ある交代級数の補正項に関する２つの連分数近似

Two continued fraction approximations for the correction terms of some alternating series

笠井　博則 (Hironori KASAI)[1], 大浦　拓哉 (Takuya OOURA)[2]
[1] 福島大学 (Fukushima University), [2] 京都大学 (Kyoto University)
e-mail : kasai@sss.fukushima-u.ac.jp

1 Introduction

グレゴリー級数を一般化した次の交代級数

$$\tilde{S}_{a,b} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{an+b} = 1/b - 1/(a+b) + 1/(2a+b) - 1/(3a+b) + \cdots$$

の収束速度は遅く，項数 N に対して $\left|\sum_{n=0}^{(N-1)} \frac{(-1)^{k-1}}{ak+b} - \tilde{S}_{a,b}\right| < O\left(\left|\frac{1}{aN+b}\right|\right)$ 程度である。

級数 $\tilde{S}_{a,b}$ の N 項以降の和 $\tilde{R}_{a,b}(N)$ を近似する式を補正項ということにする。級数 $\tilde{S}_{a,b}$ に対して，項数 N に依存した補正項を用いることで，少ない N でも真の値に近づけることができる。例えば，$\pi/4$ を近似するグレゴリー級数（$a = 2, b = 1$) の場合には，Mādhava[1], Borwein ら [2] による補正項が知られており，前者の場合 3 次の有理式，後者の場合は 3 項の式で，N^{-7} 程度の精度を得る。

最近，筆者らはグレゴリー級数を補正項に対する 2 種類の連分数展開（超幾何級数の隣接公式を用いた表現，部分積分を利用した表現）を用いて計算した。この際，ある条件のもとで両者の値が一致することを発見し，数学的に両者の値が等しいことを証明した [3]。

この発表では，[3] の結果を任意の正の数 a, b に対する交代級数 $\tilde{S}_{a,b}$ に拡張し，超幾何級数の隣接公式を用いた補正項の連分数表現から，[1], [2] の連分数表現に対応する補正項の表現を導出する。

2 補正項の連分数表示

２つの連分数 R_A，R_B を次のように表し，その n 回近似をそれぞれ $R_{A,n}$，$R_{B,n}$ とする。

$$R_B(X) = \cfrac{1}{X + \cfrac{X^2}{(X+a) + \cfrac{a^2}{(X+2a) + \cfrac{(X+a)^2}{(X+3a) + \cfrac{(2a)^2}{(X+4a) + \cfrac{(X+2a)^2}{(X+5a) + \cfrac{(3a)^2}{\ddots}}}}}}} \approx R_{B,n}(X)$$

$$R_A(Y) = \cfrac{1}{Y + \cfrac{a^2}{Y + \cfrac{(2a)^2}{Y + \cfrac{(3a)^2}{\ddots}}}} \approx R_{A,n}(Y)$$

このとき，連分数近似 $R_{A,n}$ と $R_{B,n}$ について，次の式が成り立つ。

定理 1（主定理） n, N が自然数，　$X = aN + b$ とするとき，次の式が成り立つ。

$$R_{B,2n}(X) - \left(\sum_{k=0}^{N-1} \frac{(-1)^k}{X + ka}\right) = (-1)^n R_{A,n}(2X + 2an - a)$$
$$R_{B,2n+1}(X) - \left(\sum_{k=0}^{N} \frac{(-1)^k}{X + ak}\right) = (-1)^n R_{A,n}(2X + 2an + a)$$

$\tilde{R}_{a,b}(N)$ の表記は複数知られているが，その一つに $\tilde{R}_{a,b}(N)$ を超幾何級数とみなすものがある。この超幾何級数の連分数表示が $\tilde{R}_B$ になることが知られている ([4] など)。

補題 2　大きすぎない n に対して交代級数 $\tilde{S}_{a,b}$ は次のように近似される。

$$\tilde{S}_{a,b} \approx \sum_{k=0}^{N-1} \frac{(-1)^k}{ak + b} + R_{B,n}(X),\ X = aN + b$$

