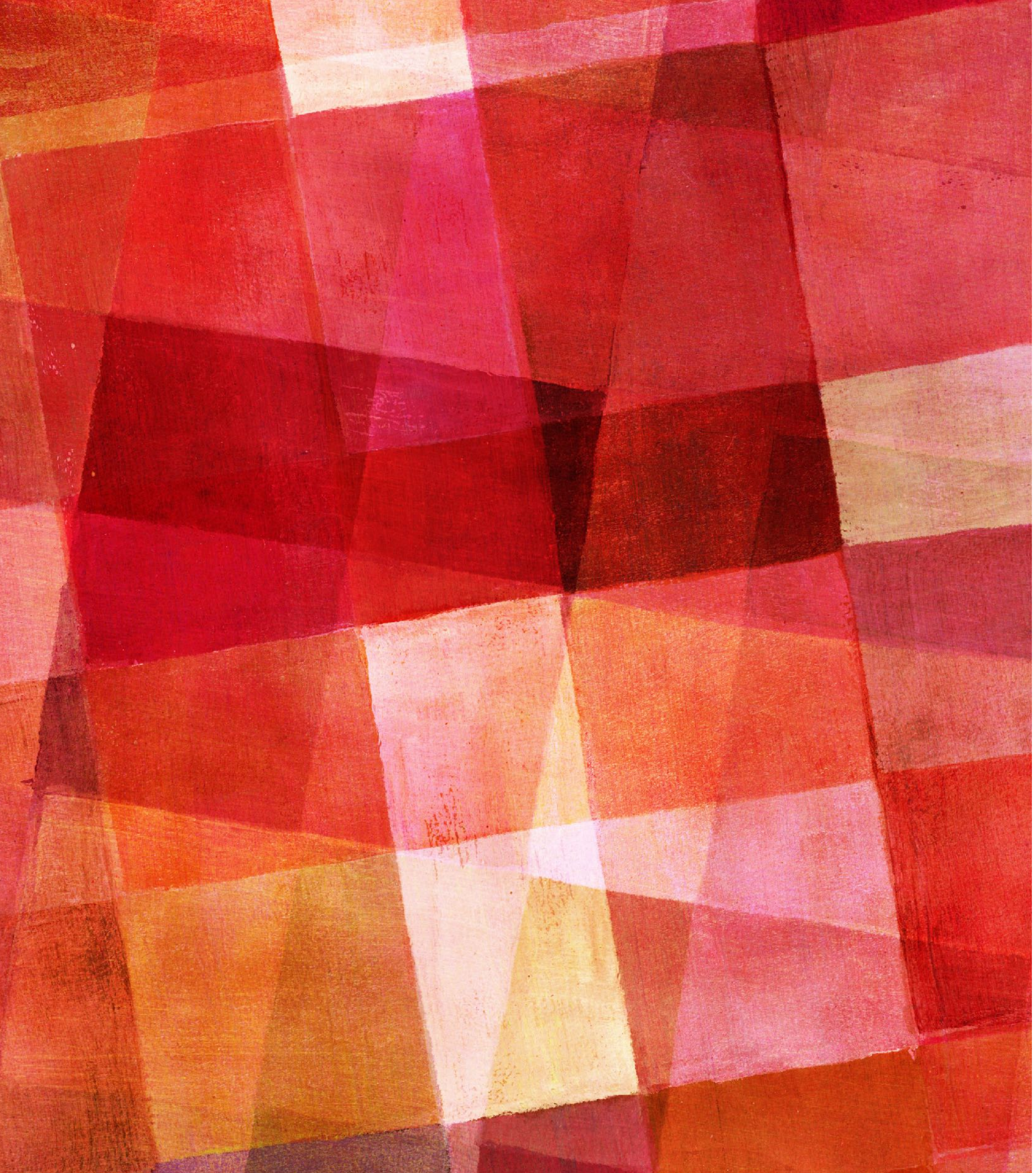
モノを効率よく輸送する話

数理の翼サロン2023

東京大学理学系研究科附属生物普遍性研究機構 伊藤 創祐

生物普遍性研究機構
Universal Biology Institute



自己紹介

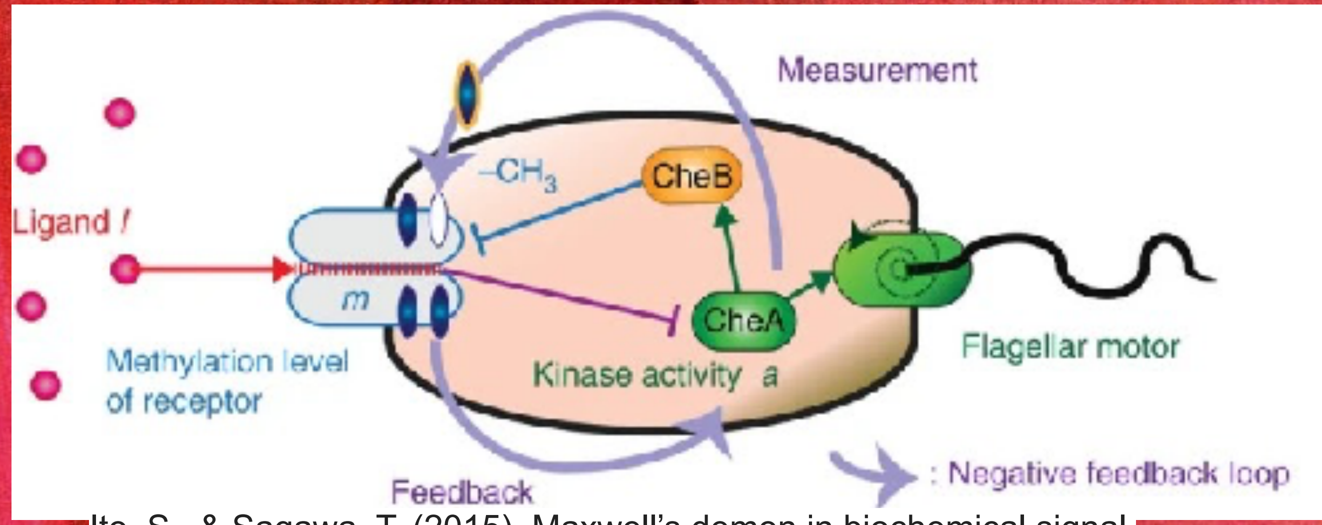
- 伊藤創祐 (いとうそうすけ)
  1987年 愛知県生まれ
  2006年 愛知県立旭丘高校卒業/東京大学(理科I類)進学。　なんやかんやあって…
  2023年現在 東京大学 准教授
  専門: 理論物理 (非平衡熱力学/生物物理/情報幾何)
- 趣味: ボードゲーム、読書(漫画)
- ボードゲームは最適な戦略をその場で考えるのが好き
  リソース管理、拡大再生産、ランダムネス
- 漫画は生物としての「限界」を超える話が好き (例えば、からくりサーカス、チェンソーマン…)

自己紹介

- 伊藤創祐 (いとうそうすけ)
  1987年 愛知県生まれ
  2006年 愛知県立旭丘高校卒業/東京大学(理科I類)進学。　なんやかんやあって…
  2023年現在 東京大学 准教授
  専門: 理論物理 (非平衡熱力学/生物物理/情報幾何)
- 趣味: ボードゲーム、読書(漫画)
- ボードゲームは最適な戦略をその場で考えるのが好き
  リソース管理、拡大再生産、ランダムネス
- 漫画は生物としての「限界」を超える話が好き (例えば、からくりサーカス、チェンソーマン…)

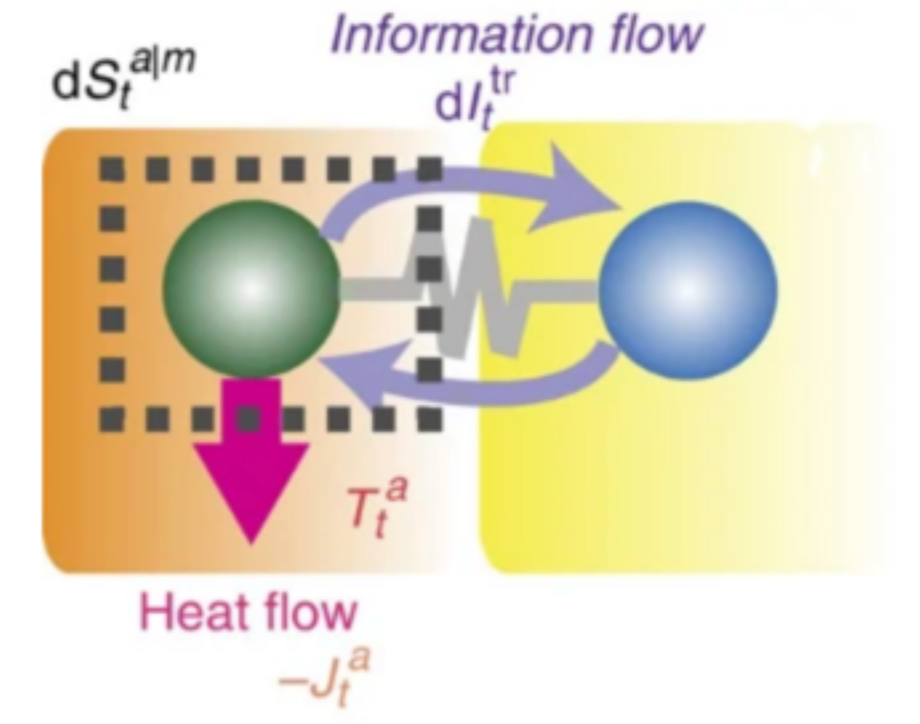
研究も…

① 生物の「限界」



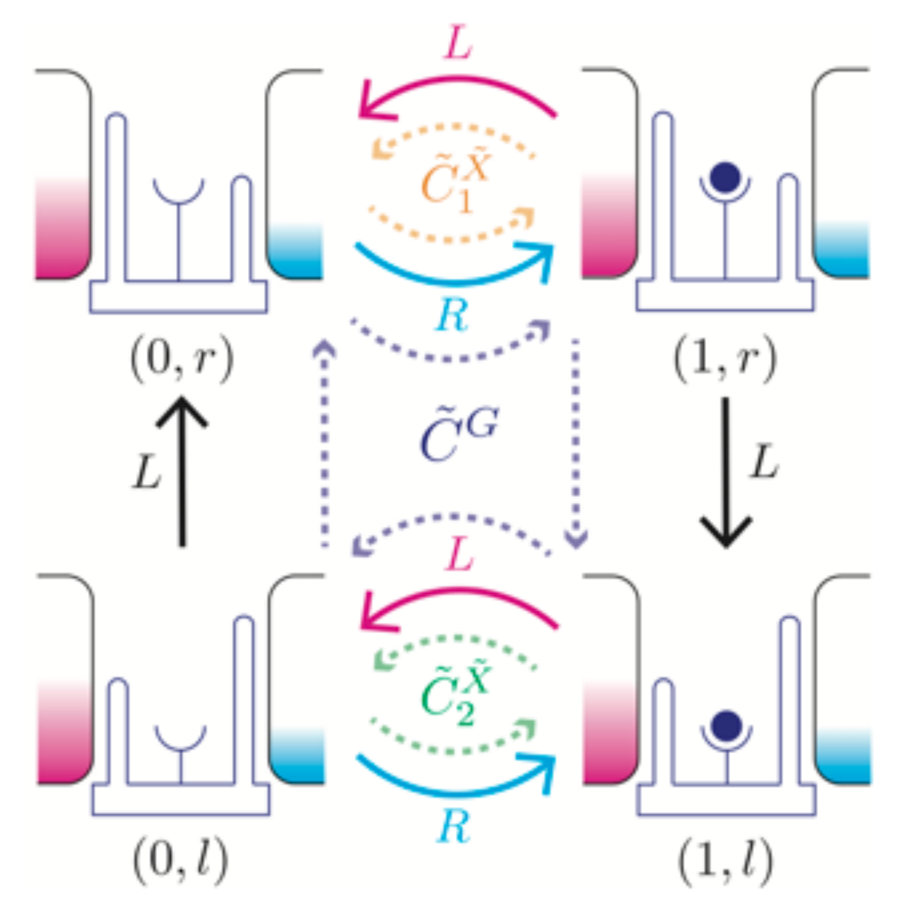
Ito, S., & Sagawa, T. (2015). Maxwell's demon in biochemical signal transduction with feedback loop. *Nature communications*, *6*(1), 7498.

② リソース管理



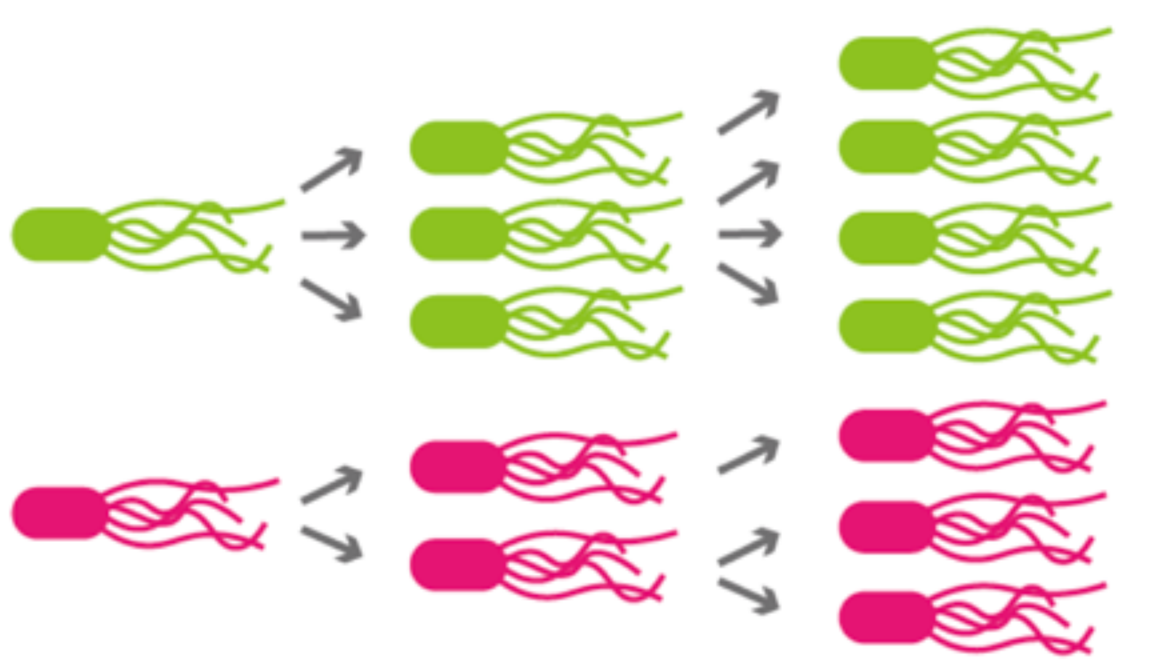
Ito, S., & Sagawa, T. (2015). Maxwell's demon in biochemical signal transduction with feedback loop. *Nature communications*, *6*(1), 7498.

③ ランダムネス



Yamamoto, S., Ito, S., Shiraishi, N., & Sagawa, T. (2016). Linear irreversible thermodynamics and Onsager reciprocity for information-driven engines. *Physical Review E*, *94*(5), 052121.

④ 拡大再生産

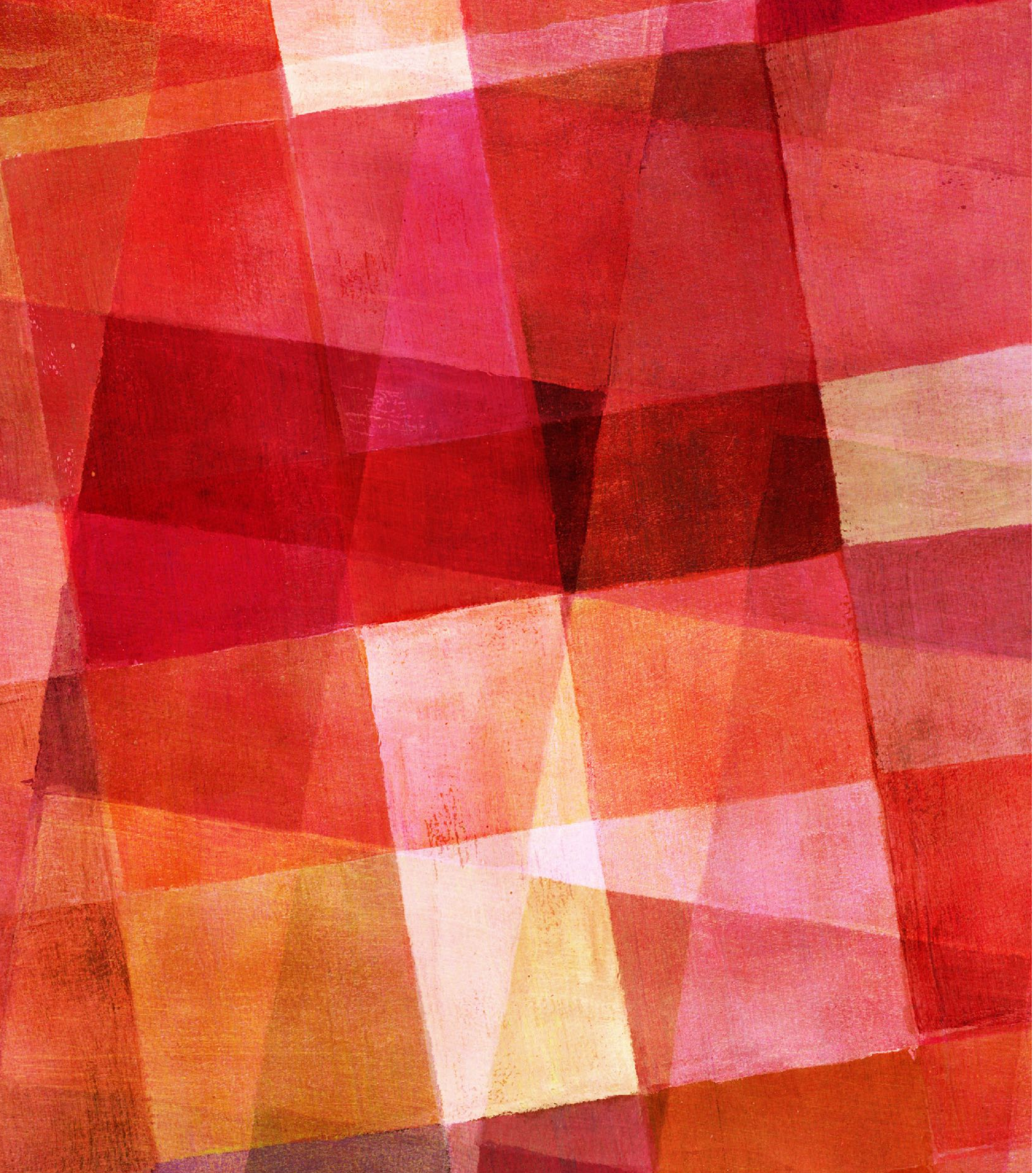


Hoshino, M., Nagayama, R., Yoshimura, K., Yamagishi, J. F., & Ito, S. (2022). A geometric speed limit for acceleration by natural selection in evolutionary processes. *arXiv preprint arXiv:2207.04640*.

に関わる物理法則を新たに作る！

自己紹介

- 伊藤創祐 (いとうそうすけ)
  1987年 愛知県生まれ
  2006年 愛知県立旭丘高校卒業/東京大学(理科I類)進学。　なんやかんやあって…
  2023年現在 東京大学 准教授
  専門: 理論物理 (非平衡熱力学/生物物理/情報幾何)
- 趣味: ボードゲーム、読書(漫画)
- ボードゲームは最適な戦略をその場で考えるのが好き
  リソース管理、拡大再生産、ランダムネス
- 漫画は生物としての「限界」を超える話が好き (例えば、からくりサーカス、チェンソーマン…)

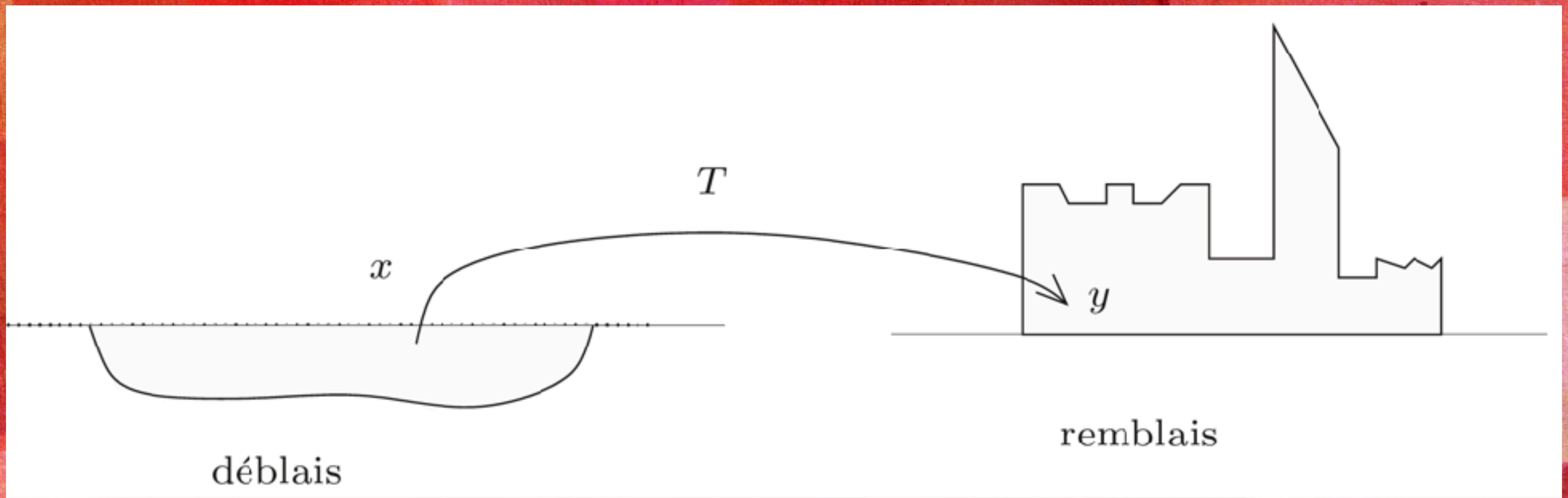


ボードゲームで最も良い戦略は？

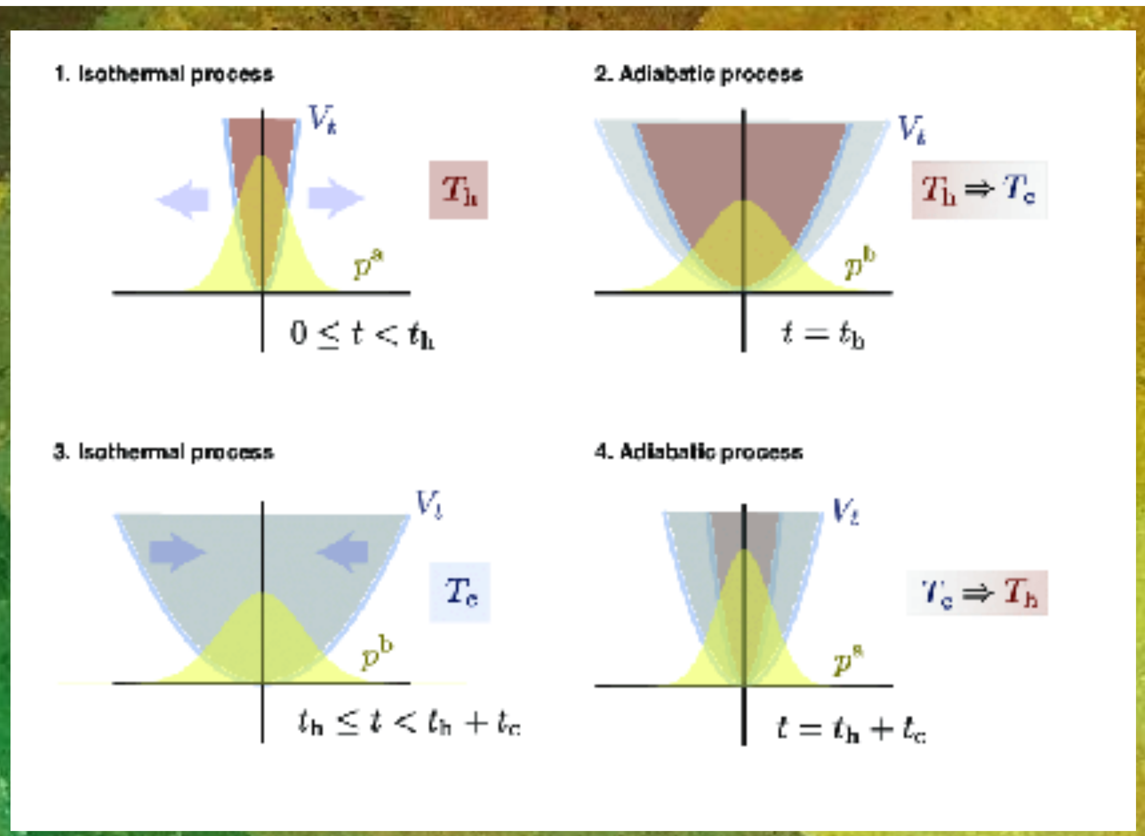
「コストを支払って、モノを動かす」

- 例: バックギャモン(盤双六)
  駒を出た目を消費してゴールまで動かす
- 例: 将棋
  他の駒を犠牲にしながら、特定の駒を相手の陣地まで動かす（成駒、入玉)
- 例: カタン
  資源リソースを支払いながら、より遠くの土地に道、街を建設をする

問：最もコスト消費の少ない良いやり方は？



Villani, C. (2009). *Optimal transport: old and new* (Vol. 338, p. 23). Berlin: springer.



Nakazato, M., & Ito, S. (2021). Geometrical aspects of entropy production in stochastic thermodynamics based on Wasserstein distance. *Physical Review Research*, *3*(4), 043093

(t=0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 and 1)

Lei Zhu, et al. IEEE trans on image processing, 16, 1481 (2007).

