知の探究

5. AI・機械学習

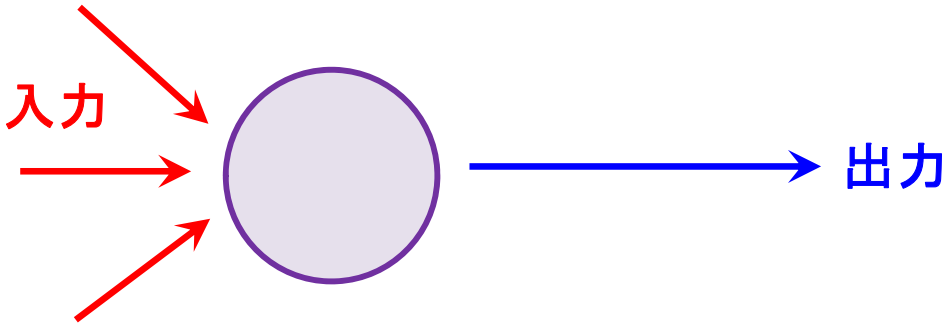
堀田　敬介

神経細胞とニューラルネットワーク

- 神経細胞 neuron

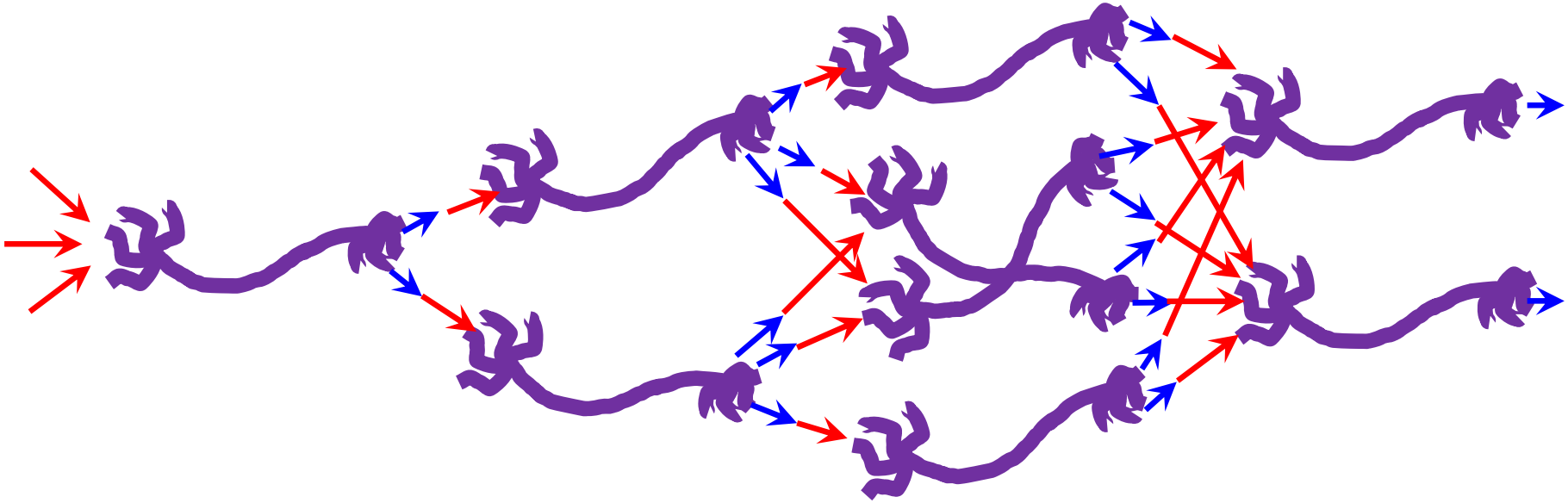
1. 樹状突起に，他の神経細胞とのシナプス synapse が多数ある
2. シナプス部位で情報を受け取る（入力）
3. 細胞体内で活動電位を発生させ電気信号に変換，軸索を通り軸索末端へ
4. 軸索末端が神経伝達物質を放出（次の神経細胞へ出力）