さらに，定理 1 によって次のような等号が成立つ例を構成できる。$(a, b, N, n) = (5, 1, 100, 4)$

$$\sum_{k=0}^{99} \frac{(-1)^k}{5k + 1} + R_{B,8}(501) = \sum_{k=0}^{103} \frac{(-1)^k}{5k + 1} + R_{A,4}(1037)$$

この式により $R_{A,n}$ も補正項とみなせることがわかる。これを一般化することで，次の命題を示すことができる。(一般に，同じ近似回数ならば R_A を用いた連分数の方が精度が高い。)

定理 3　大きすぎない m に対して交代級数 $\tilde{S}_{a,b}$ は次のように近似される。

$$\tilde{S}_{a,b} \approx \sum_{n=0}^{N-1} \frac{(-1)^n}{an + b} + (-1)^N R_{A,m}(2aN + (2b - a))$$

(例)$\tilde{S}_{22,17}$：$\displaystyle\sum_{n=0}^{10^2-1} \frac{(-1)^n}{22n + 17} + R_{A,4}(4412) = \underline{0.04277839650340135}32788142130678419592 1\cdots$

$$\sum_{n=0}^{10^3-1} \frac{(-1)^n}{22n + 17} + R_{A,4}(44012) = \underline{0.0427783965034013533286268875}6642857793\cdots$$

参考文献

[1] C.T.Rajagopal,M.S.Rangachari, ”On an Untapped Source of Medieval Keralese Mathematics”. Archive for History of Exact Sciences. 18 (2): 89–102, (1978)

[2] J. M. Borwein, P. B. Borwein, K. Dilcher, ”Pi, Euler numbers, and asymptotic expansions”, Amer. Math. Monthly 96(1989) 681-687. MR1019148

[3] H.Kasai,T.Oura, ”On Some Notes for Correction Terms of the Gregory’s series”, submitted

[4] H.Kasai,T.Oura, ”Two continued fraction approximations for the correction terms of some alternating series”, prepairing

拡散項や分散項を持つ非線形移流方程式に対する semi-Lagrangian method の誤差評価

Error estimates of semi-Lagrangian methods for nonlinear advection equations with diffusive or dispersive terms

竹村 春希 (Haruki Takemura)

東京大学大学院数理科学研究科
(Graduate School of Mathematical Sciences, The University of Tokyo)
e-mail : takemura@ms.u-tokyo.ac.jp

Semi-Lagrangian method は, 大気やプラズマ等, 移流の作用が強くはたらく流体運動を表す数理モデルに対して有効な手法として広く研究されてきた [1, 2]. 本研究の主結果は, [3] で提案された移流拡散方程式の初期値問題に対する semi-Lagrangian method に関する L^2 誤差評価である.

次のような $\mathbb{T} = \mathbb{R}/\mathbb{Z}$ 上の 1 次元非線形移流拡散方程式の初期値問題を考える:

$$\begin{cases} \partial_t u + f(u)\,\partial_x u - \nu\,\partial_x^2 u = 0, & \text{in} \quad \mathbb{T}\times(0,T), \\ u(0) = u_0, & \text{in} \quad \mathbb{T}. \end{cases} \tag{1}$$

ただし, $\nu > 0$ とする. 以下では f, u_0 が十分滑らかとし, (1) の十分滑らかな古典解 u の一意存在性を仮定する.

