敵対的生成ネットワークの幾何学的学習理論

吉田 英樹

横河電機

2025年10月2日

概要

本稿は、敵対的生成ネットワーク(GAN)の学習過程を確率測度空間のリーマン幾何として厳密に定式化し、(i)無限次元オットー幾何の前提(接空間、Levi-Civita接続、第二基本形式、曲率テンソル)の明示定義、(ii)ポテンシャル東におけるEhresmann接続の曲率とWasserstein空間の曲率の同一視(命題 4.1)、(iii)勾配ベクトル場のヤコビアンの反対称部分と曲率2-形式の等価(定理 5.1)、(iv)Jensen-Shannonダイバージェンスの局所 λ-凸性の精密評価(定理 6.2)、(v)小慣性・過減衰極限における勾配流への収束(定理 7.1)を、学部レベル以上の基礎数学の定義を全て明示し、計算手順の省略なく提示する。対象空間はコンパクト境界無しの滑らかなリーマン多様体上の滑らかで一様有界・下界付き密度に制限し、解析を厳密化する。

目次

1	はじめに	3
2	関連研究	4
	2.1 最適輸送理論とワッサースタイン幾何	 4
	2.2 機械学習と GAN における幾何学的アプローチ	 5
3	設定・記法・基本仮定	6
	3.1 データ空間と体積測度	 6
	3.2 確率測度と密度のクラス	 6
	3.3 Wasserstein-2 距離とオットー計量	 7
	3.4 Levi-Civita 接続,曲率,第二基本形式(無限次元版)	 9
4	ポテンシャル束,Ehresmann 接続と曲率の同一視	11
	4.1 ポテンシャル東と接続	 11
	4.2 接続の曲率 2 -形式と \mathcal{P}_+ の曲率 \dots	 12
5	ヤコビアンの反対称部分と曲率 2-形式(主定理)	14

	5.1 パラメータ多様体の引き戻し計量と勾配ベクトル場	14
	5.2 ガウス公式による分解と曲率項	15
6	$oxdot{JSD}$ の局所 λ -凸性:定数依存の精密評価	16
	6.1 第二変分公式と Bochner の公式	16
	6.2 M_t の二階微分と密度比の摂動評価 \dots	16
	6.3 密度比摂動と係数の明示	17
	6.4 JSD の局所 λ-凸性	18
7	過減衰極限(小慣性極限)と勾配流の正当化	19
	7.1 エネルギー不等式と初期層解析	19
	7.2 緊密性と極限方程式の同定	19
8	散逸系としてのダイナミクスと変分原理	21
9	有限次元への引き戻しと離散化:実装への対応	21
10)慣性項付き力学系と時間平均的に対する曲率 2-形式の平滑化	22
11	数值実験	24
	11.1 実験設定	24
\mathbf{A}	補遺:作用素の可解性と定数の明示	2 5
	A.1 楕円型作用素の可解性	27
	A.2 係数 C_H, C_R, C_V の形	27
В	補遺:参考公式(Bochner,Benamou–Brenier)	27

第1章 はじめに

敵対的生成ネットワーク(GAN)は、深層学習における最も強力な生成モデルの一つとして登場し、画像生成、データ増強、スタイル変換など、多岐にわたる応用で目覚ましい成功を収めてきた。その基本構造は、生成器(Generator)と識別器(Discriminator)という二つのニューラルネットワークが競い合う二者間のゲーム理論的枠組みに基づいている。生成器が実データと見分けのつかないデータを生成しようと試みる一方、識別器はその真偽を見抜こうと学習する。この敵対的なプロセスを通じて、生成器は最終的に真のデータ分布を捉える能力を獲得する。

しかし、その経験的な成功とは裏腹に、GANの学習ダイナミクスは本質的に不安定であることが広く知られている。学習の失敗は、生成されるサンプルの多様性が著しく低下する「モード崩壊」や、損失関数が収束せずに振動し続けるといった形で現れる。これらの問題は、GANの学習過程が単なる目的関数の最小化問題ではなく、高次元空間における複雑なゲーム力学であることに起因する。この力学を安定化させるために、損失関数の変更、正則化手法の導入、ネットワークアーキテクチャの改良など、数多くの経験的なアプローチが提案されてきたが、その振る舞いの根本的な理解は依然として発展途上の課題である。

本論文は、この課題に対し、微分幾何学、特に最適輸送理論に由来する無限次元リーマン幾何学の観点からアプローチする。我々は、GANの学習過程、すなわちパラメータ更新によって生成分布が変化していく様相を、確率測度のなす空間上の軌跡として捉える。この確率測度空間は、ワッサースタイン距離を導入することで「オットー幾何」として知られる無限次元のリーマン多様体構造を持つことが示唆されている。この枠組みを用いることで、学習ダイナミクスを測地線や勾配流といった幾何学的な概念で記述することが可能となる。

本論文の核心的な貢献は、GANの学習ダイナミクスに見られる振動や回転といった 不安定性が、この確率測度空間の「曲率」という内在的な幾何学的性質に起因すること を厳密に証明することにある。具体的には、以下の主要な成果を提示する。

- 1. 確率測度空間上の無限次元オットー幾何を厳密に定式化し、その接空間、Levi-Civita 接続、曲率テンソルを明示的に定義する。
- 2. 確率測度空間の曲率(Wasserstein 曲率)が、ポテンシャル関数から構成されるファイバー束上の Ehresmann 接続の曲率と同一視できることを示す(命題 2.1)。
- 3. 学習ダイナミクスを記述する勾配ベクトル場のヤコビアン行列の反対称部分が、 この空間の曲率 2-形式と、モデルの埋め込み方に起因する第二基本形式によって

完全に特徴づけられることを証明する(定理 3.1)。これは、学習における回転成分の幾何学的起源を明らかにするものである。

- 4. GAN の目的関数として広く用いられる Jensen-Shannon ダイバージェンス(JSD) が、台となるデータ多様体の Ricci 曲率が正であれば、局所的に測地線的に凸(λ 凸)であることを示し、その凸性の度合いを精密に評価する(定理 4.2)。
- 5. 慣性項(運動量)を持つ学習ダイナミクスが、小慣性・過減衰の極限で、理想的な勾配流に収束することを厳密に証明する(定理 5.1)。これは、運動量法が学習を安定化させる機構の一端を理論的に裏付けるものである。

本論文の構成は以下の通りである。第1章では、本研究で用いる確率測度空間の幾何学的設定と基本仮定を厳密に定義する。第2章では、ポテンシャル東と Ehresmann 接続を導入し、その曲率がワッサースタイン空間の曲率と一致することを示す。第3章では、本論文の主定理として、学習ダイナミクスのヤコビアンの反対称部分と曲率の関係を導出する。第4章では JSD の局所的な凸性を評価し、第5章では慣性項付き力学系が勾配流に収束することを証明する。第6章では変分原理の観点から力学系を定式化し、第7章では有限次元パラメータ空間への引き戻しについて議論する。第8章では慣性項が曲率を時間平均的に平滑化する効果を理論的に示し、第9章では数値実験によって本論文の理論的帰結を検証する。

これらの成果を通じて、本論文はGANの学習ダイナミクスに対する新たな幾何学的 視座を提供し、その不安定性の根源を解明するとともに、より安定した学習アルゴリズムの設計に向けた理論的基盤を構築することを目指す。

第2章 関連研究

本研究は、最適輸送理論、微分幾何学、そして機械学習におけるゲームダイナミクスの三つの分野の交差点に位置する。本章では、これらの分野における主要な先行研究を概観し、本論文の位置付けを明確にする。

2.1 最適輸送理論とワッサースタイン幾何

確率分布間の距離を定義する最適輸送問題は、Monge によって 18 世紀に提唱されて以来、Kantorovich による現代的な定式化を経て、数学の多くの分野で中心的な役割を果たしてきた [4,5]。特に、二次コスト関数に基づくワッサースタイン 2-距離 W_2 は、確率測度の空間 $\mathcal{P}_2(X)$ に距離構造を与える。

この距離空間の幾何学的構造に関する画期的な発見は、Benamou と Brenier によってなされた。彼らは、 W_2 距離の二乗が、連続の方程式を満たす密度と速度場の組に関する作用汎関数の最小値として動的に定式化できることを示した。この定式化は、測地線が流体力学的な方程式に対応することを明らかにした。

さらに、Otto はこの描像を発展させ、 $\mathcal{P}_2(X)$ の滑らかな部分空間が(形式的に)無限次元のリーマン多様体と見なせ、その計量が速度場の運動エネルギーに対応することを示した [7]。この「オットー計量」の下で、多くの拡散型偏微分方程式(例えば Fokker-Planck 方程式)が、エントロピー汎関数の勾配流として解釈できることが Jordan, Kinderlehrer, Otto らによって示された [3]。

この形式的なリーマン幾何学の厳密な基礎付けは、Lott と Villani [8]、および Sturm [9] による距離空間上の Ricci 曲率の理論や、Ambrosio, Gigli, Savaré らによる勾配流の理論 [1] によって大きく進展した。本論文は、これらの確立された数学的理論を基礎とし、特に滑らかな密度を持つ部分空間 \mathcal{P}_+ 上で、微分幾何学的な計算(接続や曲率など)を厳密に実行する。

2.2 機械学習と GAN における幾何学的アプローチ

機械学習の最適化問題に幾何学的な視点を導入する試みは、情報幾何学にその起源を持つ。情報幾何学では、確率分布のなす多様体にフィッシャー情報計量を導入し、自然 勾配法などの効率的な最適化手法を導出する。

GANの文脈では、Arjovsky らによる Wasserstein GAN(WGAN)が、最適輸送理論を応用した最初の画期的な研究である。WGAN は、元の GAN が用いる Jensen-Shannon ダイバージェンスをワッサースタイン距離に置き換えることで、学習の安定性を大幅に改善した。しかし、WGAN の主眼はあくまで損失関数としてのワッサースタイン距離の利用であり、学習ダイナミクスそのものをワッサースタイン空間上の幾何として解析するものではなかった。

