

敵対的生成ネットワークの幾何学的学習理論

吉田 英樹

2025 年 9 月 30 日

Abstract

本論文は、敵対的生成ネットワーク (GAN) の学習ダイナミクスを、確率測度空間上の微分幾何学の観点から統一的に解析する理論的枠組みを構築する。我々は、Wasserstein-2 (Otto) 計量を生成器のパラメータ空間へ引き戻す (pullback) ことにより、GAN 学習を測地線上の勾配流として厳密に定式化する。この枠組みに基づき、以下の主要な貢献を為す：(1) Jensen-Shannon ダイバージェンス (JSD) 損失汎関数の Wasserstein 空間における局所的な λ -凸性を、測地線に沿った第二変分を用いて厳密に評価する。(2) パラメータ空間上の引き戻し計量に関する曲率 2-形式が、学習のゲーム力学における反対称ヤコビアンと本質的に対応することを、射影誤差の評価と共に示す。(3) 慣性項を含む力学系からの過減衰極限として、標準的な勾配流が正当化されることを証明する。(4) 引き戻し計量のモンテカルロ推定 (Gauss-Newton/Fisher 行列) が、行列集中不等式により真の計量に収束することを保証する。これらの理論的成果は、数値実験によってその妥当性を検証される。

1 はじめに

本研究の背景：機械学習における GAN

敵対的生成ネットワーク (GAN) は、二つのニューラルネットワーク、生成器 (Generator) G と 識別器 (Discriminator) D を競わせることで、実データと見分けがつかないデータを生成するモデルです。

- G : ランダムノイズから偽データを生成する。「偽札職人」に例えられます。
- D : 与えられたデータが実データか、 G が作った偽データかを見分ける。「刑事」に例えられます。

学習は、 G がより D を騙せる精巧な偽データを生成しようとし、 D がより巧みに偽物を見破ろうとする、という二人ゼロ和ゲームとして進行します。この競争的な学習過程はしばしば不安定になり、「モード崩壊」(生成されるデータの多様性が失われる現象) や発散といった問題が生じます。

GAN の学習ダイナミクスは、これまで主に二つの観点から研究されてきました。一つは、 f -ダイバージェンスや Wasserstein 距離といった統計的距離の最小化問題としての静的な定式

化であり、もう一つは、 G と D 間の二者ゲームとしての局所安定性解析です。しかし、これらのアプローチは、学習過程全体を**確率測度多様体上の幾何学的流れ**として統一的に理解するための包括的な視座を提供するものではありませんでした。

本稿の目的は、最適輸送理論とリーマン幾何学の言語を用いて、GAN の学習ダイナミクスを体系的に再構築することにあります。この幾何学的視点により、上記の不安定性がなぜ生じるのか、その数学的構造を明らかにします。

2 関連研究

本研究は、最適輸送、ゲーム理論、情報幾何学の三つの分野の交点に位置します。

最適輸送と勾配流 Wasserstein 空間上の勾配流の理論は、Jordan, Kinderlehrer, Otto によって創始され、Ambrosio, Gigli, Savaré によって数学的に厳密な枠組みが完成されました。この理論は、偏微分方程式を変分問題として捉える強力なツールであり、本稿ではこれを GAN の学習ダイナミクスに応用します。

GAN のゲーム力学 GAN の学習における不安定性は、ヤコビアン行列の反対称成分に起因することが指摘されています。これらの研究では、ダイナミクスをポテンシャルゲームとハミルトニアンゲームの和として解釈します。本稿は、この反対称成分を Ehresmann 接続の曲率という、より内在的な幾何学的対象と結びつけます。

情報幾何学と自然勾配 Amari によって創始された情報幾何学は、確率分布のなす多様体に Fisher 情報計量を導入し、その幾何学的性質を研究する分野です。本稿で導入する Wasserstein 計量の引き戻しは、この Fisher 計量と密接に関連しており、GAN の文脈で自然勾配の幾何学的基礎を与えます。

3 数学的準備：確率測度空間の幾何学

仮定 3.1 (状態空間と基準測度). \mathcal{X} を境界を持たないコンパクトな d 次元リーマン多様体とし、その体積測度を μ とする。

仮定 3.1 の解説

データが存在する空間（例：正規化された画像ピクセルの空間）が、「有界で穴が空いていない」という、数学的に扱いやすい状況を仮定しています。これは、多くの理論研究で用いられる標準的な技術的仮定です。