$N_t, N_x \in \mathbb{N}$, $\Delta t = T/N_t$, $t_n = n\Delta t$, $0 = x_0 < x_1 < \cdots < x_{N_x} = 1$ とする. [3] では, 初期値問題 (1) に対して次のような数値スキームが提案されている:

$$\begin{cases} u_m^0 = u_0(x_m), \\ u_m^n = \frac{1}{2}\mathcal{I}_h[U^{n-1}]\left(x_m - f(u_m^n)\Delta t - \sqrt{2}\delta\right) + \frac{1}{2}\mathcal{I}_h[U^{n-1}]\left(x_m - f(u_m^n)\Delta t + \sqrt{2}\delta\right). \end{cases} \tag{2}$$

ただし, u_m^n は $u(x_m, t_n)$ を近似する数値解, $\delta = (\nu\,\Delta t)^{1/2}$, $U^n = (u_1^n, \ldots, u_{N_x}^n)$ とする. $\mathcal{I}_h$ は何らかの補間作用素であり, $\mathcal{I}_h[(v_j)_j]$ は $\mathcal{I}_h[(v_j)_j](x_m) = v_m$ を満たすような $\mathbb{T}$ 上の関数である. Semi-Lagrangian method は, 移流項の作用を表現するために, 各時間幅 $[t_{n-1}, t_n]$ において格子点から特性曲線を時間逆方向へ遡り, その上流点における情報を用いて時刻 t_n の近似値を求めるのが特徴である. スキーム (2) は、移流だけでなく拡散項の寄与についても特性曲線の追跡を通じて反映するため, fully semi-Lagrangian method と呼ばれる.

また, このスキームは陰的であり, (2) の 2 行目において u_m^n を計算するには Newton 法等の反復法を用いる必要がある. 計算コストを増加させるような陰的スキームを採用するのは, スキームの安定性を向上させるためである.

$\mathcal{I}_h$ が線形補間作用素の場合, [3] の数学解析を基に L^∞ 誤差評価が得られる. また, 類似のスキームについて, [4] に L^∞ 誤差評価がある. 一方, $\mathcal{I}_h$ として高次のスプライン補間作用素などを用いた場合, これらの方針をそのまま適用することは容易ではない. 線形補間作用素は L^∞ ノルムを増加させないが, 高次の補間作用素においては, そのような性質が保証されるとは限らないためである. 本研究の主結果は, これらの先行研究とは異なるアプローチによって, $\mathcal{I}_h$ として高次のスプライン補間作用素や Hermite 補間作用素を採用した場合に有効な誤差評価を得たことである.

ここで $\mathcal{I}_h$ の仮定を用意する．$(2s-1)$ 次の Hermite 補間作用素とスプライン補間作用素は，$q=2s$ としたときの仮定 (1), (2) を満たす．$|\cdot|_{H^s(\mathbb{T})}$ は Sobolev 空間 $H^s(\mathbb{T})$ のセミノルムを表す．

仮定 (1)　任意の $v,w\in H^s(\mathbb{T})$ に対して次が成り立つ．ただし，I は恒等作用素を表す．

$$|(I-\mathcal{I}_h)v-\mathcal{I}_h w|^2_{H^s(\mathbb{T})}=|(I-\mathcal{I}_h)v|^2_{H^s(\mathbb{T})}+|\mathcal{I}_h w|^2_{H^s(\mathbb{T})} \tag{3}$$

仮定 (2)　$s,q\in\mathbb{N}$ $(s<q)$ と定数 $C_I>0$ が存在して，任意の $v\in H^s(\mathbb{T})$ に対して次が成り立つ:

$$\|(I-\mathcal{I}_h)v\|_{L^2(\mathbb{T})}\le C_I h^s\,|v|_{H^s(\mathbb{T})}, \tag{4}$$

$$|(I-\mathcal{I}_h)v|_{H^s(\mathbb{T})}\le C_I h^{q-s}\,|v|_{H^q(\mathbb{T})}. \tag{5}$$

以下の定理が本研究の主結果である．初期値問題 (1) の厳密解を $u^n=u(t_n)$, スキーム (2) による近似解を $u_h^n=\mathcal{I}_h[U^n]$ とする．

定理 1　補間作用素 $\mathcal{I}_h$ が仮定 (1), (2) を満たすとする．さらに，空間・時間方向の刻み幅 h, Δt について，正の定数 C_{D}, ε が存在して

$$h^{2s}/\Delta t\le C_{\mathrm{D}},\quad h^{2(q-s)}/\Delta t^{1+\varepsilon}\le C_{\mathrm{D}} \tag{6}$$