Liu, H., Gu, X., & Samaras, D. (2019). Wasserstein gan with quadratic transport cost. In *Proceedings of the IEEE/CVF international conference on computer vision* (pp. 4832-4841)

今日は「モノを効率よく輸送する話」をします

注意：今回のような講演は単なる「きっかけ」

講演を聞いてその内容について知った気になるのは、
<u>ボードゲームをプレイしないで、ボードゲームをルールやプレイの感想を聞くだけで理解した気になる</u>ようなもの、、、

例えば「カタン」というゲームをプレイせずに、「カタン」について何か聞いても本当は何もわかっていない。また一回だけプレイしても一面しかわからない。深く理解するためには何度もプレイすることがとても大切。

「数理」についてもそう！
実際に”プレイ”（計算をする、具体的な問題を解く、新たな問題を考える）を繰り返してみないと本当はわからない。

「然るべき時期」にこういう講演を卒業して、自分の手で”プレイ”を繰り返しましょう。

もしも中高の勉強に飽きていたらこういうものを使ってみよう.
例: ストラング線形代数, 共立出版 詳解力学演習, 久保熱学・統計力学演習…etc.
(まだ中高の勉強に飽きてなかったら、中高の勉強を飽きるまでやってください)

そして具体的な問題を解いてみよう.
<u>人より早くやることは重要ではない</u>. 時間をかけた深い理解が重要！

注意：今回のような講演は単なる「きっかけ」

講演を聞いてその内容について知った気になるのは、

ボード

いい「攻略本」はあるが，「攻略本」を読むだけで終わらないこと

例えば　　　　ナプレ

イしても一面しかわからない。深く理解するためには何度もプレイすることがとても大切。

「数理」

いい「攻略本」の例（物理の力学の場合)

実際に"

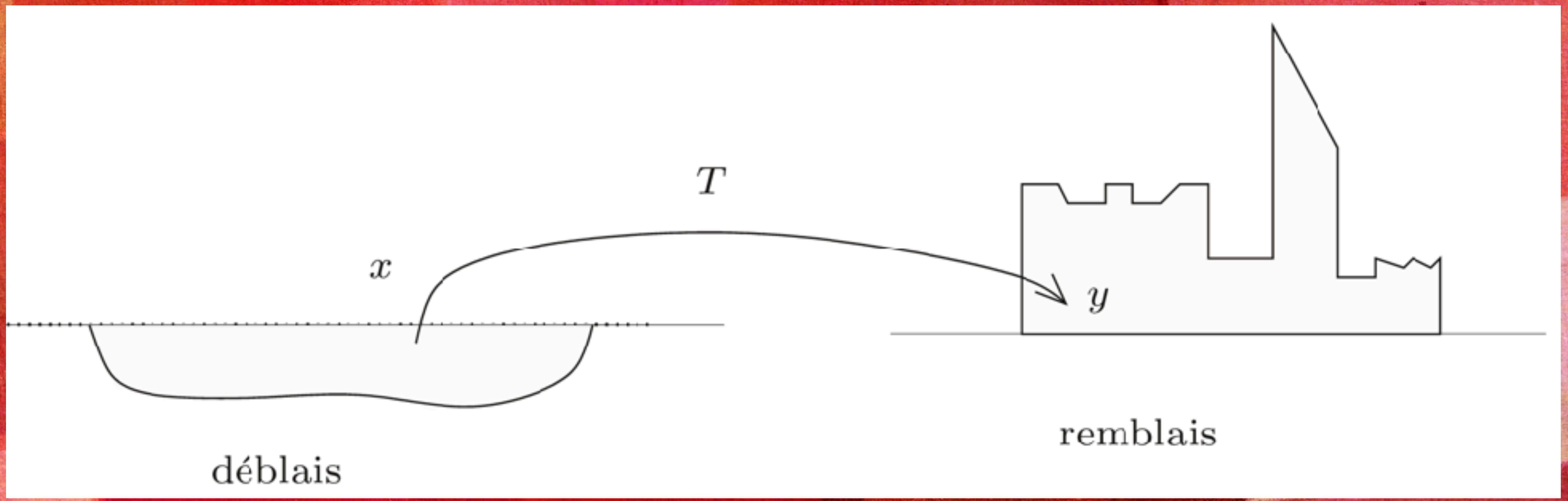
例: ファインマン力学, ランダウ力学

「然る

攻略本を端から端まで読んでも、深くプレイした人には敵わない

(攻略本の情報は「古い」「誤っている」こともある)

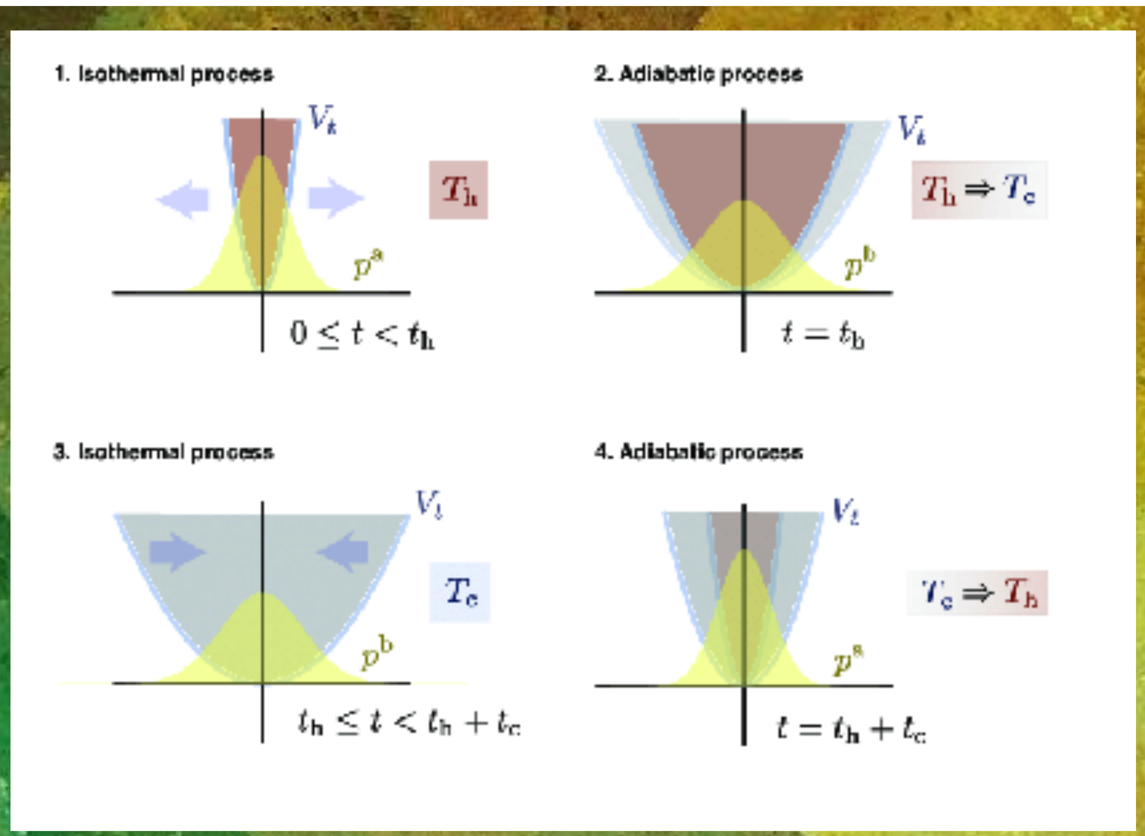
ゲーム: 共立出版 詳解力学演習



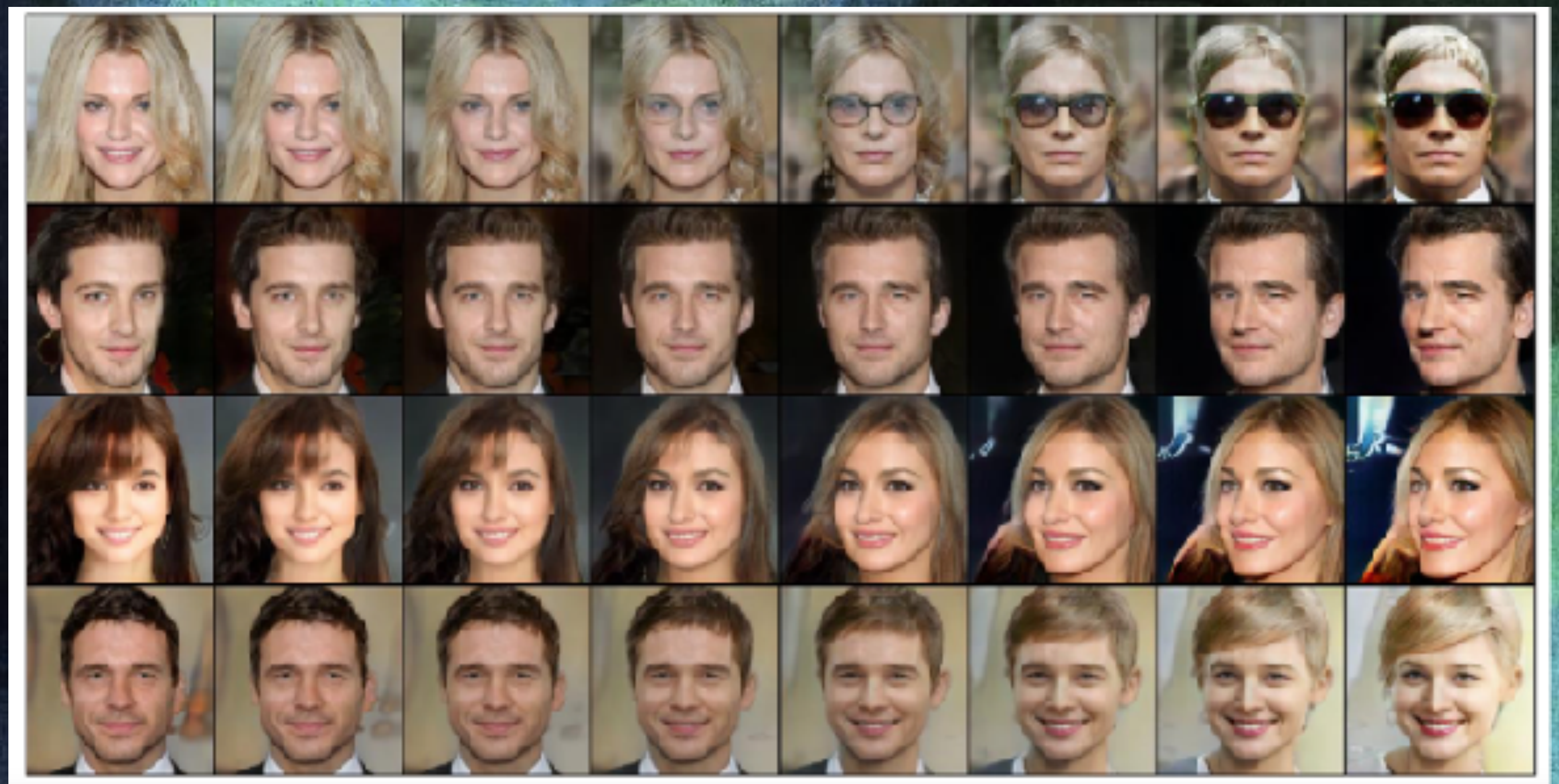
Villani, C. (2009). *Optimal transport: old and new* (Vol. 338, p. 23). Berlin: springer.

(t=0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 and 1)

Lei Zhu, et al. IEEE trans on image processing, 16, 1481 (2007).



Nakazato, M., & Ito, S. (2021). Geometrical aspects of entropy production in stochastic thermodynamics based on Wasserstein distance. *Physical Review Research*, *3*(4), 043093



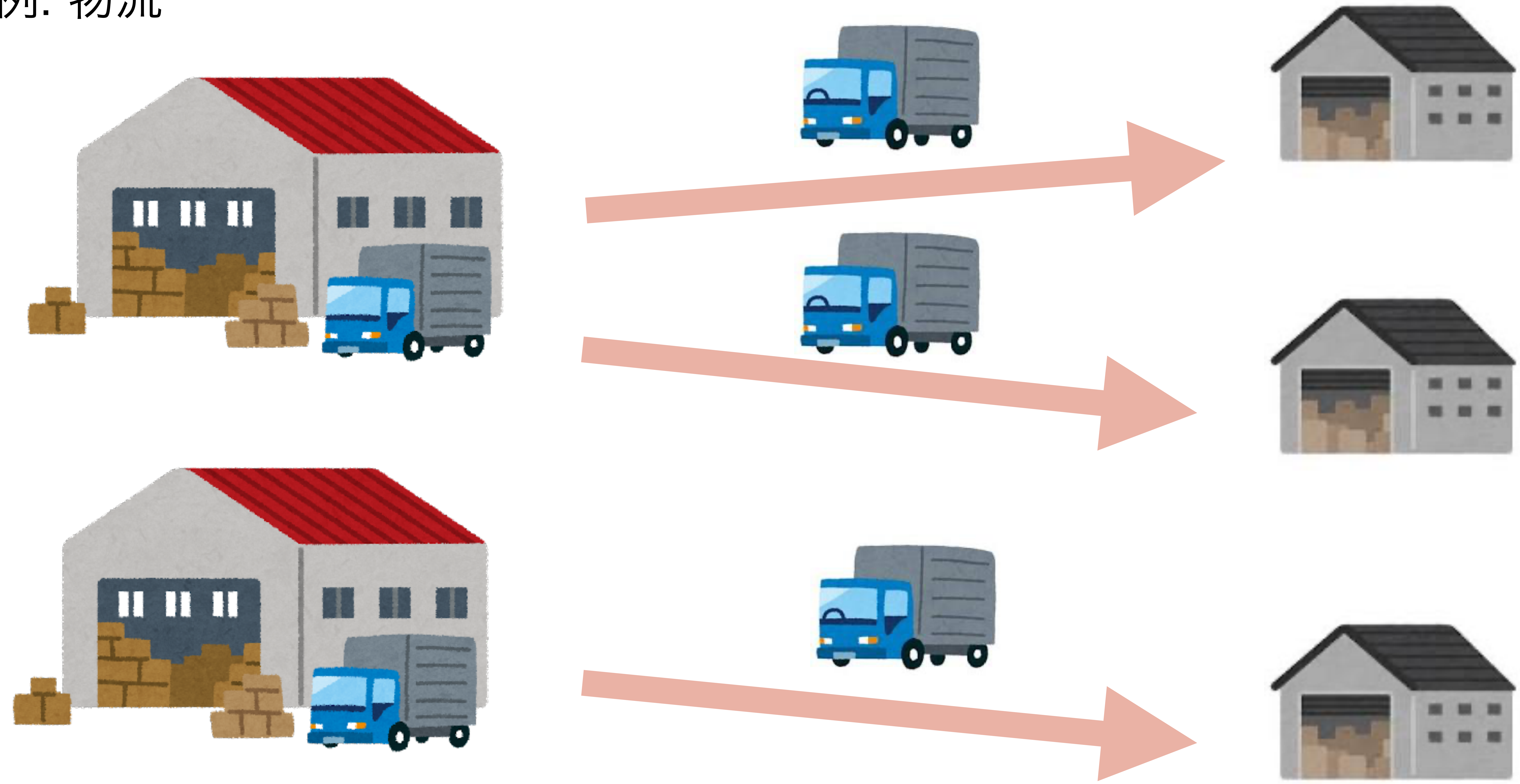
Liu, H., Gu, X., & Samaras, D. (2019). Wasserstein gan with quadratic transport cost. In *Proceedings of the IEEE/CVF international conference on computer vision* (pp. 4832-4841)

「モノを効率よく輸送する話」に戻ります

注: 数学的な厳密性は「多少」犠牲にして、伝わるように話します

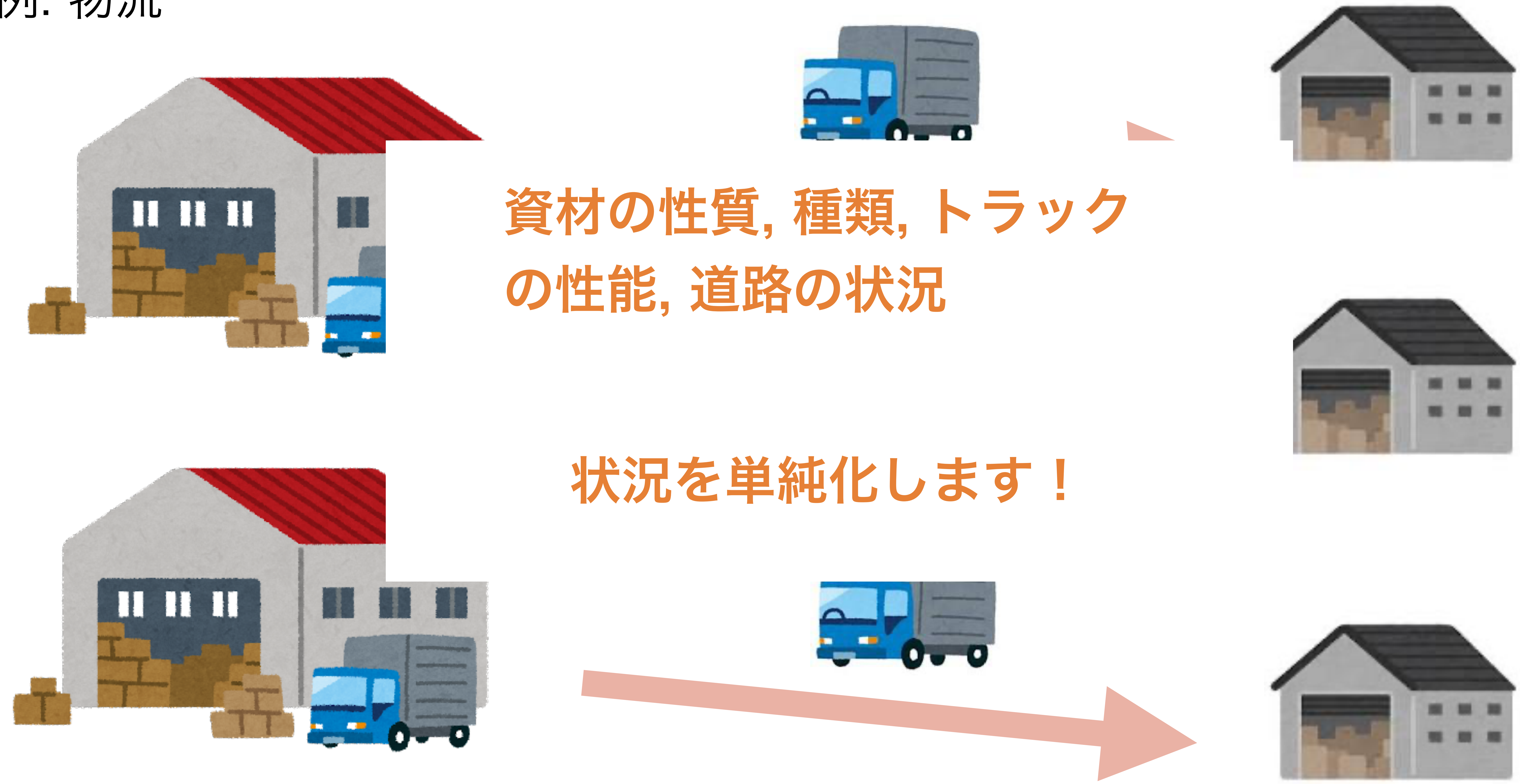
モノを効率よく輸送したい

例: 物流



モノを効率よく輸送したい

例: 物流

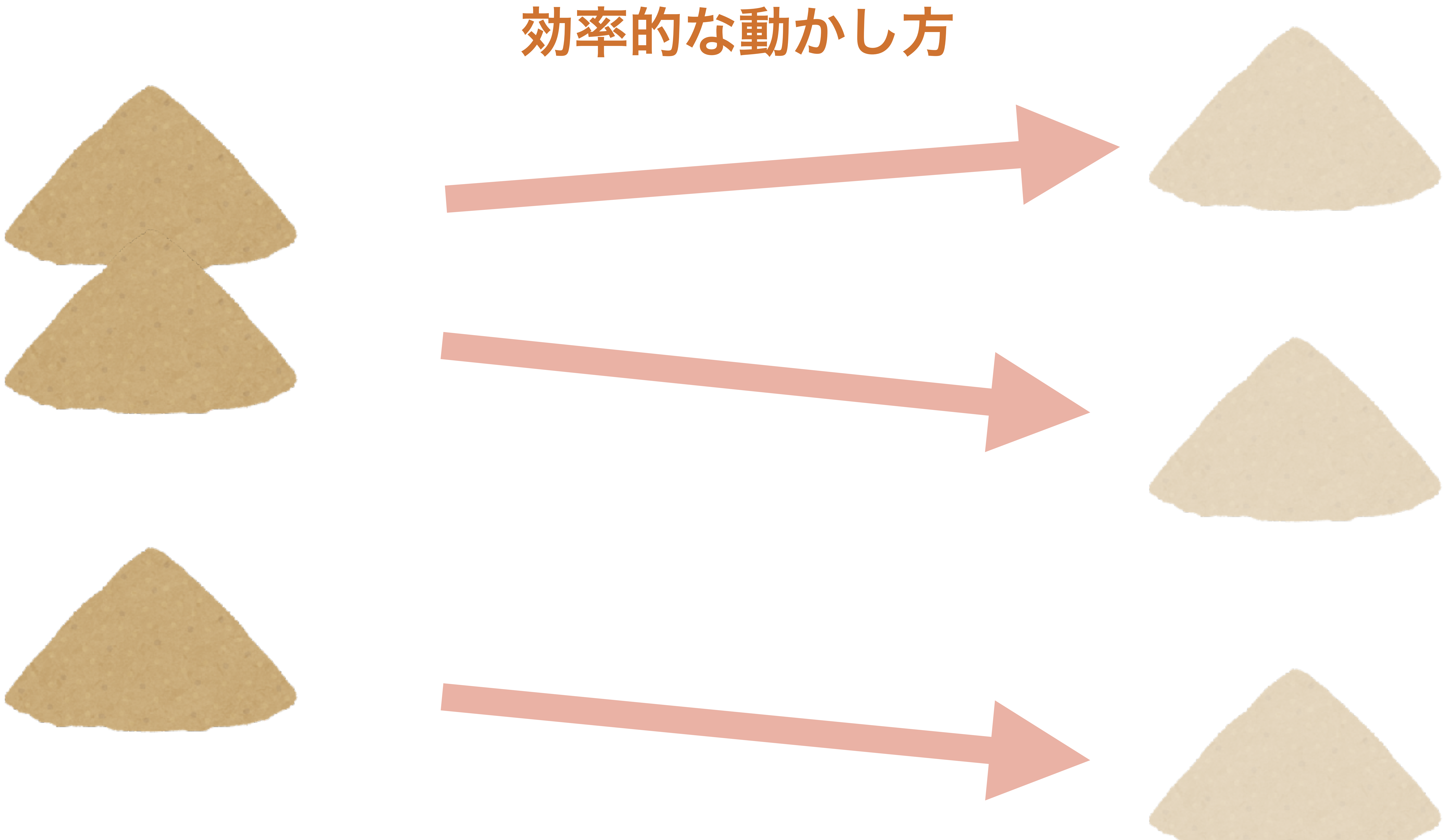


資材の性質, 種類, トラックの性能, 道路の状況

状況を単純化します！

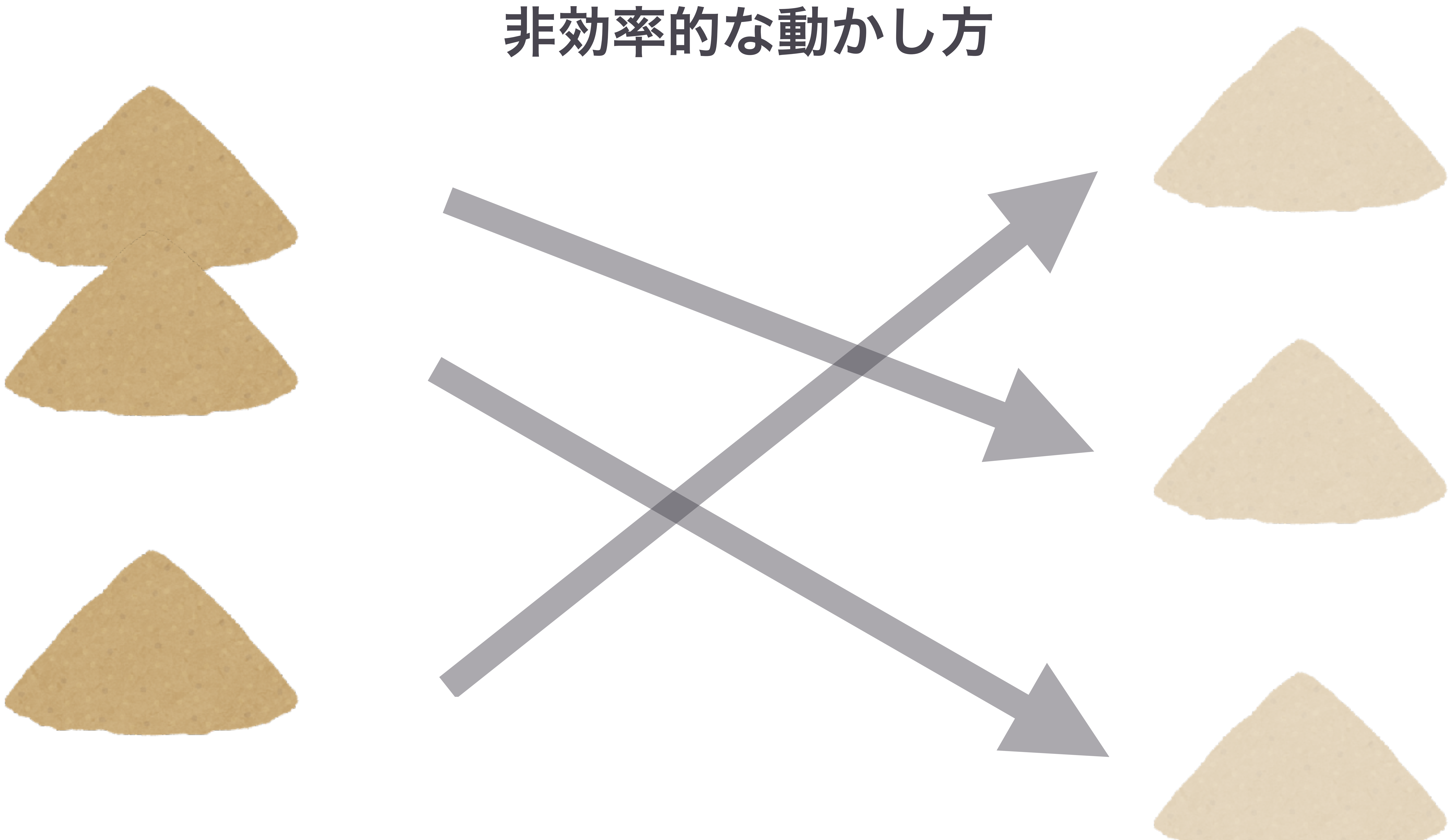
モノを効率よく輸送したい

例: 砂山の輸送

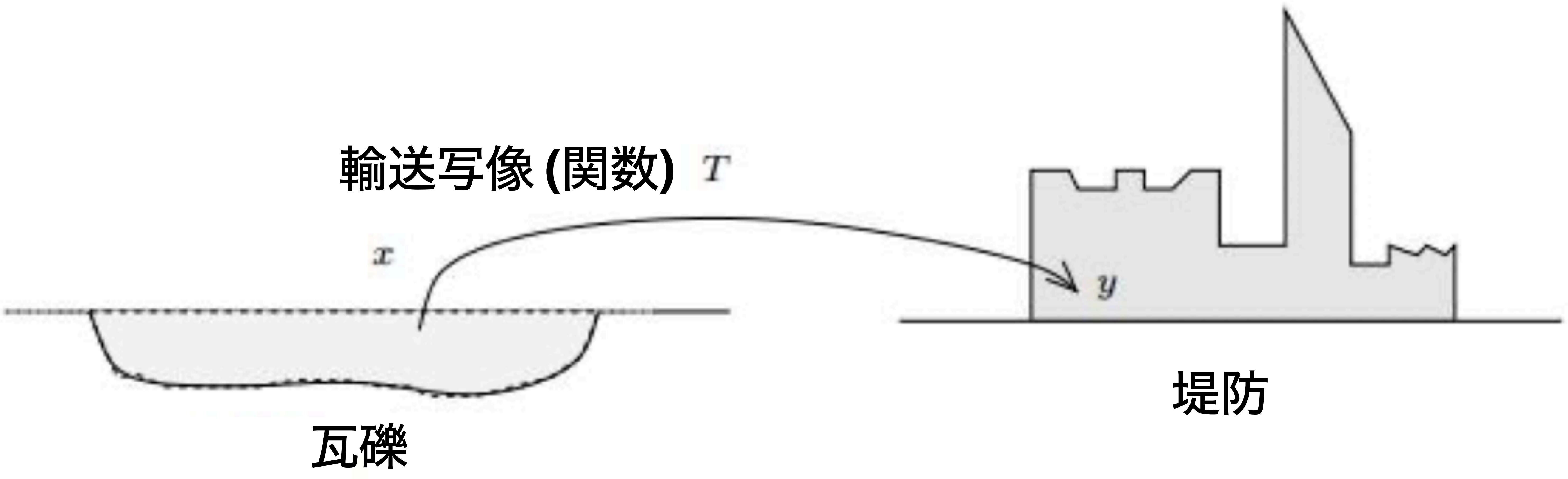


モノを効率よく輸送したい

例: 砂山の輸送



問題：最適輸送問題 (MONGE, 1781)



Villani, C. (2009). *Optimal transport: old and new* (Vol. 338, p. 23). Berlin: springer.

