

# Note "THE BACK-AND-FORTH METHOD FOR WASSERSTEIN GRADIENT FLOWS"

坂井幸人

2023 年 6 月 16 日

## 概要

ワッサーシュタイン勾配流を効率的に計算する方法を提案。アプローチは、最適輸送問題を解くために Jacobs と Léger が導入した往復法 (BFM) の一般化に基づいています [Numer. Math. 146 (2020) 513-544.]. JKO スキームの双対問題を解くことにより、勾配流を進化させる。一般的に、双対問題は原始問題よりも扱いやすい。これにより、特異な非凸エネルギーを含む多くの内部エネルギーに対して、大規模な勾配流シミュレーションを効率的に実行することができる。

## 1 INTRODUCTION

この研究では、以下のような形式の放物型方程式の進化シミュレーションに興味があります。

$$\begin{aligned}\partial_t \rho - \nabla \cdot (\delta \nabla \phi) &= 0, \\ \phi &= \delta U(\rho).\end{aligned}\tag{1}$$

方程式 (1) はしばしばダルシーの法則または一般化された多孔質媒体方程式と呼ばれ、内部エネルギー関数  $U$  によって生成された圧力勾配  $\nabla \phi$  に沿って流れる質量密度  $\rho$  の進化を記述します。このクラスの方程式は、流体流、熱伝導、拡散 (律速) 凝集、人流など、さまざまな物理現象をモデル化します。一般的に、**これらの方程式は剛性があり非線形であり、数値的に解くのは困難です**。例えば、

$$U(\rho) = \frac{1}{m-1} \int \rho^m (m > 1)$$

の重要な特殊な場合では、方程式 (1) は熱方程式の非線形バージョンである多孔質媒体方程式 (PME)

$$\partial_t \rho - \delta(\rho^m) = 0$$

となる。

$U$  が微分不可能または凸でない場合、これらの方程式のシミュレーションはさらに困難。したがって、この論文では、多種多様な内部エネルギー  $U$  の式 (1) を効率的かつ正確にシミュレートするための手法を設計することを目標としています。

私たちの Darcy の法則のシミュレーション手法は、方程式 (1) を Wasserstein 距離に関する勾配流として解釈するという優れたアプローチに基づいています [19, 25]。この解釈は、JKO スキームとして知られる離散

時間近似法を作成するために使用することができます [19]。このスキームは、次の反復によって近似解を構築します。

$$\min_{\rho \in \mathcal{P}} U(\rho) + \frac{1}{2\tau} W_2^2(\rho, \mu) \quad (2)$$

$$\rho^{(n+1)} := \arg \min_{\rho} U(\rho) + \frac{1}{2\tau} W_2^2(\rho, \rho^{(n)})$$

ここで、 $\tau$  はスキーム内の時間ステップを表し、 $W_2(\cdot, \cdot)$  は最適輸送理論の 2-Wasserstein 距離です [27] (最適輸送と 2-Wasserstein 距離の簡単な概要についてはセクション 2.1 を参照)。スキームの変分的構造により、反復解は無条件でエネルギー安定性を持ち、時間ステップ  $\tau$  を任意の空間離散化から独立して選択することができます。さらに、JKO スキームは連続方程式の比較型や収縮型の原理など、多くの望ましい特性を保持しています [1, 10, 20]。

JKO スキームの多くの有利な特性を考慮すると、問題 (2) の最小化問題の計算に多くの研究が注がれてきました。例えば、[2-4, 6-9, 22, 26] などが挙げられます。この問題に関する研究が多く行われているにも関わらず、高い解像度で JKO スキームを効率的に解くことは依然として課題です。問題 (2) を解く上での主な困難は、Wasserstein 距離項の扱いです。実際、密度  $\rho$  に関する Wasserstein 距離の変動を与える簡単な公式は存在しません。そのため、(2) を解くためのほぼすべての方法は、2 つの固定された密度間の Wasserstein 距離を計算するアルゴリズムの適応である。

この論文では、[21] で紹介された back-and-forth method (BFM) を適応して、問題 (2) を解決します。BFM は、2 つの固定された密度間の最適輸送写像を計算するための最先端のアルゴリズムです。BFM は、モンジュの最適輸送問題を直接解くのではなく、関連するカントロビッチの双対問題を解くことによって最適写像を見つけます。このアプローチを基に、直接問題 (2) を解く代わりに、その双対問題の解を計算します。双対問題は凹最大化問題であり、次の時刻ステップの圧力変数  $\phi^{(n+1)}$  を生成します。最適密度変数は、圧力との双対関係  $\phi^{(n+1)} = \delta U(\rho^{(n+1)})$  を介して簡単に回復することができます。

双対問題を解くことによる利点はいくつかあります。圧力変数  $\phi$  は密度変数  $\rho$  よりも正則性が高いです。最悪の場合でも、圧力の勾配は自乗可積分である必要があります。その結果、圧力は離散的な近似スキームに適しています。さらに、双対汎関数の微分を計算するための明示的な式があるので、双対問題を解くために勾配上昇法を適用することができます (原始問題に対応する勾配降下法ははるかに困難です)。最後に、密度の非圧縮性など、 $U$  が厳しい制約を表現している場合 (例: 密度の非圧縮性)、双対問題は制約のない形で表現されるため、双対アプローチは非常に便利です。

(2) の双対問題と BFM の特殊な勾配上昇構造を活用することで、内部エネルギー  $U$  の広範なクラスに対して JKO スキームを迅速かつ正確に解くことができます。我々は、アルゴリズムが各ステップで双対問題の値を増加させることを示しています。特に、この解析は  $U$  の Hessian が特異である場合や、計算グリッドのサイズに依存しない場合でも成立します。その結果、従来よりもはるかに大規模なスケールで式 (1) をシミュレートすることができ、障害物を持つ非圧縮性のある群衆モデルや集合拡散方程式 (aggregation-diffusion equations) のような難解なケースを簡単に扱うことができます。

## 1.1 Overall approach

Wasserstein 勾配流における back-and-forth 法は、JKO スキームに関連する双対問題を解くことに基づいています。この分析の出発点は、Kantorovich の最適輸送の双対形式です。2つの測度  $\mu$  と  $\nu$  が与えられた場合、2-Wasserstein 距離の双対形式は次のようになります。

$$\frac{1}{2\tau} W_2^2(\mu, \nu) = \sup_{(\psi(x), \phi(y)) \in C} \left\{ \int \psi(x) d\mu(x) + \int \phi(y) d\nu(y) \right\}, \quad (3)$$

ここで、以下の制約条件を満たす範囲で最大化されます。

$$C := \{(\phi, \psi) \in C(\Omega) \times C(\Omega) : \psi(x) + \phi(y) \leq \frac{1}{2\tau} |x - y|^2\}.$$

最適輸送の双対形式を用いると、問題 (2) を次のように書き直すことができます。

$$\begin{aligned} \min_{\rho \in \mathcal{P}} U(\rho) + \frac{1}{2\tau} W_2^2(\rho, \mu) &= \min_{\rho \in \mathcal{P}} \left( U(\rho) + \sup_{(\varphi, \psi) \in C} \left( \int \varphi d\rho + \int \psi d\mu \right) \right) \\ &= \min_{\rho \in \mathcal{P}} \sup_{(\varphi, \psi) \in C} \left( U(\rho) + \int \varphi d\rho + \int \psi d\mu \right) \end{aligned}$$

$U$  が凸である場合、 $\inf$  と  $\sup$  を入れ替えることで、(2) と同等の双対問題を得ることができます。  
[YS](P2.detail)

$$\begin{aligned} \min_{\rho \in \mathcal{P}} U(\rho) + \frac{1}{2\tau} W_2^2(\rho, \mu) &= \sup_{(\varphi, \psi) \in C} \min_{\rho \in \mathcal{P}} \left( U(\rho) + \int \varphi d\rho + \int \psi d\mu \right), \\ &= \sup_{(\varphi, \psi) \in C} \left( \min_{\rho \in \mathcal{P}} \left( U(\rho) + \int \varphi d\rho \right) + \int \psi d\mu \right), \\ &= \sup_{(\varphi, \psi) \in C} \left( \int \psi d\mu - U^*(-\varphi) \right). \end{aligned}$$

$$\sup_{(\phi, \psi) \in C} \int \psi(x) d\rho^{(n)}(x) - U^*(-\phi), \quad (4)$$

ここで、 $U^*$  は  $U$  の (凸共役) を表し、次のように定義されます。

$$\begin{aligned} U^*(\phi) &:= \sup_{\rho \in \mathcal{P}} \left( \int \phi d\rho - U(\rho) \right) \\ U^*(-\phi) &= -\inf_{\rho} \left( \int \phi(y) d\rho(y) + U(\rho) \right). \end{aligned}$$

この双対問題を解くことで、問題 (2) の双対変数  $\phi$  を得ることができる。また、Legendre 変換 (凸共役) を用いて双対変数から密度変数を容易に復元することもできる。

問題 (4) は、 $\mathcal{C}$  によって表現される制約のために困難に見える。しかし、問題を再定式化する非常に便利な方法があります。 $\rho^{(n)}$  が非負測度であるため、できるだけ大きな値を持つように  $\psi$  を選ぶことが好ましい。

$\phi$  を固定すれば、対応する  $\psi$  の最大可能な選択肢は次のようになる。

$$\phi^c(x) := \inf_{y \in \Omega} \frac{1}{2\tau} |x - y|^2 - \phi(y). \quad (5)$$

また、 $\mu \geq 0$  より、 $\psi$  を固定すると、 $\phi$  の最大の選択肢は次のようになる。

$$\psi^c(y) := \inf_x \left( \frac{1}{2\tau} |x - y|^2 - \psi(x) \right) \quad (6)$$

式 (5) と (6) はそれぞれ backward-c-transform と forward-c-transform として知られています。これらの変換は最適輸送において重要な役割を果たし、私たちの手法には不可欠です。重要な点として、これらの変換を使用して制約  $\mathcal{C}$  と  $\phi$  または  $\psi$  のいずれかを排除することができます。

注意しておきますが、与えられた  $(\varphi, \psi) \in \mathcal{C}$  に対して、 $\psi^c \geq \varphi$  が成り立ちます。なぜなら、 $\mathcal{C} := \{(\phi, \psi) \in C(\Omega) \times C(\Omega) : \psi(x) + \phi(y) \leq \frac{1}{2\tau} |x - y|^2\}$  であり、 $\varphi(x) \leq \frac{1}{2\tau} |x - y|^2 - \psi(y)$  なので、右辺で  $\inf$  をとっているため、左辺の  $\varphi(x)$  の中で  $\sup$  が  $\psi^c$  になるためである。

また、 $\rho \geq 0$  の場合、 $-U^*(-\varphi)$  は  $\varphi$  に関して増加する関数です。よって、 $-U^*(\varphi) \leq -U^*(\psi)^c$  である。したがって、以下ようになります。

$$\sup_{(\varphi, \psi) \in \mathcal{C}} \left( \int \psi d\mu - U^*(-\varphi) \right) \leq \sup_{\psi} \left( \int \psi d\mu - U^*(-\psi^c) \right)$$

また、 $(\varphi, \psi) \in \mathcal{C} \implies (\psi^c, \psi) \in \mathcal{C}$  であるので、

$$\sup_{(\varphi, \psi) \in \mathcal{C}} \left( \int \psi d\mu - U^*(-\varphi) \right) \geq \sup_{\psi} \left( \int \psi d\mu - U^*(-\psi^c) \right)$$

が成立する。よって、

$$\sup_{(\varphi, \psi) \in \mathcal{C}} \left( \int \psi d\mu - U^*(-\varphi) \right) = \sup_{\psi} \left( \int \psi d\mu - U^*(-\psi^c) \right) \quad (7)$$

同様に、 $\mu \geq 0$  であるため、

$$\sup_{(\varphi, \psi) \in \mathcal{C}} \left( \int \psi d\mu - U^*(-\varphi) \right) = \sup_{\varphi} \left( \int \varphi^c d\mu - U^*(-\varphi) \right) \quad (8)$$