- ニューラルネットワーク neural network
  - 神経細胞をグラフ $G = (V, E)$ でモデル化

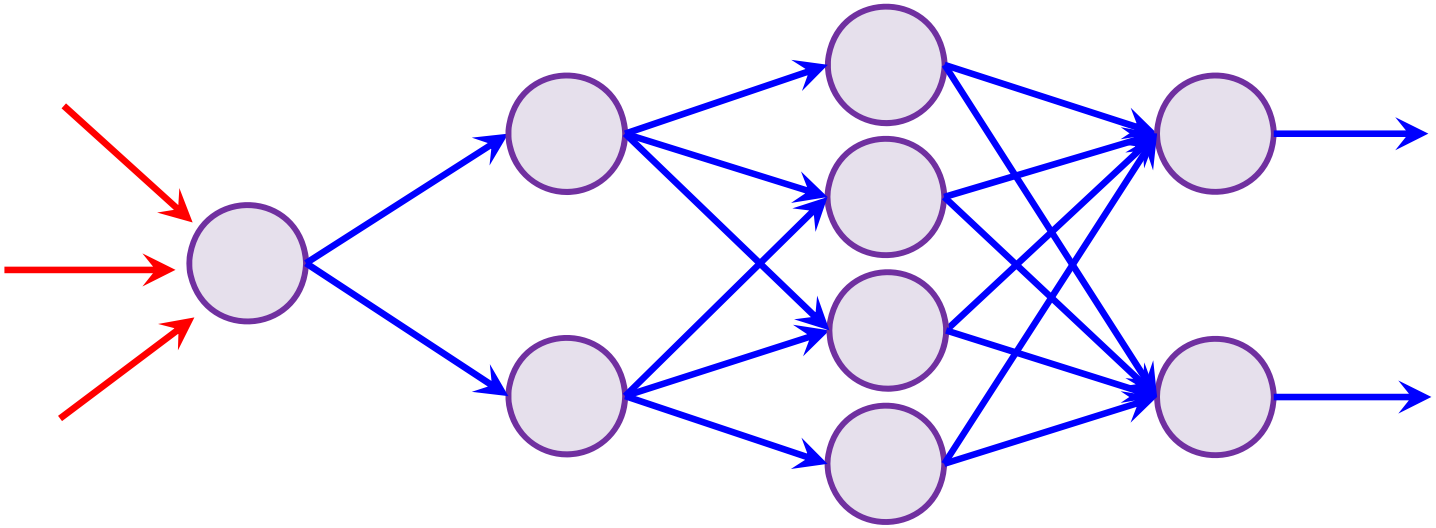


神経細胞とニューラルネットワーク

- 神経細胞 neuron

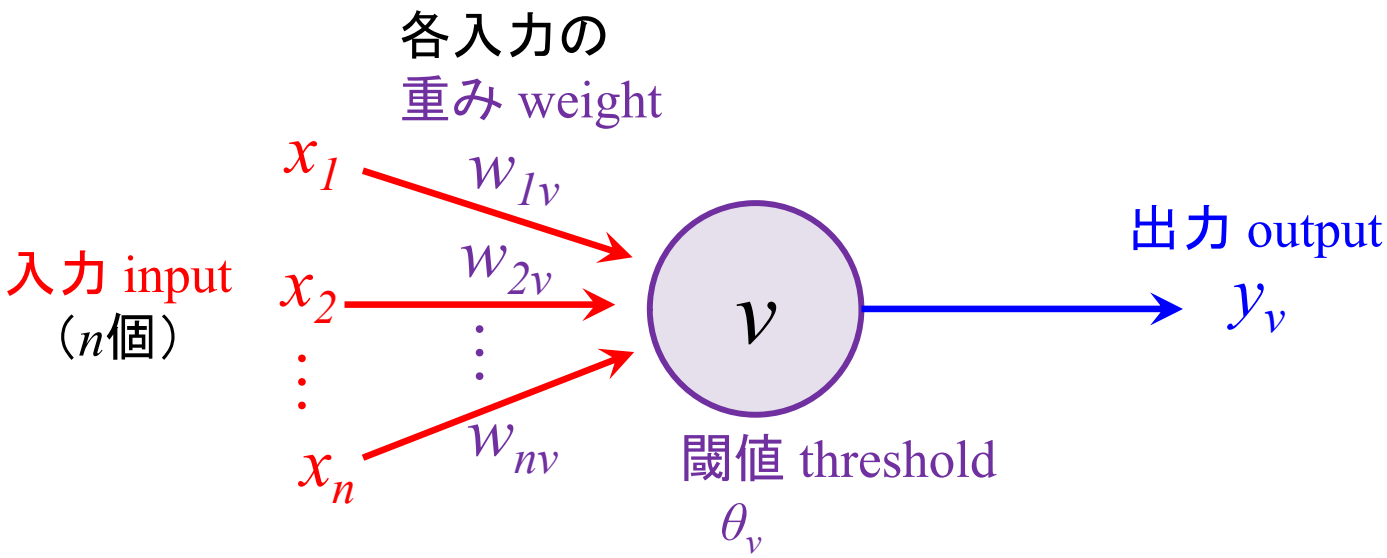


- ニューラルネットワーク neural network



神経細胞とニューラルネットワーク

- 基本ユニットと入力から出力までの伝達（計算）



※出力値は1つだが，次の複数のユニットに伝達される

$$s_v = w_{1v}x_1 + w_{2v}x_2 + \ldots + w_{nv}x_n - \theta_v \qquad y_v = a(s_v)$$
$$= \boldsymbol{w}_v{}^T \boldsymbol{x}$$

※aは活性化関数 activation function

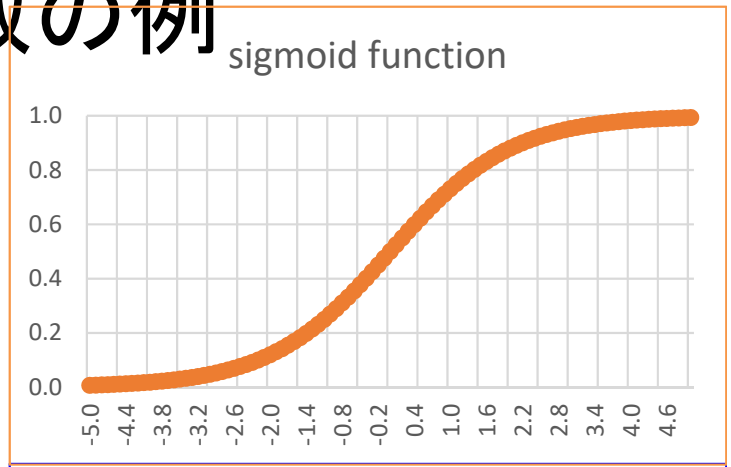
ただし，$\boldsymbol{w}_v = \begin{pmatrix} w_{1v} \\ w_{2v} \\ \vdots \\ w_{nv} \\ \theta_v \end{pmatrix}, \boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \\ -1 \end{pmatrix}$

※重みと閾値 $\boldsymbol{w}_v$ は各ユニットがもつ固有の値

神経細胞とニューラルネットワーク

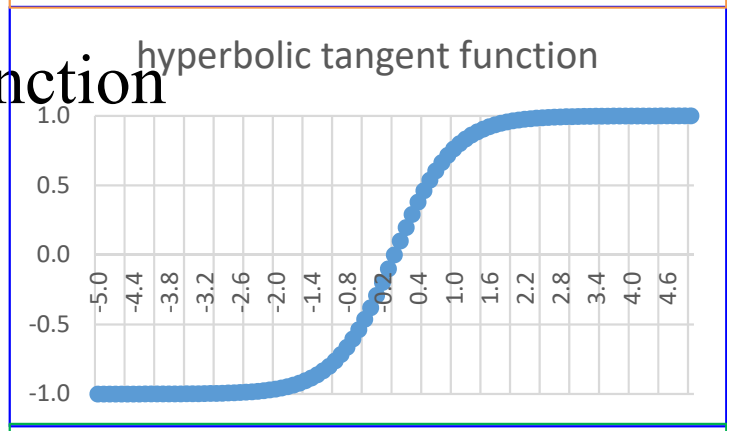
- 活性化関数として使われる関数の例
  - シグモイド関数 sigmoid function

