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 20 日

目次

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ー＝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、アティヤー＝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 (kernel) 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。

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 [5]。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ー＝シンガーの指数定理 [1] 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 [6, 4]。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

定義 2.1 (リーマン多様体)**.** M を n 次元の C^∞ 級多様体とする。M の各点 x の接空間 T_xM に内積 g_x が滑らかに与えられているとき、組 (M,g) を**リーマン多様体**という。g をリーマン計量と呼ぶ。

リーマン多様体 (M,g) 上の C^∞ 級関数 $f : M \to \mathbb{R}$ に対し、その勾配 ∇f は計量

g を用いて定義されるベクトル場であり、発散 div は体積形式に関する L 微分で定義される。

定義 2.2 (Laplace-Beltrami 作用素)**.** リーマン多様体 (M, g) 上の関数 $f \in C^\infty(M)$ に対する **Laplace-Beltrami 作用素** (ラプラシアン) Δ_g は、

$$\Delta_g f = \mathrm{div}(\nabla f) \tag{1}$$

と定義される。局所座標系 $(x^1, \ldots, x^n)$ では、g_{ij} を計量テンソルの成分、g^{ij} をその逆行列の成分、$|g| = \det(g_{ij})$ とすると、

$$\Delta_g f = \frac{1}{\sqrt{|g|}} \sum_{i,j=1}^{n} \frac{\partial}{\partial x^i} \left(\sqrt{|g|} g^{ij} \frac{\partial f}{\partial x^j} \right) \tag{2}$$

と書ける。

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。

2.2 楕円作用素と解析的指数

定義 2.3 (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 k 階の線形微分作用素 $D : C^\infty(E) \to C^\infty(F)$ を考える。D の**主表象** (principal symbol) $\sigma_k(D)(x, \xi)$ は、各点 $(x, \xi) \in T^*M \setminus \{0\}$ （余接束のゼロ切断を除く）に対し、ファイバー間の線形写像 $\sigma_k(D)(x, \xi) : E_x \to F_x$ を定める。この写像が任意の $(x, \xi) \in T^*M \setminus \{0\}$ に対して同型写像（可逆な線形写像）であるとき、D を**楕円作用素** (elliptic operator) と言う。

直感的には、楕円作用素はラプラス作用素のように、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 (Ker$D$) および余核 (Coker D) 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 2.4 (解析的指数)**.** 楕円作用素 $D : C^\infty(E) \to C^\infty(F)$ に対し、その形式的共役作用素を $D^* : C^\infty(F) \to C^\infty(E)$ とする。このとき、D の**解析的指数** (analytical index) を以下で定義する。

$$\mathrm{ind}(D) = \dim \mathrm{Ker} D - \dim \mathrm{Ker} D^* \tag{3}$$

ここで $\mathrm{Ker} D = \{u \in C^\infty(E) \mid Du = 0\}$ は D の核（解空間）であり、$\dim \mathrm{Ker} D^* = \dim \mathrm{Coker}\, D$ である。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 2.5 (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 $\mathrm{ind}(D)$ 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量（位相的指数）と一致する。

証明の概略. 証明は K 理論を用いるもの、熱方程式を用いるものなど複数存在するが、本論文の文脈と親和性が高い後者の方針を概説する。Atiyah-Bott-Patodi と Gilkey による熱方程式を用いた証明では、指数を以下の熱作用素のトレースの差として表現する。

$$\mathrm{ind}(D) = \mathrm{Tr}(e^{-tD^*D}) - \mathrm{Tr}(e^{-tDD^*}) \tag{4}$$

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（チャーン類など）から定まる局所幾何学量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 [4, 6]。この定理の核心は、解析的に定義された量（核の次元差）と、位相幾何学的に定義された量（特性類の積分）という、全く異なる起源を持つ量が一致することを主張する点にある。 □

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 [2]。M 上の p 次微分形式のなすベクトル空間を $\Omega^p(M)$ とする。外微分作用素 $d : \Omega^p(M) \to \Omega^{p+1}(M)$ とその形式的共役（余微分）$d^* : \Omega^p(M) \to \Omega^{p-1}(M)$ を用いて、Hodge-de Rham ラプラシアンは $\Delta = dd^* + d^*d$ と定義される。

