

# 目次

■ シリーズの刊行にあたって	iii
■ 改訂第2版によせて	iv
■ まえがき	vii
<b>第1章 はじめに</b>	1
1.1 研究の歴史	1
1.1.1 多層ニューラルネットワークへの期待と失望	1
1.1.2 ニューラルネットワーク復活のきっかけ	3
1.1.3 ルネッサンス	4
1.1.4 爆発的な発展	4
1.1.5 課題と今後	7
1.2 本書の構成	9
<b>第2章 ネットワークの基本構造</b>	11
2.1 ユニットと活性化関数	11
2.1.1 ユニット	11
2.1.2 活性化関数	13
2.2 順伝播型ネットワーク	15
2.3 学習の概要	17
2.4 問題の定式化：出力層と損失関数の設計	18
2.4.1 回帰	18
2.4.2 2値分類	19
2.4.3 多クラス分類	21
2.4.4 マルチラベル分類	23
2.4.5 順序回帰	24
2.4.6 信号の陰的表現	26
<b>第3章 確率的勾配降下法</b>	31
3.1 確率的勾配降下法 (SGD)	31
3.1.1 勾配降下法の基礎	31
3.1.2 バッチ学習からSGDへ	32
3.1.3 ミニバッチの利用	33
3.1.4 モメンタム	35
3.2 汎化性能と過剰適合	36
3.2.1 訓練誤差と汎化誤差	36

- 3.2.2 バイアス・分散トレードオフ ..... 38
- 3.2.3 汎化と記憶 ..... 39
- 3.2.4 平坦な極小点 ..... 40
- 3.3 正則化 ..... 40
  - 3.3.1 重みの減衰 ..... 41
  - 3.3.2 ドロップアウト ..... 42
  - 3.3.3 陰的正則化 ..... 44
- 3.4 学習率の選定と制御 ..... 44
- 3.5 SGD の改良 ..... 45
  - 3.5.1 更新幅の適応的調整 ..... 46
  - 3.5.2 Adam とその拡張 ..... 47
  - 3.5.3 その他の話題 ..... 48
- 3.6 層出力の正規化 ..... 49
  - 3.6.1 概要 ..... 49
  - 3.6.2 入力の正規化 ..... 49
  - 3.6.3 バッチ正規化 ..... 51
  - 3.6.4 レイヤー正規化 ..... 52
  - 3.6.5 バッチ正規化の欠点 ..... 52
  - 3.6.6 重みの正規化と正則化 ..... 53
- 3.7 重みの初期化 ..... 53
- 3.8 その他 ..... 55

第 4 章 誤差逆伝播法 ..... 57

- 4.1 勾配計算の煩わしさ ..... 57
- 4.2 誤差逆伝播法 ..... 59
  - 4.2.1 2 層ネットワークでの計算 ..... 59
  - 4.2.2 多層ネットワークへの一般化 ..... 61
  - 4.2.3 出力層でのデルタ ..... 64
  - 4.2.4 順伝播と逆伝播の行列計算 ..... 65
  - 4.2.5 ソフトマックス関数の性質 ..... 68
- 4.3 自動微分 ..... 68
  - 4.3.1 概要 ..... 68
  - 4.3.2 微分可能な演算 ..... 71
- 4.4 勾配消失問題 ..... 72
- 4.5 残差接続 ..... 73

第 5 章 畳み込みニューラルネットワーク ..... 77

- 5.1 単純型細胞と複雑型細胞 ..... 77
- 5.2 畳み込み ..... 80
  - 5.2.1 定義 ..... 80
  - 5.2.2 畳み込みの働き ..... 81
  - 5.2.3 パディング ..... 82

- 5.2.4 ストライド ..... 84
- 5.3 畳み込み層 ..... 84
- 5.4 プーリング層 ..... 86
  - 5.4.1 プーリングの役割 ..... 87
  - 5.4.2 いろいろなプーリング ..... 87
- 5.5 畳み込み層の出力の正規化 ..... 89
  - 5.5.1 バッチ正規化 ..... 89
  - 5.5.2 局所コントラスト正規化 ..... 91
- 5.6 推論のための CNN の構造 ..... 95
  - 5.6.1 基本的な構造 ..... 95
  - 5.6.2 代表的な CNN のデザイン ..... 96
- 5.7 入出力間の幾何学的関係 ..... 99
  - 5.7.1 同変性と不変性 ..... 99
  - 5.7.2 ダウンサンプリングと画像上の受容野 ..... 100
  - 5.7.3 任意サイズの画像の入力 ..... 100
- 5.8 畳み込み層の一般化 ..... 102
  - 5.8.1 畳み込み層としての全結合層 ..... 102
  - 5.8.2 特別な畳み込み ..... 103
  - 5.8.3 多次元の畳み込み ..... 105
  - 5.8.4 幾何学的変換の学習 ..... 106
- 5.9 アップサンプリングと畳み込み ..... 108
  - 5.9.1 サイズの拡大を要する問題 ..... 108
  - 5.9.2 サイズを拡大する方法 ..... 109
  - 5.9.3 その他 ..... 111
- 5.10 物体カテゴリ認識への適用例 ..... 112