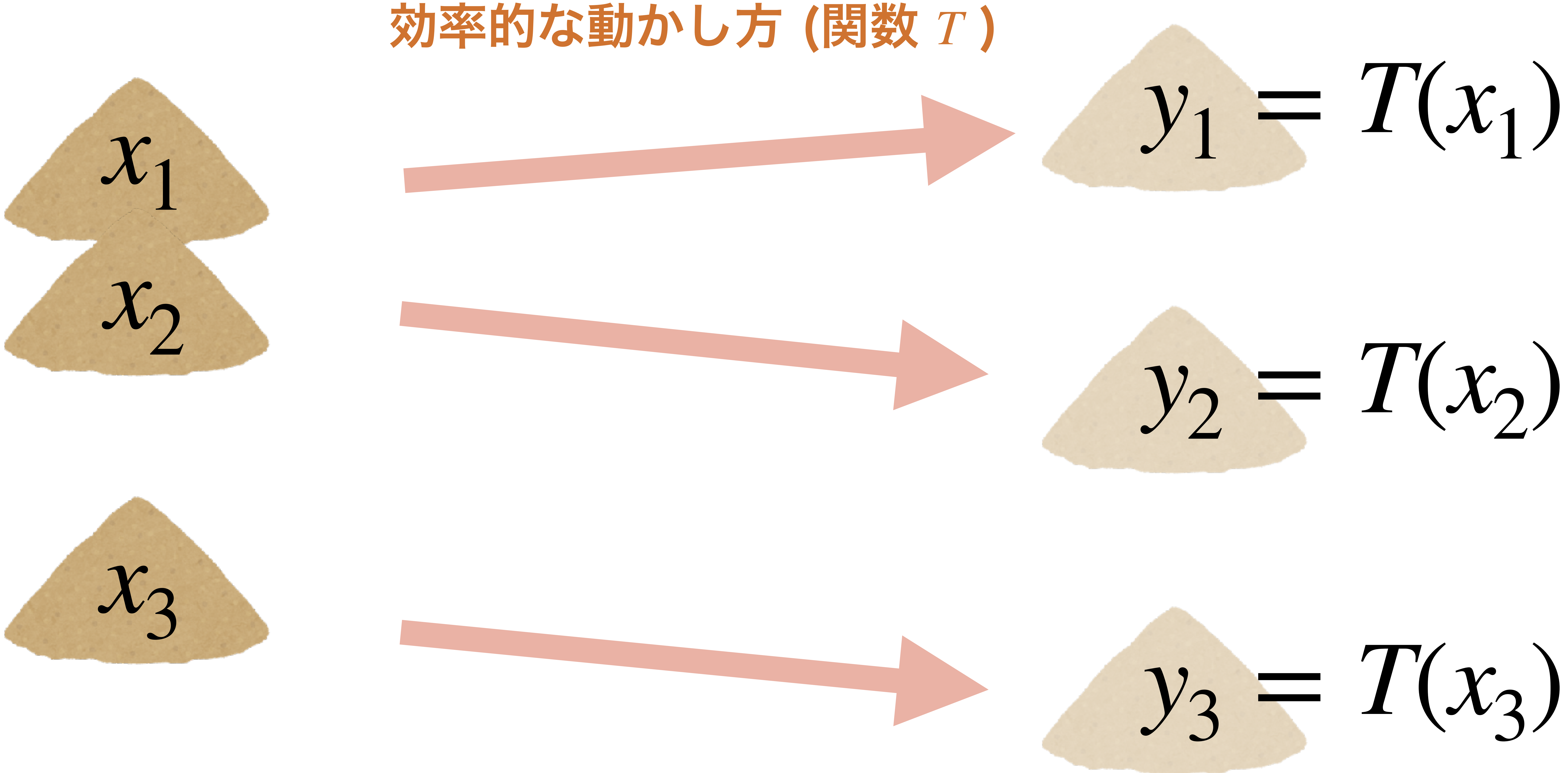
Gaspard Monge
1746-1818

Monge(モンジュ)の最適輸送問題 (1781)

位置 x にある瓦礫を位置 yに輸送写像T で $y = T(x)$ で移すことで堤防を作ることを考える。
ただし、瓦礫を動かすには輸送した距離に応じたコストがかかる。

総コストを最小化する最適な輸送手法Tは何か。その時の最小の総コストはいくつか？

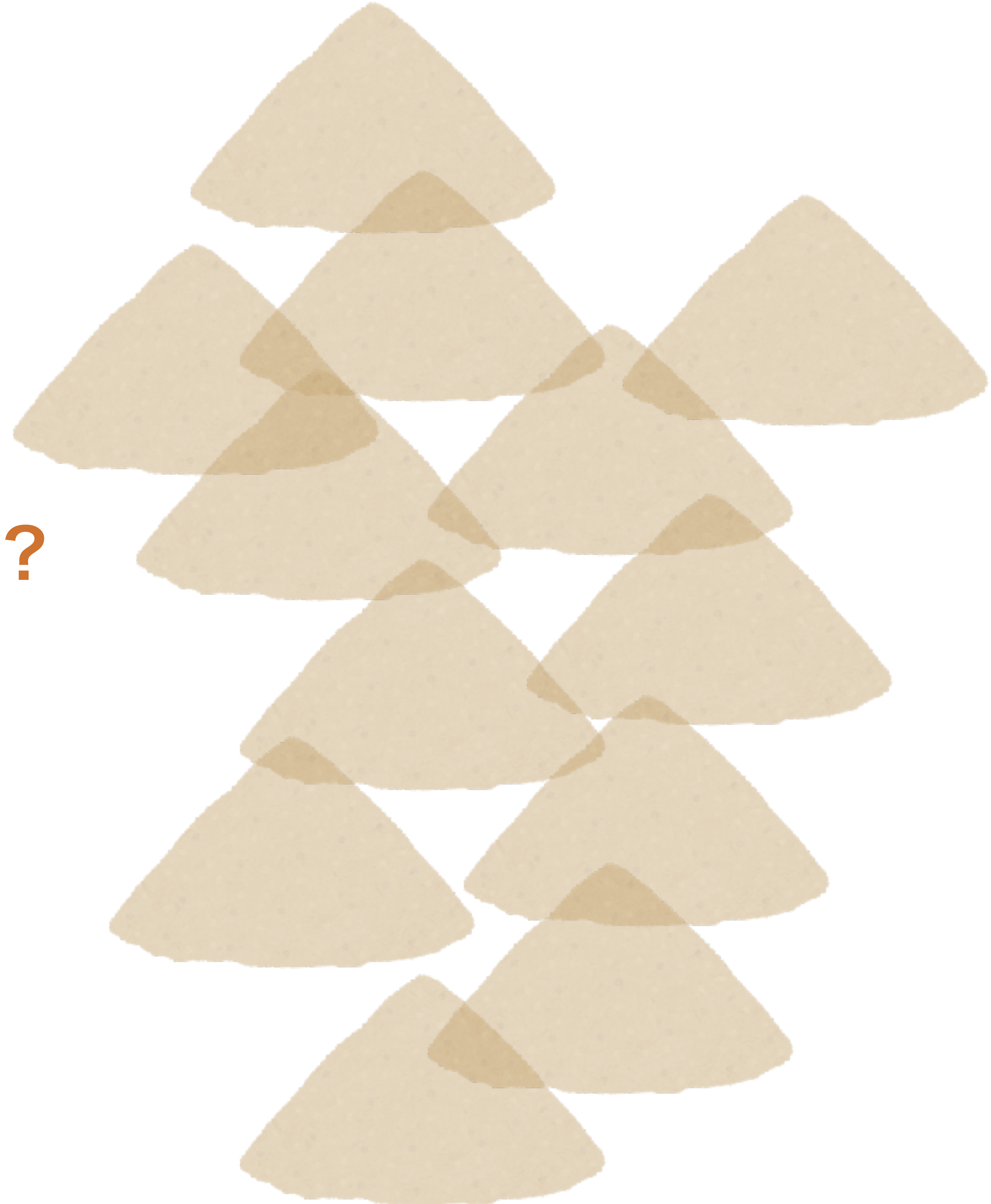
例に戻って考えてみる



砂山が沢山あ(って連続的に存在してい)る場合

効率的な動かし方 T は？

非常に難しい問題！



問題の(一応の)解決は1987年！

- 1781年 Mongeの最適輸送問題
- 1942年 Kantorovichによるアイディア
- 1969年 Wasserstein距離の定式化
- 1987年 Yan Brenierによる解決
- 2000年 Benamou-Brenierの流体力学的解法

Leonid Kantorovich
1912-1986
ノーベル経済学賞 (1975)

- 最近も…

Cédric Villani
フィールズ賞 (2010)

Alessio Figalli
フィールズ賞 (2018)

LEONID KANTOROVICH

Leonid Kantorovich
1912-1986
ノーベル経済学賞 (1975)

➤ レオニート・カントロビッチ

1930 レニングラード大学数学科卒業

1939 ソヴィエト連邦(旧ロシア)で軍部工学専門大学の教授になる

五カ年計画での経済資源の最適配分を考える (1939)

ヨシフ・スターリンの五カ年計画 1928-1990

ON THE TRANSLOCATION OF MASSES

L. V. Kantorovich*

The original paper was published in Dokl. Akad. Nauk SSSR, **37**, No. 7–8, 227–229 (1942).

最適輸送問題のアイディアを出す (1942)

第二次世界大戦突入

スターリングラード攻防戦 (1942)

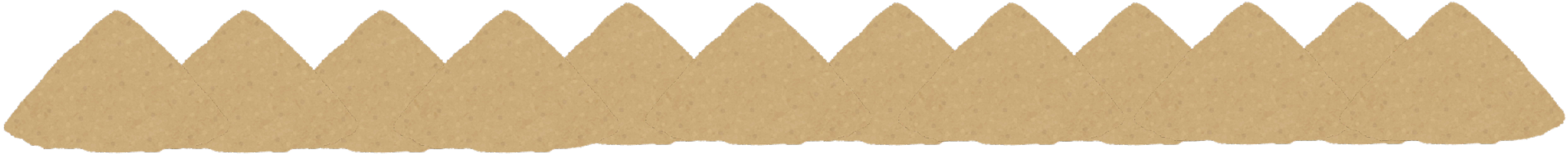
兵站の最適な輸送!

KANTOROVICHのアイディア (1942)

輸送と「確率」を結びつける！

KANTOROVICHのアイディア (1942)

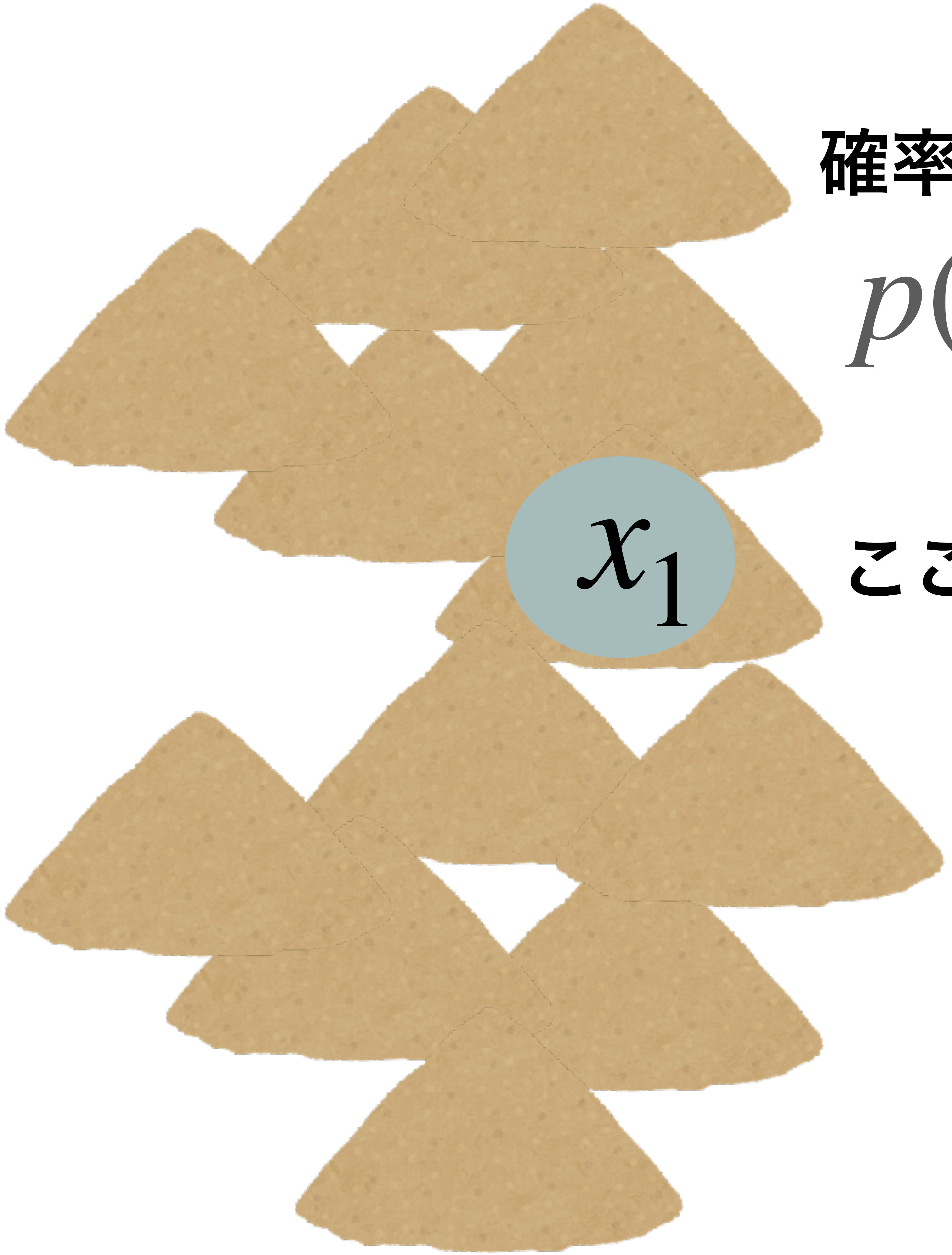
砂山の総量は保存している ⟹ 総量を1とする



足し上げたら1になる確率の性質 (連続な確率密度分布は積分したら1)

$$\sum_x p(x) = 1 \left(\int p(x)dx = 1 \right) \qquad (p(x) \geq 0)$$

KANTOROVICHのアイディア (1942)



確率分布

$p(x)$

砂山がある場所xにいる確率

ここは12個ある砂山の1つなので$p(x_1) = \dfrac{1}{12}$

x_2

ここは砂山がないので$p(x_2) = 0$

KANTOROVICHのアイディア (1942)

確率分布

$p(x)$

確率分布

$q(y)$

ある確率分布pを別の確率分布qに「輸送」する

KANTOROVICHのアイディア (1942)

確率分布 **確率分布**

$$p(x) \qquad q(y)$$

同時確率分布！

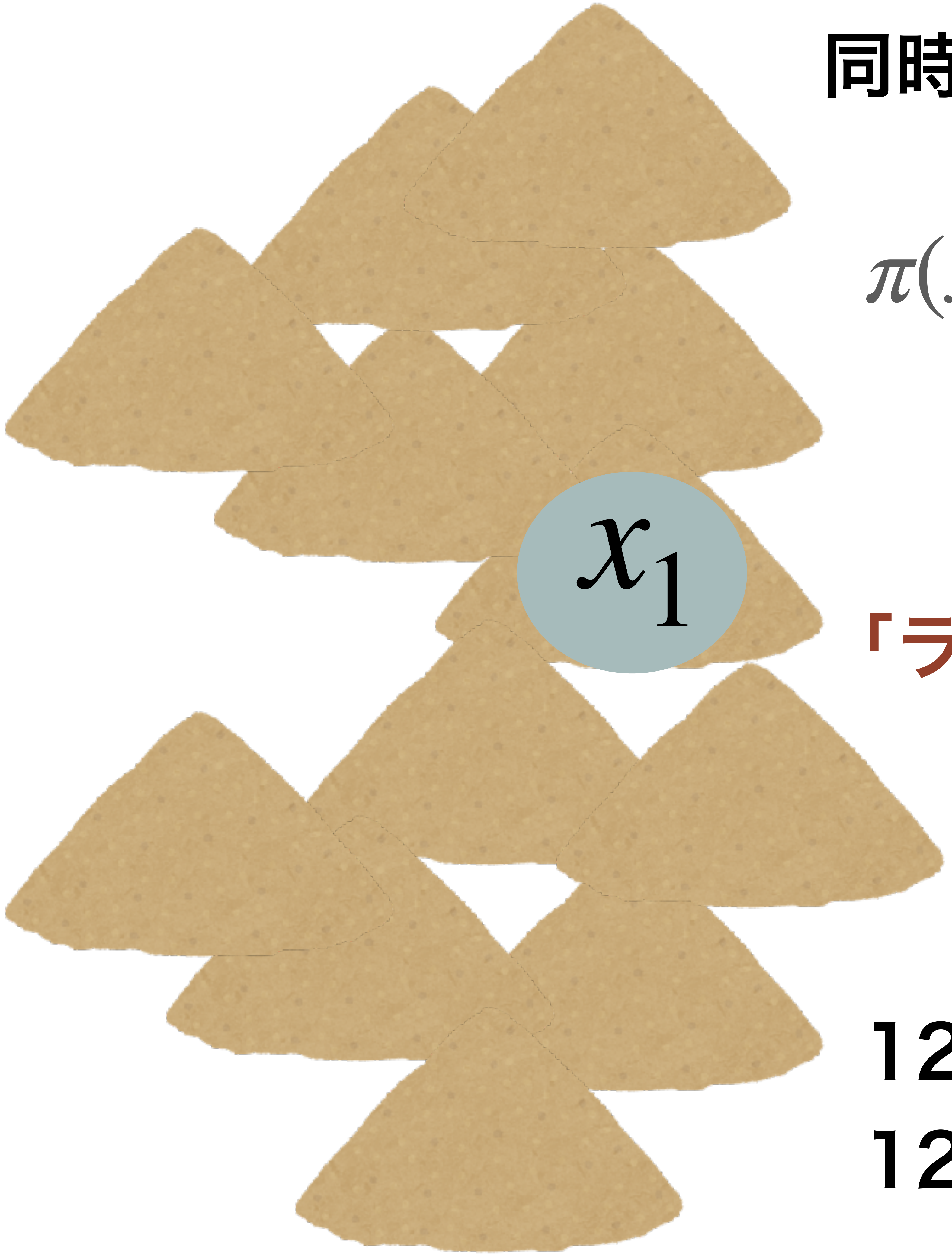
$$\pi(x, y)$$

$$\sum_{x,y} \pi(x, y) = 1 \quad \left(\iint \pi(x, y)dxdy = 1 \right)$$

$$(\pi(x, y) \geq 0)$$

$$\sum_{x} \pi(x, y) = q(y) \quad \left(\int \pi(x, y)dx = q(y) \right) \quad \sum_{y} \pi(x, y) = p(x) \quad \left(\int \pi(x, y)dy = p(x) \right)$$

KANTOROVICHのアイディア (1942)

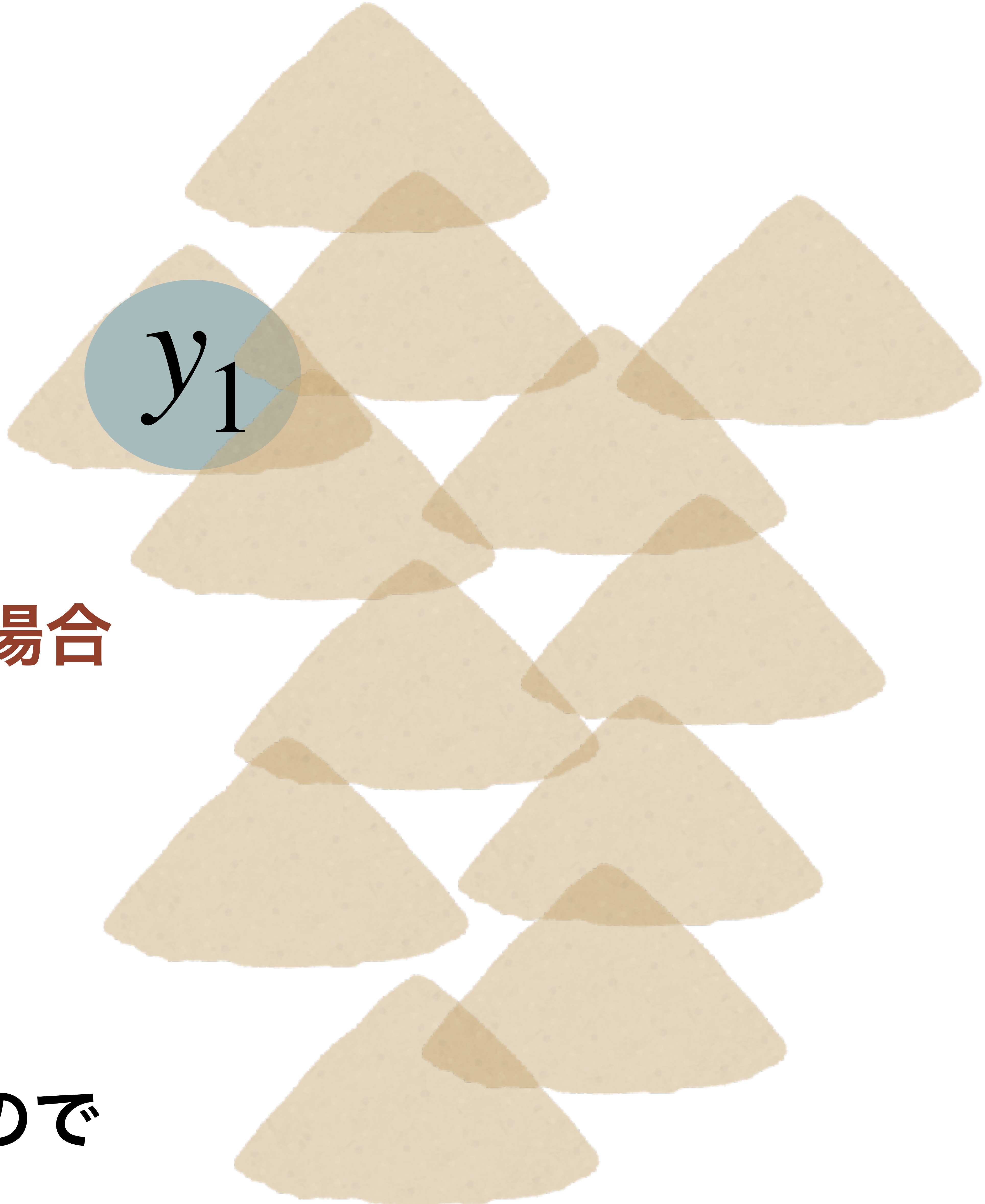


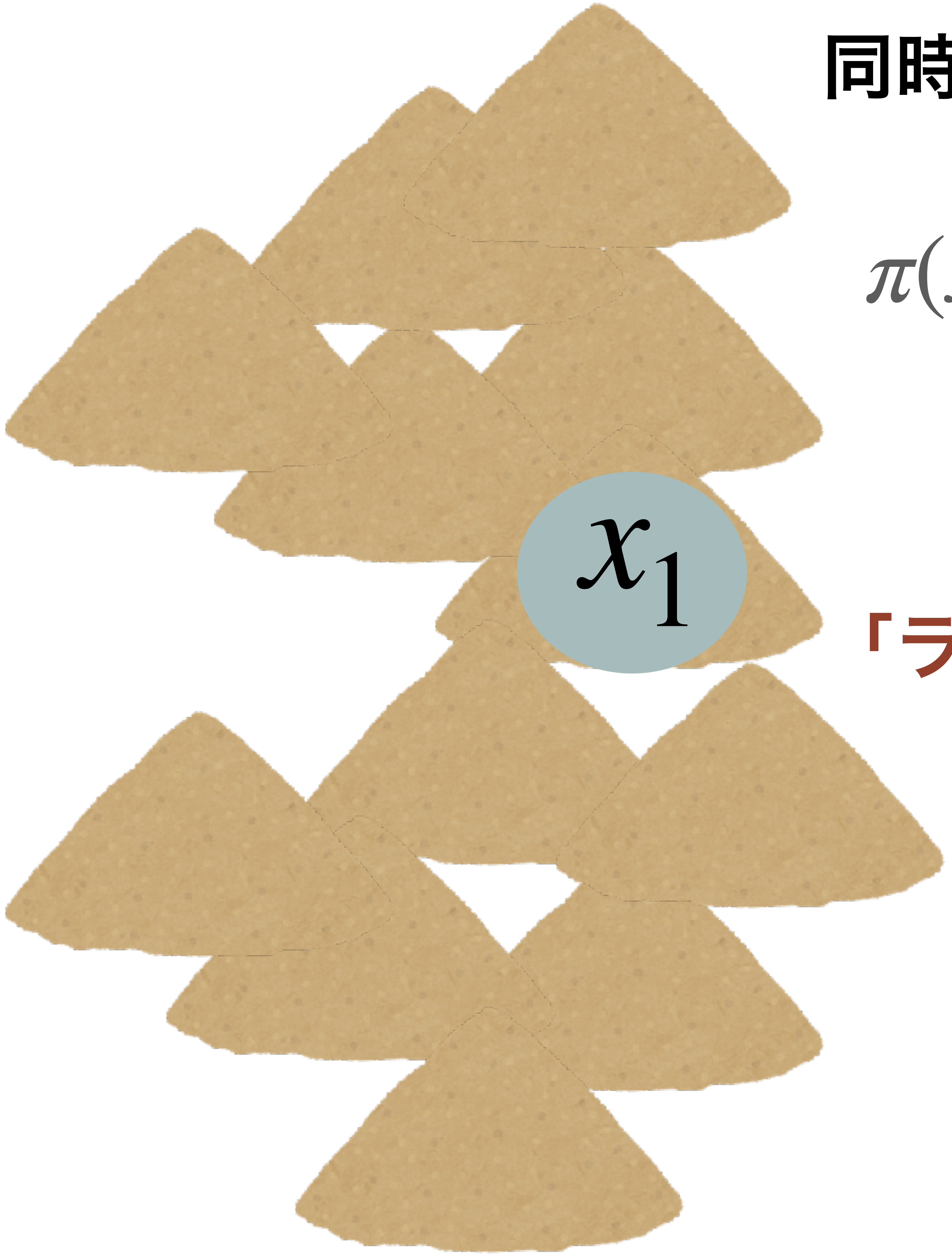
同時確率分布の例 (その1)

$$\pi(x_1, y_1) = \frac{1}{12} \times \frac{1}{12}$$

「ランダム」に輸送される場合

12個の山のうちの1つと
12個の山のうちの1つなので





同時確率分布の例 (その1)

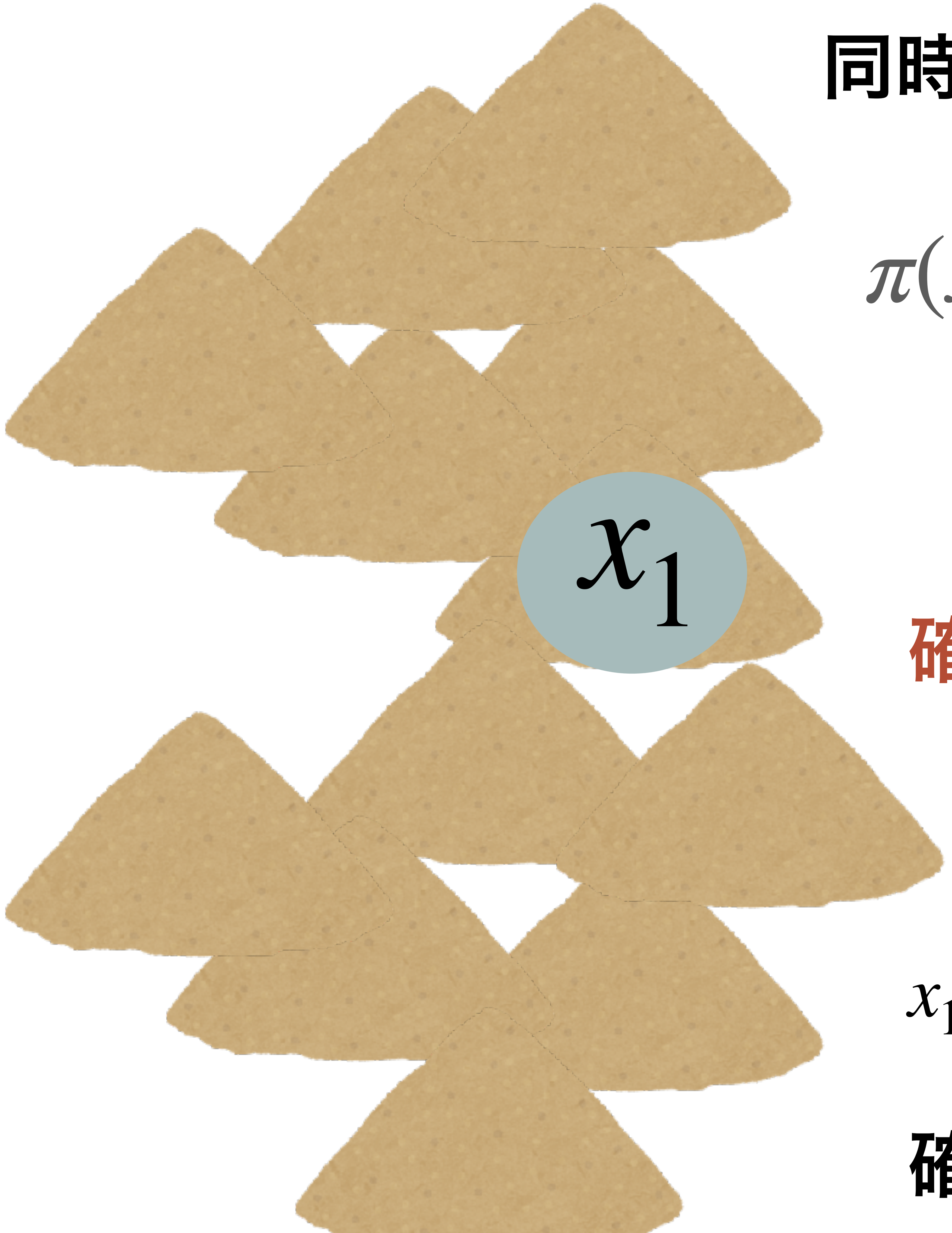
$$\pi(x_1, y_2) = \frac{1}{12} \times 0$$

「ランダム」に輸送される場合

y_2

砂山がない場所は0

KANTOROVICHのアイディア (1942)



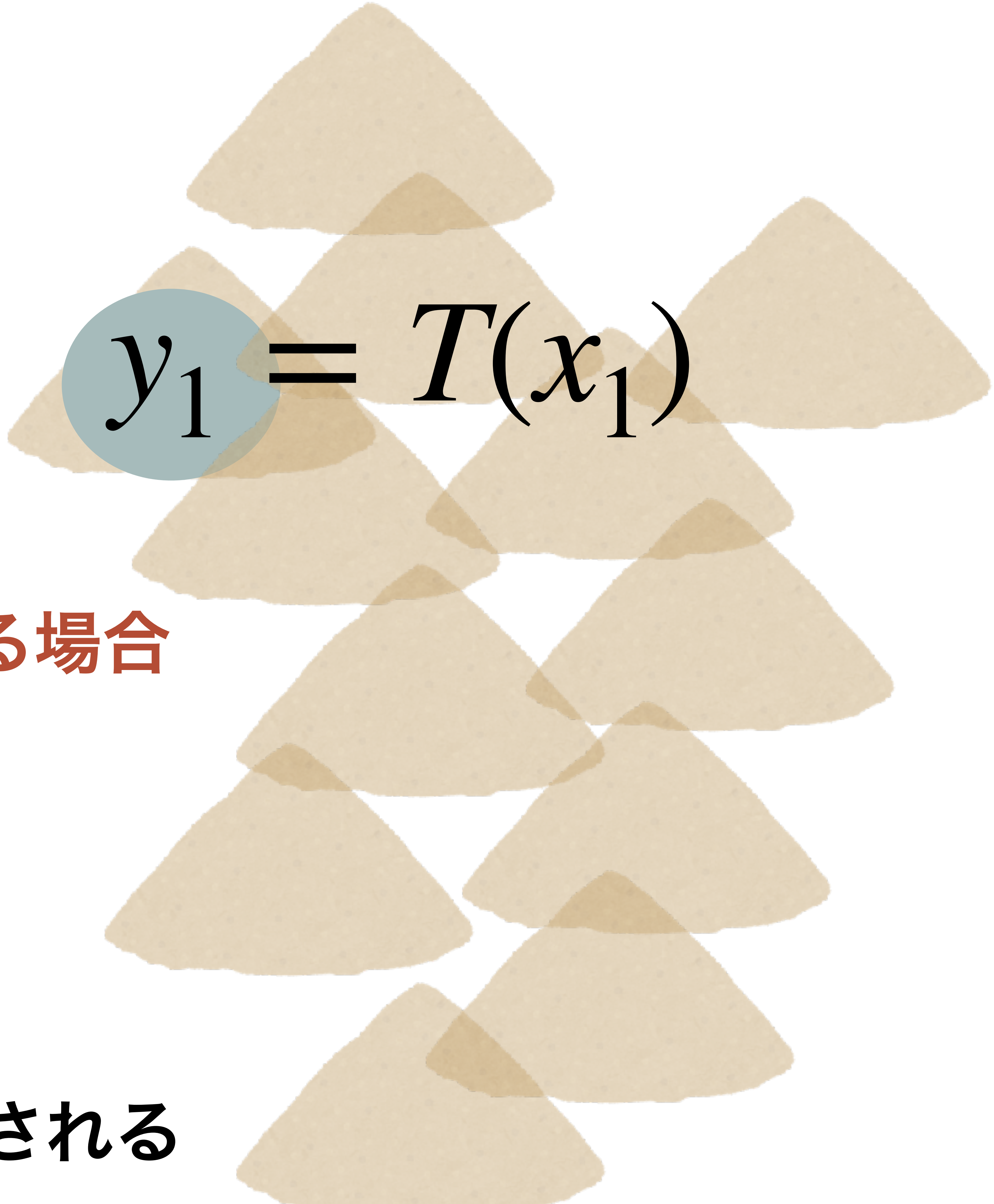
同時確率分布の例 (その2)

$$\pi(x_1, y_1) = \frac{1}{12} \times 1$$

確実にx_1はy_1に輸送される場合

x_1が$\frac{1}{12}$の確率で起きたら

確率1で$y_1 = T(x_1)$に輸送される



KANTOROVICHのアイディア (1942)