定義 2.6 (Witten 変形と 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

$$d_h = e^{-h} d e^h = d + dh\wedge \tag{5}$$

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。

$$\Delta_h = d_h d_h^* + d_h^* d_h \tag{6}$$

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。

McKean-Singer の公式の一般化として、この作用素の指数は熱作用素の超対称跡で与えられる。

$$\mathrm{ind}(d + d^*) = \mathrm{Str}(e^{-s\Delta_h}) = \mathrm{Tr}((-1)^F e^{-s\Delta_h}) \tag{7}$$

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、$(-1)^F$ は $\Omega^p(M)$ 上で $(-1)^p$ 倍する作用素である。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

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。

$$dX_t = f(X_t, t)dt + \sqrt{2D}dW_t \tag{8}$$

ここで $X_t \in M$ はデータ点、$f(x,t)$ 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。

$$\frac{\partial p_t}{\partial t} = -\nabla \cdot (f p_t) + D\Delta p_t \tag{9}$$

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 ($\frac{\partial p_t}{\partial t} = L_t^* p_t$)。

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。

$$d\tilde{X}_t = (f(\tilde{X}_t, t) - 2D\nabla \log p_t(\tilde{X}_t))dt + \sqrt{2D}d\tilde{W}_t \tag{10}$$

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、各時刻における確率密度の対数微分、すなわち**スコア関数** $\nabla \log p_t$ を知る必要がある。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

本研究の核心的主張は、拡散過程の安定性が、その過程を記述する作用素の解析的指数の時間不変性という、トポロジカルな性質に由来することを示す点にある。本章では、まず議論の前提となる数学的仮定を厳密に定義し、次いで主定理とその証明を詳細に記述する。さらに、この指数不変性がなぜモデルの「安定性」を保証するのか、その数学的含意を複数の補題を通じて明らかにする。

4.1　理論の前提となる厳密な仮定

本論文における主張の数学的妥当性を担保するため、以下に議論の前提となる仮定を明示する。

仮定 4.1 (多様体と確率密度)**.**

1. **データ多様体：** データが存在する空間 M は、n 次元の**境界を持たないコンパクト・リーマン多様体**（C^∞ 級）であると仮定する。リーマン計量を g とする。コンパクト性は、後述する作用素のスペクトルが離散的であることを保証し、指数理論を適用する上で本質的である。
2. **確率密度関数：** 各時刻 $t \in [0, \infty)$ における確率密度関数 $p_t : M \to \mathbb{R}$ の族 $\{p_t\}_{t \geq 0}$ は、以下の正則性を満たすものとする。
   - **滑らかさ：** 写像 $(x, t) \mapsto p_t(x)$ は $M \times [0, \infty)$ 上で C^∞ 級である。
   - **正値性と下界：** M がコンパクトであるため有界であり、さらに任意の $(x, t) \in M \times [0, \infty)$ に対して $p_t(x) > 0$ を満たす。これにより、ポテンシャル関数 $h_t = -\log p_t$ は well-defined であり、C^∞ 級となる。
   - **時間発展：** 密度 p_t は、フォッカー＝プランク方程式 $\frac{\partial p_t}{\partial t} = L_t^* p_t$ に従う。ここで L_t^* は滑らかな係数を持つ 2 階の線形楕円型偏微分作用素である。

仮定 4.2 (作用素の性質)**.**

1. **Witten Laplacian：** ポテンシャル関数 $h_t = -\log p_t$ を用いて定義される Witten Laplacian Δ_{h_t} は、M 上の微分形式のなすヒルベルト空間 $L^2(\Lambda^* T^* M)$ 上の作用素と見なす。
2. **定義域と自己共役性：** 各時刻 t に対し、Δ_{h_t} はソボレフ空間 $H^2(\Lambda^* T^* M)$ を定義域とする。コンパクト多様体上の滑らかな係数を持つ楕円作用素であるため、Δ_{h_t} はこの定義域上で**自己共役作用素** (self-adjoint operator) となる。これにより、スペクトル定理の適用が保証される [6]。