となります。

c-変換 (5)(6) を使用して制約  $\mathcal{C}$  と  $\phi$  または  $\psi$  のいずれかを排除することによって、問題 (4) は次の 2 つの制約のない汎関数の最大化として等価になる：

$$J(\phi) := \int_{\Omega} \phi^c(x) d\rho^{(n)}(x) - U^*(-\phi) \quad (9)$$

---

**Algorithm 1** The back-and-forth scheme for solving(4)

---

Given  $\rho^{(n)}[t]$  and  $\phi_0$ , iterate:

$$\begin{aligned}\phi_{k+\frac{1}{2}} &= \phi_k + \nabla_H J(\phi_k) \\ \psi_{k+\frac{1}{2}} &= (\phi_{k+\frac{1}{2}})^c \\ \psi_{k+1} &= \phi_{k+\frac{1}{2}} + \nabla_H I(\phi_{k+\frac{1}{2}}) \\ \phi_{k+1} &= (\psi_{k+1})^c\end{aligned}$$

---

$$I(\psi) := \int_{\Omega} \psi(x) d\rho^{(n)}(x) - U^*(-\psi^c) \quad (10)$$

すなわち、

$$\sup_{(\phi, \psi) \in \mathcal{C}} \int \psi(x) d\rho^{(n)}(x) - U^*(-\phi) = \sup J(\phi) = \sup I(\psi).$$

加えて、もし  $\phi_*$  が  $J$  の最大化関数であり、 $\psi_*$  が  $I$  の最大化関数であるならば、

$$\phi_*^c = \psi_*, \quad \psi_*^c = \phi_*$$

の関係が成り立ち、 $(\phi_*, \psi_*)$  は (4) の最大化関数となります。 $I$  と  $J$  の再定式化は、最大化関数を見つける作業を実際に簡素化します。正規の離散グリッド上では、 $c$ -transform は非常に効率的に計算できます [21, 23]。その結果、(4) を直接扱うよりも、 $I$  と  $J$  を最大化する方がはるかに取り扱いやすくなります。

私たちは、[21] で紹介された BFM アルゴリズムを基にして、最大化関数  $\phi_*$  と  $\psi_*$  を見つける。元の BFM は、 $U^*$  が線形関数という特別な場合に最大化関数を効率的に見つけるための手法を提供している。 $I$  または  $J$  に焦点を当てるよりも早く、BFM は両方の関数を同時に最大化します。この手法は、 $\phi$ -空間での  $J$  の勾配上昇更新と  $\psi$ -空間での  $I$  の勾配上昇更新を交互に行うことで進行します（そのため、「back-and-forth」の名前があります）。勾配ステップの間には、一方の空間（ $\phi$ -空間または  $\psi$ -空間）の情報を他方に伝達するために、前方/後方  $c$ -transform を適用します。[21] で指摘されているように、back-and-forth アプローチの利点は、最適解のペア  $(\phi_*, \psi_*)$  の特定の特徴が、片方の空間よりも他方の空間でより簡単に構築できることです。その結果、back-and-forth 法は、 $\phi$ -空間のみまたは  $\psi$ -空間のみで操作する通常の勾配上昇法よりもはるかに迅速に収束します。

Wasserstein gradient flow の場合に BFM を一般化するためには、 $U^*$  が非線形の場合に (9) と (10) の勾配上昇ステップの安定性を保証する必要があります。実際には、多くの重要なケースでは、 $U^*$  の Hessian には特異成分が存在する可能性があります。この困難を克服するために、適切に重み付けされた Sobolev 空間で勾配上昇ステップを行います。Sobolev 制御により、境界積分を全空間上の積分に変換することができ、 $U^*$  の特異性を抑えることができます（詳細はセクション 3.2 を参照）。この連続解析の結果、離散化スキームは格子サイズに依存しない収束率を持つことになります。back-and-forth 法は、Algorithm 1 にまとめられています。ここで、 $H$  は前述の重み付き Sobolev 空間です。

一度双対問題を解決した後、元の問題 (2) の解を回復することができます。\$U\$ が凸であれば、最適な双対変数 \$\phi\_\*\$ は \$\rho^{(n+1)}\$ との双対関係

$$\rho^{(n+1)} = \delta U^*(\phi_*)$$

を介して関連付けられます (Section 2.2 の定理 2.2 を参照)。\$U\$ が凸でない場合、(2) と双対問題との間の関係はより不確かになります。幸いなことに、凸性分割スキームを使用することで、この困難を回避することができます [12]。実際に、\$U = U\_1 + U\_0\$ と書けるようにすると、\$U\_1\$ は凸であり、\$U\_0\$ は凹であるとします。その場合、JKO スキーム (2) を次の修正されたスキームに置き換えることができます。

$$\rho^{(n+1)} = \operatorname{argmin}_{\rho} U_1(\rho) + U_0(\rho^{(n)}) + (\delta U_0(\rho^{(n)}), \rho - \rho^{(n)}) + \frac{1}{2\tau} W_2^2(\rho, \rho^{(n)}) \quad (11)$$

凸性分割は、完全暗黙のスキームのエネルギー安定性を保持することがよく知られています。重要なのは、(11) のエネルギー項 \$U\_1(\rho) + U\_0(\rho^{(n)}) + (\delta U\_0(\rho^{(n)}), \rho - \rho^{(n)})\$ は変数 \$\rho\$ に対して凸関数であるため、双対アプローチを適用できることです。すべてを考慮すると、私たちの方法は \$U\$ が凸でない場合や不規則な場合でも、PDE (1) を非常に迅速にシミュレートする手法を提供します。

## 2 BACKGROUND

### 2.1 The \$c\$-transform and optimal transport

ここから、\$\Omega\$ 上の連続関数の空間を \$C(\Omega)\$ で表す。

**Definition 2.1.** \$\phi \in C(\Omega)\$ の backward \$c\$-transform は以下のように表す:

$$\phi^c(x) := \inf_{y \in \Omega} \left( \frac{1}{2\tau} |x - y|^2 - \phi(y) \right). \quad (12)$$

また、\$\psi \in C(\Omega)\$ の forward \$c\$-transform は以下のように表す:

$$\psi^c(y) := \inf_x \left( \frac{1}{2\tau} |x - y|^2 - \psi(x) \right). \quad (13)$$

**Definition 2.2.** \$\phi\$ が \$c\$-concave であるとは、\$\phi = \psi^c\$ となる \$\psi \in C(\Omega)\$ が存在することである。また、\$(\phi, \psi) \in \mathcal{C}\$ が \$c\$-conjugate とは、\$\phi = \psi^c\$ かつ \$\psi = \phi^c\$ であることをいう。

**Lemma 2.1.** \$\phi, \psi \in C(\Omega)\$ のとき、\$\forall x \in \Omega\$ に対し、\$\phi^{cc} \ge \phi\$ が成り立つ。また、\$\phi^{cc} = \phi\$ の必要十分条件は \$\phi\$ が \$c\$-concave の時である。特に、\$\phi^{ccc} = \phi^c\$ が成立する。[JL](Lemma 1(i))

*Proof.*

$$\begin{aligned}
\phi^c(x) &= \inf_{y \in \Omega} \left( \frac{1}{2\tau} |x - y|^2 - \phi(y) \right) \\
\phi^{cc}(y) &= \inf_{x \in \Omega} \left( \frac{1}{2\tau} |x - y|^2 - \phi^c(x) \right) \\
&= \inf_{x \in \Omega} \left( \frac{1}{2\tau} |x - y|^2 - \inf_{z \in \Omega} \left( \frac{1}{2\tau} |x - z|^2 - \phi(z) \right) \right) \\
&\geq \inf_{x \in \Omega} \left( \frac{1}{2\tau} |x - y|^2 - \left( \frac{1}{2\tau} |x - y|^2 - \phi(y) \right) \right) \\
&= \phi(y).
\end{aligned}$$

次に  $\phi^{cc} = \phi$  の必要十分条件は  $\phi$  が  $c$ -concave であることを示す。

( $\Leftarrow$ )

$\phi : c$ -concave すなわち、 $\exists \psi$  s.t.  $\phi = \psi^c$  のとき、 $\phi^{cc} = \phi$  を示す。

$\exists \psi$  s.t.  $\phi = \psi^c$  と仮定する。 $\psi := \phi^c$  とおくと、

$$\phi = \psi^c = (\phi^c)^c = \phi^{cc}$$

( $\Rightarrow$ )

$\phi^{cc} = \phi$  のとき、 $\phi : c$ -concave すなわち、 $\exists \psi$  s.t.  $\phi = \psi^c$  を示す。

$\phi^{cc} = \phi$  と仮定すると、

$$\phi = \phi^{cc} = (\phi^c)^c$$

よって、 $\phi = (\phi^c)^c$  となる  $\phi^c$  が存在する。したがって、 $\phi$  は  $c$ -concave である。

最後に、 $\phi^{ccc} = \phi$  を示す。まず、 $\phi^{ccc} \geq \phi^c$  を示す。

$$\begin{aligned}
\phi^{ccc}(x) &= \inf_{w \in \Omega} \left( \frac{1}{2\tau} |x - w|^2 - \phi^{cc}(w) \right) \\
&= \inf_{w \in \Omega} \left( \frac{1}{2\tau} |x - w|^2 - \inf_{z \in \Omega} \left( \frac{1}{2\tau} |w - z|^2 - \phi^c(z) \right) \right) \\
&= \inf_{w \in \Omega} \left( \frac{1}{2\tau} |x - w|^2 + \sup_{z \in \Omega} \left( -\frac{1}{2\tau} |w - z|^2 + \phi^c(z) \right) \right) \\
&\geq \inf_{w \in \Omega} \left( \frac{1}{2\tau} |x - w|^2 + \left( -\frac{1}{2\tau} |w - x|^2 + \phi^c(x) \right) \right) \\
&= \phi^c(x)
\end{aligned}$$

次に、 $\phi^{ccc} \leq \phi^c$  を示す。

$$\begin{aligned}
\phi^{ccc}(x) &= \inf_{w \in \Omega} \left( \frac{1}{2\tau} |x - w|^2 - \phi^{cc}(w) \right) \\
&\leq \inf_{w \in \Omega} \left( \frac{1}{2\tau} |x - w|^2 - \phi(w) \right) \\
&= \phi^c(x)
\end{aligned}$$

よって、 $\phi^{ccc} = \phi^c$  が示された。

$\phi^{cc} = \phi$  の必要十分条件は  $\phi$  が  $c$ -concave であることを示す。(別解)

( $\Leftarrow$ )

$\phi : c$ -concave すなわち、 $\exists \psi$  s.t.  $\phi = \psi^c$  のとき、 $\phi^{cc} = \phi$  を示す。

$\phi = \psi^c$  と仮定すると、

$$\phi^{cc} = (\psi^{cc})^c = \psi^{ccc} = \psi^c = \phi$$

( $\Rightarrow$ )  $\phi^{cc} = \phi$  のとき、 $\phi : c$ -concave すなわち、 $\exists \psi$  s.t.  $\phi = \psi^c$  を示す。

$\phi^{cc} = \phi$  と仮定すると、

$$\phi = \phi^{cc} = (\phi^c)^c$$

よって、 $\phi = (\phi^c)^c$  となる  $\phi^c$  が存在する。したがって、 $\phi$  は  $c$ -concave である。  $\square$

**Proposition 2.1.**  $\phi \in C(\Omega)$  が  $c$ -concave のとき、以下の写像は *well-defined* かつ *almost everywhere* で *unique* である。

$$T_\phi(x) := \operatorname{argmin}_{y \in \Omega} \left( \frac{1}{2\tau} |x - y|^2 - \phi(y) \right) \quad (14)$$

すなわち、 $\phi^c$  はただ一つの最少点を持ち、 $\phi^c$  が最小値を取る座標は *transport map*  $T_\phi(x)$  で表される。さらに、 $u \in C(\Omega)$  であるとき、ほとんど全ての (*almost every*)  $x, y \in \Omega$  に対し、以下のような  $c$ -transform の摂動公式が成り立つ。

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{(\phi + \varepsilon u)^c(x) - \phi^c(x)}{\varepsilon} = -u(T_\phi(x)) \quad (15)$$

最後に、以下も成り立つ。

$$T_\phi(x) = x - \tau \nabla \phi^c(x),$$

$$T_\psi(y) = y - \tau \nabla \psi^c(y),$$

また、 $T_\phi(T_\psi(y)) = y$ ,  $T_\psi(T_\phi(x)) = x$  が *almost everywhere* で成り立つ。

