特別研究報告書

非凸な目的関数に対する
適応的最適化手法の収束解析

指導教員　　田中利幸　教授

小渕智之　准教授

京都大学工学部情報学科

数理工学コース

令和 2 年 4 月入学

三好　雅也

令和 6 年 1 月 25 日提出

摘要

近年, 確率的勾配降下法 (SGD) を基礎とした様々な適応的最適化手法がディープニューラルネットワークの学習において広く使用されている. SGD は, 機械学習において使用される最も一般的な最適化手法で, 経験損失即ち, 全訓練データにわたる損失関数の和の最小化を目指す. この手法では, 各イテレーションでランダムに選ばれたサンプルに対する勾配を計算し, その勾配を使ってモデルを更新する. SGD は機械学習において強力な手法であるが, しかしその一方で, 勾配降下法による学習では学習率を適切に調整しないと不安定になるという問題がある. 適応的学習手法では, 学習率の調整を訓練パラメータの各成分ごとに行う.

SGD では全訓練パラメータに共通の大きさの学習率を掛けるが, これでは勾配のある成分の大きさが極端に大きい, あるいは小さい場合にその成分において適切に更新ができないという可能性がある. この問題に対処するために RMSProp やその派生である Adam などが提案された. これらは勾配の大きさに基づいて成分ごとに学習率を調整するもので, 現在でもよく利用される手法である. そのため収束性能についても理論的な解析が行われてきている. また, SGD では反復ごとにデータをランダムに選ぶために勾配にノイズが生まれ, 学習が適切に進まないという問題もある. この問題に対処するために SDProp などが考案された. SDProp は勾配の分散に基づいて成分ごとに学習率を調整するもので, RMSProp の派生として比較的最近提案された手法である. そのため, その理論的な収束性能は明らかとなっていない.

先行研究において凸な目的関数に対しては SDProp の収束性能を明らかにしたが, 非凸な目的関数に対しては, SDProp の収束性能はまだ明らかになっていない. そこで本研究では, 非凸な目的関数に対する SDProp の収束性能について理論的に解析し, RMSProp と比較することを研究目的とする. 非凸な目的関数に対する RMSProp の収束解析に関する先行研究に基づいて SDProp の収束解析を行った. 結果, 凸な目的関数の時と同様に, SDProp は勾配の大きさの変化に対しては適応できていない可能性があることが分かった.

目次

1　序論

近年, 確率的勾配降下法 (SGD) を基礎とした様々な適応的最適化手法がディープニューラルネットワークの学習において広く使用されている. SGD は, 機械学習において使用される最も一般的な最適化手法で, 経験損失即ち, 全訓練データにわたる損失関数の和の最小化を目指す. この手法では, 各イテレーションでランダムに選ばれたサンプルに対する勾配を計算し, その勾配を使ってモデルを更新する. SGD は機械学習において強力な手法であるが, しかしその一方で, 勾配降下法による学習では学習率を適切に調整しないと学習が不安定になるという問題がある. 適応的学習手法では, 学習率の調整を過去の勾配の情報に基づいて, 訓練パラメータの各成分ごとに行う.

SGD では全訓練パラメータに共通の大きさの学習率を掛けるが, これでは勾配のある成分の大きさが極端に大きい, あるいは小さい場合にその成分において適切に更新ができない可能性がある. この問題に対処するために RMSProp[1] やその派生である Adam [2] などが提案された. これらは勾配の大きさに基づいて成分ごとに学習率を調整するもので, 現在でもよく利用される手法である. そのため収束性能についても理論的な解析が行われ, 適応的最適化手法全体に関する理論の進展に寄与している. また, SGD では反復ごとにデータをランダムに選ぶために勾配にノイズが生まれ, 学習が適切に進まないという問題もある. この問題に対処するために SDProp[3] などが考案された. SDProp は勾配の分散に基づいて成分ごとに学習率を調整するもので, RMSProp の派生として比較的最近提案された手法である. そのため, その理論的な収束性能は明らかとなっていない.

先行研究 [9] では, 凸な目的関数に対する SDProp の収束性能を, リグレットに注目して明らかにした. リグレットとは, ある時刻までに得られた目的関数の値の合計とその最小値との差である. ある手法のリグレット上界が小さな値で抑えられていれば, その手法からは精度の高い解が得られると考えることができる. 凸な目的関数に対する RMSProp, SDProp のリグレット上界に関しては, 同一のオーダーをもつ結果が得られている.

以上のように, 凸な目的関数に対しては SDProp の収束性能が明らかにされているが, 非凸な目的関数に対しては, SDProp の収束性能はまだ明らかになっていない. そこで本研究では, 非凸な目的関数に対する SDProp の収束性能について理論的に解析し, RMSProp と比較することを研究目的とする. 非凸な目的関数に対する RMSProp の収束解析に関する先行研究 [7] に基づいて SDProp の収束解析を行い, RMSProp の収束解析の結果と比較する .

2　最適化手法

2.1　問題設定

第 2 節では RMSProp や SDProp などの各種学習手法について説明する. そのためにまず, 次の確率的最適化問題について考える.

$$f(\mathbf{x}) := \mathbb{E}_{\xi}[f(\mathbf{x};\xi)] \tag{1}$$

ここで, ξ は特定の分布に従う乱数であり, $f(\mathbf{x};\xi):\mathbb{R}^d\to\mathbb{R}$ は L-smooth な関数とする．確率的な設定では, $f(\mathbf{x})$ の完全な勾配に直接アクセスすることはできない．代わりに, $f(\mathbf{x})$ の勾配のバイアスのない推定値 $\nabla f(\mathbf{x};\xi)$ を得ることができる．一般に, 関数 $f:\mathbb{R}^d\to\mathbb{R}$ が L-smooth であるとは, 任意の $\mathbf{x},\mathbf{y}\in\mathbb{R}^d$ に対して, 以下の不等式が成り立つことを指す.

$$\|\nabla f(\mathbf{x})-\nabla f(\mathbf{y})\|_2\leq L\|\mathbf{x}-\mathbf{y}\|_2$$

L は Lipschitz 定数と呼ばれる.

機械学習の基本的な問題設定においては入力 a , 出力 b と正解値との相違度を誤差関数 $l\,(a,b;\theta)$ で測り, データセット全体での相違度の平均を最小にするようなパラメータ θ を求めるために, 以下のような期待損失 $L(\theta)$ の最小化問題を解く.

$$L(\theta):=\mathbb{E}_{p(a,b)}[l\,(a,b;\theta)] \tag{2}$$

ここで, $p(a,b)$ は入出力 (a,b) が従う確率分布である．式 (1), (2) には, $\xi\leftrightarrow(a,b)$, $\mathbf{x}\leftrightarrow\theta$ のような対応関係がある．本研究では, 式 (1) のような一般的な最適化問題を確率的に解く立場に立って議論を進める.

2.2 SGD

目的関数を最小化するための最も基本的な確率的最適化手法である SGD について説明する. SGD では, 完全な勾配 $f(\mathbf{x})$ の代わりにバイアスのない勾配の推定値 $\nabla f(\mathbf{x};\xi)$ を使って, パラメータを更新する．その際に学習率と呼ばれるハイパーパラメータを使って, 更新の大きさを制御する．反復 t 回目における ξ の値を ξ_t とおくと, SGD では以下のようにパラメータを更新する.

$$\mathbf{g}_t=\nabla f(\mathbf{x}_t,\xi_t)$$
$$\mathbf{x}_{t+1}=\mathbf{x}_t-\alpha_t\mathbf{g}_t$$

$\mathbf{x}_t$ は反復 t 回目の訓練パラメータを表し, $\mathbf{g}_t$ は $f(\mathbf{x};\xi_t)$ の $\mathbf{x}=\mathbf{x}_t$ における勾配で, α_t は反復 t 回目の学習率である．学習率 α_t としては 0.001 のような定数がよく用いられるが, 定数ではなく t の関数として変化させる場合もある.

2.3 RMSProp

RMSProp は SGD の振動を抑える目的で作られたもので, 各パラメータの学習率を適応的に調整する．RMSProp の更新式は以下のようになる.

$$\begin{aligned}\mathbf{g}_t&=\nabla f(\mathbf{x}_t,\xi_t)\\ \mathbf{v}_t&=\beta_t\mathbf{v}_{t-1}+(1-\beta_t)\mathbf{g}_t\odot\mathbf{g}_t \qquad (3)\\ \hat{\mathbf{v}}_t&=\max(\hat{\mathbf{v}}_{t-1},\mathbf{v}_t)\end{aligned}$$

$$\hat{\mathbf{V}}_t = \mathrm{diag}(\hat{\mathbf{v}}_t + \epsilon_t)$$
$$\mathbf{x}_{t+1} = \mathbf{x}_t - \alpha_t \hat{\mathbf{V}}_t^{-1/2} \mathbf{g}_t \tag{4}$$

$\mathbf{v}_t$ は反復 t 回目における勾配の二乗の移動平均の推定値である. β_t はハイパーパラメータで, 0.9 など t に依存しない定数とすることが多い. ϵ_t は 0 除算を防ぐための微小な正の数で, t に依存しない定数とすることが多い. $\odot$ はアダマール積であり, 成分ごとの積を表す. RMSProp は, 勾配の 2 乗の移動平均 $\mathbf{v}_t$ を求め, その値を使って学習率を調節する. これにより, 勾配が大きければ更新度合いは抑えられ, 逆に小さければ更新度合いが大きくなる.