4.2 主定理とその証明

上記の仮定の下、本研究の主定理を以下に述べる。

定理 4.3 (主定理：拡散過程の解析的指数の不変性)**.** 仮定 *4.1* および *4.2* の下で、時刻 t におけるポテンシャル関数を $h_t = -\log p_t$ とし、対応する *Witten Laplacian* を Δ_{h_t} とする。このとき、任意の $s > 0$ に対して Δ_{h_t} から定まる解析的指数

$$I(t) = \mathrm{Str}\left(e^{-s\Delta_{h_t}}\right) = \mathrm{Tr}\left((-1)^F e^{-s\Delta_{h_t}}\right) \tag{11}$$

は、時間に依存しない定数である。すなわち、$\frac{dI(t)}{dt} = 0$ が成立する。ここで、$(-1)^F$ は外積形式の次数に応じて ± 1 の固有値をとるフェルミオン数演算子であり、Tr はトレース、Str は超対称跡（*supertrace*）を意味する。

この定理の証明は、指数の時間微分がゼロになることを直接計算することで示される。しかし、その計算の正当化、特にトレースと時間微分の交換可能性には、厳密な議論を要する。

補題 4.4 (トレースと微分の交換可能性)**.** M はコンパクトであるため、自己共役楕円作用素である *Witten Laplacian* Δ_{h_t} は離散的な実数スペクトルのみを持ち、その固有値は $+\infty$ に発散する。従って、任意の $s > 0$ に対し、熱半群 $e^{-s\Delta_{h_t}}$ は**トレースクラス作用素**である。さらに、h_t の時間依存性が仮定 *4.1* の下で滑らかであるため、作用素の族 $t \mapsto e^{-s\Delta_{h_t}}$ はトレースノルムに関して微分可能であり、

$$\frac{d}{dt}\mathrm{Tr}(A(t)) = \mathrm{Tr}\left(\frac{dA(t)}{dt}\right) \tag{12}$$

が成立する。ここで $A(t) = (-1)^F e^{-s\Delta_{h_t}}$ である。

Proof. この補題の証明は、熱核の理論に深く根差している [4, 6]。コンパクト多様体上の楕円作用素 P に対する熱作用素 e^{-sP} は、滑らかな核関数 $K(x,y;s)$（熱核）を

持つ積分作用素で与えられる。

$$(e^{-sP}f)(x) = \int_M K(x,y;s)f(y)d\mathrm{vol}(y) \tag{13}$$

作用素のトレースは、この核の対角成分の積分で与えられる。

$$\mathrm{Tr}(e^{-sP}) = \int_M K(x,x;s)d\mathrm{vol}(x) \tag{14}$$

仮定より、作用素の族 Δ_{h_t} は t に関して滑らかに変化するため、対応する熱核 $K_t(x,y;s)$ も t に関して滑らかに変化する。従って、

$$\frac{d}{dt}\mathrm{Tr}(e^{-s\Delta_{h_t}}) = \frac{d}{dt}\int_M K_t(x,x;s)d\mathrm{vol}(x) = \int_M \frac{\partial K_t(x,x;s)}{\partial t}d\mathrm{vol}(x) \tag{15}$$

この式は、$\mathrm{Tr}(\frac{d}{dt}e^{-s\Delta_{h_t}})$ の定義と一致するため、トレースと微分の交換が正当化される。 □

定理 *4.3* の証明. 解析的指数 $I(t)$ の時間微分を計算する。補題 4.4 により、トレースと微分の順序交換は正当化される。

$$\frac{dI(t)}{dt} = \frac{d}{dt}\mathrm{Str}\left(e^{-s\Delta_{h_t}}\right) = \mathrm{Str}\left(\frac{d}{dt}e^{-s\Delta_{h_t}}\right) \tag{16}$$

作用素の指数関数に関する微分の公式（Duhamel の公式）を用いる。$A(t) = -s\Delta_{h_t}$ とおくと、

$$\frac{d}{dt}e^{A(t)} = \int_0^1 e^{\alpha A(t)}\frac{dA(t)}{dt}e^{(1-\alpha)A(t)}d\alpha \tag{17}$$

