自動微分と Gröbner 基底による
高次冪零無限小解析

to appear in CASC 2021

@mr_konn
(Hiromi ISHII)

Slides are available at https://bit.ly/smooth_d

preprint: arXiv:2106.14153

今日の話：

Automatic Differentiation With Higher Infinitesimals, or Computational Smooth Infinitesimal Analysis in Weil Algebra

https://arxiv.org/abs/2106.14153

今日の話題を一言で

自動微分
と冪零無限小解析
の関係を明らかにし、
Gröbner 基底を使って
計算機上で高次無限小解析をやる

Slides are available at https://bit.ly/smooth_d preprint: arXiv:2106.14153

つまり？

- 自動微分：与えられた関数の値とその（高階）微分を、合成関数の微分公式を使って効率的に計算する手法
  - 古くからあるが、機械学習の逆伝播法との関連で最近研究が盛ん
- 冪零無限小解析：$d^2 = 0,\ d \neq 0$ なる無限小を使う微積分
  - Newton から Gauß くらいまでの人達はこれで微積分やってた
  - 古典的には矛盾するが、トポス理論で正当化でき、多様体論が展開可能
    - Lawvere らによる総合微分幾何（Synthetic Differential Geometry）
  - Weil 代数の概念により代数的に特徴付けられる
- 今回の結果：Gröbner 基底と自動微分を組み合わせ、Weil代数による一般の冪零無限小解析を実現するアルゴリズムを提案
- 自動微分と冪零無限小解析の関連性はよく言及されるが具体的記述は少ない
  - まず両者の関係をはっきりさせる

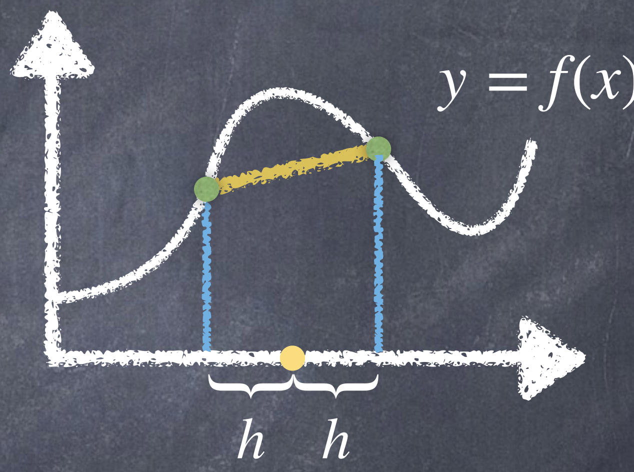
自動微分

フォワードモードを中心に

自動微分、数値微分、記号微分

- 自動微分：連鎖律を使って合成関数の微分を効率的かつ（ある程度）厳密に計算する（詳細後述）
- 数値微分：極限を微小数で置き換えて近似
  - Euler 法など
  - 効率的だがあくまで近似法
- 記号微分：数式を記号的な構文木で表し、微分法則に従って記号的に微分
  - 厳密だが、項数が指数的に爆発し効率が悪くなりがち

$$(f \circ g)'(x) = (f' \circ g)(x) \cdot g'(x)$$



$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$

自動微分（Forward mode）

係数体ℝに相当

Double など

元の関数の値

微分係数

```
data AD a = AD { real :: a, inifinitesimal :: a }

AD f f' + AD g g' = AD (f + g) (f' + g')
AD f f' * AD g g' = AD (f * g) (f' * g + f * g')
sin (AD f f') = AD (sin f) (f' * cos f)
```

微分の線型性

Leibniz Rule

三角関数の微分と連鎖律

- 基本的な考え方：ある点での関数の値と微分係数を同時に持っておく
  - $x + y\mathrm{d} := \mathtt{AD}\ x\ y$ と略記する。
- 関数 $F\colon \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ に対して、$\hat{F} : \mathtt{AD}_{\mathbb{R}} \to \mathtt{AD}_{\mathbb{R}}$ は入力が何らかの関数 f について $f(x) + f'(x)\mathrm{d}$ の形をしていると考え、$F(f(x)) + \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}F(f(x))\mathrm{d}$ の値を返すように定義する
- F の $x = a$ での微分係数を求めるには、$\hat{F}(a + \mathrm{d})$ を計算し、結果の d の係数を見ればよい
  - $a + d$: 恒等関数 $f(x) = x$ の $x = a$ での値と微分係数 $x' = 1$ に対応