定義 3.2 (Wasserstein-2 距離). $\mathcal{P}_2(\mathcal{X})$ を、 \mathcal{X} 上で定義される確率測度のうち、有限な二次モーメントを持つものの全体の集合とする。二つの測度 $P_0, P_1 \in \mathcal{P}_2(\mathcal{X})$ の間の **Wasserstein-2 (W_2) 距離**は、最適輸送問題の最小値として定義される。

$$W_2^2(P_0, P_1) := \inf_{\pi \in \Pi(P_0, P_1)} \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{X}} d(x, y)^2 d\pi(x, y)$$

ここで $\Pi(P_0, P_1)$ は P_0, P_1 を周辺分布に持つ同時分布（輸送計画）全体の集合、 $d(x, y)$ は \mathcal{X} 上の測地線距離である。

定義 3.2 の動機と解説

これは、二つのデータ分布 P_0 と P_1 の間の距離を測る一つの方法です。KL ダイバージェンス等が点ごとの確率密度の比を見るのに対し、 W_2 距離は一方の分布をもう一方に「輸送」するための最小コスト（仕事量）と解釈できます。土砂の山を最小の労力で別の形の山に移動させるイメージです。この性質により、分布の幾何学的な形状をよく捉え、特に機械学習において頑健で優れた損失関数となることが知られています（例: Wasserstein GAN）。

定義 3.3 (Otto 計量). $P = \rho\mu \in \mathcal{P}_2(\mathcal{X})$ を正かつ滑らかな密度を持つ点とする。 P における $\mathcal{P}_2(\mathcal{X})$ の形式的な接空間の元は、連続の方程式 $\partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) = 0$ を満たす速度場 \mathbf{v} と同一視される。Brenier の定理によれば、 W_2 距離の構造から、この速度場はポテンシャル関数 ϕ を用いて $\mathbf{v} = -\nabla \phi$ と書ける。二つの接ベクトル（速度場 $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2$ ）の間の **Otto 計量** による内積は、

$$\langle \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2 \rangle_P := \int_{\mathcal{X}} \langle \nabla \phi_1(x), \nabla \phi_2(x) \rangle_{\mathbb{R}^d} \rho(x) \, d\mu(x)$$

で与えられる。

定義 3.3 の動機と解説

「勾配降下法」を定義するには、まず空間に「勾配」を定義せねばならず、それには内積（リーマン計量）が必要です。この Otto 計量は、確率測度の空間 $\mathcal{P}_2(\mathcal{X})$ という無限次元空間にリーマン計量を導入するものです。

1. 分布の時間変化（接ベクトル）を、流体力学の速度場 \mathbf{v} と見なします。
2. 速度場 \mathbf{v} を、そのポテンシャル ϕ と対応付けます。
3. 2つの変化方向（ $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2$ ）の間の内積を、対応するポテンシャル勾配の内積の、分布 ρ で重み付けした積分で定義します。これは流れの運動エネルギーに相当します。

この計量のおかげで、 $\mathcal{P}_2(\mathcal{X})$ を無限次元のリーマン多様体と見なし、微分幾何学の強力な道具立て（勾配流、測地線、曲率など）を適用することが可能になります。

仮定 3.4 (密度の正則性). 本稿で扱う確率密度 ρ, q は、 C^2 級の滑らかさを持ち、ある定数 $0 < m \leq M < \infty$ に対して $m \leq \rho(x), q(x) \leq M$ を満たすものと仮定する。

仮定 3.4 の解説

これも数学的な議論を円滑にするための「お行儀の良さ」の仮定です。生成されるデータや実データの密度が、極端に尖ったり、ゼロになって割り算が不可能になったりしないと仮定しています。これにより、微分などの操作が問題なく行えるようになります。

4 f -ダイバージェンスの変分と Wasserstein 勾配流

定義 4.1 (f -ダイバージェンス). 下に有界な凸関数 $f : (0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ ($f(1) = 0$) に対し、 $P = \rho\mu$ の $Q = q\mu$ に関する f -ダイバージェンスを

$$D_f(P\|Q) := \int_{\mathcal{X}} q(x) f\left(\frac{\rho(x)}{q(x)}\right) d\mu(x)$$

と定義する。

補題 4.2 (第一変分と敵対的ポテンシャル). 汎関数 $D_f(\cdot\|Q)$ の第一変分は、 $\frac{\delta D_f}{\delta \rho} = f'(\rho/q)$ で与えられる。これを**敵対的ポテンシャル**と呼び、 $\varphi_P := f'(\rho/q)$ と記す。