$$\sigma(s) = \frac{1}{1+e^{-s}} \qquad \in (0,1)$$



  - 双曲線正接関数 hyperbolic tangent function

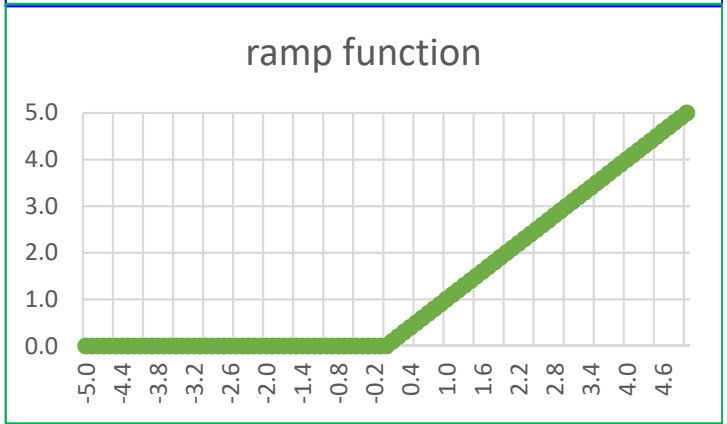
$$tanh(s) = \frac{e^{s}-e^{-s}}{e^{s}+e^{-s}} \qquad \in (-1,1)$$



  - ランプ関数 ReLU ramp function

$$ReLU(s) = \begin{cases} s & (s \geq 0) \\ 0 & (s < 0) \end{cases}$$

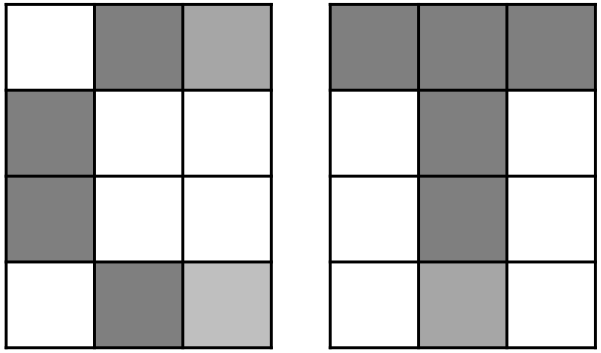
※ReLU=Rectified Linear Unit



ニューラルネットワークと機械学習

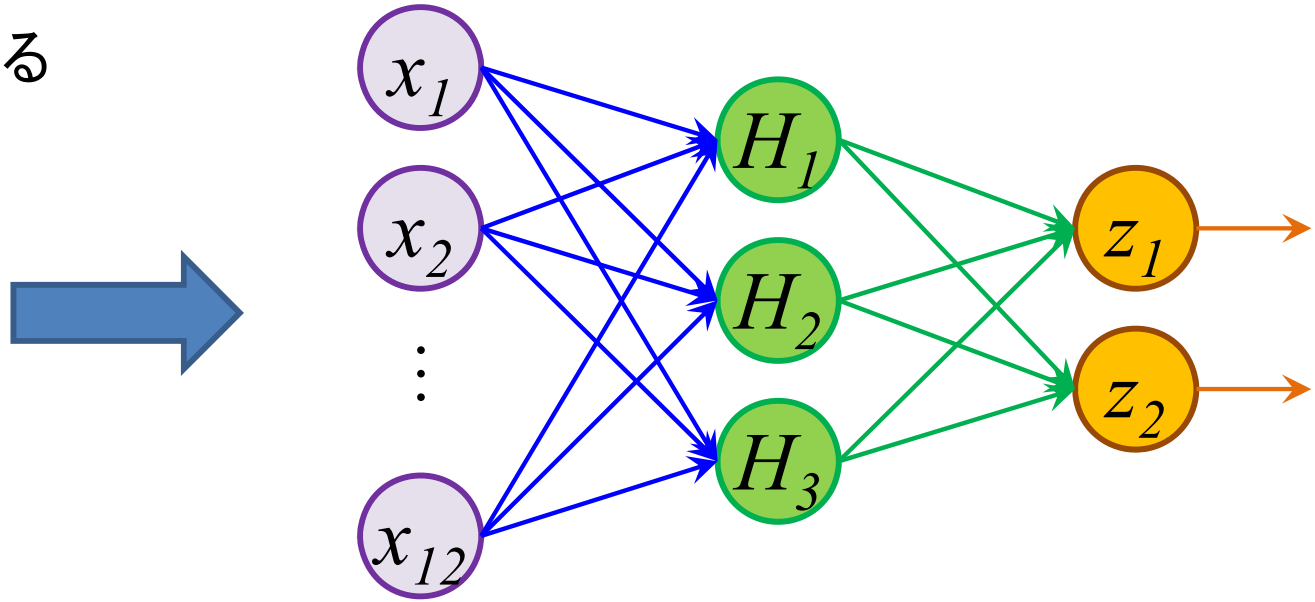
✓ 例：4×3画素の画像識別

– 各画素は 0(黒)～255(白) の整数値とする．画像例



– 入力（12個）となる

x_1	x_2	x_3
x_4	x_5	x_6
x_7	x_8	x_9
x_{10}	x_{11}	x_{12}

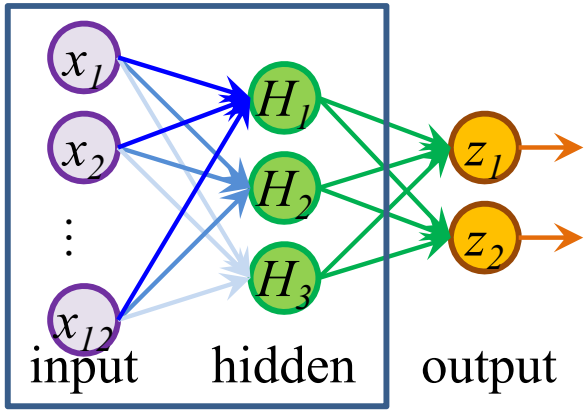


※ネットワークを多層にしたのが
深層学習 Deep Learning
＜深層学習 Deep Learning の例＞
- 畳み込みニューラルネットワーク
  CNN; Convolutional Neural Network
- 回帰型ニューラルネットワーク
  RNN; Recurrent Neural Network
- 深層強化学習　DQN; Deep Q-Network