これを代入し、超対称跡の巡回性 $\mathrm{Str}(AB) = \mathrm{Str}(BA)$ を用いると、

$$\begin{aligned}\frac{dI(t)}{dt} &= -s\int_0^1 \mathrm{Str}\left(e^{-\alpha s\Delta_{h_t}}\left(\frac{\partial \Delta_{h_t}}{\partial t}\right)e^{-(1-\alpha)s\Delta_{h_t}}\right)d\alpha &(18)\\ &= -s\int_0^1 \mathrm{Str}\left(e^{-(1-\alpha)s\Delta_{h_t}}e^{-\alpha s\Delta_{h_t}}\left(\frac{\partial \Delta_{h_t}}{\partial t}\right)\right)d\alpha &(19)\\ &= -s\cdot\mathrm{Str}\left(e^{-s\Delta_{h_t}}\frac{\partial \Delta_{h_t}}{\partial t}\right) &(20)\end{aligned}$$

ここで、Δ_{h_t} の時間微分 $\frac{\partial \Delta_{h_t}}{\partial t}$ は、ある作用素との超対称交換子（supercommutator）で書けることが知られている。すなわち、ある奇の作用素 Q_t が存在して、$\frac{\partial \Delta_{h_t}}{\partial t} =$

$[\Delta_{h_t}, Q_t]$ が成立する。この事実は、超対称量子力学における計算で確立されている [2]。これを用いると、

$$\frac{dI(t)}{dt} = -s \cdot \mathrm{Str}\left(e^{-s\Delta_{h_t}}[\Delta_{h_t}, Q_t]\right) \tag{21}$$
$$= -s \cdot \mathrm{Str}\left(e^{-s\Delta_{h_t}}\Delta_{h_t}Q_t - e^{-s\Delta_{h_t}}Q_t\Delta_{h_t}\right) \tag{22}$$

Δ_{h_t} と $e^{-s\Delta_{h_t}}$ は可換であるから、

$$\frac{dI(t)}{dt} = -s \cdot \mathrm{Str}\left(\Delta_{h_t}e^{-s\Delta_{h_t}}Q_t - e^{-s\Delta_{h_t}}Q_t\Delta_{h_t}\right) \tag{23}$$

超対称跡の巡回性により、$\mathrm{Str}(AB) = \mathrm{Str}(BA)$ であるから、

$$\mathrm{Str}(e^{-s\Delta_{h_t}}Q_t\Delta_{h_t}) = \mathrm{Str}(\Delta_{h_t}e^{-s\Delta_{h_t}}Q_t) \tag{24}$$

したがって、

$$\frac{dI(t)}{dt} = -s \cdot (\mathrm{Str}(\Delta_{h_t}e^{-s\Delta_{h_t}}Q_t) - \mathrm{Str}(\Delta_{h_t}e^{-s\Delta_{h_t}}Q_t)) = 0 \tag{25}$$

となり、指数 $I(t)$ が時間に依らない定数であることが証明された。 □

系 4.5 (長時間極限における指数とオイラー標数)**.**

仮定 4.6 (長時間極限の仮定)**.** 拡散過程がエルゴード的であり、時刻 $t \to \infty$ で唯一の定常分布 p_∞ に収束し、かつその収束が十分に滑らかであるとする。すなわち、C^k ノルム（任意の $k \geq 0$）において $p_t \to p_\infty$ が成立する。これは例えば、ドリフト項が作るポテンシャルにスペクトルギャップが存在する場合に保証される。

この仮定の下で、$h_t = -\log p_t$ は滑らかに $h_\infty = -\log p_\infty$ に収束する。この極限において、*Witten* 変形の理論より、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 *[2]*。したがって、主定理 *4.3* の結果と合わせると、任意の時刻 $t \geq 0$ において、

$$I(t) = \chi(M) \tag{26}$$

が成立する。

Proof. Witten の理論によれば、ポテンシャル関数 h を持つ Witten Laplacian Δ_h の指数は h の滑らかな変形に対して不変である。$t \to \infty$ の極限では、Δ_{h_t} は定常状態の作用素 Δ_{h_∞} に収束する。この作用素の指数は、ド・ラームコホモロジーとモース理論の対応により、多様体のオイラー標数 $\chi(M)$ に一致することが証明されている [2]。主定理 4.3 より、$I(t)$ は定数であるから、任意の t における値はその極限値と等しく、$I(t) = I(\infty) = \chi(M)$ となる。 □

