モンジュの最適輸送問題をめぐる話題について

基礎工学研究科 システム創成専攻 社会システム数理領域

教授 會田 茂樹

1. はじめに

この講演のテーマ、輸送問題の源はフランスの数学者・工学者 Gaspard Monge(ガスパール・モンジュ) が 1781 年にパリ王立科学アカデミーに提出した次の問題にあると言えます.

[問題 0] (Monge の問題) 砂山をそれと同じ体積の穴に移動させる. 移動のさい,その距離に依存したコストがかかるとき、総輸送費を最小にする移動のさせ方はどんなものか?

もちろん、現実的には砂を動かし、穴のところに持って来て手を離せば重力に従って下に落ちてしまい、穴は下の方から埋まって行ってしまいます。ここでは、そのようなことは起こらず、持ってきたところに留まって(したがって空中に浮いているような状態)いるとし、空間をどんどん埋め尽くしていくような状況を考えることにしましょう。上の形では、数学の問題としてはっきりと定式化されていませんが、それは後で述べます。

この問題は大変な難問で、Sudakov が 1979 年に最適な移動のさせ方の存在証明を発表しましたが、それには一部誤りがあり、修復された証明は 2000 年に Ambrosio により発表されています。また、別の証明が何人かの人により与えられましたが (コストが移動距離のどのような関数かで問題の難しさ、性質が変わります)、それは 1980 年代後半から 90 年代後半にかけてでした。

この講演ではこの問題に関連した数学のお話しをしたいと思います.

2. ヒッチコック型の輸送問題

[問題 $\mathbf{0}$] は解決に 200 年以上要した問題ですが、次は中学校の数学の範囲で初等的に解ける問題です。

[問題 1]

工場 1, 工場 2 がありそれぞれ製品を 100 個、200 個生産する. それらを町 1 に 75 個, 町 2 に 225 個輸送したい. 各工場から各町への 1 個あたりの輸送費用は次の表のようにかかる. 輸送費用を最小にするには、どのように輸送すればよいか?

	町 1	町 2
工場1	2 円	6円
工場 2	1円	4 円

個数や費用設定が非現実的かもしれませんが、簡単のためなので、ご容赦下され、工場2の方がいずれの町への輸送コストも小さいので、もし工場2で製品を300個製造可能なら明らかに工場2から送るのが安くすみます。しかし、工場2の生産量に制限があるから問題になるわけです。これ

は次のように解けます.工場 1 から町 1 へ x 個,工場 2 から町 1 へ y 個輸送するものとします.このとき,コストは 2x+6(100-x)+y+4(200-y)=-4x-3y+1400 円かかります.x+y=75 だからコストは -x+1175 円となります.これを $0 \le x \le 75$ の条件の下で最小になるように (x,y) を決定すれば良い.これは明らかに x=75, y=0 のときとなります.

工場の個数, 町の個数, 各工場から各町への輸送コストも色々な場合を考え, 一般的には次のように定式化されます.

[問題 2] 工場がm 個、町がn 個あるとし,工場i から町j への単位あたりの輸送コストは c_{ij} とする.工場i の生産量は μ_i ,町j の必要量が ν_j で

$$\sum_{i=1}^{m} \mu_i = \sum_{j=1}^{n} \nu_j \tag{1}$$

とする.工場iから町jへの輸送量を x_{ij} とすると輸送コストは $C(X)=\sum_{j=1}^n\sum_{i=1}^mc_{ij}x_{ij}$ となる.C(X)を

$$\sum_{i=1}^{n} x_{ij} = \mu_i, \qquad \sum_{i=1}^{m} x_{ij} = \nu_j \qquad x_{ij} \ge 0 \qquad (1 \le i \le m, 1 \le j \le n)$$
 (2)

の条件の下で最小とする X を求めよ.

C(X) と書いたのは輸送コストが輸送計画を表す行列 $X=(x_{ij})(i$ 行 j 列の成分が x_{ij} である行列) に依存するからです.条件 (2) をみたす行列 X を実行可能解,その中でコストを最小にするものを最適解と言います.