※[1]涌井・涌井「Excelでわかる機械学習超入門」技術評論社（2019）　5章

ニューラルネットワークと機械学習

➤ *input layer* → *hidden layer*



$$\begin{cases} s_1^H = w_{11}^H x_1 + \cdots + w_{12,1}^H x_{12} - \theta_1^H = (\boldsymbol{w}_1^H)^T \boldsymbol{x} \\ s_2^H = w_{12}^H x_1 + \cdots + w_{12,2}^H x_{12} - \theta_2^H = (\boldsymbol{w}_2^H)^T \boldsymbol{x} \\ s_3^H = w_{13}^H x_1 + \cdots + w_{12,3}^H x_{12} - \theta_3^H = (\boldsymbol{w}_3^H)^T \boldsymbol{x} \end{cases}$$

ただし, $\boldsymbol{w}_i^H = \begin{pmatrix} w_{1i}^H \\ w_{2i}^H \\ \vdots \\ w_{12,i}^H \\ \theta_i^H \end{pmatrix}, \boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{12} \\ -1 \end{pmatrix}$

$(i = 1,2,3)$

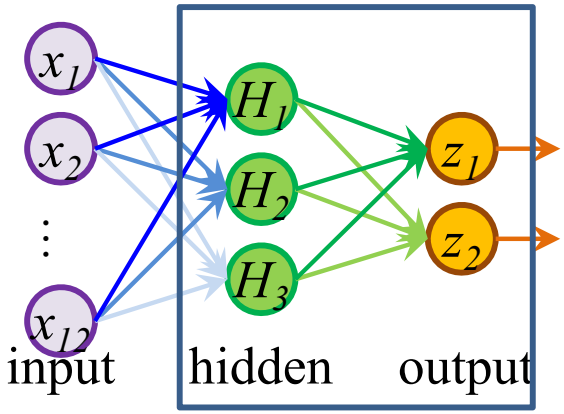
この値を求めたい（決めたい）！
人間がこの値を設定するのではなく,
機械に自ら設定させる（＝機械学習）

$$\begin{cases} h_1 = a(s_1^H) \\ h_2 = a(s_2^H) \\ h_3 = a(s_3^H) \end{cases}$$

※aは活性化関数 activation function

ニューラルネットワークと機械学習

➤ *hidden layer* → *output layer*



$$\begin{cases} s_1^o = w_{11}^o h_1 + w_{21}^o h_2 + w_{31}^o h_3 - \theta_1^o = (\boldsymbol{w}_1^o)^T \boldsymbol{h} \\ s_2^o = w_{12}^o h_1 + w_{22}^o h_2 + w_{32}^o h_3 - \theta_2^o = (\boldsymbol{w}_2^o)^T \boldsymbol{h} \end{cases}$$

ただし，$\boldsymbol{w}_j^o = \begin{pmatrix} w_{1j}^o \\ w_{2j}^o \\ w_{3j}^o \\ \theta_j^o \end{pmatrix}, \boldsymbol{h} = \begin{pmatrix} h_1 \\ h_2 \\ h_3 \\ -1 \end{pmatrix}$

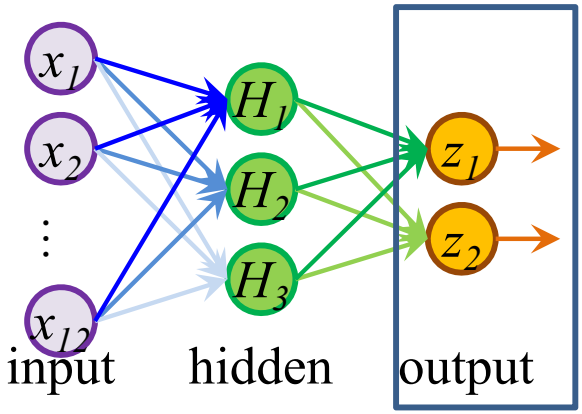
$$\begin{cases} z_1 = a(s_1^o) \\ z_2 = a(s_2^o) \end{cases}$$

$(j = 1,2)$

この値を求めたい（決めたい）！
人間がこの値を設定するのではなく，
機械に自ら設定させる（＝機械学習）

※aは活性化関数 activation function

ニューラルネットワークと機械学習



➢ *output layer* → *results*

- 例：4×3画素の画像識別/分類
  - z_1 … 文字「C」に反応（1に近い程Cの可能性大）
  - z_2 … 文字「T」に反応（1に近い程Tの可能性大）

$$\begin{cases} z_1 \approx 1 \\ z_2 \approx 0 \end{cases} \rightarrow \text{C だろう} \quad \begin{cases} z_1 \approx 0 \\ z_2 \approx 1 \end{cases} \rightarrow \text{T だろう}$$

- ソフトマックス関数（softmax function）

$$\begin{cases} \bar{z}_1 = \dfrac{e^{z_1}}{e^{z_1} + e^{z_2}} \in (0,1) \\ \bar{z}_2 = \dfrac{e^{z_2}}{e^{z_1} + e^{z_2}} \in (0,1) \end{cases}, \bar{z}_1 + \bar{z}_2 = 1 \quad \rightarrow \begin{cases} \bar{z}_1 \ldots C\text{である確率} \\ \bar{z}_2 \ldots T\text{である確率} \end{cases}$$