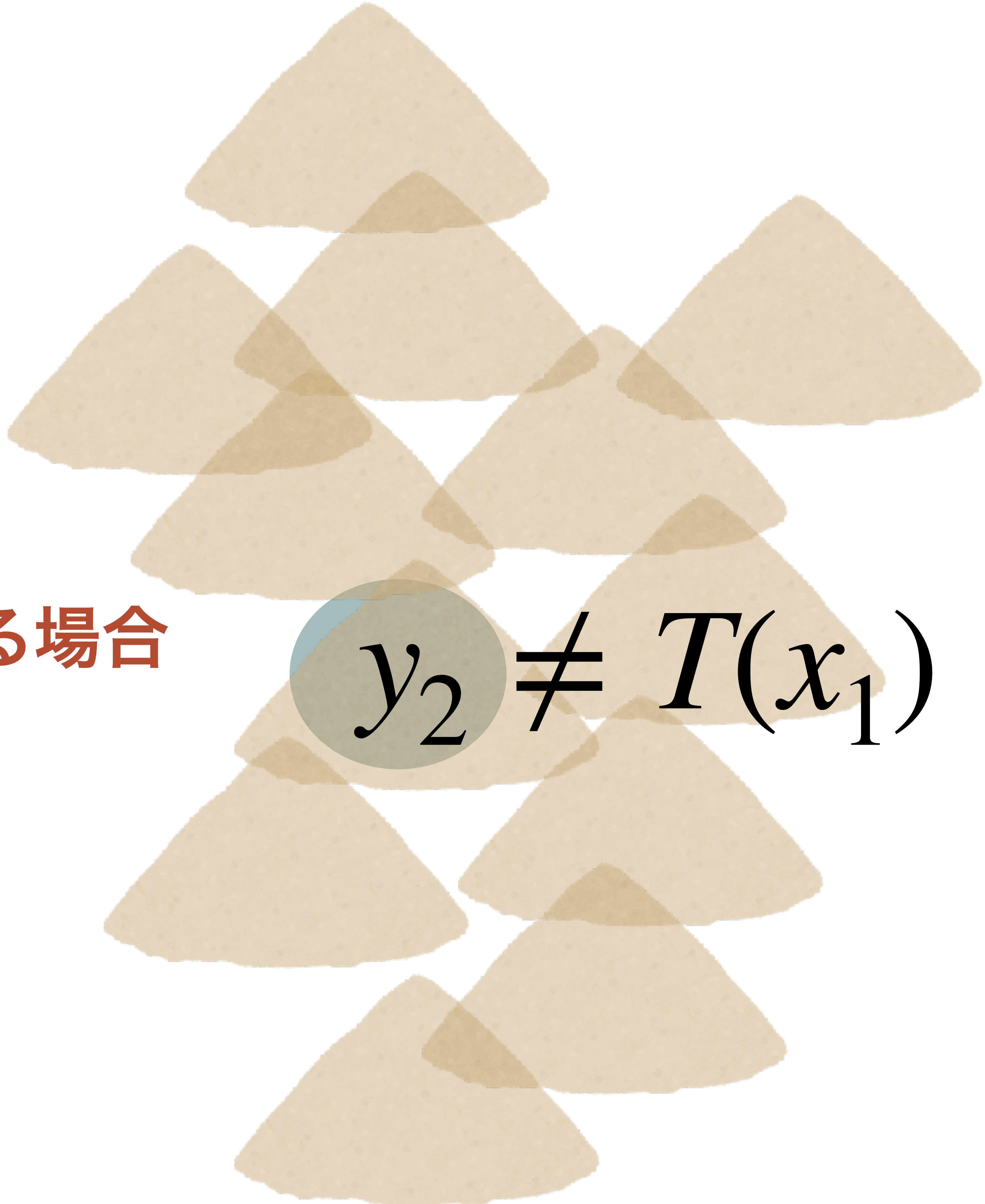
同時確率分布の例 (その2)

$$\pi(x_1, y_2) = \frac{1}{12} \times 0$$

確実にx_1はy_1に輸送される場合

x_1から$y_2 \neq T(x_1)$には

輸送されない（確率0)



KANTOROVICHのアイディア (1942)

確率分布

$p(x)$

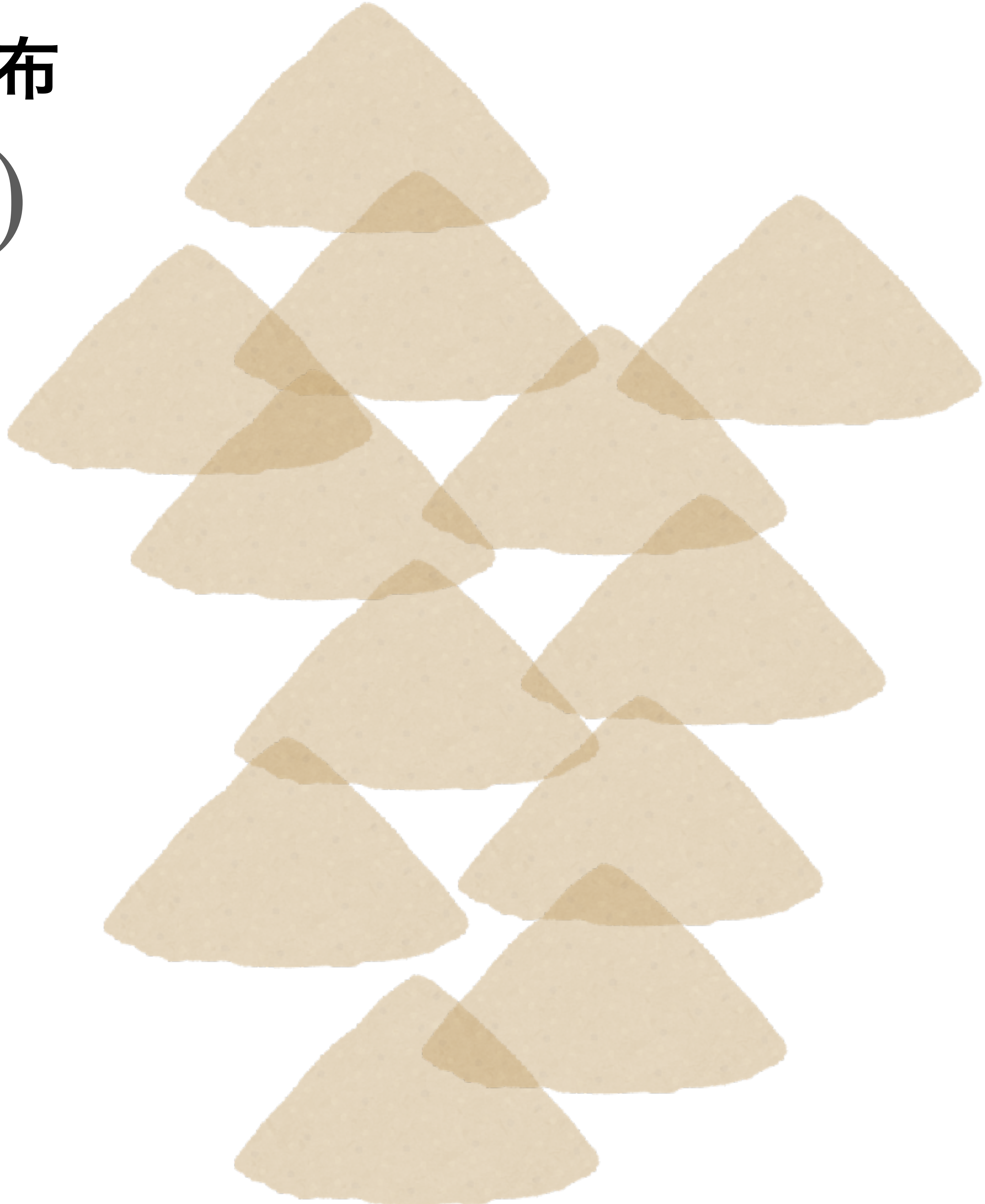
確率分布

$q(y)$

$\pi(x, y)$

同時確率分布

無数に存在する!



MONGE-KANTOROVICHの最適輸送問題

Monge-Kantorovichの最適輸送問題

同時確率分布$\pi(x,y)$での輸送コストの期待値を考える

この輸送コストの期待値について、$p(x)$と$q(y)$の同時確率分布である$\pi(x,y)$の無数の候補から最小の値を探す

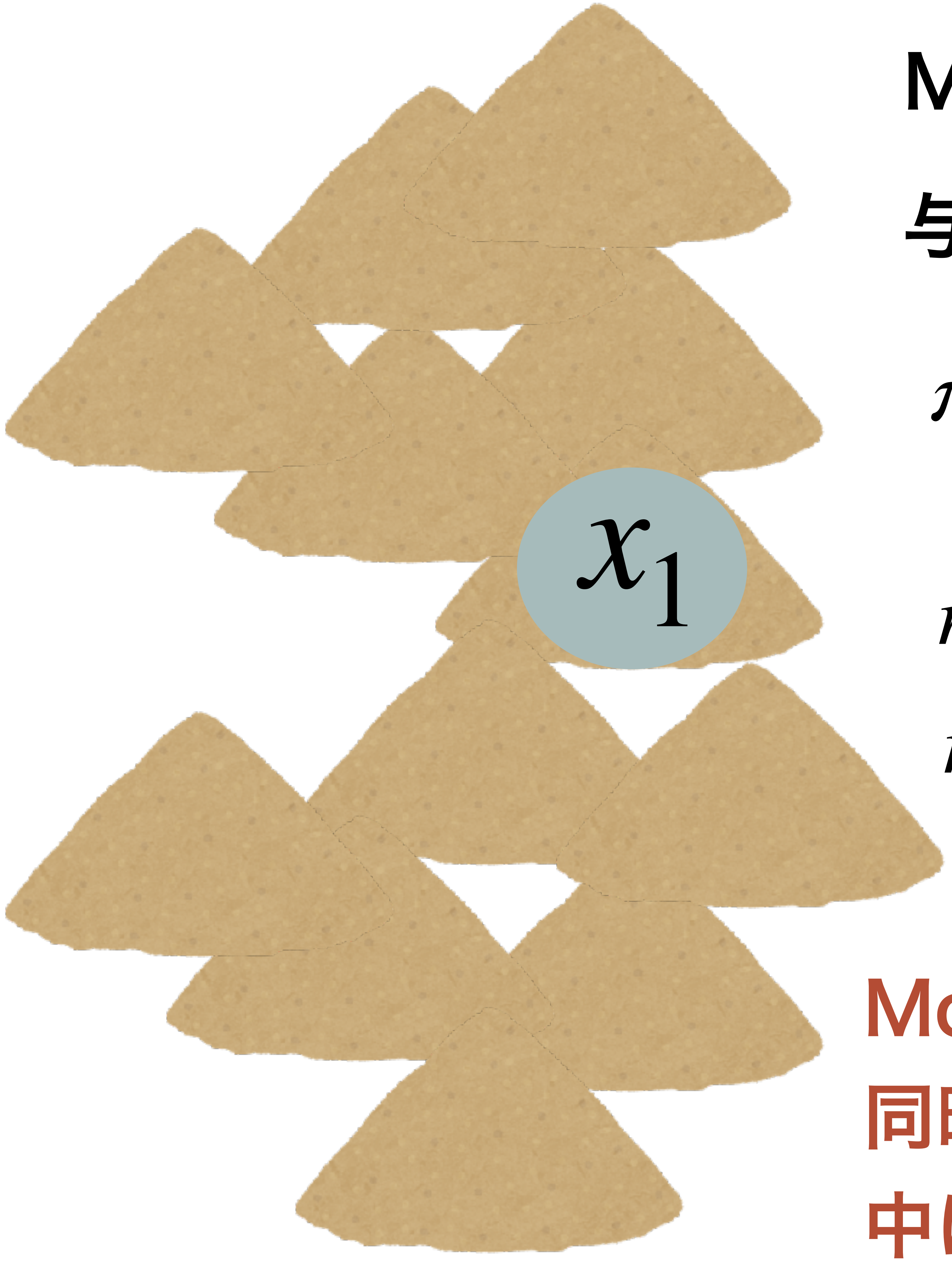
輸送コストを$c(x,y)(\geq 0)$とすると

輸送コストの期待値は $\langle c\rangle_\pi = \sum_{x,y} c(x,y)\pi(x,y)$ $\left(\langle c\rangle_\pi = \int\int c(x,y)\pi(x,y)dxdy\right)$

コストの最小化 $C(p,q) = \min_\pi \langle c\rangle_\pi$

ただし$\pi(x,y)$は次を満たす $\sum_x \pi(x,y) = q(y)$ $\left(\int \pi(x,y)dx = q(y)\right)$ $\sum_y \pi(x,y) = p(x)$ $\left(\int \pi(x,y)dy = p(x)\right)$

MONGEの最適輸送問題との直観的な関係

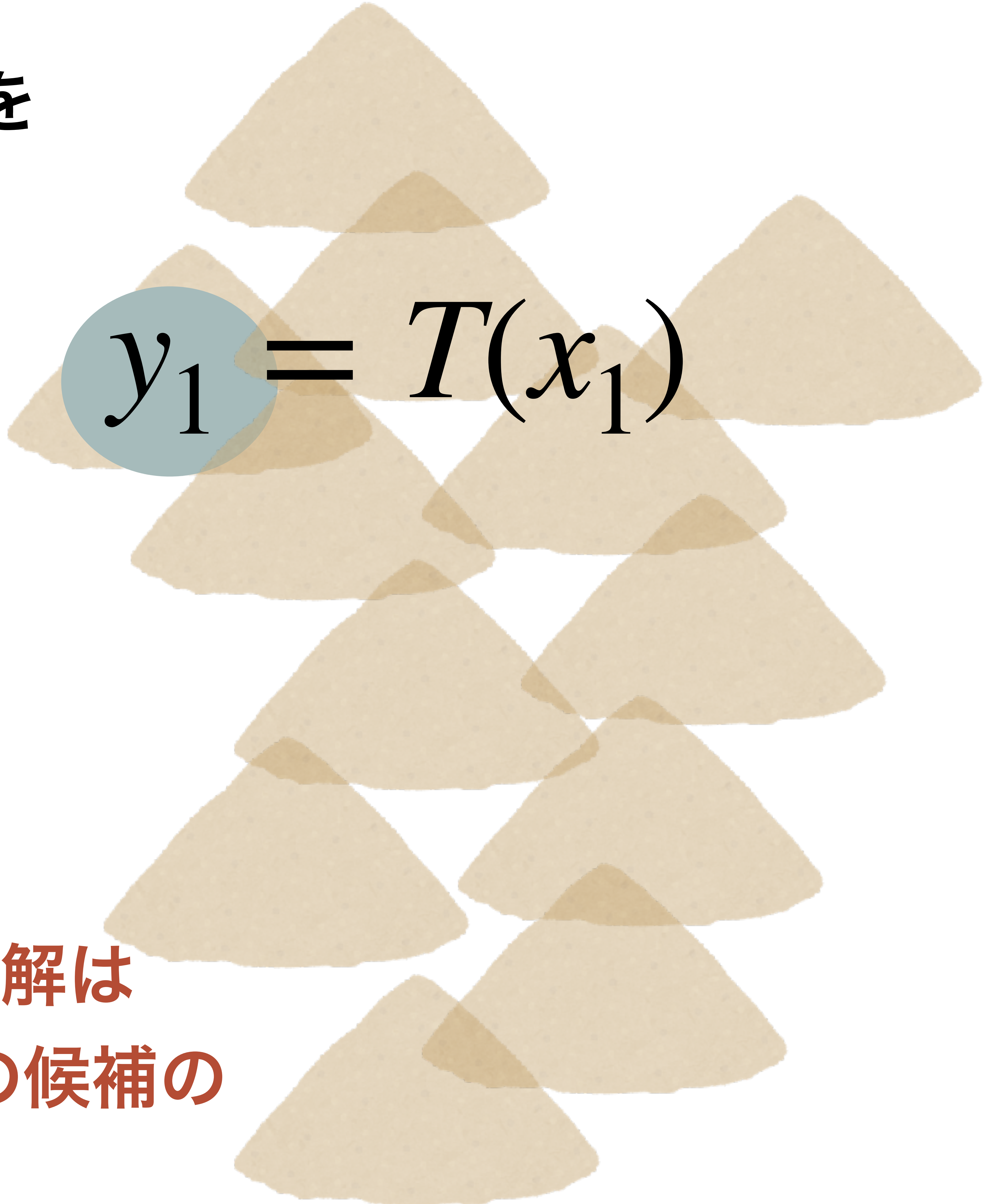


Mongeの最適輸送問題を

与える同時確率分布

$$\pi(x, y) = r(y \mid x)p(x)$$

$$r(y \mid x) = 0 \ (y \neq T(x)),$$
$$r(y \mid x) = 1 \ (y = T(x))$$



Mongeの最適輸送問題の解は
同時確率分布での最小化の候補の
中にいる

MONGEの最適輸送問題との関係

同時確率分布$\pi(x, y)$を$\pi(x, y) = r(y|x)p(x)$ とおいて

$$r(y|x) = 0 \ (y \neq T(x)),\ \ r(y|x) = 1 \ (y = T(x))$$

のように制限すれば **Monge**の最適輸送問題に帰着.

$$\left(r(y|x) = \delta(y - T(x))\right)$$

$$r(y|x) = 0 \ (y \neq T(x))$$

$$\int dy r(y|x) = 1$$

注:連続の場合は「デルタ関数」というものを使う.

$$C_{\mathrm{M}}(p, q) = \min_T \sum_x c(x, T(x))p(x) \ \ \left(C_{\mathrm{M}}(p, q) = \inf_T \int c(x, T(x))p(x)dx \right)$$

(Monge-Kantorovichの最適輸送問題は**Monge**の最適輸送問題よりも「緩くて簡単」な問題。

つまり、$C_{\mathrm{M}}(p, q) \geq C(p, q)$。制限がない分、**Kantorovich**問題の方が過度に最小化される。）

輸送コスト$c(x,y)$次第で、$C_{\mathrm{M}}(p,q) = C(p,q)$

例)

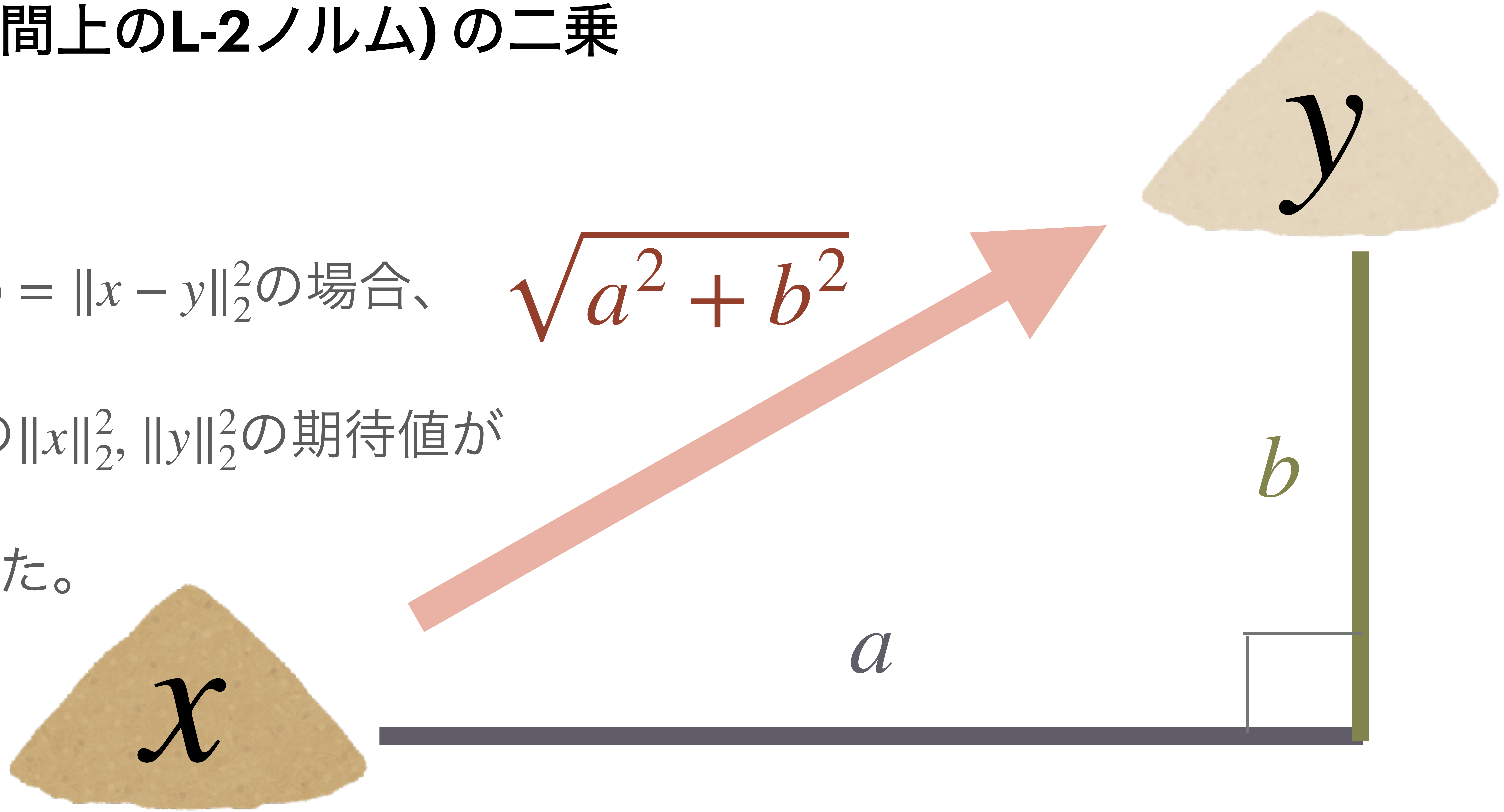
$$c(x,y) = \|x-y\|_2^2 = a^2 + b^2$$

: 距離 (ユークリッド空間上のL-2ノルム) の二乗

1987年 Yan Brenierにより$c(x,y) = \|x-y\|_2^2$の場合、

$T(x)$が存在することが、$p(x), q(y)$の$\|x\|_2^2$, $\|y\|_2^2$の期待値が

有限の値を持つ条件の下で示された。



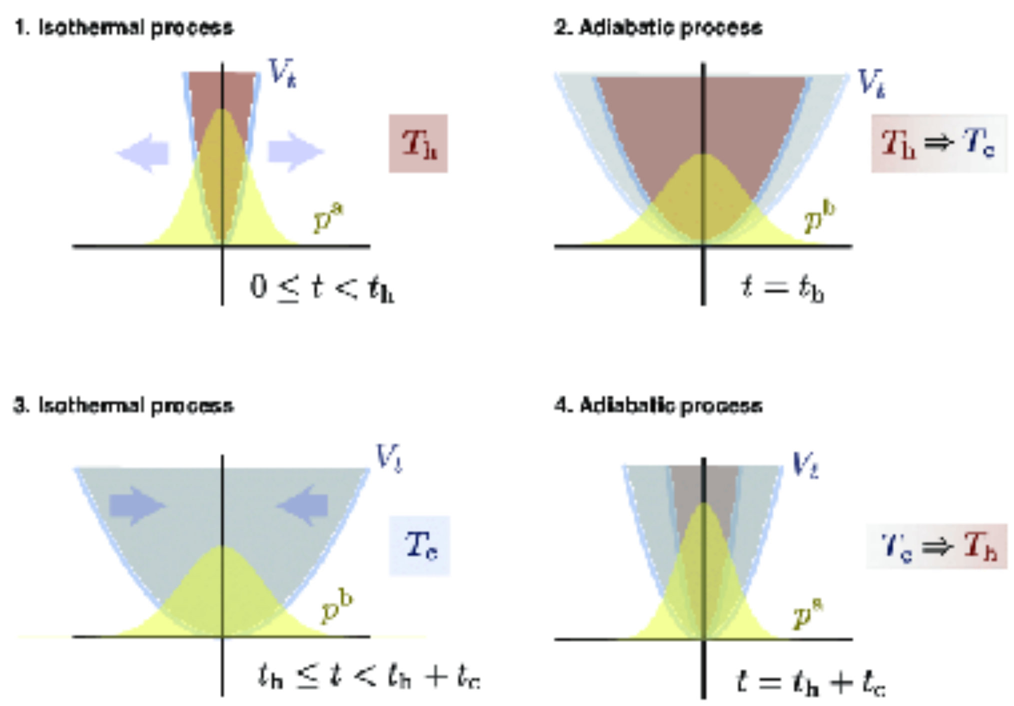
解決してよかったね….

(t=0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 and 1)

Lei Zhu, et al. IEEE trans on image processing, 16, 1481 (2007).