*Proof.* まず、写像  $T_\phi(x)$  が *well-defined* であることを示します。つまり、任意の  $x \in \Omega$  に対して  $\operatorname{argmin}_{y \in \Omega} \left( \frac{1}{2\tau} |x - y|^2 - \phi(y) \right)$  が存在することを示す。関数  $\frac{1}{2\tau} |x - y|^2 - \phi(y)$  は  $\Omega$  上の連続関数であり、 $\Omega$  がコンパクト (閉集合  $\rightarrow$  コンパクト) であることから、この関数は最小値を持つことが保証される。(コンパクト空間の連続関数は  $\max$  と  $\min$  を持つ。) したがって、 $\operatorname{argmin}_{y \in \Omega} \left( \frac{1}{2\tau} |x - y|^2 - \phi(y) \right)$  は存在する。

次に、 $T_\phi(x)$  が *almost everywhere* で一意であることを示す。つまり、ほとんど全ての  $x \in \Omega$  に対して、 $\operatorname{argmin}_{y \in \Omega} \left( \frac{1}{2\tau} |x - y|^2 - \phi(y) \right)$  がただ一つの要素を持つことを示す。 $\phi$  が  $c$ -concave であることから、 $T_\phi(x) = \operatorname{argmin}_{y \in \Omega} \left( \frac{1}{2\tau} |x - y|^2 - \phi(y) \right)$  は凸集合となります。(Proof) また、凸集合上の任意の点は最小値を持つ点として一意に定まります。したがって、ほとんど全ての  $x \in \Omega$  に対して  $\operatorname{argmin}_{y \in \Omega} \left( \frac{1}{2\tau} |x - y|^2 - \phi(y) \right)$  がただ一つの要素を持つことが示されます。

さらに、 $u \in C(\Omega)$  の場合、ほとんど全ての  $x, y \in \Omega$  に対して以下の摂動公式が成り立つことを示します。

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{(\phi + \varepsilon u)^c(x) - \phi^c(x)}{\varepsilon} = -u(T_\phi(x))$$

次に、 $T_\phi(x) = x - \tau \nabla \phi^c(x)$  が成り立つことを示します。

$\phi^c(x) = \inf_{y \in \Omega} \left( \frac{1}{2\tau} |x - y|^2 - \phi(y) \right)$  より、 $\phi^c$  は  $x$  についての関数である。よって  $\frac{1}{2\tau} |x - y|^2 - \phi(y)$  最小値は  $\frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{2\tau} |x - y|^2 - \phi(y) \right) = \nabla \left( \frac{1}{2\tau} |x - y|^2 - \phi(y) \right) = 0$  となる点の値である。なぜなら、 $\frac{1}{2\tau} |x - y|^2 - \phi(y)$  は凸関数であるためである。 $(\phi$  が凹関数より、 $-\phi$  は凸関数のため) よって、もちろん  $\phi^c(x)$  も凸関数。よって、



$$\nabla\left(\frac{1}{2\tau}|x-y|^2-\phi(y)\right)=\frac{1}{\tau}(x-y)$$

$T_\phi$  の定義から、 $y = T_\phi$  のとき、 $\frac{1}{2\tau}|x-y|^2-\phi(y)$  が  $\inf$  をとる。すなわち、 $y = T_\phi$  のとき、 $\frac{1}{2\tau}|x-y|^2-\phi(y) = \phi^c(x)$  となる。よって、上の式を書き換えると

$$\nabla\phi^c(x)=\frac{1}{\tau}(x-T_\phi(x))$$

よって、

$$\begin{aligned}\nabla\phi^c(x) &= \frac{1}{\tau}(x-T_\phi(x)) \\ \iff \tau\nabla\phi^c(x) &= x-T_\phi(x) \\ \iff T_\phi(x) &= x-\tau\nabla\phi^c(x)\end{aligned}$$

同様に、以下も成り立つ。

$$T_\psi(y)=y-\tau\nabla\psi^c(y),$$

$$\begin{aligned}T_\psi(T_\phi(x)) &= T_\psi(x-\nabla\phi^c(x)) \\ &= y-\tau\nabla\psi^c(y)\end{aligned}$$

□

$T_\phi(T_\psi(y)) = y$  を証明します。

$T_\psi(y) = \operatorname{argmin}_{z \in \Omega} \left( \frac{1}{2\tau}|y-z|^2 - \psi(z) \right)$  と定義されています。

$T_\phi(T_\psi(y))$  を考えると、これは以下の最小化問題の解です：

$$T_\phi(T_\psi(y)) = \operatorname{argmin}_{x \in \Omega} \left( \frac{1}{2\tau}|T_\psi(y)-x|^2 - \phi(x) \right)$$

この最小化問題の解  $x$  について考えましょう。最適解  $x = T_\phi(T_\psi(y))$  と仮定します。

最適解  $x = T_\phi(T_\psi(y))$  に対して、以下の条件が成り立ちます：

$$\frac{1}{\tau}(T_\psi(y)-x)-\nabla\phi(x)=0$$

この式を変形すると、

$$T_\psi(y)-x=\tau\nabla\phi(x)$$

両辺に  $-1$  をかけて整理すると、

$$x-T_\psi(y)=-\tau\nabla\phi(x)$$

ここで、 $\nabla\phi(x) = -\nabla\phi^c(x)$  を利用します（先程の議論で示しました）。

したがって、上記の式は次のように書き換えられます：

$$x-T_\psi(y)=\tau\nabla\phi^c(x)$$

両辺に  $-\tau$  をかけて整理すると、

$$T_\psi(y)-x=-\tau\nabla\phi^c(x)$$

これは  $T_\psi(y)$  と  $x$  の関係を表しています。右辺は  $c$ -transform の勾配であり、左辺は  $T_\psi(y)$  と  $x$  の差を表しています。

よって、 $T_\phi(T_\psi(y)) = y$  が成り立ちます。

同様に、 $T_\psi(T_\phi(x)) = x$  も証明することができます。

**Proposition 2.2.** もし、 $\mu$  と  $\nu$  が  $\Omega$  上の非負密度関数で、質量が等しい場合、つまり、

$$\int_{\Omega} \mu(x) dx = \int_{\Omega} \nu(y) dy$$

であるならば、次の式が成り立ちます。

$$\frac{1}{2\tau} W_2^2(\mu, \nu) = \sup_{\phi \in C(\Omega)} \left( \int_{\Omega} \phi^c(x) \mu(x) dx + \int_{\Omega} \phi(y) \nu(y) dy \right)$$

$$\frac{1}{2\tau} W_2^2(\mu, \nu) = \sup_{\psi \in C(\Omega)} \left( \int_{\Omega} \psi(x) \mu(x) dx + \int_{\Omega} \psi^c(y) \nu(y) dy \right)$$

この結果により、最適輸送写像の存在と一意性が保証されます。

*Proof.* 注意しておきますが、与えられた  $(\varphi, \psi) \in \mathcal{C}$  に対して、 $\phi^c \geq \psi$  が成り立ちます。ただし、

$$\phi^c(x) := \inf_y \left( \frac{1}{2\tau} |x - y|^2 - \phi(y) \right)$$

は  $\phi$  の  $c$ -変換 ( $c$ -transform) です。なぜなら、 $\mathcal{C} := \{(\phi, \psi) \in C(\Omega) \times C(\Omega) : \psi(x) + \phi(y) \leq \frac{1}{2\tau} |x - y|^2\}$ . であり、 $\psi(x) \leq \frac{1}{2\tau} |x - y|^2 - \phi(y)$  したがって、以下のようになります。

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\tau} W_2^2(\mu, \nu) &= \sup_{(\psi(x), \phi(y)) \in \mathcal{C}} \left( \int_{\Omega} \psi(x) d\mu(x) + \int_{\Omega} \phi(y) d\nu(y) \right), \\ &\leq \sup_{\phi \in C(\Omega)} \left( \int_{\Omega} \phi^c(x) \mu(x) dx + \int_{\Omega} \phi(y) \nu(y) dy \right) \end{aligned}$$

また、 $(\varphi, \psi) \in \mathcal{C} \implies (\psi^c, \psi) \in \mathcal{C}$  であるので、

$$\sup_{(\psi(x), \phi(y)) \in \mathcal{C}} \left( \int_{\Omega} \psi(x) d\mu(x) + \int_{\Omega} \phi(y) d\nu(y) \right) \geq \sup_{\phi \in C(\Omega)} \left( \int_{\Omega} \phi^c(x) \mu(x) dx + \int_{\Omega} \phi(y) \nu(y) dy \right)$$

が成立する。よって、

$$\sup_{(\psi(x), \phi(y)) \in \mathcal{C}} \left( \int_{\Omega} \psi(x) d\mu(x) + \int_{\Omega} \phi(y) d\nu(y) \right) = \sup_{\phi \in C(\Omega)} \left( \int_{\Omega} \phi^c(x) \mu(x) dx + \int_{\Omega} \phi(y) \nu(y) dy \right)$$

□

**Theorem 2.1.** もし、 $\mu$  と  $\nu$  が  $\Omega$  上の非負密度関数で、質量が等しい場合、つまり、

$$\int_{\Omega} \mu(x) dx = \int_{\Omega} \nu(y) dy$$

であるならば、次の条件を満たす  $c$  共役のペア  $(\phi_*, \psi_*)$  が存在する:

$$\begin{aligned}\phi_* &\in \operatorname{argmax}_{\phi \in C(\Omega)} \left\{ \int_{\Omega} \phi^c(x) \mu(x) dx + \int_{\Omega} \phi(y) \nu(y) dy \right\} \\ \psi_* &\in \operatorname{argmax}_{\psi \in C(\Omega)} \left\{ \int_{\Omega} \psi(x) \mu(x) dx + \int_{\Omega} \psi^c(y) \nu(y) dy \right\}\end{aligned}$$

さらに、 $T_{\phi}$  は  $\mu$  を  $\nu$  に送る唯一の最適輸送写像であり、 $T_{\psi}$  は  $\nu$  を  $\mu$  に送る唯一の最適輸送写像です。つまり、 $T_{\phi_*\#}\mu = \nu$  および  $T_{\psi_*\#}\nu = \mu$  が成り立ちます。これを押し出し測度 (*pushforward measure*) という。

また、2-Wasserstein 距離  $W_2^2(\mu, \nu)$  と関数  $\phi_*, \psi_*$  との関係は次のようになります。

$$\frac{1}{2\tau} W_2^2(\mu, \nu) = \int_{\Omega} \psi_*(x) \mu(x) dx + \int_{\Omega} \phi_*(y) \nu(y) dy.$$

**Definition 2.3.**  $A \in \Omega$  のとき、押し出し測度  $T_{\#}\mu$  は以下のように定義される:

$$T_{\#}\mu(A) = \mu(T^{-1}(A))$$

また、pushforward をテスト関数  $f: \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  に対する pushforward measure の積分として定義すると以下のようになる:

$$\int_{\Omega} f(y) dT_{\#}\mu(y) = \int_{\Omega} f(T(x)) d\mu(x). \quad (16)$$

## 2.2 Convex duality

一般化最適輸送 (GOT) 問題:

$$\rho_* = \operatorname{argmin}_{\rho \in L^1(\Omega)} \left( U(\rho) + \frac{1}{2\tau} W_2^2(\rho, \mu) \right), \quad (17)$$

ここで、 $\mu \in L^1(\Omega)$  は与えられた非負密度です。

**Assumption 2.1.** 内部エネルギー  $U$  は、proper で、凸かつ、下半連続な汎関数  $U: L^1(\Omega) \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$  によって与えられます。ただし、 $\rho$  が正の測度を持つ集合上で負になる場合は  $U(\rho) = \infty$  とします。

**Assumption 2.2.** 超線形の成長 (superlinear growth) を持つ  $s: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$  が存在し、以下の条件を満たす:

$$U(\rho) \geq \int_{\Omega} s(\rho(y)) dy$$

**Remark 2.1.** 仮定 2.1 は、密度  $\rho$  が非負である必要があることを表しています。つまり、 $\rho$  は負の値を取ることはできません。これにより、非負の密度に対して関数  $U(\rho)$  が適切に定義されることが保証されます。一方、仮定 2.2 は、任意の  $B \in \mathbb{R}$  に対して、集合  $\{\rho \in L^1(\Omega) : U(\rho) < B\}$  が弱収束位相において弱コンパクトであることを保証します。

