最適輸送問題の偏微分方程式への応用

坂井 幸人

数物科学専攻 1 年

February 11, 2023

研究内容

最適輸送問題 (Monge の問題 (1871))

ある砂山から砂山 (測度 μ) と同じ体積の穴 (測度 ν) に砂を運ぶ (写像 T). 輸送にかかるコストは重さと移動距離に依存する時, コストを最小にする方法を求めよ.

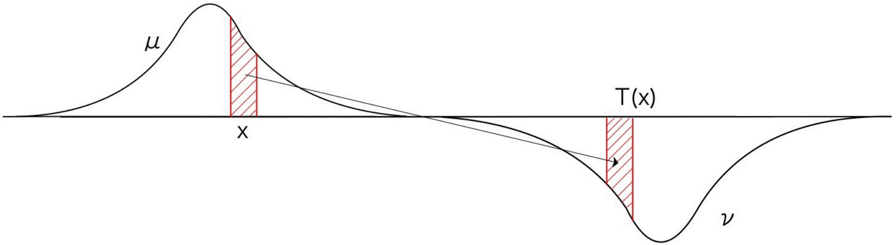


Figure: transport map

押し出し測度

Definition (押し出し測度 (pushforward measure))

μ から ν へ輸送する写像を T とするとき ($T_{\#}\mu = \nu$), 押し出し測度は

$$\nu(A) = T_{\#}\mu(A) := \mu(T^{-1}(A)) \qquad A \subset \Omega$$

で定義される.

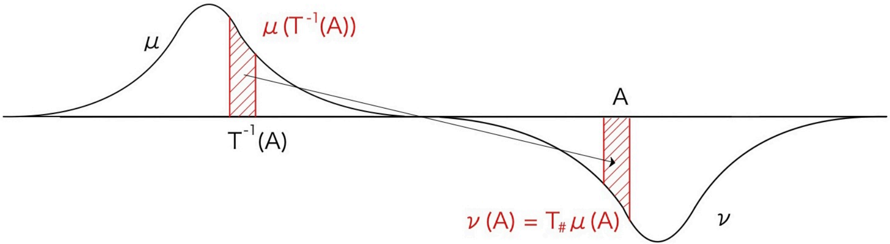


Figure: transport map

最適輸送問題の定式化

$\Omega \subset \mathbb{R}^d$: 凸集合,
$c : \Omega \times \Omega \to \mathbb{R}, \quad c(x, y)$: x から y への輸送にかかるコスト,
μ, ν : Ω上の確率測度,
$T : \Omega \to \Omega, \quad T_{\#}\mu = \nu$: μ を ν に運ぶ写像,

μ を ν に移動させる最小コストを C とすると, 最適輸送問題は以下のように定義される,

$$C(\mu, \nu) = \inf_T \int_\Omega c(x, T(x)) d\mu(x).$$

カントロヴィッチ双対問題

カントロヴィッチ双対問題

ν, μ: 確率測度,　$c(x, y)$: x から y への輸送にかかるコスト,

最適なコスト C は輸送する砂の体積を最大化させる問題として扱うことができる.

$$C = \sup_{\phi,\psi} \int \phi d\nu + \int \psi d\mu$$

ただし,Kantorovich ポテンシャル $\phi(y), \psi(x)$ は,

$$\phi(y) + \psi(x) \leq c(x, y).$$

$\mu \to \nu$ への最適マップが存在すると、双対問題の最大値 $\phi_*(y), \psi_*(x)$ が復元できる.
そのとき,

$$\phi_*(y) + \psi_*(x) = c(x, y).$$

c-変換

Definition (c-変換)

連続関数 $\phi : \Omega \to \mathbb{R}$ に対し, その c-変換 $\phi^c : \Omega \to \mathbb{R}$ を次のように定義する.

$$\phi^c(x) := \inf_{y\in\Omega}\{c(x,y) - \phi(y)\}$$

また, ϕ が c-凹関数とは, $\phi = \psi^c$ となる連続関数 $\psi : \Omega \to \mathbb{R}$ が存在することをいう.
さらに関数の組 (ϕ, ψ) が c-共役であるとは, $\phi = \psi^c$ かつ $\psi = \phi^c$ のときをいう.

