# 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 2.1)、(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 3.1)、(iv)Jensen-Shannonダイバージェンスの局所 λ-凸性の精密評価(定理 4.2)、(v)小慣性・過減衰極限における勾配流への収束(定理 5.1)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	設定	・記法・基本仮定	3
	1.1	データ空間と体積測度	3
	1.2	確率測度と密度のクラス	3
	1.3	Wasserstein-2 距離とオットー計量	4
	1.4	Levi-Civita 接続,曲率,第二基本形式(無限次元版)	6
<b>2</b>	ポテ	ンシャル束,Ehresmann 接続と曲率の同一視	8
	2.1	ポテンシャル束と接続	8
	2.2	接続の曲率 2-形式と $\mathcal{P}_+$ の曲率	9
3	ヤコ	ビアンの反対称部分と曲率 2-形式(主定理)	11
	3.1	パラメータ多様体の引き戻し計量と勾配ベクトル場	11
	3.2	ガウス公式による分解と曲率項	11
4	JSE	)の局所 $\lambda$ -凸性:定数依存の精密評価	12
	4.1	第二変分公式と Bochner の公式	13

	$4.2$ $M_t$ の二階微分と密度比の摂動評価 $\dots$	13
	4.3 密度比摂動と係数の明示	14
	4.4 JSD の局所 λ-凸性	15
5	過減衰極限(小慣性極限)と勾配流の正当化	15
	5.1 エネルギー不等式と初期層解析	15
	5.2 緊密性と極限方程式の同定	16
6	散逸系としてのダイナミクスと変分原理	17
7	有限次元への引き戻しと離散化:実装への対応	18
8	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	19
9	数値実験	21
	9.1 実験設定	21
$\mathbf{A}$	補遺:作用素の可解性と定数の明示	22
	A.1 楕円型作用素の可解性	23
	A.2 係数 $C_H, C_R, C_V$ の形	23
В	補遺:参考公式(Bochner, Benamou-Brenier)	24

## 第1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。

#### 1.1 データ空間と体積測度

**定義 1.1** (リーマン多様体・体積測度). (X,g) を d 次元の滑らかな( $C^{\infty}$  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 1.2 (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

$$\operatorname{Ric}_x(v,v) \geq \kappa \langle v,v \rangle_x$$

が成り立つとき、Ric  $\geq \kappa g$  と記す。

## 1.2 確率測度と密度のクラス

定義 1.3 (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 1.4 (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 1.1. 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。

#### 1.3 Wasserstein-2 距離とオットー計量

定義 1.5 (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 1.6 (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

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

を定義する。これは $\varphi_i$ 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 1.1** (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  $\mathsf{W}_2$ -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  $\mu$  とする。次に、 $\mathsf{W}_2$  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  $\mu$  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)。 $P_0, P_1 \in \mathcal{P}_2(X)$  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  $T: X \to X$  が存在し、 $T = \nabla \Phi$  とポテンシャル  $\Phi$  で書ける。  $\Phi$  は Monge-Ampère 方程式を(弱く)満たす。ここで重要なのは、密度  $\rho_0, \rho_1$  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  $\Phi$  も  $C^\infty$  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  $\rho_t$  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、 $\rho_t$  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  $\psi_t$  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 1.2 (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 1.6 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  $\varphi$  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 1.3 (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。

### 1.4 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 1.7** (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  $(\phi_U(P) \in C^{\infty}(X)/\mathbb{R})$ 。 $\phi_U$  を U のポテンシャルと呼ぶ。

定義 1.8 (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  $\nabla$  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 1.4. (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 1.9 (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 1.10 (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  $\Theta$  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。 $\Theta$  上の計量  $g_{\Theta}$  を  $\mathcal{P}_{+}$  のオットー計量の引き戻しで定義する:

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

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

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

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 1.5.** 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 1.6** (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、 $C^{\infty}$  級リーマン計量を持つ。
- (b) **密度クラスの正則性**: 密度  $\rho$  は  $C^{\infty}$  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  $L_{\rho}$  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  $\rho_{\theta}$  は、パラメータ  $\theta$  に対し滑らかである。これにより、引き戻し計量  $g_{\Theta}$  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  $\lambda$ -凸であること(EVI条件に相当)。これは  $Ambrosio-Gigli-Savar\acute{e}$  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 5.1 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  $\lambda$ -凸性を導出するために不可欠である(定理 4.2 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1.1)。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2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。

## 2.1 ポテンシャル束と接続

定義 2.1 (ポテンシャル東). 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  $(P,\phi)$  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 2.2 (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  $\phi_U$  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, $\pi$ -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 2.1.** 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。