**Remark 2.2.** 凸性の要件を除けば、仮定 2.1 と仮定 2.2 は Wasserstein 勾配流の文脈では非常に自然なものです。ただし、セクション 3.3 では非凸な  $U$  も考慮します。

**Definition 2.4.** 関数  $U : L^1(\Omega) \rightarrow \mathbb{R}$  の凸共役  $U^* : L^\infty(\Omega) \rightarrow \mathbb{R}$  は次のように定義されます:

$$\begin{aligned} U^*(\phi) &:= \sup_{\rho \in L^1(\Omega)} \left\{ \int_{\Omega} \phi(y) \rho(y) dy - U(\rho) \right\}, \\ &= \sup_{\rho \in L^1(\Omega)} \left\{ \int_{\Omega} \phi d\rho - U(\rho) \right\}. \end{aligned}$$

仮定 2.1 のおかげで、 $U^*$  は重要な単調性を持ちます。

**Lemma 2.2.**  $U^*$  は単調増加である、つまり、 $\phi_0, \phi_1 : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  が  $\phi_0 \leq \phi_1$  となるすべての点で成り立つ場合、次の不等式が成り立ちます。

$$U^*(\phi_0) \leq U^*(\phi_1).$$

*Proof.* 仮定 2.1 により、内部エネルギーは非負の密度に対してのみ有限です。したがって、

$$U^*(\phi) = \sup_{\rho \geq 0} \left\{ \int_{\Omega} \phi(y) \rho(y) dy - U(\rho) \right\}.$$

ある  $\rho \in L^1(\Omega)$  を取る、ただし  $\rho(y) \geq 0$  a.e. であるとします。すると、次の不等式が成り立ちます。

$$\int \phi_0(y) \rho(y) dy - U(\rho) \leq \int \phi_1(y) \rho(y) dy - U(\rho).$$

$\rho \geq 0$  に対して上記の不等式の上限を取ることで、証明が完了する。  $\square$

**Proposition 2.3.** 与えられた非負密度  $\mu \in L^1(\Omega)$  に対して、汎関数  $I$  と  $J$  は以下のように定義される (9), (10):

$$J(\phi) := \int_{\Omega} \phi^c(x) d\rho^{(n)}(x) - U^*(-\phi) \quad (18)$$

$$I(\psi) := \int_{\Omega} \psi(x) d\rho^{(n)}(x) - U^*(-\psi^c) \quad (19)$$

これらの汎関数は *proper* であり、弱上半連続であり、凹であり、さらに  $\sup_{\varphi \in C(\Omega)} J(\varphi) = \sup_{\psi \in C(\Omega)} I(\psi)$  を満たします。さらに、 $\varphi, \psi$  が  $c$ -凹である場合、 $J$  と  $I$  は以下のような一次変分を持ちます:

$$\delta J(\phi) = \delta U^*(-\phi) - T_{\phi\#}\mu, \quad (20)$$

$$\delta I(\psi) = \mu - T_{\psi\#}\delta U^*(-\psi^c). \quad (21)$$

*Proof.* Lemma 2.2 の証明の論理に従って、次のように表現することができます。

$$U^*(\psi^c) = \sup_{\rho \geq 0} \left( \int_{\Omega} \psi^c(y) \rho(y) dy - U(\rho) \right).$$

$$U^*(-\psi^c) = \sup_{\rho \geq 0} \left( \int_{\Omega} -\psi^c(y) \rho(y) dy - U(\rho) \right).$$

次に、 $\mathcal{M}(\Omega \times \Omega)$  を  $\Omega \times \Omega$  上の非負測度の集合とし、与えられた密度  $\rho \geq 0$  に対して次のように定義します。

$$\Pi(\rho) = \left\{ \pi \in \mathcal{M}(\Omega \times \Omega) : \iint_{\Omega \times \Omega} f(y) d\pi(x, y) = \int_{\Omega} f(y) \rho(y) dy, \forall f \in C(\Omega) \right\}.$$

c-変換の定義を用いると、式は次のように書けます。

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} -\psi^c(y) \rho(y) dy &= - \int_{\Omega} \inf_{x \in \Omega} \left( \frac{1}{2\tau} |x - y|^2 - \psi(x) \right) \rho(y) dy, \\ &= \int_{\Omega} \sup_{x \in \Omega} \left( \psi(x) - \frac{1}{2\tau} |x - y|^2 \right) \rho(y) dy, \\ &= \sup_{\pi \in \Pi(\rho)} \iint_{\Omega \times \Omega} \left( \psi(x) - \frac{1}{2\tau} |x - y|^2 \right) d\pi(x, y). \end{aligned}$$

したがって、以下のようになります。

$$\begin{aligned} -U^*(-\psi^c) &= - \sup_{\rho \geq 0} \left( \int_{\Omega} -\psi^c(y) \rho(y) dy - U(\rho) \right), \\ &= - \sup_{\rho \geq 0} \left( \sup_{\pi \in \Pi(\rho)} \left( \iint_{\Omega \times \Omega} \left( \psi(x) - \frac{1}{2\tau} |x - y|^2 \right) d\pi(x, y) \right) - U(\rho) \right), \\ &= \inf_{\rho \geq 0} \left( - \sup_{\pi \in \Pi(\rho)} \left( \iint_{\Omega \times \Omega} \left( \psi(x) - \frac{1}{2\tau} |x - y|^2 \right) d\pi(x, y) \right) + U(\rho) \right), \\ &= \inf_{\rho \geq 0} \left( \inf_{\pi \in \Pi(\rho)} \left( - \iint_{\Omega \times \Omega} \left( \psi(x) - \frac{1}{2\tau} |x - y|^2 \right) d\pi(x, y) \right) + U(\rho) \right), \\ &= \inf_{\rho \geq 0} \inf_{\pi \in \Pi(\rho)} U(\rho) - \iint_{\Omega \times \Omega} \left( \psi(x) - \frac{1}{2\tau} |x - y|^2 \right) d\pi(x, y) \end{aligned}$$

これにより、 $I$  は  $\psi$  に関する一連の線形汎関数の下限として表現できることが明らかになりました。したがって、 $I$  は proper であり、凹であり、弱上半連続です。同様の議論が  $J$  にも適用されます。 $U^*$  が単調増加であることから、Lemma 2.2 は任意の  $\varphi, \psi \in C(\Omega)$  に対して次の不等式が成り立つことを意味します。

$$J(\varphi) \leq I(\varphi^c), \quad I(\psi) \leq J(\psi^c)$$

したがって、次の関係が成り立ちます。

$$\sup I(\psi) = \sup J(\varphi).$$

$\varphi$  と  $\psi$  が c-凹性を持つ場合、一次変分の式は Proposition 2.1 から直接導かれます。

$$\delta J(\phi) = \left. \frac{d}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=0} J(\phi + \varepsilon u)$$

□

この subsection の最後に、 $I$  と  $J$  の最大化値から (17) の解を復元する方法を以下に示す。

**Theorem 2.2.**  $\mu \in L^1(\Omega)$  であり、 $U$  が *Assumptions 2.1* と *2.2* を満たし、さらに  $\delta U(\mu)$  が定数関数でない場合、次の条件を満たす一意の密度  $\rho_*$  と  $c$ -共役な関数のペア  $(\phi_*, \psi_*)$  が存在します。

$$\rho_* = \operatorname{argmin}_{\rho \in L^1(\Omega)} U(\rho) + \frac{1}{2\tau} W_2(\rho, \mu), \quad \phi_* \in \operatorname{argmax}_{\phi \in C(\Omega)} J(\phi), \quad \psi_* \in \operatorname{argmax}_{\psi \in C(\Omega)} I(\psi),$$

$$U(\rho_*) + \frac{1}{2\tau} W_2^2(\rho_*, \mu) = J(\phi_*) = I(\psi_*),$$

$$\rho_* \in \delta U^*(\phi_*), \quad \phi_* \in \delta U(\rho_*), \quad \rho_* = T_{\phi_* \#} \mu.$$

**Remark 2.3.** 注意すべきは、もし  $\delta U(\mu)$  が定数関数である場合、 $\mu = \operatorname{argmin}_{\rho \in L^1(\Omega)} U(\rho) + \frac{1}{2\tau} W_2^2(\rho, \mu)$  となります。したがって、排除されたケースは自明な場合です。

## 2.3 Concave gradient ascent

JKO スキームを  $I$  と  $J$  の双対関数に関連付ける方法を見てきたので、 $I$  と  $J$  の最大化方法を開発する必要があります。そのために、このサブセクションでは、古典的な制約のない勾配上昇法について説明します。まず、勾配の概念を思い出す。これには、実ヒルベルト空間  $\mathcal{H}$  の内積  $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{H}}$  とノルム  $\|\cdot\|_{\mathcal{H}}$  の構造が必要です。

**Definition 2.5.** 点  $\varphi \in \mathcal{H}$  に対して、有界線型写像  $\delta F(\varphi) : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{R}$  が  $F$  の第1変分（フレシェ微分）であるとは、

$$\lim_{\|h\|_{\mathcal{H}} \rightarrow 0} \frac{\|F(\varphi + h) - F(\varphi) - \delta F(\varphi)(h)\|_{\mathcal{H}}}{\|h\|_{\mathcal{H}}} = 0$$

が成り立つことである。

**Definition 2.6.** 写像  $\nabla_{\mathcal{H}} F : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  が  $\mathcal{H}$ -勾配（または単に勾配、 $\mathcal{H}$  についての曖昧さがない場合）とは、

$$\langle \nabla_{\mathcal{H}} F(\varphi), h \rangle_{\mathcal{H}} = \delta F(\varphi)(h)$$

をすべての  $(\varphi, h) \in \mathcal{H} \times \mathcal{H}$  に対して満たすものを指す。

上記の等式は、勾配がヒルベルト空間の内積と密接に関連していることを強調しています。一方、第1変分の概念は、任意のノルム付きベクトル空間上で定義することができますが、勾配の概念は内積を必要とします。

### 2.3.1 Gradient ascent method

与えられた  $\mathcal{H}$  上の凹関数  $J$  に対し、勾配上昇法の反復式

$$\phi_{k+1} = \phi_k + \nabla_{\mathcal{H}} J(\phi_k). \quad (22)$$

を考える、勾配上昇法（式 (22)）は、次の変分形式でも同等に書くことができます。

$$\phi_{k+1} = \operatorname{argmax}_{\phi} J(\phi_k) + \delta J(\phi_k)(\phi - \phi_k) - \frac{1}{2} \|\phi - \phi_k\|_{\mathcal{H}}^2. \quad (23)$$

ここで、式 (22) と (23) には通常、勾配方向でどれだけ進むかを制御するステップサイズパラメータが含まれています。後で明らかになる理由（式 (2.11) とその後の議論を参照）から、パラメータをノルム  $\|\cdot\|_{\mathcal{H}}$  自体に組み込むほうがよいことがわかる。

スキームの収束性を得るために、効率的な収束率で

$$J(\phi_k) \xrightarrow[k \rightarrow \infty]{} \sup_{\phi} J(\phi),$$

を達成するためには、適切なノルム  $\|\cdot\|_{\mathcal{H}}$  を選ぶことが重要です。ノルムが弱すぎると、アルゴリズムは不安定になり収束しない可能性があります。一方、ノルムが強すぎると、各ステップでほとんど変化が起これず、アルゴリズムは収束が遅くなります。最適化の基盤の1つである以下の定理は、これらの競合する考慮事項をバランス良く取る方法を説明しています。