が成り立つとする．このとき，$\|u\|_{W^{2,\infty}(0,T;H^s(\mathbb{T}))}$, $\|u\|_{L^\infty(0,T;H^{s+4}(\mathbb{T}))}$, $\|u\|_{L^\infty(0,T;H^q(\mathbb{T}))}$ に依存する $(h_0,\Delta t_0)\in(0,1)^2$, $C_e>0$ が存在して，$(h,\Delta t)\in(0,h_0)\times(0,\Delta t_0)$ のとき，次の評価が成り立つ:

$$\|u^n-u_h^n\|_{L^2(\mathbb{T})}\le C_e\left(\Delta t+\frac{h^q}{\Delta t}\right). \tag{7}$$

定理の証明においては，重みつき H^s ノルム $\|v\|_{s,2,\Delta}=(\|v\|^2_{L^2(\mathbb{T})}+(h^{2s}/\Delta t)\,|v|^2_{H^s(\mathbb{T})})^{1/2}$ に関する補間作用素 $\mathcal{I}_h$ の安定性 $\|\mathcal{I}_h v\|_{s,2,\Delta}\le(1+C\Delta t)\,\|v\|_{s,2,\Delta}$ $(\forall v\in H^s(\mathbb{T}))$ が重要である．この不等式の $s=2$ の場合の証明は [5] において与えられている．本研究では，任意の自然数 s について，補間作用素が仮定 (1), (2) を満たせば上記の安定性に関する不等式が成り立つことを示した．

本発表では，数値実験例を紹介し，数値計算上の収束レートが定理と矛盾しないことを確認する．

また，Korteweg–de Vries 方程式に対する fully semi-Lagrangian method に関する誤差評価についても同様の数学解析の結果を述べる．

参考文献

[1] A. Staniforth and J. Côté, Semi-Lagrangian integration schemes for atmospheric models—a review, *Mon. Weather Rev.*, 119 (1991), 2206–2223.

[2] E. Sonnendrücker, J. Roche, P. Bertrand, and A. Ghizzo, The semi-Lagrangian method for the numerical resolution of the vlasov equation, *J. Comput. Phys.*, 149 (1999), 201–220.

[3] R. Ferretti, A fully semi-Lagrangian technique for viscous and dispersive conservation laws, *J. Comput. Phys.*, 526 (2025), 113784.

[4] G. N. Milstein and M. V. Tretyakov, Numerical algorithms for semilinear parabolic equations with small parameter based on approximation of stochastic equations. *Math. Comp.*, 69 (2000), 237–267.

[5] T. Kashiwabara and H. Takemura, Error estimates of the cubic interpolated pseudo-particle scheme for one-dimensional advection equations, arXiv:2402.11885, 2024.

Cahn–Hilliard 方程式に対する平方差分に基づく構造保存スキーム

A structure-preserving scheme for the Cahn–Hilliard equation using radical differences

奥村 真善美 (Makoto Okumura)[1]
[1] 甲南大学 (Konan University)
e-mail : okumura@konan-u.ac.jp

1 概要 近年, 線形性を緩和する代わりに他に優れた特徴を引き出すことをねらいとして, 対数差分など, 様々な非線形差分作用素が降籏により提案されており, 数値例を通じてその優れた特徴が確認されている [1, 2]. 本研究では, 非線形差分作用素のうち, その定義内に無理関数が現れる差分 (平方差分) を用い, Cahn–Hilliard 方程式に対し, 保存則, 散逸則を離散的に保持する構造保存スキームを構成した. 本講演では, 数値例を含めた提案スキームに関する結果について報告する.

2 平方差分とその和分公式

定義 1 関数 u の x における微分値の近似として, $\delta_{\surd}$ を

$$\delta_{\surd}\, u(x) := \frac{\sqrt{u(x)+c}}{\Delta x}\left(\sqrt{u(x+\Delta x)+c} - \sqrt{u(x-\Delta x)+c}\right)$$

と定義する. ただし, Δx は分割幅であり, $c \in \mathbb{R}$ は $u(x)+c \geq 0$, $u(x+\Delta x)+c \geq 0$, $u(x-\Delta x)+c \geq 0$ を満たすようにとる. 以後, この差分を **(一階) 平方差分**と呼ぶ.