これは Frank Hitchcock(フランク ヒッチコック) が 1941 年に定式化した問題で,線形計画法の問題の一つです. Monge の問題とは違い, Hitchcock 型の輸送問題は必ず最適解を持つ事は難しくなくわかります. この時点で Monge の問題は未だ解かれてはいませんでしたが,現実への応用からこのような問題が考えられるのは自然な事ですし, Monge が考えたということを知らずにこの問題に思い至っても不思議ではありません.

実際、線形計画法の開拓者の一人 $Alan\ Hoffman\$ は c_{ij} が条件

• $1 \leq i < r \leq m, 1 \leq j < s \leq n$ をみたすすべての i, r, j, s について $c_{ij} + c_{rs} \leq c_{is} + c_{rj}$

をみたすとき,北西隅ルールで実行可能解を作ればそれが最適解になることを見出しましたが,この性質の重要性は Monge がすでに気づいていたのです (したがって,価格行列 $C=(c_{ij})$ の Monge 性と言います).

北西隅ルールとは

- 1. 工場1から可能な限りの量を町1に必要な範囲で送る.
- 2. まだ工場 1 に残量があれば町 2 が必要としている範囲で送る.それでもなお工場 1 に残量があれば町 3 へ送る.これを繰り返し,工場 1 の残量が 0 になるまで続ける.

3. 工場 1 から出荷した製品だけではナンバー i 以後の町の必要量が不足していれば,次は工場 2 から町 i へ可能な限り配送し,以下同様な方法で配送する.

のようにして配送プランを作ることを言います.ちょうど行列の北西の隅 (左上方) から配送量が決まっていくので,この名前があります.なお,問題 1 の価格行列は Monge 性をみたすことに注意して下さい.次に Monge の問題をもう少し正確に定式化してみましょう.

3. Monge の問題の定式化

我々の生活している空間は縦,横,高さの3つの実数の組み (x_1,x_2,x_3) で表されます.これを3次元ユークリッド空間と言い, \mathbb{R}^3 と表します.

[問題 ${\bf 0}$]' D_1 , D_2 は \mathbb{R}^3 の部分集合で同じ体積 1 をもつとする.位置 x の砂を位置 y に移動するのに要する価格は単位体積あたり c(x,y) だけかかるとする. D_1 から D_2 への写像 T で次の性質をもつものを考える.

- (1) T は上への一対一写像である.すなわち $x \neq x'$ ならば $T(x) \neq T(x')$,かつ D_1 の T による像 $T(D_1) = \{T(x) \mid x \in D_1\}$ は D_2 である.
- (2) D_1 の任意の部分集合 U に対してその像 T(U) と U の体積は同じである.

この条件の下で $C(T) = \int_{D_1} c(x,T(x)) dx$ を最小にする輸送写像 T を求めよ.

実は数学の問題としては (1) よりもう少し緩い条件の写像を考えますが簡単のため,このように述べています.最初のところで,全体積が 1 としていますが,全体積が 1 で無いときは全体積で割って 1 と考えておけばよいので,これは本質的ではありません.以下の議論で確率の言葉で書くための布石です.上の条件 (2) で体積が保存されるというのは砂のかたまりの形は変わるが,その体積は変わらないということを表します.また,位置 x の砂を輸送写像により T(x) に移すとその x を含む微小部分 Δx の移動には $c(x,T(x))|\Delta x|$ だけのコストがかかります. $|\Delta x|$ は Δx の体積を表します.これが足されるため,輸送写像が T のとき,輸送総費用は集合 D_1 上の積分 $\int_{D_1} c(x,T(x))dx$ で表されるわけです.この問題の難しさの一つは条件 (2) の非線形性にあります.実際 (2) の体積保存の条件は写像 T が微分可能性をもつ向きを保つ写像のとき,次の非線形方程式と同値になります.

$$\det(DT(x)) = 1. \tag{\$}$$

 $\det(DT(x))$ は写像の微分のヤコビ行列式です.(\clubsuit) をみたす写像の存在は自明な問題ではありません.このような困難さを解決するため,Leonid Kantorovich(レオニード カントロヴィッチ) は輸送写像の概念を拡張し,広い範囲で輸送計画を組むアイデアを出しました.実はその広い範囲では解の存在は,さほど困難無く証明できます.しかも価格関数 c(x,y) が良い条件を満たせば,その一般化された解が Monge の問題の解にもなっていることがわかります.なお,Kantorovich は関連する業績で 1975 年にノーベル経済学賞を受賞しています.

