

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) ポテンシャル束における 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、滑らかなリーマン多様体上の滑らかな一様有界・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)	4
2	ポテンシャル束, Ehresmann 接続と曲率の同一視	6
2.1	ポテンシャル束と接続	6
2.2	接続の曲率 2-形式と \mathcal{P}_+ の曲率	6
3	ヤコビアンの反対称部分と曲率 2-形式 (主定理)	8
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	9
3.2	ガウス公式による分解と曲率項	9
4	JSD の局所 λ -凸性: 定数依存の精密評価	10
4.1	第二変分公式と Bochner の公式	10

4.2	M_t の二階微分と密度比の摂動評価	11
4.3	密度比摂動と係数の明示	12
4.4	JSD の局所 λ -凸性	12
5	過減衰極限（小慣性極限）と勾配流の正当化	13
5.1	エネルギー不等式と初期層解析	13
5.2	緊密性と極限方程式の同定	14
6	散逸系としてのダイナミクスと変分原理	15
7	有限次元への引き戻しと離散化：実装への対応	16
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	16
9	数値実験	19
9.1	実験設定	19
A	補遺：作用素の可解性と定数の明示	20
A.1	楕円型作用素の可解性	20
A.2	係数 C_H, C_R, C_V の形	20
B	補遺：参考公式（Bochner, Benamou–Brenier）	20

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^∞ 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 $v \in T_x X$ に対し

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

が成り立つとき, $\text{Ric} \geq \kappa g$ 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

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

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 $0 < m \leq M < \infty$ とする。以下を満たす密度の集合を

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

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 $-\text{div}(\rho \nabla \varphi) = \sigma$ 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 $T_P \mathcal{P}(X)$ を

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

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

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

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 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 1.2 (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 ($\phi_U(P) \in C^\infty(X)/\mathbb{R}$)。 ϕ_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 $\nabla_U^P W$ を

$$\nabla_U^P W(P) := -\operatorname{div}(\rho \nabla \xi(P))$$

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：

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

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 1.3. (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 Θ と滑らかな写像（埋め込み）

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

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：

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

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 Π 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 1.4. 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。

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 $\mathcal{F} := C^\infty(X)/\mathbb{R}$ とする。射影 $\pi : E \rightarrow M$ 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 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

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

と定義する。ただし ϕ_U は $U = -\text{div}(\rho \nabla \phi_U)$ を満たすポテンシャルである。すなわち, π -関連で $d\pi(U^{\text{hor}}) = U$, 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. 上記はオー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 $s : \mathcal{P}_+ \rightarrow E$, $s(P) = (P, \psi(P))$ 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 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

$$F(U, V)s := \nabla_U^E \nabla_V^E s - \nabla_V^E \nabla_U^E s - \nabla_{[U, V]}^E s$$

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 $\nabla_V^E s = (0, V[\psi] - \phi_V)$, $\nabla_U^E(\nabla_V^E s) = (0, U[V[\psi] - \phi_V] - \phi_U^{(V[\psi] - \phi_V)})$. 本接続では常に $\phi_U^{(\cdot)} = \phi_U$ を取るので $\nabla_U^E \nabla_V^E s = (0, U[V[\psi]] - U[\phi_V] - \phi_U)$. 同様に $\nabla_V^E \nabla_U^E s = (0, V[U[\psi]] - V[\phi_U] - \phi_V)$. さらに $\nabla_{[U, V]}^E s = (0, [U, V][\psi] - \phi_{[U, V]})$. 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 $\phi_{[U, V]} - (U[\phi_V] - V[\phi_U])$ 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

$$[U, L_\rho]f := U[L_\rho f] - L_\rho(U[f]) = -\operatorname{div}(\sigma_U \nabla f), \quad \sigma_U = -\operatorname{div}(\rho \nabla \phi_U)$$

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。□

系 2.1 (ポテンシャル方程式). 任意の接ベクトル場 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 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 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 $R^P(U, V)$ に同型である。すな

わち

$F(U, V)s$ に対応するポテンシャルは $\phi_{R^P(U, V)W}$ (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

$$\langle R^P(U, V)W, Z \rangle_{T_P \mathcal{P}} = \int_X \langle \nabla(F(U, V)\psi_W), \nabla\psi_Z \rangle \rho d\mu,$$