#### 2.2 接続の曲率 2-形式と $\mathcal{P}_+$ の曲率

定義 2.3 (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  $\psi$  の U 方向微分, $\phi_U^{(\psi)}$  は U のポテンシャル( $\psi$  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 2.4 (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 2.1 (曲率 2-形式の具体式). 上の接続では

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

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 2.4 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 2.2 (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 2.1** (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 2.2 を  $\phi_V$ 、 $\phi_U$  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 2.1 (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

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

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

Proof. 補題 2.1 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  $\nabla^p_U \nabla^p_V W$ , $\nabla^p_V \nabla^p_U W$ , $\nabla^p_U \nabla^p_U W$ ,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 2.2 と系 2.1 を用いると

$$L_{\rho}\Big(\,\xi_{UV}-\xi_{VU}-\xi_{[U,V]}\,\Big) \;=\; -\; \mathrm{div}\Big(\sigma_U\,\nabla\phi_V-\sigma_V\,\nabla\phi_U\Big) \;=\; L_{\rho}\Big(\phi_{[U,V]}-U[\phi_V]+V[\phi_U]\Big)\,.$$

 $L_{\rho}$  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  $R^p(U,V)W$  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 1.6 による。

**注意 2.2.** 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3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  $\Theta$  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 2.1 の曲率 2-形式に等価であることを示す。

#### 3.1 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 3.1 (引き戻し計量と自然勾配).  $\iota:\Theta\to\mathcal{P}_+$  の引き戻し計量  $g_\Theta$  は 定義 1.10 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 3.2 (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  $g_{\Theta}$  に関する随伴)。

## 3.2 ガウス公式による分解と曲率項

補題 3.1 (ガウス公式による展開).  $u, w \in T_{\theta}\Theta$  に対し,

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

が成り立つ  $(u^* := d\iota(u)$ など)。

*Proof.* ガウス公式 (定義 1.10) を  $w \mapsto v$  に適用し、内積を取るだけである。

補題 3.2 (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  $E_{\text{proj}}(u, w) := \frac{1}{2} (\langle u, \text{II}(w, v) \rangle_{\Theta} - \langle w, \text{II}(u, v) \rangle_{\Theta})$  である。

Proof. 補題 3.1 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 3.1 (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, $\Theta$  が全空間  $\mathcal{P}_+$  に等しい場合には消失する。

Proof. 補題 3.2 の第一項を, $\mathcal{P}_+$  の Levi–Civita 接続の非可換性公式  $\nabla^{\mathcal{P}}_{u^*}\nabla^{\mathcal{P}}_{w^*}v^* - \nabla^{\mathcal{P}}_{w^*}\nabla^{\mathcal{P}}_{u^*}v^* - \nabla^{\mathcal{P}}_{u^*}\nabla^{\mathcal{P}}_{u^*}v^* - \nabla^{\mathcal{P}}_{u^*$ 

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

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 2.1 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 3.1** (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 3.1 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4章 $ext{JSD}$ の局所 $\lambda$ -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  $\psi_t$ )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  $\operatorname{Ent}(R) = \int r \log r \, d\mu$ 。

#### 4.1 第二変分公式と Bochner の公式

**定理 4.1** (エントロピーの第二変分).  $P_t$  が測地線で  $\psi_t$  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 4.1 (Ricci 下界による凸性). Ric  $\geq \kappa g$  より

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

#### 4.2 M<sub>t</sub> 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  $\alpha, \beta, \gamma$  は次節で明示的に与える係数である。

#### 4.3 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  $\operatorname{Ric} \geq \kappa \mathbf{g} \, \, \mathsf{E} \, \, \|\operatorname{Hess} \psi_t\|^2 \geq 0 \, \,$ から

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

## 4.4 JSD の局所 $\lambda$ -凸性

定理 4.2 (JSD の局所  $\lambda$ -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

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

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  $\lambda \rightarrow \frac{1}{2}\kappa$ 。

Proof. 定理 4.1 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  $\lambda$  を得る。ここで  $\|\dot{P}_t\|_{T_{P_t}\mathcal{P}}^2 = \int \|\nabla \psi_t\|^2 \rho_t \, d\mu$  を用いた。  $\Box$  **注意 4.1.**  $C_R, C_V$  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5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  $(\Theta,g_{\Theta})$  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

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

への収束を示す。

## 5.1 エネルギー不等式と初期層解析

補題 5.1 (エネルギー単調性). エネルギー  $\mathcal{E}_{\varepsilon}(t):=J(\theta(t))+rac{\varepsilon}{2}\|\dot{\theta}(t)\|_{g_{\Theta}}^2$  に対し