2.4 SDProp

SGD では学習に用いるデータを反復毎にランダムに選ぶので, 更新されたパラメータ $\mathbf{x}$ の変化だけでなく, どのデータが選ばれるかも勾配に影響し, この影響が勾配にノイズをもたらしている. SDProp ではこのようなノイズに対処するために勾配の共分散行列に基づいた前処理をする. SDProp の更新式は以下のようになる.

$$\mathbf{g}_t = \nabla f(\mathbf{x}_t, \xi_t)$$
$$\mathbf{m}_t = \gamma_t \mathbf{m}_{t-1} + (1-\gamma_t)\mathbf{g}_t$$
$$\mathbf{s}_t = \gamma_t \mathbf{s}_{t-1} + \gamma_t(1-\gamma_t)(\mathbf{g}_t - \mathbf{m}_{t-1}) \odot (\mathbf{g}_t - \mathbf{m}_{t-1}) \tag{5}$$
$$\hat{\mathbf{s}}_t = \max(\hat{\mathbf{s}}_{t-1}, \mathbf{s}_t)$$
$$\hat{\mathbf{S}}_t = \mathrm{diag}(\hat{\mathbf{s}}_t + \epsilon_t)$$
$$\mathbf{x}_{t+1} = \mathbf{x}_t - \alpha_t \hat{\mathbf{S}}_t^{-1/2} \mathbf{g}_t \tag{6}$$

$\mathbf{m}_t$ は反復 t 回目における勾配の移動平均の推定値で, $\mathbf{s}_t$ は反復 t 回目における勾配の分散の推定値を表す. γ_t はハイパーパラメータで, 0.99 など t に依存しない定数とすることが多い. ϵ_t は 0 除算を防ぐための微小な正の数で, t に依存しない定数とすることが多い. 学習率を決定する式 (5) が勾配の 2 乗の移動平均ではなく, 勾配から勾配の移動平均を引いた式の 2 乗の移動平均, つまり分散の移動平均になっている点だけ RMSProp とは異なる.

3 凸な目的関数に対するリグレット解析

3.1 問題設定

本節では, 先行研究 [4], [9] により示された RMSProp, SDProp の収束性能について述べる. 以下のリグレット $R(T)$ を指標とする. 実行可能解の集合を F とした.

$$R(T) = \sum_{t=1}^{T} \left(f_t(x_t) - f_t(x^\star)\right)$$
$$x^\star = \arg\min_{x \in F} \sum_{t=1}^{T} f_t(x)$$

リグレット $R(T)$ は, 反復 T 回で実際に辿ってきた目的関数の値の合計とその最小値との差を表す．SGD において訓練に用いるデータが等確率で選ばれる場合, 学習に用いるデータセットを S とすると, $\frac{|S|}{T}\sum_{t=1}^{T} f_t(x)$ は $T \to \infty$ で大数の法則により経験損失に収束すると考えられる．このリグレット $R(T)$ を T で割った値が $T \to \infty$ において 0 に収束するとき，反復を重ねるにつれて，一回の反復当たりのリグレットの値が小さくなることを意味している．言い換えると, あるアルゴリズムについて次式が成り立つとき，リグレットは T に関して劣線形となる. このとき, 当該アルゴリズムは良いアルゴリズムであるとみなすことができる.

$$\lim_{T \to \infty} \frac{R(T)}{T} = 0$$

次にいくつかの仮定を置く.

仮定 1. 関数 f は 1 階微分可能であり, かつ凸関数であるとする.

仮定 2. 次の不等式を満たす正の定数 G_∞ が存在する.

$$\max_{x \in F} \|\nabla f_t(x)\|_\infty \leq G_\infty$$

仮定 3. 次の不等式を満たす正の定数 D_∞ が存在する.

$$\max_{a,b \in F} \|b - a\|_\infty \leq D_\infty$$

3.2 RMSProp

RMSProp のリグレット上界に関しては, 以下の結果 [4] が知られている.

定理 1. 仮定 1, 2, 3 に加え, α_t に関して条件 $\alpha_t = \frac{\alpha}{\sqrt{t}}, \beta_t$ に関して条件 $1 - \frac{1}{t} \leq \beta_t \leq 1 - \frac{\tau}{t}, 0 < \tau \leq 1, \epsilon_t$ に 関して条件 $\sqrt{t-1}\epsilon_{t-1} \leq \sqrt{t}\epsilon_t$ をおく．パラメータの更新が第 2.3 節のように行われるとき, RMSProp におけるリグレット $R(T)$ の上界は次のようになる.

$$R(T) \leq \left(\frac{D_\infty^2}{2\alpha} + \frac{\alpha(2-\tau)}{\tau}\right) \sum_{i=1}^{d} \left(\sqrt{T v_{T,i}} + \sqrt{T}\epsilon_T\right)$$

3.3 SDProp

SDProp のリグレット上界に関しては, 以下の結果 [9] が知られている.

定理 2. 仮定 1, 2, 3 に加え, α_t に関して条件 $\alpha_t = \frac{\alpha}{\sqrt{t}}, \gamma_t$ に関して条件 $1 - \frac{1}{t} \leq \gamma_t \leq 1 - \frac{\rho}{t}, 0 < \rho \leq 1, \epsilon_t$ に 関して条件 $\sqrt{t-1}\epsilon_{t-1} \leq \sqrt{t}\epsilon_t$ をおく．また, ϵ_t の最小値を ϵ とする．パラメータの更新が第 2.4 節のように行われるとき, SDProp におけるリグレット $R(T)$ の上界は次のようになる.

$$R(T) \leq \frac{D_\infty^2}{2\alpha} \sum_{i=1}^{d} \left(\sqrt{T s_{T,i}} + \sqrt{T}\epsilon_T\right) + \frac{\alpha G_\infty (2-\rho)}{\epsilon\rho} \sum_{i=1}^{d} \left(\sqrt{T\left(s_{T,i} + m_{T,i}^2\right)} + \sqrt{T}\epsilon_T\right)$$

定理 1, 定理 2 に示された結果から, RMSProp, SDProp のリグレット上界の T に関するオーダーが共に $O(\sqrt{T})$ であるから, 収束率という観点では違いはないと考えられる．また, 両者のリグ

レット上界における $\sqrt{T}$ の係数は, SDProp には勾配に依存する係数 G_∞ が出てきたのに対し, RMSProp には出てこなかった.

以上のとおり, 先行研究 [4], [9] により SDProp は RMSProp とは異なり, 凸な目的関数に対して勾配の大きさによって収束性能が左右される可能性があるとわかった.

ここで, 定理 2 を導く際に扱った重要な式変形について, 第 4 節で扱うため, 以下に記す. $\mathbf{m}_t = \gamma_t \mathbf{m}_{t-1} + (1-\gamma_t)\mathbf{g}_t$ という更新式から次の等式が得られる.

$$\mathbf{m}_t \odot \mathbf{m}_t = \gamma_t^2 \mathbf{m}_{t-1} \odot \mathbf{m}_{t-1} + (1-\gamma_t)^2 \mathbf{g}_t \odot \mathbf{g}_t + 2\gamma_t (1-\gamma_t) \mathbf{m}_{t-1} \odot \mathbf{g}_t$$

また, $\mathbf{s}_t = \gamma_t \mathbf{s}_{t-1} + \gamma_t(1-\gamma_t)(\mathbf{g}_t - \mathbf{m}_{t-1}) \odot (\mathbf{g}_t - \mathbf{m}_{t-1})$ という更新式から次の等式が得られる.

$$\mathbf{s}_t = \gamma_t \mathbf{s}_{t-1} + \gamma_t (1-\gamma_t) \mathbf{m}_{t-1} \odot \mathbf{m}_{t-1} + \gamma_t (1-\gamma_t) \mathbf{g}_t \odot \mathbf{g}_t - 2\gamma_t (1-\gamma_t) \mathbf{m}_{t-1} \odot \mathbf{g}_t$$

上の 2 式の両辺の和を取り, 整理すると次の等式が得られる.

$$\mathbf{s}_t + \mathbf{m}_t \odot \mathbf{m}_t = \gamma_t (\mathbf{s}_{t-1} + \mathbf{m}_{t-1} \odot \mathbf{m}_{t-1}) + (1-\gamma_t) \mathbf{g}_t \odot \mathbf{g}_t \tag{7}$$

これにより, RMSProp における式 (3) と同じ勾配の 2 乗の移動平均の推定値が得られる.

