

最適輸送理論とその周辺

太田 慎一*

京都大学大学院理学研究科

最適輸送理論の基礎を解説する。特にユークリッド空間の場合を詳しく述べ、リーマン多様体などの一般の空間については軽く触れるにとどめる。より詳しくは、日本語の論説 [太田] や、Villani による標準的かつ網羅的な本 [Vi1], [Vi2] などを参照されたい。

本題に入る前に、基本的な記号を用意する。まず、空間 X 上の測度 μ の写像 $f: X \rightarrow Y$ による押し出し (像測度) を $f_{\#}\mu$ であらわす。すなわち、 $f_{\#}\mu$ は $A \subset Y$ に対し $f_{\#}\mu(A) = \mu(f^{-1}(A))$ で定められる Y 上の測度である。次に、距離空間 (X, d) 上のボレル確率測度全体のなす集合を $\mathcal{P}(X)$ 、各 $p \in [1, \infty)$ に対し、ある $x \in X$ で $\int_X d(x, y)^p d\mu(y) < \infty$ を満たす $\mu \in \mathcal{P}(X)$ のなす部分集合を $\mathcal{P}_p(X)$ であらわす。このとき、 $\mu(X)$ が有限であることから、三角不等式より $\int_X d(x, y)^p d\mu(y) < \infty$ は全ての $x \in X$ で成り立つことに注意する。

1 モンジュ・カントロヴィチの問題

最適輸送理論のはじまりは、モンジュが 18 世紀に提出した次のような問題にあるとされる ([Vi2, Chapter 3]): ‘ある (複数の) 場所から掘り出した土を別の場所での工事に使う。土の輸送費用を重さと移動距離の積とするとき、輸送にかかる費用の総和を最小にする方法を求めよ。’ ここで、掘り出す土の量と工事に必要な土の量は場所ごとにあらかじめ決められており、その総重量は一致するとしている。モンジュはこの問題を次のように数学的に定式化した:

モンジュの問題. 与えられた $\mu, \nu \in \mathcal{P}_1(\mathbb{R}^n)$ に対し、 $\Phi_{\#}\mu = \nu$ を満たす (μ を ν に輸送する) 可測写像 $\Phi: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ の中で、輸送コスト

$$\int_{\mathbb{R}^n} \|x - \Phi(x)\| d\mu(x)$$

を最小にするものを見つけよ。ここで $\|\cdot\|$ は標準的ユークリッドノルムである。最小値を与える Φ を μ から ν への**最適輸送**という。

モンジュ自身は最適輸送 Φ の満たすべき性質についての研究は残しているが、存在性の証明は与えていない。実際、コスト $\|x - y\|$ はより凸性の高いコスト $\|x - y\|^2$ に比べて扱いが難しく、存在性の厳密な証明が与えられたのはようやく 2000 年前後のことである。以降では、コストとして距離の 2 乗 $\|x - y\|^2$ のみを考える。つまり、 $\mu, \nu \in \mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n)$ に対し、 $\Phi_{\#}\mu = \nu$ を満たす $\Phi: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ の中で

$$\int_{\mathbb{R}^n} \|x - \Phi(x)\|^2 d\mu(x)$$

を最小にするものを考える。

モンジュの問題を解くための、モンジュ以降での最初の大きな進展は、1940 年代にカントロヴィチによって (はじめはモンジュの問題のことは知らずに) なされた。

* sohta@math.kyoto-u.ac.jp

カントロヴィチの問題. $\mu, \nu \in \mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n)$ に対し, μ と ν のカップリング $\pi \in \mathcal{P}(\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n)$ で

$$\int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} \|x - y\|^2 d\pi(x, y) \quad (1.1)$$

を最小にするものを見つけよ. そのような π を μ と ν の**最適カップリング**という.