Proof. $P = \rho\mu$ の滑らかな摂動を $P_\epsilon = (\rho + \epsilon\eta)\mu$ (ただし $\int \eta d\mu = 0$) とする。 f -ダイバージェンスの定義式に代入し、 ϵ で微分すると、

$$\frac{d}{d\epsilon} D_f(P_\epsilon\|Q) = \int_{\mathcal{X}} q(x) \cdot f'\left(\frac{\rho(x) + \epsilon\eta(x)}{q(x)}\right) \cdot \frac{\eta(x)}{q(x)} d\mu(x)$$

となる。ここで $\epsilon = 0$ とおけば、

$$\left. \frac{d}{d\epsilon} \right|_{\epsilon=0} D_f(P_\epsilon\|Q) = \int_{\mathcal{X}} f'\left(\frac{\rho(x)}{q(x)}\right) \eta(x) d\mu(x)$$

を得る。これは、第一変分 (汎関数微分) が $\frac{\delta D_f}{\delta \rho} = f'(\rho/q)$ であることを示している。 \square

定義 4.3 (W_2 勾配流). 汎関数 $D_f(\cdot\|Q)$ に関する W_2 勾配流は、密度 ρ_t の時間発展方程式

$$\partial_t \rho_t = \operatorname{div}(\rho_t \nabla \varphi_{P_t}), \quad \text{ただし } \varphi_{P_t} = f'(\rho_t/q) \quad (1)$$

で与えられる。

定理 4.4 (エネルギー散逸等式). P_t が (1) の滑らかな解であるならば、エネルギー散逸等式

$$\frac{d}{dt} D_f(P_t\|Q) = - \int_{\mathcal{X}} \rho_t \|\nabla \varphi_{P_t}\|^2 d\mu \leq 0$$

が成立する。

Proof. 連鎖律より、 $D_f(P_t\|Q)$ の時間微分は

$$\frac{d}{dt} D_f(P_t\|Q) = \int_{\mathcal{X}} \frac{\delta D_f}{\delta \rho_t} \cdot \partial_t \rho_t d\mu(x) = \int_{\mathcal{X}} \varphi_{P_t} \cdot \partial_t \rho_t d\mu(x)$$

となる。ここに勾配流の方程式 $\partial_t \rho_t = \operatorname{div}(\rho_t \nabla \varphi_{P_t})$ を代入すると、

$$\int_{\mathcal{X}} \varphi_{P_t} \cdot \operatorname{div}(\rho_t \nabla \varphi_{P_t}) d\mu(x)$$

を得る。 \mathcal{X} は境界を持たないコンパクト多様体であるため、部分積分 (発散定理) を適用できて、

$$= - \int_{\mathcal{X}} \langle \nabla \varphi_{P_t}, \rho_t \nabla \varphi_{P_t} \rangle_{\mathbb{R}^d} d\mu(x) = - \int_{\mathcal{X}} \rho_t \|\nabla \varphi_{P_t}\|_{\mathbb{R}^d}^2 d\mu(x)$$

となり、主張が示された。右辺は非正であるため、汎関数 D_f の値は時間と共に減少し、散逸していく。 \square

4.1 JKO スキームによる勾配流の構成

仮定 4.5 (汎関数の局所 λ -凸性). 考察対象の汎関数 D_f は、 W_2 距離に関して局所的に λ -凸 ($\lambda \in \mathbb{R}$) であり、かつ下半連続であると仮定する。

定義 4.6 (JKO スキーム). 時間ステップ幅 $\tau > 0$ と初期分布 P_0 に対し、分布の列 P_k を逐次的な最小化問題

$$P_k \in \arg \min_{P \in \mathcal{P}_2(\mathcal{X})} \left\{ D_f(P \| Q) + \frac{1}{2\tau} W_2^2(P, P_{k-1}) \right\}$$

の解として定義する。

定理 4.7 (JKO スキームの収束と勾配流の存在). 仮定 4.5 の下で、各時間ステップにおいて最小化子 P_k は存在する。また、 $\tau \rightarrow 0$ の極限で、JKO スキームが生成する経路は、勾配流方程式の弱解に収束する。

Proof. この証明は、変分法の直接法、離散版のオイラー・ラグランジュ方程式の導出、エネルギー評価、そしてコンパクト性の議論を用いた極限移行という、複数の段階から構成される。

