Učení, rozhodovací stromy, neuronové sítě

Aleš Horák

E-mail: `hales@fi.muni.cz`

`http://nlp.fi.muni.cz/uui/`

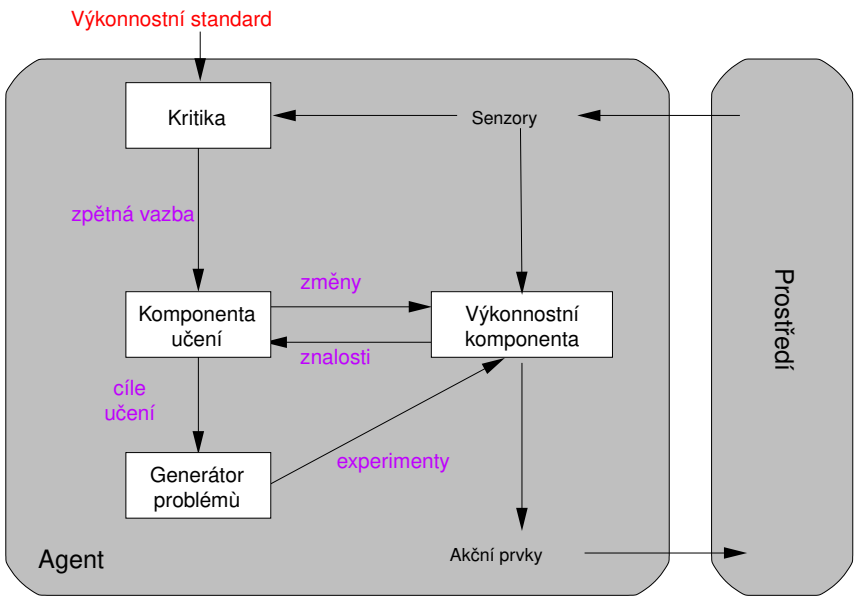
Obsah:

- ➜ Učení
- ➜ Rozhodovací stromy
- ➜ Neuronové sítě

Učení

- **učení** je klíčové pro neznámé prostředí (kde návrhář není vševědoucí)
- učení je také někdy vhodné jako **metoda konstrukce** systému – vystavit agenta realitě místo přepisování reality do pevných pravidel
- učení agenta – využití jeho **vjemů** z prostředí nejen pro vyvození další akce
- učení **modifikuje rozhodovací systém** agenta pro zlepšení jeho výkonnosti

Učící se agent



příklad automatického taxi:

- **Výkonnostní komponenta** – obsahuje znalosti a postupy pro výběr akcí pro vlastní řízení auta
- **Kritika** – sleduje reakce okolí na akce taxi. Např. při rychlém přejetí 3 podélných pruhů zaznamená a předá pohoršující reakce dalších řidičů
- **Komponenta učení** – z hlášení Kritiky vyvodí nové pravidlo, že takové přejíždění je nevhodné, a modifikuje odpovídajícím způsobem Výkonnostní komponentu
- **Generátor problémů** – zjišťuje, které oblasti by mohly potřebovat vylepšení a navrhuje experimenty, jako je třeba brždění na různých typech vozovky

Komponenta učení

návrh komponenty učení závisí na několika atributech:

- jaký typ výkonnostní komponenty je použit
- která funkční část výkonnostní komponenty má být učena
- jak je tato funkční část reprezentována
- jaká zpětná vazba je k dispozici

příklady:

výkonnostní komponenta	**funkční část**	**reprezentace**	zpětná vazba
Alfa-beta prohledávání	**vyhodnocovací funkce**	**vážená lineární funkce**	výhra/prohra
Logický agent	**určení akce**	**axiomy** $Result$	výsledné skóre
Reflexní agent	**váhy preceptronu**	**neuronová síť**	správná/špatná akce

učení **s dohledem** (*supervised learning*) $\times$ **bez dohledu** (*unsupervised learning*)

❑ **s dohledem** – učení **funkce** z příkladů vstupů a výstupů

❑ **bez dohledu** – učení **vzorů** na vstupu vzhledem k reakcím prostředí

❑ **posílené** (*reinforcement learning*) – nejobecnější, agent se učí podle **odměn**/**pokut**

