Poincaré Embeddings のための数学

西尾優

2019 年 11 月 27 日

1 Introduction

Poincaré Embeddings は双曲空間と言う特殊な空間で単語の分散表現を求めるのに便利な機械学習手法である．本文はこの Poincaré Embeddings についての論文 [1] を読むのに必要な数学の内容や論文中の数式の行間をできる限り埋める．リーマン多様体上の計量や, 関数の勾配について定義して, それらを用いてポアンカレ円盤上の距離や勾配を導出する．(可微分) 多様体の基礎的な知識は仮定するが, 末尾に Appendix として簡単な多様体論などの復習を載せる．

2 リーマン多様体と計量

定義 2.1. リーマン多様体とは可微分級多様体 M であり, 接空間上の 2 次双線形形式で正定値であるものが定まっている多様体のことをいう．またこの *2* 次形式をリーマン計量という．

注意として、一般に (パラ) コンパクトと言う良い性質を持つ可微分多様体にはリーマン計量が存在することが知られている．
またリーマン計量が存在するとき, その接空間には自然にノルムが定まり, さらにそのノルムを用いてリーマン多様体上の曲線の長さを以下のように定義することができる．

定義 2.2. 曲線 $c : [0, 1] \to M$ に対してその長さ $L(c)$ とは $L(c) = \int_0^1 ||c'(t)||_{c(t)} dt$ で定められる．

また上記曲線の長さを用いるとリーマン多様体上の 2 点間の距離を定義することができる．

定義 2.3. リーマン多様体上の *2* 点 $p, q \in M$ の距離とは $\inf \{L(c) | c$ は p, q を結ぶあらゆる曲線 $\}$ で定められる実数とする．

のちにこの定義による距離や曲線の長さが参考文献の定義たちと一致することをみる．最後にリーマン多様体上の関数の勾配について定義しておく．

定義 2.4. リーマン多様体上の C^∞ 関数 f の勾配を以下のように定める．$x \in M$ における勾配 $\nabla_M(f)_x$ は $g_x(\nabla_M(f)_x, \zeta) = \zeta(f)$ ただし $\zeta \in T_xM$ を満たすベクトル場 $\nabla_M(f)$ として定義する．

3 Poincare 円盤

定義 3.1. ポアンカレ円盤とは位相空間 $B = \{x \in \mathbb{R}^n||x| < 1\}$ に対して, 各点での接空間に計量 ${g_x}^P = \frac{4}{(1-|x|^2)^2}{g_x}^E$ ただし g^E はユークリッド空間における標準的なリーマン計量を表すとする.

定理 3.2. ポアンカレ円盤上の曲線 c の長さは $L(c) = \displaystyle\int_0^1 \frac{2|\frac{dc}{dt}(t)|}{1-|c(t)|^2}dt$ で与えられる.

証明. 定義に基づいて計算していく. まず点 $p \in B$ における接空間のノルム $||\cdot||$ は $||a|| = (\frac{2}{1-|p|^2})|a|$ と計算される. したがって曲線 c の長さは $L(c) = \displaystyle\int_0^1 \frac{2|\frac{dc}{dt}(t)|}{1-|c(t)|^2}dt$ と計算される.

□

上記で求めたポアンカレ円盤上の曲線の長さは [2] の p.46 で円盤モデルの曲線の長さとして採用されている定義と一致している. またこれを用いて変分問題をとくことによって具体的にポアンカレ円盤の 2 点間の測地線 (リーマン多様体上の 2 点間を結ぶ曲線のうち距離が最小になるようにとったもの) と距離を求めることができる. 詳細な証明は省略するが具体的には以下のような式になる.

定理 3.3. ポアンカレ円盤上の距離 $d(p,q)$ は $d(p,q) = \cosh^{-1}\left(1 + \frac{|p-q|^2}{(1-|p|^2)(1-|q|^2)}\right)$ で与えられる.

またポアンカレ空間上の f の勾配 $\nabla_P(f)$ もリーマン多様体上の勾配の一般論から以下のように表すことが可能である.

定理 3.4. ポアンカレ円盤において, 点 $p \in B$ での関数 f の勾配は ${\nabla_P(f)}_p = (\frac{1-|p|^2}{2})^2{\nabla_E(f)}_p$ のように求められる. ただし $\nabla_P(f)$ でポアンカレ円盤上の勾配,$\nabla_E(f)$ でユークリッド空間での関数の勾配とする.