➢ 誤差 *error*

この誤差が最小になるように，機械に学習させる

$$e = \frac{(t_1 - z_1)^2 + (t_2 - z_2)^2}{2}$$

2乗誤差

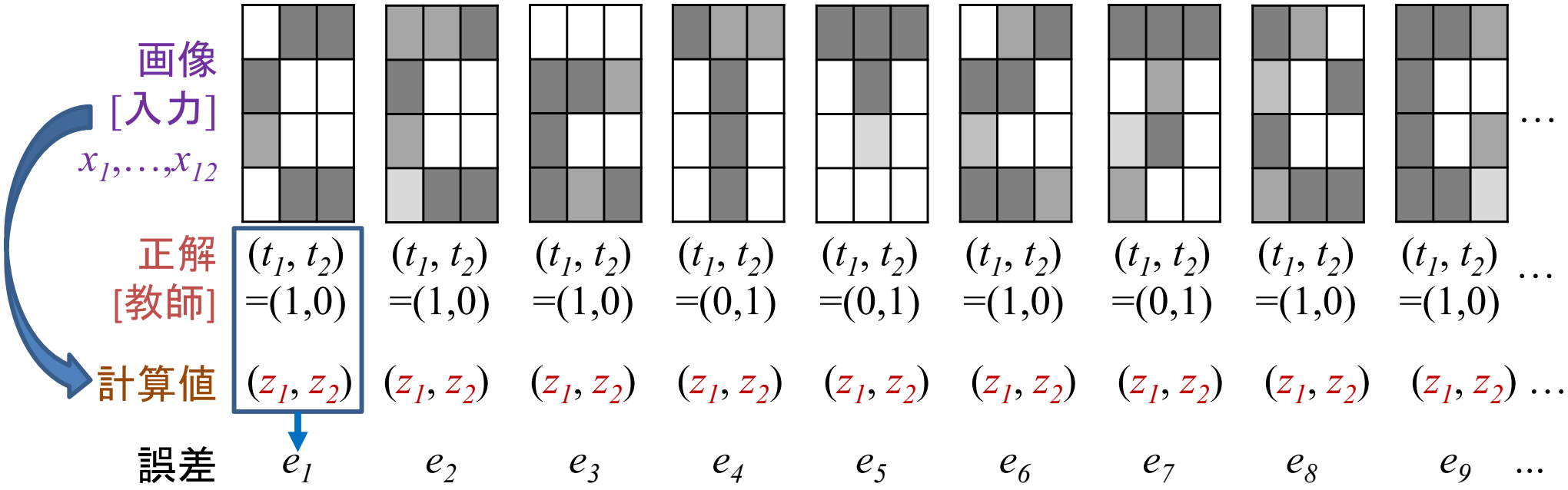
こちらを使う場合が多い

$$e = -(t_1 \log z_1 + t_2 \log z_2)$$

交差エントロピー誤差
(cross entropy error)

ニューラルネットワークと機械学習

- 誤差 *error* 評価で機械学習（教師あり学習の場合）
  - 画像[入力]と正解[教師] (t_1, t_2) の組を多数準備する



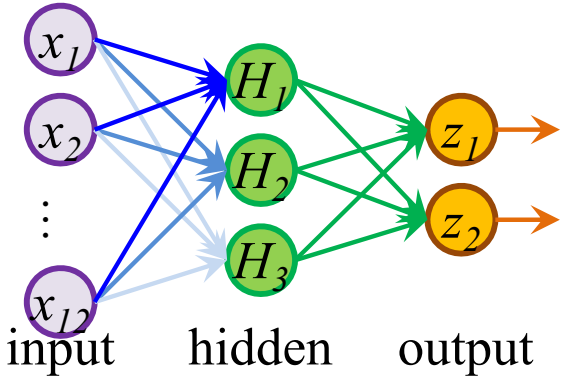
$$e_p = -(t_1 \log z_1 + t_2 \log z_2)$$

誤差の総和 $E = e_1 + e_2 + e_3 + e_4 + e_5 + e_6 + e_7 + e_8 + e_9 \ldots$

一度に全部ではなく幾つかに分けて繰り返す場合も

この誤差（の総和）が最小になるように，ネットワークの各ユニットがもつ固有の値[パラメータ]（$\boldsymbol{w}_i^H$ $(i = 1,2,3)$, $\boldsymbol{w}_j^o$ $(j = 1,2)$）を機械に学習・設定させる

機械学習（誤差の総和最小化）



➢ 誤差総和 E の最小化

$E = e_1 + e_2 + \ldots$

$$e_p = -(t_1 \log z_1 + t_2 \log z_2)$$

$$\begin{cases} z_1 = a(s_1^o) \\ z_2 = a(s_2^o) \end{cases} \quad \begin{cases} s_1^o = (\boldsymbol{w}_1^o)^T \boldsymbol{h} \\ s_2^o = (\boldsymbol{w}_2^o)^T \boldsymbol{h} \end{cases}$$

ただし，$\boldsymbol{w}_j^o = \begin{pmatrix} w_{1j}^o \\ w_{2j}^o \\ w_{3j}^o \\ \theta_j^o \end{pmatrix}, \boldsymbol{h} = \begin{pmatrix} h_1 \\ h_2 \\ h_3 \\ -1 \end{pmatrix}$

$(j = 1,2)$

$$\begin{cases} h_1 = a(s_1^H) \\ h_2 = a(s_2^H) \\ h_3 = a(s_3^H) \end{cases} \quad \begin{cases} s_1^H = (\boldsymbol{w}_1^H)^T \boldsymbol{x} \\ s_2^H = (\boldsymbol{w}_2^H)^T \boldsymbol{x} \\ s_3^H = (\boldsymbol{w}_3^H)^T \boldsymbol{x} \end{cases}$$

ただし，$\boldsymbol{w}_i^H = \begin{pmatrix} w_{1i}^H \\ w_{2i}^H \\ \vdots \\ w_{12,i}^H \\ \theta_i^H \end{pmatrix}, \boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{12} \\ -1 \end{pmatrix}$

$(i = 1,2,3)$

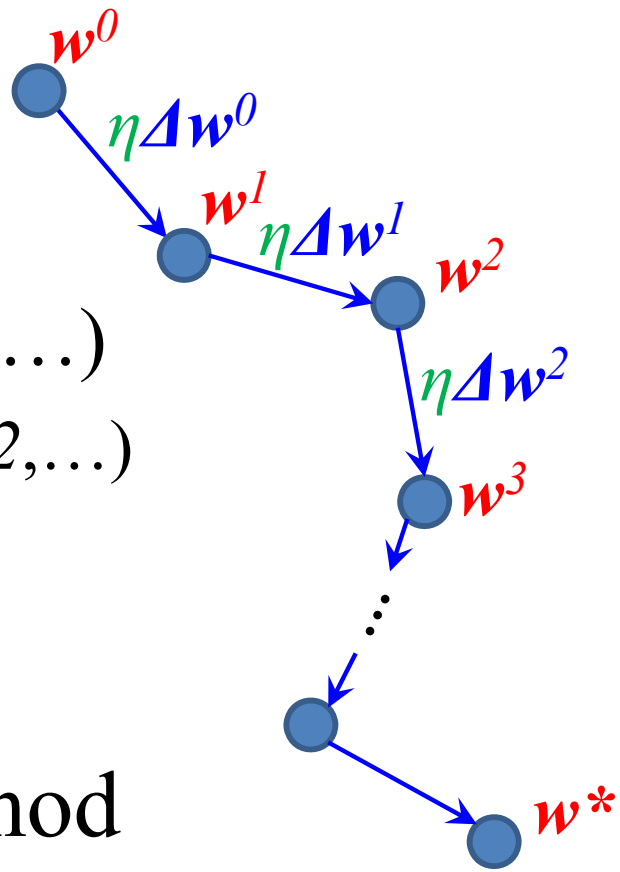
➡ E を最小とするパラメータ（変数）$\boldsymbol{w}_j^o (j = 1,2), \boldsymbol{w}_i^H (i = 1,2,3)$ の値を求めたい
変数の数：（入力数+1）×（隠れ層数）+（隠れ層数+1）×（出力数）=13*3+4*2 = 47