4. Monge-Kantorovich の問題

 ${
m Kantorovich}$ の定式化した問題を以下に書いてみましょう . ${
m \mathbb{R}}^3$ で問題を定式化していますが , ${
m Monge}$ の問題ともども一般の n 次元ユークリッド空間 (n 個の実数の組みからなる集合) で考えられる問題です . 高校の確率論で出て来ない用語が出て来ますので後で解説します (すでに高校の数学で出て来ない用語が出て来てしまっていますが) .

[問題 3] (Monge-Kantorovich 問題) μ, ν を \mathbb{R}^3 上の確率分布とする.

$$\Pi(\mu,\nu) = \left\{\pi \mid \pi \text{ は } \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \text{ 上の確率分布で } \mathbb{R}^3 \text{ の任意の集合 } A, B \text{ について} \right.$$
 $\pi(A \times \mathbb{R}^3) = \mu(A), \, \pi(\mathbb{R}^3 \times B) = \nu(B) \text{ をみたす} \right\}$ (\diamondsuit)
$$I(\pi) = \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} c(x,y) \pi(dxdy) \quad (\pi \in \Pi(\mu,\nu))$$
 (\spadesuit)

とおく $I(\pi)$ を最小にする π を求めよ .

 $\Pi(\mu,\nu)$ が空集合だと上の問題は意味がありませんが , $\Pi(\mu,\nu)\neq\emptyset$ です . $\Pi(\mu,\nu)$ が拡張された輸送計画と言えます . μ が \mathbb{R}^3 上の確率分布であるとは , \mathbb{R}^3 の各部分集合 A に対して確率 $\mu(A)$ を与えるものを言います . 代表的な物は離散型確率分布と密度関数をもつ連続型確率分布です .

● 離散型確率分布:

 \mathbb{R}^3 の中の m 個の点 P_1,\ldots,P_m があるとき P_i に確率 μ_i が与えられているような分布.ただし, $\sum_{i=1}^m \mu_i = 1$ を仮定します (全事象の確率は 1 でなければなりません).つまり集合 A の確率は A に含まれている点 P_i の確率 μ_i をすべて足したものとなります.

● 密度関数を持つ連続型確率分布:

f(x) を \mathbb{R}^3 上の負にならない関数で $\int_{\mathbb{R}^3} f(x) dx = 1$ とします. \mathbb{R}^3 の部分集合 A の確率が $\mu(A) = \int_A f(x) dx$ で与えられる確率分布を確率密度関数 f(x) を持つ連続型確率分布とよび, μ_f と書きます

$$\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi^3}} \exp\left(-\frac{|x|^2}{2}\right) \quad x = (x_1, x_2, x_3)$$

とおきます.ただし, $|x|^2=x_1^2+x_2^2+x_3^2$ です. $\mu_{
ho}$ は3次元標準正規分布と呼ばれます.

 $\Pi(\mu,\nu)$ の定義式(\diamondsuit)の中で $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$ の記号が出て来ていますが,これは \mathbb{R}^3 の要素を二つ並べてできる集合(積集合といいます)です.したがって(3+3=)6 次元ユークリッド空間と考えることもできます. $A \times \mathbb{R}^3 = \{(x,y) \mid x \in A, y \in \mathbb{R}^3\}$ などと定義されていることに注意して下さい.なぜこの問題が Monge の問題の拡張にあたるかを説明しましょう. μ,ν をそれぞれ D_1,D_2 に一様に分布する体積で与えられる確率分布とします. $T:D_1 \to D_2$ が [問題 $\mathbf{0}$]'をみたす写像とすると $A \times B$ $(A,B \subset \mathbb{R}^3)$ の確率が μ $(A \cap T^{-1}(B))$ で与えられる $\Pi(\mu,\nu)$ の元(π_T と書きましょう)が存在します.ただし, T^{-1} は T の逆写像です. $I(\pi_T) = \int_{D_1} c(x,T(x))dx$ が π_T の定義からわかります.つまり Monge の問題の実行可能解から Monge-Kantorovich 問題(=MK 問題と略記しま