ここで, 上記の平方差分は Taylor 展開によって以下のように評価できる.

性質 2 平方差分 $\delta_{\surd}$ に対し, 以下が成り立つ.

$$\delta_{\surd}\, u(x) = u^{(1)} + \left(\frac{u^{(3)}}{6} - \frac{u^{(1)}u^{(2)}}{4(u+c)} + \frac{(u^{(1)})^3}{8(u+c)^2}\right)(\Delta x)^2 + O\big((\Delta x)^4\big).$$

ただし, $u^{(i)}$ は u の i 次導関数を表す.

注意 3 平方差分 (非線形差分) のポイントとして, 以下が挙げられる.

- 通常の中心差分と違って, 中心点の関数値 $u(x)$ を使える.
- $c \in \mathbb{R}$ には自由度があり, 誤差をある程度制御できると期待される.
- 誤差主要項 ($(\Delta x)^2$ オーダー) に現れる $u^{(3)}/6$ は, 下記の通常の線形中心差分の $(\Delta x)^2$ オーダーの係数と同じ.
- c を十分大きくすると, $(\Delta x)^2$ オーダー誤差は線形差分と同じものに収束する.

[通常の線形中心差分の誤差評価]

$$\delta_x^{\langle 1\rangle}\, u(x) := \frac{u(x+\Delta x) - u(x-\Delta x)}{2\Delta x} = u^{(1)} + \frac{u^{(3)}}{6}(\Delta x)^2 + O\big((\Delta x)^4\big).$$

さらに, 平方差分は分子を有理化することにより以下のように変形できる.

$$\delta_{\surd}\, u(x) = \frac{2\sqrt{u(x)+c}}{\sqrt{u(x+\Delta x)+c} + \sqrt{u(x-\Delta x)+c}}\delta_x^{\langle 1\rangle} u(x).$$

上記の等式変形を用いることで, 今回, 周期境界条件下の Cahn–Hilliard 方程式に対し, 保存則, 散逸則の両方を離散的に保持する, 平方差分による構造保存スキームを構成した.

3　平方差分による構造保存スキーム

Toy problem として, 以下の Cahn–Hilliard 方程式

$$\begin{cases} \partial_t u = \partial_x^2 p \quad \text{in } (0,L)\times(0,\infty), \\ p = -\gamma\partial_x^2 u + F'(u) \quad \text{in } (0,L)\times(0,\infty) \end{cases}$$

に対し, 周期境界条件を課した問題を考える. ただし, $\gamma > 0$ であり, F' はポテンシャル F の導関数で, 例えば, $F(s) := (1/4)s^4 - (1/2)s^2$. このとき, 問題の解 u は次の保存則, 散逸則を満たす.

$$\frac{d}{dt}\int_0^L u dx = \int_0^L \partial_x^2 p dx = 0, \quad \frac{d}{dt}\int_0^L \left(\frac{\gamma}{2}\left|\partial_x u\right|^2 + F(u)\right)dx = -\int_0^L \left|\partial_x p\right|^2 dx \le 0.$$

上記の保存則と散逸則を離散的に再現する, 構造保存スキームを以下のように提案する. 今, $L > 0$, $K \in \mathbb{N}$ とし, $\Delta x := L/K$ とする. そして, 時間分割幅を Δt とし, $k = 0, 1, \ldots, K-1$, $n = 0, 1, \ldots$ に対し, 問題の厳密解 $u(k\Delta x, n\Delta t)$ に対応する数値解を $U_k^{(n)}$ と表すことにする.