Liu, H., Gu, X., & Samaras, D. (2019). Wasserstein gan with quadratic transport cost. In *Proceedings of the IEEE/CVF international conference on computer vision* (pp. 4832-4841)

最適輸送問題が真に「面白い」のはここから！！！



Nakazato, M., & Ito, S. (2021). Geometrical aspects of entropy production in stochastic thermodynamics based on Wasserstein distance. *Physical Review Research*, 3(4), 043093

確率 × 幾何学!

$$c(x, y) = \|x - y\|_2^2 \qquad C_{\mathrm{M}}(p, q) = C(p, q)$$

は距離の"二乗"の期待値の最小化だった。

気持ち悪いのでルート取りたくない？ $\mathscr{W}(p, q) = \sqrt{C_{\mathrm{M}}(p, q)} = \sqrt{C(p, q)}$

実はこの$\mathscr{W}(p, q)$は「確率分布の世界」で「距離の公理」を満たす！: **L-2 Wasserstein距離**

$$\mathscr{W}(p, q) \geq 0 \qquad \mathscr{W}(p, q) = \mathscr{W}(q, p)$$

$$\mathscr{W}(p, q) = 0 \Leftrightarrow p = q \qquad \mathscr{W}(p, q) \leq \mathscr{W}(p, r) + \mathscr{W}(r, q)$$

(確率分布$p(x)$, $q(y)$, $r(z)$に対して、$\|x\|_2^2$, $\|y\|_2^2$, $\|z\|_2^2$の期待値が有限の値を持つ下で)

最適な輸送の総コストが距離を与える

確率分布

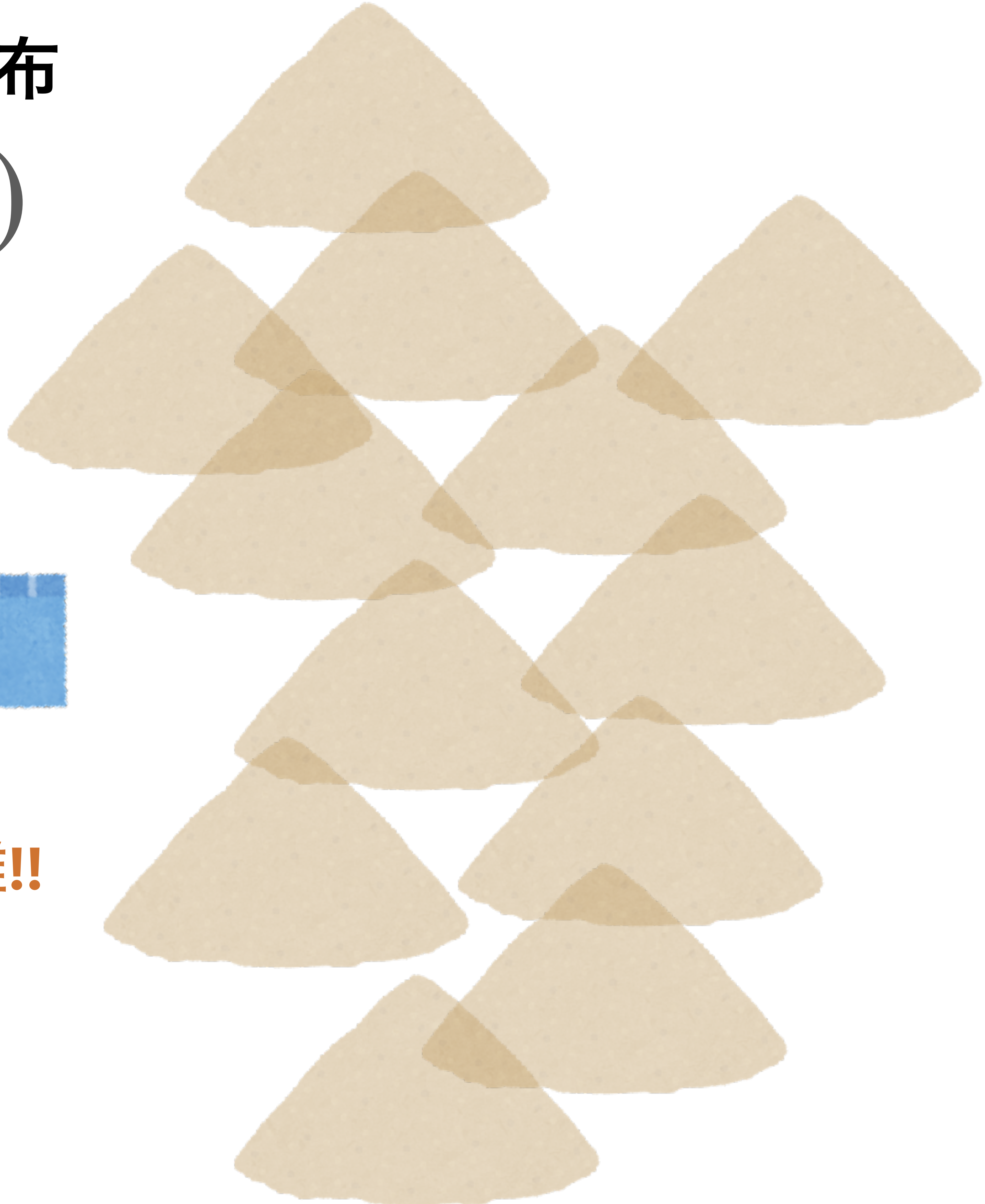
$p(x)$

確率分布

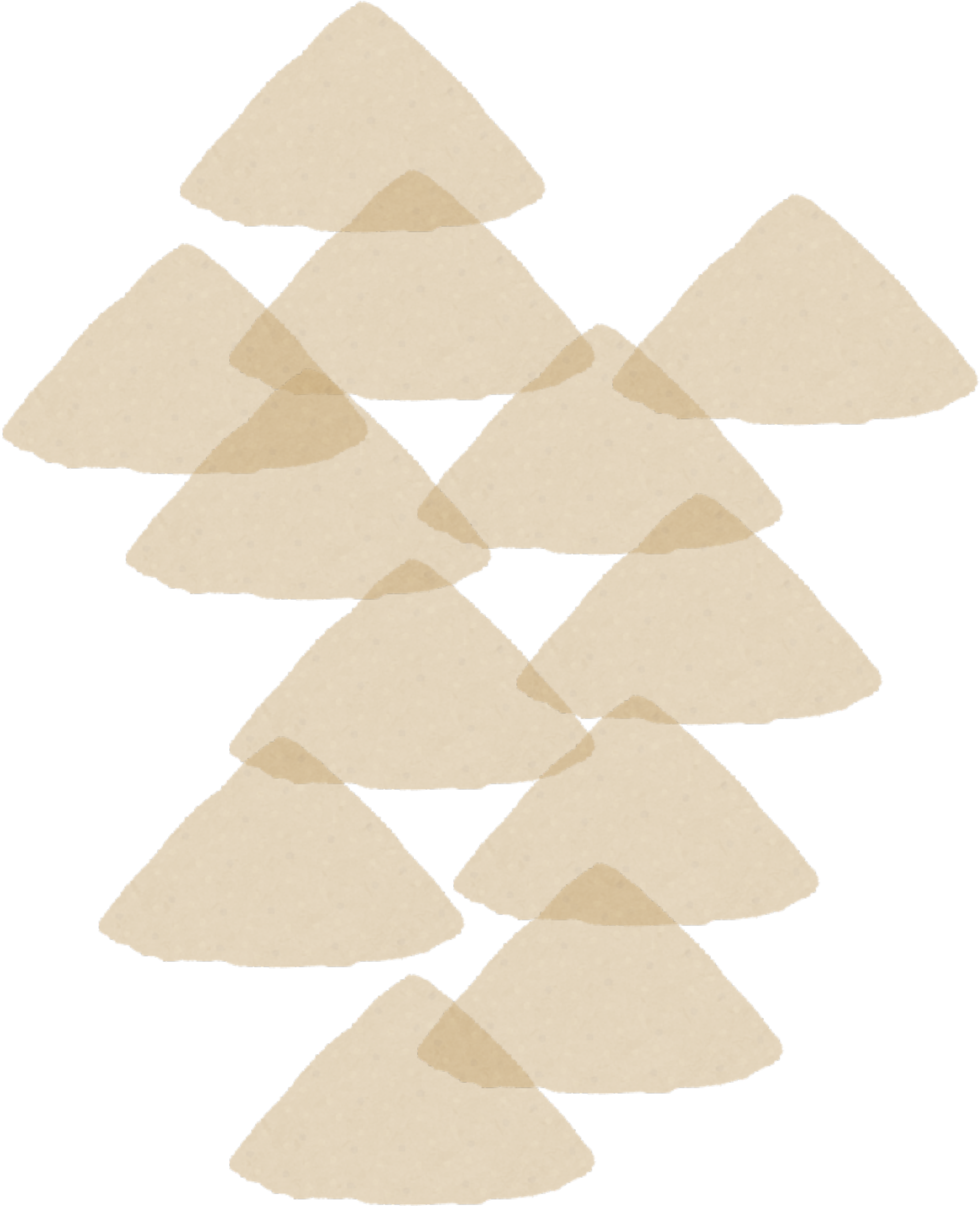
$q(y)$

$\mathscr{W}(p, q)$

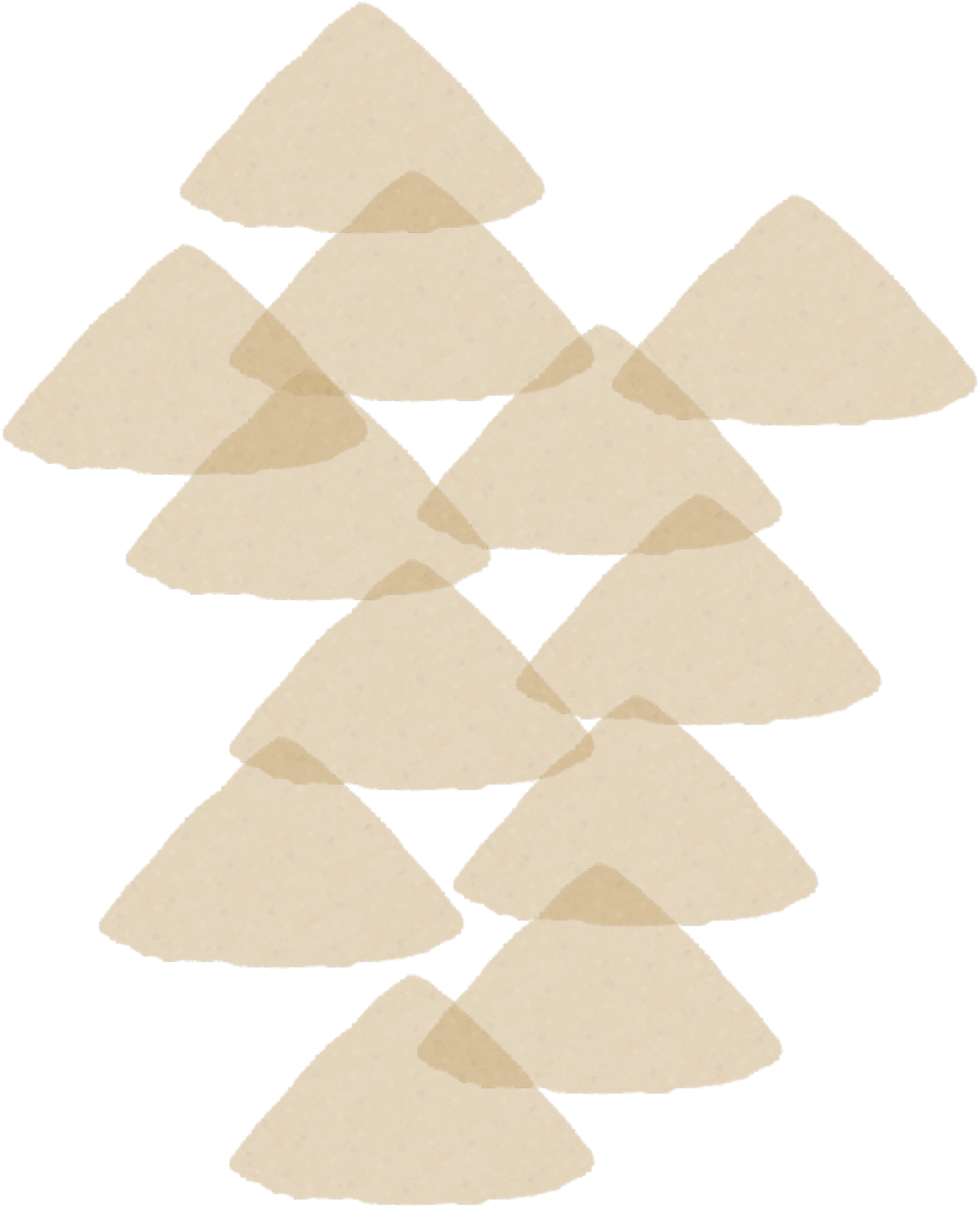
pの砂山と、qの砂山の距離!!



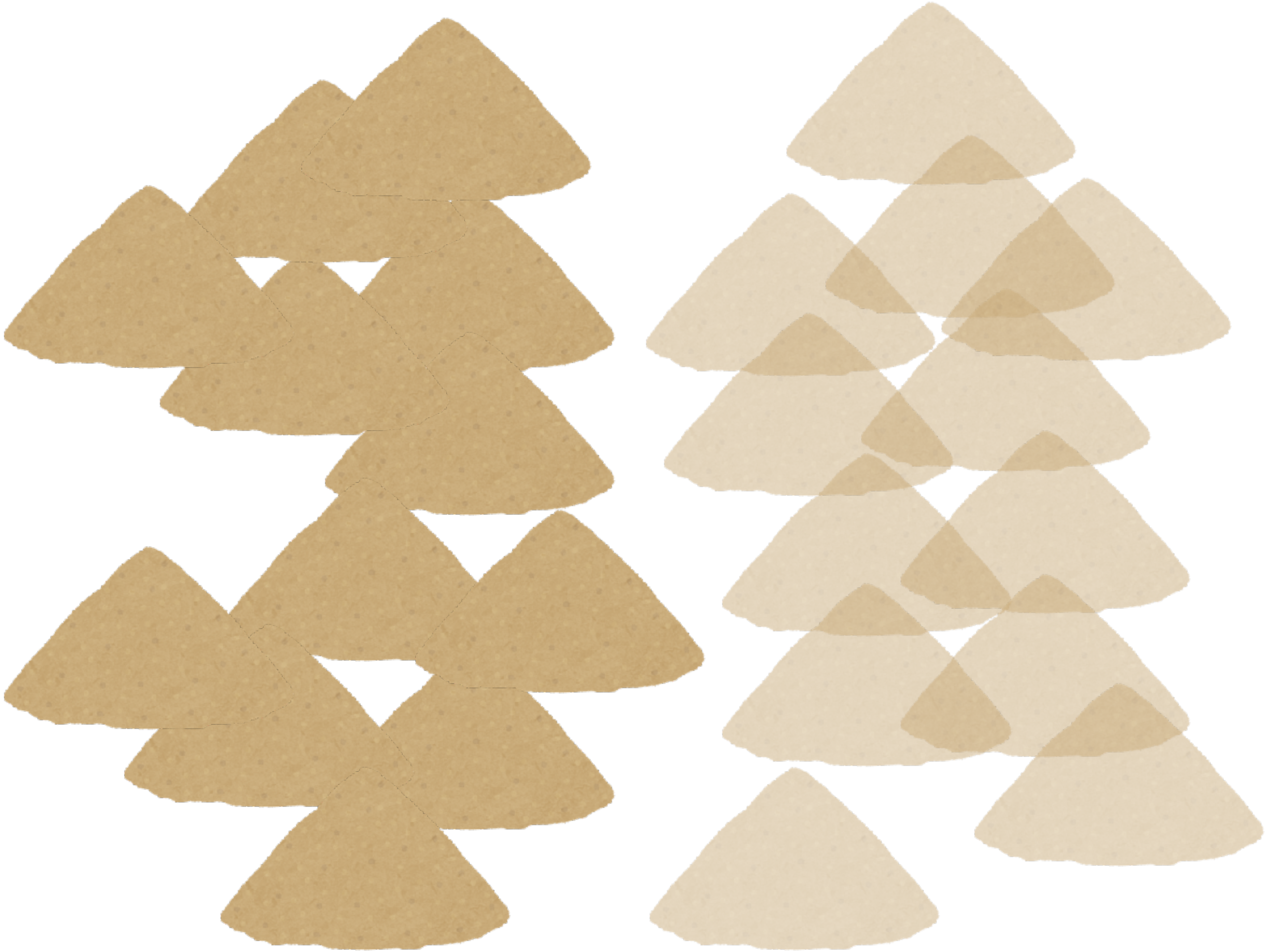
L-2 WASSERSTEIN距離を短くしていこう



L-2 WASSERSTEIN距離を短くしていこう



L-2 WASSERSTEIN距離を短くしていこう



L-2 WASSERSTEIN距離を短くしていこう

L-2 WASSERSTEIN距離を短くしていこう

全てのaで $p(x=a)=q(y=a)$

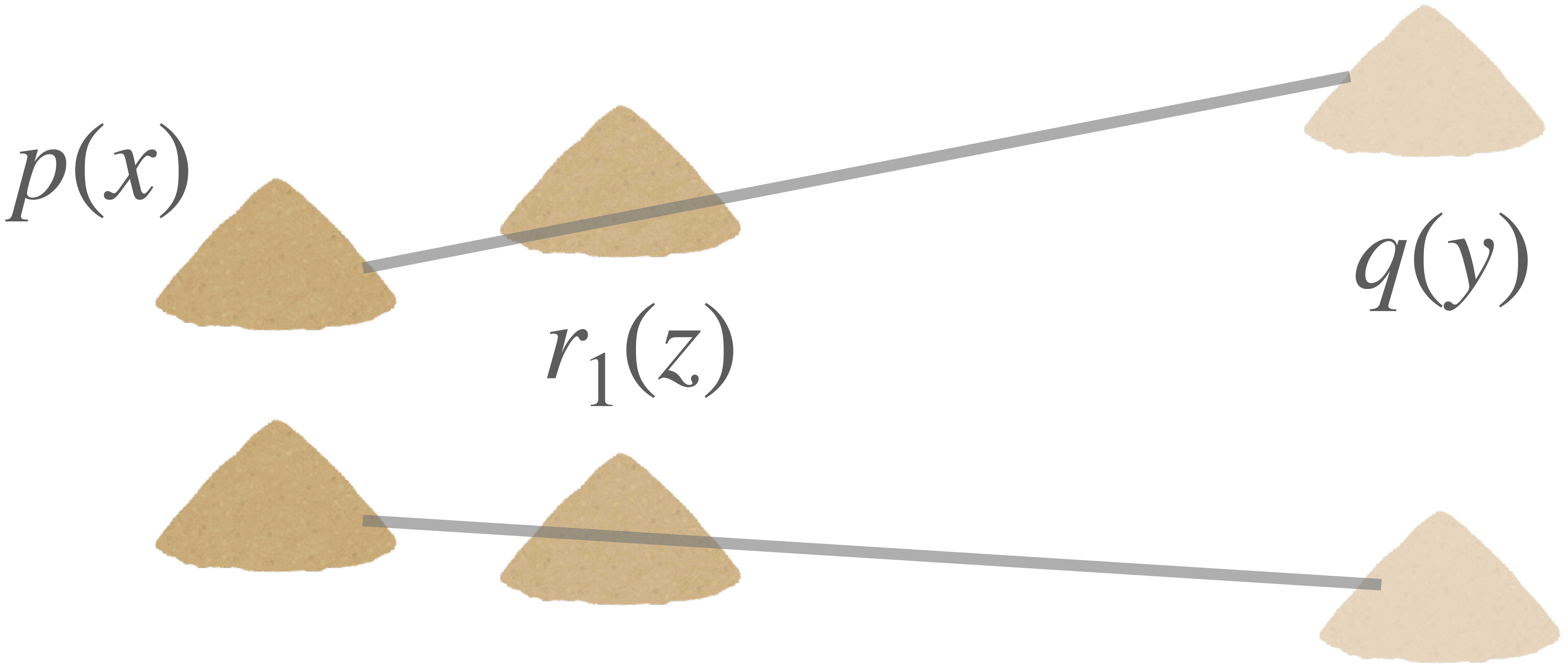
$$\mathscr{W}(p,q)=0$$

(動かさなければ総コストは当然0)

L-2 WASSERSTEIN距離の世界で「真っ直ぐ」動かす！

$$\mathscr{W}(p, q) = \mathscr{W}(p, r_t) + \mathscr{W}(r_t, q)$$

「真っ直ぐ」
＝三角不等式の等号成立を満たすように

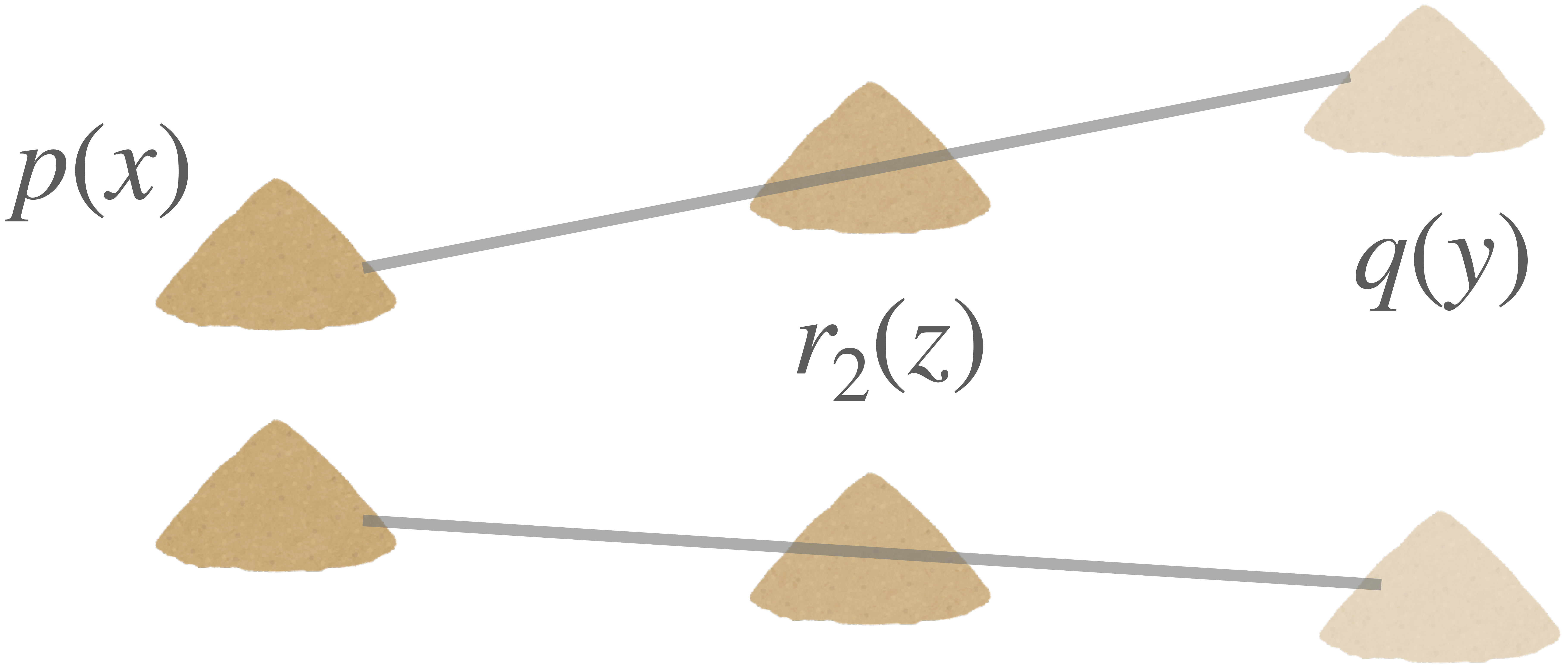


(r_tにおけるtは動かすためのパラメーター)

L-2 WASSERSTEIN距離の世界で「真っ直ぐ」動かす！

$$\mathscr{W}(p,q) = \mathscr{W}(p,r_t) + \mathscr{W}(r_t,q)$$

「真っ直ぐ」
＝三角不等式の等号成立を満たすように

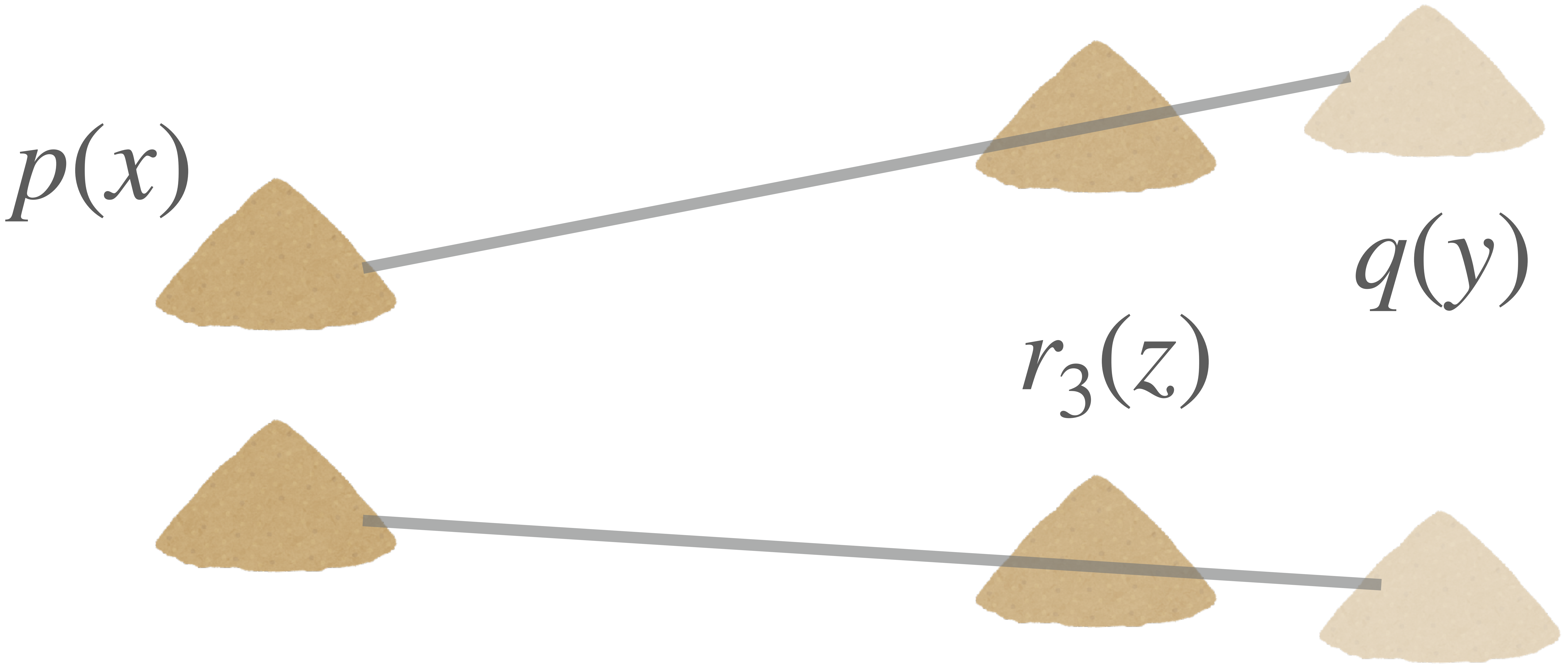


(r_tにおけるtは動かすためのパラメーター)

L-2 WASSERSTEIN距離の世界で「真っ直ぐ」動かす！

$$\mathscr{W}(p,q) = \mathscr{W}(p,r_t) + \mathscr{W}(r_t,q)$$

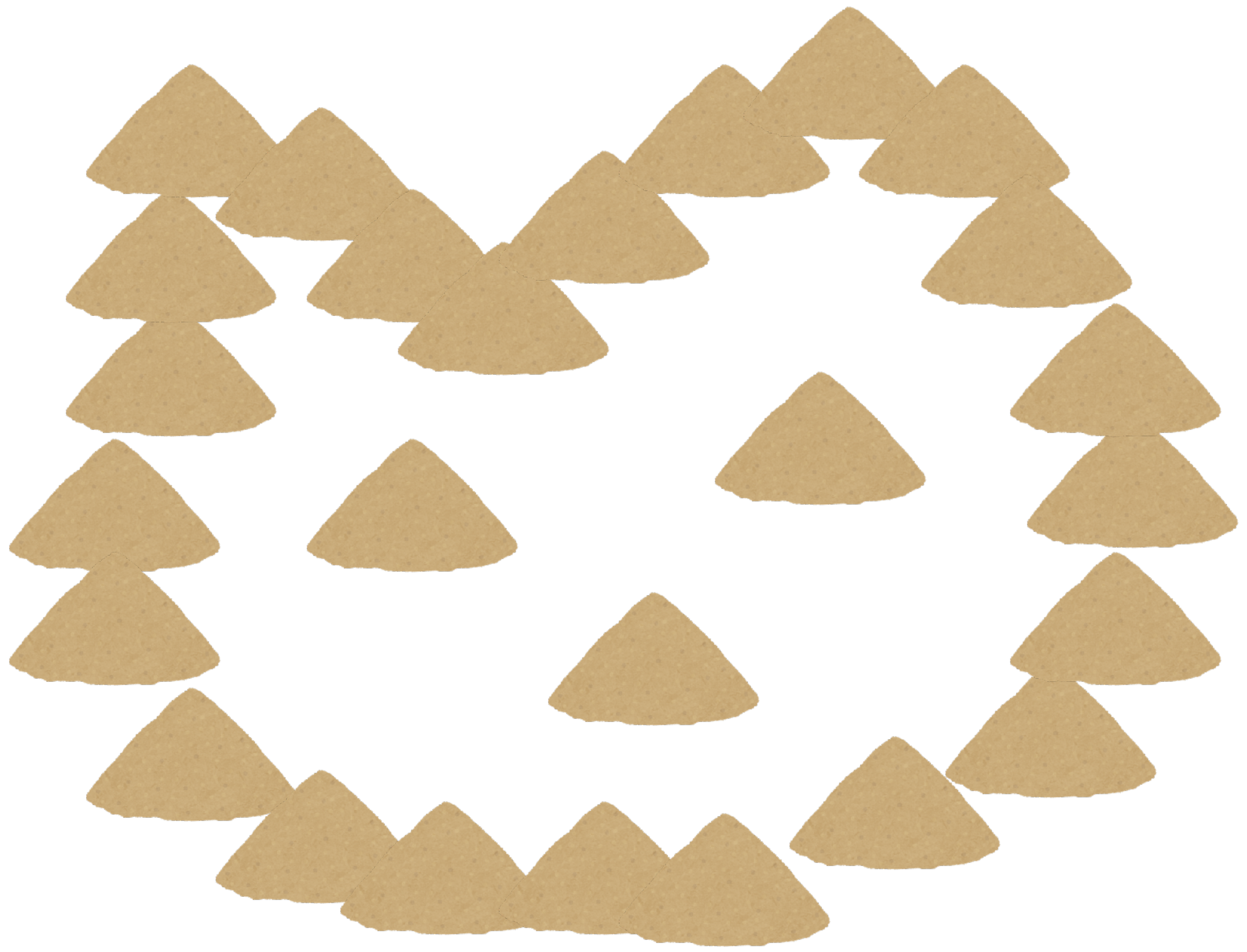
「真っ直ぐ」
＝三角不等式の等号成立を満たすように



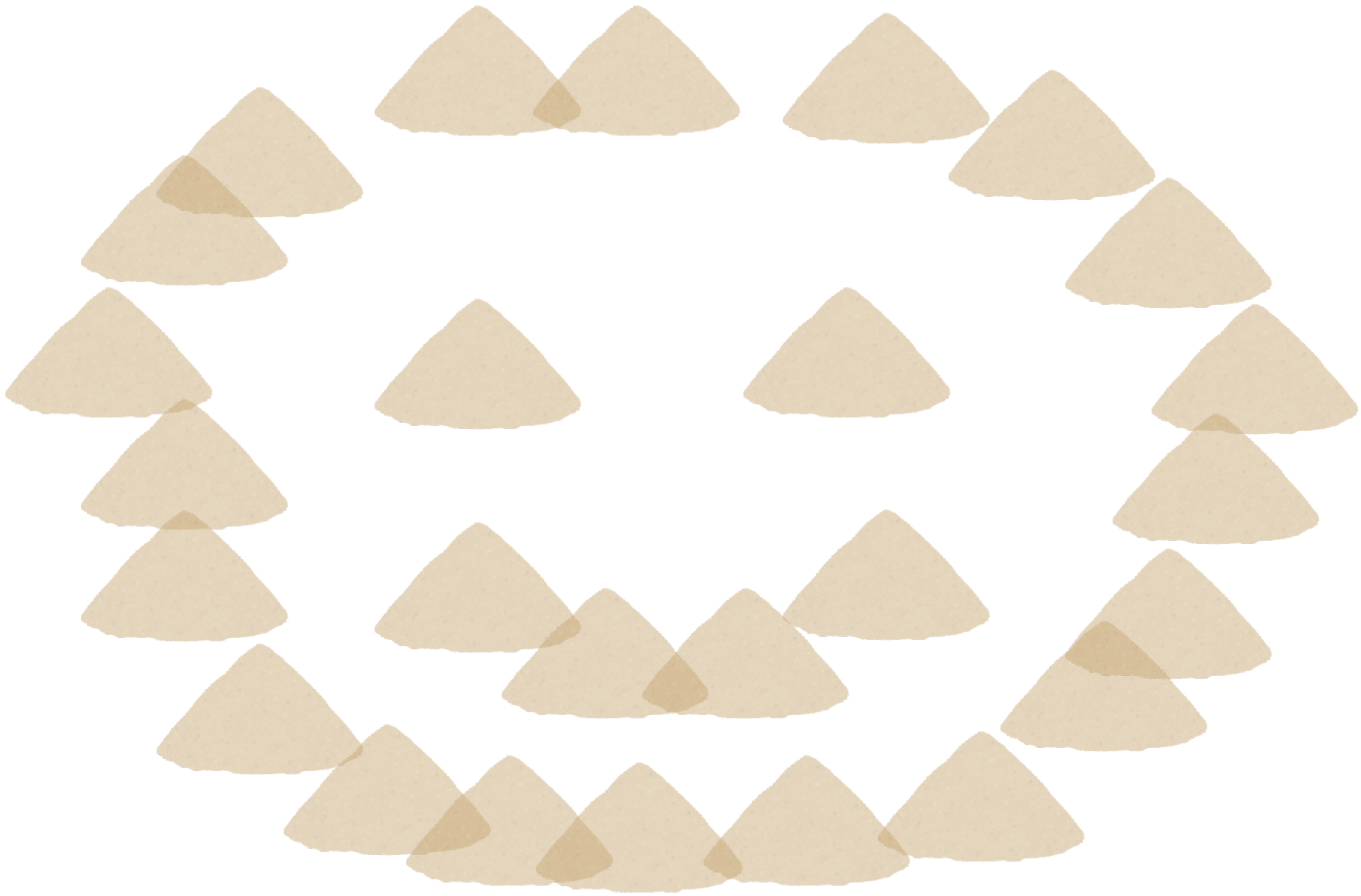
(r_tにおけるtは動かすためのパラメーター)

絵も確率分布…？

$p(x)$ $r_t(z)$ $q(y)$



?



