

距離コストに対する最適輸送問題について

東北大学大学院理学研究科数学専攻
小林 慎一郎 (Shinichiro KOBAYASHI)

概要

Monge は, 1781 年の論文において最適輸送問題を提唱・定式化した. 最適輸送問題とは, 単位当たりのコストが与えられたときに, ものを運ぶのにかかる総コストを最小化する方法を求めるという, ある種の最適化問題である. Monge は元々, 単位当たりのコストが Euclid 距離で与えられる場合に最適輸送問題を考えていた. 本発表では, 単位当たりのコストを Euclid 距離のみに限らず, Hilbert らによって考えられた「線分を最短線として持つ距離」に一般化した問題を扱う.

1 導入

1781 年, G. Monge は論文 [6] において最適輸送問題を提唱した. それは, 現代の数学の言葉を用いると以下のように表現される.

Monge の最適輸送問題. Euclid 空間 $\mathbb{R}^n$ 上に 2 つの Borel 確率測度 μ, ν が与えられたとき, Borel 可測写像 $T: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ で $T_{\#}\mu = \nu$ を満たすものの中で

$$I(T) := \int_{\mathbb{R}^n} |T(x) - x| d\mu(x)$$

を最小化するものは存在するか. ここで, 測度 $T_{\#}\mu$ は写像 T による測度 μ の押し出し測度である.

この問題は次のように解釈できる. 砂が詰まった砂山 (測度 μ) から, 同体積の空っぽの砂場 (測度 ν) へ砂を運ぶ (写像 T) ことを考える. 条件 $T_{\#}\mu = \nu$ から, 地域 $A \subset \mathbb{R}^n$ に入ってくる砂の量 $\nu(A)$ と, A に送る地域 $T^{-1}(A)$ の砂の量 $\mu(T^{-1}(A))$ は等しい (図 1 参照). つまり, 輸送の前後で砂の量が変わらないことを要請している. 位置 x から y へ運ぶには単位あたり $|y - x|$ だけコストがかかるとすると, 値 $I(T)$ は輸送 T でかかる総コストである.

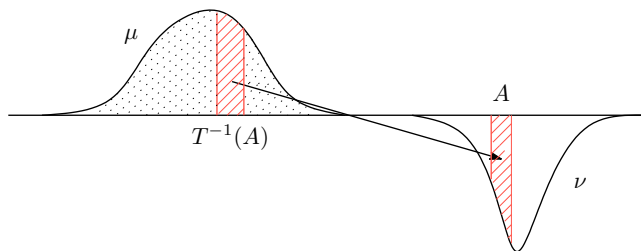


図 1 輸送のイメージ図

Monge の問題を考える舞台は Euclid 空間である必要はなく, 単位当たりのコストも距離関数でな

くてもよいことに注意する. 条件 $T_{\#}\mu = \nu$ を満たす写像 T を μ から ν への輸送写像といい, 汎関数 I を最小化する輸送写像を最適輸送写像という. 測度の取り方によっては輸送写像すら存在しないことがある. 例えば μ を 1 点上の Dirac 測度, ν を 2 点上の Dirac 測度とすると, 輸送写像は存在しない. したがって, Monge の問題を一般的に考える際には測度 (特に μ) に仮定をおく必要がある. Monge の問題は長い年月をかけて多くの数学者により様々な仮定のもとで解決された. 解決の歴史については [2] が詳しい. 本講演と関連する方向で一般的な形で解決は Champion-De Pascale [3] による.

定理 1.1 (Champion-De Pascale [3]). μ, ν をコンパクト台を持つ $\mathbb{R}^n$ 上の Borel 確率測度とする. このとき, μ が n 次元 Lebesgue 測度に絶対連続ならば, μ から ν への最適輸送写像が存在する. ただし, 単位当たりのコストとしてノルム (どんなノルムでもよい) から定まる距離を考えている.

一方, $\mathbb{R}^n$ の G_δ -集合 Ω にはノルムから定まらない完備距離がいくつも入る. そこで, 単位当たりのコストとしてそのような距離をとったときに同じく最適輸送写像は存在するかという問題を考える. この問いに対する答えが本稿の主定理である. 主定理を述べる前に, 考える距離のクラスを説明したい. Euclid 空間における測地線 (線分) はノルムが定める距離に関しても測地線になっている. この性質を満たす距離は射影的であると言われる. また, ノルム空間はある意味で “Ricci 曲率が下に有界” である. 射影的かつ “Ricci 曲率が下に有界” な距離として, **Hilbert** の射影的距離が知られている.

