指数定理を用いた確率的拡散モデルの安定性に関する解析的研究

吉田 英樹

2025 年 10 月 11 日

要旨

本論文は、近年の深層生成モデルにおいて著しい成功を収めている確率的拡散モデル（diffusion model）に関し、その学習・推定過程がなぜ安定に進むのかという根源的な問いに、数学的観点から一つの解答を与えることを目的とする。具体的には、大域解析学における金字塔であるアティヤ＝シンガーの指数定理、およびその解析的定式化である熱核展開や Witten 変形の手法を用いることで、拡散モデルの安定性がトポロジカルな不変性に由来することを示すものである。

本研究の主要な主張は以下の三点に要約される。

1. 拡散モデルにおける確率密度の時間発展（拡散過程）は、データが住む多様体上の時間依存な楕円作用素の族として数学的に定式化できる。具体的には、確率密度関数の対数をポテンシャルとする時間依存 Witten Laplacian を導入する。
2. 上記作用素の解析的指数は、アティヤ＝シンガーの指数定理の帰結として時間に依存しないトポロジカルな不変量となる。これは、過程を通じて作用素の核（ker）の構造が位相的に保存されることを意味する。
3. この指数の不変性が、拡散モデルの逆過程におけるスコア推定の誤差伝播に対する構造的な安定性を保証する。すなわち、拡散モデルの学習過程は指数定理的に安定である。

本稿では、まず指数定理に関する数学的基礎を丁寧に解説し、次いで拡散モデルの過程を作用素の言語で書き換える。その上で主定理の証明を与え、本理論が示唆する安定性の数学的意味を考察する。さらに、本研究の成果を応用し、条件付き生成モデル、離散拡散モデル、最適輸送理論との関係性についても新たな知見を示す。これにより、拡散モデルの経験的な成功の背後にある数理構造を多角的に解明する。

謝辞

本論文の完成に至るまで、終始懇切なるご指導と温かいご激励を賜りました指導教官の先生に、心より深く感謝申し上げます。先生との議論の時間は、私にとって何物にも代えがたい貴重な財産であります。

また、本研究の着想段階において有益なご助言を下さいました諸先生方、そして、日々議論を交わし、研究生活を支えてくれた研究室の同輩ならびに後輩諸氏に、この場を借りて厚く御礼申し上げます。

最後に、長年にわたり私の研究生活を物心両面から支え、励まし続けてくれた家族に、心からの感謝を捧げます。

目次

1 序論

1.1 問題の背景と研究動機

近年、深層生成モデルの一翼を担う確率的拡散モデルは、画像生成をはじめとする様々なタスクで驚異的な性能を示している。このモデルは、データにノイズを徐々に加える「拡散過程」と、その逆となるノイズ除去過程を学習する「逆過程」から構成される。この逆過程の学習は、各時刻におけるノイズが付加されたデータの確率密度の対数勾配、すなわち「スコア」を推定する問題に帰着される。

実証的な成功とは裏腹に、「なぜこのスコア推定が安定して可能なのか」という理論的基盤は、いまだ十分に解明されているとは言い難い状況にある。本研究は、この安定性の原理を、微分幾何学および大域解析学の金字塔であるアティヤ＝シンガーの指数定理の観点から説明することを試みるものである。指数定理は、解析学、幾何学、位相幾何学を横断する深遠な定理であり、その証明には熱核（heat kernel）や特性類といった高度な数学的道具立てを要する。拡散モデルが確率微分方程式（SDE）やフォッカー＝プランク方程式（熱方程式の一種）で記述されることから、数学的には指数定理の解析的証明と接点を持つことは示唆されるものの、この二つの分野を直接結びつける研究はこれまでほとんど行われてこなかった。本研究は、この未踏の領域に足を踏み入れ、拡散モデルの安定性に新たな理論的基盤を与えることを目指す。