素朴な最適輸送による中間画像の作成

$p(x)$ $\qquad$ $r_t(z)$ $\qquad$ $q(y)$

(t=0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 and 1)

Lei Zhu, et al. IEEE trans on image processing, 16, 1481 (2007).

最初の絵と最後の絵だけ存在。真ん中の４つの絵は「真っ直ぐ」動かして作ったもの

機械学習 × L-2 WASSERSTEIN距離 (WASSERSTEIN GAN)

確率分布から生成した偽物の画像が「人間の顔」か「否」かを、 **L-2 Wasserstein距離に基づいて判断させる**

機械学習で作り出した偽物の人間 $p(x)$

$q(x)$

本物の人の顔

機械学習で作り出した偽物の犬 $p'(x)$

$\mathscr{W}(p,q) \simeq 0.$ お前の顔を生成する確率分布は

L-2 Wasserstein距離的に人間の顔っぽい

$\mathscr{W}(p',q) \gg 1.$ お前の顔を生成する確率分布は

L-2 Wasserstein距離的に人間の顔じゃない

機械学習 × L-2 WASSERSTEIN距離 (WASSERSTEIN GAN)

確率分布から生成した偽物の画像が「人間の顔」か「否」かを、 **L-2 Wasserstein距離に基づいて判断させる**

機械学習で作り出した偽物の人間 $p(x)$

$q(x)$

機械学習で作り出した偽物の犬 $p'(x)$

人間の顔を生成する確率分布の集合を作ることができる。

本物の人の顔

$\mathscr{W}(p,q) \simeq 0.$ お前の顔を生成する確率分布は

L-2 Wasserstein距離的に人間の顔っぽい

$\mathscr{W}(p',q) \gg 1.$ お前の顔を生成する確率分布は

L-2 Wasserstein距離的に人間の顔じゃない

機械学習 × L-2 WASSERSTEIN距離 (WASSERSTEIN GAN)

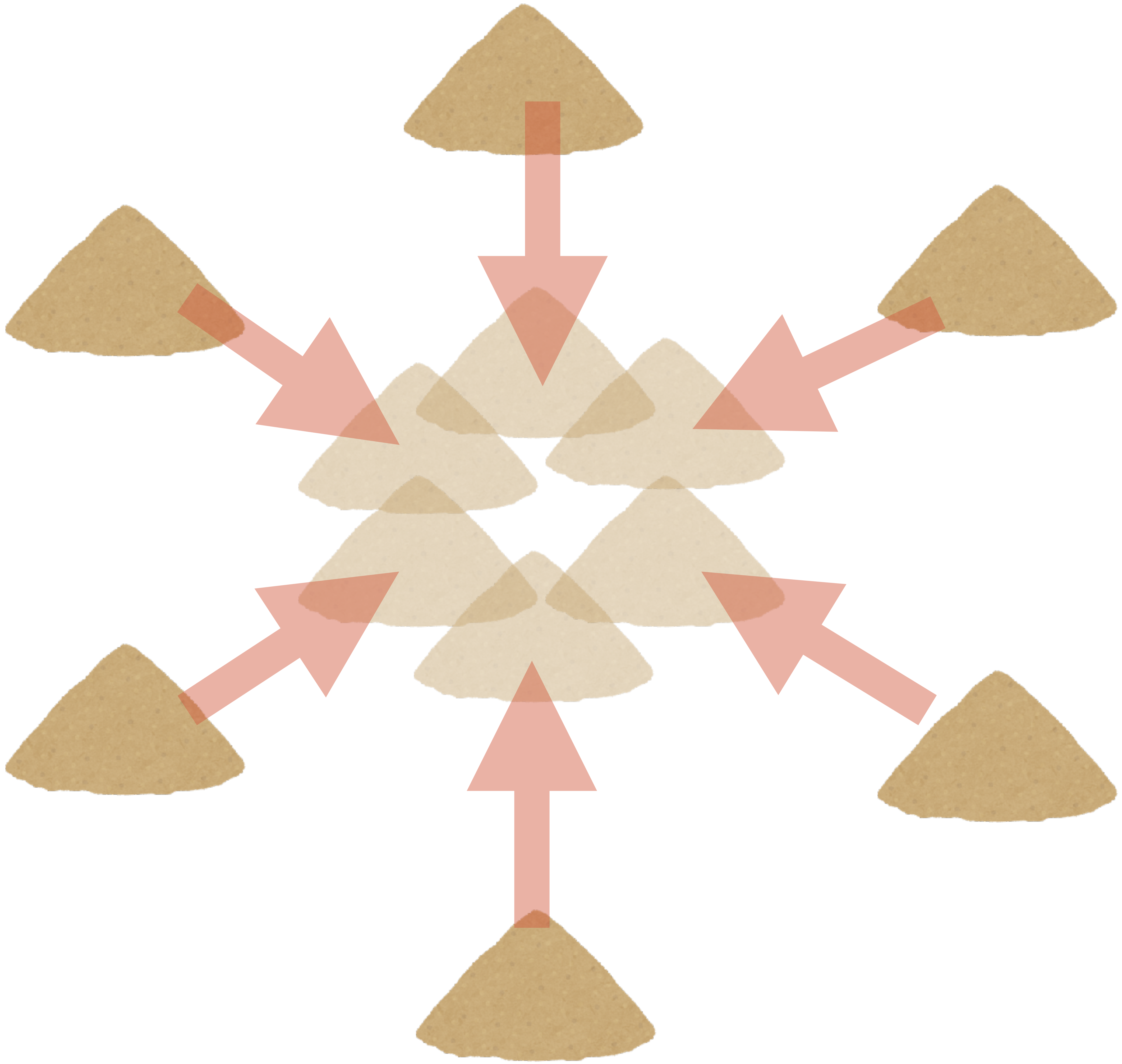
「人間の顔」を生成する確率分布の集合の中だけで、顔を「輸送」をすることもできる！

Liu, H., Gu, X., & Samaras, D. (2019). Wasserstein gan with quadratic transport cost. In *Proceedings of the IEEE/CVF international conference on computer vision* (pp. 4832-4841)

最適輸送理論 × 物理学 (流体力学)

➤ Benamou-Brenierの流体力学的解法 (2000)

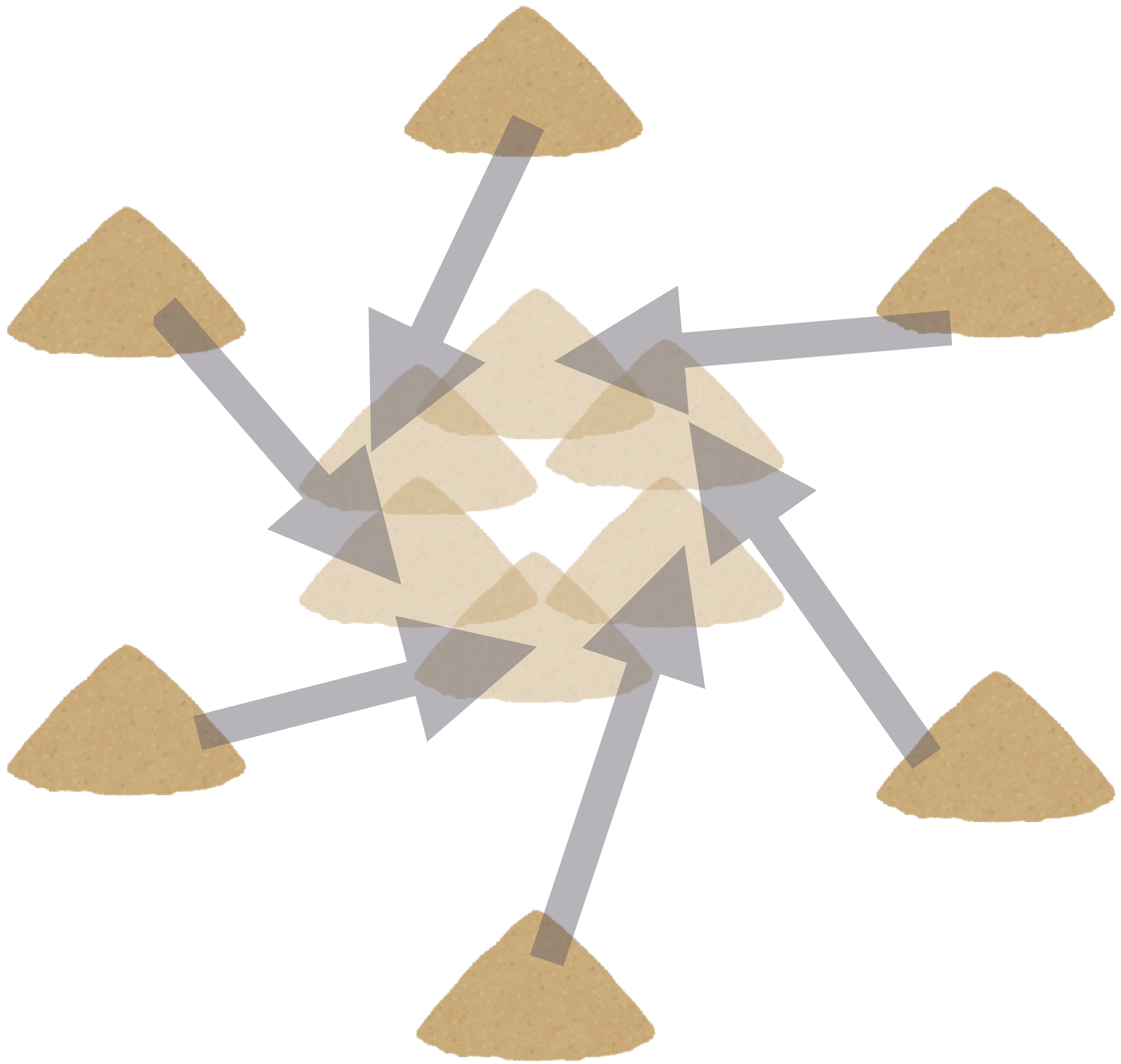
最適な輸送とそうでない輸送



最適輸送理論 × 物理学 (流体力学)

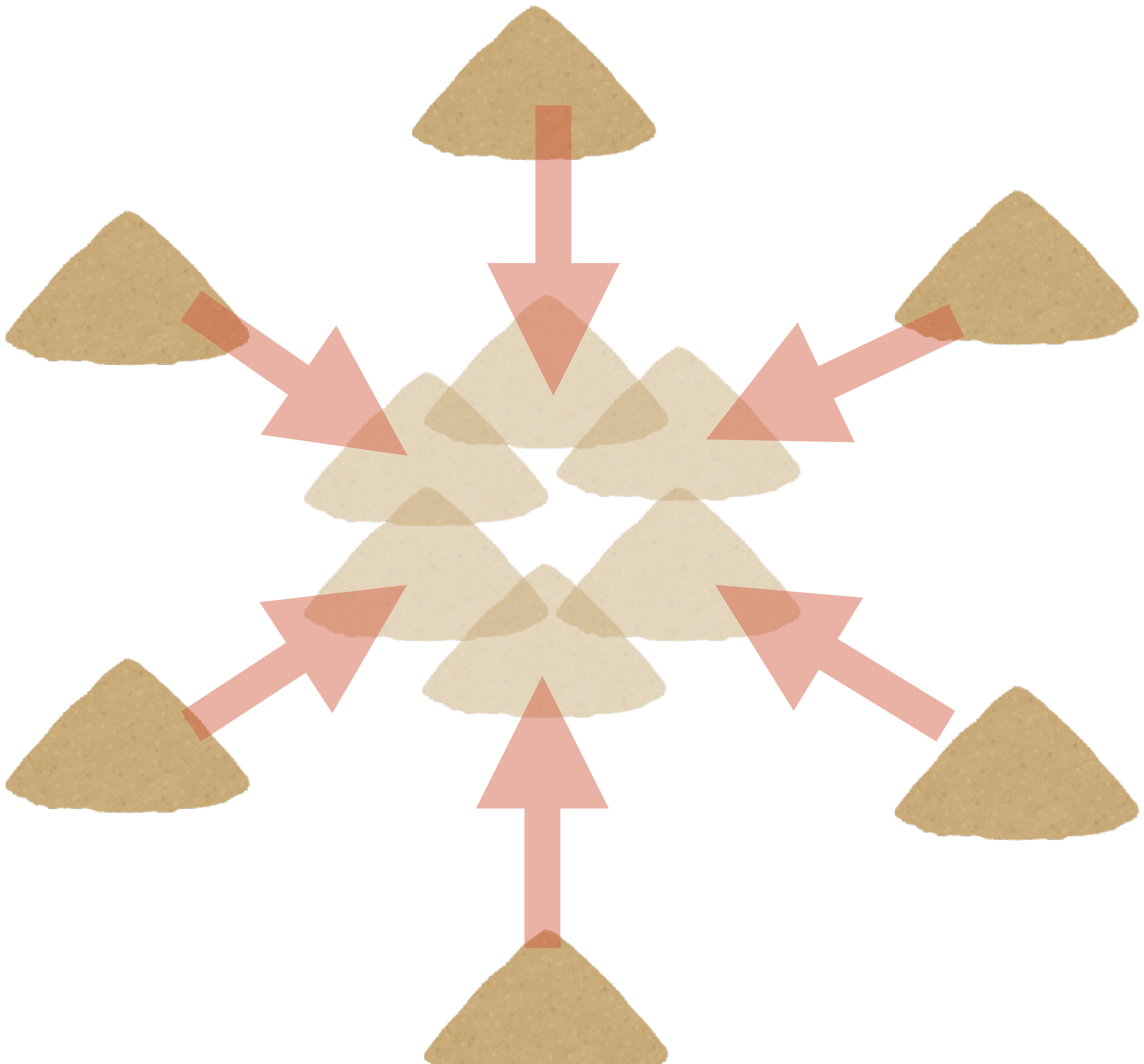
➤ Benamou-Brenierの流体力学的解法 (2000)

最適な輸送とそうでない輸送

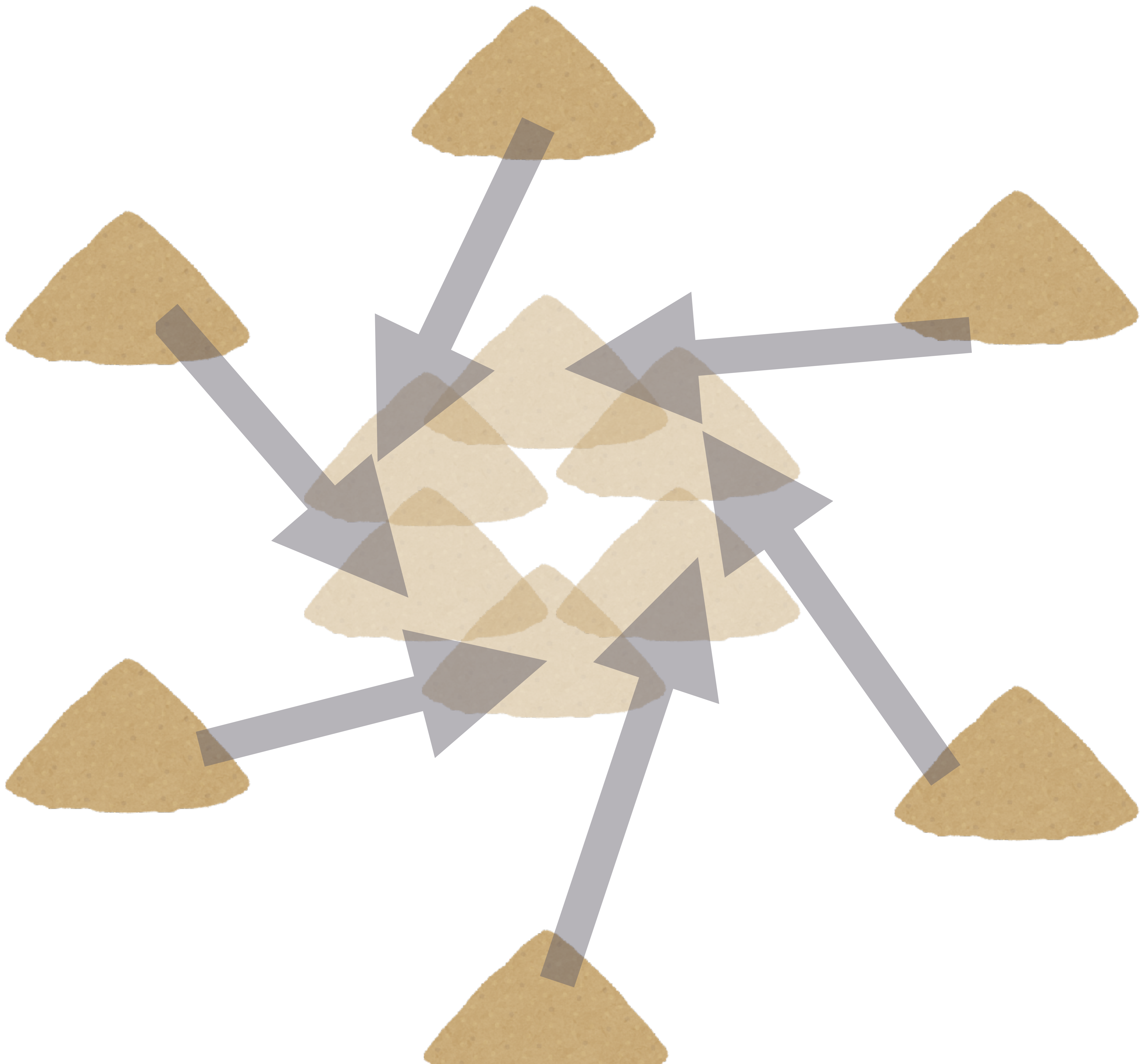


最適輸送理論 × 物理学 (流体力学)

➤ Benamou-Brenierの流体力学的解法 (2000)



最適でない輸送は「渦」が生じる！

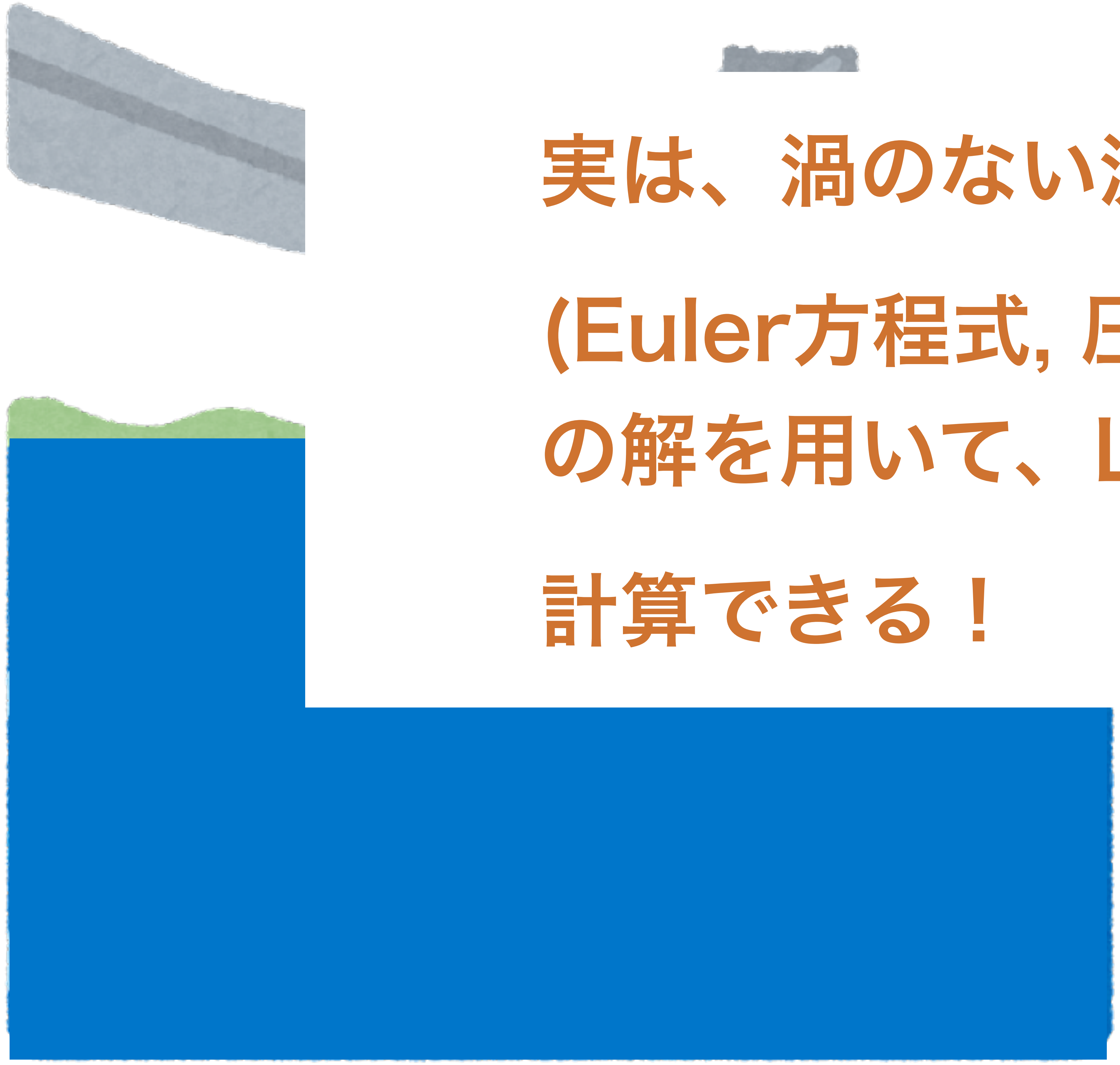


最適輸送理論 × 物理学 (流体力学)

- Benamou-Brenierの流体力学的解法 (2000)

最適輸送理論 × 物理学 (流体力学)

- Benamou-Brenierの流体力学的解法 (2000)



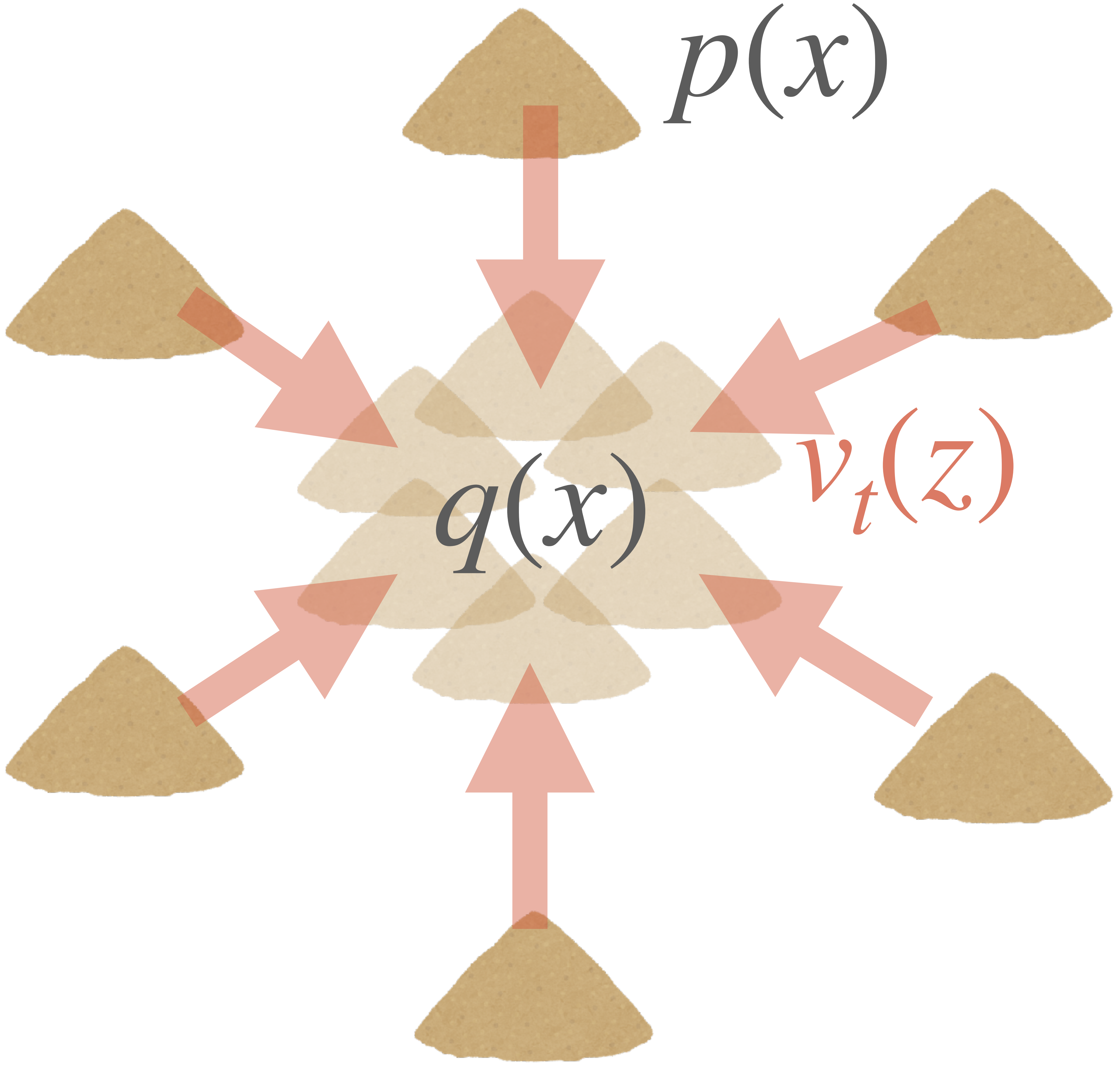
実は、渦のない流体を記述する方程式

(Euler方程式, 圧力なしポテンシャル流れ)

の解を用いて、L-2 Wasserstein距離が

計算できる！

BENAMOU-BRENIERの公式 (2000)



- Benamou-Brenierの公式 (2000)

渦のない流体を記述する方程式で得られる

時々刻々と時間変化する時刻tでの

速度場(ベクトル)$v_t(z)$と確率分布$r_t(z)$を使って

$$\mathscr{W}(p,q) = \sqrt{\tau \int_0^\tau \int \|v_t(z)\|^2 r_t(z) dz dt}$$

$r_t(z)$は「真っ直ぐ」動く確率分布 (時刻tでの確率分布)

ただし時刻$t=0$で, 任意のaで$r_{t=0}(z=a) = p(x=a)$

時刻$t=\tau$で, 任意のaで$r_{t=\tau}(z=a) = q(y=a)$

コーヒーカップの中のラテアート

時刻$t = 0$

時刻$t = \tau$

さらに…時間の向き、熱力学的な不可逆性へ

時刻$t = 0$

時間の向き

時刻$t = \tau$

時間が経つと元に戻せない。

時間の向きを決める熱力学的な「取り返し」のつかなさ (散逸)　=　エントロピー生成Σ

エントロピー生成は増えることはあっても減ることはない。$\Sigma \geq 0$　（熱力学第二法則）

これも...コーヒー内のミルクの「輸送」？

時刻$t = 0$

$\mathscr{W}(p, q)$

違いの距離を測る

時刻$t = \tau$

$p(x)$

ミルクの位置の確率分布

$q(y)$

熱力学 × 幾何学 (FEATURING 最適輸送)

時刻$t = 0$

$\mathscr{W}(p,q)$

違いの距離を測る

時刻$t = \tau$

時間の向きを決める熱力学的な「取り返し」のつかなさ（散逸) = エントロピー生成 Σ

$$\Sigma \geq \frac{\mathscr{W}(p,q)^2}{D\tau}$$

熱力学 **VS** 幾何学

ミルクの状態の変化を表す幾何学的な距離 $\mathscr{W}(p,q)^2$

(D: 拡散係数)

この辺から僕の研究...

熱力学第二法則の精密化

（みんな大好き）熱力学第二法則

$$\Sigma \geq 0$$

事実① 無限にゆっくり動かす(準静的極限)だと可逆にできるよ!

すなわち$\tau \to \infty$で$\Sigma = 0$が達成可能

熱力学的速度限界 (熱力学第二法則の精密化)

$$\Sigma \geq \frac{\mathscr{W}(p,q)^2}{D\tau} \geq 0$$

事実①' 無限にゆっくり動かすと可逆にできるよ!

なぜなら$\tau \to \infty$で$\dfrac{\mathscr{W}(p,q)^2}{D\tau} \to 0$

熱力学第二法則の精密化

（みんな大好き）熱力学第二法則

$$\Sigma \geq 0$$

事実① 無限にゆっくり動かす(準静的極限)だと可逆にできるよ!