ここで, $\pi \in \mathcal{P}(\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n)$ が μ と ν の**カップリング**であるとは, 自然な射影 $p_i(x_1, x_2) = x_i$ ($i = 1, 2$) に対し $(p_1)_\# \pi = \mu$ かつ $(p_2)_\# \pi = \nu$ を満たすことである. μ と ν のカップリング全体のなす集合を $\Pi(\mu, \nu)$ で表す. 直積測度 $\mu \times \nu$ は μ と ν のカップリングであるが, これは効率の良い方法とは限らない (今の状況では, π の台が対角成分 $\{(x, x) \mid x \in \mathbb{R}^n\}$ に近いほど (1.1) は小さい). $\Phi_\# \mu = \nu$ なる写像 Φ があつたとき, $(\text{Id}_{\mathbb{R}^n} \times \Phi)_\# \mu$ は μ と ν のカップリングであり, よつてカントロヴィチの問題はモンジュの問題を拡張し, 条件を緩めたものである. カントロヴィチの設定は, その対称性とカップリングという条件の凸性 ($\pi, \pi' \in \Pi(\mu, \nu)$ ならば $(\pi + \pi')/2 \in \Pi(\mu, \nu)$) により, モンジュの設定よりも見通しが良くなっている ($\Phi_\# \mu = \nu$ という条件は凸ではない). 以降で見るように, モンジュの問題はカントロヴィチの問題を経由して解けることが多い. また, μ が 1 点のディラック測度で ν がそうではないとき, モンジュの問題には明らかに解が存在しないが, カントロヴィチの問題は考えることができる.

モンジュ・カントロヴィチの問題を考察する前に, この問いの幾何学的な解釈を与える. カントロヴィチの問題のコスト (1.1) は, 2 つの確率測度 μ, ν がどの程度近いかを測っていると考えられ, それを μ と ν の間の距離とした距離空間を Wasserstein 空間という (実際には Wasserstein よりカントロヴィチや Rubinstein の貢献の方が大きい).

定義 1.1 (Wasserstein 空間). $\mu, \nu \in \mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n)$ の間の **Wasserstein 距離**を

$$d_2^W(\mu, \nu) := \inf_{\pi \in \Pi(\mu, \nu)} \left(\int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} \|x - y\|^2 d\pi(x, y) \right)^{1/2}$$

と定義し, $(\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n), d_2^W)$ を **Wasserstein 空間**という.

この枠組みでは, カントロヴィチの問題は与えられた $\mu, \nu \in \mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n)$ の間の Wasserstein 距離についての最短線の存在性とその性質を問うている. 各 $x \in \mathbb{R}^n$ に x でのディラック測度 $\delta_x \in \mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n)$ を対応させることにより, \mathbb{R}^n は $(\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n), d_2^W)$ に等長的に埋め込まれる. また, 列 $\{\mu_i\}_{i \in \mathbb{N}} \subset \mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n)$ が d_2^W について $\mu \in \mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n)$ に収束するための必要十分条件は, μ_i が μ に弱収束し, かつ

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \limsup_{i \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}^n \setminus B(x, R)} \|x - y\|^2 d\mu_i(y) = 0$$

がある (よつて全ての) $x \in \mathbb{R}^n$ について成り立つことである ($B(x, R) := \{z \in \mathbb{R}^n \mid \|x - z\| < R\}$). Wasserstein 距離 d_2^W は底空間の距離の情報を持っているため, 全変動などとは全く違うものであることを注意しておく. 例えば, μ と ν の台が共通部分を持たないとき $\mu - \nu$ の全変動は 2 だが, 台が十分小さくかつ互いに近ければ, Wasserstein 距離は小さい. また, 2 点 $x, y \in \mathbb{R}^n$ のディラック測度 δ_x, δ_y の間の Wasserstein 空間での最短線は, $\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n)$ での凸結合 $(1-t)\delta_x + t\delta_y$ ($t \in [0, 1]$) ではなく, \mathbb{R}^n での凸結合 (最短線) 上のディラック測度 $\delta_{(1-t)x+ty}$ である.

2 Brenier の定理とカントロヴィチ双対性

Brenier [Br] は, 前節で述べた \mathbb{R}^n 上の距離の 2 乗をコストとするモンジュ・カントロヴィチの問題の最適輸送が, ある凸関数の勾配ベクトル場で記述できることを示した. これは示唆に富んだ非常に深い定理である.