(ϕ, ψ) が c-共役のとき, $\phi(y), \psi(x)$ の 最大値 ϕ_*, ψ_* は,

$$\phi_*(y) = \psi_*^c(y) = \inf\{c(x,y) - \psi_*(x)\}$$

$$\psi_*(x) = \phi_*^c(x) = \inf\{c(x,y) - \phi_*(y)\}$$

The back-and-forth method(Matt Jacobs, Flavien Léger 2020)

カントロヴィッチ双対問題 $C = \sup_{\phi,\psi} \int \phi d\nu + \int \psi d\mu$ は c-変換を用いて,

$$J(\phi) = \int \phi d\nu + \int \phi^c d\mu, \qquad I(\psi) = \int \psi^c d\nu + \int \psi d\mu,$$

の sup と表すことができる.

J と I それぞれで勾配上昇法によって最大値を求め,J と I を c-変換で行き来することで, 高速にカントロヴィッチ双対問題（最適輸送問題）を解くことができる.

$$J(\phi) \underset{\psi^c=\phi}{\overset{\phi^c=\psi}{\rightleftharpoons}} I(\psi)$$

Algorithm

Algorithm: the back-and-forth method

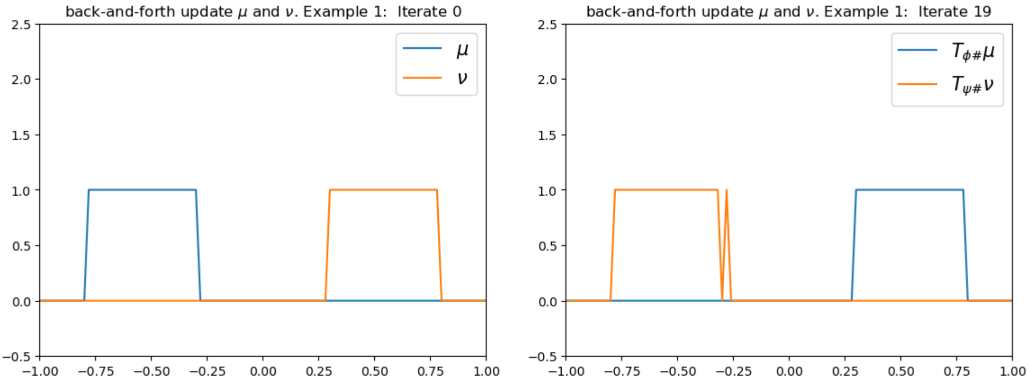
$$
\begin{aligned}
\phi_{n+\frac{1}{2}} &= \phi_n + \sigma \nabla_{\dot{H}^1} J(\phi_n), \\
\psi_{n+\frac{1}{2}} &= (\phi_{n+\frac{1}{2}})^c, \\
\psi_{n+1} &= \psi_{n+\frac{1}{2}} + \sigma \nabla_{\dot{H}^1} I(\psi_{n+\frac{1}{2}}), \\
\phi_{n+1} &= (\psi_{n+1})^c.
\end{aligned}
$$

1. 勾配上昇法を以下条件のもとに行う.

$$
\nabla_{\dot{H}^1} J(\phi) = (-\Delta)^{-1}(\nu - T_{\phi\#}\mu)
$$
$$
\nabla_{\dot{H}^1} I(\psi) = (-\Delta)^{-1}(\mu - T_{\psi\#}\nu)
$$