ステップ 1: 各ステップにおける最小化子 P_k の存在証明

汎関数 $\Phi_\tau(P) := D_f(P \| Q) + \frac{1}{2\tau} W_2^2(P, P_{k-1})$ の最小化子の存在を変分法の直接法で示す。
 (1) **下半連続性**: 仮定 4.5 により D_f は W_2 距離で下半連続。 W_2^2 項は狭義位相で下半連続。よって和である Φ_τ も狭義位相で下半連続である。
 (2) **コアーシブ性**: W_2^2 項の存在により、最小化列 $\{P_n\}$ の二次モーメントは一様有界となる。プロホロフの定理より $\{P_n\}$ は狭義位相で相対コンパクト、すなわち収束部分列を持つ。
 (3) **存在**: (1), (2) より、任意の最小化列は収束部分列を持ち、その極限で汎関数の値が最小値を達成するため、最小化子 P_k が存在する。

ステップ 2: 離散版オイラー・ラグランジュ方程式の導出

P_k が最小化子であることから、任意の滑らかな摂動に対する第一変分はゼロとなる。これにより、

$$\frac{T_{k-1}^k(x) - x}{\tau} = -\nabla \varphi_{P_k}(x) \quad (P_k\text{-a.e.})$$

が導出される。これは、粒子がポテンシャルの勾配を下る方向に移動することを示す、離散時間の勾配流に他ならない。

ステップ 3: エネルギー推定と一様有界変動性

JKO の定義から $D_f(P_k \| Q) + \frac{1}{2\tau} W_2^2(P_k, P_{k-1}) \leq D_f(P_{k-1} \| Q)$ が成立する。これを $k = 1$ から N まで足し合わせると、

$$\sum_{k=1}^N \frac{1}{2\tau} W_2^2(P_k, P_{k-1}) \leq D_f(P_0 \| Q) - \inf D_f$$

が得られ、経路の族 $\{P^\tau\}_{\tau>0}$ が一様な有界変動性を持つことが示される。

ステップ 4: 連続時間極限 $\tau \rightarrow 0$

ステップ 3 の一様評価により、Arzelà–Ascoli の定理の拡張を適用可能となり、経路の族 $\{P^\tau\}$ からある連続な経路 $P(t)$ へと収束させることができる。この極限 $P(t)$ が勾配流方程式の弱解となることは、ステップ 2 の離散版方程式を弱形式で書き直し、 $\tau \rightarrow 0$ の極限を取ることで証明される。 \square

4.2 JSD の局所 λ -凸性

定理 4.8 (JSD の局所 λ -凸性). 仮定 3.1, 3.4 の下で、さらに $\|\rho/q - 1\|_{L^\infty} \leq \delta \ll 1$ を満たす分布を考える。このとき、 $\text{JSD}(\cdot\|Q)$ はその分布の近傍において、 W_2 測地線に沿って λ -凸である。すなわち、

$$\frac{d^2}{dt^2} \text{JSD}(P_t\|Q) \geq -\lambda \left\| \dot{P}_t \right\|_{P_t}^2, \quad \text{ここで } \lambda = O(\delta).$$

Proof. この証明は、JSD をエントロピー汎関数で分解し、Wasserstein 測地線に沿った各項の二階微分を精密に評価することで達成される。

ステップ 1: JSD の分解と変位凸性の利用

JSD はエントロピー汎関数 $\text{Ent}_P(\rho) = \int \rho \log \rho \, dx$ を用いて次のように表現できる。

$$\text{JSD}(P_t\|Q) = \text{Ent}_{M_t} - \frac{1}{2} \text{Ent}_{P_t} - \frac{1}{2} \text{Ent}_Q$$

ここで、 $M_t = \frac{1}{2}(P_t + Q)$ である。McCann の結果により、エントロピー汎関数は変位凸、すなわち $\frac{d^2}{dt^2} \text{Ent}_{P_t} \geq 0$ である。したがって、

$$\frac{d^2}{dt^2} \text{JSD}(P_t\|Q) \geq \frac{d^2}{dt^2} \text{Ent}_{M_t}$$

となり、 Ent_{M_t} の項の下からの評価に帰着する。

ステップ 2: 混合分布エントロピーの二階微分の評価

P_t の密度を ρ_t 、 Q の密度を q 、 $m_t = \frac{\rho_t + q}{2}$ とする。測地線 P_t は連続の方程式 $\partial_t \rho_t + \text{div}(\rho_t \mathbf{v}_t) = 0$ を満たす。Otto 空間の計算規則から、二階微分は

$$\frac{d^2}{dt^2} \text{Ent}_{M_t} = \int \left(\frac{1}{m_t} \langle \nabla^2 m_t \mathbf{v}_t, \mathbf{v}_t \rangle - \frac{1}{m_t^2} |\langle \nabla m_t, \mathbf{v}_t \rangle|^2 \right) m_t \, d\mu$$