DEMO

自動微分と記号微分の関係

- 自動微分を係数が多相になるように実装し、中に記号処理用の型を入れれば復元できる（See Demo）
  - 記号微分＋事後評価と自動微分は同じ精度
- ただし、効率の上で違いがある
  - 自動微分は Chain Rule に従い逐次的に計算を行う
  - 記号微分は全ての項を一旦記号的に微分して、それから評価を行うため、項の数が爆発し効率が落ちる

なぜこれで良いのか？

ここで SDG 由来の概念 C^∞-環と Weil 代数が登場

理論的正当化

- Forward Mode は二重数環 $\mathbb{R}[d] = \mathbb{R}[X]/(X^2)$ に対応、 C^∞-環の構造を持つ
  - Forward Mode 自動微分が満たす $d^2 = 0$ が自動微分を特徴付けている(DEMO)

定義（Lawvere）

可換環 A が C^∞-環であるとは、任意のC^∞-級関数 $f\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ に対し、直積を保つ写像 $A(f)\colon A^n \to A$ が定まることを言う。

滑らかな多変数関数がいい感じに A 上に持ち上がる環、という事

- 例：多様体 M に対し、M上の滑らかな $\mathbb{R}$-値関数の成す環 $C^\infty(M)$ は C^∞-環
- $\mathbb{R}[d]$ はその中でも Weil 代数という冪零無限小構造をもつ特別なC^∞-環の一種！

圏論ねいちぶへの定義：

定義（Lawvere）

CartSp を有限次元 Euclid 空間とその間の C^∞-級写像の成す圏とする。

C^∞-環とは、直積を保つ函手 $A : \mathbf{CartSp} \to \mathbf{Sets}$ のことである。しばしば A^m と $A(\mathbb{R}^m)$ を同一視し、$\mathbb{R}$の加法・乗法から定まる環構造は所与のものとして扱う。

C^∞-環の例：形式的冪級数環

定理 2 (Lawvere)

多変数形式的冪級数環 $\mathbb{R}[\![\mathbb{X}]\!]$ はTaylor 展開を介して C^∞-環構造が入る。

アイデア

$f : \mathbb{R}^n \xrightarrow{C^\infty} \mathbb{R}, g_1, \ldots, g_n \in \mathbb{R}[\![\mathbb{X}]\!]$に対し以下で定める：

$$\mathbb{R}[\![\mathbb{X}]\!](f)(\overrightarrow{g}) := \sum_{\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{N}^n} \frac{\boldsymbol{X}^{\boldsymbol{\alpha}}}{\alpha!} \mathrm{D}^{\boldsymbol{\alpha}}(f \circ \langle g_1, \ldots, g_n \rangle)(\mathbf{0})$$

Weil 代数

定義

次を満たすイデアル $I \subseteq \mathbb{R}[X_1, \ldots, X_n]$ が存在するとき、$\mathbb{R}$-線型空間 W を Weil 代数 と呼ぶ：

$$W \cong \mathbb{R}[\mathbb{X}]/I, \text{ and } (X_1, \ldots, X_n)^k \subseteq I \text{ for some k.}$$

- 直観：実数直線を冪零無限小で拡張したような代数
- 変数 X_i たちが独立した冪零無限小に対応する
  - X_i は剰余環 $\mathbb{R}[\mathbb{X}]/I$ で冪零
  - 特にベクトル空間として有限次元なので、I は零次元イデアル

Weil環がC^∞-環であること

定理 (Lawvere)

任意のWeil代数 $W = \mathbb{R}[\mathbb{X}]/I$ は自然な C^∞-環構造を持つ

これは次の補題から直ちに従う：

補題 1

C^∞-環 A 上の環論的イデアル I に対し、 A/I 上には商写像が誘導する C^∞-環が入る：

$$(A/I)(f)([x_1]_I, \ldots, [x_m]_I) := \left[A(f)(x_1, \ldots, x_m)\right]_I$$

- I が零次元なので、$\mathbb{R}[\![X]\!]/I \cong \mathbb{R}[\mathbb{X}]/I$ も C^∞-環となる。
- 特に、自動微分の二重数環 $\mathbb{R}[d] \cong \mathbb{R}[X]/(X^2)$ も C^∞-環！