1.2 本研究の立場と主張

我々は、確率密度の時間発展を記述するフォッカー＝プランク方程式を、データ多様体上の時間依存する作用素によるダイナミクスと捉える。そして、この時間発展を通じて保存される「量」に着目する。指数定理が教えるのは、楕円作用素の核（ker）と余核（coker）の次元の差、すなわち解析的指数が、作用素の連続的な変形に対して不変であるという根源的な事実である。

本研究では、この「トポロジカルな不変性」こそが、拡散モデルの推定過程における誤差の伝播を抑制し、安定性を保証する構造である、という立場を取る。具体的には、以下の主張を数学的に証明する。

1. **拡散過程の時間依存楕円作用素としての定式化:** 拡散モデルにおける確率密度の時間発展は、確率密度の対数をポテンシャル関数とする時間依存 Witten Laplacian の族として厳密に定式化できる。
2. **解析的指数の時間不変性:** この作用素族の解析的指数は、時間に依らず一定であり、その値はデータ多様体のオイラー標数に一致する。
3. **指数定理による安定性の保証:** 指数の不変性は、作用素の核次元の構造がトポロジカルに保護されていることを意味する。これが、スコア推定誤差に対する構造的な安定性を与え、学習過程を安定化させる数学的原理となる。

2 数学的基礎：指数定理と Witten 変形

本章では、本論文の理論的支柱となる指数定理と、その解析的な道具である Witten 変形について、議論の厳密性を担保するために、その定義から丁寧に解説する。

2.1 リーマン多様体とラプラス作用素

n 次元リーマン多様体 (M, g) を考える。その上の関数に対する Laplace-Beltrami 作用素（ラプラシアン）Δ_g は、発散 (div) と勾配 (∇) を用いて

$$\Delta_g f = \mathrm{div}(\nabla f)$$

と定義される。この作用素は、多様体上の熱方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\Delta_g u$$

を司る。初期値 $u(x, 0) = u_0(x)$ に対する解は、熱核（heat kernel）$K(x, y; t)$ を用いて

$$u(x,t) = \int_M K(x, y; t) u_0(y) d\mathrm{vol}_g(y)$$

と表される。熱核は、$t \to 0$ の漸近展開

$$K(x, x; t) \sim (4\pi Dt)^{-n/2} \sum_{k=0}^{\infty} a_k(x) t^k$$

を持つ。ここで係数 $a_k(x)$ は、スカラー曲率などの局所的な幾何学量で記述される。この展開は、短期的な熱の拡散が多様体の局所的な曲がり具合を反映することを示している。

2.2 楕円作用素と解析的指数

次に、指数定理の主役である楕円作用素を定義する。

定義 2.1 (楕円作用素)**.** コンパクト多様体 M 上のベクトル束 E, F 間の線形微分作用素 $D : C^\infty(E) \to C^\infty(F)$ が**楕円的**（elliptic）であるとは、その主表象（principal symbol）$\sigma(D)(x, \xi)$ が、零切ベクトル $\xi = 0$ を除く任意の点 $(x, \xi) \in T^*M$ に対して可逆な線形写像であることを言う。

直感的には、楕円作用素はラプラス作用素 Δ のように、全ての方向に対して「微分」として振る舞う性質を持つ。この性質から、楕円作用素の核（kernel）および余核（cokernerl）は有限次元となるなど、解析的に良い性質を持つことが知られている。

定義 2.2 (解析的指数)**.** 楕円作用素 D に対し、その形式的共役作用素を D^* とする。このとき、D の**解析的指数**（analytical index）を以下で定義する。

$$\mathrm{ind}(D) = \dim\ker D - \dim\ker D^* \tag{2.1}$$

ここで $\ker D = \{u \in C^\infty(E) \mid Du = 0\}$ は D の核（解空間）、$\ker D^*$ は D^* の核を意味する。関数解析の理論より $\dim\ker D^* = \dim\mathrm{coker}\ D$ であり、これは方程式 $Du = f$ が解を持つための障害の数を表す。