Induktivní učení

známé taky jako **věda** ☺

nejjednodušší forma – učení funkce z příkladů (agent je tabula rasa)

f je **cílová funkce**

příklad je dvojice x, $f(x)$ např. $\begin{array}{c|c|c} \text{O} & \text{O} & \times \\ \hline & \times & \\ \hline \times & & \end{array}$, $+1$

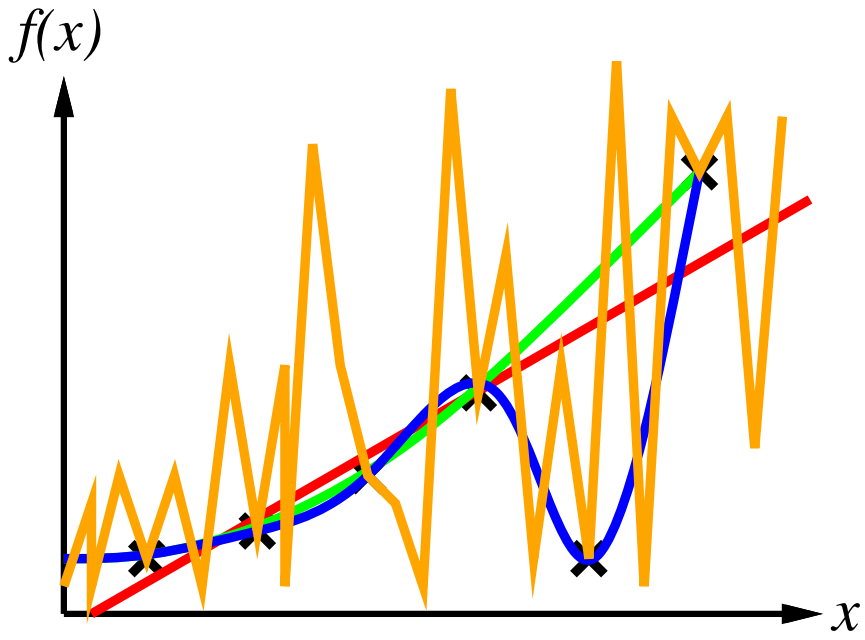
úkol **indukce**: najdi **hypotézu** h
takovou, že $h \approx f$
pomocí sady **trénovacích příkladů**

Metoda induktivního učení

zkonstruuj/uprav h, aby souhlasila s f na trénovacích příkladech

h je **konzistentní** $\Leftrightarrow$ souhlasí f f na všech příkladech

např. hledání křivky:



pravidlo **Ockhamovy břitvy** – maximalizovat kombinaci konzistence a jednoduchosti (*nejjednodušší ze správných je nejlepší*)

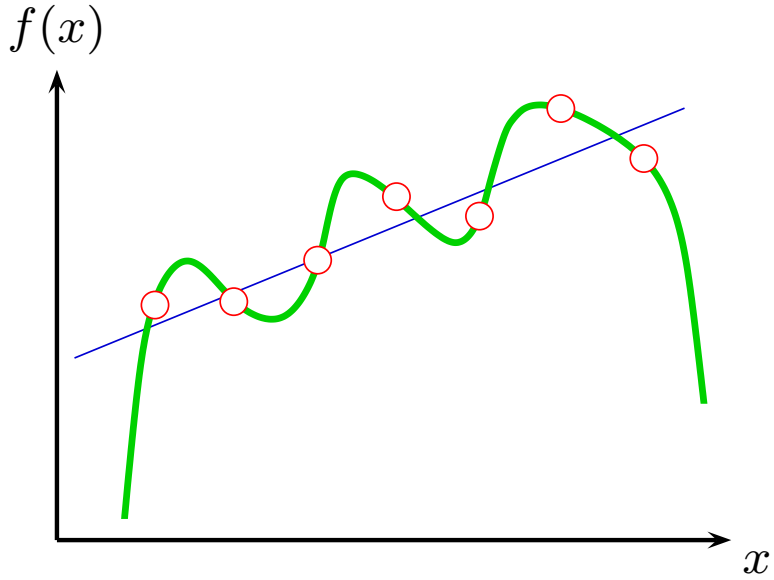
Metoda induktivního učení pokrač.

hodně záleží na **prostoru hypotéz**, jsou na něj protichůdné požadavky:

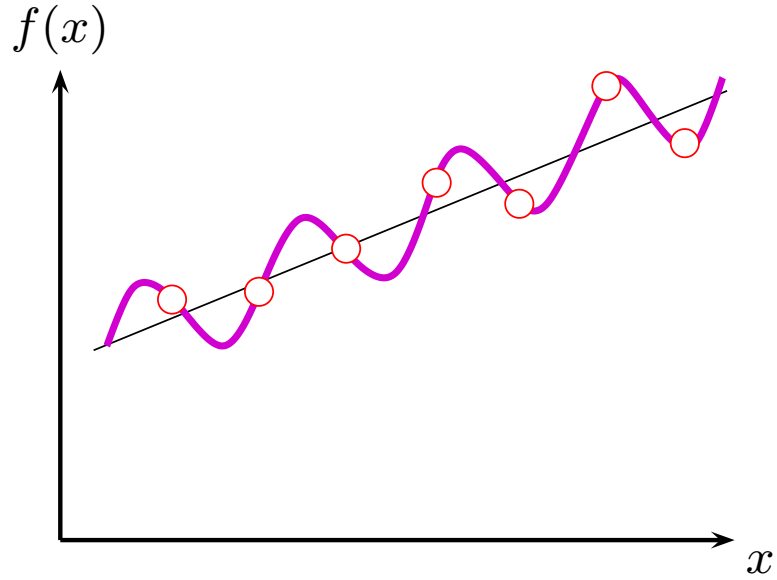
- pokrýt co **největší množství** hledaných funkcí
- udržet **nízkou výpočetní složitost** hypotézy

např.

a)



b)



- stejná sada 7 bodů
- nejmenší konzistentní polynom – polynom 6-tého stupně (7 parametrů)
- může být výhodnější použít nekonzistentní **přibližnou** lineární funkci
- přitom existuje konzistentní funkce $ax + by + c \sin x$

Atributová reprezentace příkladů

příklady popsané výčtem **hodnot atributů** (libovolných hodnot)

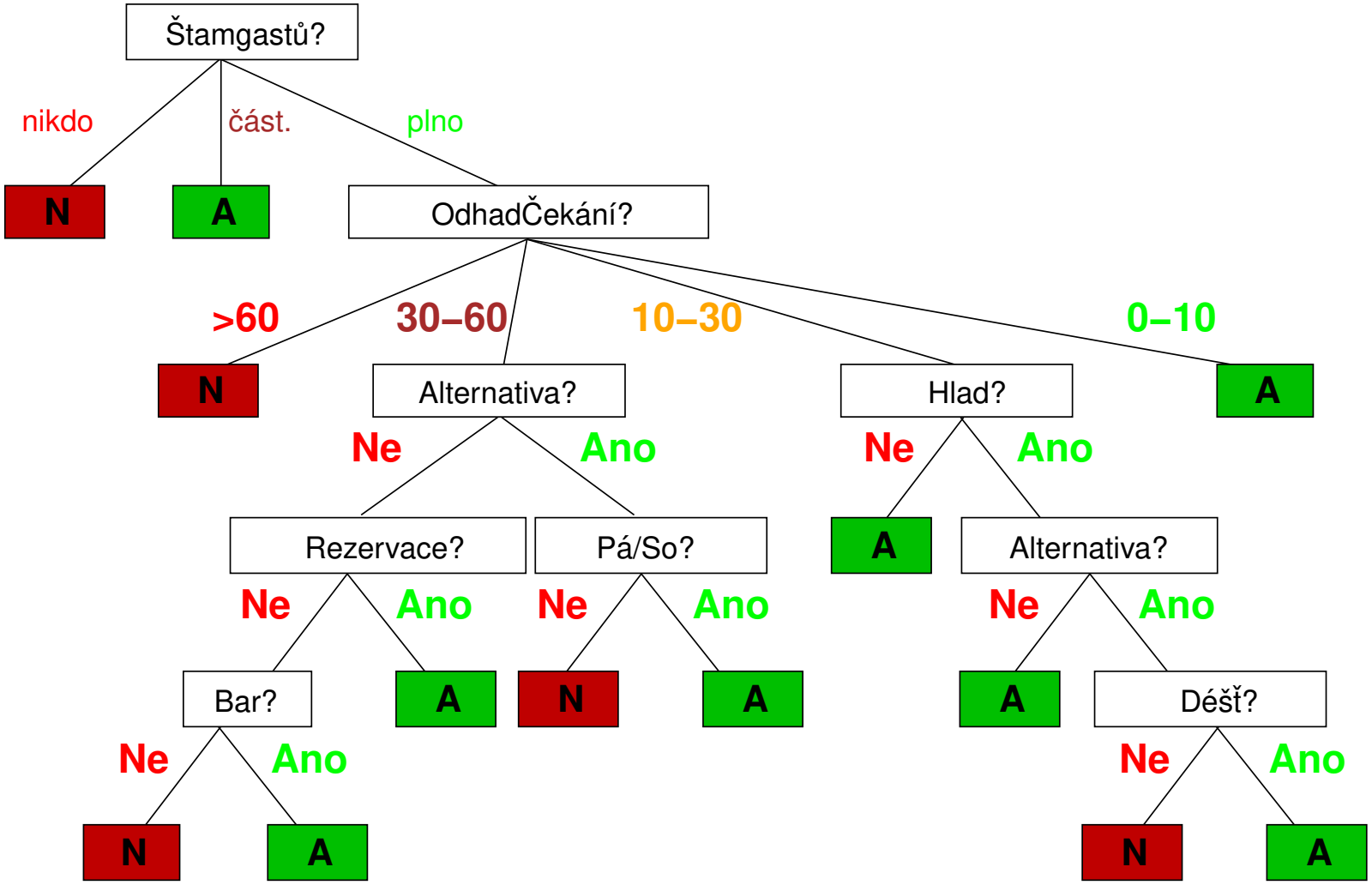
např. rozhodování, zda počkat na uvolnění stolu v restauraci:

Příklad	Atributy										počkat?
	Alt	Bar	$Pá/So$	$Hlad$	$Štam$	Cen	$Déšť$	Rez	Typ	$ČekD$	
X_1	A	N	N	A	část.	$$$	N	A	mexická	0–10	A
X_2	A	N	N	A	plno	$	N	N	asijská	30–60	N
X_3	N	A	N	N	část.	$	N	N	bufet	0–10	A
X_4	A	N	A	A	plno	$	N	N	asijská	10–30	A
X_5	A	N	A	N	plno	$$$	N	A	mexická	>60	N
X_6	N	A	N	A	část.	$$	A	A	pizzerie	0–10	A
X_7	N	A	N	N	nikdo	$	A	N	bufet	0–10	N
X_8	N	N	N	A	část.	$$	A	A	asijská	0–10	A
X_9	N	A	A	N	plno	$	A	N	bufet	>60	N
X_{10}	A	A	A	A	plno	$$$	N	A	pizzerie	10–30	N
X_{11}	N	N	N	N	nikdo	$	N	N	asijská	0–10	N
X_{12}	A	A	A	A	plno	$	N	N	bufet	30–60	A

Ohodnocení tvoří **klasifikaci** příkladů – pozitivní (A) a negativní (N)

Rozhodovací stromy

jedna z možných reprezentací hypotéz – **rozhodovací strom** pro určení, jestli počkat na stůl:



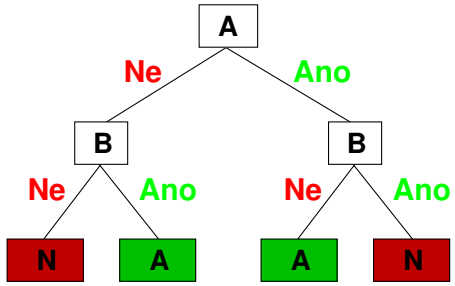
Vyjadřovací síla rozhodovacích stromů

rozhodovací stromy vyjádří libovolnou **Booleovskou funkci vstupních atributů** $\longrightarrow$ odpovídá **výrokové logice**

$\forall s$ počkat?$(s) \Leftrightarrow \big(P_1(s) \vee P_2(s) \vee \ldots \vee P_n(s)\big)$, kde $P_i(s) = \big(A_1(s) = V_1 \wedge \ldots \wedge A_m(s) = V_m\big)$

pro libovolnou Booleovskou funkci $\longrightarrow$ řádek v pravdivostní tabulce = **cesta ve stromu** (od kořene k listu)

A	B	A xor B
F	F	F
F	T	T
T	F	T
T	T	F



triviálně

> *pro libovolnou trénovací sadu existuje konzistentní rozhodovací strom s jednou cestou k listům pro každý příklad*

ale takový strom pravděpodobně nebude generalizovat na nové příklady

chceme najít co možná **kompaktní** rozhodovací strom

Prostor hypotéz

1. vezměme pouze Booleovské atributy, bez dalšího omezení

   Kolik existuje různých rozhodovacích stromů s n Booleovskými atributy?