二重数環$\mathbb{R}[d]$のC^∞-環構造

- 一変数の場合は $f(a + b\mathrm{d}) = f(a) + bf'(a)\mathrm{d}$ となるように定めていた
- 多変数関数 $f : \mathbb{R}^n \xrightarrow{C^\infty} \mathbb{R}$ の持ち上げは？
    - 形式的冪級数環の作用を1次で打ち切って $X \mapsto d$ と思えばよい

$\mathbb{R}[d]$のC^∞-環構造 (cont.)

$g_i = a_i + b_i X \ (i = 1, \ldots, n)$ とする。

$$
\begin{aligned}
&\mathbb{R}[\![X]\!](f)(\overrightarrow{g}) \\
&= f(\overrightarrow{g}(0)) + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(f \circ \langle g_1, \ldots, g_n \rangle)(0) X + \ldots \\
&= f(a_1, \ldots, a_n) + (g_1'(0) + \ldots g_n'(0)) \cdot f'(g_1(0), \ldots, g_n(0)) \ X + \ldots \\
&= f(a_1, \ldots, a_n) + (b_1 + \ldots + b_n) \cdot f'(a_1, \ldots, a_n) \ X + \ldots
\end{aligned}
$$

よって $I = (X^2)$ で剰余を取れば、

$$
\mathbb{R}[d](f)(a_1 + b_1 d, \ldots, a_n + b_n d) = f(\overrightarrow{a}) + (b_1 + \ldots + b_n) f'(\overrightarrow{a}) \cdot d
$$

これは $n = 1$の時、二重数環の一変数の定式化と一致する！

まとめ

- 自動微分（のForward Mode) は関数の評価値と微分係数を同時に引き回すことでC^∞-関数の合成関数の微分を厳密・効率的に計算する技法
  - これは二重数環 $\mathbb{R}[d] = \mathbb{R}[X]/(X^2)$ に C^∞-環の構造が入ることを逆用したもの
  - （実は変数の数や求めたいヤコビアンの次数によって、別の実装法も沢山ある；[2]参照）
- 二重数環は冪零元を持つ Weil 代数と呼ばれるものの一種

二重数環と
滑らかな冪零無限小解析

Slides are available at https://bit.ly/smooth_d preprint: arXiv:2106.14153

滑らかな無限小解析と総合微分幾何学

Q.　Forward　Modeに限れば「C^∞-関数のTaylor展開を逆用している」で済むのに、なんでWeil 代数だの C^∞-環だのに言及したの？

A.　Forward Mode の自動微分を、多変数・高階微分や高次の冪零無限小に一般化するため

高階微分と Weil 代数

- 二重数環のテンソル積を使えば、高階微分係数を一挙に求められる！

$$\mathbb{R}[d_1, \ldots, d_n] = \mathbb{R}[X_1, \ldots, X_n]/(X_i^2 \mid i \leq n) \cong \underbrace{\mathbb{R}[d] \otimes_{\mathbb{R}} \ldots \otimes_{\mathbb{R}} \mathbb{R}[d]}_{n\text{-copies}}$$

- を考えれば、帰納法により（但しσ_n^iはi-次のk-変数基本対称式）

$$\mathbb{R}[\overrightarrow{d}](f)(x + d_1 + \ldots + d_n) = \sum_{0 \leq i \leq n} f^{(i)}(x)\sigma_n^i(\overrightarrow{d}),$$

- 特に、$\mathbb{R}[\overrightarrow{d}](f)(x + d_1 + \ldots + d_n)$ の $d_1 \ldots d_k$ の係数を見れば、f のk-階微分係数がわかる！（n階微分までの情報を全部持ってる）
- 同様に、多変数の高階微分も $\mathbb{R}[d]$ の有限個のテンソル積で求まる