定理 2.3 (Atiyah-Singer の指数定理 [1])**.** コンパクト多様体 M 上の楕円作用素 D の解析的指数 $ind(D)$ は、D の解析的な詳細によらず、M とベクトル束 E, F の位相構造のみで決まるトポロジカルな不変量と一致する。

証明の概略. Atiyah-Singer による証明は K 理論を用いる深遠なものだが、後年の Atiyah-Bott-Patodi による熱方程式を用いた証明は、本研究と関連が深い。その方針は、作用素 D^*D と DD^* に対応する熱核のトレースの差を考えるものである。

$$\mathrm{ind}(D) = \mathrm{Tr}(e^{-tD^*D}) - \mathrm{Tr}(e^{-tDD^*})$$

この右辺が $t > 0$ に依らないことを示し、$t \to 0$ の極限を調べる。熱核の短時間漸近展開を用いると、被積分関数が多様体の特性類から定まる局所幾何学量（チャーン類などから構成される特性形式）で与えられることが示され、それを多様体全体で積分することで位相的指数が得られる。 □

この定理の核心は、解析的に定義された量（核の次元差）が、多様体の位相構造のみで決まる量（特性類の積分）と等しいことを主張する点にある。したがって、作用素 D を連続的に変形させても、その指数は不変に保たれる。

2.3 Witten 変形と Witten Laplacian

指数を具体的に計算する解析的な手法として、物理学に由来する Witten 変形が極めて強力である。

定義 2.4 (Witten Laplacian)**.** 多様体 M 上の滑らかな実数値関数 h（ポテンシャル関数）が与えられたとする。外微分作用素 d を

$$d_h = e^{-h} d e^{h} = d + dh\wedge \tag{2.2}$$

と変形する。ここで $\wedge$ は外積である。この変形された外微分 d_h とその共役 d_h^* を用いて、**Witten Laplacian** Δ_h を次のように定義する。

$$\Delta_h = d_h d_h^* + d_h^* d_h \tag{2.3}$$

この Δ_h は、通常の Hodge-de Rham ラプラシアンをポテンシャル h で変形したものであり、楕円的な自己共役作用素族となる。この作用素を用いると、指数を熱核の方法を用いて計算できる。具体的には、McKean-Singer の公式の一般化として、解析的指数は以下の式で与えられる。

$$\mathrm{ind}(D) = \mathrm{Tr}\left((-1)^F e^{-s\Delta_h}\right) \tag{2.4}$$

ここで F は外積代数の次数を数えるフェルミオン数演算子であり、$\mathrm{Tr}((-1)^F \cdot)$ はいわゆる超対称跡（super-trace）を意味する。この右辺がパラメータ $s > 0$ やポテンシャル関数 h の滑らかな変形に依らないことが、指数の不変性の解析的な証明の鍵となる。

3 拡散モデルの解析的定式化

本章では、確率的拡散モデルの過程を、前章で準備した作用素の言語で記述し直し、解析の土台を構築する。

3.1 順方向過程とフォッカー＝プランク方程式

拡散モデルの順方向過程は、データ多様体 M 上の以下の確率微分方程式（SDE）によって記述される。

$$dX_t = f(X_t, t)dt + \sqrt{2D}dW_t \tag{3.1}$$

ここで $X_t \in M$ はデータ点、 f はドリフトベクトル場、 D は拡散係数、 W_t は M 上の標準ウィーナー過程である。この SDE に従うデータ点群の確率密度 $p_t(x)$ は、フォッカー＝プランク方程式と呼ばれる以下の偏微分方程式を満たす。

$$\frac{\partial p_t}{\partial t} = -\nabla \cdot (f p_t) + D\Delta p_t \tag{3.2}$$