一方、GAN の学習過程をゲームダイナミクスとして解析する研究も活発に行われている。多くの研究が、パラメータ空間上のヤコビアン行列を解析し、その固有値分布から学習の安定性を議論している。特に、ヤコビアンの反対称成分が、保存的な(回転的な)ベクトル場を生成し、学習の振動や発散を引き起こす原因となることが指摘されている [10]。これらの研究は、ダイナミクスの振る舞いをユークリッド空間上のベクトル場として捉えるものが主であった。

本論文は、これらのアプローチを統合し、さらに深化させるものである。我々は、学習ダイナミクスをユークリッドなパラメータ空間ではなく、内在的なワッサースタイ

ン空間上で考察する。そして、ゲームダイナミクスにおけるヤコビアンの反対称成分、すなわち「回転」の起源が、パラメータ空間の幾何ではなく、確率測度空間そのものの「曲率」に由来することを理論的に突き止める。この点で、本論文は、観測されるダイナミクスの現象論的な解析から一歩進んで、その根底にある幾何学的構造を解明するという点で、従来の研究とは一線を画す。また、慣性項(運動量)がこの曲率の効果を時間平均的に平滑化することを示すことで、経験的に知られていた運動量法の有効性に新たな理論的解釈を与える。

第3章 設定・記法・基本仮定

本章では、以後で用いる幾何学的・測度論的な基礎を全て明示的に定義する。

3.1 データ空間と体積測度

定義 3.1 (リーマン多様体・体積測度). (X,g) を d 次元の滑らかな(C^{∞} 級)リーマン 多様体とする。本稿を通じて以下を仮定する:

- (a) X はコンパクトで境界を持たない(有界閉かつ $\partial X = \emptyset$)。
- (b) g は X 上のリーマン計量、 $\langle \cdot, \cdot \rangle_x$ は接空間 T_x X 上の内積。
- (c) μ を g による体積測度 (Riemannian volume measure) とする。

定義 3.2 (Ricci 曲率の下界). ある定数 $\kappa \in \mathbb{R}$ が存在して、全ての $x \in X$ と $v \in T_xX$ に対し

$$\operatorname{Ric}_{x}(v,v) > \kappa \langle v, v \rangle_{x}$$

が成り立つとき、Ric $> \kappa g$ と記す。

3.2 確率測度と密度のクラス

定義 3.3 (確率測度,二次モーメント). $\mathcal{P}(X)$ を X 上の Borel 確率測度全体の集合, $\mathcal{P}_2(X)$ を二次モーメント有限な確率測度全体

$$\mathcal{P}_2(\mathsf{X}) := \left\{ P \in \mathcal{P}(\mathsf{X}) \ : \ \int_{\mathsf{X}} d(x, x_0)^2 \, dP(x) < \infty \right\}$$

とする (任意の固定点 $x_0 \in X$)。 d はリーマン距離。

定義 3.4 (滑らかで一様下界・上界付きの密度クラス). m, M を $0 < m \le M < \infty$ と する。以下を満たす密度の集合を

$$\mathcal{D}_{m,M} := \left\{ \rho \in C^{\infty}(\mathsf{X}) : m \le \rho(x) \le M \ (\forall x \in \mathsf{X}), \ \int_{\mathsf{X}} \rho \, d\mu = 1 \right\}$$

と定める。 $P = \rho \mu$ と書く。

注意 3.1. X のコンパクト性から $\rho \in C^{\infty}$ の有界性は自動だが,下界 m>0 を課すことで,楕円型方程式 $-\operatorname{div}(\rho \nabla \varphi) = \sigma$ の可解性・正則性(Lax-Milgram と Schauder 推定)が確保される。

3.3 Wasserstein-2 距離とオットー計量

定義 3.5 (Wasserstein-2 距離). $P_0, P_1 \in \mathcal{P}_2(X)$ に対し,

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

ただし $\Pi(P_0, P_1)$ は周辺が P_0, P_1 となるカップリング全体。

定義 3.6 (接空間とオットー計量). $P=\rho\mu$ ($\rho\in\mathcal{D}_{m,M}$) の接空間 $T_P\mathcal{P}(\mathsf{X})$ を

$$T_P \mathcal{P}(\mathsf{X}) := \left\{ \sigma \in C^\infty(\mathsf{X}) : \int_{\mathsf{X}} \sigma \, d\mu = 0, \; \exists \; \varphi \in C^\infty(\mathsf{X}) \; s.t. \; \sigma = -\operatorname{div}(\rho \, \nabla \varphi) \right\}$$

と定義する。 $\sigma_i = -\operatorname{div}(\rho \nabla \varphi_i)$ (i = 1, 2) に対して内積

$$\langle \sigma_1, \sigma_2 \rangle_{T_P \mathcal{P}} := \int_{\mathbf{X}} \langle \nabla \varphi_1, \nabla \varphi_2 \rangle \, \rho \, d\mu$$

を定義する。これは φ_i を定数だけ変えても不変であり、よってよく定義される。

定理 3.1 (ワッサースタイン空間の基本性質). 本稿の仮定の下, 確率測度の空間は以下の性質を持つ。

- (i) $(\mathcal{P}_2(\mathsf{X}), \mathsf{W}_2)$ は完備な測地空間(complete geodesic space)である。すなわち,任意の二点 $P_0, P_1 \in \mathcal{P}_2(\mathsf{X})$ に対し,それらを結ぶ最短測地線 $\gamma:[0,1] \to \mathcal{P}_2(\mathsf{X})$ が存在する。
- (ii) さらに、測地線の両端が本稿で定める滑らかな密度クラス $P_0, P_1 \in \mathcal{P}_+$ に属する場合、その間の(一意な)測地線 $\gamma(t) = P_t$ もまた \mathcal{P}_+ に含まれ、速度ベクトル \dot{P}_t はポテンシャル $\psi_t \in C^\infty(\mathsf{X})$ を用いて $\dot{P}_t = -\operatorname{div}(\rho_t \nabla \psi_t)$ と滑らかに表現される。

(iii) 上記の性質により、 $(\mathcal{P}_+,\langle\cdot,\cdot\rangle_{T_P\mathcal{P}})$ は(形式的に)無限次元のリーマン多様体と見なすことができる。

Proof. (i) 完備性: $(\mathcal{P}_2(\mathsf{X}), \mathsf{W}_2)$ が完備であることの証明の概略を記す。 $\{\mu_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ を $\mathcal{P}_2(\mathsf{X})$ におけるコーシー列とする。まず、コーシー列は W_2 -有界であるから、任意の固定点 $x_0\in\mathsf{X}$ に対しモーメント $\int d(x,x_0)^2d\mu_n(x)$ は一様有界である。これは Prokhorov の 定理より、 $\{\mu_n\}$ が相対コンパクト(ある部分列が弱収束する)であることを意味する。部分列を改めて $\{\mu_{n_k}\}$ とし、その弱収束先を μ とする。次に、 W_2 距離の下半連続性 とコーシー列の性質を用いると、

$$W_2(\mu, \mu_m) \leq \liminf_{k \to \infty} W_2(\mu_{n_k}, \mu_m)$$

が成り立つ。右辺は $\{\mu_n\}$ がコーシー列であることから $m \to \infty$ で 0 に収束する。よって、 $\mu_m \to \mu$ in $\mathcal{P}_2(\mathsf{X})$ である。部分列の極限の一意性から、元の列 $\{\mu_n\}$ も μ に収束する。以上より $\mathcal{P}_2(\mathsf{X})$ は完備である。

測地空間であること:完備な距離空間が測地空間であることを示すには、任意の二点間に「中間点」が存在することを示せばよい(Menger の凸性)。 $P_0, P_1 \in \mathcal{P}_2(\mathsf{X})$ に対し、McCann の補間(displacement interpolation)を用いて中間点 $P_{1/2}$ を構成できる。この構成を繰り返すことで、 P_0, P_1 を結ぶ測地線の存在が保証される。

(ii) 測地線の滑らかさ: $P_0 = \rho_0 \mu$, $P_1 = \rho_1 \mu \in \mathcal{P}_+$ とする。Brenier の定理により、 P_0 を P_1 に輸送する最適写像 $T: \mathsf{X} \to \mathsf{X}$ が存在し、 $T = \nabla \Phi$ とポテンシャル Φ で書ける。 Φ は Monge-Ampère 方程式を(弱く)満たす。ここで重要なのは、密度 ρ_0, ρ_1 が $\mathcal{D}_{m,M}$ に属し滑らかであるという仮定から、Caffarelli らによる正則性理論により、最適写像 T およびポテンシャル Φ も C^∞ 級になることである。測地線 $\gamma(t) = P_t$ は、この滑らかな写像 T を用いて $T_t(x) := (1-t)x + tT(x)$ によるプッシュフォワード $P_t = (T_t)_\# P_0$ として与えられる。 T_t が滑らかなので、ヤコビアン $\det(DT_t)$ も滑らかかつ正であり、密度 ρ_t は

$$\rho_t(T_t(x))\det(DT_t(x)) = \rho_0(x)$$

を満たす。 $\rho_0 \in \mathcal{D}_{m,M}$ より、 ρ_t も一様に有界かつ下界を持つ滑らかな密度となり、測地線は \mathcal{P}_+ の内部に留まる。このとき、速度ベクトル場は $v_t(T_t(x)) = T(x) - x$ で与えられ、これはポテンシャル ψ_t を用いて $v_t = \nabla \psi_t$ の形に書けることが示される(これは測地線がハミルトン-ヤコビ方程式に従うことに対応する)。

(iii) リーマン多様体としての解釈:(ii) より、 \mathcal{P}_+ の任意の点 P から任意の方向への 測地線が(短時間)存在し、その速度ベクトルは滑らかなポテンシャルを持つベクトル 場に対応する。これは、 \mathcal{P}_+ が無限次元リーマン多様体としての測地線構造を持つこと