➡ 解析的に解く（求める）のは困難なので，反復数値計算（勾配法）で求める

機械学習（誤差の総和最小化）

➢ 反復数値計算（勾配法）

- 初期解 $\boldsymbol{w}^0$ から最適解 $\boldsymbol{w}^*$ へ
- 解の更新 $\boldsymbol{w}^{k+1}=\boldsymbol{w}^k+\eta\Delta\boldsymbol{w}^k$ $(k=0,1,2,\ldots)$
  - ✓反復 k 回目の降下方向 $\Delta\boldsymbol{w}^k$ $(k=0,1,2,\ldots)$
  - ✓反復サイズ（step size） η



➢ 最急降下法 steepest descent method

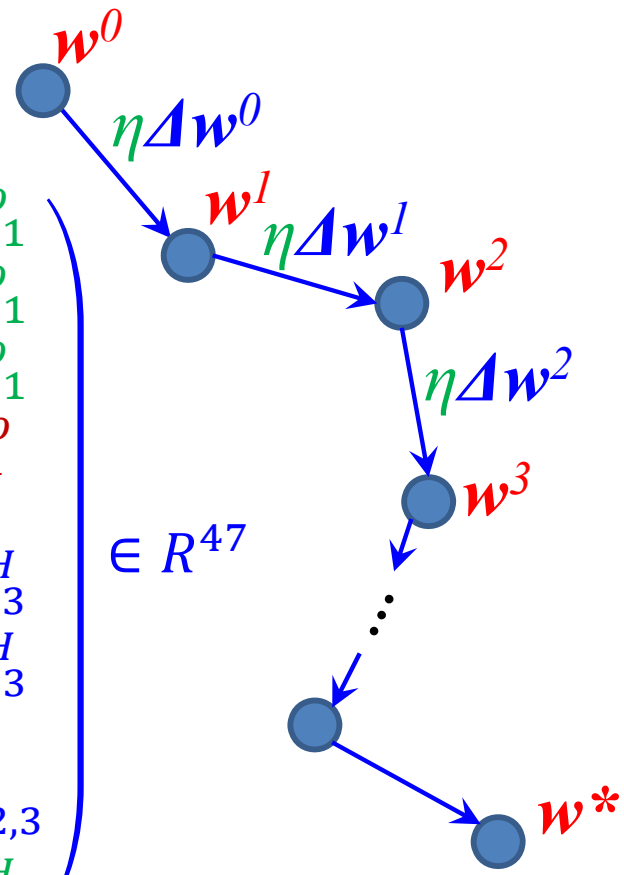
- 降下方向 $\Delta\boldsymbol{w}$ に最急降下方向を使う手法
- 関数 $f(\boldsymbol{w})$ の最急降下方向は $-\nabla f(\boldsymbol{w}) = -\begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial w_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial w_n} \end{pmatrix}$

※最急降下法は勾配法の一種で，最も簡便な手法
※勾配法のstep sizeは固定値を使うかステップ毎に変更

機械学習（誤差の総和最小化）

- 例題の解$\boldsymbol{w}$と降下方向$\Delta\boldsymbol{w}$

$$\boldsymbol{w} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{w}_1^o \\ \boldsymbol{w}_2^o \\ \boldsymbol{w}_1^H \\ \boldsymbol{w}_2^H \\ \boldsymbol{w}_3^H \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w_{11}^o \\ w_{21}^o \\ w_{31}^o \\ \theta_1^o \\ \vdots \\ w_{13}^H \\ w_{23}^H \\ \vdots \\ w_{12,3}^H \\ \theta_3^H \end{pmatrix} \in R^{47}, \Delta\boldsymbol{w} = \begin{pmatrix} \Delta\boldsymbol{w}_1^o \\ \Delta\boldsymbol{w}_2^o \\ \Delta\boldsymbol{w}_1^H \\ \Delta\boldsymbol{w}_2^H \\ \Delta\boldsymbol{w}_3^H \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Delta w_{11}^o \\ \Delta w_{21}^o \\ \Delta w_{31}^o \\ \Delta\theta_1^o \\ \vdots \\ \Delta w_{13}^H \\ \Delta w_{23}^H \\ \vdots \\ \Delta w_{12,3}^H \\ \Delta\theta_3^H \end{pmatrix} \in R^{47}$$



- 例題の誤差総和 E の最急降下方向

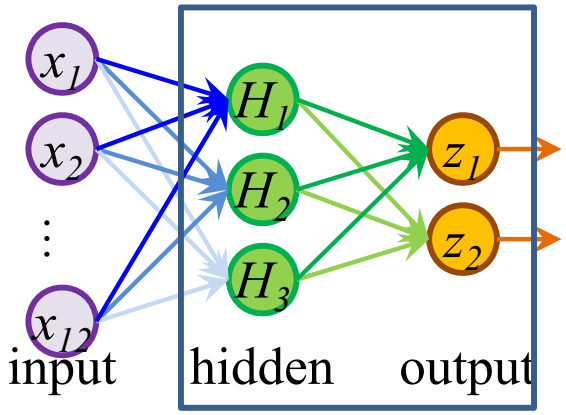
$$\Delta\boldsymbol{w} = -\nabla E(\boldsymbol{w}) = -\begin{pmatrix} \vdots \\ \dfrac{\partial E}{\partial w_l} \\ \vdots \end{pmatrix}, \qquad \frac{\partial E}{\partial w_l} = \frac{\partial e_1}{\partial w_l} + \frac{\partial e_2}{\partial w_l} + \cdots$$