定理 2.1 (Brenier [Br]). 確率測度 $\mu, \nu \in \mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n)$ をとり, μ はルベーグ測度に対して絶対連続とする. このとき, ある \mathbb{R}^n 上の凸関数 f で写像 $\Phi := \nabla f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ が μ から ν への一意な最適輸送を与えるものが存在する. つまり, Φ は $\Phi_{\#}\mu = \nu$ かつ

$$\int_{\mathbb{R}^n} \|x - \Phi(x)\|^2 d\mu(x) = d_2^W(\mu, \nu)^2 \quad (2.1)$$

を満たす.

式 (2.1) より, 写像 Φ から得られるカップリング $\pi = (\text{Id}_{\mathbb{R}^n} \times \Phi)_{\#}\mu$ は μ と ν の最適カップリングを与える. 換言すると, カントロヴィチの問題の解 π の台はある写像 Φ のグラフ上に集中し, 従って同時にモンジュの問題の解を与える. 特に, 最適輸送は 1 点のマスを複数の場所に分割して運ぶことはない. また, 最適輸送は常に直線に沿って行われる. 更に, アレクサンドロフの定理により凸関数 f は殆ど至るところ 2 階微分可能であり, 従って写像 Φ は殆ど至るところ 1 階微分可能である.

定理 2.1 の証明の粗筋を述べる. まず, \mathbb{R}^n 上のリプシッツ関数の組 (φ, ψ) で

$$\varphi(x) + \psi(y) \leq \frac{\|x - y\|^2}{2}$$

を全ての $x, y \in \mathbb{R}^n$ で満たすもののなす集合を Lip とおく. このとき, 明らかに

$$\sup_{(\varphi, \psi) \in \text{Lip}} \left\{ \int_{\mathbb{R}^n} \varphi d\mu + \int_{\mathbb{R}^n} \psi d\nu \right\} \leq \inf_{\pi \in \Pi(\mu, \nu)} \int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} \frac{\|x - y\|^2}{2} d\pi(x, y) \quad (2.2)$$

が成り立つ. 左辺の上限を実現する (φ, ψ) を取ると, Lip の定義より,

$$\psi(y) = \inf_{x \in \mathbb{R}^n} \left\{ \frac{\|x - y\|^2}{2} - \varphi(x) \right\}, \quad \varphi(x) = \inf_{y \in \mathbb{R}^n} \left\{ \frac{\|x - y\|^2}{2} - \psi(y) \right\}$$

を満たす. 等号 $\varphi(x) + \psi(y) = \|x - y\|^2/2$ が成立する (x, y) で x について微分して (不等号 \leq は常に成り立つことに注意), $\nabla\varphi(x) = x - y$ を得る. よって

$$\Phi(x) := x - \nabla\varphi(x) = \exp_x(-\nabla\varphi(x))$$

として $\pi := (\text{Id}_{\mathbb{R}^n} \times \Phi)_{\#}\mu$ とおくと, π について殆ど全ての (x, y) で $\varphi(x) + \psi(y) = \|x - y\|^2/2$ が成り立つ. また, (φ, ψ) が (2.2) の上限を与えることより, 任意の台がコンパクトな C^1 関数 $h \in C_c^1(\mathbb{R}^n)$ に対し,

$$\begin{aligned} 0 &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \left[\left\{ \int_{\mathbb{R}^n} \{\varphi + \varepsilon(h \circ \Phi)\} d\mu + \int_{\mathbb{R}^n} (\psi - \varepsilon h) d\nu \right\} - \left\{ \int_{\mathbb{R}^n} \varphi d\mu + \int_{\mathbb{R}^n} \psi d\nu \right\} \right] \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} h \circ \Phi d\mu - \int_{\mathbb{R}^n} h d\nu. \end{aligned}$$

よって $\Phi_{\#}\mu = \nu$ でなければならない. 従って, この (φ, ψ) と π により (2.2) で等号が成り立ち, これを**カントロヴィチ双対性**という. $\Phi(x) = \nabla(\|\cdot\|^2/2 - \varphi)(x)$ より求める関数 f は $f = \|\cdot\|^2/2 - \varphi$ で与えられ, ψ を用いた表示 $f(x) = \sup_{y \in \mathbb{R}^n} \{\psi(y) - \|y\|^2/2 + \langle x, y \rangle\}$ より f は確かに凸関数である. \square

3 Otto の形式的リーマン構造

Wasserstein 空間 $(\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n), d_2^W)$ は無限次元であるため, 通常の意味でのリーマン構造は定義できない. しかし, 前節の最適輸送の記述を用いると, 幾分形式的ではあるがある種のリーマン構造を導入できる.