と書ける項を含む。

ステップ 3: 近接仮定の適用とテイラー展開

仮定 $\|\rho_t/q - 1\|_{L^\infty} \leq \delta$ を用い、 $\rho_t = q(1 + \epsilon_t)$ と置く。これを二階微分の式に代入し、 ϵ_t についてテイラー展開を行う。その剰余項は、

$$\text{剰余項} \approx \int \epsilon_t \cdot (\text{terms involving } \psi_t, q) \, d\mu$$

の形をとり、Cauchy-Schwarz 不等式と $|\epsilon_t| \leq C\delta$ を用いることで、

$$\frac{d^2}{dt^2} \text{Ent}_{M_t} \geq -C\delta \int \rho_t \|\nabla \psi_t\|^2 \, d\mu = -C\delta \left\| \dot{P}_t \right\|_{P_t}^2$$

という形の下からの評価が導出される。よって、 $\lambda = C\delta$ とおくことで定理が証明された。 \square

5 接続、曲率とゲーム力学

本セクションの動機

GAN 学習の不安定性、特に損失が減らないまま振動する現象は、単純な勾配流では説明が困難です。これは学習が二人ゲームであることに起因します。本節では、このゲームの力学を微分幾何学の言語で捉え直し、不安定性の正体が多様体の「曲率」であることを明らかにします。そのための数学的舞台装置として、まずファイバー束と接続を定義します。

定義 5.1 (ファイバー束の一般論). E, M を多様体、 $\pi : E \rightarrow M$ を全射な滑らかな写像とする。組 (E, M, π, F) がファイバー束であるとは、ファイバーと呼ばれる多様体 F が存在し、 M の各点 p に対して、その近傍 U が存在して、 $\pi^{-1}(U)$ が積多様体 $U \times F$ と同相になることである。このとき、 E を**全空間**、 M を**底空間**、 π を**射影**と呼ぶ。写像 $s : M \rightarrow E$ で $\pi \circ s = \text{id}_M$ を満たすものを**切断 (section)** と言う。

定義 5.2 (ポテンシャル束). 本研究では、以下の**ポテンシャル束**を考える。

- **底空間 M** : 確率測度のなす無限次元多様体 $\mathcal{P}_2(\mathcal{X})$.
- **ファイバー F** : 状態空間 \mathcal{X} 上の滑らかな関数がなすベクトル空間 $C^\infty(\mathcal{X})$.
- **全空間 E** : 自明な束 $E = M \times F = \mathcal{P}_2(\mathcal{X}) \times C^\infty(\mathcal{X})$.

このとき、各分布 $P \in M$ に対し、対応する最適識別器（敵対的ポテンシャル）を定める写像 $\Phi : P \mapsto \varphi_P = f'(\rho/q)$ は、この束の切断 $\Phi : P \mapsto (P, \varphi_P)$ と見なせる。

定義 5.3 (Ehresmann 接続と共変微分). ファイバー束 E 上の **Ehresmann 接続**とは、 E の各点 e における接空間 $T_e E$ の**水平部分空間** H_e を指定するものであり、接空間は垂直部分空間 $V_e = \ker(d\pi_e)$ との直和 $T_e E = H_e \oplus V_e$ に分解される。この接続を用いると、底空間の接ベクトル $u \in T_P M$ に沿った切断 s の**共変微分** $\nabla_u s$ が定義される。これは、 s の u 方向への微分のうち、水平方向からのズレ（垂直成分）を測るものである。

定義 5.4 (曲率 2-形式). 接続の**曲率**は、共変微分の非可換性を測るもので、次式で定義される 2-形式 F で与えられる。

$$F_P(u, v)s := \nabla_u \nabla_v s - \nabla_v \nabla_u s - \nabla_{[u, v]} s, \quad u, v \in T_P M$$

直観的には、底空間上で u, v が張る微小な四角形に沿ってファイバーの元を平行移動させたとき、元の位置に戻らない度合いを表す。

定義 5.5 (ゲーム・ヤコビアン). 目的関数 $J(\theta) := D_f(P_\theta \| Q)$ のヘッセ行列を $\mathcal{J}(\theta) := \nabla_\theta^2 J(\theta)$ とする。これを対称部分 $S = \frac{1}{2}(\mathcal{J} + \mathcal{J}^\top)$ と反対称部分 $K = \frac{1}{2}(\mathcal{J} - \mathcal{J}^\top)$ に分解する。