すなわち$\tau \to \infty$で$\Sigma = 0$が達成可能

熱力学的速度限界 (熱力学第二法則の精密化)

$$\Sigma \geq \frac{\mathscr{W}(p,q)^2}{D\tau} \geq 0$$

事実①' 無限にゆっくり動かすと可逆にできるよ!

なぜなら$\tau \to \infty$で$\frac{\mathscr{W}(p,q)^2}{D\tau} \to 0$

事実② 残念なことに、有限の時間で$p(x)$から$q(y)$に動かしたら、絶対に$\Sigma > 0$になってしまうよね。τが小さいほど不可逆度が高いよね

熱力学第二法則の精密化、正体見たり枯れ尾花 (2000)…

- 正体は実は…Benamou-Brenierの公式 (2000)

$$\Sigma \geq \frac{\mathscr{W}(p,q)^2}{D\tau}$$

読み替え!

$$\mathscr{W}(p,q) = \sqrt{\tau \int_0^\tau \int \|v_t(z)\|^2 r_t(z) dz dt}$$

熱力学第二法則の精密化、正体見たり枯れ尾花 (2000)…

- 正体は実は…Benamou-Brenierの公式 (2000)

$$\Sigma \geq \frac{\mathscr{W}(p,q)^2}{D\tau}$$

読み替え!

$$\mathscr{W}(p,q) = \sqrt{\tau D \frac{1}{D} \int_0^\tau \int \|v_t(z)\|^2 r_t(z) dz dt} = \min \Sigma$$

- これを, ミルクの入ったコーヒーの世界でどう「熱力学的に」読み取るか…
  Jordan-Kinderlehrer-Otto (1998)

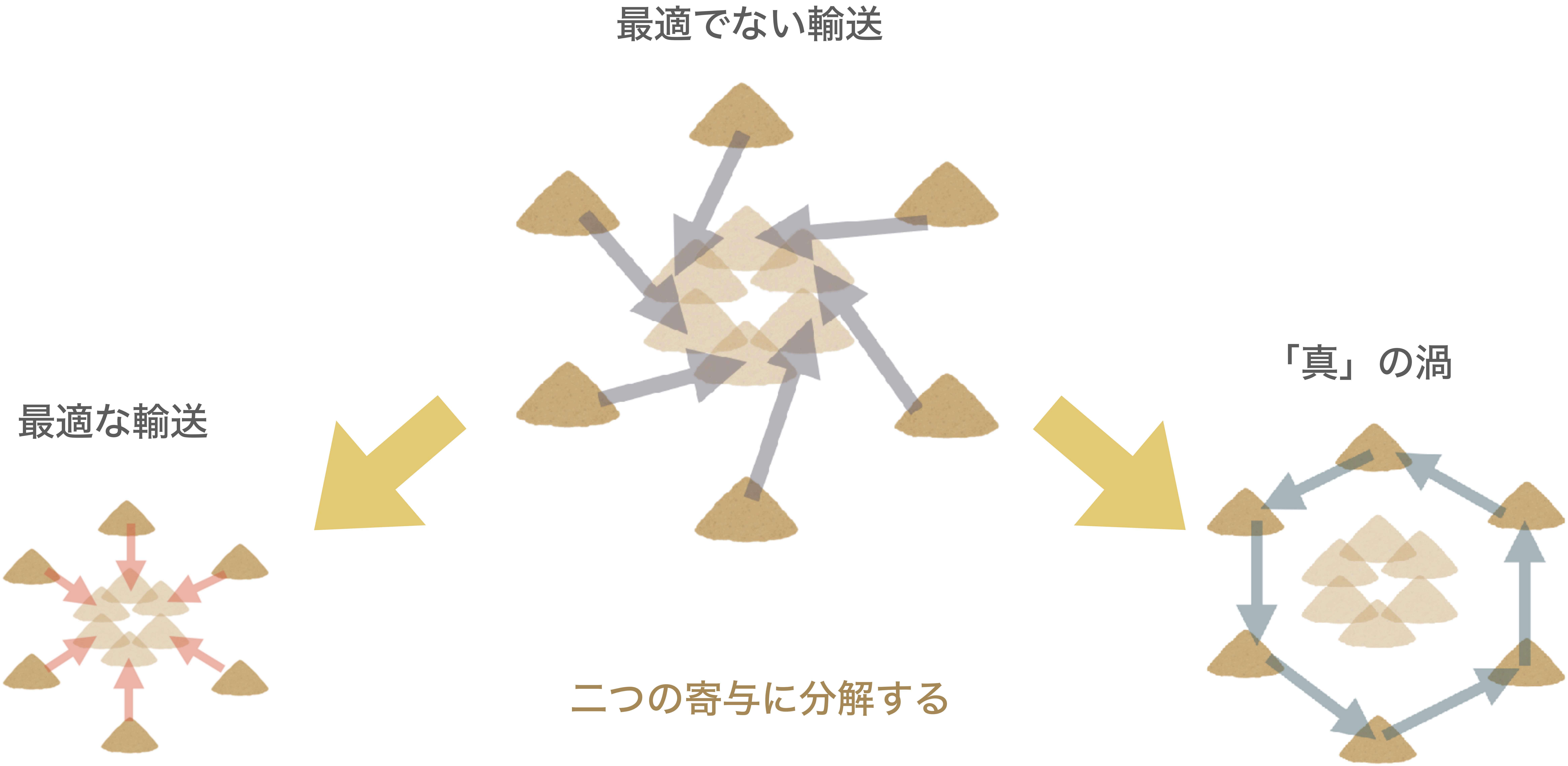
Jordan, R., Kinderlehrer, D., & Otto, F. (1998). The variational formulation of the Fokker--Planck equation. *SIAM journal on mathematical analysis*, *29*(1), 1-17.

- どう熱力学第二法則と結びつけるか…
  E. Aurell et al. (2012)

Aurell, E., Gawędzki, K., Mejía-Monasterio, C., Mohayaee, R., & Muratore-Ginanneschi, P. (2012). Refined second law of thermodynamics for fast random processes. *Journal of statistical physics*, *147*, 487-505.

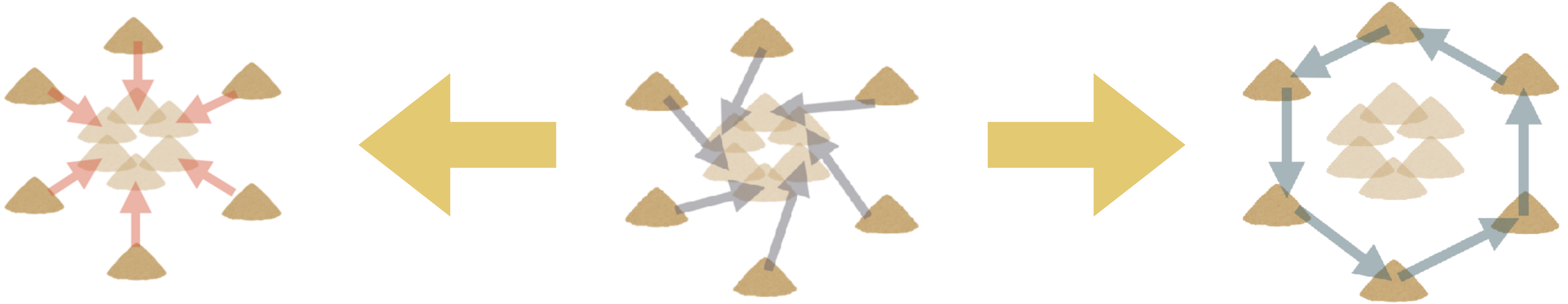
- これに基づいて「幾何学的な」熱力学の理論をどう作っていくか **(今、絶賛実行中！)**

例えば、熱力学 × 幾何学 (FEATURING 最適輸送)で何ができるの？



例えば、熱力学 × 幾何学 (FEATURING 最適輸送)で何ができるの？

渦でない σ_{ex}　　最適でない輸送の散逸 $\frac{d\Sigma}{dt}$　　「真」の渦 σ_{hk}



エントロピー生成 Σの時間変化率(エントロピー生成率)を二つの寄与に分解

$$\frac{d\Sigma}{dt} = \sigma_{\mathrm{ex}} + \sigma_{\mathrm{hk}}$$

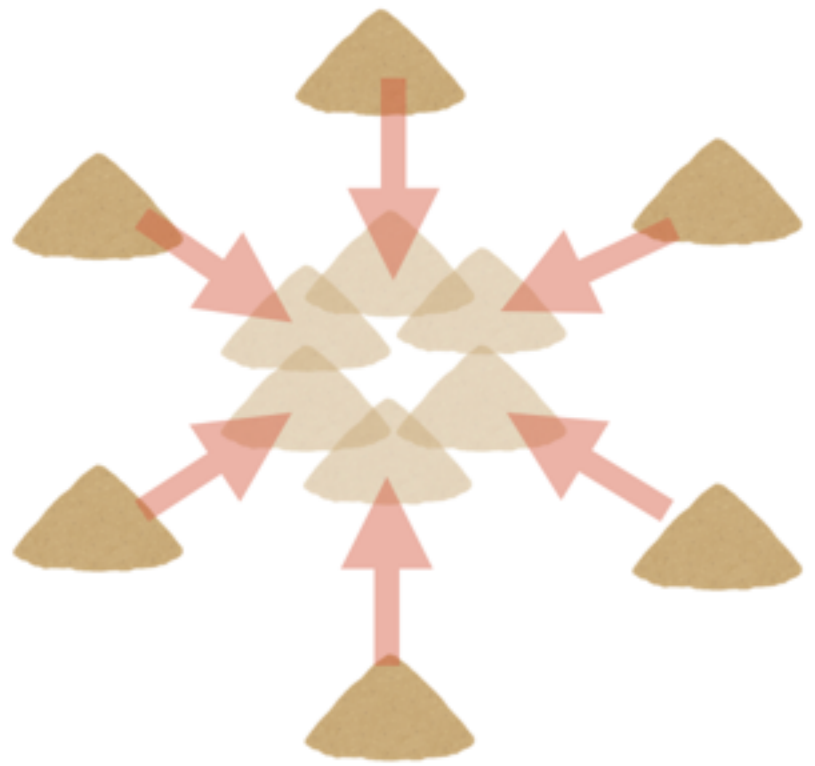
熱力学第二法則のさらなる精密化

例えば、熱力学×幾何学 (FEATURING 最適輸送)で何ができるの？

渦でない　σ_{ex}

最適でない輸送の散逸　$\dfrac{d\Sigma}{dt}$

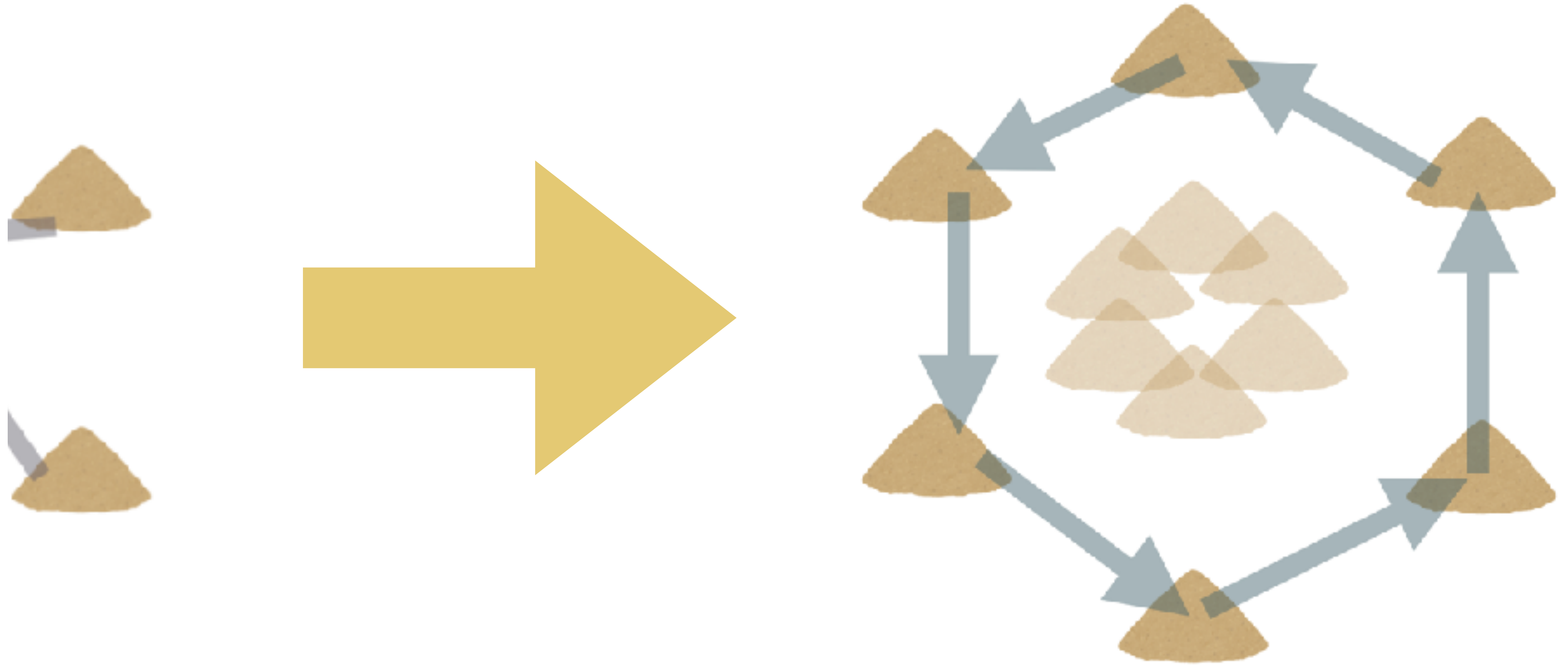
「真」の渦　σ_{hk}



$$\sigma_{\mathrm{ex}} = \frac{1}{D}\left(\lim_{\Delta t \to 0} \frac{\mathscr{W}(r_t, r_{t+\Delta t})}{\Delta t}\right)^2$$

L-2 Wasserstein距離

の世界での速さの二乗



エントロピー生成 Σの時間変化率(エントロピー生成率)を二つの寄与に分解

$$\frac{d\Sigma}{dt} = \sigma_{\mathrm{ex}} + \sigma_{\mathrm{hk}}$$

熱力学第二法則のさらなる精密化

状態変化させるのに必要な散逸：σ_{ex}

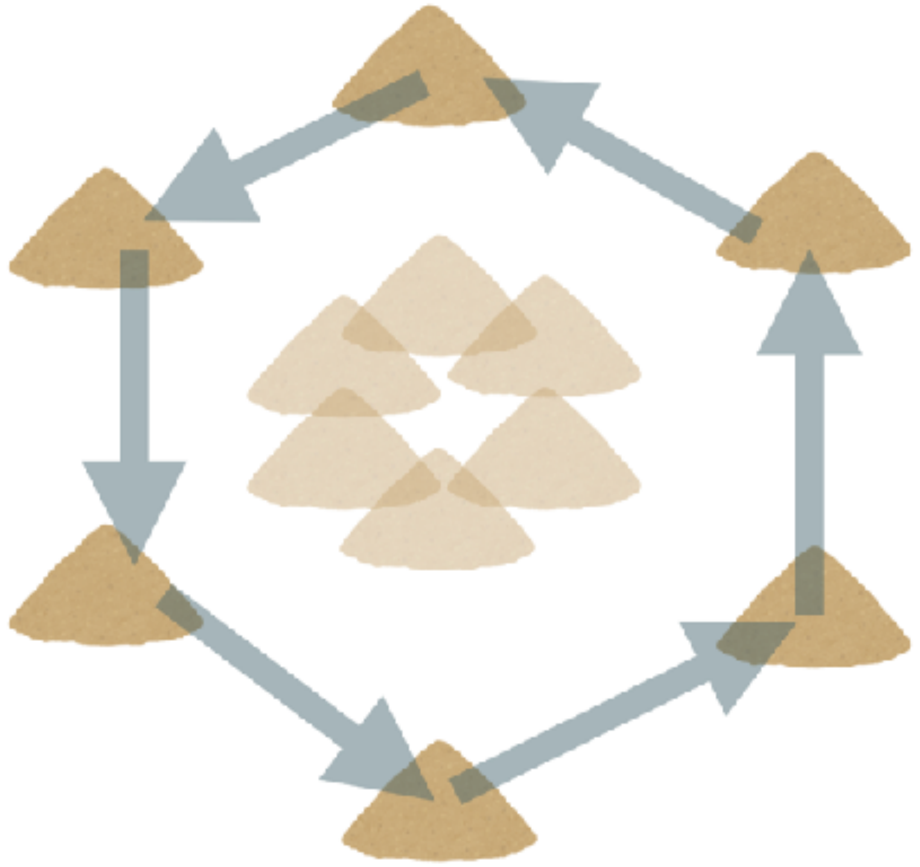
状態変化に寄与しない無駄な散逸：σ_{hk}

Nakazato, M., & Ito, S. (2021). Geometrical aspects of entropy production in stochastic thermodynamics based on Wasserstein distance. *Physical Review Research*, *3*(4), 043093.
Dechant, A., Sasa, S. I., & Ito, S. (2022). Geometric decomposition of entropy production in out-of-equilibrium systems. *Physical Review Research*, *4*(1), L012034.
Ito, S. (2023). Geometric thermodynamics for the Fokker–Planck equation: stochastic thermodynamic links between information geometry and optimal transport. *Information Geometry*, 1-42.

渦の散逸、見たことないですか？

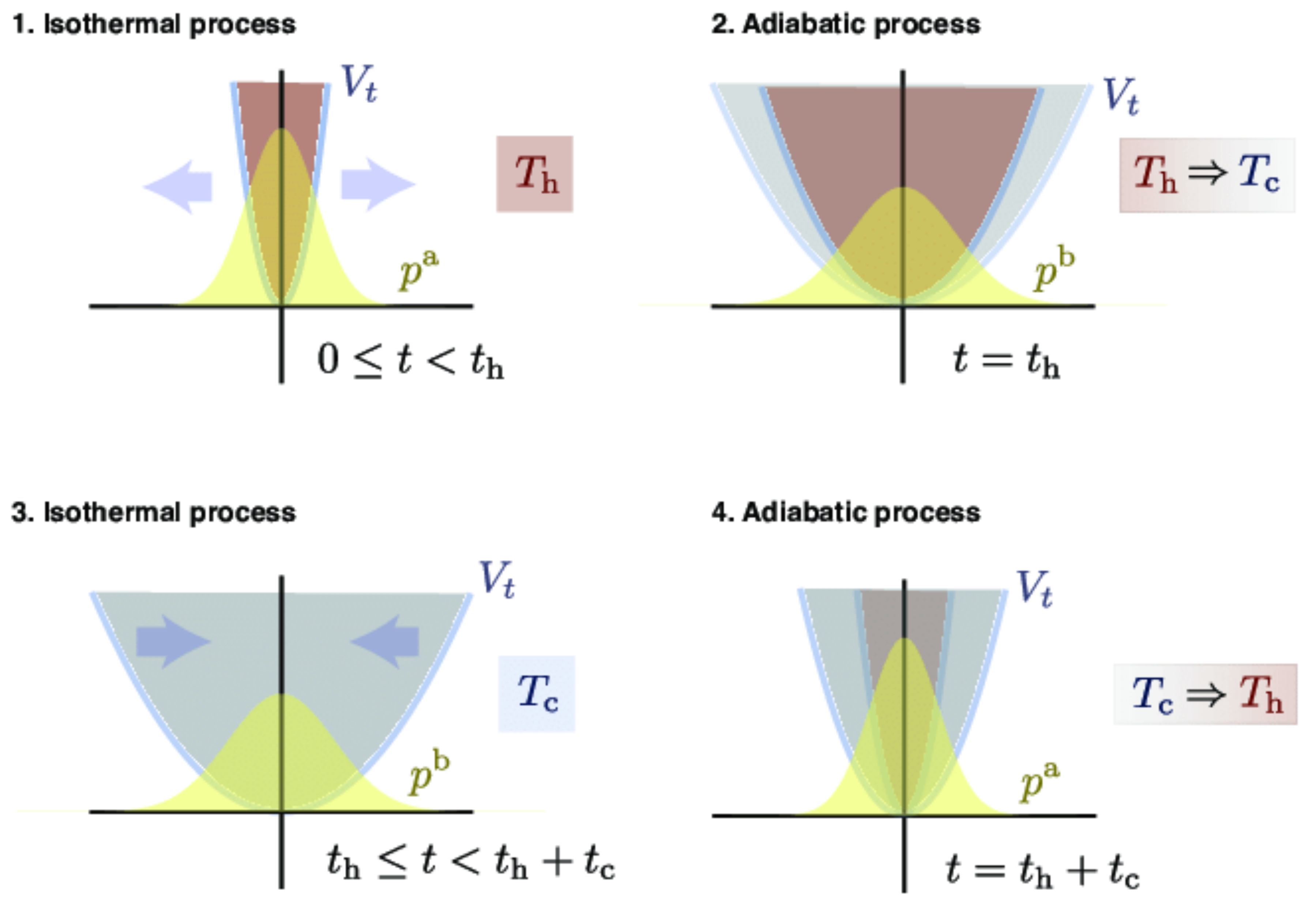
「真」の渦

σ_{hk}



散逸もわかれば、よい発電もわかる

有限時間で動かす「熱機関」



どうエンジンの状態(確率分布)を動かすか、
が最適な熱効率を決める。
コーヒー内のミルクの拡散のような系では、
L-2 Wasserstein距離が有限時間での最適な熱効率を決める！

Nakazato, M., & Ito, S. (2021). Geometrical aspects of entropy production in stochastic thermodynamics based on Wasserstein distance. *Physical Review Research*, *3*(4), 043093

残念なお知らせ。。。

熱力学　vs　幾何学

$$\Sigma \geq \frac{\mathscr{W}(p,q)^2}{D\tau}$$

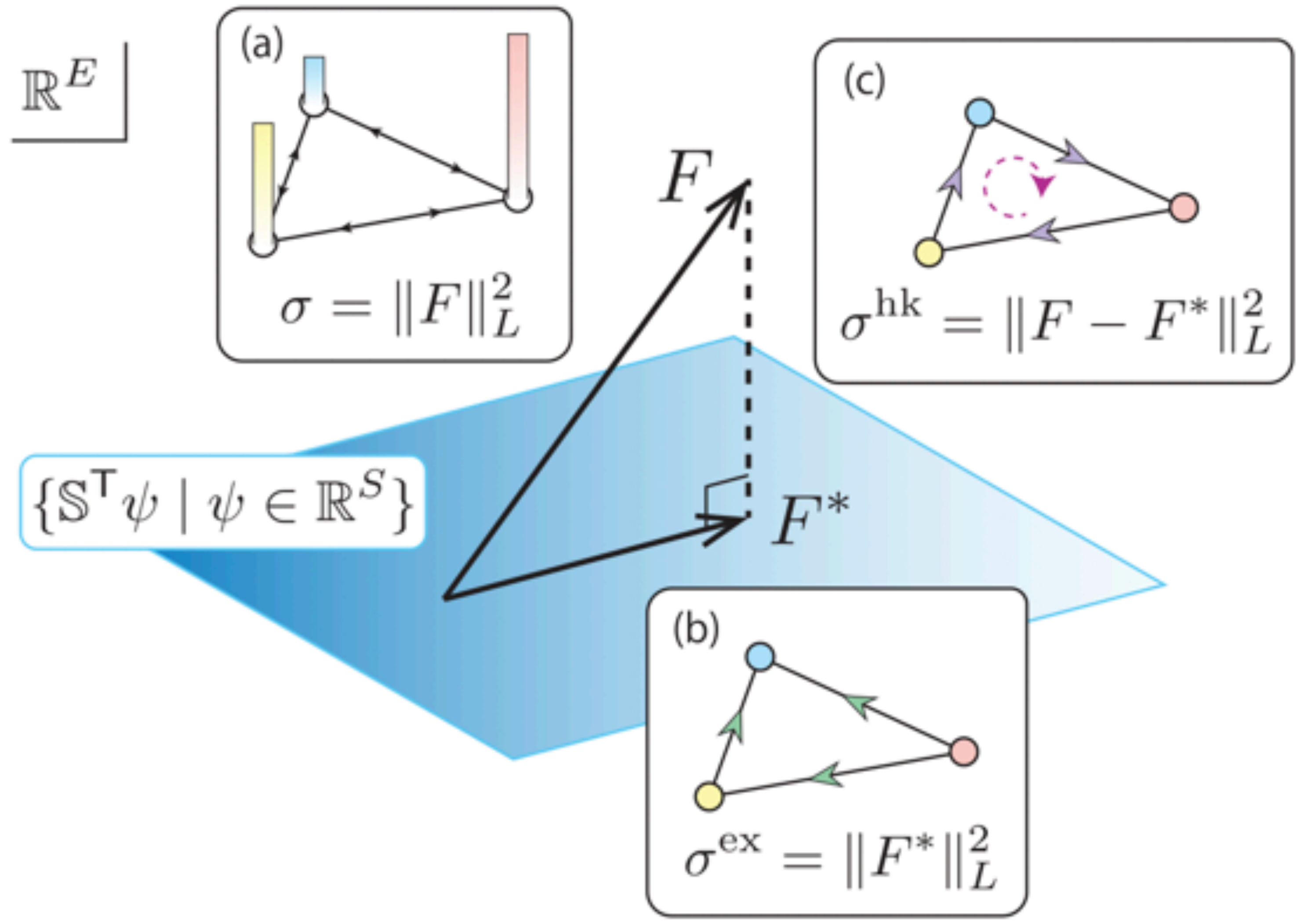
この式が成り立つのは、ミルクの拡散のような「拡散」系だけ…

ならば、これから作っていくしかない！

熱力学 vs 幾何学

$$\Sigma \geq \frac{(\text{distance})^2}{(\text{diffusion})\tau}$$

似たような式を、いろんな系で成り立つようにどんどん作ってゆけばいい



コンセプトは「渦」と「それ以外」

(決定論的な化学反応、一般の確率過程ver)

Yoshimura, K., Kolchinsky, A., Dechant, A., & Ito, S. (2023). Housekeeping and excess entropy production for general nonlinear dynamics. *Physical Review Research*, *5*(1), 013017.