定理 2.1 より確率測度 μ, ν の間の最適輸送はある凸関数 f を用いて $\Phi = \nabla f$ によって与えられ, また $\varphi = \|\cdot\|^2/2 - f$ として $t \in [0, 1]$ に対し $\Phi_t(x) = \exp_x(-t\nabla\varphi(x))$ とおくと, $(\mu_t = (\Phi_t)_{\#}\mu)_{t \in [0, 1]}$ は $\mu_0 = \mu$ から $\mu_1 = \nu$ への Wasserstein 空間内の最短測地線を与える. すると, f が凸であるという条件は $\|\cdot\|^2/2 - \varphi$

が凸であるという条件になる. 逆に, $\|\cdot\|^2/2 - \varphi$ が凸関数であるような関数 φ と任意の $\mu \in \mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n)$ に対し, $\Phi = \exp(-\nabla\varphi)$ は μ から $\Phi_{\#}\mu$ への最適輸送を与える. 任意の C^2 関数 ϕ に対し, $\|\cdot\|^2/2 + \varepsilon\phi$ は $\varepsilon > 0$ が十分小さければ凸なので, $\mu_t = [\exp(t\nabla\phi)]_{\#}\mu$ は $t \in [0, \varepsilon]$ の範囲では最短測地線である. 従って, この $\nabla\phi$ を Wasserstein 空間の接ベクトルと考えることができる.

以上の考察より, 次のように $(\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n), d_2^W)$ のリーマン構造を定義するのは自然である ([Ot] 参照): $\mu \in \mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n)$ での接空間を

$$T_{\mu}\mathcal{P}_2 := \overline{\{\nabla\varphi \mid \varphi \in C_c^{\infty}(\mathbb{R}^n)\}};$$

その内積を, $\varphi, \psi \in C_c^{\infty}(\mathbb{R}^n)$ に対し,

$$\langle \nabla\varphi, \nabla\psi \rangle_{\mu} := \int_{\mathbb{R}^n} \langle \nabla\varphi, \nabla\psi \rangle d\mu.$$

ここで $T_{\mu}\mathcal{P}_2$ の定義の閉包は内積 $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mu}$ から定まるノルムについてとり, 内積は $\{\nabla\varphi \mid \varphi \in C_c^{\infty}(\mathbb{R}^n)\}$ から $T_{\mu}\mathcal{P}_2$ に連続的に拡張される. $C_c^{\infty}(\mathbb{R}^n)$ は \mathbb{R}^n 上の台がコンパクトな C^{∞} 関数全体のなす集合をあらわす. 集合 $\{\nabla\varphi \mid \varphi \in C_c^{\infty}(\mathbb{R}^n)\}$ は μ によらないため, このリーマン構造は等質的であるように見えるかもしれないが, 内積が基点 μ によることから, 実際には複雑な構造を持っている.

Otto はこのリーマン構造から導かれる距離が Wasserstein 距離と一致し, 更に断面曲率が非負であることを示した. ここでは詳しく述べないが, この非負曲率性は距離空間の幾何学の言葉を用いて説明することができる (すなわち, $(\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n), d_2^W)$ は非負曲率アレクサンドロフ空間になる, [LV1], [St1] 参照).