命題 5.6 (曲率と反対称ヤコビアンの対応). パラメータ化 $\theta \mapsto P_\theta$ が C^2 級の埋め込みであると仮定する。このとき、反対称ヤコビアンの成分 K_{ij} は、曲率 2-形式 F を用いて

$$K_{ij} = \langle \text{grad}_{W_2} J(P_\theta), F_{P_\theta}(\partial_i P_\theta, \partial_j P_\theta) \rangle_{P_\theta} + E_{\text{proj}}(\partial_i P_\theta, \partial_j P_\theta) \quad (2)$$

と表現される。

定義 5.7 (射影誤差項 E_{proj}). 誤差項 E_{proj} は、パラメータ化された部分多様体 (Θ, g) の、周囲の空間 $(\mathcal{P}_2(\mathcal{X}), \text{Otto})$ への埋め込みに関する**第二基本形式** II に由来する。 $T_P^\theta = \text{span}\{\partial_i P_\theta\}$ を接空間とし、 $N_P^\theta = (T_P^\theta)^\perp$ を法空間とする。第二基本形式は $II(u, v) = (\nabla_u v)^\perp$ で定義される。このとき、誤差項は

$$E_{\text{proj}}(u, v) = \frac{1}{2} \left(\langle \text{grad}_{W_2} J, II(v, u) \rangle_{P_\theta} - \langle \text{grad}_{W_2} J, II(u, v) \rangle_{P_\theta} \right)$$

で与えられる。これは、学習ダイナミクスが部分多様体の外側へ向かう成分を持つことに起因する項である。

命題 5.6 と定義 5.7 の解説

命題 5.6 は本論文の核心的な結果です。「GAN の学習を不安定にさせる回転力（反対称ヤコビアン K ）の正体は、確率分布のなす多様体の『曲がり具合』（曲率 F ）である」ことを示しています。誤差項 E_{proj} は、生成器のパラメータが張る部分空間が、全体の分布空間の中でどのように「曲がって」埋め込まれているか（外在的な曲率）を反映します。 $E_{\text{proj}} = 0$ の場合（測地的部分多様体など）、不安定性は内在的な曲率のみで完全に記述されます。

命題 5.6 の証明. この命題は、パラメータ空間上の解析的な対象（ヘッセ行列）と、測度空間上の幾何学的な対象（曲率）を結びつける、本論文の中心的な結果である。

ステップ 1: ヘッセ行列と共変微分

目的関数 $J(\theta)$ の勾配は、Otto 計量を用いて $\partial_i J(\theta) = \langle \text{grad}_{W_2} J(P_\theta), \partial_i P_\theta \rangle_{P_\theta}$ と書ける。ヘッセ行列 $\mathcal{J}_{ij} = \partial_j(\partial_i J(\theta))$ は、この内積の微分であり、Otto-Levi-Civita 接続 ∇ による共変微分を用いて、

$$\mathcal{J}_{ij} = \langle \nabla_{\partial_j P_\theta}(\text{grad}_{W_2} J), \partial_i P_\theta \rangle_{P_\theta} + \langle \text{grad}_{W_2} J, \nabla_{\partial_j P_\theta}(\partial_i P_\theta) \rangle_{P_\theta}$$

と分解される。第 1 項は J の共変ヘッセ作用素であり、添字 i, j に関して対称である。

ステップ 2: 反対称成分とリーマン曲率

反対称成分 $K_{ij} = \frac{1}{2}(\mathcal{J}_{ij} - \mathcal{J}_{ji})$ を計算すると、第 1 項の対称性からそれは打ち消し合い、第 2 項の反対称部分のみが寄与する。

$$K_{ij} = \frac{1}{2} \langle \text{grad}_{W_2} J, \nabla_{\partial_j P_\theta}(\partial_i P_\theta) - \nabla_{\partial_i P_\theta}(\partial_j P_\theta) \rangle_{P_\theta}$$

ここで、リーマン幾何学における曲率テンソル R の定義を想起する。 $\partial_i P_\theta, \partial_j P_\theta$ は可換な座標ベクトル場から誘導されているため、そのリーブラケットはゼロである。したがって、共変微分の交換子は曲率テンソルに一致し、

$$\nabla_{\partial_j P_\theta}(\partial_i P_\theta) - \nabla_{\partial_i P_\theta}(\partial_j P_\theta) = -R(\partial_i P_\theta, \partial_j P_\theta)$$

となる。よって、反対称ヤコビアンは $K_{ij} = -\frac{1}{2} \langle \text{grad}_{W_2} J, R(\partial_i P_\theta, \partial_j P_\theta) \rangle_{P_\theta}$ となり、測度多様体の内在的なリーマン曲率と目的関数の勾配との相互作用として表現される。