[平方差分を用いた構造保存スキーム]

$$\begin{cases} \dfrac{U_k^{(n+1)} - U_k^{(n)}}{\Delta t} = \delta_k^{\langle 1\rangle}(\delta_{\sqrt{}} P_k^{(n+1)}) \quad (k = 0, \ldots, K-1,\ n = 0, 1, \ldots), \\ P_k^{(n+1)} = -\gamma\delta_k^{\langle 2\rangle}\left(\dfrac{U_k^{(n+1)} + U_k^{(n)}}{2}\right) + \dfrac{dF}{d(U_k^{(n+1)}, U_k^{(n)})} \quad (k = 0, \ldots, K-1,\ n = 0, 1, \ldots), \\ U_l^{(m)} = U_{l \bmod K}^{(m)} \quad (l \in \mathbb{Z},\ m = 0, 1, \ldots). \end{cases}$$

ただし, $\delta_k^{\langle 2\rangle}$ は空間方向の (通常の) 二階中心差分作用素 [3] であり, $dF/d(\cdot,\cdot)$ は F の差分商で,

$$\frac{dF}{d(\xi,\eta)} = \frac{\xi^3 + \xi^2\eta + \xi\eta^2 + \eta^3}{4} - \frac{\xi+\eta}{2}.$$

このスキームに対し, 次の保存則, 散逸則が成り立つ.

性質 4 上記スキームの解 $\boldsymbol{U}^{(n)} = \{U_k^{(n)}\}_{k=0}^{K-1}$ は次の保存則, 散逸則を満たす. $n = 0, 1, \ldots$ に対し,

$$\frac{1}{\Delta t}\left(M_{\mathrm{d}}(\boldsymbol{U}^{(n+1)}) - M_{\mathrm{d}}(\boldsymbol{U}^{(n)})\right) = 0,$$

$$\frac{1}{\Delta t}\left(J_{\mathrm{d}}(\boldsymbol{U}^{(n+1)}) - J_{\mathrm{d}}(\boldsymbol{U}^{(n)})\right) = -\sum_{k=0}^{K-1}\frac{2\sqrt{P_k^{(n+1)} + c}}{\sqrt{P_{k+1}^{(n+1)} + c} + \sqrt{P_{k-1}^{(n+1)} + c}}\left|\delta_k^{\langle 1\rangle} P_k^{(n+1)}\right|^2 \Delta x \le 0.$$

ただし, M_{d}, J_{d} はそれぞれ, 質量, エネルギーの離散版で, 以下で定義される.

$$M_{\mathrm{d}}(\boldsymbol{U}) := \sum_{k=0}^{K-1} U_k \Delta x, \quad J_{\mathrm{d}}(\boldsymbol{U}) := \sum_{k=0}^{K-1}\left(\frac{\gamma}{2}\left|\delta_k^+ U_k\right|^2 + F(U_k)\right)\Delta x.$$

なお, 数値例やその他得られた結果については講演にて述べる予定である.

謝辞　本研究は科研費 (課題番号:23K13009), 甲南大学デジタルツイン研究所の助成を受けた.

参考文献

[1] 降籏大介, 非線形性差分とその応用, 日本応用数理学会 2021 年度年会講演予稿集, 2021.

[2] 降籏大介, 非線形差分作用素の近似誤差プロファイルと入力誤差への耐性, 計算工学講演会論文集, 27 (2022).

[3] D. Furihata and T. Matsuo, *Discrete variational derivative method: A structure-preserving numerical method for partial differential equations*, CRC Press, 2011.