4 非凸な目的関数に対する収束解析

4.1 準備

ベクトル $\mathbf{x} = [x_i] \in \mathbb{R}^d$ に対して, ℓ_p ノルム $(p \geq 1)$ は $\|\mathbf{x}\|_p = \left(\sum_{i=1}^d |x_i|^p\right)^{1/p}$ で表され, ℓ_∞ ノルムは $\|\mathbf{x}\|_\infty = \max_{i=1}^d |x_i|$ で表す. ベクトル列 $\{\mathbf{g}_j\}_{j=1}^t$ に対して, $g_{j,i}$ は $\mathbf{g}_j$ の第 i 要素を表す. また, $\mathbf{g}_{1:t,i} = [g_{1,i}, g_{2,i}, \ldots, g_{t,i}]^\top$ と表記する. 行列 $\mathbf{A} = [A_{ij}] \in \mathbb{R}^{d \times d}$ に対して, $\|\mathbf{A}\|_{1,1} = \sum_{i,j=1}^d |A_{ij}|$ と定義する.
γ_t, ϵ_t について今回は t に依存しない定数 γ,ϵ とし, $\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}_1$, $\mathbf{m}_0 = 0, \mathbf{s}_0 = 0, \widehat{\mathbf{s}}_0 = 0$ とする. 次に 2 つの仮定をおく.

仮定 4. 任意の ξ に対して $\|\nabla f(\mathbf{x};\xi)\|_\infty \leq G_\infty$ が成り立つ.

仮定 5. $f(\mathbf{x}) = \mathbb{E}_\xi[f(\mathbf{x};\xi)]$ は L-smooth とする. すなわち, $f(\mathbf{x})$ は微分可能で, さらに, 任意の $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^d$ に対して,

$$|f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{y}) - \langle \nabla f(\mathbf{y}), \mathbf{x} - \mathbf{y} \rangle| \leq \frac{L}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2^2$$

が成り立つとする. L はリプシッツ定数で, これは以下の式と等価である.

$$\|\nabla f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{y})\|_2 \leq L \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2$$

目的関数が凸であるとは限らない場合には，解候補を反復的に求める最適化手法は目的関数の大域的最適解ではなく局所的最適解に収束する可能性がある．そのため，第 3 節で凸な目的関数の場

合に行ったようなリグレットにもとづく議論からは，有益な結論が導かれない．一方で，目的関数が凸であるとは限らない場合であっても，解候補が局所的最適解に近づくにつれて目的関数の勾配は小さくなっていくと期待される．このため，目的関数が凸であるとは限らない場合の収束解析では，勾配の 2 乗ノルムの累積和に対する上界がよく注目されており，本研究でもこの立場で議論する．

4.2 RMSProp

先行研究 [7] と同様の条件を置くために式 (4) を以下のような更新式に置き換えた RMSProp について考える．

$$\mathbf{x}_{t+1} = \mathbf{x}_t - \alpha_t \hat{\mathbf{V}}_t^{-1/2} \mathbf{m}_t \tag{8}$$

これは勾配 $\mathbf{g}_t$ を勾配の移動平均の推定値 $\mathbf{m}_t$ に書き換えたもので, 勾配の移動平均の推定値は勾配の変動を平滑化する効果があるためノイズの影響を受けにくくなり, RMSProp より安定した学習が期待できる．更新式を式 (8) のように一部書き換えた RMSProp に関して以下の結果 [7] が知られている．

定理 3. 仮定 4,5 のもとで、$t = 1, \ldots, T, 0 \leq s \leq 1/2$ のとき $\alpha_t = \alpha$, $\|\mathbf{g}_{1:T,i}\|_2 \leq G_\infty T^s$ が成り立ち, 出力 $\mathbf{x}_{\mathrm{out}}$ が $2 \leq t \leq T$ のとき $\alpha_{t-1}/\sum_{i=1}^{T-1} \alpha_i$ の確率で $\{\mathbf{x}_t\}$ から選択されるとすると, RMSProp の $\mathbf{x}_t$ は以下の式を満たす．

$$\frac{1}{T-1} \sum_{t=2}^{T} \mathbb{E}\left[\|\nabla f(\mathbf{x}_t)\|_2^2\right] \leq \frac{M_1}{T\alpha} + \frac{M_2 d}{T} + \frac{\alpha M_3 d}{T^{1/2-s}}$$

M_1, M_2, M_3 は以下のように定義される．

$$M_1 = 2(G_\infty + \epsilon)\Delta f, \quad M_2 = 2G_\infty(G_\infty + \epsilon)(G_\infty \epsilon^{-1/2} + 1), \quad M_3 = \frac{6LG_\infty(G_\infty + \epsilon)}{\epsilon^{1/2}(1-\beta)^{1/2}}$$

また $\Delta f = f(\mathbf{x}_1) - \inf_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x})$ とした．

最悪の場合, 即ち, 確率的勾配が全く疎でない場合, $s = 1/2$ で, 一方, 実際の状況では確率的勾配が疎である場合, $s < 1/2$ となる．

4.3 SDProp

本研究では, 先行研究 [7] と同様の条件を置くために式 (6) を以下のような更新式に置き換えた SDProp について考える．

$$\mathbf{x}_{t+1} = \mathbf{x}_t - \alpha_t \hat{\mathbf{S}}_t^{-1/2} \mathbf{m}_t \tag{9}$$

第 4.2 節の RMSProp と同様, $\mathbf{x}_t$ を $\mathbf{g}_t$ ではなく $\mathbf{m}_t$ にもとづいて更新する SDProp はより安定した学習が期待できる．更新式を式 (9) のように一部書き換えた SDProp に関して定理 3 に相当する結果を得た．得られた結果を以下に示す．

定理 4. 仮定 4,5 のもとで、$t = 1, \dots, T, 0 \le s \le 1/2$ のとき $\alpha_t = \alpha$, $\|\mathbf{g}_{1:T,i}\|_2 \le G_\infty T^s$ が成り立ち, 出力 $\mathbf{x}_{\text{out}}$ が $2 \le t \le T$ のとき $\alpha_{t-1}/\sum_{i=1}^{T-1}\alpha_i$ の確率で $\{\mathbf{x}_t\}$ から選択されるとするとSDProp の $\mathbf{x}_t$ は以下の式を満たす.

$$\frac{1}{T-1}\sum_{t=2}^{T}\mathbb{E}\left[\|\nabla f(\mathbf{x}_t)\|_2^2\right] \le \frac{M_1}{T\alpha} + \frac{M_2 d}{T} + \frac{\alpha M_3 d}{T^{1/2-s}}$$

M_1, M_2, M_3 は以下のように定義される.

$$M_1 = 2(G_\infty + \epsilon)\Delta f, \quad M_2 = 2G_\infty(G_\infty + \epsilon)(G_\infty \epsilon^{-1/2} + 1),$$
$$M_3 = \frac{2LG_\infty^2(G_\infty + \epsilon)(1-\gamma)^{1/2}}{\epsilon(1-\sqrt{\gamma})}\left(1 + 2(1-\sqrt{\gamma})\frac{\gamma^2}{(1-\gamma)^3}\right)$$

また $\Delta f = f(\mathbf{x}_1) - \inf_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x})$ とした.

補題 1.(証明は付録 A に記載)
仮定 4 より, $\|\nabla f(\mathbf{x})\|_\infty \le G_\infty, \|\widehat{\mathbf{s}}_t\|_\infty \le G_\infty^2$, $\|\mathbf{m}_t\|_\infty \le G_\infty$ が成り立つ.

通常の確率的勾配降下法 (SGD) の解析と比較して, 適応的最適化手法の収束率を解析する主な難しさは, 確率的モーメンタム $\mathbf{m}_t$ と確率的重み行列 $\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}$ の存在によるもので, それらを取り扱うために, 以下のような補助列 $\mathbf{z}_t$ を定義する.

$$\mathbf{z}_t = \mathbf{x}_t + \frac{\gamma}{1-\gamma}(\mathbf{x}_t - \mathbf{x}_{t-1}) \tag{10}$$

これは以下のようにも表せる.

$$\mathbf{z}_t = \frac{1}{1-\gamma}\mathbf{x}_t - \frac{\gamma}{1-\gamma}\mathbf{x}_{t-1} \tag{11}$$

補題 2.(証明は付録 B に記載)
以下の 4 式が式 (10),(11) より成り立つ.

$$\mathbf{z}_2 - \mathbf{z}_1 = -\alpha_1\widehat{\mathbf{S}}_1^{-1/2}\mathbf{g}_1, \tag{12}$$

$$\mathbf{z}_{t+1} - \mathbf{z}_t = \frac{\gamma}{1-\gamma}\left(\alpha_{t-1}\widehat{\mathbf{S}}_{t-1}^{-1/2} - \alpha_t\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\right)\mathbf{m}_{t-1} - \alpha_t\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\mathbf{g}_t \quad (t \ge 2 \text{ のとき}), \tag{13}$$

$$\|\mathbf{z}_{t+1} - \mathbf{z}_t\|_2 \le \left\|\alpha\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\mathbf{g}_t\right\|_2 + \frac{\gamma}{1-\gamma}\|\mathbf{x}_{t-1} - \mathbf{x}_t\|_2, \tag{14}$$

$$\|\nabla f(\mathbf{z}_t) - \nabla f(\mathbf{x}_t)\|_2 \le L\left(\frac{\gamma}{1-\gamma}\right)\cdot\|\mathbf{x}_t - \mathbf{x}_{t-1}\|_2. \tag{15}$$

定理 4 の証明.