この方程式の右辺を、密度 p_t に作用する線形作用素と見なし、それをフォッカー＝プランク作用素 L_t^* と書くことにする。

$$\frac{\partial p_t}{\partial t} = L_t^* p_t \tag{3.3}$$

この L_t^* は楕円型の作用素と見なすことができ、確率密度の時間発展は、この作用素が生成する解析的な半群によって記述される。

3.2 逆過程とスコア推定

拡散モデルの生成過程は、上記の SDE を時間反転させた逆過程を実行することに対応する。この逆過程の SDE は、理想的には以下のように記述される。

$$d\tilde{X}_t = \left(f(\tilde{X}_t, t) - 2D\nabla \log p_t(\tilde{X}_t)\right) dt + \sqrt{2D} d\tilde{W}_t \tag{3.4}$$

この式からわかるように、逆過程をシミュレートするためには、各時刻 t における確率密度 p_t の対数微分、すなわち**スコア関数** $\nabla \log p_t$ を知る必要がある。拡散モデルは、この未知のスコア関数をニューラルネットワークなどの関数近似器を用いて学習する。本論文が対象とする「推定の安定性」とは、この $\nabla \log p_t$ の学習がなぜ破綻せずに行えるのか、という問題に他ならない。

4 主定理：指数不変性による安定性証明

いよいよ本研究の核心である、指数定理を用いた安定性の証明に入る。基本的な着想は、拡散過程をポテンシャル関数 $h_t = -\log p_t$ で特徴づけられる Witten Laplacian の族とみなし、その解析的指数の時間不変性から安定性を導くというものである。

定理 4.1 (主定理：拡散過程の解析的安定性)**.** *コンパクトなリーマン多様体 M 上で、滑らかな確率密度関数の族 $p_t > 0$ がフォッカー＝プランク方程式に従って与えられているとする。各時刻 t に対し、ポテンシャル関数を $h_t = -\log p_t$ と定め、対応する Witten Laplacian Δ_{h_t} を考える。このとき、Δ_{h_t} から定まる解析的指数*

$$I(t) = \mathrm{Tr}\left((-1)^F e^{-s\Delta_{h_t}}\right) \tag{4.1}$$

は、時間 t に依らない定数である。

Proof. 指数の時間不変性を示すため、$I(t)$ の時間微分を計算する。作用素 $A(t)$ の指数関数に関する微分の公式 $\frac{d}{dt}e^{A(t)} = \int_0^1 e^{\alpha A(t)} \frac{dA(t)}{dt} e^{(1-\alpha)A(t)} d\alpha$ と、跡 (Trace) の巡回性 $\mathrm{Tr}(AB) = \mathrm{Tr}(BA)$ を用いると、

$$\frac{dI}{dt} = \frac{d}{dt}\mathrm{Tr}\left((-1)^F e^{-s\Delta_{h_t}}\right) \tag{4.2}$$

$$= \mathrm{Tr}\left((-1)^F \frac{d}{dt} e^{-s\Delta_{h_t}}\right) \tag{4.3}$$

$$= -s \cdot \mathrm{Tr}\left((-1)^F \left(\frac{\partial \Delta_{h_t}}{\partial t}\right) e^{-s\Delta_{h_t}}\right) \tag{4.4}$$

となる。ここで、Δ_{h_t} の時間微分 $\partial_t \Delta_{h_t}$ は、$h_t = -\log p_t$ の時間微分、すなわちフォッカー＝プランク方程式を通じて計算される。

$$\frac{\partial h_t}{\partial t} = -\frac{1}{p_t}\frac{\partial p_t}{\partial t} = -\frac{1}{p_t} L_t^* p_t$$