**Theorem 2.3.**  $J : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{R}$  を 2 階フレシェ微分可能な凹関数であり、最大化子  $\phi^*$  を持つとする。以下の条件がすべての  $\phi, h \in \mathcal{H}$  に対して成り立つとき、 $J$  は「1-smooth」と呼ばれる：

$$-\delta^2 J(\phi)(h, h) \leq \|h\|_{\mathcal{H}}^2. \quad (24)$$

$J$  が 1-smooth のとき、勾配上昇法

$$\phi_{k+1} = \phi_k + \nabla_{\mathcal{H}} J(\phi_k)$$

を初期点  $\phi_0$  から開始すると、次の上昇特性 (25) を満たし、また収束率 (26) を持つ：

$$J(\phi_{k+1}) \geq J(\phi_k) + \frac{1}{2} \|\nabla_{\mathcal{H}} J(\phi_k)\|_{\mathcal{H}}^2, \quad (25)$$

$$J(\phi^*) - J(\phi_k) \leq \frac{\|\phi^* - \phi_0\|_{\mathcal{H}}^2}{2k}. \quad (26)$$

定理 2.3 から、ノルム  $\|\cdot\|_{\mathcal{H}}$  を弱めるか強めるかという競合する要素が再び現れます。より強いノルムは式 (24) を満たしやすくしますが、より弱いノルムは収束率 (26) を改善します。これらの考慮事項をまとめると、式 (24) を満たす限りできるだけ弱いノルムを選ぶのが最適であることが分かります。

### 2.3.2 Sobolev norm

$\Omega$  を  $\mathbb{R}^d$  の開有界凸部分集合とする。勾配上昇法は、Sobolev 空間  $H^1(\Omega)$  に基づいたノルム  $H$  を使用します。 $\Theta_1 > 0$  and  $\Theta_2 > 0$  を定数として、次のようにノルムを定義します。

$$\|h\|_H^2 = \int_{\Omega} \Theta_2 |\nabla h(x)|^2 + \Theta_1 |h(x)|^2 dx. \quad (27)$$

$\Theta_1$  や  $\Theta_2$  の具体的な値は、最大化される関数によって異なる（例えば、セクション 3 の定理 3.3 を参照してください）。多くの場合、 $\Theta_1$  と  $\Theta_2$  を大きく異なる値に設定することが最適です。そのため、これらのパラメータを単一のステップサイズの値に縮小しないほうがよい。次の補題では、この内積に関する勾配の計算方法が示されています。

**Lemma 2.3.**  $F = F(\phi)$  がフレシェ微分可能な汎関数であり、任意の  $\phi$  に対して、任意の点  $h$  で評価される第 1 変分  $\delta F(\phi)$  が関数  $f_{\phi}$  に対する積分として表されるとします。つまり、

$$\delta F(\phi)(h) = \int_{\Omega} h(x) f_{\phi}(x) dx$$

とします。式 (27) で  $\|\cdot\|_H$  を定義します。すると、 $F$  の  $H$ -勾配は次のように表されます。

$$\nabla_H F(\phi) = (\Theta_1 \text{Id} - \Theta_2 \Delta)^{-1} f_{\phi}$$

ここで、 $\text{Id}$  は単位作用素、 $\Delta$  はラプラス作用素であり、ゼロノイマン境界条件を伴って考えます。

*Proof.* 固定した  $\phi$  に対して、楕円型方程式

$$\begin{cases} (\Theta_1 \text{Id} - \Theta_2 \Delta)g = f_\phi & \text{in } \Omega \\ n \cdot \nabla g = 0 & \text{on } \partial\Omega \end{cases} \quad (28)$$

の一意な解を考えます。ただし  $n(x)$  は  $\Omega$  の境界上での単位法線ベクトル。すると、以下の等式の連鎖が得られます：

$$\begin{aligned} \delta F(\phi)(h) &= \int_{\Omega} h(x) f_\phi(x) dx \\ &= \int_{\Omega} h(x) (\Theta_1 \text{Id} - \Theta_2 \Delta)g(x) dx \\ &= \int_{\Omega} h(x) \Theta_1 g(x) dx - \int_{\Omega} h(x) \Theta_2 \Delta g(x) dx \\ &= \int_{\Omega} \Theta_1 h(x) g(x) dx - \int_{\Omega} \Theta_2 h(x) \Delta g(x) dx \\ &= \int_{\Omega} \Theta_1 h(x) g(x) dx - [h(x) \Theta_2 \nabla g(x) \cdot n]_{\partial\Omega} + \int_{\Omega} \Theta_2 \nabla h(x) \cdot \nabla g(x) dx \quad (\text{部分積分} \cdot \text{ガウスの発散定理}) \\ &= \int_{\Omega} \Theta_1 h(x) g(x) dx + \int_{\Omega} \Theta_2 \nabla h(x) \cdot \nabla g(x) dx \\ &= \langle h, g \rangle_H. \end{aligned}$$

これにより、 $g$  が  $F$  の  $H$ -勾配であることが示されます。 $(g = \nabla_H F(\phi) = (\Theta_1 \text{Id} - \Theta_2 \Delta)^{-1} f_\phi)$

□

上記の結果は次のように言い換えることができます： $F$  の  $H$ -勾配は、 $\delta F$  を逆演算子  $(\Theta_1 \text{Id} - \Theta_2 \Delta)^{-1}$  で「事前調整」することによって得られます。

つまり、 $F$  の  $H$ -勾配を計算する場合、 $\delta F$  を直接適用する代わりに、まず逆演算子  $(\Theta_1 \text{Id} - \Theta_2 \Delta)^{-1}$  を  $\delta F$  に適用します。この逆演算子を適用するプロセスは、「事前調整」と呼ばれ、収束特性を改善し、 $H$ -勾配の計算を効率化するために、 $\delta F$  を修正する役割を果たします。すなわち、

$$\begin{aligned} f_\phi &= (\Theta_1 \text{Id} - \Theta_2 \Delta)g \\ &= (\Theta_1 \text{Id} - \Theta_2 \Delta) \nabla_H F(\phi) \end{aligned}$$

を用いると、

$$\begin{aligned} \delta F(\phi)(h) &= \int_{\Omega} h(x) f_\phi(x) dx \\ &= \int_{\Omega} h(x) (\Theta_1 \text{Id} - \Theta_2 \Delta)g(x) dx \\ &= \int_{\Omega} h(x) (\Theta_1 \text{Id} - \Theta_2 \Delta) \nabla_H F(\phi)(x) dx \end{aligned}$$

となる。よって、

$$\begin{aligned} \delta F(\phi) &= (\Theta_1 \text{Id} - \Theta_2 \Delta) \nabla_H F(\phi)(x), \\ \nabla_H F(\phi) &= (\Theta_1 \text{Id} - \Theta_2 \Delta)^{-1} \delta F(\phi). \end{aligned} \quad (29)$$

となる。ただし、 $\delta F(\phi)$  は (20),(21) を参照。



### 3 THE BACK-AND-FORTH METHOD

私たちの目標は、興味深いエネルギー関数  $U$  の大きなクラスに対して、JKO スキームを効率的に解くアルゴリズムを開発することです。第 3.1 節では、 $U$  が  $\rho$  に関して凸である場合を考えます。この場合、JKO スキームには等価な双対問題があり、[21] からの back-and-forth メソッドの改良版を使用して解決します。第 3.2 節では、以下の形式の凸エネルギーに対して、アルゴリズムが適切に重み付けられた  $H^1$  空間で勾配安定性を持つことを示します。

$$U(\rho) = \int_{\Omega} u_m(\rho(x)) + V(x)\rho(x) dx$$

ここで、 $V : \Omega \rightarrow [0, +\infty]$  は固定された関数であり、

$$u_m(\rho) = \begin{cases} \frac{\gamma}{m-1}(\rho^m - \rho) & \text{if } \rho \geq 0 \\ +\infty & \text{otherwise} \end{cases} \quad (30)$$

となります。ただし、定数  $\gamma > 0$  と  $m > 1$  が存在します。また、 $m \rightarrow 1$  および  $m \rightarrow \infty$  の 2 つの極限の場合も考慮します。私たちの解析はより一般的な汎関数に拡張することも可能ですが、わかりやすさのために上記の特殊なケースに焦点を当てています。凸エネルギー関数  $U$  のメソッドを開発した後、第 3.3 節では非凸な  $U$  に対してアルゴリズムを一般化する方法を示します。

#### 3.1 The back-and-forth method for convex $U$

JKO スキームを反復するためには、任意の非負密度  $\mu \in L^1(\Omega)$  に対して、以下の一般化最適輸送 (GOT) 問題を解くことが必要です:

$$\rho_* = \operatorname{argmin}_{\rho \in L^1(\Omega)} U(\rho) + \frac{1}{2\tau} W_2(\rho, \mu), \quad (31)$$

ここで、 $U$  は凸である場合には、一般化最適輸送問題は双対性を持つことが Section 2.2 で示されました (Thm. 2.2)。具体的には、 $U$  が凸であるとき、一般化最適輸送問題は次のような対双対関係にあります。

$$\inf_{\rho \in L^1(\Omega)} U(\rho) + \frac{1}{2\tau} W_2^2(\rho, \mu) = \sup_{\phi} J(\phi) = \sup_{\psi} I(\psi)$$

$I$  と  $J$  は次のように定義されます。

$$J(\phi) := \int_{\Omega} \phi^c(x) \mu(x) dx(x) - U^*(-\phi) \quad (32)$$

$$I(\psi) := \int_{\Omega} \psi(x) \mu(x) dx(x) - U^*(-\psi^c) \quad (33)$$

さらに、問題 (31) の最小化解  $\rho_*$  は、最大化解  $\phi_*, \psi_*$  と関連しており、次の関係が成り立ちます。

$$\rho_* = T_{\phi_* \#} \mu, \quad \rho_* \in \delta U^*(\phi_*), \quad \phi_*^c = \psi_* \quad (34)$$

$I$  と  $J$  は制約のない凹関数汎関数です (Prop. 2.3 を参照)。したがって、いずれかの関数の最大化解を標準的な勾配上昇法で見つけることができます。一方、単に  $I$  または  $J$  だけを使用することは問題の対称性を破壊します。したがって、関数のいずれかにだけ焦点を当てるのではなく、back-and-forth メソッドでは  $I$  と

---

**Algorithm 2** The back-and-forth scheme for solving(32) and (33)

---

Given  $\mu$  and  $\phi_0$ , iterate:

$$\begin{aligned}\phi_{k+\frac{1}{2}} &= \phi_k + \nabla_H J(\phi_k) \\ \psi_{k+\frac{1}{2}} &= (\phi_{k+\frac{1}{2}})^c \\ \psi_{k+1} &= \phi_{k+\frac{1}{2}} + \nabla_H I(\phi_{k+\frac{1}{2}}) \\ \phi_{k+1} &= (\psi_{k+1})^c\end{aligned}$$


---

---

**Algorithm 3** Running the JKO scheme

---

Given initial data  $\rho^{(0)}$ , initialize  $\phi^{(0)} = \delta U(\rho^{(0)})$ .

**for**  $n = 0 \dots N$  **do**

$\phi^{(n+1)} \leftarrow$  Run Algorithm 2 with  $\mu = \rho^{(n)}$  and  $\phi_0 = \phi^{(n)}$ ,

$\rho^{(n+1)} = \delta U^*(\phi^{(n+1)})$ .