仮定 5 より,

$$\begin{aligned} f(\mathbf{z}_{t+1}) &\le f(\mathbf{z}_t) + \nabla f(\mathbf{z}_t)^\top(\mathbf{z}_{t+1} - \mathbf{z}_t) + \frac{L}{2}\|\mathbf{z}_{t+1} - \mathbf{z}_t\|_2^2 \\ &= f(\mathbf{z}_t) + \underbrace{\nabla f(\mathbf{x}_t)^\top(\mathbf{z}_{t+1} - \mathbf{z}_t)}_{I_1} + \underbrace{(\nabla f(\mathbf{z}_t) - \nabla f(\mathbf{x}_t))^\top(\mathbf{z}_{t+1} - \mathbf{z}_t)}_{I_2} + \underbrace{\frac{L}{2}\|\mathbf{z}_{t+1} - \mathbf{z}_t\|_2^2}_{I_3} \end{aligned} \tag{16}$$

が成り立つ.

補題 3.(証明は付録 C に記載)

I_1 について, $t=1$ のとき

$$I_1 = -\alpha_1 \nabla f\left(\mathbf{x}_1\right)^{\top} \widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2} \mathbf{g}_1,$$

$t \geq 2$ のとき

$$I_1 \leq -\alpha_{t-1} \nabla f\left(\mathbf{x}_t\right)^{\top} \widehat{\mathbf{S}}_{t-1}^{-1/2} \mathbf{g}_t + \frac{1}{1-\gamma} G_{\infty}^2 \left(\left\| \alpha_{t-1} \widehat{\mathbf{S}}_{t-1}^{-1/2} \right\|_{1,1} - \left\| \alpha_t \widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2} \right\|_{1,1} \right)$$

が成り立つ.

また, I_2, I_3 について

$$I_2 \leq L \left\| \alpha_t \widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2} \mathbf{g}_t \right\|_2^2 + 2L \left(\frac{\gamma}{1-\gamma} \right)^2 \left\| \mathbf{x}_t - \mathbf{x}_{t-1} \right\|_2^2,$$

$$I_3 \leq L \left\| \alpha_t \widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2} \mathbf{g}_t \right\|_2^2 + 2L \left(\frac{\gamma}{1-\gamma} \right)^2 \left\| \mathbf{x}_{t-1} - \mathbf{x}_t \right\|_2^2$$

が成り立つ.

定理 4 の証明続き.

式 (16) において $t=1$ とすると, 補題 3 により

$$\begin{aligned}
&\mathbb{E}\left[f\left(\mathbf{z}_2\right) - f\left(\mathbf{z}_1\right)\right] \\
&\leq \mathbb{E}\left[-\alpha_1 \nabla f\left(\mathbf{x}_1\right)^{\top} \widehat{\mathbf{S}}_1^{-1/2} \mathbf{g}_1 + 2L \left\| \alpha_1 \widehat{\mathbf{S}}_1^{-1/2} \mathbf{g}_1 \right\|_2^2 + 4L \left(\frac{\gamma}{1-\gamma} \right)^2 \left\| \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0 \right\|_2^2 \right] \\
&= \mathbb{E}\left[-\alpha_1 \nabla f\left(\mathbf{x}_1\right)^{\top} \widehat{\mathbf{S}}_1^{-1/2} \mathbf{g}_1 + 2L \left\| \alpha_1 \widehat{\mathbf{S}}_1^{-1/2} \mathbf{g}_1 \right\|_2^2 \right] \qquad (17) \\
&\leq \mathbb{E}\left[d\alpha_1 G_{\infty} + 2L \left\| \alpha_1 \widehat{\mathbf{S}}_1^{-1/2} \mathbf{g}_1 \right\|_2^2 \right] \qquad (18)
\end{aligned}$$

が成り立つ. なお, 式 (17) の等式変形は $\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}_1$ より成り立つ. また, 式 (18) の不等式変形では, ヘルダー指数 $(p, q) = (1, \infty)$ としたヘルダーの不等式とノルムの性質から

$$-\nabla f\left(\mathbf{x}_1\right)^{\top} \widehat{\mathbf{S}}_1^{-1/2} \mathbf{g}_1 \leq d \cdot \left\| \nabla f\left(\mathbf{x}_1\right) \right\|_{\infty} \cdot \left\| \widehat{\mathbf{S}}_1^{-1/2} \mathbf{g}_1 \right\|_{\infty} \leq dG_{\infty}$$

となることを用いた.

$t \geq 2$ のとき, 補題 3 を使うと式 (16) から

$$\begin{aligned}
&\mathbb{E}\left[f\left(\mathbf{z}_{t+1}\right)+\frac{G_{\infty}^{2}\left\|\alpha_{t}\widehat{\mathbf{S}}_{t}^{-1/2}\right\|_{1,1}}{1-\gamma}-\left(f\left(\mathbf{z}_{t}\right)+\frac{G_{\infty}^{2}\left\|\alpha_{t-1}\widehat{\mathbf{S}}_{t-1}^{-1/2}\right\|_{1,1}}{1-\gamma}\right)\right] \\
&\leq \mathbb{E}\left[-\alpha_{t-1}\nabla f\left(\mathbf{x}_{t}\right)^{\top}\widehat{\mathbf{S}}_{t-1}^{-1/2}\mathbf{g}_{t}+2L\left\|\alpha_{t}\widehat{\mathbf{S}}_{t}^{-1/2}\mathbf{g}_{t}\right\|_{2}^{2}+4L\left(\frac{\gamma}{1-\gamma}\right)^{2}\left\|\mathbf{x}_{t}-\mathbf{x}_{t-1}\right\|_{2}^{2}\right] \\
&= \mathbb{E}\left[-\alpha_{t-1}\nabla f\left(\mathbf{x}_{t}\right)^{\top}\widehat{\mathbf{S}}_{t-1}^{-1/2}\nabla f\left(\mathbf{x}_{t}\right)+2L\left\|\alpha_{t}\widehat{\mathbf{S}}_{t}^{-1/2}\mathbf{g}_{t}\right\|_{2}^{2}+4L\left(\frac{\gamma}{1-\gamma}\right)^{2}\left\|\alpha_{t-1}\widehat{\mathbf{S}}_{t-1}^{-1/2}\mathbf{m}_{t-1}\right\|_{2}^{2}\right] \quad (19) \\
&\leq \mathbb{E}\left[-\alpha_{t-1}\left\|\nabla f\left(\mathbf{x}_{t}\right)\right\|_{2}^{2}\left(G_{\infty}+\epsilon\right)^{-1}+2L\left\|\alpha_{t}\widehat{\mathbf{S}}_{t}^{-1/2}\mathbf{g}_{t}\right\|_{2}^{2}+4L\left(\frac{\gamma}{1-\gamma}\right)^{2}\left\|\alpha_{t-1}\widehat{\mathbf{S}}_{t-1}^{-1/2}\mathbf{m}_{t-1}\right\|_{2}^{2}\right] \quad (20)
\end{aligned}$$

が導かれる. ここで, 式 (19) の等式変形では $\mathbb{E}\left[\mathbf{g}_{t}\right]=\nabla f\left(\mathbf{x}_{t}\right)$ となることを用いた. また, 式 (20) の不等式変形は補題 1 より, 成り立つ. よって, 式 (20) の第 1 項を左辺に移項し整理すると

$$\begin{aligned}
&\left(G_{\infty}+\epsilon\right)^{-1}\alpha_{t-1}\mathbb{E}\left[\left\|\nabla f\left(\mathbf{x}_{t}\right)\right\|_{2}^{2}\right] \\
&\leq \mathbb{E}\left[-f\left(\mathbf{z}_{t+1}\right)-\frac{G_{\infty}^{2}\left\|\alpha_{t}\widehat{\mathbf{S}}_{t}^{-1/2}\right\|_{1,1}}{1-\gamma}+\left(f\left(\mathbf{z}_{t}\right)+\frac{G_{\infty}^{2}\left\|\alpha_{t-1}\widehat{\mathbf{S}}_{t-1}^{-1/2}\right\|_{1,1}}{1-\gamma}\right)\right] \\
&+\mathbb{E}\left[2L\left\|\alpha_{t}\widehat{\mathbf{S}}_{t}^{-1/2}\mathbf{g}_{t}\right\|_{2}^{2}+4L\left(\frac{\gamma}{1-\gamma}\right)^{2}\left\|\alpha_{t-1}\widehat{\mathbf{S}}_{t-1}^{-1/2}\mathbf{m}_{t-1}\right\|_{2}^{2}\right]
\end{aligned}$$