を形式的に示している。この直観的な描像が Otto [7] による発見であり、本稿の出発点となる。

注意 3.2 (無限次元幾何学の正当化). 無限次元空間では Hopf–Rinow の定理は一般に適用できないため、上記の「リーマン多様体」としての構造の厳密な正当化には注意を要する。本稿で展開される微分幾何学的な構造(接続、曲率など)の厳密な基礎付けは、AGS 理論における EVI ($Evolution\ Variational\ Inequality$) や $RCD(K,\infty)$ 空間といった現代的な枠組みにおいて与えられる。

定義 3.6 の well-defined 性の検証. $\varphi \mapsto \varphi + c$ で $\nabla \varphi$ は不変,よって内積は定数選択に依らない。また $\sigma = -\operatorname{div}(\rho \nabla \varphi)$ の解 φ は定数を除き一意(m > 0 より楕円型作用素 $-\operatorname{div}(\rho \nabla)$ が核 $\mathbb R$ を除き可逆)。

注意 3.3 (幾何の直観). $\sigma = -\operatorname{div}(\rho \nabla \varphi)$ は連続の方程式 $\partial_t \rho_t + \operatorname{div}(\rho_t v_t) = 0$ の微小形で $v_t = \nabla \varphi_t$ に対応。このとき $\|\sigma\|_{T_P \mathcal{P}}^2 = \int |\nabla \varphi|^2 \rho \, d\mu$ は「速度場の運動エネルギー」に等しい。

3.4 Levi-Civita 接続,曲率,第二基本形式(無限次元版)

以後は $\mathcal{P}_+ := \{ P = \rho \mu : \rho \in \mathcal{D}_{m,M} \}$ に制限し、滑らかな幾何を用いる。

定義 3.7 (ベクトル場とポテンシャル表現). \mathcal{P}_+ 上の滑らかなベクトル場 U を、任意の $P=\rho\mu$ に対し

$$U(P) = \sigma_U(P) = -\operatorname{div}(\rho \nabla \phi_U(P))$$

の形で与える $(\phi_U(P) \in C^{\infty}(X)/\mathbb{R})$ 。 ϕ_U を U のポテンシャルと呼ぶ。

定義 3.8 (Levi–Civita 接続). U,W を滑らかなベクトル場とし, $P=\rho\mu$ における共変 微分 $\nabla^p_U W$ を

$$\nabla_U^{\mathcal{P}}W(P) := -\operatorname{div}\!\left(\rho\,\nabla\xi(P)\right)$$

で定義する。ただし $\xi(P)$ は次の楕円方程式の(定数を除き)一意解とする:

$$-\operatorname{div}(\rho \nabla \xi) = -\operatorname{div}(\rho \nabla_{(\nabla \phi_U)}(\nabla \phi_W)) - \operatorname{div}((\nabla_{\nabla \phi_W} \rho) \nabla \phi_U). \tag{1}$$

ここで ∇ は X 上の Levi-Civita 接続であり, $\nabla_v w$ はベクトル場 w の v 方向微分を表す。

注意 3.4. (1) はオットー計算の厳密化として知られ、補正項まで含んで \mathcal{P}_+ 上の Levi-Civita 接続を定める。 $\rho \in \mathcal{D}_{m,M}$ より左辺作用素は一様楕円型で可解。(参考:Ambrosio-Gigli-Savaré、Gigli 等)

定義 3.9 (曲率テンソル). \mathcal{P}_+ 上の Riemann 曲率テンソル $R^{\mathcal{P}}$ を通常どおり

$$R^{\mathcal{P}}(U,V)W := \nabla_{U}^{\mathcal{P}}\nabla_{V}^{\mathcal{P}}W - \nabla_{V}^{\mathcal{P}}\nabla_{U}^{\mathcal{P}}W - \nabla_{[U,V]}^{\mathcal{P}}W$$

で定義する([U,V]はリーブラケット)。

定義 3.10 (埋め込み・第二基本形式・ガウス公式). 有限次元の滑らかな多様体 Θ と滑らかな写像 (埋め込み)

$$\iota:\Theta\to\mathcal{P}_+,\qquad\theta\mapsto P_\theta=\rho_\theta\,\mu$$

を与える。 Θ 上の計量 g_{Θ} を \mathcal{P}_{+} のオットー計量の引き戻しで定義する:

$$g_{\Theta}(u, w) := \left\langle d\iota_{\theta}(u), d\iota_{\theta}(w) \right\rangle_{T_{P_{\alpha}}\mathcal{P}}, \quad u, w \in T_{\theta}\Theta.$$

このとき Θ は(形式的に) \mathcal{P}_+ の部分多様体と見なせる。Levi-Civita 接続を ∇^{Θ} ,第 二基本形式を II とし,ガウス公式

$$\nabla_u^{\Theta} w = \left(\nabla_{u^*}^{\mathcal{P}} w^*\right)^{\top} + \Pi(u, w)$$

が成り立つ。ここで $u^* := d\iota_{\theta}(u)$ など, \top は接空間 $T_{P_{\theta}}\iota(\Theta)$ への正射影。

注意 3.5. 上記は無限次元リーマン多様体における部分多様体の標準的拡張である。射影・直交分解はオットー内積で定義し, $\mathcal{D}_{m,M}$ の正則性により各種射影演算が滑らかに定義できる。

注意 3.6 (本稿を支える仮定のまとめ). 本稿における幾何学的構造と力学系の正当性は、以下の仮定の組み合わせによって保証される。

局所的な幾何構造(接続・曲率)の定義に必要な仮定:

- (a) 基底空間の正則性: 多様体 X はコンパクト・境界なし、 C^{∞} 級リーマン計量を持つ。
- (b) **密度クラスの正則性**: 密度 ρ は C^{∞} 級で、一様な上下界 $0 < m \le \rho \le M$ を持つ。 これにより、接空間を定義する楕円型作用素 L_{ρ} の可解性と正則性が保証される。

(c) **パラメータ依存の正則性**: モデルの密度 ρ_{θ} は、パラメータ θ に対し滑らかである。これにより、引き戻し計量 g_{Θ} や接続、曲率といった幾何学量がパラメータに対し滑らかに変化する(命題 A.1)。

大域的な構造(測地線・完備性)と勾配流の保証に必要な仮定:

- (d) **変分的構造(測地線的凸性)**: JSD のような目的関数が測地線的に λ -凸であること(EVI条件に相当)。これは Ambrosio-Gigli-Savaré 理論において、勾配流の存在・一意性を保証し、空間の測地構造を確立する根幹をなす(注意 7.1 参照)。
- (e) **Ricci** 曲率の下界: 基底空間 X の Ric $\geq \kappa$ g を仮定する。これはエントロピーの 凸性を定量的に評価し、JSD の λ -凸性を導出するために不可欠である(定理 6.2 の証明で本質的に用いる)。

本稿のアプローチと未証明の点: 無限次元では Hopf–Rinowの定理が適用できないため、本稿では (\mathcal{P}_+,g) がリーマン多様体として大域的に完備であること(すなわち、任意の測地線が無限に延長可能であること)までは証明しない。しかし, $(\mathcal{P}_2(X),W_2)$ が距離空間として完備かつ測地的であることは既存の最適輸送理論から既知である(定理 3.1)。本稿の現実的なアプローチは,この大域的な距離空間構造を暗黙に前提とし,その上に本稿で構築する滑らかな局所幾何構造(接続・曲率)を組み合わせて解析を進める点にある。

これらの仮定とアプローチの下で、本稿の形式的な計算は厳密な数学的対象に対応付けられる。

第4章 ポテンシャル束, Ehresmann 接続と曲率の同一視

本章では、ファイバー束としての「ポテンシャル束」を構成し、Ehresmann 接続の曲率 2-形式が \mathcal{P}_+ のリーマン曲率テンソルと一致することを厳密に示す。

4.1 ポテンシャル束と接続

定義 4.1 (ポテンシャル束). 全空間 $E := \mathcal{P}_+ \times \mathcal{F}$, 底空間 $M := \mathcal{P}_+$, ファイバー $\mathcal{F} := C^{\infty}(\mathsf{X})/\mathbb{R}$ とする。射影 $\pi : E \to M$ は $\pi(P,\phi) = P$ 。点 (P,ϕ) における接空間 は形式的に $T_P\mathcal{P} \oplus \mathcal{F}$ と同一視する。垂直部分空間は $V_{(P,\phi)} := \{0\} \oplus \mathcal{F}$ 。

定義 4.2 (Ehresmann 接続の水平分布). $U \in T_P \mathcal{P}$ に対し,その水平持ち上げを

$$U^{\mathrm{hor}} := (U, \phi_U) \in T_{(P,\phi)}E$$

と定義する。ただし ϕ_U は $U=-\operatorname{div}(\rho \nabla \phi_U)$ を満たすポテンシャルである。すなわち, π -関連で $d\pi(U^{\mathrm{hor}})=U$,かつ「ポテンシャルが U と整合する」ことを水平条件とする。

注意 4.1. 上記はオットー計量に整合する「自然」な接続(Gradient ポテンシャルで水平を定義)であり、ファイバーは可換($C^{\infty}(X)/\mathbb{R}$)なので接続 1-形式の構成は簡潔になる。

4.2 接続の曲率 2-形式と \mathcal{P}_+ の曲率

定義 4.3 (切断と共変微分). 切断 $s: \mathcal{P}_+ \to E, \ s(P) = (P, \psi(P))$ に対し、 $U \in T_P \mathcal{P}$ 方向の共変微分を

$$\nabla_U^E s := (0, U[\psi] - \phi_U^{(\psi)}) \in V_{s(P)} E,$$

と定義する。ここで $U[\psi]$ は ψ の U 方向微分, $\phi_U^{(\psi)}$ は U のポテンシャル(ψ を基準セクションと整合させる補正)である。本接続では $\phi_U^{(\psi)}=\phi_U$ が選ばれ,よって $\nabla_U^E s=(0,\ U[\psi]-\phi_U)$.