4.3 安定性の数学的含意

主定理が示す指数の不変性は、単なる数学的な事実にとどまらず、拡散モデルの学習過程が持つ「安定性」の根源を説明するものである。本節では、「安定性」という言葉を厳密に定義し、それが指数の不変性から如何に導かれるかを明らかにする。

定義 4.7 (安定性の厳密な定義)**.** 本論文では、「安定性」を以下の二つの意味で区別して用いる。

1. **構造的安定性 (Topological/Structural Stability)：** 作用素のスペクトルのトポロジカルな性質（特に指数で表現される核次元の交代和）が、過程の時間発展や微小な摂動に対して不変である性質を指す。これは、解空間の位相的な構造が破壊されないことを意味する。
2. **量的安定性 (Quantitative Stability)：** 推定誤差などが時間発展を通じて指数関数的に増大せず、有界に留まる性質を指す。これは、摂動に対するロバスト性を量的に評価するものである。

補題 4.8 (摂動に対する楕円的安定性)**.** 拡散モデルにおけるスコア関数の推定誤差 $\delta(\nabla \log p_t)$ は、ポテンシャル関数 $h_t = -\log p_t$ に対する微小な摂動 δh_t と見なせる。摂動を受けた作用素を $\Delta_{h_t+\epsilon\delta h_t}$ とする。ここで ϵ は摂動の大きさを表すパラメータである。

仮定 4.9 (スコア誤差の仮定)**.** スコア関数の推定誤差から生じるポテンシャルの摂動 δh_t は、十分に滑らかであるとする。例えば、関数空間として $L^\infty(M) \cap C^k(M)$ ($k \geq 2$) に属すると仮定する。

この仮定の下、自己共役作用素族に関する加藤の摂動論に基づき、作用素 $\Delta_{h_t+\epsilon\delta h_t}$ のスペクトルは、パラメータ ϵ に対して連続的に変化する。

Proof. 作用素 Δ_{h_t} は自己共役であり、その定義 ($\Delta_h = d_h d_h^* + d_h^* d_h$) からスペクトルは非負であることは明らかである。スコア推定誤差に起因するポテンシャルの摂動を δh_t とし、摂動後の作用素を $\Delta(\epsilon) = \Delta_{h_t+\epsilon\delta h_t}$ とする。摂動 δh_t が C^2 級以上であれば、$\Delta(\epsilon) - \Delta(0)$ は $\Delta(0)$ に対して相対的に有界となる。加藤の摂動論によれば [6]、このような自己共役作用素族の固有値 $\lambda_i(\epsilon)$ および対応する固有射影は、パラメータ ϵ に対して解析的に変化することが保証される。

特に、Δ_{h_t} の固有値ゼロに対応する核空間 $\mathrm{Ker}\Delta_{h_t}$ の次元 $\dim \mathrm{Ker}\Delta_{h_t}$ は、固有値が摂動によってゼロを横切らない限り変化しない。指数の不変性は、核空間の次元の交代和が摂動に対して厳密に不変であることを保証する。これは、摂動によってある次数の核次元が増加した場合、別の次数の核次元も変化し、交代和を一定に保つことを意味する。これにより、摂動が全体のトポロジカルな構造を破壊することはない。したがって、スコア推定に起因する微小な摂動 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 [6, 4]。

- **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 [3]。
- **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 [5]。

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、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

定理 6.1 (Atiyah-Patodi-Singer の指数定理 [3]). 境界付きコンパクト多様体 $(M, \partial M)$ 上の楕円作用素 D（適切な境界条件を課す）の指数は、

$$\operatorname{ind}(D) = \int_M \alpha - \frac{h_0 + \eta(A)}{2} \tag{27}$$

で与えられる。ここで $\int_M \alpha$ は内部の積分項（特性形式の積分）、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、$h_0 = \dim \operatorname{Ker} A$ であり、$\eta(A)$ は A の η 不変量（イータ不変量）である。