と変形できる. $t=2$ から $t=T$ までにわたり上の不等式の両辺の和をとると,

$$\begin{aligned}
&\left(G_{\infty}+\epsilon\right)^{-1}\sum_{t=2}^{T}\alpha_{t-1}\mathbb{E}\left\|\nabla f\left(\mathbf{x}_{t}\right)\right\|_{2}^{2} \\
&\leq \mathbb{E}\left[f\left(\mathbf{z}_{1}\right)+\frac{G_{\infty}^{2}\left\|\alpha_{1}\widehat{\mathbf{S}}_{1}^{-1/2}\right\|_{1,1}}{1-\gamma}+d\alpha_{1}G_{\infty}-\left(f\left(\mathbf{z}_{T+1}\right)+\frac{G_{\infty}^{2}\left\|\alpha_{T}\widehat{\mathbf{S}}_{T}^{-1/2}\right\|_{1}}{1-\gamma}\right)\right] \\
&+2L\sum_{t=1}^{T}\mathbb{E}\left\|\alpha_{t}\widehat{\mathbf{S}}_{t}^{-1/2}\mathbf{g}_{t}\right\|_{2}^{2}+4L\left(\frac{\gamma}{1-\gamma}\right)^{2}\sum_{t=2}^{T}\mathbb{E}\left[\left\|\alpha_{t-1}\widehat{\mathbf{S}}_{t-1}^{-1/2}\mathbf{m}_{t-1}\right\|_{2}^{2}\right] \\
&\leq \mathbb{E}\left[\Delta f+\frac{G_{\infty}^{2}\alpha_{1}\epsilon^{-1/2}d}{1-\gamma}+d\alpha_{1}G_{\infty}\right]+2L\sum_{t=1}^{T}\mathbb{E}\left\|\alpha_{t}\widehat{\mathbf{S}}_{t}^{-1/2}\mathbf{g}_{t}\right\|_{2}^{2} \\
&+4L\left(\frac{\gamma}{1-\gamma}\right)^{2}\sum_{t=1}^{T}\mathbb{E}\left[\left\|\alpha_{t}\widehat{\mathbf{S}}_{t}^{-1/2}\mathbf{m}_{t}\right\|_{2}^{2}\right] \quad (21)
\end{aligned}$$

となる. なお $\Delta f=f\left(\mathbf{x}_{1}\right)-\inf_{\mathbf{x}}f(\mathbf{x})$ とした.

ここで, $\alpha_t^2 \left\|\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\mathbf{m}_t\right\|_2^2$, $\alpha_t^2 \left\|\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\mathbf{g}_t\right\|_2^2$ について考える.

式 (7) より, $\mathbf{s}_t + \mathbf{m}_t \odot \mathbf{m}_t \leq G_\infty^2$ となり, また $\epsilon \ll \widehat{\mathbf{s}}_t$ より

$$\frac{\sqrt{\mathbf{s}_t + \mathbf{m}_t \odot \mathbf{m}_t}}{\sqrt{\widehat{\mathbf{s}}_t}} \leq \frac{G_\infty}{\sqrt{\epsilon}} \Leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{\widehat{\mathbf{s}}_t}} \leq \frac{G_\infty}{\sqrt{\epsilon}} \frac{1}{\sqrt{\mathbf{s}_t + \mathbf{m}_t \odot \mathbf{m}_t}} \tag{22}$$

という関係が成り立つ. よって

$$\begin{aligned}
\alpha_t^2 \left\|\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\mathbf{m}_t\right\|_2^2 &= \alpha_t^2 \sum_{i=1}^{d} \frac{m_{t,i}^2}{\widehat{s}_{t,i}^{1/2}} \cdot \frac{\widehat{s}_{t,i}^{1/2}}{\widehat{s}_{t,i} + \epsilon} \\
&\leq \alpha_t^2 \sum_{i=1}^{d} \frac{m_{t,i}^2}{\widehat{s}_{t,i}^{1/2}} \cdot \frac{\widehat{s}_{t,i}^{1/2}}{2\widehat{s}_{t,i}^{1/2}\epsilon^{1/2}} \qquad (23) \\
&\leq \frac{\alpha_t^2}{2\epsilon^{1/2}} \sum_{i=1}^{d} \frac{m_{t,i}^2}{\sqrt{\widehat{s}_{t,i}}} \\
&\leq \frac{\alpha_t^2}{2\epsilon^{1/2}} \sum_{i=1}^{d} \frac{G_\infty}{\sqrt{\epsilon}} \frac{m_{t,i}^2}{\sqrt{s_{t,i} + m_{t,i}^2}} \qquad (24) \\
&= \frac{\alpha_t^2 G_\infty}{2\epsilon} \sum_{i=1}^{d} \frac{\left(\sum_{j=1}^{t} (1-\gamma)\gamma^{t-j} g_{j,i}\right)^2}{\left(\sum_{j=1}^{t} (1-\gamma)\gamma^{t-j} g_{j,i}^2\right)^{1/2}} \\
&\leq \frac{\alpha_t^2 (1-\gamma)^{3/2} G_\infty}{2\epsilon} \sum_{i=1}^{d} \frac{\left(\sum_{j=1}^{t} \gamma^{t-j}\right)\left(\sum_{j=1}^{t} \gamma^{t-j} |g_{j,i}|^2\right)}{\left(\sum_{j=1}^{t} \gamma^{t-j} g_{j,i}^2\right)^{1/2}} \qquad (25) \\
&\leq \frac{\alpha_t^2 \sqrt{1-\gamma} G_\infty}{2\epsilon} \sum_{i=1}^{d} \frac{\sum_{j=1}^{t} \gamma^{t-j} |g_{j,i}|^2}{\left(\sum_{j=1}^{t} \gamma^{t-j} g_{j,i}^2\right)^{1/2}} \qquad (26)
\end{aligned}$$

と整理できる. ここで, 式 (23) の不等号は, 相加相乗平均の関係より成り立ち, 式 (24) の不等号は, 式 (22) より成り立つ. また, 式 (25) の不等号は, コーシー・シュワルツの不等式より成り立ち, 式 (26) の不等号は, $\sum_{j=1}^{t} \gamma^{t-j} \leq (1-\gamma)^{-1}$ となることを用いた. コーシー・シュワルツの不等式より

$$\sum_{i=1}^{d} \frac{\sum_{j=1}^{t} \gamma^{t-j} |g_{j,i}|^2}{\left(\sum_{j=1}^{t} \gamma^{t-j} g_{j,i}^2\right)^{1/2}} \leq \sum_{i=1}^{d} \sum_{j=1}^{t} \frac{\gamma^{t-j} |g_{j,i}|^2}{\left(\gamma^{t-j} g_{j,i}^2\right)^{1/2}} = \sum_{i=1}^{d} \sum_{j=1}^{t} \gamma^{\frac{1}{2}(t-j)} |g_{j,i}|$$

が成り立つ. よって

$$\alpha_t^2 \left\|\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\mathbf{m}_t\right\|_2^2 \leq \frac{\alpha_t^2 \sqrt{1-\gamma} G_\infty}{2\epsilon} \sum_{i=1}^{d} \sum_{j=1}^{t} \sqrt{\gamma}^{t-j} |g_{j,i}|$$

と変形できる. $t=1$ から $t=T$ までにわたり上の不等式の両辺の和をとると,

$$\begin{aligned}\sum_{t=1}^{T}\alpha_t^2\left\|\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\mathbf{m}_t\right\|_2^2 &\leq \frac{\alpha_t^2\sqrt{1-\gamma}G_\infty}{2\epsilon}\sum_{t=1}^{T}\sum_{i=1}^{d}\sum_{j=1}^{t}\sqrt{\gamma}^{t-j}\left|g_{j,i}\right| \\ &= \frac{\alpha_t^2\sqrt{1-\gamma}G_\infty}{2\epsilon}\sum_{i=1}^{d}\sum_{j=1}^{T}\left|g_{j,i}\right|\sum_{t=j}^{T}\sqrt{\gamma}^{t-j} \\ &\leq \frac{\alpha_t^2\sqrt{1-\gamma}G_\infty}{2\epsilon(1-\sqrt{\gamma})}\sum_{i=1}^{d}\sum_{j=1}^{T}\left|g_{j,i}\right| \qquad (27)\end{aligned}$$

となる. ここで, 式 (27) の不等号は, $\sum_{t=j}^{T}\sqrt{\gamma}^{t-j}\leq\left(1-\sqrt{\gamma}\right)^{-1}$ となることを用いた.
また, コーシー・シュワルツの不等式より,

$$\sum_{i=1}^{d}\sum_{j=1}^{T}\left|g_{j,i}\right| \leq \sum_{i=1}^{d}\left(\sum_{j=1}^{T}g_{j,i}^2\right)^{1/2}\cdot T^{1/2} = T^{1/2}\sum_{i=1}^{d}\left\|\mathbf{g}_{1:T,i}\right\|_2 \qquad (28)$$