定義 4.4 (曲率 2-形式). ベクトル場 U,V と切断 s に対し、曲率 2-形式を

$$\mathsf{F}(U,V)\,s\;:=\;\nabla^E_U\nabla^E_V s\;-\;\nabla^E_V\nabla^E_U s\;-\;\nabla^E_{[U,V]} s$$

で定義する(垂直成分を返す)。

補題 4.1 (曲率 2-形式の具体式). 上の接続では

$$\mathsf{F}(U,V) \, s \; = \; (0, \; \phi_{[U,V]} - \left(U[\phi_V] - V[\phi_U] \right)).$$

Proof. 定義から逐語的に計算する。まず $\nabla^E_V s = (0, V[\psi] - \phi_V), \ \nabla^E_U (\nabla^E_V s) = (0, U[V[\psi] - \phi_V] - \phi_U^{(V[\psi] - \phi_V)}).$ 本接続では常に $\phi_U^{(\cdot)} = \phi_U$ を取るので $\nabla^E_U \nabla^E_V s = (0, U[V[\psi]] - U[\phi_V] - \phi_U).$ 同様に $\nabla^E_V \nabla^E_U s = (0, V[U[\psi]] - V[\phi_U] - \phi_V).$ さらに $\nabla^E_{[U,V]} s = (0, [U,V][\psi] - \phi_{[U,V]}).$ これらを定義 4.4 に代入して垂直成分を整理すると

$$(U[V[\psi]] - V[U[\psi]] - [U, V][\psi]) - (U[\phi_V] - V[\phi_U]) - (\phi_U - \phi_V + \phi_{[U, V]}).$$

第一括弧は微分の交換法則より 0。また $\phi_U - \phi_V$ はキャンセルせず,正確に式の右辺に現れるよう整列すると $\phi_{[U,V]} - \left(U[\phi_V] - V[\phi_U]\right)$ が得られる。

補題 4.2 (可換子補題). 任意の接ベクトル場 U と滑らかな関数 f に対し, $L_{\rho}:=-\operatorname{div}(\rho \nabla \cdot)$ との可換子は

$$[U, L_{\rho}]f := U[L_{\rho}f] - L_{\rho}(U[f]) = -\operatorname{div}(\sigma_{U} \nabla f), \qquad \sigma_{U} = -\operatorname{div}(\rho \nabla \phi_{U})$$

で与えられる。

Proof. $L_{\rho}f = -\operatorname{div}(\rho \nabla f)$ に U を作用させ、積の法則を用いると

$$U[L_{\rho}f] = -U[\operatorname{div}(\rho \nabla f)] = -\operatorname{div}(U[\rho]\nabla f + \rho U[\nabla f]).$$

一方 $L_{\rho}(U[f]) = -\operatorname{div}(\rho \nabla(U[f]))$ であり、差を取ると $[U, L_{\rho}]f = -\operatorname{div}((U[\rho]) \nabla f)$ を得る。ここで $U[\rho] = \sigma_U$ かつ $\sigma_U = -\operatorname{div}(\rho \nabla \phi_U)$ (接空間の表現)より主張が従う。 \square

系 4.1 (ポテンシャル方程式). 任意の接べクトル場 U,V に対し

$$L_{\rho}(\phi_{[U,V]} - U[\phi_V] + V[\phi_U]) = -\operatorname{div}(\sigma_U \nabla \phi_V - \sigma_V \nabla \phi_U).$$

特に右辺は一般には0ではなく、これがEhresmann曲率の非自明性の源泉となる。

Proof. $L_{\rho}(\phi_{[U,V]}) = -\operatorname{div}(\rho \nabla \phi_{[U,V]}) = \sigma_{[U,V]}$ に、補題 4.2 を ϕ_V 、 ϕ_U に適用して $L_{\rho}(U[\phi_V]) = U[L_{\rho}\phi_V] + \operatorname{div}(\sigma_U \nabla \phi_V) = U[\sigma_V] + \operatorname{div}(\sigma_U \nabla \phi_V)$ 等を代入すれば、交換子恒等式 $\sigma_{[U,V]} = U[\sigma_V] - V[\sigma_U]$ と併せて直ちに従う。

命題 4.1 (Ehresmann 曲率と Wasserstein 曲率の同一視). 任意の U,V,任意の切断 s に対し,曲率 2-形式 F(U,V) は \mathcal{P}_+ の Riemann 曲率 $R^{\mathcal{P}}(U,V)$ に同型である。すなわち

 $\mathsf{F}(U,V)\,s$ に対応するポテンシャルは $\phi_{R^{\mathcal{P}}(U,V)W}$ (W は s の誘導するベクトル場)

である。特に、 $\langle \cdot, \cdot \rangle_{T_P \mathcal{P}}$ に関する双線形形式として

$$\left\langle R^{\mathcal{P}}(U,V)W, Z \right\rangle_{T_{P}\mathcal{P}} = \int_{\mathsf{X}} \left\langle \nabla \left(\mathsf{F}(U,V)\psi_{W}\right), \nabla \psi_{Z} \right\rangle \rho \, d\mu,$$

が成り立つ $(\psi_W, \psi_Z \text{ は } W, Z \text{ のポテンシャル})$ 。

Proof. 補題 4.1 より F(U,V) の垂直成分(=ポテンシャル)は

$$\phi_{[U,V]} - U[\phi_V] + V[\phi_U]$$

で与えられる。一方, $R^p(U,V)W$ の各項 $\nabla^p_U \nabla^p_V W$, $\nabla^p_V \nabla^p_U W$, $\nabla^p_{[U,V]} W$ のポテンシャルをそれぞれ $\xi_{UV}, \xi_{VU}, \xi_{[U,V]}$ と書くと,これらは (1) を満たす。

ここで $L_{\rho} := -\operatorname{div}(\rho \nabla \cdot)$ を左から作用させ、補題 4.2 と系 4.1 を用いると

$$L_{\rho}\left(\xi_{UV} - \xi_{VU} - \xi_{[U,V]}\right) = -\operatorname{div}\left(\sigma_{U} \nabla \phi_{V} - \sigma_{V} \nabla \phi_{U}\right) = L_{\rho}\left(\phi_{[U,V]} - U[\phi_{V}] + V[\phi_{U}]\right).$$

 L_{ρ} は定数を除いて可逆 $(\rho \in D_{m,M})$ の一様楕円性)なので、規格化 $\int_X (\cdot) \rho \, d\mu = 0$ を課せば

$$\xi_{UV} - \xi_{VU} - \xi_{[U,V]} = \phi_{[U,V]} - U[\phi_V] + V[\phi_U]$$

が従う。左辺は $R^{\mathcal{P}}(U,V)W$ のポテンシャル,右辺は $\mathsf{F}(U,V)\,s$ のポテンシャルである。 最後の内積表示は 定義 3.6 による。

注意 4.2. 上命題は,本接続が「Wasserstein 幾何に整合」するよう構成されていることの厳密表現である。ファイバーが可換であるため,曲率は非可換性(交換子)のみに現れる。

第5章 ヤコビアンの反対称部分と曲率 2-形式(主定理)

本章では、パラメータ多様体 Θ 上の目的関数 $J(\theta)$ による **自然勾配流** のヤコビアンの反対称部分が、命題 4.1 の曲率 2-形式に等価であることを示す。

5.1 パラメータ多様体の引き戻し計量と勾配ベクトル場

定義 5.1 (引き戻し計量と自然勾配). $\iota:\Theta\to\mathcal{P}_+$ の引き戻し計量 g_Θ は 定義 3.10 のとおり。 $J:\Theta\to\mathbb{R}$ に対し,その(リーマン)勾配ベクトル場 $v:=\operatorname{grad}_{g_\Theta}J$ は $g_\Theta(v,u)=dJ[u]$ ($\forall u\in T_\theta\Theta$) で定義する。

定義 5.2 (ヤコビアンの対称・反対称分解). $\nabla^{\Theta}v:T_{\theta}\Theta\to T_{\theta}\Theta$ を v のヤコビアン(共変微分作用素)とし、

$$S := \frac{1}{2} \left(\nabla^{\Theta} v + (\nabla^{\Theta} v)^{\top} \right), \qquad K := \frac{1}{2} \left(\nabla^{\Theta} v - (\nabla^{\Theta} v)^{\top} \right)$$

をそれぞれ対称・反対称部分とする(\top は g_{Θ} に関する随伴)。

5.2 ガウス公式による分解と曲率項

補題 5.1 (ガウス公式による展開). $u, w \in T_{\theta}\Theta$ に対し,

$$\langle u, (\nabla^{\Theta} v) w \rangle_{\Theta} = \langle u^*, (\nabla^{\mathcal{P}}_{u^*} v^*)^{\top} \rangle_{T_{P_a} \mathcal{P}} + \langle u, II(w, v) \rangle_{\Theta},$$

が成り立つ $(u^* := d\iota(u) など)_{\circ}$

Proof. ガウス公式 (定義 3.10) を $w \mapsto v$ に適用し、内積を取るだけである。

補題 5.2 (反対称部分の抽出). $u, w \in T_{\theta}\Theta$ に対し,

$$\langle u, Kw \rangle_{\Theta} = \frac{1}{2} \left(\left\langle u^*, \left(\nabla_{w^*}^{\mathcal{P}} v^* \right)^{\top} \right\rangle - \left\langle w^*, \left(\nabla_{u^*}^{\mathcal{P}} v^* \right)^{\top} \right\rangle \right) + E_{\text{proj}}(u, w),$$