   = počet všech Booleovských funkcí nad těmito atributy

   = počet různých pravdivostních tabulek s 2^n řádky = 2^{2^n}

   např. pro 6 atributů existuje 18 446 744 073 709 551 616 různých rozhodovacích stromů

2. když se omezíme pouze na konjunktivní hypotézy ($Hlad \wedge \neg Déšt'$)

   Kolik existuje takových čistě konjunktivních hypotéz?

   každý atribut může být v pozitivní nebo negativní formě nebo nepoužit

   $\Rightarrow 3^n$ různých konjunktivních hypotéz (pro 6 atributů = 729)

prostor hypotéz s větší **expresivitou**

- **zvyšuje šance**, že najdeme přesné vyjádření cílové funkce
- ALE **zvyšuje** i **počet** možných hypotéz, které jsou konzistentní s trénovací množinou

  $\Rightarrow$ můžeme získat **nižší kvalitu** předpovědí (generalizace)

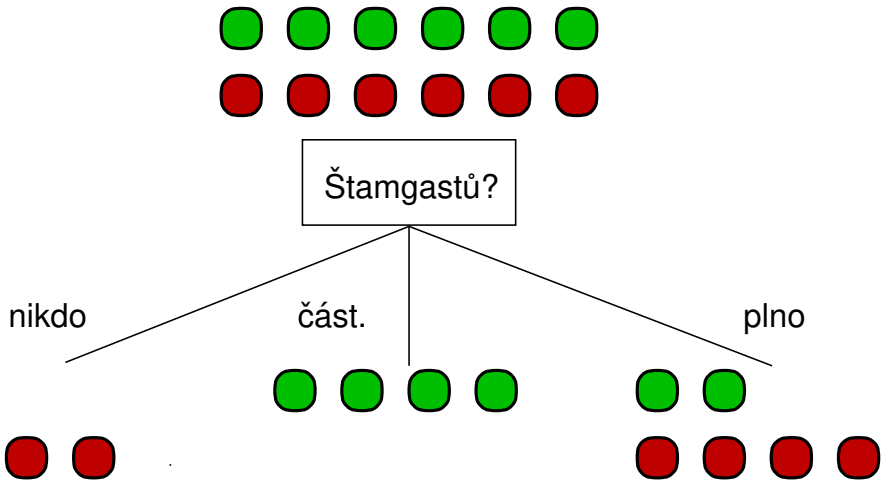
Učení ve formě rozhodovacích stromů

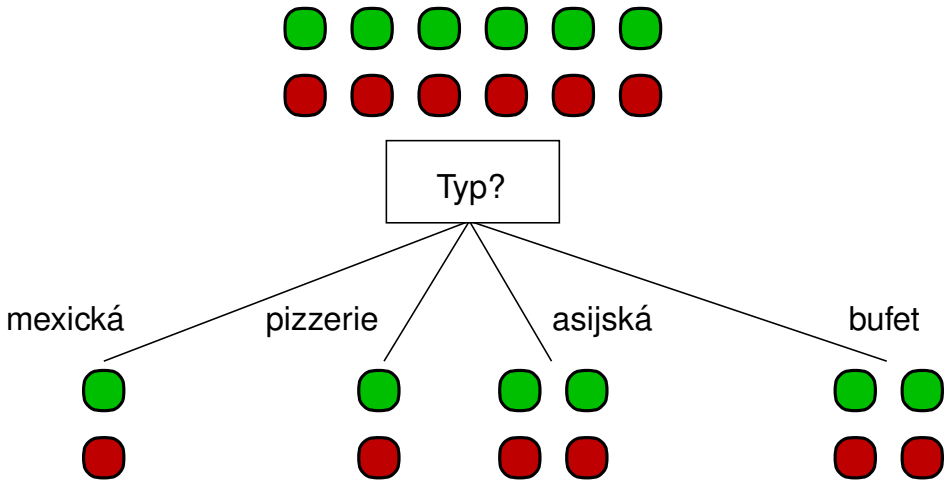
- **triviální konstrukce rozhodovacího stromu**
  - pro každý příklad v trénovací sadě přidej jednu cestu od kořene k listu
  - na stejných příkladech jako v trénovací sadě bude fungovat přesně
  - na nových příkladech se bude chovat náhodně – **negeneralizuje** vzory z příkladů, pouze **kopíruje** pozorování
- **heuristická konstrukce kompaktního stromu**
  - chceme najít **nejmenší** rozhodovací strom, který souhlasí s příklady
  - vlastní nalezení nejmenšího stromu je ovšem příliš složité