が成り立つ (ψ_W, ψ_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 $\nabla_U^P \nabla_V^P W, \nabla_V^P \nabla_U^P W, \nabla_{[U, V]}^P W$ 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

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

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 $R^P(U, V)W$ のポテンシャル, 右辺は $F(U, V)s$ 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。 \square

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 of 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 of 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). $\iota : \Theta \rightarrow \mathcal{P}_+$ の引き戻し計量 g_Θ は 定義 1.10 のとおり。 $J : \Theta \rightarrow \mathbb{R}$ に対し, その (リーマン) 勾配ベクトル場 $v := \text{grad}_{g_\Theta} J$ 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). $\nabla^\Theta v : T_\theta \Theta \rightarrow T_\theta \Theta$ を v のヤコビアン (共変微分作用素) とし,

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

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)。

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,

$$\langle u, (\nabla^\Theta v)w \rangle_\Theta = \left\langle u^*, \left(\nabla_{u^*}^{\mathcal{P}} v^* \right)^\top \right\rangle_{T_{P_\theta} \mathcal{P}} + \langle u, \Pi(w, v) \rangle_\Theta,$$

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。 \square

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 $E_{\text{proj}}(u, w) := \frac{1}{2}(\langle u, \Pi(w, v) \rangle_\Theta - \langle w, \Pi(u, v) \rangle_\Theta)$ 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。 \square

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, $E_{\text{proj}}(u, w)$ 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 3.2 の第一項を, \mathcal{P}_+ の Levi-Civita 接続の非可換性公式 $\nabla_{u^*}^{\mathcal{P}} \nabla_{w^*}^{\mathcal{P}} v^* - \nabla_{w^*}^{\mathcal{P}} \nabla_{u^*}^{\mathcal{P}} v^* - \nabla_{[u^*, w^*]}^{\mathcal{P}} v^* = R^{\mathcal{P}}(u^*, w^*)v^*$ により書き換える。すなわち

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

となるよう \mathbf{n} を選ぶ (⊥ 射影により接・法成分に分かれ, 法方向は Π で既に別項に集約済み)。命題 2.1 より $R^{\mathcal{P}}$ 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 $E_{\text{proj}}(u, w)$ 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 JSD の局所 λ -凸性：定数依存の精密評価

$Q = q\mu$ を固定し, $P_t = \rho_t\mu$ を \mathcal{P}_+ 上の W_2 -測地線 (速度ポテンシャル ψ_t) とする。

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

JSD を $M_t = \frac{P_t + Q}{2}$ を用いて

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

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

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 ψ_t を速度ポテンシャルとすると

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

Proof. Bochner の公式 $\frac{1}{2}\Delta \|\nabla f\|^2 = \|\text{Hess } f\|^2 + \langle \nabla f, \nabla(\Delta f) \rangle + \text{Ric}(\nabla f, \nabla f)$ と連続の方程式に基づくオートー計算を逐一適用する。第一変分 $\delta \text{Ent} / \delta \rho = \log \rho + 1$, 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). $\text{Ric} \geq \kappa g$ より

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

4.2 M_t の二階微分と密度比の摂動評価

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

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

よって

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \text{Ent}(M_t) &= \int_X (1 + \log m_t) \partial_t m_t d\mu = -\frac{1}{2} \int_X (1 + \log m_t) \text{div}(\rho_t \nabla \psi_t) d\mu \\ &= \frac{1}{2} \int_X \left\langle \nabla \log m_t, \rho_t \nabla \psi_t \right\rangle d\mu. \end{aligned}$$

さらに

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

ここで

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

従って

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

また

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

$\partial_t \rho_t = -\text{div}(\rho_t \nabla \psi_t)$ 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 $\partial_t (\nabla \psi_t) = -\text{Hess } \psi_t \nabla \psi_t$ 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

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dt^2} \text{Ent}(M_t) &\geq \alpha(m, M, \delta) \int_X \|\text{Hess } \psi_t\|^2 \rho_t d\mu + \beta(m, M, \delta) \int_X \text{Ric}(\nabla \psi_t, \nabla \psi_t) \rho_t d\mu \\ &\quad - \gamma(m, M, \delta) \int_X \|\nabla \psi_t\|^2 \rho_t d\mu, \end{aligned} \tag{2}$$