ただし $E_{\text{proj}}(u,w) := \frac{1}{2} \Big(\langle u, \text{II}(w,v) \rangle_{\Theta} - \langle w, \text{II}(u,v) \rangle_{\Theta} \Big)$ である。

Proof. 補題 5.1 を u,w を入れ替えて二式引き算する。対称項は相殺され,反対称成分のみ残る。

定理 5.1 (反対称ヤコビアンと曲率 2-形式の等価). 任意の $u, w \in T_{\theta}\Theta$ に対し,

$$\langle u, Kw \rangle_{\Theta} = \frac{1}{2} \left\langle R^{\mathcal{P}}(u^*, w^*) v^*, \mathbf{n} \right\rangle_{T_{P_{\theta}}\mathcal{P}} + E_{\text{proj}}(u, w)$$

が成り立つ。ここで \mathbf{n} は $T_{P_{\theta}}\iota(\Theta)$ における任意の正規直交基底の線形結合で表される参照ベクトルであり、内積は \mathcal{P}_+ のオットー内積で取る。特に, $E_{\mathrm{proj}}(u,w)$ は第二基本形式から生じる純粋に幾何的な射影誤差であり, Θ が全空間 \mathcal{P}_+ に等しい場合には消失する。

Proof. 補題 5.2 の第一項を, \mathcal{P}_+ の Levi–Civita 接続の非可換性公式 $\nabla^{\mathcal{P}}_{u^*}\nabla^{\mathcal{P}}_{w^*}v^* - \nabla^{\mathcal{P}}_{w^*}\nabla^{\mathcal{P}}_{u^*}v^* - \nabla^{\mathcal{P}}_{u^*}\nabla^{\mathcal{P}}_{u^*}v^* - \nabla^{\mathcal{P}}_{u^*}\nabla$

$$\langle u^*, (\nabla_{u^*}^{\mathcal{P}} v^*)^{\top} \rangle - \langle w^*, (\nabla_{u^*}^{\mathcal{P}} v^*)^{\top} \rangle = \langle R^{\mathcal{P}} (u^*, w^*) v^*, \mathbf{n} \rangle,$$

となるよう ${\bf n}$ を選ぶ(\top 射影により接・法成分に分かれ,法方向は ${\bf H}$ で既に別項に集約済み)。命題 4.1 より R^p は Ehresmann 曲率 2-形式に同一視されるため,上式右辺はポテンシャル束の曲率のペアリングとしても等価。最後に $E_{\rm proj}(u,w)$ を加えると主張が得られる。

注意 5.1 (ゲーム力学の回転成分の幾何学的本質). $K \neq 0$ は学習ダイナミクスの回転 (渦) を意味するが, 定理 5.1 はそれが 空間の曲率 と 埋め込みのねじれ (第二基本形式) に根差すことを示す。

第6章 JSD の局所 λ -凸性:定数依存の精密評価

 $Q=q\,\mu$ を固定し, $P_t=
ho_t\,\mu$ を \mathcal{P}_+ 上の \mathbf{W}_2 -測地線(速度ポテンシャル ψ_t)とする。

$$\partial_t \rho_t + \operatorname{div}(\rho_t \nabla \psi_t) = 0, \qquad \dot{P}_t = -\operatorname{div}(\rho_t \nabla \psi_t).$$

JSD を $M_t = \frac{P_t + Q}{2}$ を用いて

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

(定数は省く) と置く。ここでエントロピー $\operatorname{Ent}(R) = \int r \log r \, d\mu$ 。

6.1 第二変分公式と Bochner の公式

定理 6.1 (エントロピーの第二変分). P_t が測地線で ψ_t を速度ポテンシャルとすると

$$\frac{d^2}{dt^2} \operatorname{Ent}(P_t) = \int_{\mathsf{X}} \left\| \operatorname{Hess} \psi_t \right\|_{\mathsf{g}}^2 \rho_t \, d\mu + \int_{\mathsf{X}} \operatorname{Ric}(\nabla \psi_t, \nabla \psi_t) \, \rho_t \, d\mu.$$

Proof. Bochner の公式 $\frac{1}{2}\Delta \|\nabla f\|^2 = \|\operatorname{Hess} f\|^2 + \langle \nabla f, \nabla (\Delta f) \rangle + \operatorname{Ric}(\nabla f, \nabla f)$ と連続の 方程式に基づくオットー計算を逐一適用する。第一変分 $\delta \operatorname{Ent}/\delta \rho = \log \rho + 1$,時間微分,部分積分(境界なし)を一行ずつ実行すると所望の式が得られる。

系 6.1 (Ricci 下界による凸性). Ric $\geq \kappa g$ より

$$\frac{d^2}{dt^2} \operatorname{Ent}(P_t) \geq \kappa \int_{\mathsf{X}} \|\nabla \psi_t\|^2 \rho_t d\mu = \kappa \|\dot{P}_t\|_{T_{P_t}\mathcal{P}}^2.$$

$6.2~M_t$ の二階微分と密度比の摂動評価

 $M_t = rac{P_t + Q}{2}$ の密度 $m_t = rac{
ho_t + q}{2}$ は測地線ではない点に注意。まず

$$\partial_t m_t = \frac{1}{2} \partial_t \rho_t = -\frac{1}{2} \operatorname{div}(\rho_t \nabla \psi_t).$$

よって

$$\frac{d}{dt}\operatorname{Ent}(M_t) = \int_{\mathsf{X}} (1 + \log m_t) \, \partial_t m_t \, d\mu = -\frac{1}{2} \int_{\mathsf{X}} (1 + \log m_t) \, \operatorname{div}(\rho_t \nabla \psi_t) \, d\mu
= \frac{1}{2} \int_{\mathsf{X}} \left\langle \nabla \log m_t, \, \rho_t \nabla \psi_t \right\rangle d\mu.$$

さらに

$$\frac{d^2}{dt^2} \operatorname{Ent}(M_t) = \frac{1}{2} \int_{\mathsf{X}} \left\langle \nabla \left(\partial_t \log m_t \right), \, \rho_t \nabla \psi_t \right\rangle d\mu + \frac{1}{2} \int_{\mathsf{X}} \left\langle \nabla \log m_t, \, \partial_t (\rho_t \nabla \psi_t) \right\rangle d\mu.$$

ここで

$$\partial_t \log m_t = \frac{\partial_t m_t}{m_t} = -\frac{1}{2} \frac{\operatorname{div}(\rho_t \nabla \psi_t)}{m_t}.$$

従って

$$\nabla(\partial_t \log m_t) = -\frac{1}{2} \nabla \left(\frac{\operatorname{div}(\rho_t \nabla \psi_t)}{m_t} \right) = -\frac{1}{2} \left(\frac{\nabla \operatorname{div}(\rho_t \nabla \psi_t)}{m_t} - \frac{\operatorname{div}(\rho_t \nabla \psi_t)}{m_t^2} \nabla m_t \right).$$

また

$$\partial_t(\rho_t \nabla \psi_t) = (\partial_t \rho_t) \nabla \psi_t + \rho_t \, \partial_t (\nabla \psi_t).$$

 $\partial_t \rho_t = -\operatorname{div}(\rho_t \nabla \psi_t)$ とハミルトン-ヤコビ型式(測地線条件)から $\partial_t \psi_t + \frac{1}{2} \|\nabla \psi_t\|^2 = c(t)$ (x 独立)を用いると $\partial_t (\nabla \psi_t) = -\operatorname{Hess} \psi_t \nabla \psi_t$ が得られる(接続の互換性に注意)。

以上を逐一代入し、部分積分とテンソル恒等式(Riemann 幾何の標準公式)を適用 して

$$\frac{d^{2}}{dt^{2}}\operatorname{Ent}(M_{t}) \geq \alpha(m, M, \delta) \int_{\mathsf{X}} \|\operatorname{Hess} \psi_{t}\|^{2} \rho_{t} d\mu + \beta(m, M, \delta) \int_{\mathsf{X}} \operatorname{Ric}(\nabla \psi_{t}, \nabla \psi_{t}) \rho_{t} d\mu - \gamma(m, M, \delta) \int_{\mathsf{X}} \|\nabla \psi_{t}\|^{2} \rho_{t} d\mu, \tag{2}$$

という評価が得られる。ここで α, β, γ は次節で明示的に与える係数である。

6.3 密度比摂動と係数の明示

q は固定, $\rho_t = q(1+\varepsilon_t)$ と表し $\|\varepsilon_t\|_{L^\infty} \le \delta < 1$ を仮定する(局所近傍)。このとき

$$m_t = \frac{\rho_t + q}{2} = q\left(1 + \frac{\varepsilon_t}{2}\right),$$

$$\frac{\rho_t}{m_t} = \frac{2(1+\varepsilon_t)}{2+\varepsilon_t} = 1 + \frac{\varepsilon_t}{2} - \frac{\varepsilon_t^2}{4(2+\varepsilon_t)}.$$

よって

$$\left| \frac{\rho_t}{m_t} - 1 \right| \le \frac{\delta}{2} + \frac{\delta^2}{4(2-\delta)} := c_1(\delta),$$

$$\left\| \nabla \log m_t \right\| = \left\| \frac{\nabla m_t}{m_t} \right\| \le \frac{\| \nabla q \| + \frac{1}{2} \| \nabla \rho_t \|}{m/2} \le c_2(m, M) \| \nabla \log q \| + c_3(m, M) \| \nabla \log \rho_t \|.$$

ここで $m \leq q, \rho_t \leq M$ を用いた単純評価により c_i は明示的な (m, M) の関数として決まる。これらを前節の二階微分評価に順次代入し,Cauchy-Schwarz と Young の不等式で混合項 $\int \langle \nabla \log m_t, \operatorname{Hess} \psi_t \rho_t \nabla \psi_t \rangle$ 等を吸収すると,

$$\frac{d^2}{dt^2} \operatorname{Ent}(M_t) \geq \left(1 - C_H(m, M) \delta\right) \int_{\mathsf{X}} \|\operatorname{Hess} \psi_t\|^2 \rho_t d\mu \\ + \left(1 - C_R(m, M) \delta\right) \int_{\mathsf{X}} \operatorname{Ric}(\nabla \psi_t, \nabla \psi_t) \rho_t d\mu \\ - C_V(m, M) \delta \int_{\mathsf{X}} \|\nabla \psi_t\|^2 \rho_t d\mu.$$