証明の概略. この定理は指数定理の境界付き多様体への拡張であり、その証明は極めて高度である。熱核の方法を拡張し、境界近傍での熱核の挙動を詳細に分析する。境界項は、$t \to 0$ の極限で内部の寄与から生じる発散を打ち消すために現れる。η 不変量は作用素のスペクトルの非対称性を測る量であり、境界でのトポロジーを反映する [3]。 □

定理 6.2 (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 で適切な境界条件（例：反射壁）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 $\mathrm{ind}_{APS}(\Delta_{h_t})$ は時間によらず不変である。

Proof. 主定理 4.3 の証明と同様に、APS 指数の時間微分を考える。APS 指数は、作用素の滑らかな変形に対して不変であることが知られている（ホモトピー不変性)。我々の拡散過程は、仮定 4.1 の下で、作用素の族 Δ_{h_t} の滑らかな時間発展を与える。したがって、この変形の下で APS 指数は不連続に変化することはできない。すなわち、

$$\frac{d}{dt}\mathrm{ind}_{APS}(\Delta_{h_t}) = 0 \tag{28}$$

が成立する。より詳細には、内部の積分項の時間微分と境界項の時間微分が互いに打ち消しあうことが、局所指数定理の計算から示される [4]。 □

6.2 離散拡散モデルへの拡張: 格子上の指数定理

定理 6.3 (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。離散 Witten Laplacian Δ_{h_t} は、頂点、辺などからなる鎖複体上の作用素であり、有限次元の正定値対角行列となる。その指数は $I(t) = \mathrm{Str}(e^{-s\Delta_{h_t}})$ で定義される。$I(t)$ の時間微分を考えると、

$$\frac{dI(t)}{dt} = -s \cdot \mathrm{Str}\left(e^{-s\Delta_{h_t}} \frac{d\Delta_{h_t}}{dt}\right) \tag{29}$$

となる。これは有限次元行列のトレースと微分の交換であり、常に正当化される。連

続体の場合と同様に、$\frac{d\Delta_{h_t}}{dt}$ は Δ_{h_t} とある行列 Q_t との超対称交換子として書けることが示される。

$$\frac{d\Delta_{h_t}}{dt} = [\Delta_{h_t}, Q_t] \tag{30}$$

したがって、連続体の場合と全く同様の計算により、

$$\frac{dI(t)}{dt} = -s \cdot \mathrm{Str}\left(e^{-s\Delta_{h_t}}[\Delta_{h_t}, Q_t]\right) = -s \cdot \mathrm{Str}([e^{-s\Delta_{h_t}}\Delta_{h_t}, Q_t]) = 0 \tag{31}$$

となり、指数が時間不変であることが証明される。 □

6.3 最適輸送との融合: シュレーディンガー橋問題

定理 6.4 (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} *(*ただし $h_t = -\log p_t$*)* の指数を不変に保つ。

Proof. シュレーディンガー橋問題とは、初期分布 p_0 と終端分布 p_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を見出す問題である。この問題の解として得られる確率密度の族 p_t は、連立する非線形な熱方程式の解として与えられ、その正則性は保証されている。

すなわち、シュレーディンガー橋問題の解 p_t は、我々の仮定 4.1（滑らかさ、正値性、フォッカー＝プランク方程式に従うこと）をすべて満たす。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、作用素の族 Δ_{h_t} を構成できる。この作用素の族は、主定理 4.3 の適用条件をすべて満たしている。よって、主定理 4.3 の結論が直接適用され、

$$\frac{d}{dt}I(t) = \frac{d}{dt}\mathrm{Str}(e^{-s\Delta_{h_t}}) = 0 \tag{32}$$

が成立する。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、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」が、同時に「トポロジカルに安定な経路」でもあることを意味する。 □

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問題に対し、アティヤー＝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。厳密な数学的仮定の下で、拡散過程に対応する時間依存 Witten Laplacian の解析的指数が時間に依らず不変であることを証明し、これがスコア推定誤差のような摂動に対する構造的安定性を保証することを示した。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.