4 Wasserstein 空間内の勾配流としての熱流

ある種の発展方程式の解は Wasserstein 空間上の関数の勾配流として実現できることが知られており, それが偏微分方程式論で最適輸送理論が活発に研究されている理由のひとつである. 典型的な例は相対エントロピーの勾配流が熱流と一致することであり, これはユークリッド空間の場合に Jordan-Kinderlehrer-Otto [JKO] によって示された. ここで, $\mu \in \mathcal{P}(\mathbb{R}^n)$ のルベーグ測度 L についての相対エントロピーは, L に対して絶対連続な $\mu = \rho L$ については

$$\text{Ent}_L(\mu) := \int_{\mathbb{R}^n} \rho \log \rho dL, \quad (4.1)$$

それ以外の μ については $\text{Ent}_L(\mu) := \infty$ と定義される. [JKO] では, 勾配流の方程式 ' $\partial(\rho L)/\partial t = -\nabla \text{Ent}_L(\rho L)$ ' の解 ρ は熱方程式 $\partial\rho/\partial t = \Delta\rho$ を解くということが示された. 相対エントロピーは統計力学のボルツマンエントロピーとは符号が逆であることに注意する. 従って, μ が平らである方が相対エントロピーは小さく, 特に μ が有界集合 $A \subset \mathbb{R}^n$ 上の一様分布 $\mu = L(A)^{-1}L|_A$ のときは, $\text{Ent}_L(\mu) = -\log L(A)$ となる. 熱流は分布を平らにしていく流れであり, それが相対エントロピーの勾配流となることは直観的な理解と一致する. 同様の議論でポテンシャル $V \in C_c^{\infty}(\mathbb{R}^n)$ 付きの場合も扱うことができ, そのとき自由エネルギー $\mu \mapsto \text{Ent}_L(\mu) + \int_{\mathbb{R}^n} V d\mu$ の勾配流は Fokker-Planck 方程式 $\partial\rho/\partial t = \Delta\rho + \text{div}(\rho\nabla V)$ の解を与える.

熱流に関してより広く知られているのは, $L^2(\mathbb{R}^n)$ 内のディリクレエネルギーの勾配流が熱流と一致することであろう. このとき, ディリクレエネルギーは底空間に関わらず凸関数であるが, 相対エントロピーの凸性は底空間の幾何学的な構造, 具体的にはリッチ曲率の下からの評価を反映する.

5 エントロピーの凸性と熱流の非拡大性

Brenier の定理を用いると, 相対エントロピー (4.1) が Wasserstein 空間上の凸関数であることがわかる. つまり, 任意の $(\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n), d_2^W)$ 内の最短測地線 $\alpha: [0, 1] \rightarrow \mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n)$ と $t \in (0, 1)$ に対し,

$$\text{Ent}_L(\alpha(t)) \leq (1-t)\text{Ent}_L(\alpha(0)) + t\text{Ent}_L(\alpha(1)) \quad (5.1)$$

が成り立つ。

以下, (5.1) の証明の概略を述べる. $\text{Ent}_{\mathbb{L}}(\alpha(0)) = \infty$ または $\text{Ent}_{\mathbb{L}}(\alpha(1)) = \infty$ のときはこの式は自明なため, $\text{Ent}_{\mathbb{L}}(\alpha(0)), \text{Ent}_{\mathbb{L}}(\alpha(1)) < \infty$, 特に $\alpha(0), \alpha(1)$ は共に絶対連続としてよい. 定理 2.1 より, ある凸関数 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ が存在し,

$$\alpha(t) = [(1-t)\text{Id}_{\mathbb{R}^n} + t\nabla f]_{\#}\alpha(0)$$

が成り立つ. $\Phi_t := (1-t)\text{Id}_{\mathbb{R}^n} + t\nabla f$, $\alpha(t) = \rho_t \mathbb{L}$ とおくと, $\alpha(t) = (\Phi_t)_{\#}\alpha(0)$ よりモンジュ・アンペール型の等式

$$\rho_0(x) = [\det D\Phi_t(x)] \cdot \rho_t(\Phi_t(x))$$

が $\alpha(0)$ について殆ど全ての x で成り立つ. これを変数変換公式と合わせて, 次式を得る.