熱力学と幾何学をコンセプトに新たな結果をどんどん作ろう！

(幾何学的な熱力学の創出へ)

Ito, S. (2023). Geometric thermodynamics for the Fokker–Planck equation: stochastic thermodynamic links between information geometry and optimal transport. *Information Geometry*, 1-42

まとめ　1/4

モノを効率よく輸送する話をしました

数学的には「最適輸送問題」と呼ばれます

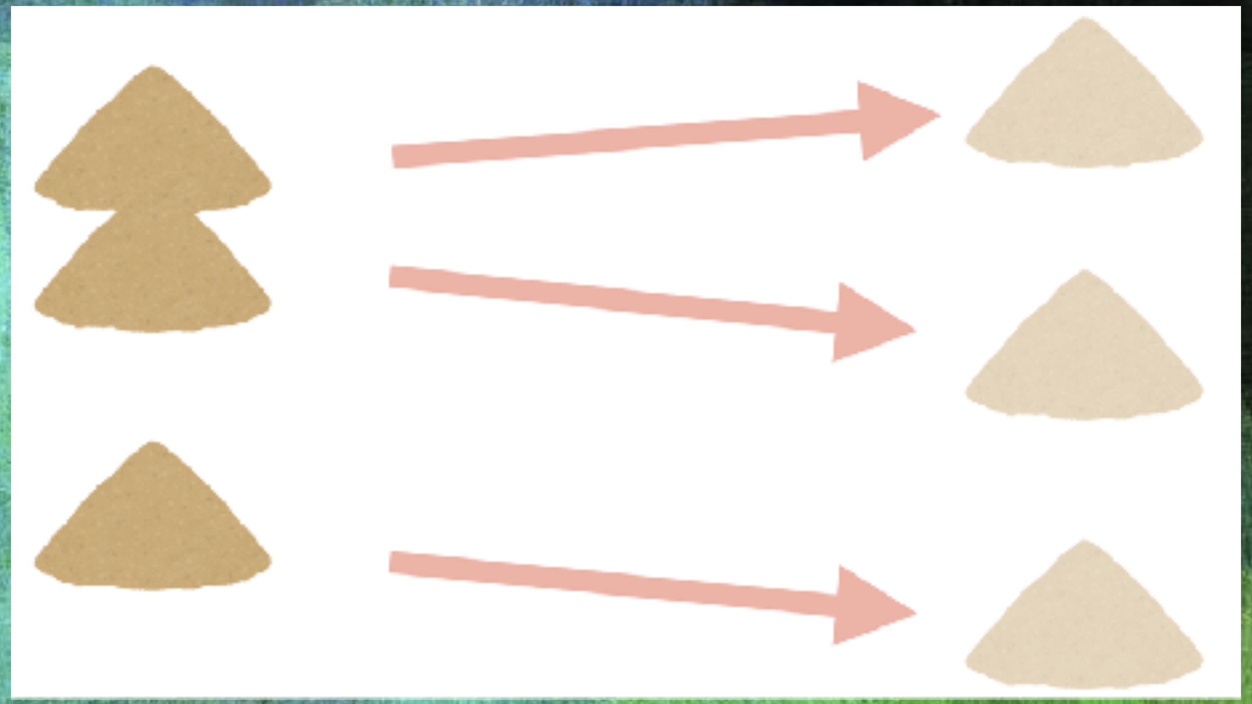
確率を使ってコストの期待値の最小化として

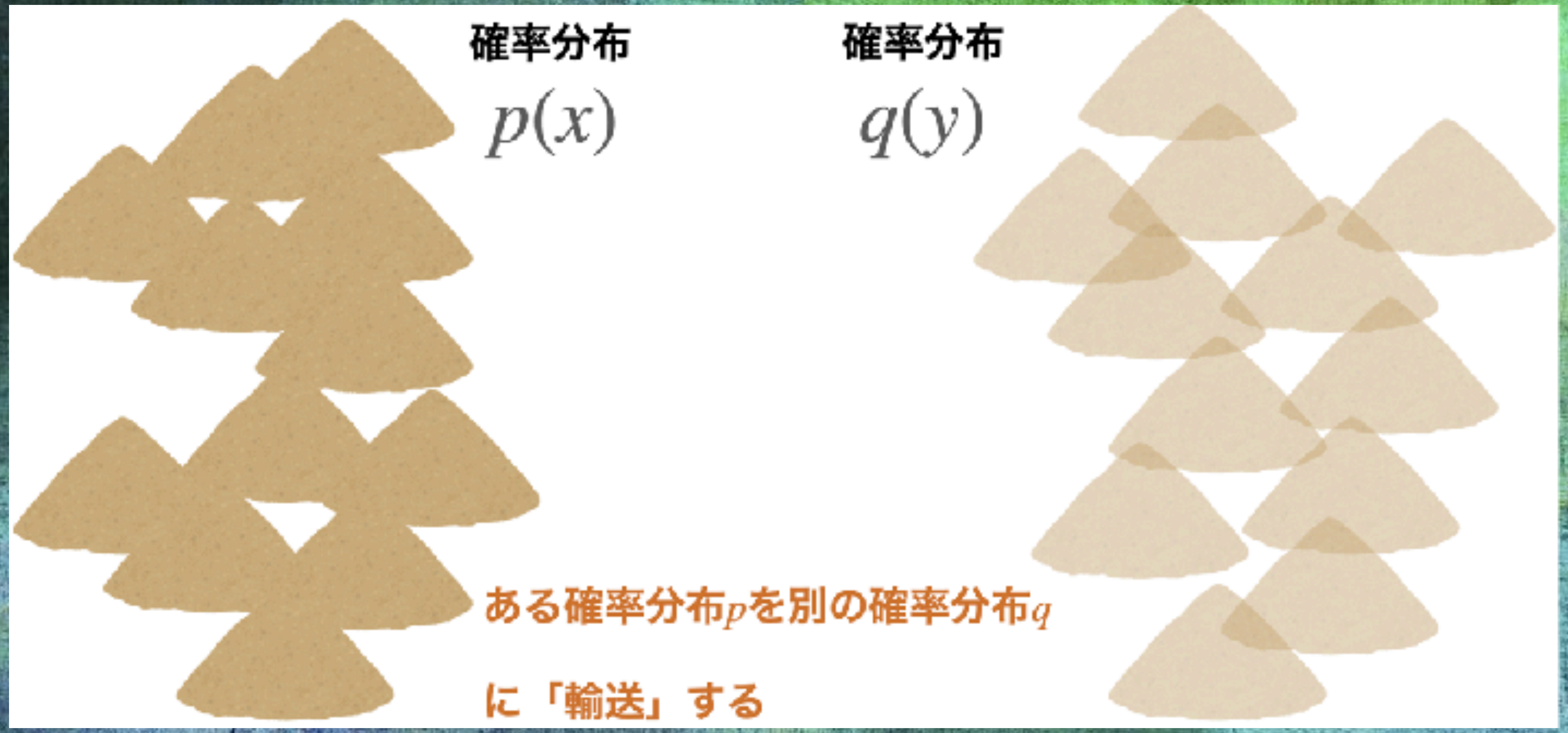
扱えました(Monge-Kantorovichの最適輸送問題)

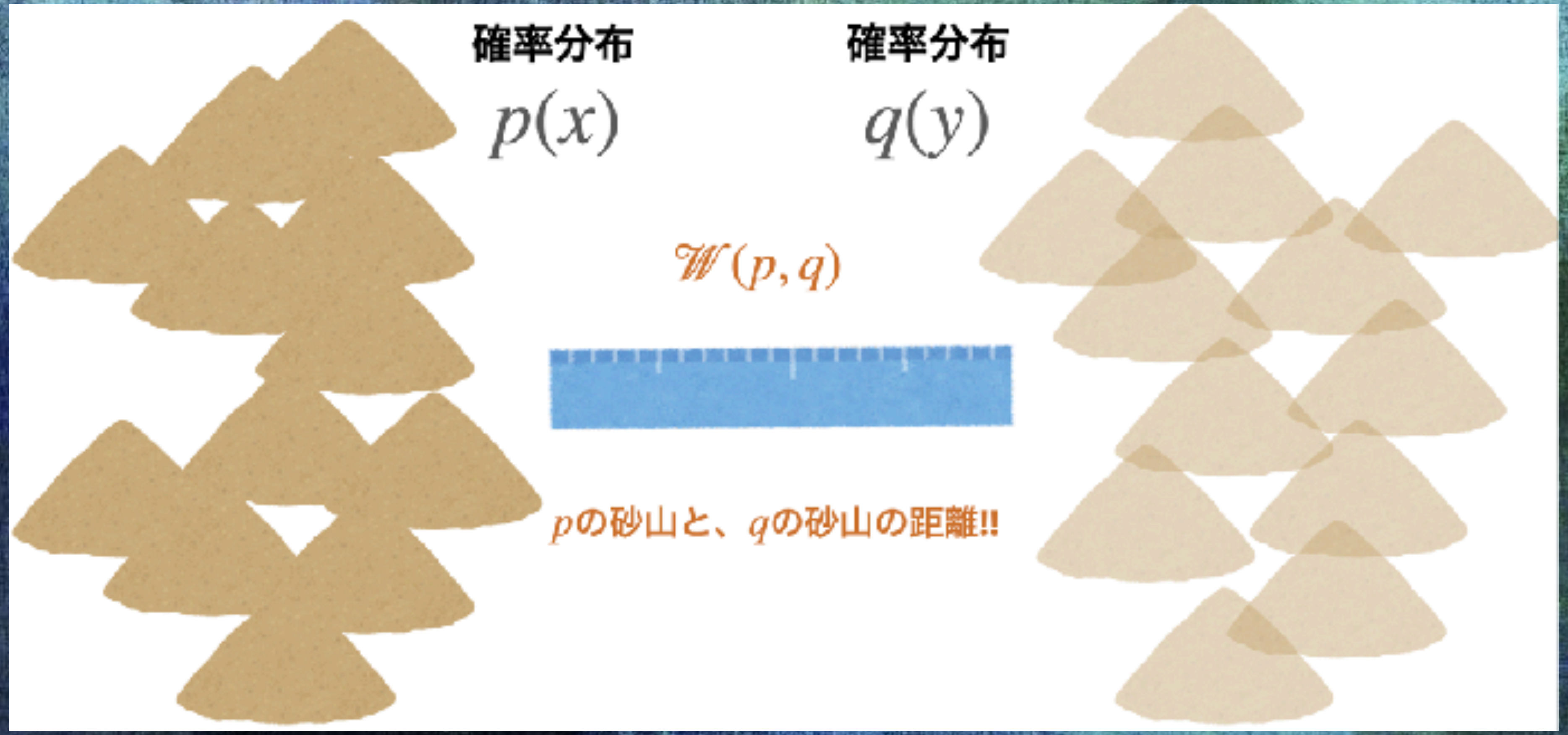
達成できる最小のコストを使って

確率分布の間の距離を考えることができます

(L-2 Wasserstein距離)





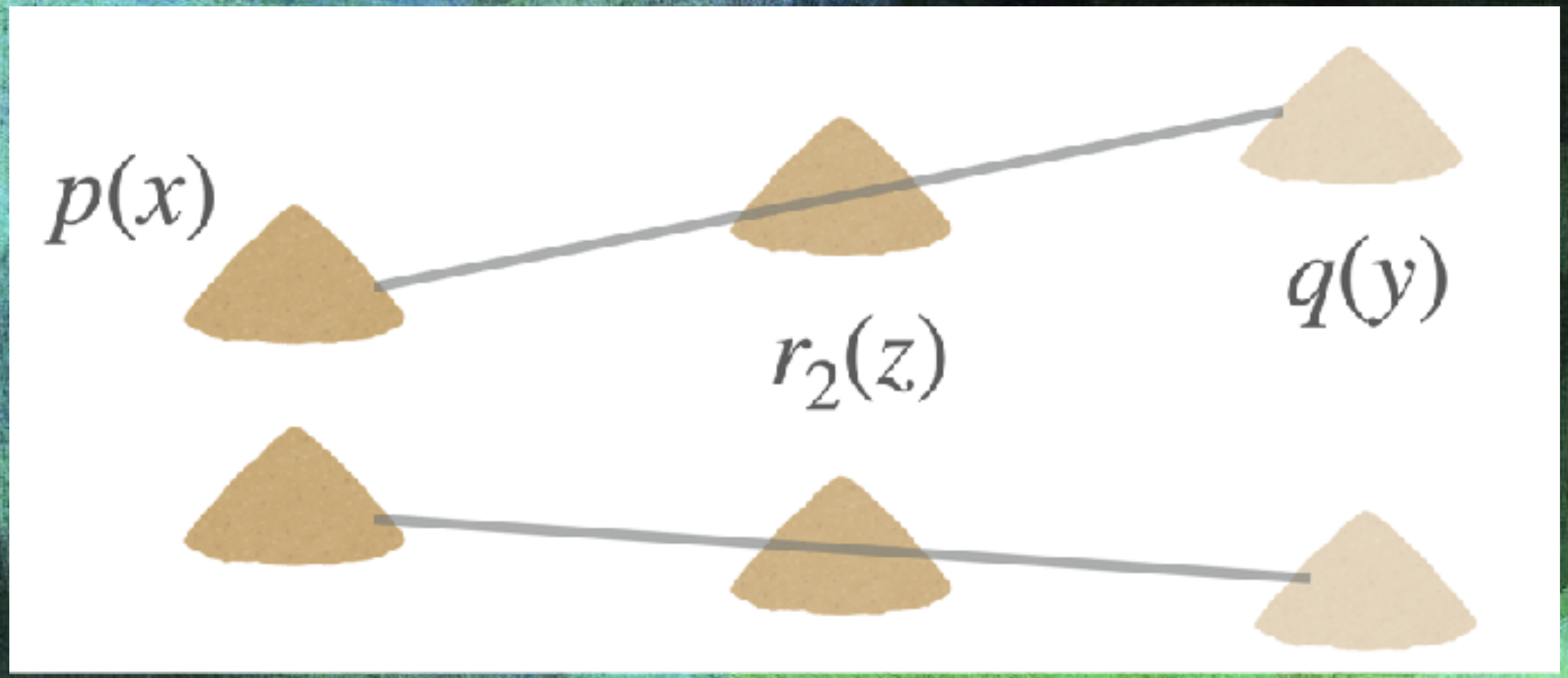


まとめ　2/4

L-2 Wasserstein距離の意味で分布を
真っ直ぐ動かすことができます

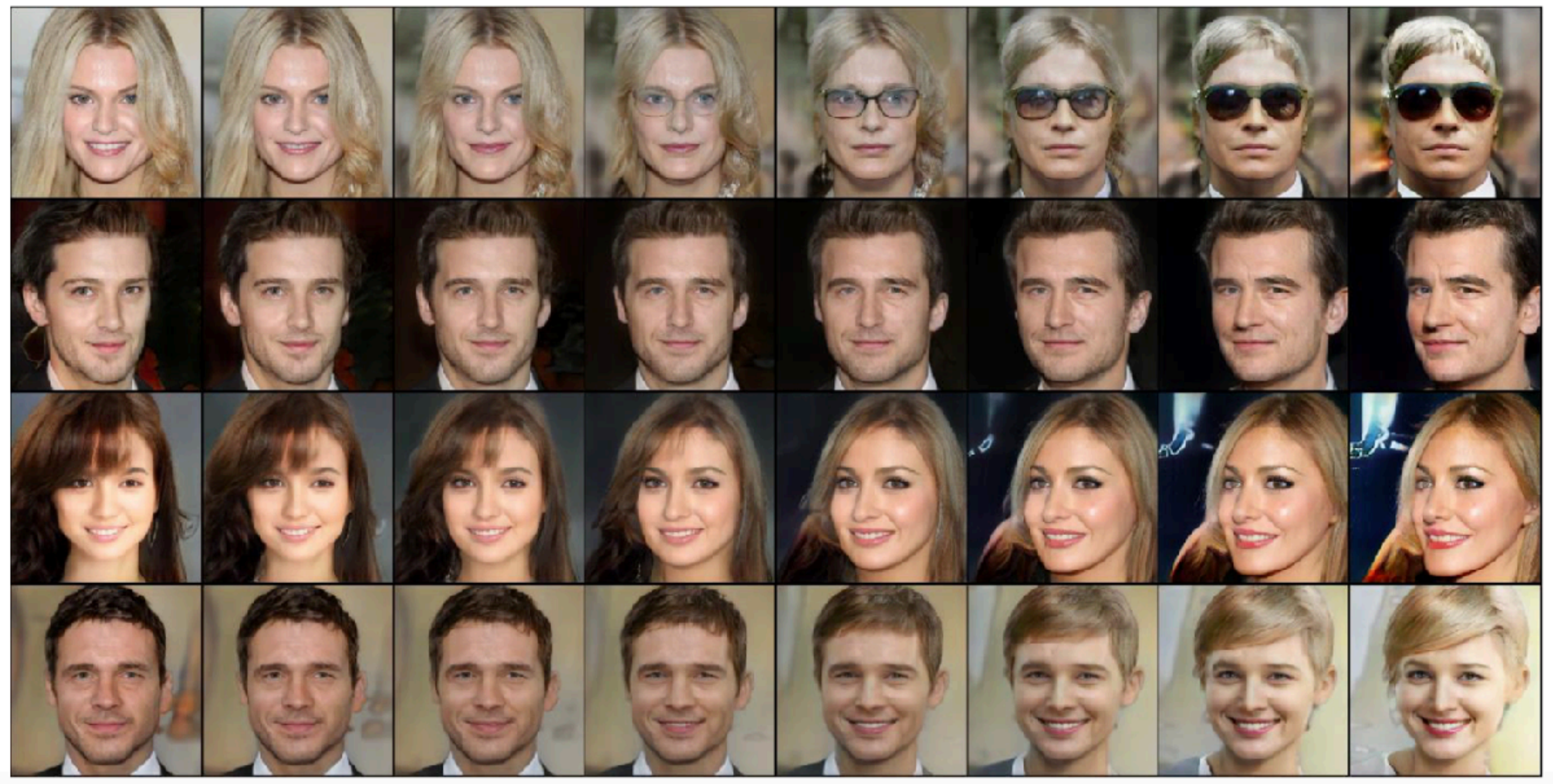
炎の画像を動かしたり

ちょっと機械学習で工夫すれば
顔だって動かすことができます



(t=0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 and 1)

Lei Zhu, et al. IEEE trans on image processing, 16, 1481 (2007).



Liu, H., Gu, X., & Samaras, D. (2019). Wasserstein gan with quadratic transport cost. In *Proceedings of the IEEE/CVF international conference on computer vision* (pp. 4832-4841)

まとめ　3/4

最適な輸送かどうかは「渦」で決まります

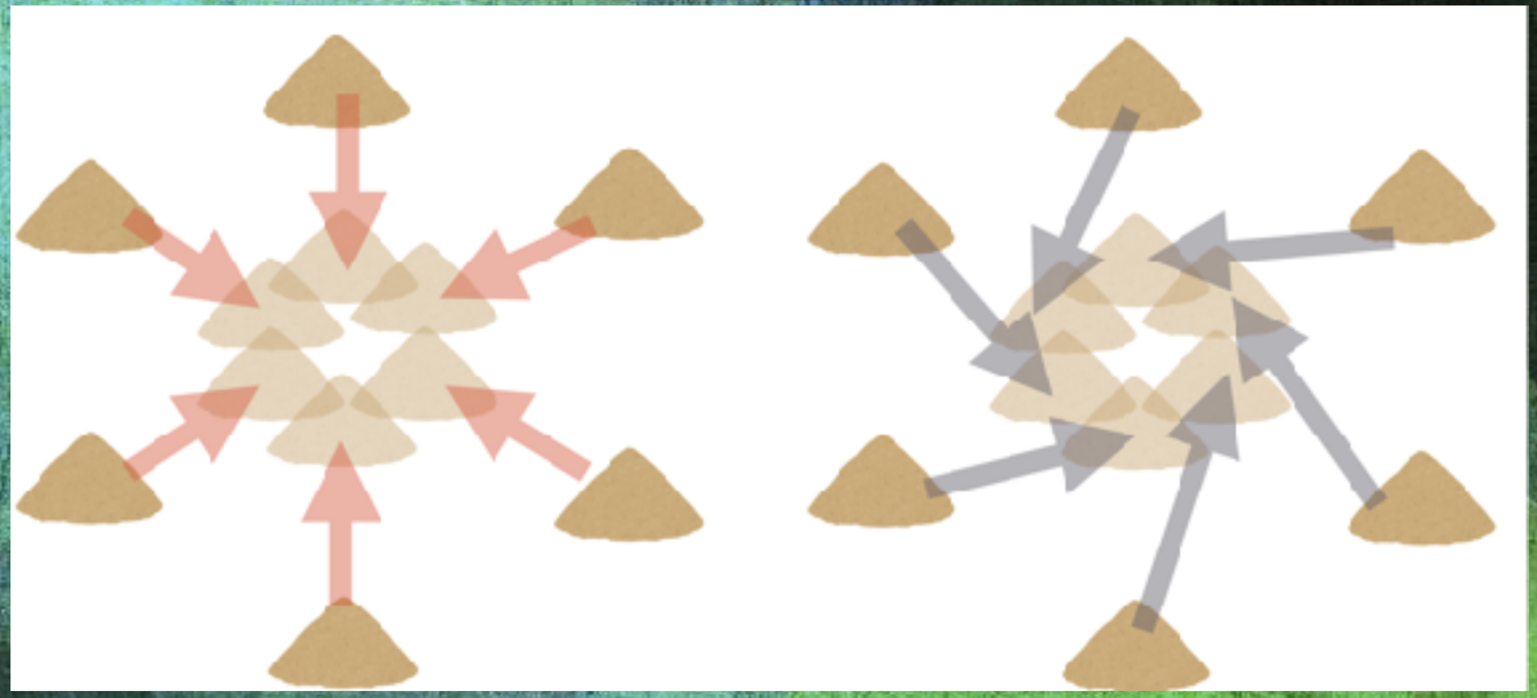
「渦」がない流体力学の方程式経由で

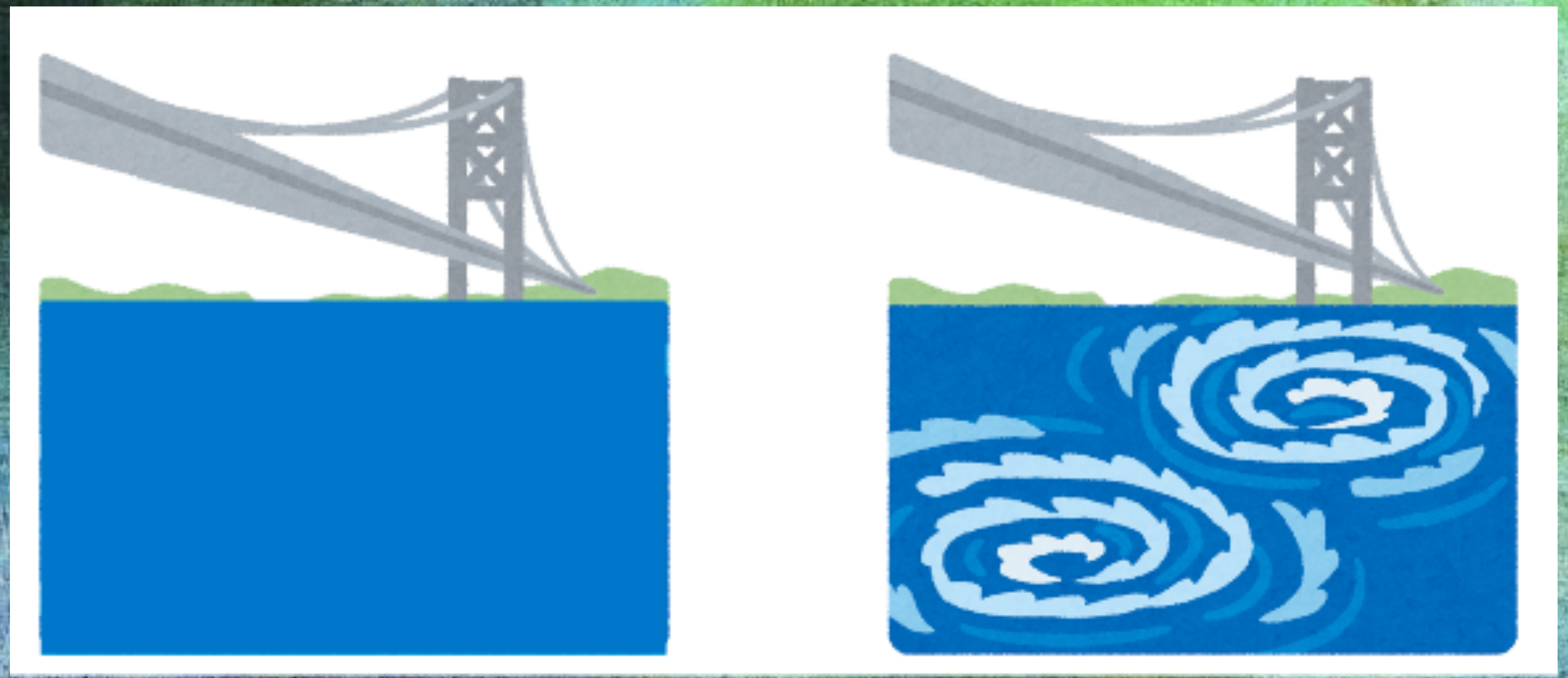
L-2 Wasserstein距離が求まります

(Benamou-Brenierの公式)

ミルクの拡散による不可逆性さえも
L-2 Wasserstein距離が効いてきます

(熱力学第二法則の精密化 / 熱力学的速度限界)





まとめ　4/4

最適輸送理論を経由することで

熱力学と幾何学を結びつけることができます

(渦による散逸、渦によらない散逸)

発電の効率でさえも

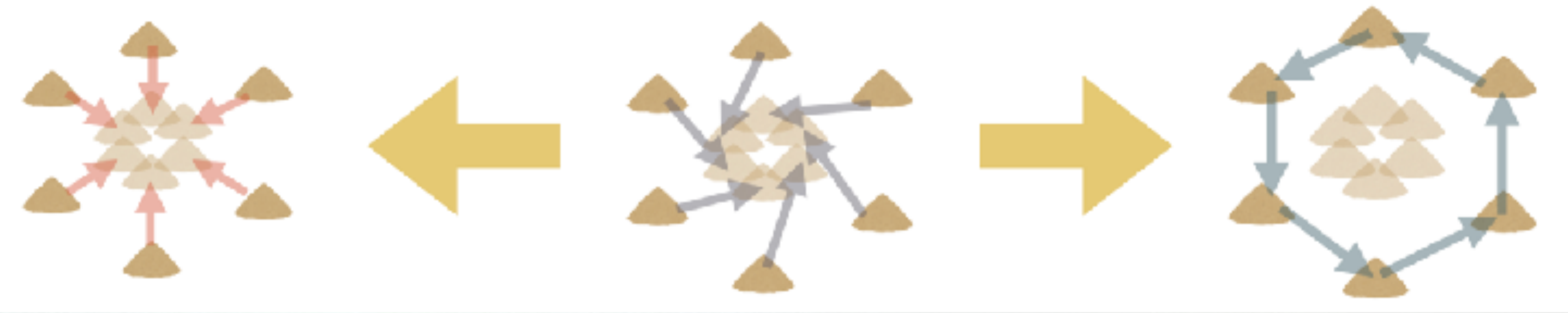
最適輸送の視点から扱えます

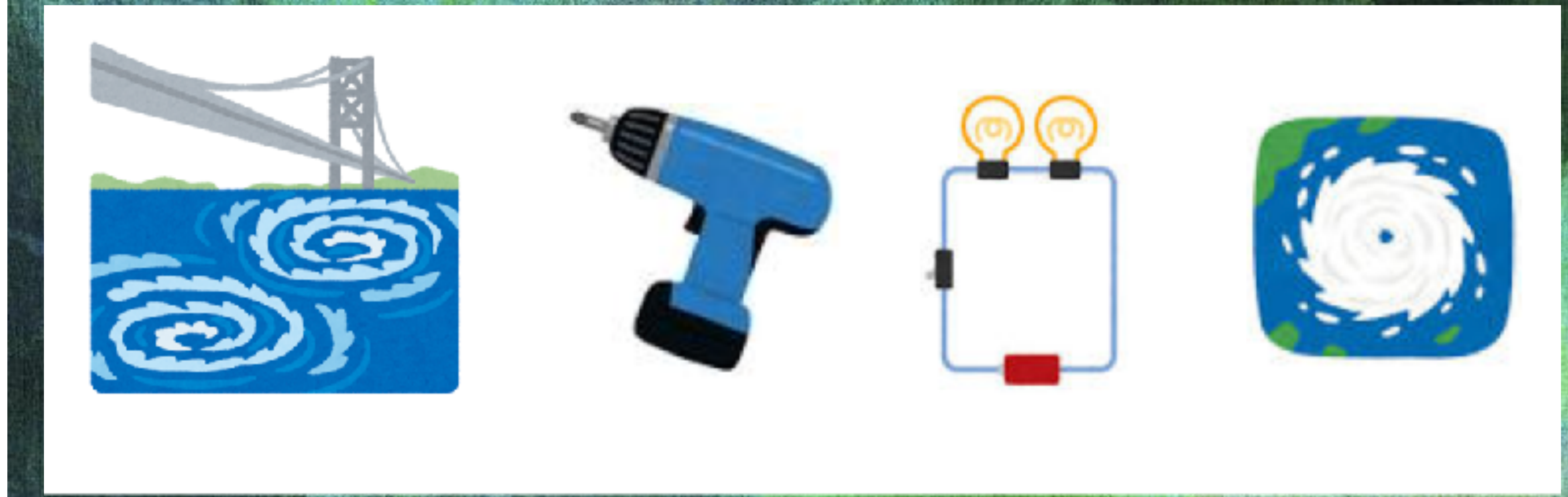
こういう最適輸送に基づいたコンセプトを

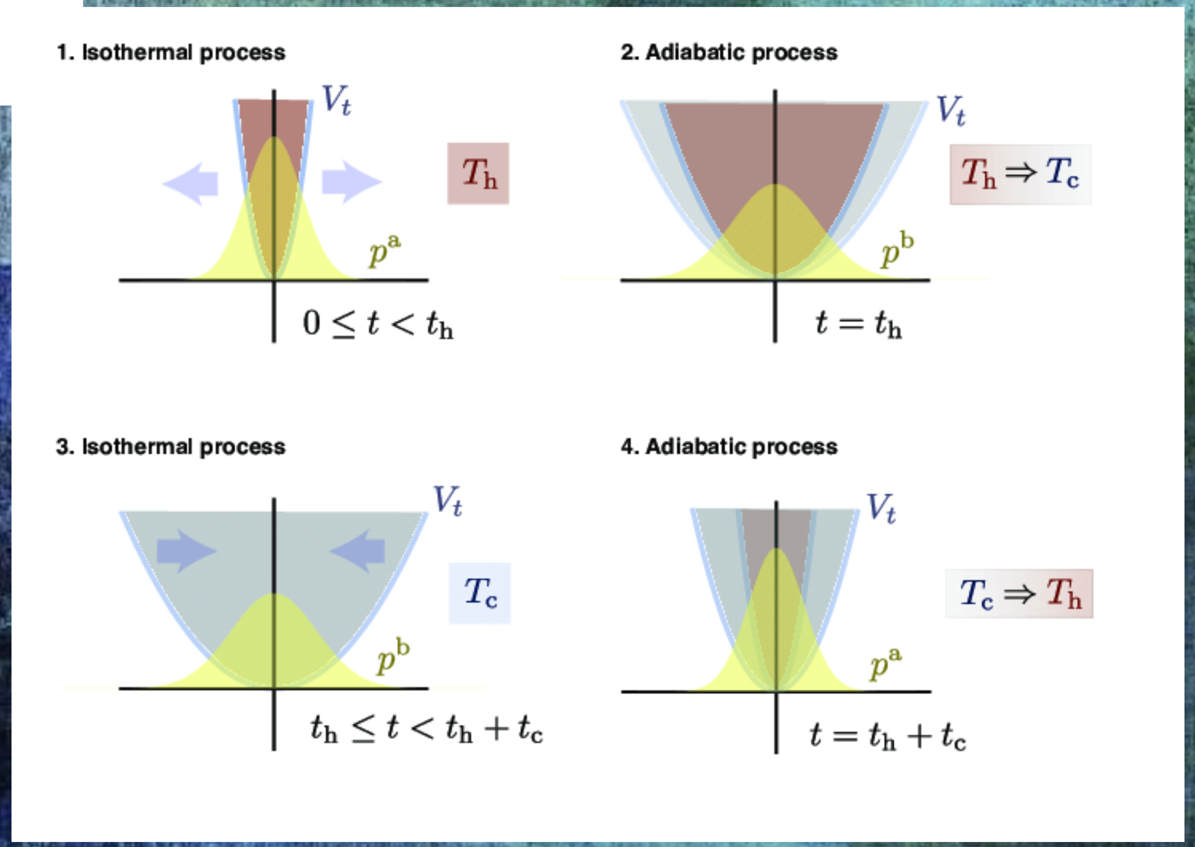
さまざまな系に拡張した「幾何学的な熱力学」

絶賛創出中！

終







Nakazato, M., & Ito, S. (2021). Geometrical aspects of entropy production in stochastic thermodynamics based on Wasserstein distance. *Physical Review Research*, 3(4), 043093

おまけ

なぜそんなことを考えたいのか？

熱力学第二法則のような熱力学的な「限界」

を理解して

生物としての「限界」を超えるために、、、

終