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

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

補題 5.2 (初期層(高速時間)の消散).  $s=t/\varepsilon$  とおくと,  $t\in[0,T]$  で

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

よって任意の  $\eta > 0$  に対し  $t \ge \tau_{\varepsilon} := \varepsilon \log(\|v_0\|/\eta)$  で  $\|\dot{\theta}(t)\| \le \eta + C\varepsilon_{\circ}$ 

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  $g_{\Theta}$  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。

#### 5.2 緊密性と極限方程式の同定

補題 5.3 (一様有界・等連続性). 補題 5.1 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  $\theta_\varepsilon$  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 5.1 (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  $\varphi$  とペアリングし,  $\varepsilon \nabla_{\dot{\theta}}\dot{\theta}$  は  $\varepsilon \to 0$  で  $L^1$ -小(補題 5.2 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 5.1 (過減衰極限の収束).  $(\Theta, g_{\Theta})$  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, $\theta_{\varepsilon}$  は (4) の解  $\theta$  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 5.1 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  $\theta$  は  $\dot{\theta}=-\nabla J(\theta)$  を満たす。

 $t\mapsto \frac{1}{2}d_\Thetaig( heta_\varepsilon(t), heta(t)ig)^2$  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  $L\ge 0$ (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  $\nabla J$  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 5.1 と等連続性(補題 5.3)から従い,右辺第 2 項も  $\varepsilon\downarrow0$  で 0 に収束する。以上より主張が従う。

注意 5.1 (参考: $\lambda$ -凸の場合の EVI). J が測地線的に  $\lambda$ -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6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 6.1 (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 6.2 (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 6.1 (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  $\delta P_t$  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 6.1 (§5 の式 (3) との対応). § 5 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  $(\Theta, g_{\Theta})$  に引き戻し,"質量"(慣性) $\varepsilon$  と摩擦  $\gamma = 1$  に正規化した形 に一致する.逆に本節は摩擦  $\gamma$  を明示し,時間再スケーリングで両者を相互に移せる.

## 第7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 7.1 (慣性付き自然勾配の幾何学的離散化). (5) を  $(\Theta,g)$  に引き戻した  $\nabla_{\dot{\theta}}\dot{\theta}+\gamma\dot{\theta}+$   $\operatorname{grad}_{g}J(\theta)=0$  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:

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

ここで  $R_{\theta}$  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 7.1** (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8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 8.1 (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 8.2 (曲率 2-形式). Riemann 多様体  $(\mathcal{P},g)$  上の Levi-Civita 接続  $\nabla$  に対して、曲率  $\mathcal{P}$  な

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

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 8.1 (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、 $\varphi$  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、 $\varphi$  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、

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

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9章 数值実験

#### 9.1 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。

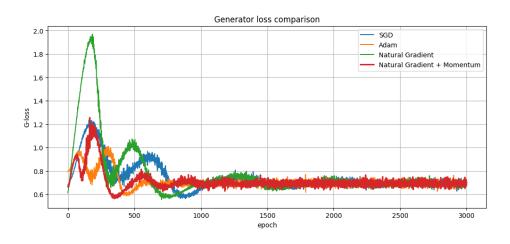


図 1: 生成器の損失

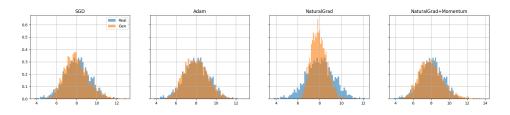


図 2: 生成分布と真のデータ分布の比較

## 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  $\lambda$ -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).  $\Theta$  を滑らかな有限次元多様体とし、写像  $\theta\mapsto \rho_{\theta}$  が  $\Theta$  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  $\sigma\in T_{\rho_{\theta}}\mathcal{P}_{+}$  をその平均 0 のポテンシャル  $\phi\in C^{\infty}(\mathsf{X})/\mathbb{R}$  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  $\theta$  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)
- $B_{\sigma}:=\{f\in C^{k,\alpha}(\mathsf{X}):\int_{\mathsf{X}}fd\mu=0\}$  (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  $C^{\infty}$  であるという仮定から、F は  $\theta$  と  $\phi$  に関して滑らかな写像(より正確には  $C^{\infty}$  級の Fréchet 微分可能)である。これは、F の  $\phi$  に関する線形性と、 $\rho_{\theta}$  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  $(\theta_0, \phi_0)$  における  $\phi$  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  $B_{\phi}$  から  $B_{\sigma}$  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  $(\theta_{0},\phi_{0})$  の近傍で、 $\theta$  と  $\sigma$  に滑らかに依存する一意な解  $\phi=\phi(\theta,\sigma)$  が存在する。特に、 $\sigma$  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  $\theta$  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).