DEMO

今回の研究成果

更なる一般化

- Weil 代数 $W = \mathbb{R}[\mathbb{X}]/I$ の構造は $(X_1, \ldots, X_n) \subseteq \sqrt{I}$ なる I から定まる
- W はベクトル空間として有限次元、特に I は零次元イデアル
  - 零次元イデアル：剰余環が$\mathbb{R}$-多元環として有限次元になるような多項式イデアル。剰余環や根基のよいアルゴリズムがある。
  - 特にGröbner基底でベクトル空間の単項式基底が求まる！([6])
    - 大抵 I は単項式イデアルなのでもっと計算も簡単な筈
- 冪零無限小たちの振る舞いは、一旦形式的冪級数環で考えてから、適切な次数で項を打ち切って剰余を取ればよい！
  - 一般の冪零無限小を持つ空間での計算を計算機で出来る！

Weil代数の判定

Algorithm 1 (WeilTest)

- 入力：多項式イデアル $I \subseteq \mathbb{R}[\mathbf{X}]$
- $I \subseteq \mathbb{R}[\mathbb{X}]$ が零次元イデアルか？ No→ Weil 代数ではない
- 零次元イデアル用のアルゴリズムで $\sqrt{I}$ の Gröbner 基底を計算
- $X_1, \ldots, X_n \overset{?}{\in} \sqrt{I}$
  - No→Weil 代数ではない
  - Yes→計算に必要な基底の一覧、指数の上限、乗算表を返す（[6]）

- 以上の情報があれば、Weil代数 W の中での代数演算は簡単
- 論文では、より効率的に計算が出来るように、非自明な値を取る単項式の基底による線型表現を同時に計算させている

Weil 代数のC^∞-構造の計算

- 補題 1 よりWeil代数のC^∞-構造は冪級数環 $\mathbb{R}[\![\mathbf{X}]\!]$ の剰余を取れば得られる
- 定理 2 によれば、冪級数環の C^∞-構造 は次で与えられる：

$$\mathbb{R}[\![\mathbf{X}]\!](f)(g_1, \ldots, g_m) = \sum_{\alpha \in \mathbb{N}^n} \frac{\mathbf{X}^\alpha}{\alpha!} D^\alpha \left(f \circ \langle g_1, \ldots, g_m \rangle\right)(\mathbf{0})$$

- 合成微分の任意の偏微分が必要
  - 一般に、多変数の高階微分の情報を全部一挙に求める自動微分は Tower-mode 自動微分と呼ばれている
  - Tower-mode ADと $\mathbb{R}[\![\mathbf{X}]\!]$は多重階乗 $\alpha! = \alpha_1! \cdot \cdots \cdot \alpha_m!$ の分だけズレ
- いまは C^∞-級関数だけ考えているので微分の順番は可換
  - こうした特質を活かした Tower AD の手法は [9] で提案（おまけ参照）

Weil代数のC^∞-環構造の計算

Algorithm 2 (LiftWeil)

- 入力： $f\colon \mathbb{R}^n \xrightarrow{C^\infty} \mathbb{R}$ Tower 自動微分可能関数、
  Alg. 1 が与える Weil代数 $W = \mathbb{R}[X_1, \ldots, X_n]/I$ の情報（特に W の単項式基底 $\left\{\boldsymbol{X}^{\boldsymbol{\beta}_1}, \ldots, \boldsymbol{X}^{\boldsymbol{\beta}_k}\right\}$ と指数上界 $\boldsymbol{\alpha}$）とその元 $\overrightarrow{w} = (w_1, \ldots, w_n) \in W^n$
- 出力：$W(f)(\overrightarrow{w}) \in W$ ：C^∞-環構造の与える値 $W(f)(\overrightarrow{w}) \in W$

1. 各 $\overrightarrow{w}$ の代表元に対応する多項式 $\overrightarrow{g}$ を取る
2. $\mathbb{R}[[\mathbf{X}]](f)(\overrightarrow{g})$ を次数上界 $\boldsymbol{\alpha}$ で打ち切った $h \in \mathbb{R}[X]$ を求める（Tower ADをやって各項に多重階乗を掛ける）
3. $\bar{h}^G = \sum_{i \leq k} c_k \boldsymbol{X}^{\boldsymbol{\beta}_k}$ （h の G による多項式剰余）を計算し$(c_1, \ldots, c_k)$ を返す。