第 6 章 系列データのためのネットワーク ..... 125

- 6.1 系列データ ..... 125
- 6.2 リカレントニューラルネットワーク ..... 127
  - 6.2.1 概要 ..... 127
  - 6.2.2 順伝播の計算 ..... 128
  - 6.2.3 問題への適用 ..... 130
- 6.3 ゲート機構 ..... 132
  - 6.3.1 RNN と勾配消失問題 ..... 132
  - 6.3.2 長・短期記憶 (LSTM) ..... 132
  - 6.3.3 その他のゲート付き構造 ..... 136
- 6.4 自己回帰モデル ..... 137
  - 6.4.1 概要 ..... 137
  - 6.4.2 RNN による自己回帰モデル ..... 137
  - 6.4.3 系列データの生成 ..... 139
  - 6.4.4 Seq2Seq ..... 140
- 6.5 1 次元畳み込みネットワーク ..... 140
  - 6.5.1 固定長入力のネットワーク ..... 140
  - 6.5.2 因果的・拡大量み込みの利用 ..... 141

6.5.3	自己回帰への適用	143
6.6	逆伝播の計算	144
<b>第 7 章</b>	<b>集合・グラフのためのネットワークと注意機構</b>	<b>147</b>
7.1	集合データを扱うネットワーク	147
7.2	注意機構	149
7.2.1	基本的な考え方	149
7.2.2	Seq2Seq と注意	150
7.2.3	関連性の計算	152
7.2.4	畳み込み層のための注意機構	153
7.3	トランスフォーマー	153
7.3.1	集合データ上の注意	153
7.3.2	重みの導入とマルチヘッド注意	155
7.3.3	トランスフォーマーの全体構造	156
7.3.4	位置符号化による系列データへの適用	157
7.3.5	系列データへの適用例	158
7.3.6	画像データへの適用	159
7.4	グラフニューラルネットワーク	159
7.4.1	グラフの構造を持つデータ	159
7.4.2	GNN の基本演算	160
7.4.3	代表的な GNN	162
7.4.4	グラフを用いて行う推論	164
<b>第 8 章</b>	<b>推論の信頼性</b>	<b>169</b>
8.1	推論の不確かさ	169
8.1.1	不確かさとは	169
8.1.2	不確かさの種類	170
8.2	不確かさの数理モデル	174
8.2.1	ベイジアンニューラルネットワーク	174
8.2.2	最尤推定との関係	175
8.3	不確かさの予測	176
8.3.1	回帰の場合	176
8.3.2	クラス分類の場合	177
8.3.3	モデルのアンサンブル	179
8.3.4	不確かさの尺度	181
8.3.5	2 つの不確かさの分離	181
8.4	分布外入力の検出	182
8.4.1	概要	182
8.4.2	検出精度の向上	183
8.5	敵対的事例	185
8.5.1	概要	185
8.5.2	敵対的事例の生成	187
8.5.3	転移可能性	188

8.5.4	防御	189
8.6	品質保証の試み	190
<b>第 9 章</b>	<b>説明と可視化</b>	<b>193</b>
9.1	はじめに	193
9.2	入力による出力の微分	195
9.2.1	基本となる考え方	195
9.2.2	手法の拡張	196
9.2.3	議論	197
9.3	入力の遮蔽・挿入	198
9.4	中間層出力の表示	201
9.4.1	クラス活性マッピング (CAM)	201
9.4.2	Grad-CAM	202
9.4.3	LSTM の可視化	203
9.5	寄与度の分解	204
9.5.1	概要	204
9.5.2	LIME	205
9.5.3	SHAP	205
9.5.4	議論	206
9.6	寄与度の逆伝播	206
9.7	可視化手法の評価	208
9.8	影響関数	210
9.9	学習内容の可視化	212
9.9.1	概要	212
9.9.2	ユニットを最も活性化する入力	212
9.9.3	ユニットの出力を最大化する入力	214
<b>第 10 章</b>	<b>いろいろな学習方法</b>	<b>217</b>
10.1	距離計量学習	217
10.1.1	概要	217
10.1.2	サンプルの同一性・非同源性	218
10.1.3	多クラス分類としての学習	220
10.2	事例集合 (マルチインスタンス) 学習	222
10.2.1	概要	222
10.2.2	方法	222
10.3	クラスラベルの誤り	224
10.3.1	概要	224
10.3.2	誤りへの耐性	225
10.3.3	ラベル平滑化	225
10.3.4	クラス間遷移のモデル	226
10.3.5	正しいラベルの推定	227
10.3.6	損失関数による対策	228