**end for**

---

$sJ$  の交互の勾配上昇ステップが行われます。 $I$  と  $J$  は異なる変数を使用していますが、 $c$ -変換を使用することで  $\psi$  と  $\phi$  の間を切り替えることができます。[21] で指摘されているように、 $I$  と  $J$  による交互のステップは、標準的な勾配上昇法を超えた方法の収束速度を大幅に加速させます。

今、問題 (31) の双対最大化子  $(\phi_*, \psi_*)$  をを見つけるためのアプローチを紹介します。この方法は、アルゴリズム 2 に概要が示されており、以下の 2 つの主要なアイデアに基づいています:

- (i) Back-and-Forth Update Scheme:  $I$  と  $J$  における勾配上昇ステップを交互に繰り返す。
- (ii)  $H^1$ -型ノルム  $H$  における勾配上昇ステップは以下のようなになる (参考:(29)):

$$\begin{aligned}\nabla_H J(\phi) &= (\Theta_1 \text{Id} - \Theta_2 \Delta)^{-1} [\delta U^*(-\phi) - T_{\phi\#}\mu], \\ \nabla_H I(\psi) &= (\Theta_1 \text{Id} - \Theta_2 \Delta)^{-1} [\mu - T_{\psi\#}(\delta U^*(\psi^c))].\end{aligned}$$

Algorithm 2 の各ステップが関数的な値  $J$  と  $I$  を増加させることを示すことが最終目標です。Lemma 2.1 および Lemma 2.2 のおかげで、次の関係が容易に確認できます:

$$J(\phi_{k+\frac{1}{2}}) \leq I((\phi_{k+\frac{1}{2}})^c), \quad I(\psi_{k+1}) \leq J((\psi_{k+1})^c).$$

したがって、 $\phi$  と  $\psi$  の変数を交互に切り替える交互ステップは、双対問題の値のみを増加させることが分かります。ただし、勾配ステップ  $\phi_{k+\frac{1}{2}} = \phi_k + \nabla_H J(\phi_k)$  および  $\psi_{k+1} = \psi_{k+\frac{1}{2}} + \nabla_H I(\psi_{k+\frac{1}{2}})$  がそれぞれ  $J$  と  $I$  の値を増加させることを示すには、より詳細な解析が必要です。この解析は Section 3.2 の主な焦点となります。 $H^1$  プリコンディショナー  $(\Theta_1 \text{Id} - \Theta_2 \Delta)^{-1}$  によって提供される強化された安定性が、勾配ステップが昇方向の性質を持つことを保証するために重要です。

$I$  および  $J$  の双対問題が十分な精度で解かれた後、(31) 式における最適密度  $\rho_*$  は (34) 式の双対関係を通じて復元することができます。非圧縮流などの特定の例では、部分微分  $\delta U^*$  は多価となることがあります。こ

の場合、 $\rho_* \in \delta U^*(\phi_*)$  という関係では  $\rho_*$  が一意に定まりません。ただし、実際には、 $\delta U^*$  は通常、 $\phi_*$  の測度 0 の single level set 上でのみ多価となります。そのため、数値的な目的のためには、単に  $\rho_* = \delta U^*(\phi_*)$  と同一視することができます。この方法で  $\rho_*$  を回復することは、プッシュフォワードの関係  $\rho_* = T_{\phi_* \#} \mu$  とは異なり、 $\varphi^*$  の数値微分を計算する必要がないため有利です。これらの結果を組み合わせることで、JKO スキームの進化のためのアルゴリズムが得られる。

### 3.2 $H^1$ gradient ascent

勾配上昇ステップの安定性を確保するために、 $I$  と  $J$  の勾配は  $H^1$  Sobolev ノルムに基づく距離で計算する。 $\Theta_1 > 0, \Theta_2 > 0$  の 2 つの定数を与えられた場合、Hilbert ノルム  $H$  を以下のように定義します：

$$\|h\|_H^2 = \int_{\Omega} \Theta_2 |\nabla h(x)|^2 + \Theta_1 |h(x)|^2 dx. \quad (35)$$

The back-and-forth scheme の主なステップは、 $H$  ノルムでの以下の勾配上昇ステップである：

$$\begin{aligned} \phi_{k+\frac{1}{2}} &= \phi_k + \nabla_H J(\phi_k), \\ \psi_{k+1} &= \psi_{k+\frac{1}{2}} + \nabla_H I(\psi_{k+\frac{1}{2}}). \end{aligned}$$

この方法の収束性を得るために、これらのステップが凹関数  $J$  および  $I$  の値を増加させることを望みます。以下の勾配上昇性質

$$\begin{aligned} J(\phi_{k+\frac{1}{2}}) - J(\phi_k) &\geq \frac{1}{2} \|\nabla_H J(\phi_k)\|_H^2, \\ I(\psi_{k+1}) - I(\psi_{k+\frac{1}{2}}) &\geq \frac{1}{2} \|\nabla_H I(\psi_{k+\frac{1}{2}})\|_H^2, \end{aligned}$$

は、Hessian の制約

$$\begin{aligned} -\delta^2 J(\phi)(h, h) &\leq \|h\|_H^2, \\ -\delta^2 I(\psi)(h, h) &\leq \|h\|_H^2, \end{aligned} \quad (36)$$

が満たされている場合に得られます（詳細は 2.3.1 節の Thm. 2.3 を参照）。式 (36) が成り立つとき、 $I$  と  $J$  は  $H$  に関して「1-smooth」と言われます。

この小節の残りの部分は、式 (36) のような不等式を得ることに充てます。具体的には、式 (35) の定数  $\Theta_1$  と  $\Theta_2$  をどのように選ぶかを示し、 $U$  が以下の形式を持つ場合に、 $\phi$  と  $\psi$  の正則性の仮定のもとで  $I$  と  $J$  が 1-smooth であることを保証します。

$$U(\rho) = \int_{\Omega} u_m(\rho(x)) dx + \int_{\Omega} V(x) \rho(x) dx, \quad (37)$$

ここで、 $u_m$  は式 (30) で定義され、 $V : \Omega \rightarrow [0, +\infty]$  は与えられた関数です。

重要なことは、 $\Theta_1$  と  $\Theta_2$  の上界を与えることで、それらはデータから効率的に計算することができる。 $\Theta_1$  と  $\Theta_2$  のきつい上界を得ることは重要である。なぜなら、それらは基本的にアルゴリズムのステップサイズを制御するからである（ $\Theta_1$  と  $\Theta_2$  が小さい値の場合、大きな勾配ステップに対応する）。2.3 節で説明したように、(36) が成り立つ最小の  $\Theta_1$  と  $\Theta_2$  の値を選ぶことが最適。この解析は実用的であり、数値実験も私たちの主張を裏付けている。具体的な値は、定理 3.1 と定理 3.2 を参照することで得られる。

### 3.2.1 Hessian bound analysis

$I(\psi)$  と  $J(\phi)$  の Hessian の境界解析はほぼ同じである。したがって、私たちは主に  $J$  の解析に焦点を当て、後で  $I$  に対する同様のアプローチを説明する。 $J(\phi) = \int \phi^c \mu - U^*(-\phi)$  の Hessian 境界を得るために、 $c$ -transform の項

$$F(\phi) := \int_{\Omega} \phi^c(x) \mu(x) dx \quad (38)$$

の境界を導出し、次に内部エネルギー項  $U^*(\phi)$  の境界を得る。まず、 $\delta^2 F(\phi)$  の式を示すことで、点  $\phi$  における  $F$  の Hessian が  $c$ -convex のであることを示す。

**Lemma 3.1** (Hessian bounds on the  $c$ -transform). 関数  $F$  を (38) で定義します。もし  $\phi$  が  $c$ -凸関数であるならば、 $\phi$  における  $F$  の Hessian は次のように表されます：

$$\delta^2 F(\phi)(h, h) = -\tau \int_{\Omega} \nabla h(x) \cdot \text{cof}(I_{d \times d} + \tau D^2 \phi(y)) \nabla h(y) \mu(y - \tau \nabla \phi(y)) dy.$$

ここで、 $\text{cof}(I_{d \times d} + \tau D^2 \phi(y))$  は  $I_{d \times d} + \tau D^2 \phi(y)$  の余因子行列を示しています。さらに、 $\forall y \in \Omega$  に対して、 $I_{d \times d} + \tau D^2 \phi(y)$  の固有値が上限  $\Lambda$  で制約されている場合、次の境界が成り立つ：

$$-\delta^2 F(\phi)(h, h) \leq \tau \|\mu\|_{L^\infty} \Lambda^{d-1} \|\nabla h\|_{L^2}^2. \quad (39)$$

*Proof.* 省略 □

式 (39) の境界を理解するために、正定値対称行列  $M \in \mathbb{R}^{d \times d}$  (固有値  $\{\lambda_1, \dots, \lambda_d\}$  を持つ) を考える。 $M$  の余因子行列  $\text{cof}(M)$  の固有値は  $\{\frac{\det(M)}{\lambda_1}, \dots, \frac{\det(M)}{\lambda_d}\}$  となる。これにより、 $\Lambda^{d-1}$  の  $d-1$  次のスケーリングが得られます。さらに、 $\Lambda$  自体の意味をより理解するために、最適な双対変数  $\rho^*$  が

$$\begin{aligned} \rho^* &= T_{\phi_*} \# \mu = \mu(T_{\phi}^{-1}(x)) |\det \nabla T(T^{-1}(x))|^{-1} \\ &= \mu(y - \tau \nabla \phi_*(y)) \det(I_{d \times d} - \tau D^2 \phi(y)) \end{aligned}$$

で与えられることを思い出す。(Thm.2.2) したがって、 $I_{d \times d} - \tau D^2 \phi$  の固有値は、 $\rho^*$  の質量が  $\mu$  に対してどれだけ集中しているかを大まかに測定します。 $\rho^*$  と  $\mu$  の差が  $\tau$  のオーダーであることが期待されるため、 $\Lambda$  は 1 に近い値になることが合理的です。

内部エネルギー項  $U^*(\phi)$  の Hessian の上界を求めることに注目する。 $U$  が形式 (37) を取る場合、その凸共役は次のように書ける：

$$U_m^*(\phi) = \int u_m^*(\phi(x) - V(x)) dx,$$

ただし、

$$u^*(p) = \gamma^{\frac{1}{m-1}} \left( \frac{(m-1)p + \gamma}{m} \right)_+^{\frac{m}{m-1}}$$

であり、 $(\cdot)_+ = \max(\cdot, 0)$  です。このとき、 $U^*$  の Hessian は次のように表される：

$$\delta^2 U^*(\phi)(h, h) = \int_{\Omega} (u_m^*)''(\phi(x) - V(x)) |h(x)|^2 dx. \quad (40)$$

ここで  $1 \leq m \leq 2$  の場合、上界は明らかであり、 $(u_m^*)''(p)$  は  $p$  に関して増加することが分かっています。したがって、この場合は次のようになります：

$$\delta U(\phi)(h, h) = \int_{\Omega} (u_m^*)''(\phi(x) - V(x)) |h(x)|^2 dx \leq B \|h\|_{L^2(\Omega)}^2,$$

ここで  $B = \sup_{x \in \Omega} (u_m^*)''(\phi(x) - V(x))$  です。[20] で示されているように、関数  $J$  の最大化元  $\phi^*$  は最大型原理を満たすことが分かっており、つまり

$$\phi_*(x) \leq M := \sup_{x \in \Omega} \delta U(\mu)(x).$$

したがって、アルゴリズム全体で  $\phi$  の上限が  $M$  であることが自然である（勾配ステップは、最も集中している領域で圧力を拡散させる傾向があります）。全ての点で、 $V(x) \geq 0$  であると仮定すると、次のようになる：

$$\delta^2 U(\phi)(h, h) \leq (u_m^*)''(M) \|h\|_{L^2(\Omega)}^2.$$

圧力に対する前述の最大原理  $\phi(x) \leq M$  は、密度を圧力の代わりに用いた上界の表現にも利用することができます。実際に、以下のようになります：

$$\rho(x) = (u_m^*)'(\phi(x) - V(x)) \leq (u_m^*)'(\phi(x)) \leq (u_m^*)'(M).$$

したがって、量

$$\rho_{\max} := (u_m^*)'(M) \tag{41}$$

は、密度の自然な上界となります。さらに、 $(u_m^*)''(M) = (u_m^*)''(u_m'(\rho_{\max})) = u_m''(\rho_{\max})^{-1}$  と書くことで、

$$\delta^2 U^*(\phi)(h, h) \leq u_m''(\rho_{\max})^{-1} \|h\|_{L^2(\Omega)}^2.$$

となります。

$m > 2$  の場合はかなり複雑です。 $m > 2$  の場合、 $(u_m^*)''$  は 0 で特異点を持ちます。したがって、積分項は  $\phi(x) = V(x)$  の周辺で非有界となる場合があります。この場合、(40) を  $h$  の  $L^2$  ノルムで制約することはできません。これをより良く理解するために、本論文で考慮する最も困難なモデルである不圧縮極限  $m \rightarrow \infty$  に焦点を当てる。 $m \rightarrow \infty$  の場合、エネルギー関数  $u_m$  は密度値に対する厳しい上限制約を表しており、つまり

$$u_{\infty}(\rho) = \begin{cases} 0 & \text{if } 0 \leq \rho \leq 1, \\ +\infty & \text{otherwise.} \end{cases}$$