定理 1.2 (K.). $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ を凸かつ内点を持つ G_δ -集合, ρ を射影的かつ “Ricci 曲率が下に有界” な Ω 上の距離とする. μ, ν をコンパクト台を持つ Ω 上の Borel 確率測度とする. このとき, μ が n 次元 Lebesgue 測度に絶対連続ならば, 単位当たりのコストを ρ としたときの最適輸送写像が存在する.

本稿は 4 節からなる. 第 2 節で最適輸送理論の一般論を述べ, 第 3 節で Hilbert の射影的距離について説明する. 第 4 節で主定理の証明の概略を述べる.

2 最適輸送理論

本節の詳細については [1], [7] を参照されたい. 本節以降, 測度といったら Borel 測度を指す. また, 位相空間 Z 上の確率測度全体の集合を $\mathcal{P}(Z)$ と表す. 単位当たりのコストをコスト関数という. 一般に, ポーランド空間 X と下半連続な関数 $c: X^2 \rightarrow [0, +\infty]$ に対し, c をコスト関数とする最適輸送問題を考えることができる.

Monge の最適輸送問題 (一般のコスト関数の場合). X 上の 2 つの Borel 確率測度 μ, ν が与えられたとき, Borel 可測写像 $T: X \rightarrow X$ で $T_{\#}\mu = \nu$ を満たすものの中で

$$I_c(T) := \int_X c(x, T(x)) d\mu(x)$$

を最小化するものは存在するか.

Monge の問題の難しさは, 輸送写像全体の空間のコンパクト性の欠落, すなわち最小化列 $\{T_j\}_j$ を考えたときに T_j の収束先を見つけることが一般にはできないところにある. Kantorovich [5] は, 対

象を写像から広げて、カップリングを用いて輸送問題を考えることを提唱した。ここでカップリングとは X^2 上の確率測度 π であって、任意の Borel 集合 $A \subset X$ に対して

$$\mu(A) = \pi(A \times X), \nu(A) = \pi(X \times A)$$

が成り立つものを指す。カップリング全体の集合を $\Pi(\mu, \nu)$ と表す。輸送写像 T に対して $(\text{id}, T)_\# \mu$ はカップリングである。そして、汎関数

$$J_c(\pi) = \int_{X^2} c(x, y) d\pi(x, y), \pi \in \Pi(\mu, \nu) \quad (1)$$

の最小化を考える。最小化元のことを最適カップリングという。最適カップリングの存在は、以下のようにして容易に示される。まず、 X がポーランド空間であるとき、 $\Pi(\mu, \nu)$ は測度の弱収束に関してコンパクトである。ここで、位相空間 Z 上の確率測度の列 $\{\nu_i\}_i$ が $\nu \in \mathcal{P}(Z)$ に弱収束するとは、 Z 上の任意の有界な連続関数 φ に対して

$$\lim_{i \rightarrow \infty} \int_Z \varphi d\nu_i = \int_Z \varphi d\nu$$

が成り立つことである。 Z が距離付け可能ならば、弱収束も距離付け可能である。ポーランド空間 Z に対し、部分集合 $\mathcal{K} \subset \mathcal{P}(Z)$ の相対コンパクト性と緊密性は同値である (Prokhorov の定理)。ここで、 $\mathcal{K}$ が緊密であるとは、任意の $\varepsilon > 0$ に対してあるコンパクト集合 $K = K_\varepsilon \subset Z$ が存在して

$$\sup_{\nu \in \mathcal{K}} \nu(Z \setminus K) \leq \varepsilon$$

が成り立つことである。カップリング全体の空間 $\Pi(\mu, \nu) \subset \mathcal{P}(X^2)$ が緊密であることと閉集合であることはすぐにわかるので、コンパクトである。また、コスト関数 c が下半連続ならば、汎関数 J_c が下半連続であることもすぐにわかる。したがって、最適カップリングが存在することは変分法における直接法の議論によって示される。最適カップリングが満たす重要な性質として、巡回的単調性がある。これは、粗く述べると“最適カップリングが運ぶ場所をどう入れ替えても総コストは安くない”と言える。カップリング π が c -巡回的単調であるとは、任意の有限点 $(x_1, y_1), \dots, (x_N, y_N) \in \text{supp } \pi$ と任意の置換 $\sigma \in \mathfrak{S}_N$ に対し、

$$\sum_{i=1}^N c(x_i, y_i) \leq \sum_{i=1}^N c(x_i, y_{\sigma(i)})$$

が成り立つことである。例えば、 $N = 2$ で c が Euclid 距離の自乗のときは通常の意味での単調性になる。

最適カップリングが存在するだけでは面白みはあまりないが、Kantorovich による一般化の最大の利点は双対問題を持つことにある。これは、“総コストを最小化することと利益を最大化することは同じである”という主張である。