機械学習（誤差逆伝播法backpropagation）

➢ 出力層の勾配[(重み3+閾値1)×2=8個]

$$
\begin{cases}
\dfrac{\partial e_p}{\partial w_{11}^o} = \dfrac{\partial e_p}{\partial z_1}\dfrac{\partial z_1}{\partial s_1^o}\dfrac{\partial s_1^o}{\partial w_{11}^o} = (z_1 - t_1)a'(s_1^o)h_1 \\
\dfrac{\partial e_p}{\partial w_{21}^o} = \dfrac{\partial e_p}{\partial z_1}\dfrac{\partial z_1}{\partial s_1^o}\dfrac{\partial s_1^o}{\partial w_{21}^o} = (z_1 - t_1)a'(s_1^o)h_2 \\
\dfrac{\partial e_p}{\partial w_{31}^o} = \dfrac{\partial e_p}{\partial z_1}\dfrac{\partial z_1}{\partial s_1^o}\dfrac{\partial s_1^o}{\partial w_{31}^o} = (z_1 - t_1)a'(s_1^o)h_3 \\
\dfrac{\partial e_p}{\partial \theta_1^o} = \dfrac{\partial e_p}{\partial z_1}\dfrac{\partial z_1}{\partial s_1^o}\dfrac{\partial s_1^o}{\partial \theta_1^o} = -(z_1 - t_1)a'(s_1^o)
\end{cases}
$$

$$
\begin{cases}
\dfrac{\partial e_p}{\partial w_{12}^o} = \dfrac{\partial e_p}{\partial z_2}\dfrac{\partial z_2}{\partial s_2^o}\dfrac{\partial s_2^o}{\partial w_{12}^o} = (z_2 - t_2)a'(s_2^o)h_1 \\
\dfrac{\partial e_p}{\partial w_{22}^o} = \dfrac{\partial e_p}{\partial z_2}\dfrac{\partial z_2}{\partial s_2^o}\dfrac{\partial s_2^o}{\partial w_{22}^o} = (z_2 - t_2)a'(s_2^o)h_2 \\
\dfrac{\partial e_p}{\partial w_{32}^o} = \dfrac{\partial e_p}{\partial z_2}\dfrac{\partial z_2}{\partial s_2^o}\dfrac{\partial s_2^o}{\partial w_{32}^o} = (z_2 - t_2)a'(s_2^o)h_3 \\
\dfrac{\partial e_p}{\partial \theta_2^o} = \dfrac{\partial e_p}{\partial z_2}\dfrac{\partial z_2}{\partial s_2^o}\dfrac{\partial s_2^o}{\partial \theta_2^o} = -(z_2 - t_2)a'(s_2^o)
\end{cases}
$$



$$e_p = -(t_1 \log z_1 + t_2 \log z_2)$$

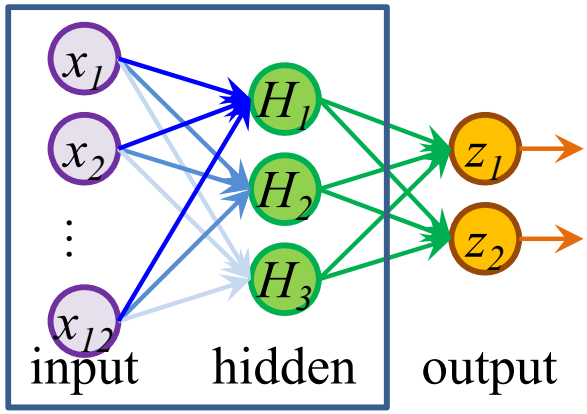
$$
\begin{cases}
z_1 = a(s_1^o) \\
z_2 = a(s_2^o)
\end{cases}
$$

$$
\rightarrow \begin{cases}
\dfrac{\partial e_p}{\partial z_1} = (z_1 - t_1) \\
\dfrac{\partial e_p}{\partial z_2} = (z_2 - t_2)
\end{cases}
\qquad
\rightarrow \begin{cases}
\dfrac{\partial z_1}{\partial s_1^o} = a'(s_1^o) \\
\dfrac{\partial z_2}{\partial s_2^o} = a'(s_2^o)
\end{cases}
$$

$$
\begin{cases}
s_1^o = w_{11}^o h_1 + w_{21}^o h_2 + w_{31}^o h_3 - \theta_1^o \\
s_2^o = w_{12}^o h_1 + w_{22}^o h_2 + w_{32}^o h_3 - \theta_2^o
\end{cases}
$$

$$
\rightarrow \begin{cases}
\dfrac{\partial s_1^o}{\partial w_{11}^o} = h_1, \dfrac{\partial s_1^o}{\partial w_{21}^o} = h_2, \dfrac{\partial s_1^o}{\partial w_{31}^o} = h_3, \dfrac{\partial s_1^o}{\partial \theta_1^o} = -1 \\
\dfrac{\partial s_2^o}{\partial w_{12}^o} = h_1, \dfrac{\partial s_2^o}{\partial w_{22}^o} = h_2, \dfrac{\partial s_2^o}{\partial w_{32}^o} = h_3, \dfrac{\partial s_2^o}{\partial \theta_2^o} = -1
\end{cases}
$$

機械学習（誤差逆伝播法backpropagation）



➢ 隠れ層の勾配[(重み12+閾値1)×3=39個]

✓ $i=1(H_1), 2(H_2), 3(H_3)$の場合の各13個

$$
\begin{cases}
\dfrac{\partial e_p}{\partial w_{1i}^H} = \left(\dfrac{\partial e_p}{\partial z_1}\dfrac{\partial z_1}{\partial s_1^o}\dfrac{\partial s_1^o}{\partial h_i} + \dfrac{\partial e_p}{\partial z_2}\dfrac{\partial z_2}{\partial s_2^o}\dfrac{\partial s_2^o}{\partial h_i}\right)\dfrac{\partial h_i}{\partial s_i^H}\dfrac{\partial s_i^H}{\partial w_{1i}^H} \\
\qquad = \left((z_1 - t_1)a'(s_1^o)w_{i1}^o + (z_2 - t_2)a'(s_2^o)w_{i2}^o\right)a'(s_i^H)x_1 \\
\qquad \vdots \\
\dfrac{\partial e_p}{\partial w_{12,i}^H} = \left(\dfrac{\partial e_p}{\partial z_1}\dfrac{\partial z_1}{\partial s_1^o}\dfrac{\partial s_1^o}{\partial h_i} + \dfrac{\partial e_p}{\partial z_2}\dfrac{\partial z_2}{\partial s_2^o}\dfrac{\partial s_2^o}{\partial h_i}\right)\dfrac{\partial h_i}{\partial s_i^H}\dfrac{\partial s_i^H}{\partial w_{12,i}^H} \\
\qquad = \left((z_1 - t_1)a'(s_1^o)w_{i1}^o + (z_2 - t_2)a'(s_2^o)w_{i2}^o\right)a'(s_i^H)x_{12} \\
\dfrac{\partial e_p}{\partial \theta_i^H} = \left(\dfrac{\partial e_p}{\partial z_1}\dfrac{\partial z_1}{\partial s_1^o}\dfrac{\partial s_1^o}{\partial h_i} + \dfrac{\partial e_p}{\partial z_2}\dfrac{\partial z_2}{\partial s_2^o}\dfrac{\partial s_2^o}{\partial h_i}\right)\dfrac{\partial h_i}{\partial s_i^H}\dfrac{\partial s_i^H}{\partial \theta_i^H} \\
\qquad = -\left((z_1 - t_1)a'(s_1^o)w_{i1}^o + (z_2 - t_2)a'(s_2^o)w_{i2}^o\right)a'(s_i^H)
\end{cases}
\qquad (i = 1,2,3)
$$