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。

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 $\|\varepsilon_t\|_{L^\infty} \leq \delta < 1$ 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

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

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

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 $\int \langle \nabla \log m_t, \text{Hess } \psi_t \rho_t \nabla \psi_t \rangle$ 等を吸収すると,

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dt^2} \text{Ent}(M_t) &\geq \left(1 - C_H(m, M) \delta\right) \int_X \|\text{Hess } \psi_t\|^2 \rho_t d\mu \\ &\quad + \left(1 - C_R(m, M) \delta\right) \int_X \text{Ric}(\nabla \psi_t, \nabla \psi_t) \rho_t d\mu \\ &\quad - C_V(m, M) \delta \int_X \|\nabla \psi_t\|^2 \rho_t d\mu. \end{aligned}$$

特に $\text{Ric} \geq \kappa g$ と $\|\text{Hess } \psi_t\|^2 \geq 0$ から

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

4.4 JSD の局所 λ -凸性

定理 4.2 (JSD の局所 λ -凸性と定数依存). $\text{Ric} \geq \kappa g$, $q, \rho_t \in \mathcal{D}_{m, M}$, $\|\rho_t/q - 1\|_{L^\infty} \leq \delta < 1$ のとき

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

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

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

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

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 (Θ, g_Θ) と滑らか関数 $J: \Theta \rightarrow \mathbb{R}$ を考える。小慣性 $\varepsilon > 0$ に対し

$$\varepsilon \nabla_{\dot{\theta}}^\Theta \dot{\theta} + \dot{\theta} + \text{grad}_{g_\Theta} J(\theta) = 0, \quad \theta(0) = \theta_0, \quad \dot{\theta}(0) = v_0. \quad (3)$$

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

$$\dot{\theta} + \text{grad}_{g_\Theta} J(\theta) = 0, \quad \theta(0) = \theta_0, \quad (4)$$

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 $\mathcal{E}_\varepsilon(t) := J(\theta(t)) + \frac{\varepsilon}{2} \|\dot{\theta}(t)\|_{g_\Theta}^2$ に対し

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

Proof. $\frac{d}{dt} J(\theta) = \langle \text{grad} J, \dot{\theta} \rangle$, 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 $\varepsilon \langle \nabla_{\dot{\theta}} \dot{\theta}, \dot{\theta} \rangle + \langle \dot{\theta}, \dot{\theta} \rangle + \langle \text{grad} J, \dot{\theta} \rangle = 0$ より直ちに得る。 \square

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

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

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

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。□

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, $\int_0^T \|\dot{\theta}\|^2 dt \leq J(\theta_0) - \inf J$. よって θ_ε は H^1 有界, *Arzelà–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 $\theta_{\varepsilon_n} \rightarrow \theta$ 一様収束とする。任意の $\varphi \in C_c^\infty((0, T); T^*\Theta)$ に対し

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

すなわち $\dot{\theta} + \text{grad} J(\theta) = 0$ *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 $\varepsilon \rightarrow 0$ 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). (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

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

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 θ は $\dot{\theta} = -\nabla J(\theta)$ を満たす。

$t \mapsto \frac{1}{2} d_\Theta(\theta_\varepsilon(t), \theta(t))^2$ 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 $\int_{\tau_\varepsilon}^T |r_\varepsilon(t)| dt \rightarrow 0$ が従う。Grönwall の不等式により

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

$\theta_\varepsilon(\tau_\varepsilon) \rightarrow \theta(\tau_\varepsilon)$ は 命題 5.1 と等連続性 (補題 5.3) から従い、右辺第 2 項も $\varepsilon \downarrow 0$ で 0 に収束する。以上より主張が従う。 \square

注意 5.1 (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 Grönwall 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、

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(P_t, \dot{P}_t) &:= \frac{1}{2} \|\dot{P}_t\|_{g_{P_t}}^2 - \mathcal{J}(P_t), \\ \mathcal{F}(P_t, \dot{P}_t) &:= \frac{1}{2} \gamma \|\dot{P}_t\|_{g_{P_t}}^2 \quad (\gamma > 0). \end{aligned}$$