定理 2.1 (Kantorovich 双対性). 以下の等式が成り立つ:

$$\inf_{\pi \in \Pi(\mu, \nu)} J_c(\pi) = \sup_{(\varphi, \psi)} \left(\int_X \varphi d\mu + \int_X \psi d\nu \right).$$

ただし右辺の上限は X 上の有界連続関数の組 (φ, ψ) であって各点 $(x, y) \in X^2$ で

$$\varphi(x) + \psi(y) \leq c(x, y) \quad (2)$$

を満たすものの全てにわたってとる.

定理 2.1 は凸解析の Legendre 変換を巧みに用いることで証明することができる. ここで, 関数 $\varphi: X \rightarrow \mathbb{R}$ に対して不等式 (2) を満たす関数 ψ の中で各点で最大になるものを導入する.

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

とおき, 関数 φ の c -変換という. ある関数の c -変換で表せる関数を c -凹関数という. d が X 上の距離であるとき, 関数が d -凹関数であることと 1-Lipschitz, すなわち Lipschitz 定数が高々 1 である Lipschitz 連続関数であることは同値である. また, 関数 φ が 1-Lipschitz であるとき, φ の d -変換 φ^d は $-\varphi$ に等しい. したがって以下を得る.

系 2.2 (Kantorovich-Rubinstein 双対性). (X, d) を可分かつ完備な距離空間とする. このとき, 以下が成り立つ:

$$\inf_{\pi \in \Pi(\mu, \nu)} \int_{X^2} d(x, y) d\pi = \sup_{\varphi: 1\text{-Lip.}} \left(\int_X \varphi d\mu - \int_X \varphi d\nu \right).$$

定理 2.1 と c -変換を上手く使うことで, 以下の定理を得る.

定理 2.3. カップリング $\pi \in \Pi(\mu, \nu)$ に対し, 以下は同値:

1. π は最適輸送計画である.
2. π は c -巡回的単調である.
3. ある c -凹な Borel 可測関数 $\varphi: X \rightarrow \mathbb{R}$ が存在して π -a.e. $(x, y) \in X^2$ に対して

$$\varphi(x) + \varphi^c(y) = c(x, y)$$

が成り立つ (この関数 φ を **Kantorovich** ポテンシャルという)

さらに測度 μ, ν に対して

$$\begin{aligned} \mu \left(\left\{ x \in X \mid \int_X c(x, y) d\nu(y) < +\infty \right\} \right) &> 0, \\ \nu \left(\left\{ y \in X \mid \int_X c(x, y) d\mu(x) < +\infty \right\} \right) &> 0 \end{aligned}$$

が成り立つと仮定すると, 3. の関数 φ は μ -可積分であり,

$$\inf_{\pi \in \Pi(\mu, \nu)} J_c(\pi) = \int_X \varphi d\mu + \int_X \varphi^c d\nu$$

が成り立つ.

3 Hilbert の射影的距離

Euclid 幾何学において、線分は 2 点を結ぶ最短線である。一方、双曲幾何学のモデルの一つである Cayley-Klein モデルにおいても線分は 2 点を結ぶ最短線である。Hilbert [4] は、線分を最短線として持つ幾何学の研究を第 4 の問題として提示した。その後、弟子である G. Hamel は、Hilbert の第 4 問題の解が射影空間またはその凸部分集合上で表現されることを見出したため、解である距離は射影的であると言われる。Hilbert による例は今日では **Hilbert** の射影的距離または **Hilbert** 幾何学と呼ばれている。これについて紹介する。 $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ を有界な開凸集合とする。 Ω 上の **Hilbert** 距離 $d_{\mathcal{H}}$ を以下で定める。異なる 2 点 $x, y \in \Omega$ に対し、それを通る直線 l と Ω の境界との交点は Ω の凸性からちょうど 2 点存在する。 x に近いほうを a 、 y に近いほうを b とそれぞれおく (図 2 参照)。すなわち 4 点 a, x, y, b がこの順で同一直線上に並んでいるとする。この設定のもと、

$$d_{\mathcal{H}}(x, y) := \frac{1}{2} \log \frac{|y - a||x - b|}{|x - a||y - b|}$$