$$
\begin{cases}
h_1 = a(s_1^H) \\
h_2 = a(s_2^H) \\
h_3 = a(s_3^H)
\end{cases}
$$

$$
\begin{cases}
s_1^H = w_{11}^H x_1 + \cdots + w_{12,1}^H x_{12} - \theta_1^H \\
s_2^H = w_{12}^H x_1 + \cdots + w_{12,2}^H x_{12} - \theta_2^H \\
s_3^H = w_{13}^H x_1 + \cdots + w_{12,3}^H x_{12} - \theta_3^H
\end{cases}
\rightarrow
\begin{cases}
\dfrac{\partial s_1^H}{\partial w_{11}^H} = x_1, \cdots, \dfrac{\partial s_1^H}{\partial w_{12,1}^H} = x_{12}, \dfrac{\partial s_1^H}{\partial \theta_1^H} = -1 \\
\dfrac{\partial s_2^H}{\partial w_{12}^H} = x_1, \cdots, \dfrac{\partial s_2^H}{\partial w_{12,2}^H} = x_{12}, \dfrac{\partial s_2^H}{\partial \theta_2^H} = -1 \\
\dfrac{\partial s_3^H}{\partial w_{13}^H} = x_1, \cdots, \dfrac{\partial s_3^H}{\partial w_{12,3}^H} = x_{12}, \dfrac{\partial s_3^H}{\partial \theta_3^H} = -1
\end{cases}
\rightarrow
\begin{cases}
\dfrac{\partial h_1}{\partial s_1^H} = a'(s_1^H) \\
\dfrac{\partial h_2}{\partial s_2^H} = a'(s_2^H) \\
\dfrac{\partial h_3}{\partial s_3^H} = a'(s_3^H)
\end{cases}
$$

機械学習（誤差逆伝播法backpropagation）

- 活性化関数 $a(s)$ の微分 $a'(s)$
  - シグモイド関数 sigmoid function

$$\sigma(s) = \frac{1}{1+e^{-s}}$$

$$\frac{\partial \sigma}{\partial s} = -\frac{-e^{-s}}{(1+e^{-s})^2} = \frac{1+e^{-s}-1}{(1+e^{-s})^2}$$
$$= \frac{1}{1+e^{-s}} \cdot \left(1 - \frac{1}{1+e^{-s}}\right)$$
$$= \sigma(s)\{1-\sigma(s)\}$$

  - 双曲線正接関数 hyperbolic tangent function

$$tanh(s) = \frac{e^{s}-e^{-s}}{e^{s}+e^{-s}}$$

$$\frac{\partial t}{\partial s} = \frac{(e^{s}+e^{-s})^2-(e^{s}-e^{-s})^2}{(e^{s}+e^{-s})^2}$$
$$= 1 - tanh(s)^2$$

  - ランプ関数 ReLU ramp function

$$ReLU(s) = \begin{cases} s & (s \geq 0) \\ 0 & (s < 0) \end{cases}$$

$$\frac{\partial R}{\partial s} = \begin{cases} 1 & (s > 0) \\ 0 & (s < 0) \end{cases}$$

※s=0で微分不可能 indifferentiable
※凸関数より s=0で劣微分可能 subdifferentiable

機械学習（教師あり学習）

- 機械学習のアルゴリズム algorithm

1. 入力と正解の組を充分数準備．初期解 $\boldsymbol{w}^0$ を生成（=各ユニット固有の値の初期値を設定）．$k = 0$
2. 入力（$x_1,\ldots,x_{12}$）から，各ユニット固有の値 $\boldsymbol{w}^k$ で出力（z_1, z_2）を計算（※準備した全てについて計算）
3. 正解（t_1, t_2）と出力（z_1, z_2）から誤差 E を計算（※準備した全てについて計算し，誤差e_pの和 E を計算）
4. 誤差 E が十分小さい（$E < \varepsilon$）なら終了．そうでなければ，誤差逆伝播法で勾配 $\Delta\boldsymbol{w}^k$ を計算
5. 勾配法（最急降下法）で解を更新 $\boldsymbol{w}^{k+1} = \boldsymbol{w}^k + \eta\Delta\boldsymbol{w}^k$. $k = k+1$ として step 2へ

機械学習（教師あり学習）

※[2]斎藤康毅「ゼロから作るDeep Learning」オライリージャパン（2016）6章 学習に関するテクニック

➢ 補足

- ✓ ネットワークの構成
  - 層の数をどうするか？ / 各層のノード数をどうするか？
- ✓ 初期解 w^0 の生成（重要）
  - Xavierの初期値（sigmoid関数/tanh関数）
  - Heの初期値（ReLU関数）
- ✓ 勾配法の選択 と step size の決め方
  - 最急降下法 steepest descent method
  - Momentum
  - AdaGrad; adaptive gradient
  - Adam; adaptive moment estimation
- ✓ 過学習 overfitting への対処
  - Weight Decay
  - Dropout

参考文献

0	1	1
1	0	0
1	0	0
0	1	1

[1]涌井良幸・涌井貞美「Excelでわかる機械学習超入門」
技術評論社（2019）

[2]斎藤康毅「ゼロから作るDeep Learning」
オライリージャパン（2016）