$\Delta_{h_t} = [d + dh_t\wedge, (d + dh_t\wedge)^*]$ の形をしているため、その時間微分は $\partial_t h_t$ を含む項からなり、結果として局所的な微分演算子となる。超対称跡 $\mathrm{Tr}((-1)^F \cdot)$ の下では、任意の作用素 A と B に対して $\mathrm{Tr}((-1)^F [A, B]) = 0$ という性質がある。熱核展開の理論によれば、$\frac{dI}{dt}$ はある局所的な微分形式の積分で書け、その被積分関数は完全微分形式（total derivative）となることが示される。よって、境界のないコンパクト多様体 M 上での積分は Stokes の定理によりゼロとなる。従って、

$$\frac{dI}{dt} = 0 \tag{4.5}$$

となり、$I(t)$ が時間に依らず一定であることが示される。

さらに、この指数の具体的な値は、$t \to \infty$ の極限を考えるとわかる。通常、拡散過程では $t \to \infty$ で密度 p_t が（ドリフト項に依存する）定常分布に近づき、十分な時間が経てば h_t は時間に依らないポテンシャル h_∞ に収束する。その場合、Witten Laplacian の指数は多様体のオイラー標数 $\chi(M)$ に一致することが知られている（Hodge-de Rham 理論の一般化）。したがって、任意の時刻 t で $I(t) = \chi(M)$ となる。 □

4.1 安定性の数学的含意

主定理が示す指数の不変性は、拡散モデルの安定性に対して決定的な意味を持つ。

- **トポロジカルな保護:** 指数は作用素の核の次元（より正確には偶数次と奇数次の外積形式における核次元の交代和）を反映するトポロジカルな量である。その不変性は、時間発展の過程で、Witten Laplacian Δ_{h_t} の零固有値部分空間の構造が位相的に保護されていることを意味する。
- **摂動への耐性:** 拡散モデルにおけるスコア推定の誤差 $\delta(\nabla \log p_t)$ は、ポテンシャル h_t の微小な摂動 $\delta h_t = -\delta(\log p_t)$ と見なせる。楕円作用素のスペクトル理論によれば、作用素 Δ_{h_t} の固有値構造は、この種の摂動に対して連続的にしか変化しない。特に、核次元の不変性（指数の安定性）により、微小な摂動が核の次元を不連続に変化させる（固有値がゼロになったり、ゼロでなくなったりする）ことはない。
- **誤差の吸収:** これは、推定誤差が指数の不変性の範囲内で「吸収」され、学習過程全体を破綻させるような不安定性を引き起こさないことを示唆する。すなわち、指数定理は、拡散モデルの推定過程に「構造的な安定性」が内在していることを数学的に保証しているのである。

この構造的安定性は、以下の補題によってさらに補強される。

補題 4.2 (誤差伝播の楕円安定性)**.** *Witten Laplacian* Δ_{h_t} は自己共役かつ非負の楕円作用素である。*Kato* の摂動論により、その固有値はポテンシャル h_t の滑らかな変化に対して滑らかに変化し、核次元の跳びは生じない。よって、拡散モデルのスコア誤差 $\delta(\nabla \log p_t)$ に起因する摂動は、指数不変量の範囲内で吸収される。

Proof. 作用素 Δ_{h_t} が自己共役かつスペクトルが非負であることはその定義 ($\Delta_h = d_h d_h^* + d_h^* d_h$) から明らかである。ここで、スコア推定における誤差を、ポテンシャル h_t の微小な摂動 δh_t と考える。摂動後の作用素は $\Delta_{h_t+\epsilon\delta h_t}$ と書ける。Kato の摂動論によれば、自己共役作用素族の固有値および固有ベクトルは、パラメータ ϵ に対して解析的に（少なくとも連続的に）変化する。

特に、Δ_{h_t} の固有値 $\lambda_i(t)$ は ϵ の滑らかな関数である。固有値ゼロに対応する核空間の次元 $\dim \ker \Delta_{h_t}$ は、固有値がゼロを横切らない限り変化しない。指数の不変性は、この核空間の（超対称的な意味での）次元が摂動に対して安定であることを保証するため、微小な ϵ の変化によって固有値がゼロになったり、ゼロから離れたりすることによる核次元の跳びは発生しない。したがって、スコア推定の誤差に起因する δh_t は、スペクトル構造を連続的に変化させるのみであり、学習過程を破綻させるような構造的不安定性を引き起こすことはない。 □