とおく。すなわち $d_{\mathcal{H}}(x, y)$ は 4 点 a, x, y, b 対しても b の複比の対数である。 Ω が円盤であるときの

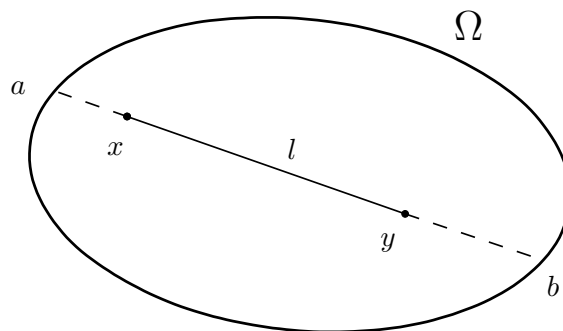


図 2 Hilbert 距離

Hilbert 幾何学は双曲幾何学の Cayley-Klein モデルに一致する。また、凸領域 Ω の境界が C^2 級かつ正曲率であるとき、Hilbert 幾何学は曲率 -1 の定曲率空間であることが知られている。

4 主定理

測地的距離空間において、コスト関数が距離のみに依存するとき、測地線に沿って輸送すれば最適になると一般に予想される。測地線が分岐しないならば、(ある種の曲率に対する下限条件の下で) 最適輸送を写像で表すことができる。一方、測地線が分岐するような空間では同様の議論はできない。ノルム空間において測地線として非 Euclid 的なものも存在する (図 3 参照) が、そのようなものは選ばずに Euclid 的な線分のみに沿った最適輸送を考え、それが輸送写像から誘導されることを示すことによって、最適輸送写像の存在が示される。このアイデアを用いて、射影的距離に対して最適輸送写像の存在を示した。どのような道具を用いるかを以下に述べる。

補題 4.1. π を最適カップリングとする。 π が輸送写像 T で書ける、すなわち $\pi = (\text{id}, T)_{\#} \mu$ ならば、 T は最適輸送写像である。

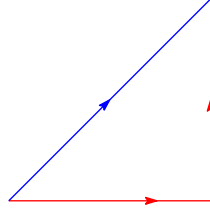


図3 l^1 -ノルムの測地線

補題 4.1 から, ある最適カップリングが写像で書けることを示せば最適輸送写像の存在が言えることになる. 以降, $\Omega \subset \mathbb{R}^n, \rho$ を定理 1.2 のものとする. $\varphi: \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ を Kantorovich ポテンシャルとする. 関数 φ は距離 ρ について 1-Lipschitz であった. 関数 $\beta: \Omega^2 \rightarrow [0, +\infty]$ を

$$\beta(x, y) := \begin{cases} |x - y|^2 & (\varphi(x) - \varphi(y) = \rho(x, y) \text{ のとき}) \\ +\infty & (\text{そうでないとき}) \end{cases}$$

によって定める. β をコスト関数とする最適輸送問題を考え, 定理 2.3 と距離 ρ が射影的であることを用いて以下がわかる.

命題 4.2. カップリング $\pi \in \Pi(\mu, \nu)$ がコスト関数 β について最適カップリングであるならば, コスト関数 ρ についても最適であり, ある β -巡回的単調集合 $\Gamma \subset \Omega^2$ が存在して以下を満たす.

1. $\pi(\Gamma) = 1$.
2. 任意の $(x, y), (x', y') \in \Gamma$ で $x \in [x', y']$ を満たすものに対して

$$|x - y|^2 + |x' - y'|^2 \leq |x - y'|^2 + |x' - y|^2$$

が成り立つ. ここで集合 $[x', y']$ は 2 点 x', y' をつなぐ線分である.

コスト関数 β に対する最適カップリング全体の集合を $\mathcal{O}_\beta(\mu, \nu)$ とおく. 次に $\mathcal{O}_\beta(\mu, \nu)$ の部分集合 $\mathcal{O}_2(\mu, \nu)$ を定める. まず正数 $\varepsilon > 0$ を任意に固定する. $\pi \in \mathcal{P}(\Omega^2)$ であって $(\text{pr}_1)_\# \pi = \mu$ を満たすものに対して $J_\varepsilon(\pi) \in [0, +\infty]$ を

$$J_\varepsilon(\pi) := \frac{1}{\varepsilon} W_1((\text{pr}_2)_\# \pi, \nu) + \int_{\Omega^2} \rho(x, y) + \varepsilon |x - y|^2 d\pi + \varepsilon^{3d+2} \# \text{supp}((\text{pr}_2)_\# \pi)$$