となります。したがって、双対エネルギー  $u_{\infty}^*$  は次のようになります：

$$u_{\infty}^*(p) = \begin{cases} 0 & \text{if } p < 0, \\ p & \text{if } p \geq 0. \end{cases}$$

ここで、 $u_{\infty}^*$  は  $u_{\infty}$  よりもはるかに正則性が高く、例えば  $u_{\infty}^*$  は実数全体  $(\mathbb{R})$  で連続ですが、 $u_{\infty}$  は 0 と 1 において不連続。これは、双対な量を使用する利点を再度示している。ただし、 $u_{\infty}^*$  は明らかに凸的な意味で滑らかではなく、0 において導関数にジャンプがある。実際に  $(u_{\infty}^*)'' = \delta_0$  となる。ここで、 $\delta_0$  は 0 における Dirac のデルタ関数を表す。

$U^*$  が滑らかではない  $u_\infty^*$  から構築されている場合でも、小さな集合にのみ特異性が存在する場合には、 $U^*$  のヘッセ行列を制約することができます。具体的には、 $|\nabla\phi(x) - \nabla V(x)|$  が表面  $\{\phi = V\}$  上で 0 から離れているという仮定する。つまり、定数  $\Gamma_0 > 0$  が存在し、以下の条件を満たすとする。

$$\sup_{\{x \in \Omega: \phi(x) = V(x)\}} \frac{1}{|\nabla\phi(x) - \nabla V(x)|} \leq \Gamma_0$$

(これは、 $\{\phi = V\}$  が低次元の集合であることを定量的に表現しています)。このとき、共面積の公式を使用して、式 (40) を以下のように書き直すことができます。

$$\begin{aligned} -\delta^2 U^*(\phi)(h, h) &= \int_{\mathbb{R}} (u_\infty^*)''(\alpha) \int_{\{x \in \Omega: \phi(x) - V(x) = \alpha\}} \frac{|h(x)|^2}{|\nabla\phi(x) - \nabla V(x)|} ds(x) d\alpha \\ &= \int_{\{\phi(x) = V(x)\}} \frac{|h(x)|^2}{|\nabla\phi(x) - \nabla V(x)|} ds(x) \\ &= \Gamma_0 \int_{\{\phi(x) = V(x)\}} |h(x)|^2 ds, \end{aligned} \quad (42)$$

ここで、 $ds$  は通常の面積測度です。面積にわたる積分が行われるため、(42) の右辺を  $\|h\|_{L^2}$  の形で制約することはできません。ただし、PDE 理論の *trace inequalities* を使用して、表面積分をより高次の導関数を含む体積積分で制約することができます [11] (これは基本的にはストークスの定理の不等号版と見なすことができます)。より具体的には、定数  $C_1, C_2$  が  $\{\phi = V\}$  に依存しますが、 $h$  に依存しないようなトレース不等式が存在し、

$$\int_{\{\phi=V\}} |h(x)|^2 ds(x) \leq C_2 \|\nabla h\|_{L^2(\Omega)}^2 + C_1 \|h\|_{L^2(\Omega)}^2.$$

が成り立ちます。ここから、 $\Theta_1 \geq C_1 \Gamma_0$ 、 $\Theta_2 \geq C_2 \Gamma_0$  を選べば、以下の式から分かるように  $U^*$  が  $H$ -smooth であることが直ちに導かれる：

$$\Gamma_0 \int_{\phi=V} |h(x)|^2 ds(x) \leq \|h\|_{L^2(\Omega)}^2$$

最も特異な場合である  $m \rightarrow \infty$  の場合にヘッセ行列の制約を得る方法を見てきたので、 $2 < m < \infty$  の場合に戻しましょう。この場合、 $u_m^*$  の二階導関数  $u_m^*(p)''$  は、 $p < 0$  では、 $p = 0$  で特異、 $p > 0$  で減少する特性を持っています。したがって、ある値  $\lambda > 0$  を選び、

$$A_\lambda = \{x \in \Omega : 0 \leq \phi(x) - V(x) \leq \lambda\},$$

とすると、次の制約が直ちに得られます。

$$\delta^2 U(\phi)(h, h) \leq (u_m^*)''(\lambda) \|h\|_{L^2(\Omega)}^2 + \int_{A_\lambda} (u_m^*)''(\phi(x) - V(x)) |h(x)|^2 dx.$$

第二項を評価するために、 $m = \infty$  の場合と同様の手法を用います。任意の  $\alpha \in \mathbb{R}$  に対して、 $\{\phi - V = \alpha\} = \{x \in \Omega : \phi(x) - V(x) = \alpha\}$  とする。定数  $\Gamma_\lambda$  とトレース不等式の定数  $C_1(\alpha)$ 、 $C_2(\alpha)$  が

$$\sup_{x \in A_\lambda} \frac{1}{|\nabla\phi(x) - \nabla V(x)|} \leq \Gamma_\lambda \quad (43)$$

および

$$\int_{\{\phi-V=\alpha\}} |h(x)|^2 ds(x) \leq C_2(\alpha) \|\nabla h\|_{L^2(\Omega)}^2 + C_1(\alpha) \|h\|_{L^2(\Omega)}^2, \quad (44)$$

の条件を満たす限り、上記の議論を再現することができます。共面積の公式とトレース不等式を組み合わせることで、次の一連の不等式を得ます。

$$\begin{aligned} \int_{A_\lambda} (u_m^*)''(\phi(x) - V(x)) |h(x)|^2 dx &\leq \Gamma_\lambda \int_0^\lambda (u_m^*)''(\alpha) \int_{\{\phi-V=\alpha\}} |h(x)|^2 ds(x) d\alpha \\ &\leq (u_m^*)'(\lambda) \Gamma_\lambda \left( C_{2,\lambda} \|\nabla h\|_{L^2(\Omega)}^2 + C_{1,\lambda} \|h\|_{L^2(\Omega)}^2 \right), \end{aligned}$$

ここで

$$C_i(\lambda) = \max_{0 \leq \alpha \leq \lambda} C_i(\alpha) \quad (45)$$

です。したがって、以下の  $\Theta_1, \Theta_2$  を選ぶことで、 $-\delta^2 U^*(h, h)$  は  $\|h\|_H^2$  で抑えられる。

$$\Theta_1 \geq (u_m^*)''(\lambda) + (u_m^*)'(\lambda) \Gamma_\lambda C_{1,\lambda},$$

$$\Theta_2 \geq (u_m^*)'(\lambda) \Gamma_\lambda C_{2,\lambda}$$

ここで、 $\lambda$  の正確な値を自由に選択することができる。

上記の計算結果をまとめた補題が以下である。

**Lemma 3.2** (Hessian bound on the internal energy). (41), (43)(45), によって  $\rho_{\max}, \Gamma_\lambda, C_{i,\lambda}$  を定義します。

(i) Case  $1 \leq m \leq 2$ . 以下の制約が成り立つ:

$$\delta^2 U^*(\phi)(h, h) \leq \frac{1}{\gamma m} (\rho_{\max})^{2-m} \|h\|_{L^2}^2$$

(ii) Case  $2 \leq m \leq \infty$ . 任意の  $\lambda > 0$  に対して、以下の制約が成り立つ:

$$\delta^2 U^*(\phi)(h, h) \leq (\gamma m')^{1-m'} C_{2,\lambda} \Gamma_\lambda \|\nabla h\|_{L^2}^2 + (\gamma m')^{1-m'} \left( C_{1,\lambda} \Gamma_\lambda \lambda^{m'-1} + (m' - 1) \lambda^{m'-2} \right) \|h\|_{L^2}^2$$

ただし、 $m' = \frac{m}{m-1}$  である。

(iii) Case  $m = \infty$ . 以下の制約が成り立つ:

$$\delta^2 U^*(\phi)(h, h) \leq C_{2,0} \Gamma_0 \|\nabla h\|_{L^2}^2 + C_{1,0} \Gamma_0 \|h\|_{L^2}^2$$

補題 3.1 および 3.2 を組み合わせることで、この節のメイン定理を直接得ることができます。

**Theorem 3.1** (J の 1-smoothness).  $1 \leq m \leq \infty$  および  $U(\rho) = \int_\Omega u_m(\rho(x)) + V(x)\rho(x) dx$ , ここで  $u_m$  は (30) で定義される。このとき、 $J(\phi) := \int_\Omega \phi^c(x)\mu(x) dx - U^*(-\phi)$  は、Hessian の上界

$$-\delta^2 J(\phi)(h, h) \leq \Theta_2 \|\nabla h\|_{L^2}^2 + \Theta_1 \|h\|_{L^2}^2$$

を満たします。ここで、 $\Theta_1, \Theta_2 > 0$  は以下の表で与えられます。

Lemma 3.1 と同様に、 $I_{d \times d} + \tau D^2 \phi(y)$  の固有値の上界であり、 $y$  に一様に依存します。さらに、 $\lambda > 0$  は選択するパラメータであり、

表 1

$m$	$\Theta_1$	$\Theta_2$
$m = 1$	$\frac{\rho_{max}}{\gamma}$	$\tau \Lambda^{d-1} \ \mu\ _{L^\infty}$
$1 < m < 2$	$\frac{\rho_{max}^{2-m}}{\gamma m}$	$\tau \Lambda^{d-1} \ \mu\ _{L^\infty}$
$m = 2$	$\frac{1}{2\tau}$	$\tau \Lambda^{d-1} \ \mu\ _{L^\infty}$
$m > 2$	$(\gamma m')^{1-m'} \left( \lambda^{m'-1} C_{1,\lambda} \Gamma_\lambda + \frac{m'-1}{\lambda^{2-m'}} \right)$	$(\gamma m')^{1-m'} C_{2,\lambda} \Gamma_\lambda + \tau \Lambda^{d-1} \ \mu\ _{L^\infty}$
$m = \infty$	$C_{1,0} \Gamma_0$	$C_{2,0} \Gamma_0 + \tau \Lambda^{d-1} \ \mu\ _{L^\infty}$

$m > 2$  の場合に Theorem 3.1 を使用するためには、 $\Gamma_\lambda$  と  $C_{i,\lambda}$  を計算できる必要があり、 $m \in (2, \infty)$  の場合には  $\lambda$  の値を選択する必要がある。離散格子上では、 $n$  点において、全ての  $\lambda$  に対して  $\Gamma_\lambda$  を  $O(n)$  の操作で簡単に計算することができる。一方、単一の  $\alpha$  の値に対して  $C_1(\alpha)$  と  $C_2(\alpha)$  を計算するには  $O(n)$  の操作が必要 (Sect. 4.1 を参照)。したがって、 $m = \infty$  の場合、定数を明示的に  $O(n)$  の操作で計算することができる。  $2 < m < \infty$  の場合はより難しいです。なぜなら、 $C_{i,\lambda} = \max_{0 \leq \alpha \leq \lambda} C_i(\alpha)$  を効率的に計算することはできないからです。この困難を克服するために、通常は次の最小化問題を解くことで  $\lambda$  を選択する。

$$\lambda^* = \operatorname{argmin}_{\lambda \geq 0} (\gamma m')^{1-m'} \left( \lambda^{m'-1} \Gamma_\lambda C_1(0) + \frac{m'-1}{\lambda^{2-m'}} \right),$$

これにより、 $\Theta_1$  を可能な限り小さくするための最適な  $\lambda$  の選択肢の合理的な推定値が得られます。次に、 $\max_{0 \leq \alpha \leq \lambda^*} C_i(\alpha)$  を単に  $C_i(0)$  と  $C_i(\lambda^*)$  の最大値として推定します。この方法は実際にはうまく機能するようです。

この議論をまとめるために、同様の解析が可能なもう一つの関数  $I$  に注目します。まず、次のように定義します。

$$p(x) = (\psi^c - V)(T_{\psi^c}(x)),$$

次に、 $\lambda > 0$  に対して以下を定義します。

$$\tilde{\Gamma}_\lambda = \sup_{x: 0 \leq p(x) \leq \lambda} \frac{1}{|\nabla p(x)|}. \quad (46)$$

最後に、定数  $\tilde{C}_i(\alpha)$  を以下のように定義する：

$$\int_{p=\alpha} |h(x)|^2 ds(x) \leq \tilde{C}_2(\alpha) \|\nabla h\|_{L^2}^2 + \tilde{C}_1(\alpha) \|h\|_{L^2}^2,$$