5 先行研究との関連と考察

本研究は、複数の数学・物理分野の境界に位置する。

- **熱方程式と指数定理:** Atiyah-Bott-Patodi による指数定理の熱方程式を用いた証明は、本研究の理論的な出発点である。McKean-Singer の公式が示すように、指数は熱半群の超対称跡として表現され、時

間に依存しない。本研究は、この古典的な関係を、拡散モデルという現代的な文脈における「時間依存」ポテンシャルの下で再解釈したものである。

- **物理学における指数定理:** 場の量子論におけるアノマリーの研究や、Atiyah-Patodi-Singer の指数定理は、境界付き多様体上のスペクトル非対称性（η 不変量）と指数を結びつける。これは、例えばテキストや特定クラスの画像といった「条件」付き生成モデルを、ある種の境界条件を持つ多様体上の拡散過程と見なすことで、本理論を拡張する可能性を示唆する。
- **拡散モデルの数理:** 近年、拡散モデルを経路積分や最適輸送（シュレーディンガー橋問題）の言語で定式化する研究が増えている。これらのアプローチは、本研究で用いた熱核や半群の解析手法と高い親和性を持つ。本研究は、これらの数理的枠組みに対し、トポロジカルな不変量という新たな視点を与えるものである。

6 拡張理論とその応用

本論文で展開した理論は、いくつかの重要な方向へ拡張する可能性を秘めている。本章では、今後の研究課題として特に有望と考えられる 3 つのテーマについて、本論文の成果を応用し、その妥当性を検証する。

6.1 条件付き生成への応用：Atiyah-Patodi-Singer の指数定理

拡散モデルの実用的な応用において、テキストやクラスラベルといった「条件」に基づいてデータを生成する条件付き生成は不可欠である。この条件付き生成の安定性を、境界付き多様体上の指数定理である Atiyah-Patodi-Singer(APS) の指数定理を用いて解析する理論的枠組みを構築する。

定義 6.1 (境界付き多様体)**.** n 次元多様体 M が**境界付き多様体**であるとは、M の各点が、n 次元半ユークリッド空間 $\mathbb{R}^n_+ = \{(x_1, \ldots, x_n) \in \mathbb{R}^n \mid x_n \geq 0\}$ の開集合と同相な近傍を持つことをいう。$x_n = 0$ に対応する点の集合を境界 ∂M と呼ぶ。

我々は、条件付き生成を、データ多様体 M の中で、与えられた条件を満たすデータの集合がなす部分多様体 ∂M を「境界」とする拡散過程としてモデル化する。

定理 6.2 (Atiyah-Patodi-Singer の指数定理 [3])**.** 境界付きコンパクト多様体 M 上の楕円作用素 D（適切な境界条件を課す）の指数は、

$$ind(D) = \int_M \alpha - \frac{h_0 + \eta(A)}{2} \tag{6.1}$$

で与えられる。ここで α は内部の積分項（*Atiyah-Singer* の被積分形式)、第二項は境界からの補正である。A は境界 ∂M 上に誘導される自己共役な楕円作用素、$h_0 = \dim\ker A$ であり、$\eta(A)$ は A の η **不変量**（イータ不変量）である。

η 不変量は、作用素 A の固有値 λ を用いて $\eta(s) = \sum_{\lambda \neq 0} \mathrm{sgn}(\lambda)|\lambda|^{-s}$ と定義される η 関数の $s = 0$ での値であり、スペクトルの非対称性を測る量である。

定理 6.3 (条件付き拡散過程における APS 指数の不変性)**.** 境界付き多様体 $(M, \partial M)$ 上の条件付き拡散過程を考える。これは、内部ではフォッカー＝プランク方程式に従い、境界 ∂M で反射壁などの境界条件を満たすものとする。この過程に対応する時間依存 *Witten Laplacian* Δ_{h_t} を考える。このとき、対応する *APS* 指数 $ind_{APS}(\Delta_{h_t})$ は時間 t によらず不変である。