によって定める. ただし $W_1(\cdot, \cdot)$ はコスト関数 ρ に関する最適輸送コストであり, $\#A$ は集合 A の元の個数である. A が無限集合のときは $\#A = \infty$ とする. 整数 d は “Ricci 曲率の下限” に関する条件から定まる定数である. 汎関数 J_ε を最小化する元全体の集合を D_ε とおく. すなわち

$$D_\varepsilon := \arg \min \{ C_\varepsilon(\pi) \mid \pi \in \mathcal{P}(\Omega^2), (\text{pr}_1)_\# \pi = \mu \}$$

とおく. そして, 集合族 $\{D_\varepsilon\}_\varepsilon$ の極限点全体の集合を $\mathcal{O}_2(\mu, \nu)$ とおく. このとき, 以下が成り立つ.

命題 4.3. μ, ν をコンパクト台を持つ Ω 上の Borel 確率測度で, μ は n 次元 Lebesgue 測度に絶対連続であるとする. μ の Radon-Nikodym 導関数を f とする. $\pi \in \mathcal{O}_2(\mu, \nu)$ とする. このとき, ある部分集合 $\Gamma \subset \Omega^2$ が存在して $\pi(\Gamma) = 1$ かつ, 任意の $(x, y) \in \Gamma \setminus \text{diag}$ と $r > 0$ に対して

$$\liminf_{\delta \rightarrow 0} \frac{\mathcal{L}^n \left(T \left(\Gamma \cap (B_{\delta/4}(x) \times B_r(y)) \right) \cap B_\delta(x) \right)}{\mathcal{L}^n(B_\delta(x))} > 0$$

が成り立つ. ここで $T(\Xi) \subset \mathbb{R}^n$ は,

$$T(\Xi) := \{P_t(x, y) \mid t \in [0, 1], (x, y) \in \Xi\}$$

によって定められる.

定理 1.2 の証明の概略は以下のとおりである. $\pi \in \mathcal{O}_2(\mu, \nu)$ とする. この π が写像で書けることを示す. 写像で書けないと仮定すると, ある点 $(x_0, y_0), (x_0, y_1) \in \Gamma$ が存在して $y_0 \neq y_1$ となる. このとき $(y_1 - y_0) \cdot (y_0 - x_0) < 0$ または $(y_0 - y_1) \cdot (y_1 - x_0) < 0$ が成り立つ. y_0 と y_1 は入れ替えることができるので, $(y_1 - y_0) \cdot (y_0 - x_0) < 0$ が成り立つと仮定してよい. このとき, 命題 4.3 からある点 $x \in B_\delta(x_0), y \in B_r(y_1), x' \in B_{\delta/4}(x_0), y' \in B_r(y_0)$ が存在して $(x, y), (x', y') \in \Gamma$ かつ $x \in [x', y']$ が成り立つ. 命題 4.2 から

$$(y - y') \cdot (x - x') \geq 0$$

である. 一方, $r > 0$ を十分小さくおくと

$$(y - y') \cdot (y' - x') < 0$$

が成り立つ (内積の連続性) が, $x' \in [x, y]$ から

$$(y - y') \cdot (x - x') < 0.$$

これは矛盾. よって, π は写像で書ける.

参考文献

- [1] L. Ambrosio and N. Gigli, *A user's guide to optimal transport*, Modelling and optimisation of flows on networks, 2013, pp. 1–155.
- [2] F. Cavalletti, *An overview of L^1 optimal transportation on metric measure spaces*, Measure theory in non-smooth spaces, 2017, pp. 98–144.
- [3] T. Champion and L. De Pascale, *The Monge problem in $\mathbb{R}^d$* , Duke Math. J. **157** (2011), no. 3, 551–572.
- [4] D. Hilbert, *Ueber die gerade linie als kürzeste verbindung zweier punkte*, Mathematische Annalen **46** (1895Mar), no. 1, 91–96.
- [5] L. Kantorovitch, *On the translocation of masses*, Management Sci. **5** (1958), 1–4.
- [6] G. Monge, *Mémoire sur la théorie des déblais et des remblais*, De l’Imprimerie Royale, 1781.
- [7] C. Villani, *Optimal transport*, Grundlehren der Mathematischen Wissenschaften [Fundamental Principles of Mathematical Sciences], vol. 338, Springer-Verlag, Berlin, 2009. Old and new.