2. back-and-forth method で J と I で勾配上昇を交互に行う

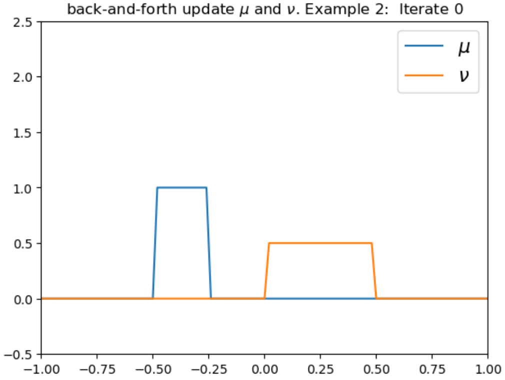
Example 1: Update μ and ν

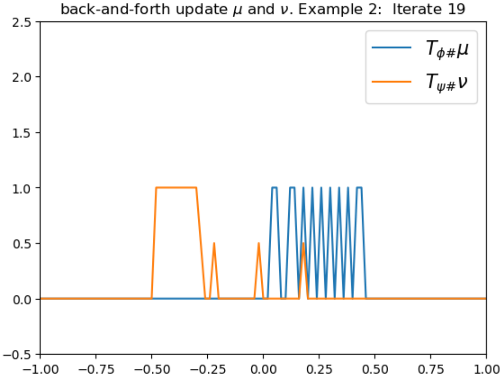


初期条件

$$\mu = \begin{cases} 1 & 0.3 \leq x \leq 0.8 \\ 0 & otherwise \end{cases} \quad \nu = \begin{cases} 1 & -0.8 \leq x \leq -0.3 \\ 0 & otherwise \end{cases}$$

Example 2: Update μ and ν





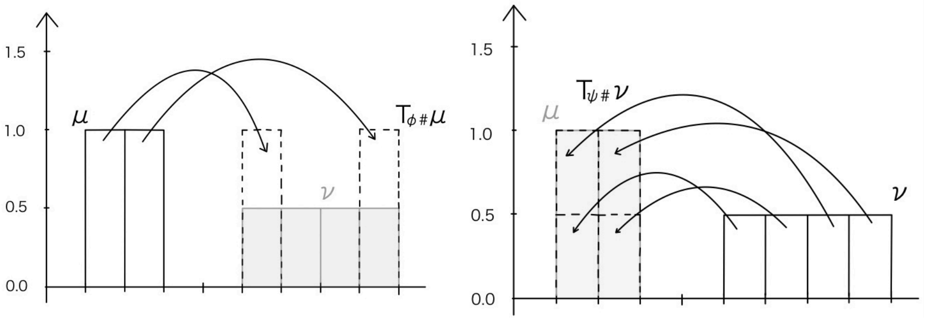
初期条件

$$\mu = \begin{cases} 0.5 & 0 \le x \le 0.5 \\ 0 & otherwise \end{cases} \quad \nu = \begin{cases} 1 & -0.5 \le x \le -0.25 \\ 0 & otherwise \end{cases}$$

問題点

transport map

$T_{\phi\#}\mu = \nu,\ T_{\psi\#}\nu = \mu$



transport 前と後の x 座標が一対一対応であるため,
ある x での ν と μ の質量（値）がそのまま transport 先へ反映される.

今後

- 一対一対応ではない transport map のプログラム作成（精度向上のため）
- back and forth method を用いて偏微分方程式を解くプログラムの作成
- 特に非線型方程式の新しい解法を求めるプログラムを作成

参考文献

- Matt Jacobs, Flavien Léger.
  A fast approach to optimal transport: the back-and-forth method.
  Numerische Mathematik, 2020.
- 太田 慎一.
  最適輸送理論とその周辺.
  http://www4.math.sci.osaka-u.ac.jp/~sohta/jarts/kino09.pdf
- 小林 愼一郎.
  距離コストに対する最適輸送問題について.
  https://www.math.sci.hokudai.ac.jp/~wakate/mcyr/2020/pdf/kobayashi_shinichiro.pdf.