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

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

が成り立つとき、曲線 P_t は次の方程式を満たす：

$$\nabla_{\dot{P}_t} \dot{P}_t + \gamma \dot{P}_t + \text{grad}_{P_t} \mathcal{J} = 0. \quad (5)$$

特に過減衰極限 $\gamma \rightarrow \infty$ (時間再スケーリングを含む) で $\dot{P}_t = -\eta \text{grad}_{P_t} \mathcal{J}$ (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 $\delta S = - \int_0^T \langle \delta P_t, \nabla_{\dot{P}_t} \dot{P}_t + \text{grad}_{P_t} \mathcal{J} \rangle_{g_{P_t}} dt$ 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． \square

注意 6.1 (§5 の式 (3) との対応). §5 の式 (3) ($\varepsilon \nabla_{\dot{\theta}} \dot{\theta} + \dot{\theta} + \text{grad}_{g_{\Theta}} J(\theta) = 0$) 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 $\iota: \Theta \rightarrow \mathcal{P}_+$ ($\theta \mapsto P_{\theta}$) 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 $\text{grad}_g J(\theta) = g(\theta)^{-1} \nabla_{\theta} J(\theta)$ 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 (Θ, g) に引き戻した $\nabla_{\dot{\theta}} \dot{\theta} + \gamma \dot{\theta} + \text{grad}_g J(\theta) = 0$ 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：

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

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 $R(\xi) = \theta + \xi$, $\mathcal{T} = \text{Id}$ 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 $v : \Theta \rightarrow \mathbb{R}^d$ のヤコビアン $J(\theta) := \nabla v(\theta)$ に対して、

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\|v_{\text{sm}}(\theta_I(t)) - v_{\text{sm}}(\theta_S(t))\| \leq L\|e(t)\|$$

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、

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

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

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

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

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

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、

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

以上より、

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

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、

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

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 数値実験

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。

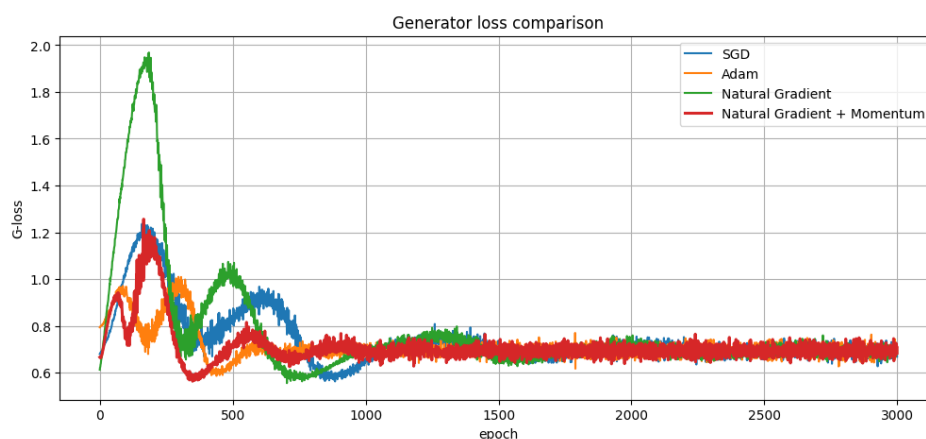


図 1: 生成器の損失

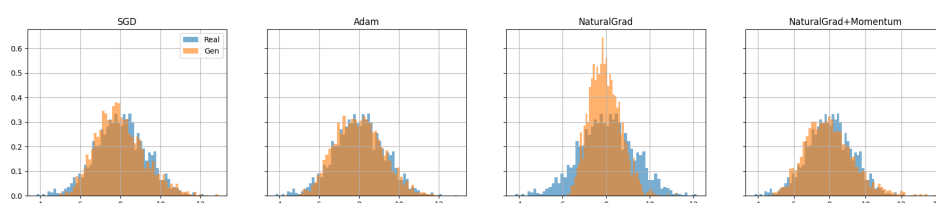


図 2: 生成分布と真のデータ分布の比較

結語

本章では、GAN 学習の幾何学的基礎を、無限次元オート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 of 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

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、 $H^1/\mathbb{R} \rightarrow H^{-1}$ 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。

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、 $\delta \rightarrow 0$ で $C_H\delta, C_R\delta, C_V\delta \rightarrow 0$ 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).