証明. まずポアンカレ円盤は可微分多様体としては自然にユークリッド空間の部分空間であることを確認する. またユークリッド空間には標準的なリーマン計量が定まっていることにより, 局所座標表示 (この場合は座標変換などを考慮しなくても良いが) を $(B, x_1, x_2, , , x_n)$ と表すとすると,T_pM の元は $\sum_{i=1}^n a_i(\frac{\partial}{\partial x_i})_p$ の形で表されているとすると, 内積は係数を取り出したベクトルの通常の意味の内積で定まっている. この時 ${\nabla_P(f)}_p$ の係数ベクトルでの表示を $(a_1, a_2, , , a_n)$ とすると, 定義から以下の式が成り立っている. ${g_p}^P((a_1, a_2, , , a_n), (0, , 1, , 0)) = \frac{4}{(1-|p|^2)^2}{g_p}^E((a_1, a_2, , , a_n), (0, , 1, , 0)) = (\frac{\partial f}{\partial x_i})_p$ したがって $a_i = \frac{(1-|p|^2)^2}{4}(\frac{\partial f}{\partial x_i})_p$ である. またユークリッド空間での通常の勾配 ${\nabla_E(f)}_p$ の係数ベクトル表示は同様に計算して $(1, 1, , , 1)$ であることを考えると題意が成立する. □

4 Appendix:多様体論の復習

以下で位相空間論や多様体論の簡単な用語の復習を行う. 詳細は大学の位相空間や線形代数, 多様体の教科書を参考にしてほしい. 参考文献としては [6] をあげておく.

定義 4.1. 位相空間とは集合 X と以下の公理を満たす部分集合族 $\mathcal{O}$ の組 $(X, \mathcal{O})$ のことをさす. また $\mathcal{O}$ の元のことを X の開集合という.

- $\emptyset, X \in \mathcal{O}$
- $\forall O_1, O_2 \in \mathcal{O} \quad : \quad O_1 \cap O_2 \in \mathcal{O}$
- $\forall \{O_\lambda\}_{\lambda \in \Lambda} \subset \mathcal{O} \quad : \quad \displaystyle\bigcup_{\lambda \in \Lambda} O_\lambda \in \mathcal{O}$

定義 4.2. 位相空間の間の写像 $f : X \to Y$ が連続であるとは Y の任意の開集合 U の逆像 $f^{-1}(U)$ が開集合になることをいう. また位相空間の間の写像 f が同相とは, 連続で全単射かつ逆写像も連続であることを言う.

定義 4.3. 位相空間 X がハウスドルフ空間とは,$\forall x, y \in X (x \neq y)$ に対して,$\exists U, V \in \mathcal{O}(U \cap V = \phi)$ が存在していて $x \in U, y \in V$ とできることである.

定義 4.4. 可微分多様体とは以下の定義を満たす位相空間 M のことをいう.

- M はハウスドルフ空間である.
- $\bigcup_{i \in \lambda} U_i = M$ を満たす開集合達が存在している.
- $\phi_i : U_i \to \mathbb{R}^n$ なる連続関数が存在していてこの関数によって U_i はユークリッド空間のある開集合に同相である.
- $\phi_j \cdot {\phi_i}^{-1}$ は C^∞ 級の関数である.

定義 4.5. 可微分多様体 M の点 $p \in M$ における接空間 T_pM とは (本来の定義はもっとちゃんとしていて, 難しそうなものだが) 本文中では $(\frac{\partial}{\partial x_i})_p$ の形の微分作用素で生成されるベクトル空間とする.

定義 4.6. 可微分多様体 M のベクトル場とは写像 $X : M \to \bigcup_{p \in M} T_pM$ のことである.

定義 4.7. ベクトル空間 V 上の 2 次双線型形式 $\langle , \rangle$ とは写像 $\langle , \rangle : V \times V \to \mathbb{R}$ であって, 第一成分, 第二成分共に線型関数であるものをいう. また 2 次双線型形式が正定値とは $\forall x \in V, \langle x, x \rangle \geq 0$ が成立するものを言う. 少なくとも本文中ではいわゆる「内積」のことと思っていても差し支えない.

参考文献

[1] Maximilian Nickel,Douwe Kiela, Poincaré Embeddings for Learning Hierarchical Representations,https://arxiv.org/pdf/1705.08039.pdf

[2] 深谷賢治，双曲幾何，岩波書店，2004/9/7

[3] 田丸, 曲線・曲面とリーマン多様体,http://www.math.sci.hiroshima-u.ac.jp/ tamaru/files/09kika-c.pdf

[4] John G. Ratcliffe, Foundations of Hyperbolic Manifolds, http://entsphere.com/pub/pdf/Ratcliffe

[5] 佐藤 寛之, リーマン多様体上の最適化の理論と応用

[6] 坪井 俊, 幾何学 I 多様体入門　, 東京大学出版会