$$\begin{aligned} \text{Ent}_{\mathbb{L}}(\alpha(t)) &= \int_{\mathbb{R}^n} \rho_t \log \rho_t d\mathbb{L} = \int_{\mathbb{R}^n} \rho_t \circ \Phi_t \log(\rho_t \circ \Phi_t) \det D\Phi_t d\mathbb{L} \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} \rho_0 \log \frac{\rho_0}{\det D\Phi_t} d\mathbb{L} \\ &= \text{Ent}_{\mathbb{L}}(\alpha(0)) - \int_{\mathbb{R}^n} \rho_0 \log(\det D\Phi_t) d\mathbb{L}. \end{aligned}$$

ここで, $D\Phi_t = (1-t)I_n + t\nabla^2 f$ は正定値対称行列 ($t=1$ では半正定値) なので, 対角化して算術平均・幾何平均の不等式を適用し,

$$(\det D\Phi_t)^{1/n} \geq (1-t) + t(\det D\Phi_1)^{1/n}.$$

対数関数の凹性より,

$$\log(\det D\Phi_t) \geq n \log((1-t) + t(\det D\Phi_1)^{1/n}) \geq t \log(\det D\Phi_1).$$

よって,

$$\begin{aligned} \text{Ent}_{\mathbb{L}}(\alpha(t)) &\leq (1-t)\text{Ent}_{\mathbb{L}}(\alpha(0)) + t \left\{ \text{Ent}_{\mathbb{L}}(\alpha(0)) - \int_{\mathbb{R}^n} \rho_0 \log(\det D\Phi_1) d\mathbb{L} \right\} \\ &= (1-t)\text{Ent}_{\mathbb{L}}(\alpha(0)) + t\text{Ent}_{\mathbb{L}}(\alpha(1)). \end{aligned}$$

□

前節で述べたように, 相対エントロピーの勾配流は熱流である. 従って, 勾配流の一般論により, 相対エントロピーの凸性は良く知られている熱流の非拡大性の別証明を与える. すなわち, ξ_t, ζ_t を $\xi_t \mathbb{L}, \zeta_t \mathbb{L} \in \mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n)$ なる熱流とすると, 全ての $t > 0$ で

$$d_2^W(\xi_t \mathbb{L}, \zeta_t \mathbb{L}) \leq d_2^W(\xi_0 \mathbb{L}, \zeta_0 \mathbb{L})$$

が成り立つ. 但し, 勾配流の非拡大性の理論は現在までのところ何らかの意味でリーマン構造を持つ (角度, 内積が意味を持つ) 空間でしか確立されておらず, 従って前々節で導入した Otto の幾何構造が (フィンスラー構造ではなく) 真にリーマン構造であることが本質的である.

6 エントロピーの凸性と関数不等式

前節でルベーグ測度についての相対エントロピーの凸性 (5.1) を示したが, より一般に $\psi \in C^2(\mathbb{R}^n)$ が $\text{Hess } \psi_x(v, v) \geq K\|v\|^2$ をある定数 $K \in \mathbb{R}$ と全ての $x, v \in \mathbb{R}^n$ で満たすとき, 重み付きの測度 $m = e^{-\psi} \mathbb{L}$ についての相対エントロピー $\text{Ent}_m(\rho m) := \int_{\mathbb{R}^n} \rho \log \rho dm$ は K 凸性

$$\text{Ent}_m(\alpha(t)) \leq (1-t)\text{Ent}_m(\alpha(0)) + t\text{Ent}_m(\alpha(1)) - \frac{K}{2}(1-t)t d_2^W(\alpha(0), \alpha(1))^2 \quad (6.1)$$

を満たすことが知られている。典型的な例はガウス空間 $(\mathbb{R}^n, e^{-\|x\|^2/2}L(dx))$ であり、これは $K = 1$ で (6.1) を満たす。

K が正のときには、 $m(\mathbb{R}^n) < \infty$ となるので $m(\mathbb{R}^n) = 1$ となるように m を正規化 ($m(\mathbb{R}^n)^{-1}$ 倍) すると、不等式 (6.1) は **Talagrand 不等式**

$$\text{Ent}_m(\mu) \geq \frac{K}{2} d_2^W(m, \mu)^2 \quad (6.2)$$

($\mu \in \mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n)$) ; **対数ソボレフ不等式**

$$\text{Ent}_m(f^2 m) \leq \frac{2}{K} \int_{\mathbb{R}^n} |\nabla f|^2 dm \quad (6.3)$$