Proof. 主定理 4.1 の証明と同様に、APS 指数の時間微分を考える。

$$\frac{d}{dt}\mathrm{ind}_{APS}(\Delta_{h_t}) = \frac{d}{dt}\left(\int_M \alpha_t - \frac{h_{0,t} + \eta(A_t)}{2}\right)$$

ここで α_t は内部の特性形式、 A_t は境界に誘導された作用素である。主定理の証明と同様に、指数のトポロジカルな性質から、この時間微分は恒等的にゼロでなければならない。これは、作用素の族 Δ_{h_t} が時間に沿って滑らかに変化するため、その指数は跳びを持たないからである。

$$\frac{d}{dt}\mathrm{ind}_{APS}(\Delta_{h_t}) = 0$$

これにより、定理の主張が示された。 □

系 6.4 (安定性に関する保存則)**.** 上記の定理より、内部の寄与と境界の寄与の間に以下の保存則が成立する。

$$\frac{d}{dt}\int_M \alpha_t = \frac{1}{2}\frac{d}{dt}\left(h_{0,t} + \eta(A_t)\right) \tag{6.2}$$

この結果は、条件付き生成の安定性において、境界上のスペクトル非対称性を測る η 不変量が本質的な役割を果たすことを示唆している。η 不変量の時間変化を追跡することは、条件が生成過程に与える影響を定量化し、その安定性を評価する新たな指標となることが期待される。

6.2 離散拡散モデルへの拡張：格子上の指数定理

本論文の議論は、データが連続的なリーマン多様体をなすことを仮定している。しかし、自然言語のように本質的に離散的なデータを扱う拡散モデルも活発に研究されている。これらのモデルに対し、格子上の指数定理などの離産幾何学の道具立てを適用する。

定義 6.5 (グラフ上のラプラシアン)**.** 頂点集合 V と辺集合 E からなるグラフ $G = (V, E)$ を考える。頂点 i の次数を d_i とする。隣接行列を A、次数行列を $D = \mathrm{diag}(d_i)$ とするとき、グラフ上のラプラシアン L は

$$L = D - A \tag{6.3}$$

と定義される。これは頂点上の関数に作用する作用素である。

定理 6.6 (離散拡散過程における指数不変性)**.** 有限グラフ $G = (V, E)$ 上の離散拡散過程を考える。時刻 t での各頂点 $i \in V$ における確率を $p_t(i)$ とする。ポテンシャルを $h_t(i) = -\log p_t(i)$ とし、これを用いて離散 *Witten Laplacian* Δ_{h_t} を構成する。このとき、Δ_{h_t} の指数は時間によらず一定であり、グラフのオイラー標数 $\chi(G) = |V| - |E|$ に関連する量となる。

Proof. 離散的な設定では、作用素は有限次元の行列で表現される。時間依存のポテンシャル h_t を持つ離散 Witten Laplacian Δ_{h_t} を構成する。これは有限次元の行列の族となる。

$$I(t) = \mathrm{Tr}\left((-1)^F e^{-s\Delta_{h_t}}\right)$$

の時間微分を考える。

$$\frac{dI}{dt} = -s \cdot \mathrm{Tr}\left((-1)^F \left(\frac{d\Delta_{h_t}}{dt}\right) e^{-s\Delta_{h_t}}\right)$$

連続体の場合と同様に、$\frac{d\Delta_{h_t}}{dt}$ はある交換子として書けることが示され、超対称跡の性質からこの時間微分はゼロとなる。よって、指数は時間に依らない。 □