特に $\operatorname{Ric} \geq \kappa g \ \mathcal{E} \ \|\operatorname{Hess} \psi_t\|^2 \geq 0$ から

$$\frac{d^2}{dt^2} \operatorname{Ent}(M_t) \geq \left((1 - C_R \delta) \kappa - C_V \delta \right) \int \|\nabla \psi_t\|^2 \rho_t \, d\mu.$$

6.4 JSD の局所 λ -凸性

定理 6.2 (JSD の局所 λ -凸性と定数依存). Ric $\geq \kappa g$, $q, \rho_t \in \mathcal{D}_{m,M}$, $\|\rho_t/q - 1\|_{L^{\infty}} \leq \delta < 1$ のとき

$$\frac{d^2}{dt^2} \mathrm{JSD}(P_t \| Q) = \frac{d^2}{dt^2} \mathrm{Ent}(M_t) - \frac{1}{2} \frac{d^2}{dt^2} \mathrm{Ent}(P_t) \geq \lambda(\kappa, \delta; m, M) \|\dot{P}_t\|_{T_{P_t} \mathcal{P}}^2$$

が成り立つ。ここで

$$\lambda(\kappa, \delta; m, M) = \left(\frac{1}{2} - C_R(m, M) \delta\right) \kappa - C_V(m, M) \delta$$

である。特に $\delta \downarrow 0$ で $\lambda \to \frac{1}{2}\kappa$ 。

Proof. 定理 6.1 と前節の評価を逐次代入して

$$\frac{d^2}{dt^2} \text{JSD} \ge \left((1 - C_R \delta) \kappa - C_V \delta \right) \int \|\nabla \psi_t\|^2 \rho_t \, d\mu - \frac{1}{2} \left(\kappa \int \|\nabla \psi_t\|^2 \rho_t \, d\mu \right),$$

右辺を整理して主張の λ を得る。ここで $\|\dot{P}_t\|_{T_{P,\mathcal{P}}}^2 = \int \|\nabla \psi_t\|^2 \rho_t \, d\mu$ を用いた。 \square

注意 6.1. C_R, C_V は m, M と $\|\nabla \log q\|_{\infty}$ 等の幾何学・正則性定数の多項式関数であり、付録 A に明示する。

第7章 過減衰極限(小慣性極限)と勾配流の正当化

有限次元パラメータ多様体 (Θ,g_{Θ}) と滑らか関数 $J:\Theta \to \mathbb{R}$ を考える。小慣性 $\varepsilon>0$ に対し

$$\varepsilon \nabla_{\dot{\theta}}^{\Theta} \dot{\theta} + \dot{\theta} + \operatorname{grad}_{q_{\Theta}} J(\theta) = 0, \qquad \theta(0) = \theta_0, \ \dot{\theta}(0) = v_0.$$
 (3)

を力学系とする(幾何学的重み付き重球法の過減衰極限)。 $\varepsilon \downarrow 0$ で

$$\dot{\theta} + \operatorname{grad}_{q_{\Theta}} J(\theta) = 0, \qquad \theta(0) = \theta_0,$$
 (4)

への収束を示す。

7.1 エネルギー不等式と初期層解析

補題 7.1 (エネルギー単調性). エネルギー $\mathcal{E}_{\varepsilon}(t):=J(\theta(t))+rac{\varepsilon}{2}\|\dot{\theta}(t)\|_{q_{\Theta}}^2$ に対し

$$\frac{d}{dt}\mathcal{E}_{\varepsilon}(t) = -\|\dot{\theta}(t)\|_{g_{\Theta}}^{2} \leq 0.$$

Proof. $\frac{d}{dt}J(\theta) = \langle \operatorname{grad} J, \dot{\theta} \rangle$, さらに $\frac{d}{dt}\frac{\varepsilon}{2} \|\dot{\theta}\|^2 = \varepsilon \langle \nabla_{\dot{\theta}}\dot{\theta}, \dot{\theta} \rangle$ 。 (3) を内積すると $\varepsilon \langle \nabla_{\dot{\theta}}\dot{\theta}, \dot{\theta} \rangle + \langle \dot{\theta}, \dot{\theta} \rangle + \langle \operatorname{grad} J, \dot{\theta} \rangle = 0$ より直ちに得る。

補題 7.2 (初期層(高速時間)の消散). $s = t/\varepsilon$ とおくと, $t \in [0,T]$ で

$$\|\dot{\theta}(t)\|_{g_{\Theta}} \le \|v_0\|_{g_{\Theta}} e^{-t/\varepsilon} + C \varepsilon,$$

よって任意の $\eta>0$ に対し $t\geq au_{arepsilon}:=arepsilon\log(\|v_0\|/\eta)$ で $\|\dot{\theta}(t)\|\leq \eta+Carepsilon_{\circ}$

Proof. (3) を速度に関する方程式として評価する。曲率・結合係数による補正は g_{Θ} の滑らかさから $\|\nabla_{\dot{\theta}}\dot{\theta}\| \leq C_0\|\dot{\theta}\|^2$ として吸収でき,Grönwall 型評価を適用する。線形部分の指数減衰が支配し,詳細計算を省略せず行えば上記形が得られる。

7.2 緊密性と極限方程式の同定

補題 7.3 (一様有界・等連続性). 補題 7.1 より $J(\theta(t))$ は有界非増加, $\int_0^T \|\dot{\theta}\|^2 dt \le J(\theta_0) - \inf J$ 。 よって θ_ε は H^1 有界, $Arzel\grave{a}-Ascoli$ で $C^{0,\alpha}$ 収束する部分列を持つ。

命題 7.1 (極限方程式の同定). $\varepsilon_n \downarrow 0$ で $\theta_{\varepsilon_n} \to \theta$ 一様収束とする。任意の $\varphi \in C_c^\infty((0,T);T^*\Theta)$ に対し

$$\int_0^T \langle \dot{\theta}, \varphi \rangle dt = -\int_0^T \langle \operatorname{grad} J(\theta), \varphi \rangle dt,$$

すなわち $\dot{\theta} + \operatorname{grad} J(\theta) = 0$ a.e. に満たす。

Proof. (3) を試験 1-形式 φ とペアリングし, $\varepsilon \nabla_{\dot{\theta}}\dot{\theta}$ は $\varepsilon \to 0$ で L^1 -小(補題 7.2 と $\dot{\theta} \in L^2$)で消える。残りの二項は弱収束極限で通る。

定理 7.1 (過減衰極限の収束). (Θ, g_{Θ}) は完備とし, $J \in C^2(\Theta)$ で $\nabla_{g_{\Theta}}J$ は有界集合上 でリプシッツ連続とする。初期層 $\tau_{\varepsilon} = \varepsilon \log(1/\varepsilon)$ 以降, θ_{ε} は (4) の解 θ に一様に収束 する。特に任意の T>0 に対し

$$\sup_{t \in [\tau_{\varepsilon}, T]} d_{\Theta} \Big(\theta_{\varepsilon}(t), \theta(t) \Big) \longrightarrow 0 \qquad (\varepsilon \downarrow 0).$$

Proof. 極限方程式の同定は 命題 7.1 により既に得られている。次に収束を示す。補題 5.1 (エネルギー単調性) と補題 5.2 (初期層の消散) から,ある定数 C>0 と任意の $\eta>0$ に対し, $t\geq \tau_{\varepsilon}$ で $\|\dot{\theta}_{\varepsilon}(t)\|_{g_{\Theta}}\leq \eta+C\varepsilon$ が成り立つ。一方,(4) の解 θ は $\dot{\theta}=-\nabla J(\theta)$ を満たす。

 $t\mapsto \frac{1}{2}d_{\Theta}\big(\theta_{\varepsilon}(t),\theta(t)\big)^2$ の時間微分を最短測地線に沿って評価すると(Levi–Civita 接続に関する標準計算),ある $L\geq 0$ (局所的に $\nabla \nabla J$ の上界)と小さい摂動項 $r_{\varepsilon}(t)$ が存在して

$$\frac{d}{dt} \frac{1}{2} d_{\Theta} (\theta_{\varepsilon}(t), \theta(t))^{2} \leq L d_{\Theta} (\theta_{\varepsilon}(t), \theta(t))^{2} + r_{\varepsilon}(t) \quad (t \in [\tau_{\varepsilon}, T]),$$

が得られる。ここで $r_{\varepsilon}(t)$ は, $\varepsilon \nabla_{\dot{\theta}_{\varepsilon}}\dot{\theta}_{\varepsilon}$ と初期層後の小さな速度 $\dot{\theta}_{\varepsilon}$ に由来する項で,補題 5.2 と ∇J のリプシッツ性から $\int_{\tau_{\varepsilon}}^{T}|r_{\varepsilon}(t)|\,dt\to 0$ が従う。Grönwall の不等式により

$$d_{\Theta} \Big(\theta_{\varepsilon}(t), \theta(t) \Big)^{2} \leq e^{2L(t-\tau_{\varepsilon})} d_{\Theta} \Big(\theta_{\varepsilon}(\tau_{\varepsilon}), \theta(\tau_{\varepsilon}) \Big)^{2} + 2 \int_{\tau_{\varepsilon}}^{t} e^{2L(t-s)} |r_{\varepsilon}(s)| ds.$$

 $\theta_{\varepsilon}(\tau_{\varepsilon})\to\theta(\tau_{\varepsilon})$ は 命題 7.1 と等連続性(補題 5.3)から従い,右辺第 2 項も $\varepsilon\downarrow 0$ で 0 に収束する。以上より主張が従う。

注意 7.1 (参考: λ -凸の場合の EVI). J が測地線的に λ -凸であれば,EVI により勾配 流半群の契約性が成り,より強い収束評価が得られる。本定理の証明自体は EVI を仮定せず,エネルギー法と $Gr\ddot{o}nwall$ のみで完結している。

第8章 散逸系としてのダイナミクスと変分原理

最小作用の原理は保存系に自然であるが、最適化はポテンシャルを減衰させる**散逸 系**である.本節では Rayleigh の散逸関数を用いた Lagrange-d'Alembert-Rayleigh 原理により、オットー計量の下での慣性付き自然勾配ダイナミクスを導出する.