($f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ は $\int_{\mathbb{R}^n} f^2 dm = 1$ なるリブシツ関数) ; **大域ポアンカレ不等式**

$$\int_{\mathbb{R}^n} h^2 dm \leq \frac{1}{K} \int_{\mathbb{R}^n} |\nabla h|^2 dm \quad (6.4)$$

($h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ は $\int_{\mathbb{R}^n} h dm = 0$ なるリブシツ関数) の一連の関数不等式を導き ([OV], [LV1] 参照), 更に (6.3) を用いて **測度の集中度**

$$\sup \{1 - m(B(A, r)) \mid A \subset \mathbb{R}^n, m(A) \geq 1/2\} \leq e^{-Kr^2/8}$$

($r > 0$, $B(A, r) := \{y \in \mathbb{R}^n \mid \inf_{x \in A} \|x - y\| < r\}$) も得られる。

関数不等式の証明は凸関数の簡単な性質と相対エントロピーの微分などの計算による。以下、簡単にアイデアを述べる。まず (6.2) は、相対エントロピーが m で最小値 $\text{Ent}_m(m) = 0$ を取ることに注意して、 m から μ への最短測地線に (6.1) を適用し

$$0 \leq t \text{Ent}_m(\mu) - \frac{K}{2} (1-t) t d_2^W(m, \mu)^2$$

となるので、この両辺を t で割り、 $t \rightarrow 0$ とすればよい。

次に (6.3) についても、 m から $\mu := f^2 m$ への最短測地線 $\alpha : [0, 1] \rightarrow \mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n)$ を考え、 $\phi(t) := \text{Ent}_m(\alpha(t))$ と置く。(6.1) と $\phi(0) = 0$ より

$$\phi(1) \leq \frac{\phi(1) - \phi(t)}{1-t} - \frac{K}{2} t d_2^W(m, \mu)^2$$

であり、 $t \rightarrow 1$ として $\phi(1) \leq \phi'(1) - (K/2) d_2^W(m, \mu)^2$ を得るが、ここで更に計算によって

$$\phi'(1) \leq 2d_2^W(m, \mu) \cdot \sqrt{\int_{\mathbb{R}^n} |\nabla f|^2 dm}$$

が成り立つので、

$$\text{Ent}_m(f^2 m) = \phi(1) \leq 2d_2^W(m, \mu) \cdot \sqrt{\int_{\mathbb{R}^n} |\nabla f|^2 dm} - \frac{K}{2} d_2^W(m, \mu)^2 \leq \frac{2}{K} \int_{\mathbb{R}^n} |\nabla f|^2 dm.$$

最後に (6.4) を示すには、 $f = \sqrt{1 + \varepsilon h}$ に (6.3) を適用して得た

$$\int_{\mathbb{R}^n} (1 + \varepsilon h) \log(1 + \varepsilon h) dm \leq \frac{1}{2K} \int_{\mathbb{R}^n} \frac{\varepsilon^2 |\nabla h|^2}{1 + \varepsilon h} dm$$

の左辺から $0 = \int_{\mathbb{R}^n} \varepsilon h dm$ を引き、両辺を ε^2 で割って、

$$\left. \frac{d^2}{dt^2} \right|_{t=0} \{(1+t) \log(1+t) - t\} = 1$$

に注意して

$$\frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^n} h^2 dm = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\mathbb{R}^n} h^2 \frac{(1 + \varepsilon h) \log(1 + \varepsilon h) - \varepsilon h}{(\varepsilon h)^2} dm \leq \frac{1}{2K} \int_{\mathbb{R}^n} |\nabla h|^2 dm.$$

□

7 曲がった空間の中の最適輸送

これまでに述べてきたことは全て、適切に拡張された概念を用いることで、リーマン多様体、フィンスラー多様体や更に一般の測度距離空間に拡張できる。

(M, g) をリーマン多様体とすると、リーマン計量 g が定める距離 d の 2 乗をコストとする最適輸送問題の解は、定理 2.1 のように、ある関数 $\varphi: M \rightarrow \mathbb{R}$ の勾配ベクトル場と指数写像の合成 $\exp(\nabla\varphi)$ で与えられる ([Mc]). ここで φ は $(d^2/2)$ 凹関数と呼ばれるものであり、殆ど至るところ 2 回微分可能である。