す) の実行可能解を作ることができ、その輸送費用は一致します.したがって MK 問題の方がより 広い範囲で解を探していることになりますが,MK 問題の解が実は π_T の形で与えられる (Monge の問題の解である) こともあるのです.さて,ここで [問題 2] を見直してみます.

 \mathbb{R}^3 に m 個の点 P_1,\dots,P_m,n 個の点 Q_1,\dots,Q_n があるとします. \mathbb{R}^3 上の二つの離散型確率分布 $\mu,\,\nu$ をそれぞれ点 P_i の確率が μ_i $(1\leq i\leq m)$,点 Q_j の確率が ν_j $(1\leq j\leq n)$ となるようにとります $(\sum_{i=1}^m \mu_i = \sum_{j=1}^n \nu_j = 1$ を仮定します).すると $\Pi(\mu,\nu)$ の要素 π は $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$ の有限個の点集合 $\{(P_i,Q_j)\mid 1\leq i\leq m,1\leq j\leq n\}$ 上に確率をもつ離散型確率分布となります.具体的には $\pi_{ij}=\pi(\{(P_i,Q_j)\})\Big((P_i,Q_j)$ の確率 $\Big)$ とすると π_{ij} は

$$\sum_{i=1}^{n} \pi_{ij} = \mu_i \quad (1 \le i \le m), \qquad \sum_{i=1}^{m} \pi_{ij} = \nu_j \quad (1 \le j \le n)$$

をみたす確率となります.この条件は [問題 2] に出て来ている条件と同じです.また, P_i は工場i のある位置, Q_j は町j のある位置と考えて, c_{ij} を P_i と Q_j の間の距離とすれば価格行列が距離となる例を与えることになります.したがって,MK 問題は Hitchcock 型の最適輸送問題の拡張と見ることができるのです.逆に MK 問題を Hitchcock 型の最適輸送問題の極限ととらえ,Monge の問題を解くこともできます.ここらあたりは講演でお話します.

5. 輸送コスト不等式

(♠) で $c(x,y)=|x-y|^2$ のときを考えます. $I(\pi)$ の最小値の平方根を取った量は確率分布 μ と ν がどれだけ近いものかを表している量で W_2 -距離と呼ばれていて $W_2(\mu,\nu)$ と表されます.一方 \mathbb{R}^3 上で密度関数 f(x),g(x) を持つ連続型確率分布 μ_f,μ_g があるときそれらの相対エントロピーと呼ばれる量

$$H(\mu_f \mid \mu_g) = \int_{\mathbb{R}^3} f(x) \log \left(\frac{f(x)}{g(x)}\right) dx$$

も μ_f と μ_g の近さ,遠さを与える量と言えます (ただし,これは数学で定義される距離にはなりません.相対エントロピーは離散型確率分布のときも定義されます).相対エントロピーは情報理論で基本的なものですし, W_2 -距離は確率論の極限定理,近似定理で良く使われる距離です.この相対エントロピーと W_2 -距離の間の関係を与えているのが輸送コスト不等式と呼ばれているものです.例えば, $\mu_g=\mu_\rho$ (標準正規分布) のときすべての μ_f について

$$W_2(\mu_f, \mu_\rho)^2 \le 2H(\mu_f \mid \mu_\rho)$$

が成立します。この不等式は μ_ρ ではなくても密度関数がある条件をみたせば成立します。このことは、密度関数をもつ確率分布全体の集合をリーマン多様体 (リーマン計量という距離の素がある空間) と解釈し、その空間の上で、ある微分方程式を考えると自然に理解されます。現代数学ではこのように関数全体の集合の構造に着目するのは基本的なアイデアと言えます。講演の後半ではこれらの話題をお話します。