Denoising Diffusion Probabilistic Model の誤差評価

Error Estimation of Denoising Diffusion Probabilistic models

中野 張 (Yumiharu Nakano)
東京科学大学 (Institute of Science Tokyo)
e-mail : nakano@comp.isct.ac.jp

Ho et al. [1] によって導入された Denoising Diffusion Probabilistic Model（DDPM）は近年注目されている生成モデルの一種であり，画像・音声生成，時系列予測，計算化学など多様な応用が報告されている．本研究では，DDPM の理論的性質を明らかにすることを目的とし，特にノイズスケジュールに一般性を持たせた枠組みの下で，サンプリング分布と真のデータ分布との近さを全変動距離 D_{TV} で評価する．

$(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ を完備確率空間とする．μ_{data} を $\mathbb{R}^d$ 上のボレル確率測度，$\{\alpha_i\}_{i=1}^n$ は $0 < \alpha_i < 1$, $i = 1, \ldots, n$, を満たす数列とする．$\mathbf{x}_0 \sim \mu_{data}$，$Z \sim N(0, I_d)$ とする．DDPM における順時間過程 $\{\mathbf{x}_i\}_{i=0}^n$, 逆時間過程 $\{\mathbf{x}_i^*\}_{i=0}^n$ はそれぞれ次で記述される．

$$\mathbf{x}_i = \sqrt{\alpha_i}\mathbf{x}_{i-1} + \sqrt{1-\alpha_i} Z_i, \quad i = 1, \ldots, n,$$

$$\begin{cases} \mathbf{x}_n^* = \xi_n, \\ \mathbf{x}_{i-1}^* = \dfrac{1}{\sqrt{\alpha_i}}\left(\mathbf{x}_i^* - \dfrac{1-\alpha_i}{\sqrt{1-\bar{\alpha}_i}} z_i(\mathbf{x}_i^*)\right) + \sigma_i \xi_i, \quad i = 1, \ldots, n. \end{cases}$$

ここで $\sigma_i^2 = (1-\alpha_i)/\alpha_i$. $\{Z_i\}_{i=1}^n$ は $N(0, I_d)$ を共通の分布とする独立同分布確率変数列で，$\mathbf{x}_0$ とは独立とする．$\{z_i\}_{i=1}^n$ は $\mathbb{R}^d$ 上のボレル可測関数列で，学習により決定される．$\{\xi_i\}_{i=1}^n$ も $N(0, I_d)$ 共通の分布とする独立同分布確率変数列である．DDPM の学習目的は次で与えられる．

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \mathbb{E}\left|Z - z_i\left(\sqrt{\bar{\alpha}_i}\mathbf{x}_0 + \sqrt{1-\bar{\alpha}_i} Z\right)\right|^2.$$

これは変分下限から導かれる簡略化された目的関数であり，スコアマッチング目的と等価である．実際，関数 $\mathbf{s}_i(x) := (-1/\sqrt{1-\bar{\alpha}_i}) z_i(x)$ に対して，

$$\begin{aligned} L &:= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \mathbb{E}\left|\mathbf{s}_i(\mathbf{x}_i) - \nabla \log \mathbf{p}_i(\mathbf{x}_i)\right|^2 \\ &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \frac{1}{1-\bar{\alpha}_i}\mathbb{E}\left|z_i(\mathbf{x}_i) - Z\right|^2 + \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \mathbb{E}\left[|\nabla \log \mathbf{p}_i(\mathbf{x}_i|\mathbf{x}_0)|^2 - |\nabla \log \mathbf{p}_i(\mathbf{x}_i)|^2\right] \end{aligned}$$

が成り立つ．ここで $\nabla \log \mathbf{p}_i(x)$ は $\mathbf{x}_i$ のスコア関数である．

まず次の条件を仮定する．

(H1) データ分布 μ_{data} は有界な密度 p_{data} を持つ．p_{data} の弱微分 ∇p_{data} が存在し，適当な正定値対称行列 Q および定数 $c_0 > 0$ に対して

$$|\nabla p_{\mathrm{data}}(x) + p_{\mathrm{data}}(x) Q x| \le c_0 p_{\mathrm{data}}(x), \quad \text{a.e. } x \in \mathbb{R}^d.$$

注意 1　U が $\mathbb{R}^d$ 上でリプシッツ連続のとき，密度関数

$$p_{data}(x) \propto e^{-\frac{1}{2}x^\top Qx - U(x)}, \quad x \in \mathbb{R}^d,$$