が成り立つから, 以上より

$$\sum_{t=1}^{T}\alpha_t^2\left\|\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\mathbf{m}_t\right\|_2^2 \leq \frac{T^{1/2}\alpha_t^2\sqrt{1-\gamma}G_\infty}{2\epsilon(1-\sqrt{\gamma})}\sum_{i=1}^{d}\left\|\mathbf{g}_{1:T,i}\right\|_2 \qquad (29)$$

が得られる. 次に $\alpha_t^2\left\|\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\mathbf{g}_t\right\|_2^2$ について考える. $\alpha_t^2\left\|\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\mathbf{m}_t\right\|_2^2$ で行った式 (24) までと同様の式変形を行うと,

$$\begin{aligned}\alpha_t^2\left\|\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\mathbf{g}_t\right\|_2^2 &\leq \frac{\alpha_t^2}{2\epsilon^{1/2}}\sum_{i=1}^{d}\frac{G_\infty}{\sqrt{\epsilon}}\frac{g_{t,i}^2}{\sqrt{s_{t,i}+m_{t,i}^2}} \\ &\leq \frac{\alpha_t^2 G_\infty}{2\epsilon\sqrt{1-\gamma}}\sum_{i=1}^{d}\frac{g_{t,i}^2}{\left(\sum_{j=1}^{t}\gamma^{t-j}g_{j,i}^2\right)^{1/2}}\end{aligned}$$

が得られるから,

$$\begin{aligned}\alpha_t^2\left\|\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\mathbf{g}_t\right\|_2^2 &\leq \frac{\alpha_t^2 G_\infty}{2\epsilon\sqrt{1-\gamma}}\sum_{i=1}^{d}\frac{g_{t,i}^2}{\left(g_{t,i}^2\right)^{1/2}} \\ &= \frac{\alpha_t^2 G_\infty}{2\epsilon\sqrt{1-\gamma}}\sum_{i=1}^{d}g_{t,i}\end{aligned}$$

となり, $t=1$ から $t=T$ までにわたり上の不等式の両辺の和をとると,

$$\sum_{t=1}^{T}\alpha_t^2\left\|\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\mathbf{g}_t\right\|_2^2 \leq \frac{\alpha_t^2 G_\infty}{2\epsilon\sqrt{1-\gamma}}\sum_{i=1}^{d}\sum_{t=1}^{T}g_{t,i} \qquad (30)$$

となる．式 (28) より，

$$\sum_{t=1}^{T}\alpha_t^2\left\|\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\mathbf{g}_t\right\|_2^2\leq\frac{T^{1/2}\alpha_t^2G_\infty}{2\epsilon\sqrt{1-\gamma}}\sum_{i=1}^{d}\|\mathbf{g}_{1:T,i}\|_2 \tag{31}$$

が得られ, 式 (29),(31) を式 (21) に代入すると

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}\|\nabla f(\mathbf{x}_{\mathrm{out}})\|_2^2=&\frac{1}{\sum_{t=2}^{T}\alpha_{t-1}}\sum_{t=2}^{T}\alpha_{t-1}\mathbb{E}\|\nabla f(\mathbf{x}_t)\|_2^2\\
\leq&\frac{G_\infty+\epsilon}{\sum_{t=2}^{T}\alpha_{t-1}}\mathbb{E}\left[\Delta f+\frac{G_\infty^2\alpha_1\epsilon^{-1/2}d}{1-\gamma}+d\alpha_1G_\infty\right]\\
&+\frac{2L(G_\infty+\epsilon)}{\sum_{t=2}^{T}\alpha_{t-1}}\cdot\frac{T^{1/2}\alpha_t^2\sqrt{1-\gamma}G_\infty}{2\epsilon(1-\sqrt{\gamma})}\mathbb{E}\left(\sum_{i=1}^{d}\|\mathbf{g}_{1:T,i}\|_2\right)\\
&+\frac{4L(G_\infty+\epsilon)}{\sum_{t=2}^{T}\alpha_{t-1}}\left(\frac{\gamma}{1-\gamma}\right)^2\frac{T^{1/2}\alpha_t^2G_\infty}{2\epsilon\sqrt{1-\gamma}}\mathbb{E}\left(\sum_{i=1}^{d}\|\mathbf{g}_{1:T,i}\|_2\right)\\
\leq&\frac{1}{T\alpha}2(G_\infty+\epsilon)\Delta f+\frac{2}{T}\left(\frac{G_\infty^2(G_\infty+\epsilon)\epsilon^{-1/2}d}{1-\gamma}+dG_\infty(G_\infty+\epsilon)\right)\\
&+\frac{2LG_\infty(G_\infty+\epsilon)\alpha(1-\gamma)^{1/2}}{T^{1/2}\epsilon(1-\sqrt{\gamma})}\mathbb{E}\left(\sum_{i=1}^{d}\|\mathbf{g}_{1:T,i}\|_2\right)\left(1+2(1-\sqrt{\gamma})\frac{\gamma^2}{(1-\gamma)^3}\right)
\end{aligned}\tag{32}$$

となる．ここで, 式 (32) の不等式変形について $\alpha_t=\alpha$ より, $\sum_{t=2}^{T}\alpha_{t-1}\geq\frac{T\alpha}{2}$ となることを用いた．

よって, $\|\mathbf{g}_{1:T,i}\|_2\leq G_\infty T^s$ より,

$$\mathbb{E}\|\nabla f(\mathbf{x}_{\mathrm{out}})\|_2^2\leq\frac{M_1}{T\alpha}+\frac{M_2d}{T}+\frac{\alpha M_3d}{T^{1/2-s}},$$

$$M_1=2(G_\infty+\epsilon)\Delta f,\quad M_2=2G_\infty(G_\infty+\epsilon)(G_\infty\epsilon^{-1/2}+1),$$

$$M_3=\frac{2LG_\infty^2(G_\infty+\epsilon)(1-\gamma)^{1/2}}{\epsilon(1-\sqrt{\gamma})}\left(1+2(1-\sqrt{\gamma})\frac{\gamma^2}{(1-\gamma)^3}\right)$$

が得られ, 定理 4 は示された．

定理 3 と定理 4 の結果を比較して, 収束の違いについて考察をする．定理 3, 定理 4 共に勾配の 2 乗ノルムの累積和に対する上界は T に関して同じであるから, 本節で議論している RMSProp と SDProp は凸な目的関数のときと同様に収束率という観点では違いはないと考えられる．

次に両者の上界における M_1,M_2,M_3 の係数を比較する．M_1,M_2 は全く同じであるが , M_3 に関しては G_∞ のべき指数が定理 3 では 2 となっているのに対して, 定理 4 では 3 となっている．SDProp の上界は RMSProp とは異なり G_∞ の影響をさらに強く受けるため, 勾配が大きくなりやすい環境においては, そうでない環境と比べて収束性能が悪くなるのではないかと考えられる．

5 結論

本研究では目的関数が凸とは限らない場合の SDProp の収束解析を通じて RMSProp と SDProp の収束性能の比較を行った. その結果, SDProp は RMSProp とは異なり, 勾配の大きさによって収束性能が左右される可能性があると分かった. SDProp は勾配の分散によって適応的に学習率を調整する手法であるため, この性質から考えても SDProp は勾配の大きさの変化に対しては適応できていないと考えられ, このことを理論的に確認した.

謝辞

本研究に取り組むにあたって助言をいただいた田中利幸教授と小渕智之准教授に深く感謝する.

参考文献

[1] T. Tieleman and G. Hinton, "Lecture 6.5—RmsProp: Divide the gradient by a running average of its recent magnitude," *COURSERA: Neural Networks for Machine Learning*, vol. 4, no. 2, pp. 26–31, 2012.

[2] Diederik Kingma and Jimmy Ba, "Adam: A method for stochastic optimization," *International Conference on Learning Representations,* 2014.

[3] Y. Ida, Y. Fujiwara and S. Iwamura, "Adaptive Learning Rate via Covariance Matrix Based Preconditioning for Deep Neural Networks," *Proceedings of the 26th International Joint Conference on Artificial Intelligence,* pp. 1923–1929, 2017.

[4] M. C. Mukkamala and M. Hein, "Variants of RMSProp and Adagrad with Logarithmic Regret Bounds," *Proceedings of the 34th International Conference on Machine Learning,* pp. 2545–2553, 2017.

[5] A. Alacaoglu, Y. Malitsky, P. Mertikopoulos and V. Cevher, "A New Regret Analysis for Adam-type Algorithms," *Proceedings of the 37th International Conference on Machine Learning*, pp. 202–210, 2020.

[6] X. Chen, S. Liu, R. Sun and M. Hong, "On the Convergence of A Class of Adam-Type Algorithms for Non-Convex Optimization," *arXiv preprint arXiv:1808.02941[cs.LG],* 2018.

[7] D. Zhou, J. Chen, Y. Cao, Y. Tang, Z. Yang and Q. Gu, "On the Convergence of Adaptive Gradient Methods for Nonconvex Optimization," *arXiv preprint arXiv:1808.05671v3 [cs.LG],* 2020; Anonymous, "On the Convergence of Adaptive Gradient Methods for Nonconvex Optimization," Submitted to Transactions on Machine Learning Research, `https://openreview.net/forum?id=Gh0cxhbz3c`, 2023.