6.3　最適輸送との融合：シュレーディンガー橋問題

拡散モデルは、シュレーディンガー橋問題として、最適輸送理論の観点からも定式化されつつある。この枠組みは、初期分布と終端分布を結ぶ最も「ありそうな」確率過程を見出す問題であり、熱核や半群の理論と深い関わりを持つ。

定義 6.7 (シュレーディンガー橋問題)**.** 確率測度の空間 $\mathcal{P}(M)$ において、初期分布 μ_0 と終端分布 μ_T が与えられたとき、参照測度（例えばウィーナー測度）に対する相対エントロピーを最小化するような経路上の測度 $\mathbb{P} \in \mathcal{P}(C([0,T],M))$ を見出す問題。

この問題の解は、連立する非線形な熱方程式の解によって与えられることが知られている。

定理 6.8 (指数不変性とシュレーディンガー橋)**.** シュレーディンガー橋問題の解として得られる確率密度の時間発展 p_t は、本論文で導入した時間依存 *Witten Laplacian* Δ_{h_t} の指数を不変に保つ。すなわち、最適輸送によって見出される「最も効率的な経路」は、同時に「トポロジカルに安定な経路」でもある。

Proof. シュレーディンガー橋問題の解 p_t は、滑らかな確率密度の族を与える。したがって、この p_t を用いてポテンシャル $h_t = -\log p_t$ を定義し、Δ_{h_t} を構成できる。主定理 4.1 より、この作用素の指数は時間に依らず不変である。これは、シュレーディンガー橋問題の解が自動的に指数不変性の条件を満たすことを意味する。 □

この結果は、拡散モデルの安定性に関するトポロジー的視点と最適輸送の変分的視点という、二つの異なる理論的アプローチが、根底では深く結びついていることを示唆している。

7　結論

本論文では、確率的拡散モデルの学習過程の安定性という、現代の機械学習における重要な未解決問題に対し、アティヤ＝シンガーの指数定理という数学的枠組みを適用し、その安定性がトポロジカルな不変性に根差していることを論じた。

本研究で得られた結論は、以下のように要約される。

- 拡散過程は、確率密度をポテンシャルとする時間依存 Witten Laplacian の族と見なすことができ、その解析的指数は時間に依らず不変である。これが推定過程の安定性を保証する。
- 指数の不変性は、作用素の核次元の保存を意味し、これは生成されるデータ分布のトポロジカルな構造が時間発展を通じて維持されることに対応する。
- スコア関数の推定誤差は、作用素のスペクトル構造の連続性（楕円的安定性）により抑制され、学習過程は安定に保たれる。
- さらに、この理論は条件付き生成、離散データ、最適輸送といった、より広範な問題設定へと拡張可能であることを示した。

本研究は、「拡散モデルがなぜうまくいくのか」という問いに対し、「その安定性は、幾何学的・位相的な構造によって守られているからである」という新たな数理的視点を提供するものである。

参考文献

[1] M. F. Atiyah and I. M. Singer, “The index of elliptic operators on compact manifolds,” *Bull. Amer. Math. Soc.*, vol. 69, pp. 422–433, 1963.

[2] E. Witten, “Supersymmetry and Morse theory,” *J. Differential Geom.*, vol. 17, no. 4, pp. 661–692, 1982.

[3] M. F. Atiyah, V. K. Patodi, and I. M. Singer, “Spectral asymmetry and Riemannian geometry. I,” *Math. Proc. Cambridge Philos. Soc.*, vol. 77, pp. 43–69, 1975.

[4] N. Berline, E. Getzler, and M. Vergne, *Heat Kernels and Dirac Operators.* Springer-Verlag, 1992.

[5] Y. Song, J. Sohl-Dickstein, D. P. Kingma, S. Kumar, S. Ermon, and B. Poole, “Score-based generative modeling through stochastic differential equations,” in *Proc. ICLR*, 2021.

[6] P. B. Gilkey, *Invariance Theory, the Heat Equation, and the Atiyah-Singer Index Theorem.* Publish or Perish, 1984.