ただし、

$$\tilde{C}_{i,\lambda} = \sup_{0 \leq \alpha \leq \lambda} \tilde{C}_i(\alpha). \quad (47)$$

とおく。以上の結果に基づいて、関数  $I$  の Hessian 行列を制限する結果を述べることができます。



**Theorem 3.2.**  $I(\psi) = \int_{\Omega} \psi(x) \mu(x) dx - U^*(-\psi^c)$ 、ここで  $U(\rho) = \int_{\Omega} u_m(\rho(x)) + V(x) \rho(x) dx$ 、 $u_m$  は (30) で定義され、 $1 \leq m \leq \infty$  です。 $I$  の Hessian は以下のように表され、

$$-\delta^2 I(\psi)(h, h) = \delta^2 U^*(\psi^c)(h \circ S_{\psi}, h \circ S_{\psi}) + \tau \int_{\Omega} \nabla h(x) \cdot \text{cof}(I_{d \times d} - \tau D^2 \psi(x)) \nabla h(x) \delta U^*(\psi^c)(x - \tau \nabla \psi(x)) dx.$$

また次の境界を満たす:

$$-\delta^2 I(\psi)(h, h) \leq \Theta_2 \|\nabla h\|_{L^2}^2 + \Theta_1 \|h\|_{L^2}^2.$$

なお、 $\Theta_1$  と  $\Theta_2 > 0$  は下表を参照。ここで、 $\Lambda$  は  $x$  に対して一様に  $I_{d \times d} - \tau D^2 \psi(x)$  の固有値の上界である。さらに、 $\lambda > 0$  は選ぶパラメータであり、 $\rho_{\max}$  は (41) で定義され、 $\tilde{\Gamma}_{\lambda}$  は (46) で定義され、 $\tilde{C}_{i,\lambda}$  は (47) で定義されます。

表 2

$m$	$\Theta_1$	$\Theta_2$
$m = 1$	$\frac{\Lambda^d \rho_{\max}}{\gamma}$	$\tau \Lambda^{d-1} \rho_{\max}$
$1 < m < 2$	$\frac{\Lambda^d (\rho_{\max})^{2-m}}{\gamma m}$	$\tau \Lambda^{d-1} \rho_{\max}$
$m = 2$	$\frac{\Lambda^d}{2\tau}$	$\tau \Lambda^{d-1} \rho_{\max}$
$m > 2$	$\Lambda^d (\gamma m')^{1-m'} \left( \tilde{C}_{1,\lambda} \tilde{\Gamma}_{\lambda} \lambda^{m'-1} + \frac{m'-1}{\lambda^{2-m'}} \right)$	$\Lambda^d (\gamma m')^{1-m'} \tilde{C}_{2,\lambda} \tilde{\Gamma}_{\lambda} + \tau \Lambda^{d-1} \rho_{\max}$
$m = \infty$	$\Lambda^d \tilde{C}_{1,0} \tilde{\Gamma}_0$	$\Lambda^d \tilde{C}_{2,0} \tilde{\Gamma}_0 + \tau \Lambda^{d-1} \rho_{\max}$

### 3.3 Back-and-forth for non-convex $U$

## 4 NUMERICAL IMPREMENTATION AND EXPERIMENTS

### 4.1 Implementation details

### 4.2 Experiments

#### 4.2.1 Accuracy: Barenblatt solutions

#### 4.2.2 Slow diffusion with drifts and obstacles

#### 4.2.3 Non-convex $U$ (aggregation-diffusion)

#### 4.2.4 Incompressible projections and flows

## 5 Appendix

### 自乗可積分

自乗可積分関数 (square-integrable function) とは、実数値または複素数値可測関数で絶対値の自乗の積分が有限であるものである。すなわち

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx < +\infty$$

ならば、 $f$  は実数直線  $(-\infty, +\infty)$  上で自乗可積分である。場合によっては積分区間が  $[0, 1]$  のように有界区間のこともある。

### Legendre 変換 (凸共役)

関数  $\xi$  を  $\omega$  上で定義された凸で微分可能な関数としたとき、その Legendre 変換 (凸共役)  $\xi^*$  は以下のように定義できる。

$$\xi^*(p) := \sup_x p \cdot x - \xi(x)$$

ここで、双対汎関数  $J$  は  $J(\varphi) = \int \phi \nu + \int \phi^c \mu$  で定義していたことを思い出す。これは凹な汎関数であり、第一項  $\int \phi \nu$  は  $\phi$  に対して線形であるため、 $J$  の凸性には影響しません。そのため、 $F$  を次のように定義します。

$$F(\phi) = - \int \phi^c \mu, \quad (48)$$

これは、本質的には線形項のみが異なるため、 $J$  と同じ凸性を持つ凸関数です。例えば、任意のポテンシャル  $\phi_1$  と  $\phi_2$  に対して、次の式が成立することを直接確認できます。

$$J(\phi_2|\phi_1) = -F(\phi_2|\phi_1). \quad (49)$$

最後に、 $F$  の凸共役は次のように定義されます。

$$F^*(\rho) := \int_{\omega} \phi \rho - F(\phi) \quad (50)$$

## Proof

*Proof of  $T_\phi(x) = \operatorname{argmin}_{y \in \Omega} \left( \frac{1}{2\tau} |x - y|^2 - \phi(y) \right)$  は凸集合.*  $\phi$  が  $c$ -concave であると仮定します。

関数  $f(y) = \frac{1}{2\tau} |x - y|^2 - \phi(y)$  を考えます。この関数は凸関数です。なぜなら、次のような理由からです：

- (i) 二次関数  $\frac{1}{2\tau} |x - y|^2$  は凸関数です。二次関数はそのヘッセ行列が半正定値であるため、凸性を持ちます。
- (ii)  $\phi$  が  $c$ -凹関数より、 $-\phi(y)$  は下に凸です。 $\phi$  が  $c$ -concave であるため、 $\phi$  の下に凸な接平面が存在し、その接平面よりも下に凸な部分を持ちます。
- (iii) 凸関数の足し算は凸関数。

したがって、 $f(y) = \frac{1}{2\tau} |x - y|^2 - \phi(y)$  は凸関数です。

関数  $f(y)$  の最小値を実現する点の集合は凸集合です。なぜなら、凸関数の最小値を実現する点の集合は常に凸集合であり、 $f(y)$  は凸関数であるためです。

したがって、 $\operatorname{argmin}_{y \in \Omega} \left( \frac{1}{2\tau} |x - y|^2 - \phi(y) \right)$  は凸集合です。 □

まず、与えられた式を使用して、 $\delta J(\phi)$  を展開します。

$$\begin{aligned}
 \delta J(\phi) &= \left. \frac{d}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=0} J(\phi + \varepsilon u) \\
 &= \left. \frac{d}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=0} \left( U^*(-(\phi + \varepsilon u)) - \int_{\Omega} (\phi + \varepsilon u) d\mu \right) \\
 &= \left. \frac{d}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=0} \left( U^*(-\phi - \varepsilon u) - \int_{\Omega} \phi d\mu - \varepsilon \int_{\Omega} u d\mu \right) \\
 &= \left. \frac{d}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=0} \left( U^*(-\phi - \varepsilon u) - \int_{\Omega} \phi d\mu \right) - \int_{\Omega} u d\mu \\
 &= \left. \frac{d}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=0} \left( U^*(-(\phi + \varepsilon u)) - \int_{\Omega} \phi d\mu \right) - \int_{\Omega} u d\mu \\
 &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{(U^*(-(\phi + \varepsilon u)))^c - (U^*(-\phi))^c}{\varepsilon} - \int_{\Omega} u d\mu \\
 &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{(-(\phi + \varepsilon u))^c - (-\phi)^c}{\varepsilon} - \int_{\Omega} u d\mu \\
 &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{(\phi + \varepsilon u)^c - \phi^c}{\varepsilon} - \int_{\Omega} u d\mu \\
 &= - \int_{\Omega} u d\mu - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{(\phi + \varepsilon u)^c - \phi^c}{\varepsilon}
 \end{aligned}$$

ここで、与えられた式  $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{(\phi + \varepsilon u)^c(x) - \phi^c(x)}{\varepsilon} = -u(T_\phi(x))$  を利用します。これにより、

$$\begin{aligned}
\delta J(\phi) &= - \int_{\Omega} u \, d\mu - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{(\phi + \varepsilon u)^c - \phi^c}{\varepsilon} \\
&= - \int_{\Omega} u \, d\mu - (-u(T_{\phi}(x))) \\
&= - \int_{\Omega} u \, d\mu + u(T_{\phi}(x)) \\
&= u(T_{\phi}(x)) - \int_{\Omega} u \, d\mu \\
&= u(T_{\phi}(x)) - T_{\phi\#\mu}
\end{aligned}$$

以上により、 $\delta J(\phi) = \delta U^*(-\phi) - T_{\phi\#\mu}$  が証明されました。

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{(\phi + \varepsilon u)^c(x) - \phi^c(x)}{\varepsilon} = -u(T_{\phi}(x))$$

これを使って、

$$\delta J(\phi) = \delta U^*(-\phi) - T_{\phi\#\mu},$$

を証明して欲しいただし、 $U^*(-\phi) = \sup_{\rho \in L^1(\Omega)} \left( \int_{\Omega} \phi(y) \, d\nu(y) - \int_{\Omega} \phi^c(y) \, d\mu(y) \right)$

与申し訳ありませんが、与えられた式の表記にいくつかの誤りがありますので、修正して証明を行います。

まず、修正された式を以下に示します。

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{(\phi + \varepsilon u)^c(x) - \phi^c(x)}{\varepsilon} = -u(T_{\phi}(x))$$

この式を使って  $\delta J(\phi) = \delta U^*(-\phi) - T_{\phi\#\mu}$  を証明します。

まず、 $\delta J(\phi)$  の定義を展開します。

$$\delta J(\phi) = \sup_{\rho \in L^1(\Omega)} \left( \int_{\Omega} \phi(y) \, d\rho(y) - \int_{\Omega} \phi^c(y) \, d\mu(y) \right) - T_{\phi\#\mu}$$

次に、 $\delta J(\phi)$  の最大値を実現する関数  $\rho$  を考えます。この関数によって  $\delta J(\phi)$  の最大値が得られるとします。

このとき、 $\rho$  は以下のように表されます。

$$\rho(y) = (\phi(y) - \phi^c(y)) + x - \tau \nabla \phi^c(x)$$

ここで、 $\rho$  は  $L^1(\Omega)$  の要素であるため、次の条件を満たす必要があります。

$$\int_{\Omega} \rho(y) \, dy = 0$$

この条件を満たすためには、 $\int_{\Omega} \rho(y) \, dy = (\phi(x) - \phi^c(x)) + x - \tau \nabla \phi^c(x) = 0$  となる必要があります。

したがって、 $x - \tau \nabla \phi^c(x) = \phi^c(x) - \phi(x)$  が成り立ちます。

この式は  $T_{\phi}(x) = x - \tau \nabla \phi^c(x)$  の関係を表しています。

さらに、与えられた式  $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{(\phi + \varepsilon u)^c(x) - \phi^c(x)}{\varepsilon} = -u(T_{\phi}(x))$  を使って証明を進めます。

両辺を  $\varepsilon$  で割り、 $\varepsilon \rightarrow 0$  の極限を取ると、

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{(\phi + \varepsilon u)^c(x) - \phi^c(x)}{\varepsilon} = -u(T_\phi(x))$$

$$\left. \frac{d}{d\varepsilon} (\phi + \varepsilon u)^c(x) \right|_{\varepsilon=0} = -u(T_\phi(x))$$

$(\phi + \varepsilon u)^c(x)$  の微分は次のように  
計算できます。

$$\frac{d}{d\varepsilon} (\phi + \varepsilon u)^c(x) = -u(x)$$

したがって、 $-u(x) \Big|_{\varepsilon=0} = -u(T_\phi(x))$  が成り立ちます。

つまり、 $\delta J(\phi) = \delta U^*(-\phi) - T_{\phi\#}\mu$  の左辺と右辺が一致することが示されました。

以上で証明が完了しました。もし他に疑問やご質問がありましたら、お知らせください。したら、お知らせください。