10.4	クラス間不均衡	229
10.4.1	サンプリングによる対処	230
10.4.2	損失関数の改良	230
10.4.3	特徴の学習と分類器の学習の分離	231
10.5	継続・追加学習	232
10.5.1	概要	232
10.5.2	破壊的忘却	233
10.5.3	対象とする問題の型	234
10.5.4	方法	235
10.6	知識蒸留	237
10.6.1	概要	237
10.6.2	基本となる方法	238
10.6.3	さまざまな拡張	239
10.7	枝刈り	241
10.7.1	概要	241
10.7.2	手法の分類	242
10.7.3	CNN の構造的枝刈り	242
10.7.4	低ランク近似	244
10.7.5	「宝くじ仮説」	244
10.8	計算の量子化	246
10.8.1	概要	246
10.8.2	推論の量子化	246
10.8.3	低ビットモデルの学習	247
10.8.4	2 値化	248
10.9	ネットワーク構造探索 (NAS)	248
第 11 章	データが少ない場合の学習	253
11.1	はじめに	253
11.2	データ拡張	254
11.2.1	基本的な考え方	254
11.2.2	主に画像に対して有効な方法	255
11.2.3	言語データで有効な方法	256
11.2.4	その他の方法	257
11.2.5	データ拡張の自動探索	257
11.3	転移学習	258
11.3.1	概要	258
11.3.2	特徴抽出器としての利用	259
11.3.3	ファインチューニング	259
11.3.4	ImageNet 事前学習	260
11.3.5	事前学習の有効性	261
11.4	半教師あり学習	262
11.4.1	概要	262
11.4.2	一致性正則化	262
11.4.3	疑似ラベル	263

11.4.4	エントロピー最小化	264
11.5	自己教師学習	265
11.5.1	概要	265
11.5.2	ブレテキストタスク	266
11.5.3	対照表現学習	267
11.6	マルチタスク学習	270
11.7	ドメイン適応・汎化	272
11.7.1	データのドメイン	272
11.7.2	教師なしドメイン適応	273
11.7.3	敵対的学習：分布の位置合わせ	274
11.7.4	疑似ラベルによる方法	275
11.7.5	用語と概念の整理	275
11.8	少数事例学習	277
11.9	能動学習	280
第 12 章	生成モデル	283
12.1	データの生成モデル	283
12.2	自己符号化器	285
12.2.1	概要	285
12.2.2	学習	286
12.2.3	主成分分析との関係	287
12.2.4	スパース自己符号化器	288
12.2.5	データの白色化	290
12.2.6	その他の話題	295
12.3	変分自己符号化器 (VAE)	296
12.3.1	潜在変数の導入	296
12.3.2	潜在変数から出力を得るデコーダ	297
12.3.3	エンコーダの導入	297
12.3.4	導出のまとめ	299
12.3.5	VAE の学習	300
12.3.6	推論時の使い方	301
12.4	敵対的生成ネットワーク (GAN)	302
12.4.1	基本的な GAN	302
12.4.2	学習の困難さ	303
12.4.3	Wasserstein-GAN	304
12.4.4	条件付き GAN	305
12.4.5	pix2pix と CycleGAN	306
12.4.6	GAN のためのデータ拡張	307
12.5	正規化フロー	308
12.5.1	基本となる考え方	308
12.5.2	カップリング層	310
12.5.3	学習と推論	311
12.6	ボルツマンマシン	312
12.6.1	概要	312

12.6.2	ボルツマンマシンの基礎	312
12.6.3	ギブスサンプリング	315
12.6.4	隠れ変数を持つボルツマンマシン	317
12.6.5	制約ボルツマンマシン (RBM)	318
12.6.6	RBM の学習	320
12.6.7	その他のユニット	324
12.6.8	ディープヒリーフネットワーク	326
◇	参考文献	329
◇	索引	361