応用1：より効率的な高階微分

- 前項までの方法では n-階微分を求めるのに、n 個の無限小変数が必要
  - 証明してみるとわかるが、その分項の重複が増えてしまう
  - 特に、n-階微分まで求めるのに、2^n 項まで項数が爆発！
- 次の結果を使えば、一つで済む：

補題

$\varepsilon = (X) \in \mathbb{R}[X]/X^n$ と滑かな関数 f に対し次が成立：

$$\mathbb{R}[\overrightarrow{d}](f)(x+\varepsilon) = \sum_{0 \leq i < n} \frac{1}{i!} f^{(i)}(x)\varepsilon^i$$

応用2：テンソル積

- 二つの Weil 代数 W_1, W_2 のテンソル積 $W_1 \otimes_{\mathbb{R}} W_2$ も Weil 代数 (Lem 4)：

$$\mathbb{R}[\![X]\!]/I \otimes_{\mathbb{R}} \mathbb{R}[\![Y]\!]/J \cong \mathbb{R}[\![X, Y]\!]/\langle I, J\rangle$$

- テンソル積の Weil 構造は、畳み込みを使えば直接計算できる（Alg. 4）
  - テンソル積を使って、複数の Weil 代数を組み合わせることができる
  - 特に、Weil 代数を使って高次ADをパッケージ化し、テンソル積をとってそれらを合成できる！

例

$\mathbb{R}[\varepsilon] = \mathbb{R}[x]/(x^{n+1}), \mathbb{R}[\delta] = \mathbb{R}[y]/(y^{m+1})$ とすると、

$$(\mathbb{R}[\varepsilon] \otimes_{\mathbb{R}} \mathbb{R}[\delta])(f)(x+\varepsilon, y+\delta) = \sum_{\substack{0 \leq i \leq n \\ 0 \leq j \leq m}} \frac{1}{i!j!} \partial x^i \partial y^j f(x, y)$$

DEMO

まとめ

- Forward Mode 自動微分は二次の冪零無限小解析に相当
  - Lawvere による C^∞-環の理論で正当化出来る
  - 特に冪零無限小を持つ Weil 代数の例
  - これらは Synthetic Differential Geometry の文脈で出て来た
- 本講演の結果：自動微分と記号微分、Gröbner 基底による零次元イデアルのアルゴリズムを組み合わせ、二次に限らない一般の冪零無限小解析を計算機上で実現した
- 今後の課題： 最適化、微分幾何の synthetic な取り扱い

先行研究

- 2007年 Nishimura–Osoekawa が Weil 代数の極限の生成元の基本関係を計算するために零次元イデアルを応用している
  - 冪零無限小による計算そのものより、寧ろ総合微分幾何の理論を構築する際の計算機として使っている
  - なめらかな関数の値ではなく、Weil 環の生成元の関係の導出
- 私の問題意識は計算機上での無限小解析であり、C^∞-環の構造の計算なので、応用の仕方が違う
  - 自動微分との理論的な関連は性は指摘されていたが、両者を組み合わせて実装したのが本講演の研究成果

Future Work

- 高次の無限小を使い総合微分幾何を計算機上に実装する
  - 総合微分幾何では$\mathbb{R}[d_1, \ldots, d_n] = \mathbb{R}[x_1, \ldots, x_n]/(d_i d_j \mid i, j \leq n)$ のような一般の Weil 代数を使って、ベクトル場や微分形式を定義する
  - 微分幾何的対象を合成的な感じでプログラムで扱えると嬉しい
    - 課題：$C^\infty(M)$ は有限表示を持つが、一般に$\pi, \sin, \cos$ などが絡んだ初等超越関数の等値性は決定不能なので、直接的に扱う事はできない
  - Gröbner 基底は最悪二重指数なので高性能計算の文脈での実用には向かないが、理論がそのまんま計算できたらそれはそれで楽しい
- Reverse-Mode など他の自動微分の手法との組み合わせ