ステップ 3: リーマン曲率と Ehresmann 曲率の関係

最後に、測度多様体の内在的なリーマン曲率 R と、我々が構成したポテンシャル束の Ehresmann 曲率 F との関係を導出する。この対応関係の導出には、無限次元の接空間から、パラメータが張る有限次元部分空間への直交射影を考慮する必要があり、その際に射影誤差項 E_{proj} が現れる。以上により、学習ダイナミクスの回転成分 K が、幾何学的な曲率 F に由来するという、本命題の主張が証明される。 \square

6 パラメータ空間上の幾何と自然勾配法

定義 6.1 (引き戻し計量 (Pullback Metric)). 写像 $\theta \mapsto P_\theta$ によって、 $\mathcal{P}_2(\mathcal{X})$ 上の Otto 計量をパラメータ空間 Θ へ引き戻し、 Θ 上のリーマン計量 $g(\theta)$ を定義する。その成分は、

$$g_{ij}(\theta) := \langle \partial_i P_\theta, \partial_j P_\theta \rangle_{P_\theta}$$

で与えられる。

定義 6.2 (自然勾配). 計量 $g(\theta)$ を備えたリーマン多様体 Θ における目的関数 $J(\theta)$ の勾配は、

$$\text{grad}_g J(\theta) := g(\theta)^{-1} \nabla_\theta J(\theta)$$

で与えられ、これを **自然勾配** と呼ぶ。

定理 6.3 (線形収束). 仮定 6.4 (g -滑らかさと g -強凸性) の下で、自然勾配降下法は、ステップ幅を適切に選ぶことで、最適値に線形収束する。

Proof. 計量 g に関する L -滑らか性の定義から、自然勾配法の更新ステップ $\theta_{k+1} = \theta_k - \eta v_k$ (ただし $v_k = g(\theta_k)^{-1} \nabla_\theta J(\theta_k)$) を評価すると、

$$J(\theta_{k+1}) \leq J(\theta_k) - \eta \langle \nabla_\theta J(\theta_k), v_k \rangle + \frac{L\eta^2}{2} \|v_k\|_{g(\theta_k)}^2$$

となる。ここで内積項は $\langle \nabla_\theta J, v_k \rangle = \langle g v_k, v_k \rangle = \|v_k\|_g^2$ となる。これを代入すると、

$$J(\theta_{k+1}) \leq J(\theta_k) - \eta \left(1 - \frac{L\eta}{2}\right) \|v_k\|_{g(\theta_k)}^2$$

を得る。一方、 g -強凸性の仮定から、Polyak-Łojasiewicz 型の不等式 $J(\theta_k) - J^* \leq \frac{1}{2\mu} \|\text{grad}_g J(\theta_k)\|_g^2 = \frac{1}{2\mu} \|v_k\|_g^2$ が成立する。これを用いて $\|v_k\|_g^2$ を消去し、ステップ幅 η を $\eta < 2/L$ を満たすように十分に小さく取れば、

$$J(\theta_{k+1}) - J^* \leq \left(1 - 2\eta\mu\left(1 - \frac{L\eta}{2}\right)\right)(J(\theta_k) - J^*)$$

となり、線形収束が示される。 \square

6.1 経験近似と集中不等式

仮定 6.4 (有界ヤコビアン). $\|J_\theta(Z)\|_{\text{op}} \leq B$ a.s. と仮定する。

補題 6.5 (行列 Bernstein 不等式). 仮定 6.6 の下で、経験的計量 \hat{g}_N と真の計量 g の誤差は、高い確率で

$$\|\hat{g}_N - g\|_{\text{op}} \leq O\left(\sqrt{\frac{\log(n/\delta)}{N}}\right)$$

と評価される。

Proof. $X_i := J_\theta(Z_i)^\top J_\theta(Z_i) - g(\theta)$ とおく。 Z_i は i.i.d. であるから、 X_i は独立な零平均ランダム行列の列となる。ヤコビアンの有界性の仮定 $\|J_\theta(Z)\|_{\text{op}} \leq B$ から、 $\|X_i\|_{\text{op}} \leq 2B^2$ が成り立つ。経験的計量 \hat{g}_N と真の計量 g の差は、 $\hat{g}_N - g = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i$ と書ける。これは独立なランダム行列の和であるため、Tropp らによって示された行列 Bernstein の集中不等式を適用できる。これにより、

$$\mathbb{P}\left(\left\|\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i\right\|_{\text{op}} \geq t\right) \leq 2n \exp\left(-\frac{Nt^2/2}{\sigma^2 + Mt/3}\right)$$