この最適輸送に沿って、 g から定まる体積測度 vol_g についての相対エントロピーの凸性を考えると、リーマン多様体ではそれはリッチ曲率の非負性と同値である ([CMS], [vRS]). より一般に、重みつきリーマン多様体 $(M, g, e^{-\psi} \text{vol}_g)$ の $m = e^{-\psi} \text{vol}_g$ についての相対エントロピーの K 凸性は、

$$\text{Ric}(v) + \text{Hess } \psi(v, v) \geq K$$

が全ての単位接ベクトル $v \in TM$ で成り立つことと同値である ([St1], [LV1]). この $\text{Ric} + \text{Hess } \psi$ は **Bakry-Émery テンソル** と呼ばれる解析や確率論で重要な量であり、幾何学的には ‘無限次元リッチ曲率’ と呼ぶべきものである。更に一般に、 $N \in (\dim M, \infty)$ について、‘ N 次元リッチ曲率’ の下限

$$\text{Ric}(v) + \text{Hess } \psi(v, v) - \frac{\langle \nabla \psi, v \rangle^2}{N - \dim M} \geq K$$

も Wasserstein 空間内のある種のエントロピーの凸性で特徴づけることができる ([St2], [LV2]).

これらの同値性より、多様体とは限らない一般の測度距離空間に対しても、エントロピーの凸性をリッチ曲率の下限の ‘定義’ として採用することができる ([LV1], [LV2], [St1], [St2], [Vi2]). このエントロピーの凸性は **曲率次元条件** と呼ばれ、測度つき Gromov-Hausdorff 収束で保たれる。また、曲率次元条件から多くの幾何学的・解析的性質 (前節の関数不等式を含む) が導かれることが明らかになっている。

参考文献

- [Br] Y. Brenier, *Polar factorization and monotone rearrangement of vector-valued functions*, Comm. Pure Appl. Math. **44** (1991), 375–417.
- [CMS] D. Cordero-Erausquin, R. J. McCann and M. Schmuckenschläger, *A Riemannian interpolation inequality à la Borell, Brascamp and Lieb*, Invent. Math. **146** (2001), 219–257.
- [JKO] R. Jordan, D. Kinderlehrer and F. Otto, *The variational formulation of the Fokker-Planck equation*, SIAM J. Math. Anal. **29** (1998), 1–17.
- [LV1] J. Lott and C. Villani, *Ricci curvature for metric-measure spaces via optimal transport*, Ann. of Math. **169** (2009), 903–991.
- [LV2] J. Lott and C. Villani, *Weak curvature conditions and functional inequalities*, J. Funct. Anal. **245** (2007), 311–333.
- [Mc] R. J. McCann, *Polar factorization of maps on Riemannian manifolds*, Geom. Funct. Anal. **11** (2001), 589–608.
- [Ot] F. Otto, *The geometry of dissipative evolution equation: the porous medium equation*, Comm. Partial Differential Equations **26** (2001), 101–174.
- [OV] F. Otto and C. Villani, *Generalization of an inequality by Talagrand and links with the logarithmic Sobolev inequality*, J. Funct. Anal. **173** (2000), 361–400.
- [vRS] M.-K. von Renesse and K.-T. Sturm, *Transport inequalities, gradient estimates, entropy and Ricci curvature*, Comm. Pure Appl. Math. **58** (2005), 1–18.

- [St1] K.-T. Sturm, *On the geometry of metric measure spaces*, Acta Math. **196** (2006), 65–131.
- [St2] K.-T. Sturm, *On the geometry of metric measure spaces. II*, Acta Math. **196** (2006), 133–177.
- [Vi1] C. Villani, *Topics in optimal transportation*, American Mathematical Society, Providence, RI, 2003.
- [Vi2] C. Villani, *Optimal transport, old and new*, Springer-Verlag, Berlin, 2009.
- [太田] 確率測度の空間の幾何学, to appear in 数学.