参考文献

1. Moerdijk, I. and Reyes, G. E. *Models for Synthetic Differential Geometry*. Springer-Veriag New York, lnc.,1991.
2. Kmett, E., *The ad package*. `https://hackage.haskell.org/package/ad`
3. 稲葉一浩「自動微分 «フォワード・モード»」`http://www.kmonos.net/wlog/123.html#_2257111201`
4. Elliott. C, Beautiful Differentiation. ICFP 2009.
5. Cox, D., Little, J. and O'Shea, D., *Ideals, Varieties, and Algorithms*. 3rd ed. Springer Science+Business Media, 2007.
6. Cox, D., Little, J. and O'Shea, D., Using Algebraic Geometry. Springer Science+Business Media, 2005.
7. Nishimura, H. and Osoekawa, T., General Jacobi Identity Revisited Again. 2007.
8. I., *Automatic Differentiation With Higher Infinitesimals, or Computational Smooth Infinitesimal Analysis in Weil Algebra.* To appear in CASC 2021.
9. I., *A Succinct Multivariate Lazy Multivariate Tower AD for Weil Algebra Computation*. In: Fujimura, M. (ed.) Computer Algebra. RIMS Kôkyûroku, pp. 104–112. Research Institute for Mathematical Sciences, Kyoto University, Kyoto, Japan (2021). `arXiv:2103.11615`

御清聴
ありがとうございました

Slides are available at https://bit.ly/smooth_d

preprint: arXiv:2106.14153

先行研究

- 2007年 Nishimura–Osoekawa が Weil 代数の極限の生成元の基本関係を計算するために零次元イデアルを応用している
  - 冪零無限小による計算そのものより、寧ろ総合微分幾何の理論を構築する際の計算機として使っている
  - なめらかな関数の値ではなく、Weil 環の生成元の関係の導出
- 私の問題意識は計算機上での無限小解析であり、C^∞-環の構造の計算なので、応用の仕方が違う
  - 自動微分との理論的な関連は性は指摘されていたが、両者を組み合わせて実装したのが本講演の研究成果

Any Questions?

- Forward Mode 自動微分は二次の冪零無限小解析に相当
  - Lawvere による C^∞-環の理論で正当化出来る
  - 特に冪零無限小を持つ Weil 代数の例
  - これらは Synthetic Differential Geometry の文脈で出て来た
- 本講演の結果：自動微分と記号微分、Gröbner 基底による零次元イデアルのアルゴリズムを組み合わせ、二次に限らない一般の冪零無限小解析を計算機上で実現した
- 今後の課題： 最適化、微分幾何の synthetic な取り扱い

Slides are available at https://bit.ly/smooth_d preprint: arXiv:2106.14153

以下オマケ

おまけ：簡潔Tower AD

$$f(\boldsymbol{a})$$

$$f_x(\boldsymbol{a}) \qquad f_y(\boldsymbol{a}) \qquad f_z(\boldsymbol{a})$$

$$f_{x^2}(\boldsymbol{a})\, f_{xy}(\boldsymbol{a})\, f_{xz}(\boldsymbol{a}) \qquad f_{y^2}(\boldsymbol{a})\, f_{yz}(\boldsymbol{a}) \qquad f_{z^2}(ba)$$

$$\vdots \quad \vdots \quad \vdots\,\vdots \quad \vdots \quad \vdots \qquad \vdots \quad \vdots \quad \vdots \qquad \vdots$$

- 次第に branching が減っていく無限木で持つ
- 左端の変数について微分しなくなったら右へいく

総合微分幾何（SDG）

- Synthetic Differential Geometry: Lawvere が創始
- 説明1：冪零無限小を使って微分幾何を展開
  - $d^2 = 0$ かつ $d \neq 0$ なる実数がある、とすると古典的には矛盾するので、直観主義でやる
  - ベクトル場や接束なども冪零無限小で定義し、その種々の法則は高次の無限小を使って証明する。
    - $\left\{ (d_1, d_2, d_3) \in \mathbb{R}^3 \mid d_i d_j = 0 \right\}$ とか $\left\{ d \in \mathbb{R} \mid d^3 = 0 \right\}$ とか
- 疑問：それって「普通の」微分幾何とどう関係するの？
  - モデル構成を含む説明を最初にするとわかりやすい