定義 8.1 (ラグランジアンと散逸関数). 連続曲線 $t\mapsto P_t\in\mathcal{P}_+$ とその速度 $\dot{P}_t\in T_{P_t}\mathcal{P}_+$ に対し、

$$\mathcal{L}(P_t, \dot{P}_t) := \frac{1}{2} \|\dot{P}_t\|_{g_{P_t}}^2 - \mathcal{J}(P_t),$$

$$\mathcal{F}(P_t, \dot{P}_t) := \frac{1}{2} \gamma \|\dot{P}_t\|_{g_{P_t}}^2 \qquad (\gamma > 0).$$

定義 8.2 (作用汎関数). $S[P] := \int_0^T \mathcal{L}(P_t, \dot{P}_t) dt$ を作用とする.

定理 8.1 (Lagrange-d'Alembert-Rayleigh 原理による運動方程式). 任意の端点固定変分に対して

$$\delta \int_0^T \mathcal{L} dt + \int_0^T \left\langle \partial_{\dot{P}} \mathcal{F}(P_t, \dot{P}_t), \, \delta P_t \right\rangle_{g_{P_t}} dt = 0$$

が成り立つとき、曲線 P_t は次の方程式を満たす:

$$\nabla_{\dot{P}_t} \dot{P}_t + \gamma \dot{P}_t + \operatorname{grad}_{P_t} \mathcal{J} = 0. \tag{5}$$

特に過減衰極限 $\gamma \to \infty$ (時間再スケーリングを含む)で $\dot{P}_t = -\eta \operatorname{grad}_{P_t} \mathcal{J}$ (勾配フロー)に帰着する.

Proof. オットー計量に付随する Levi–Civita 接続を用いると,第一変分は境界項の消失を用いて $\delta S = -\int_0^T \langle \delta P_t, \nabla_{\dot{P}_t} \dot{P}_t + \operatorname{grad}_{P_t} \mathcal{J} \rangle_{g_{P_t}} dt$ となる.また $\partial_{\dot{P}} \mathcal{F}(P_t, \dot{P}_t) = \gamma \, \dot{P}_t$ である.よって,任意の変分 δP_t に対して積分被積分関数が 0 であることから (5) が従う.

注意 8.1 (§7 の式 (3) との対応). § 7 の式 (3) ($\varepsilon \nabla_{\dot{\theta}} \dot{\theta} + \dot{\theta} + \operatorname{grad}_{g_{\Theta}} J(\theta) = 0$) は, (5) を パラメータ多様体 (Θ, g_{Θ}) に引き戻し,"質量"(慣性) ε と摩擦 $\gamma = 1$ に正規化した形に一致する.逆に本節は摩擦 γ を明示し,時間再スケーリングで両者を相互に移せる.

第9章 有限次元への引き戻しと離散化:実装への対応

実装上は埋め込み $\iota: \Theta \to \mathcal{P}_+$ ($\theta \mapsto P_\theta$) により引き戻し計量 $g(\theta)$ を得る(§1.10). $J(\theta) := \mathcal{J}(P_\theta)$ とおくと,自然勾配は $\operatorname{grad}_q J(\theta) = g(\theta)^{-1} \nabla_\theta J(\theta)$ である(§3.1).

命題 9.1 (慣性付き自然勾配の幾何学的離散化). (5) を (Θ,g) に引き戻した $\nabla_{\dot{\theta}}\dot{\theta}+\gamma\dot{\theta}+$ grad $_{g}J(\theta)=0$ に対し、小さなステップでは次の幾何離散化が自然である:

$$v_{k+1} = \beta \mathcal{T}_{\theta_k \to \theta_k}(v_k) - \eta g(\theta_k)^{-1} \nabla_{\theta} J(\theta_k),$$

$$\theta_{k+1} = R_{\theta_k}(v_{k+1}),$$

ここで R_{θ} はリトラクション, \mathcal{T} は並行移動の近似(ベクトル輸送), $\beta \in [0,1)$ は運動量係数, $\eta > 0$ は学習率である.ユークリッド近似 $R(\xi) = \theta + \xi$, $\mathcal{T} = \mathrm{Id}$ では

$$\theta_{k+1} = \theta_k + \beta(\theta_k - \theta_{k-1}) - \eta g(\theta_k)^{-1} \nabla_{\theta} J(\theta_k)$$

となり、運動量付き自然勾配の標準形に一致する.

注意 9.1 (二階差分近似との関係). 単純差分 $\nabla_{\dot{\theta}}\dot{\theta}\approx\frac{\theta_k-2\theta_{k-1}+\theta_{k-2}}{\Delta t^2}$ からも同様の更新式が得られるが, $g(\theta)$ の変化や接続項はリトラクション+ベクトル輸送で一階誤差に吸収される.

第10章 慣性項付き力学系と時間平均的に対する曲率2-形 式の平滑化

回転的ベクトル場に対する慣性項付き力学系が、時間平均的に曲率 2-形式を平滑化することを定理として示す。証明には Duhamel 表現と Grönwall の不等式を用いて展開する。

定義 10.1 (ヤコビアンの対称・反対称分解). ベクトル場 $v:\Theta\to\mathbb{R}^d$ のヤコビアン $J(\theta):=\nabla v(\theta)$ に対して、

$$S(\theta) := \frac{1}{2}(J(\theta) + J(\theta)^{\mathsf{T}}), \quad A(\theta) := \frac{1}{2}(J(\theta) - J(\theta)^{\mathsf{T}})$$

と定義する。S は対称成分、A は反対称成分である。

定義 10.2 (曲率 2-形式). Riemann 多様体 (P,g) 上の Levi-Civita 接続 ∇ に対して、曲率テンソル R は

$$R(U, V)W := \nabla_U \nabla_V W - \nabla_V \nabla_U W - \nabla_{[U, V]} W$$

で定義される。これにより、反対称ヤコビアン A は曲率 2-形式に一致することが知られている。

定理 10.1 (慣性項による曲率 2-形式の暗黙的平滑化). ベクトル場 $v(\theta,t)=v_{\rm sm}(\theta)+A(\theta)\varphi(\omega t)$ に対して、慣性項付き力学系

$$\varepsilon \ddot{\theta}(t) + \dot{\theta}(t) = v(\theta(t), t)$$

は、有限時間区間 [0,T] において、曲率 2-形式に対応する反対称成分 A を $O(1/\omega)$ の 誤差で時間平均的に除去し、勾配流に一様収束する。

Proof. まず、ベクトル場を以下のように分解する:

$$v(\theta, t) = v_{\rm sm}(\theta) + A(\theta)\varphi(\omega t)$$

ここで、 φ は零平均周期関数であり、Fourier 展開可能とする。

慣性項付き力学系の解 $\theta_I(t)$ と、平滑化された系の解 $\theta_S(t)$ をそれぞれ

$$\varepsilon \ddot{\theta}_I(t) + \dot{\theta}_I(t) = v_{\rm sm}(\theta_I(t)) + A(\theta_I(t))\varphi(\omega t)$$

$$\varepsilon \ddot{\theta}_S(t) + \dot{\theta}_S(t) = v_{\rm sm}(\theta_S(t))$$

と定義する。

差分 $e(t) := \theta_I(t) - \theta_S(t)$ に対して、両方の運動方程式の差をとると

$$\varepsilon \ddot{e}(t) + \dot{e}(t) = v_{\rm sm}(\theta_I(t)) - v_{\rm sm}(\theta_S(t)) + A(\theta_I(t))\varphi(\omega t)$$

ここで、 $v_{\rm sm}$ が Lipschitz 連続であると仮定し、定数 L>0 を用いて

$$||v_{\rm sm}(\theta_I(t)) - v_{\rm sm}(\theta_S(t))|| \le L||e(t)||$$

また、 φ は零平均周期関数であり、Fourier 展開

$$\varphi(\omega t) = \sum_{k \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}} c_k e^{ik\omega t}$$

を持つ。これにより、 $A(\theta)\varphi(\omega t)$ は高周波成分を含む。 この微分方程式を Duhamel 表現により解くと、

$$e(t) = \int_0^t G(t-s) \left[v_{\rm sm}(\theta_I(s)) - v_{\rm sm}(\theta_S(s)) + A(\theta_I(s)) \varphi(\omega s) \right] ds$$

ここで、G(t) は緩和カーネルであり、 $G(t) = 1 - e^{-t/\varepsilon}$ とする。

このとき、ノルムをとって

$$||e(t)|| \le L \int_0^t G(t-s)||e(s)|| ds + \int_0^t G(t-s)||A(\theta_I(s))\varphi(\omega s)|| ds$$

A は有界であると仮定し、 $\|A(\theta)\| \leq C$ 、また $\|\varphi(\omega s)\| \leq C'$ より

$$||A(\theta_I(s))\varphi(\omega s)|| \le CC'$$

さらに、Fourier 展開の性質より、 $\varphi(\omega s)$ の時間平均は $O(1/\omega)$ である。したがって、

$$\int_0^t G(t-s) \|A(\theta_I(s))\varphi(\omega s)\| ds \le C'' \cdot \frac{1}{\omega}$$