[8] Y. Zhou, K. Huang, C. Cheng, X. Wang, A. Hussain, and X. Liu, "FastAdaBelief: Im-

proving Convergence Rate for Belief-based Adaptive Optimizers by Exploiting Strong Convexity," *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems,* vol. 34, no. 9, pp. 6515–6529, 2021.

[9] 庄司 雅文, "勾配の大きさおよび分散に基づいた適応的学習の収束解析," 京都大学工学部情報学科特別研究報告書, 2022.

付録 A　補題 1 の証明

先行研究 [7] に基づいて, 補題 1 の証明を行う. まず, 仮定 4 より

$$\|\nabla f(\mathbf{x})\|_\infty = \left\|\mathbb{E}_\xi \nabla f(\mathbf{x};\xi)\right\|_\infty \leq \mathbb{E}_\xi \|\nabla f(\mathbf{x};\xi)\|_\infty \leq G_\infty$$

が成り立つ.

次に, $\|\mathbf{m}_t\|_\infty \leq G_\infty$ が成り立つことを数学的帰納法により示す. $t=0$ のとき $\|\mathbf{m}_0\|_\infty = 0 \leq G_\infty$ は成り立つ. $t=k$ のとき $\|\mathbf{m}_k\|_\infty \leq G_\infty$ が成り立つと仮定すると, $\mathbf{m}_{k+1}$ について

$$\begin{aligned}\|\mathbf{m}_{k+1}\|_\infty &= \|\gamma \mathbf{m}_k + (1-\gamma)\,\mathbf{g}_{k+1}\|_\infty \\ &\leq \gamma \|\mathbf{m}_k\|_\infty + (1-\gamma)\|\mathbf{g}_{k+1}\|_\infty \\ &\leq \gamma G_\infty + (1-\gamma)\, G_\infty \\ &= G_\infty\end{aligned}$$

が成り立つ. よって 任意の $t \geq 0$ に対して $\|\mathbf{m}_t\|_\infty \leq G_\infty$ は成り立つ.

最後に $\|\widehat{\mathbf{s}}_t\|_\infty \leq G_\infty^2$ が成り立つことを示す.

まず数学的帰納法により, 任意の $t \geq 0$ に対して $\left\|\mathbf{s}_t + \mathbf{m_t}^2\right\|_\infty \leq G_\infty^2$ が成り立つことを示す. $t = 0$ のとき $\|\mathbf{s}_0 + \mathbf{m}_0\|_\infty = \|\widehat{\mathbf{s}}_0 + \mathbf{m}_0\|_\infty = 0 \leq G_\infty^2$ は成り立つ. $t=k$ のとき $\left\|\mathbf{s}_k + \mathbf{m}_k^2\right\|_\infty \leq G_\infty^2$ が成り立つと仮定すると, 式 (7) より

$$\begin{aligned}\left\|\mathbf{s}_{k+1} + \mathbf{m}_{k+1}^2\right\|_\infty &= \left\|\gamma(\mathbf{s}_k + \mathbf{m}_k^2) + (1-\gamma)\mathbf{g}_{k+1}^2\right\|_\infty \\ &\leq \gamma \left\|\mathbf{s}_k + \mathbf{m}_k^2\right\|_\infty + (1-\gamma)\left\|\mathbf{g}_{k+1}^2\right\|_\infty \\ &\leq \gamma G_\infty^2 + (1-\gamma)\, G_\infty^2 \\ &= G_\infty^2\end{aligned}$$

が成り立つ. よって, 任意の $t \geq 0$ に対して $\left\|\mathbf{s}_t + \mathbf{m_t}^2\right\|_\infty \leq G_\infty^2$ が成り立つ.

よって, $\|\mathbf{s}_{t+1}\|_\infty \leq G_\infty^2$ となり, 定義から $\|\widehat{\mathbf{s}}_{t+1}\|_\infty = \max\left\{\|\widehat{\mathbf{s}}_t\|_\infty, \|\mathbf{s}_{t+1}\|_\infty\right\} \leq G_\infty^2$ となる.

したがって $t \geq 0$ において $\|\widehat{\mathbf{s}}_t\|_\infty \leq G_\infty^2$ が成り立つ.

付録 B　補題 2 の証明

先行研究 [7] に基づいて, 補題 2 の証明を行う. まず, $\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}_1$, 式 (10) と $\mathbf{x}_t$ の定義式から

$$\mathbf{z}_2 - \mathbf{z}_1 = -\alpha_1 \widehat{\mathbf{S}}_1^{-1/2} \mathbf{g}_1 \tag{33}$$

が成り立ち, 式 (12) は示せた.
次に式 (11) と $\mathbf{x}_t$, $\mathbf{m}_t$ の定義式から

$$\begin{aligned}\mathbf{z}_{t+1}-\mathbf{z}_t &= \frac{1}{1-\gamma}(\mathbf{x}_{t+1}-\mathbf{x}_t)-\frac{\gamma}{1-\gamma}(\mathbf{x}_t-\mathbf{x}_{t-1}) \\ &= -\frac{\alpha_t}{1-\gamma}\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\mathbf{m}_t+\frac{\gamma}{1-\gamma}\alpha_{t-1}\widehat{\mathbf{S}}_{t-1}^{-1/2}\mathbf{m}_{t-1} \\ &= \frac{\gamma}{1-\gamma}\left(\alpha_{t-1}\widehat{\mathbf{S}}_{t-1}^{-1/2}-\alpha_t\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\right)\mathbf{m}_{t-1}-\alpha_t\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\mathbf{g}_t\end{aligned}$$

が成り立ち, 式 (13) は示せた.
次に式 (13) から

$$\begin{aligned}\mathbf{z}_{t+1}-\mathbf{z}_t &= \frac{\gamma}{1-\gamma}\left(\alpha_{t-1}\widehat{\mathbf{S}}_{t-1}^{-1/2}-\alpha_t\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\right)\mathbf{m}_{t-1}-\alpha_t\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\mathbf{g}_t \\ &= \frac{\gamma}{1-\gamma}\left[\mathbf{I}-\left(\alpha_t\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\right)\left(\alpha_{t-1}\widehat{\mathbf{S}}_{t-1}^{-1/2}\right)^{-1}\right]\alpha_{t-1}\widehat{\mathbf{S}}_{t-1}^{-1/2}\mathbf{m}_{t-1}-\alpha_t\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\mathbf{g}_t \\ &= \frac{\gamma}{1-\gamma}\left[\mathbf{I}-\left(\alpha_t\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\right)\left(\alpha_{t-1}\widehat{\mathbf{S}}_{t-1}^{-1/2}\right)^{-1}\right](\mathbf{x}_{t-1}-\mathbf{x}_t)-\alpha_t\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\mathbf{g}_t\end{aligned}$$

と変形できるから, $\gamma/\left(1-\gamma\right)$ が正であることと三角不等式を用いると

$$\begin{aligned}\|\mathbf{z}_{t+1}-\mathbf{z}_t\|_2 &= \left\|\frac{\gamma}{1-\gamma}\left[\mathbf{I}-\left(\alpha_t\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\right)\left(\alpha_{t-1}\widehat{\mathbf{S}}_{t-1}^{-1/2}\right)^{-1}\right](\mathbf{x}_{t-1}-\mathbf{x}_t)-\alpha_t\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\mathbf{g}_t\right\|_2 \\ &\leq \frac{\gamma}{1-\gamma}\left\|\mathbf{I}-\left(\alpha_t\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\right)\left(\alpha_{t-1}\widehat{\mathbf{S}}_{t-1}^{-1/2}\right)^{-1}\right\|_{\infty,\infty}\cdot\|\mathbf{x}_{t-1}-\mathbf{x}_t\|_2+\left\|\alpha_t\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\mathbf{g}_t\right\|_2\end{aligned}$$

のように書ける. $\alpha_t\widehat{\mathbf{s}}_{t,j}^{-1/2}\leq\alpha_{t-1}\widehat{\mathbf{s}}_{t-1,j}^{-1/2}$ より, $\left\|\mathbf{I}-\left(\alpha_t\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\right)\left(\alpha_{t-1}\widehat{\mathbf{S}}_{t-1}^{-1/2}\right)^{-1}\right\|_{\infty,\infty}\leq 1$ が成り立つから,

$$\|\mathbf{z}_{t+1}-\mathbf{z}_t\|_2\leq\left\|\alpha_t\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\mathbf{g}_t\right\|_2+\frac{\gamma}{1-\gamma}\|\mathbf{x}_{t-1}-\mathbf{x}_t\|_2$$

となり,　式 (14) は示せた.
$\|\nabla f(\mathbf{z}_t)-\nabla f(\mathbf{x}_t)\|_2$ について, f の勾配リプシッツ性の仮定より,

$$\begin{aligned}\|\nabla f(\mathbf{z}_t)-\nabla f(\mathbf{x}_t)\|_2 &\leq L\|\mathbf{z}_t-\mathbf{x}_t\|_2 \\ &\leq L\left\|\frac{\gamma}{1-\gamma}(\mathbf{x}_t-\mathbf{x}_{t-1})\right\|_2 \\ &\leq L\left(\frac{\gamma}{1-\gamma}\right)\cdot\|\mathbf{x}_t-\mathbf{x}_{t-1}\|_2\end{aligned}$$

となり, 式 (15) は示せた. ここで, 最後の不等号は ノルムの性質と $\gamma/\left(1-\gamma\right)$ が正であることから成り立つ.