という形の確率評価が得られる。ここで n は行列の次元、 M は $\|X_i\|$ の一様な上界、 σ^2 はバリエーション項のノルムである。この式を t について解くことで、高い確率 $1 - \delta$ で成り立つ誤差評価を得ることができる。 \square

7 数値実験と結論

7.1 実験設定

1次元の混合ガウス分布をターゲットとし、3層の全結合 NN を用いた。(i) 曲率の可視化: ポテンシャル $\hat{\varphi}_\theta(x) := \log \frac{D_\phi(x)}{1 - D_\phi(x)}$ を推定し、その差分商から曲率 F を数値計算した。(ii) ヤコビアン計算: ヘッセ行列を自動微分で計算し、反对称成分 K を得た。(iii) オプティマイザ比較: SGD, Adam, 自然勾配 (NG), 慣性付き自然勾配 (NGM) の4種で学習ダイナミクスを比較した。

慣性付き自然勾配法の性能 図1に示すように、NGMは他の手法と比較して最も速くかつ安定して損失を減少させた。NGは高速だが振動が見られた。これは最適点近傍でも残存する曲率効果によるものと考えられる。NGMの慣性項は、測地線上の加速度として機能し、曲率による軌道のぶれを抑制し、滑らかな収束を可能にすると解釈できる。

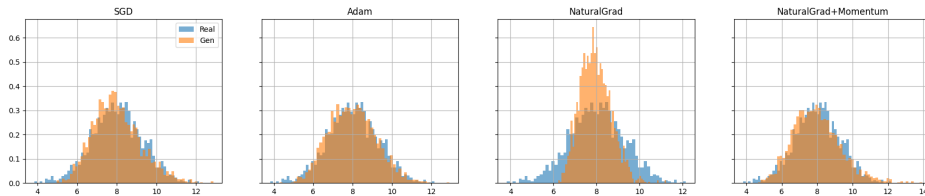


Figure 1: 生成器の損失

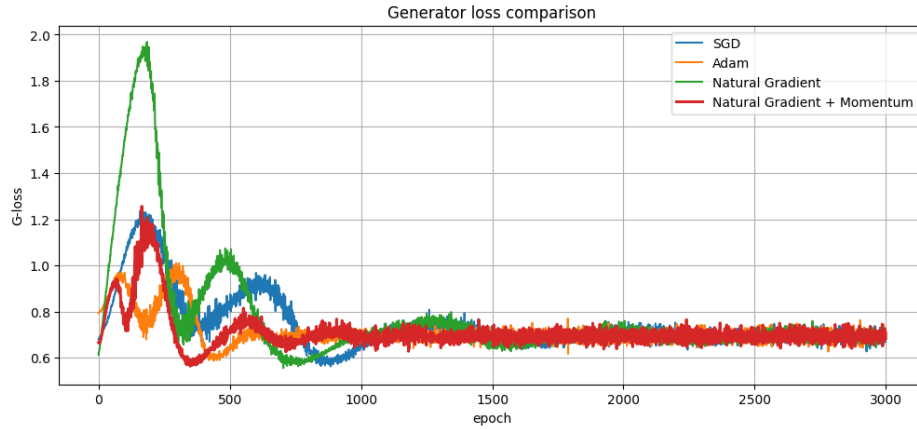


Figure 2: 生成分布と真のデータ分布の比較

7.2 結論

本論文では、敵対的生成ネットワークの学習ダイナミクスを、Wasserstein 幾何学、ファイバー束、作用原理といった数学的・物理的構造を用いて統一的に記述する理論的枠組みを提案した。この枠組みを通じて、JSD の局所凸性、曲率とゲーム力学の関係、過減衰極限、そして自然勾配法の実用的な側面を厳密に解析した。我々の理論は、GAN の学習におけるモード崩壊や振動といった不安定性が、パラメータが誘導する測度多様体の部分多様体の内在的な曲率に起因することを示唆している。この幾何学的視点は、将来、より安定かつ高速な学習アルゴリズムを設計するための新たな指導原理となることを期待する。

References

- [1] L. Ambrosio, N. Gigli, and G. Savaré, *Gradient Flows in Metric Spaces and in the Space of Probability Measures*, Birkhäuser, 2008.
- [2] S. Amari and H. Nagaoka, *Methods of Information Geometry*, AMS, 2000.
- [3] D. Balduzzi, et al., “The Mechanics of n -Player Differentiable Games,” ICML 2018.
- [4] R. Jordan, D. Kinderlehrer, and F. Otto, “The Variational Formulation of the Fokker-Planck Equation,” *SIAM J. Math. Anal.* 29(1), 1–17, 1998.