は条件 (H1) を満たす．

c_1 を Q の最大固有値より大きい正の定数とする．条件（H1）から，スコア関数 $\nabla \log \mathbf{p}_i(x)$ は次の一次増大条件を満たすことが導かれる．

$$|\nabla \log \mathbf{p}_i(x)| \le \frac{c_0}{\sqrt{\bar{\alpha}_i}} + \frac{c_1}{\bar{\alpha}_i}|x|, \quad x \in \mathbb{R}^d, \ i = 1, \dots, n.$$

このことから，推定されたスコア関数 $\mathbf{s}_i$ も $\nabla \log \mathbf{p}_i$ と同様の成長条件を満たすと仮定する．

(H2)　学習されたスコア関数 s_i は次の一次増大条件を満たす．

$$|s_i(x)| \le \frac{c_0}{\sqrt{\bar{\alpha}_i}} + \frac{c_1}{\bar{\alpha}_i}|x|, \quad \text{a.e. } x \in \mathbb{R}^d, \quad i = 1, \dots, n.$$

定理 1　仮定 (H1), (H2) のもとで，定数 $\delta > 0$ と c_0, c_1, $\mathbb{E}|\mathbf{x}_0|^2$ にのみ依存する定数 $C > 0$ が存在し，$\bar{\alpha}_n < \delta$ のとき，

$$D_{\mathrm{TV}}\big(\mu_{\mathrm{data}}, \mathcal{L}(x_0^*)\big) \le C\sqrt{\sqrt{d\bar{\alpha}_n} + \sqrt{d(-n\log\alpha_{\min})(\bar{\alpha}_n)^{-2}L} + d^2 e^{c_2(\bar{\alpha}_n)^{-1}} n(\log\alpha_{\min})^2}.$$

ここで，$\mathcal{L}(x_0^*)$ は x_0^* の分布を表し，$c_2 = 10c_0 + 7c_1 + 1$, $\alpha_{\min} = \min_{1 \le i \le n} \alpha_i$ である．

ノイズスケジュール α_i の具体的な漸近挙動を仮定することで，右辺の評価をさらに簡約化できる．

系 2　仮定 (H1), (H2) に加え，

$$\frac{\gamma_1 \log\log\log n}{n} \le -\log\alpha_i \le \frac{\gamma_2 \log\log\log n}{n}, \quad i = 1, \dots, n,$$

を満たす定数 $\gamma_1, \gamma_2 > 0$ が存在するとき，任意の $\varepsilon > 0$ に対し，十分大きな n に対して，

$$D_{\mathrm{TV}}\big(\mu_{\mathrm{data}}, \mathcal{L}(x_0^*)\big) \le C\sqrt{\sqrt{d}(\log\log n)^{-\gamma_1/2} + \sqrt{d\gamma_2}(\log\log n)^{2\gamma_2+1}\sqrt{L} + d^2\gamma_2 n^{-(1-\varepsilon)(\log\log\log n)^2}}.$$

注意 2　実際の DDPM 実装（例えば [1]）では $n = 1000$ 程度で，ノイズ分散 $1 - \alpha_i$ を 10^{-4} から 0.02 の範囲で線形に増加させている．このとき上記条件は $\gamma_1 = 0.15$, $\gamma_2 = 30.67$ 程度に対応し，実用的なスケジュールに適合する．

定理 1 の証明においては，サンプリング過程を逆時間確率微分方程式（SDE）の指数積分型近似として記述し，誤差評価には Schrödinger 橋の理論を用いる．さらに，スコア関数を前進・後退 SDE の解として表現することで時間離散化誤差の評価を行う．詳細については [2] をみよ．

謝辞　本研究は科研費 (課題番号:24K06861) の助成を受けたものである．

参考文献

[1] Ho, J. and Jain, A. and Abbeel, P., Denoising diffusion probabilistic models, Advances in Neural Information Processing Systems, 33 (2020), 6840–6851.

[2] Nakano, Y., Convergence of the denoising diffusion probabilistic models for general noise schedules, `arXiv:2406.01320[math.PR]`, 2025.