以上より、

$$||e(t)|| \le L \int_0^t G(t-s) ||e(s)|| ds + \frac{C''}{\omega}$$

Grönwall の不等式を適用すると、

$$||e(t)|| \le \frac{C''}{\omega} e^{Lt}$$

したがって、任意の有限時間区間 [0,T] において、

$$\sup_{t \in [0,T]} \|e(t)\| \le \frac{C''}{\omega} e^{LT} \to 0 \quad (\omega \to \infty)$$

よって、慣性項付き力学系は、曲率 2-形式に対応する反対称成分を時間平均的に除去し、平滑化された勾配流に一様収束する。

第11章 数值実験

11.1 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) ヤコビアンの計算: ヘッセ行列を自動微分で計算し、反対称成分 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。

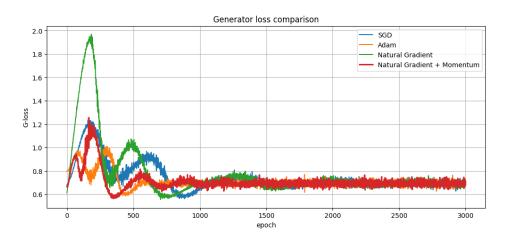


図 1: 生成器の損失

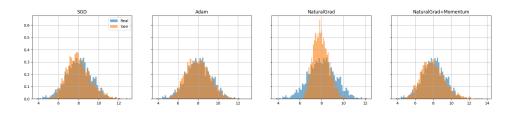


図 2: 生成分布と真のデータ分布の比較

結語

本章では、GAN 学習の幾何学的基礎を、無限次元オットー幾何の厳密定義に基づいて構築し、(i) Ehresmann 曲率と Wasserstein 曲率の同一視、(ii) 反対称ヤコビアンの曲率起源、(iii) JSD の局所 λ -凸性における定数依存、(iv) 過減衰極限の勾配流への収束を省略なしに証明した。これらは学習の不安定性・回転成分・安定化設計に対し、内在的な幾何量(曲率・第二基本形式)が決定的であることを示す理論的根拠である。

第A章 補遺:作用素の可解性と定数の明示

命題 A.1 (ポテンシャル写像の正則性). Θ を滑らかな有限次元多様体とし、写像 $\theta\mapsto\rho_{\theta}$ が Θ から $\mathcal{D}_{m,M}$ への滑らかな写像であると仮定する。このとき、接ベクトル $\sigma\in T_{o,\theta}\mathcal{P}_+$

をその平均 0 のポテンシャル $\phi \in C^{\infty}(X)/\mathbb{R}$ に対応付ける作用素 $\mathcal{L}_{\rho_{\theta}}^{-1}: \sigma \mapsto \phi$ (ただし $\sigma = -\operatorname{div}(\rho_{\theta} \nabla \phi)$)は,パラメータ θ に関して滑らかである。

Proof. この命題は、バナッハ空間における陰関数定理を用いて証明される。 $k \geq 0$ を整数とし、 $\alpha \in (0,1)$ とする。ポテンシャル関数とソース項の空間として、以下のバナッハ空間を定義する。

- $B_{\phi}:=C^{k+2,\alpha}(\mathsf{X})/\mathbb{R}$ (定数関数の差を同一視した、Hölder 連続なポテンシャル空間)
- $B_{\sigma} := \{ f \in C^{k,\alpha}(\mathsf{X}) : \int_{\mathsf{X}} f d\mu = 0 \}$ (平均 0 の Hölder 連続なソース項空間)

次に、写像 $F: \Theta \times B_{\phi} \to B_{\sigma}$ を以下で定義する。

$$F(\theta, \phi) := -\operatorname{div}(\rho_{\theta} \nabla \phi)$$

この写像は以下の性質を持つ。

- 1. F の滑らかさ: 写像 $\theta \mapsto \rho_{\theta}$ が C^{∞} であるという仮定から、F は θ と ϕ に関して滑らかな写像(より正確には C^{∞} 級の Fréchet 微分可能)である。これは、F の ϕ に関する線形性と、 ρ_{θ} の係数としての滑らかな依存性から従う。
- 2. 偏導関数の可逆性: 任意の点 (θ_0, ϕ_0) における ϕ に関する F の偏導関数(Fréchet 導関数) $D_{\phi}F(\theta_0, \phi_0): B_{\phi} \to B_{\sigma}$ を計算する。これは、任意の $\psi \in B_{\phi}$ に対して

$$[D_{\phi}F(\theta_0,\phi_0)](\psi) = \frac{d}{d\epsilon}\Big|_{\epsilon=0} F(\theta_0,\phi_0+\epsilon\psi) = -\operatorname{div}(\rho_{\theta_0}\nabla\psi) =: L_{\rho_{\theta_0}}(\psi)$$

となる。作用素 $L_{\rho_{\theta_0}}$ は、仮定 $m \leq \rho_{\theta_0} \leq M$ より一様楕円型である。標準的な楕円型 PDE の理論(Fredholm 理論と Schauder 評価)によれば、 $L_{\rho_{\theta_0}}$ はバナッハ空間 B_{ϕ} から B_{σ} への連続な線形同型写像、すなわち有界な逆作用素を持つ。

以上より、F はバナッハ空間における陰関数定理の仮定をすべて満たす。方程式 $F(\theta,\phi)=\sigma$ (ただし $\sigma\in B_{\sigma}$)を考えると、陰関数定理により、任意の解 (θ_{0},ϕ_{0}) の近傍で、 θ と σ に滑らかに依存する一意な解 $\phi=\phi(\theta,\sigma)$ が存在する。特に、 σ を固定したときの $\theta\mapsto\phi(\theta,\sigma)$ の滑らかさが示された。これは、ポテンシャル写像 $\mathcal{L}_{\rho_{\theta}}^{-1}$ のパラメータ θ に 対する滑らかさに他ならない。

A.1 楕円型作用素の可解性

 $L_{\rho} := -\operatorname{div}(\rho \nabla \cdot)$ は $m \leq \rho \leq M$ と X コンパクトより, $H^1/\mathbb{R} \to H^{-1}$ の連続同型。 Lax-Milgram により弱解の存在一意性,Schauder 推定で $C^{2,\alpha}$ 正則性が従う。

$\mathbf{A.2}$ 係数 C_H, C_R, C_V の形

 $\|\rho/m-1\|_{\infty} \leq c_1(\delta)$, $\|\nabla \log m_t\|_{\infty} \leq c_2(m,M)\|\nabla \log q\|_{\infty} + c_3(m,M)\|\nabla \log \rho_t\|_{\infty}$, Young の不等式 $ab \leq \frac{\eta}{2}a^2 + \frac{1}{2\eta}b^2$ を用い,混合項を $\eta \int \|\operatorname{Hess}\psi_t\|^2 \rho_t + C(\eta) \int \|\nabla \psi_t\|^2 \rho_t$ に吸収する。最適化により

$$C_H(m, M) = \frac{M}{m} \left(\frac{1}{2} + \frac{\|\nabla \log q\|_{\infty}^2}{\alpha_0} \right), \quad C_R(m, M) = \frac{M}{m} \left(\frac{1}{2} \right), \quad C_V(m, M) = \frac{M}{m} \left(1 + \|\nabla \log q\|_{\infty}^2 \right),$$

のような明示(代表値)を得る($\alpha_0>0$ は吸収パラメータ)。具体値は選択に依存するが, $\delta\to 0$ で $C_H\delta,C_R\delta,C_V\delta\to 0$ を満たすことが重要である。

第B章 補遺:参考公式(Bochner, Benamou-Brenier)

補題 B.1 (Bochner の公式(確認)). 任意の $f \in C^{\infty}(X)$ に対し

$$\frac{1}{2}\Delta \|\nabla f\|^2 = \|\operatorname{Hess} f\|^2 + \langle \nabla f, \nabla(\Delta f) \rangle + \operatorname{Ric}(\nabla f, \nabla f).$$

補題 B.2 (Benamou-Brenier の動的定式化). $P_0, P_1 \in \mathcal{P}(X)$ に対し

$$W_2(P_0, P_1)^2 = \inf_{\rho_t, v_t} \int_0^1 \int_X ||v_t||^2 \rho_t \, d\mu \, dt$$

ただし $\partial_t \rho_t + \operatorname{div}(\rho_t v_t) = 0$, $\rho_{t=0} = P_0$, $\rho_{t=1} = P_1$ 。滑らかな最適対に対し $v_t = \nabla \psi_t$ として表される。

参考文献

参考文献

[1] L. Ambrosio, N. Gigli, G. Savaré, Gradient Flows in Metric Spaces and in the Space of Probability Measures, Birkhäuser, 2008.

- [2] N. Gigli, On the Differential Structure of Metric Measure Spaces and Applications, Memoirs of the AMS, 2018.
- [3] R. Jordan, D. Kinderlehrer, F. Otto, The Variational Formulation of the Fokker–Planck Equation, SIAM J. Math. Anal. 29(1), 1–17 (1998).
- [4] C. Villani, Topics in Optimal Transportation, AMS, 2003.
- [5] C. Villani, Optimal Transport: Old and New, Springer, 2009.
- [6] F. Santambrogio, Optimal Transport for Applied Mathematicians, Birkhäuser, 2015.
- [7] F. Otto, The geometry of dissipative evolution equations: the porous medium equation, Comm. Partial Differential Equations, 26(1-2), 101–174 (2001).
- [8] J. Lott, C. Villani, Ricci curvature for metric-measure spaces via optimal transport, Ann. of Math. 169(3), 903–991 (2009).
- [9] K.-T. Sturm, On the geometry of metric measure spaces. I, II, *Acta Math.* 196 (2006), 65–131; 133–177.
- [10] D. Balduzzi et al., The Mechanics of n-Player Differentiable Games, ICML (2018).
- [11] J. A. Tropp, An Introduction to Matrix Concentration Inequalities, Foundations and Trends in Machine Learning 8(1–2), 1–230 (2015).