総合微分幾何（cont.）

- 説明2：C^∞-多様体の圏をより大きなトポスに忠実充満に埋め込んで微分幾何をやる
- Lawvere の観察: 多様体はその上のC^∞-関数の環 $C^\infty(M)$ で完全に分類される
- 「よい性質」を持った C^∞-環の圏の前層とか Gro. 位相とか（良く知らん）
  - 接束、ベクトル場等も同じトポスに住み多様体ぽい性質 (microlinearlity) を持つ
  - これらのトポスの内部言語で見ると、実数が非自明な冪零無限小を持つ。具体的に、任意の　Weil　代数 $W = \mathbb{R}[X]/I$　に対し、Wの定義する無限小空間 $\mathrm{Spec}_{\mathbb{R}}(W) = \left\{ \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^m : f(\boldsymbol{x}) = 0 \, \forall f \in I \right\}$ $(= V(I))$ が「点を十分持つ」
  - 冪零無限小を使って接空間などを定式化でき、それは本物の接空間と対応がつく
- 具体的なモデルの説明は Moerdijk–Reyes [1] が参考になる

定義の例

- 以下、$D = \left\{ d \in \mathbb{R} \ : \ d^2 = 0 \right\}$ とし、 $\pi : M^D \to M$ を $\pi(X) = X(0)$ で定義する。
- 多様体 M 上の接束とは $TM = M^D$ のことである
- 多様体 M の x における接空間とは $T_x M := \left\{ \mathfrak{X} \in TM : \mathfrak{X}(0) = x \right\}$
- $\mathfrak{X} : M \to M^D$ が M 上のベクトル場であるとは、$\pi \circ \mathfrak{X} = \mathrm{id}_M$ を満たす、つまり任意の点で $\mathfrak{X}(x)(0) = x$ となること。
    - 「時刻ゼロから微小時間後の流れた先」を与えるのがベクトル場
    - 古典的な微分幾何では、適当な条件下でベクトル場と媒介変数曲線に対応がついたことの冪零無限小による言い換えになっている
    - トポスなので curry 化などができ、次のようにも言い換えられる：ベクトル場とは $X : D \to M^M$ であって、 $X(0) = \mathrm{id}_M$ となるもののこと

Kock-Lawvere Axiom

- 微分を高校生に教えるときの標語「微分は関数の一次近似だ」
  - 「関数を局所的に一次関数で近似した傾きが微分係数だよ」
- この心を表したのが Kock-Lawvere Axiom:

Kock-Lawvere Axiom

任意の関数 $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ と $x \in \mathbb{R}$ および $d^2 = 0$ なる d に対し、

$$f(x + d) = f(x) + f'(x)\ d$$

Forward-mode AD やんけ

K-L Axiom 同値変形

ちょっと考えると、以下と同値なのがわかる

Kock-Lawvere Axiom

任意の $f : D \to \mathbb{R}$ と $d \in D$ に対し、$f(d) = a + bd$ なる $a, b \in \mathbb{R}$ が一意に存在

Kock-Lawvere Axiom

次で与えられる $\mathbb{R}[d] = \mathbb{R}[x]/x^2$ から $\mathbb{R}^D$ への代入写像は全単射：

$$
\begin{array}{ccc}
\mathbb{R}[d] & \longrightarrow & \mathbb{R}^D \\
\cup & & \cup \\
a + bd & \longmapsto & \lambda(d' \in D).\ a + bd' \in \mathbb{R}
\end{array}
$$

Generalised K–L Axiom

SDGのモデルでは、以下の一般化した形のK.–L.公理が成り立つ

Generalised Kock–Lawvere Axiom

任意の Weil 代数 $W = \mathbb{R}[X_1, \ldots, X_m]/I$ に対して、

次で与えられる W から $\mathbb{R}^{\mathrm{Spec}_{\mathbb{R}}(W)}$ への代入写像は全単射：

$$\begin{array}{ccc} W & \longrightarrow & \mathbb{R}^{\mathrm{Spec}_{\mathbb{R}} W} \\ \cup & & \cup \\ [f]_I & \longmapsto & \lambda(\boldsymbol{x} \in \mathrm{Spec}_{\mathbb{R}} W).\ f(\boldsymbol{x}) \in \mathbb{R} \end{array}$$

$\lim_{\to} W = \mathbb{R}[\![X]\!]$ を考えると、結局「全ての関数が Tower AD 可能 i.e. C^∞–級」と言っている！

Recall: $\mathrm{Spec}_{\mathbb{R}}(W) = \left\{ \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^m : f(\boldsymbol{x}) = 0\ \forall f \in I \right\} = V(I)$