付録 C　補題 3 の証明

先行研究 [7] に基づいて, 補題 3 の証明を行う.

- I_1 について, $t=1$ のとき, 式 (12) より

$$\nabla f\left(\mathbf{x}_1\right)^\top\left(\mathbf{z}_2-\mathbf{z}_1\right)=-\alpha_1\nabla f\left(\mathbf{x}_1\right)^\top\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\mathbf{g}_1$$

が成り立つ.
$t\geq 2$ のとき, 式 (13) より

$$\begin{aligned}
&\nabla f\left(\mathbf{x}_t\right)^\top\left(\mathbf{z}_{t+1}-\mathbf{z}_t\right)\\
&=\nabla f\left(\mathbf{x}_t\right)^\top\left[\frac{\gamma}{1-\gamma}\left(\alpha_{t-1}\widehat{\mathbf{S}}_{t-1}^{-1/2}-\alpha_t\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\right)\mathbf{m}_{t-1}-\alpha_t\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\mathbf{g}_t\right]\\
&=\frac{\gamma}{1-\gamma}\nabla f\left(\mathbf{x}_t\right)^\top\left(\alpha_{t-1}\widehat{\mathbf{S}}_{t-1}^{-1/2}-\alpha_t\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\right)\mathbf{m}_{t-1}-\alpha_t\nabla f\left(\mathbf{x}_t\right)^\top\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\mathbf{g}_t \qquad (34)
\end{aligned}$$

と変形できる. 式 (34) の $\nabla f\left(\mathbf{x}_t\right)^\top\left(\alpha_{t-1}\widehat{\mathbf{S}}_{t-1}^{-1/2}-\alpha_t\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\right)\mathbf{m}_{t-1}$ について

$$\begin{aligned}
\nabla f\left(\mathbf{x}_t\right)^\top\left(\alpha_{t-1}\widehat{\mathbf{S}}_{t-1}^{-1/2}-\alpha_t\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\right)\mathbf{m}_{t-1}&\leq\left\|\nabla f\left(\mathbf{x}_t\right)\right\|_\infty\cdot\left\|\alpha_{t-1}\widehat{\mathbf{S}}_{t-1}^{-1/2}-\alpha_t\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\right\|_{1,1}\cdot\left\|\mathbf{m}_{t-1}\right\|_\infty \qquad (35)\\
&\leq G_\infty^2\left[\left\|\alpha_{t-1}\widehat{\mathbf{S}}_{t-1}^{-1/2}\right\|_{1,1}-\left\|\alpha_t\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\right\|_{1,1}\right] \qquad (36)
\end{aligned}$$

ここで, 式 (35) の不等号では, ある正の対角行列 $\mathbf{A}$ に関して, $\mathbf{x}^\top\mathbf{A}\mathbf{y}\leq\|\mathbf{x}\|_\infty\cdot\|\mathbf{A}\|_{1,1}\cdot\|\mathbf{y}\|_\infty$ となることを用いた. また, 式 (36) の不等号について, $\alpha_{t-1}\widehat{\mathbf{S}}_{t-1}^{-1/2}\succeq\alpha_t\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\succeq 0$ という性質を用いた. 次に, 式 (34) の $-\alpha_t\nabla f\left(\mathbf{x}_t\right)^\top\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\mathbf{g}_t$ について

$$\begin{aligned}
&-\alpha_t\nabla f\left(\mathbf{x}_t\right)^\top\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\mathbf{g}_t\\
&=-\alpha_{t-1}\nabla f\left(\mathbf{x}_t\right)^\top\widehat{\mathbf{S}}_{t-1}^{-1/2}\mathbf{g}_t-\nabla f\left(\mathbf{x}_t\right)^\top\left(\alpha_t\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}-\alpha_{t-1}\widehat{\mathbf{S}}_{t-1}^{-1/2}\right)\mathbf{g}_t\\
&\leq-\alpha_{t-1}\nabla f\left(\mathbf{x}_t\right)^\top\widehat{\mathbf{S}}_{t-1}^{-1/2}\mathbf{g}_t+\left\|\nabla f\left(\mathbf{x}_t\right)\right\|_\infty\cdot\left\|\alpha_t\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}-\alpha_{t-1}\widehat{\mathbf{S}}_{t-1}^{-1/2}\right\|_{1,1}\cdot\left\|\mathbf{g}_t\right\|_\infty \qquad (37)\\
&\leq-\alpha_{t-1}\nabla f\left(\mathbf{x}_t\right)^\top\widehat{\mathbf{S}}_{t-1}^{-1/2}\mathbf{g}_t+G_\infty^2\left(\left\|\alpha_{t-1}\widehat{\mathbf{S}}_{t-1}^{-1/2}\right\|_{1,1}-\left\|\alpha_t\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\right\|_{1,1}\right) \qquad (38)
\end{aligned}$$

とかける. ここで, 式 (37) の不等号では, ある正の対角行列 $\mathbf{A}$ に関して, $\mathbf{x}^\top\mathbf{A}\mathbf{y}\leq\|\mathbf{x}\|_\infty\cdot\|\mathbf{A}\|_{1,1}\cdot\|\mathbf{y}\|_\infty$ となることを用いた. また, 式 (38) の不等号について, 補題 1 を用いた.
以上より, 式 (34) に式 (36), (38) を代入すると

$$\nabla f\left(\mathbf{x}_t\right)^\top\left(\mathbf{z}_{t+1}-\mathbf{z}_t\right)\leq-\nabla f\left(\mathbf{x}_t\right)^\top\alpha_{t-1}\widehat{\mathbf{S}}_{t-1}^{-1/2}\mathbf{g}_t+\frac{1}{1-\gamma}G_\infty^2\left(\left\|\alpha_{t-1}\widehat{\mathbf{S}}_{t-1}^{-1/2}\right\|_{1,1}-\left\|\alpha_t\widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2}\right\|_{1,1}\right)$$

が得られる.

- I_2 について

$$
\begin{aligned}
&\left(\nabla f\left(\mathbf{z}_t\right)-\nabla f\left(\mathbf{x}_t\right)\right)^{\top}\left(\mathbf{z}_{t+1}-\mathbf{z}_t\right) \\
&\leq\left\|\nabla f\left(\mathbf{z}_t\right)-\nabla f\left(\mathbf{x}_t\right)\right\|_2 \cdot\left\|\mathbf{z}_{t+1}-\mathbf{z}_t\right\|_2 \\
&\leq\left(\left\|\alpha_t \widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2} \mathbf{g}_t\right\|_2+\frac{\gamma}{1-\gamma}\left\|\mathbf{x}_{t-1}-\mathbf{x}_t\right\|_2\right) \cdot \frac{\gamma}{1-\gamma} \cdot L\left\|\mathbf{x}_t-\mathbf{x}_{t-1}\right\|_2 \qquad (39)\\
&=L \frac{\gamma}{1-\gamma}\left\|\alpha_t \widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2} \mathbf{g}_t\right\|_2 \cdot\left\|\mathbf{x}_t-\mathbf{x}_{t-1}\right\|_2+L\left(\frac{\gamma}{1-\gamma}\right)^2\left\|\mathbf{x}_t-\mathbf{x}_{t-1}\right\|_2^2 \\
&\leq L\left\|\alpha_t \widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2} \mathbf{g}_t\right\|_2^2+2 L\left(\frac{\gamma}{1-\gamma}\right)^2\left\|\mathbf{x}_t-\mathbf{x}_{t-1}\right\|_2^2 \qquad (40)
\end{aligned}
$$

が得られる．ここで, 式 (39) の変形について補題 2 の式 (14),(15) を用いた．また, 式 (40) の変形についてヤングの不等式を用いた.

- I_3 について, 補題 2 の式 (14) より

$$
\begin{aligned}
\frac{L}{2}\left\|\mathbf{z}_{t+1}-\mathbf{z}_t\right\|_2^2 &\leq \frac{L}{2}\left[\left\|\alpha_t \widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2} \mathbf{g}_t\right\|_2+\frac{\gamma}{1-\gamma}\left\|\mathbf{x}_{t-1}-\mathbf{x}_t\right\|_2\right]^2 \\
&\leq L\left\|\alpha_t \widehat{\mathbf{S}}_t^{-1/2} \mathbf{g}_t\right\|_2^2+2 L\left(\frac{\gamma}{1-\gamma}\right)^2\left\|\mathbf{x}_{t-1}-\mathbf{x}_t\right\|_2^2
\end{aligned}
$$

が得られる.