    $\longrightarrow$ heuristikou najdeme alespoň **dostatečně malý** ☺
  - hlavní myšlenka – vybíráme atributy pro test v co nejlepším **pořadí**

Výběr atributu

myšlenka – **dobrý atribut** rozdělí příklady na podmnožiny, které jsou (nejlépe) “všechny pozitivní” nebo “všechny negativní”





$\check{S}tamgastu\check{u}?$ je lepší volba atributu ← dává lepší **informaci** o vlastní **klasifikaci** příkladů

Výběr atributu – míra informace

informace – odpovídá na **otázku**

čím **méně** dopředu vím o výsledku obsaženém v odpovědi $\longrightarrow$ tím **více** informace je v ní obsaženo

měřítko:

1 bit = odpověď na Booleovskou otázku s pravděpodobností odpovědi $\langle P(T) = \frac{1}{2}, P(F) = \frac{1}{2} \rangle$

pro pravděpodobnosti všech odpovědí $\langle P(v_1), \ldots, P(v_n) \rangle \longrightarrow$ **míra informace** v odpovědi obsažená

$$I\big(\langle P(v_1), \ldots, P(v_n) \rangle\big) = \sum_{i=1}^{n} -P(v_i) \log_2 P(v_i)$$

tato míra se také nazývá **entropie**

např. pro házení mincí: $I(\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle) = -\frac{1}{2} \log_2 \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \log_2 \frac{1}{2} = 1$ bit

pro házení *falešnou* mincí, která dává na 99% vždy jednu stranu mince:

$$I(\langle \frac{1}{100}, \frac{99}{100} \rangle) = -\frac{1}{100} \log_2 \frac{1}{100} - \frac{99}{100} \log_2 \frac{99}{100} = 0.08 \text{ bitů}$$

Použití míry informace pro výběr atributu

předpokládejme, že máme p pozitivních a n negativních příkladů

$\Rightarrow I\left(\langle \frac{p}{p+n}, \frac{n}{p+n} \rangle\right)$ bitů je potřeba pro klasifikaci nového příkladu

např. pro $X_1, \ldots, X_{12}$ z volby čekání na stůl je $p = n = 6$, takže potřebujeme 1 bit

výběr atributu – *kolik informace nám dá test na hodnotu atributu A?*

= **rozdíl** odhadu odpovědi **před** a **po** testu atributu

atribut A rozdělí sadu příkladů E na podmnožiny E_i (nejlépe, že $\forall$ potřebuje méně informace)

nechť E_i má p_i pozitivních a n_i negativních příkladů

$\Rightarrow$ je potřeba $I\left(\langle \frac{p_i}{p_i+n_i}, \frac{n_i}{p_i+n_i} \rangle\right)$ bitů pro klasifikaci nového příkladu

$\Rightarrow$ **očekávaný** počet bitů přes $\forall$ větve je $Remainder(A) = \sum_i \frac{p_i+n_i}{p+n} I\left(\langle \frac{p_i}{p_i+n_i}, \frac{n_i}{p_i+n_i} \rangle\right)$

$\Rightarrow$ výsledný **zisk atributu** A je $Gain(A) = I\left(\langle \frac{p}{p+n}, \frac{n}{p+n} \rangle\right) - Remainder(A)$

výběr atributu = nalezení atributu s nejvyšší hodnotou $Gain(A)$

$Gain(Štamgastů?) \approx 0.541$ bitů $\qquad Gain(Typ?) = 0$ bitů

Algoritmus IDT – učení formou rozhodovacích stromů

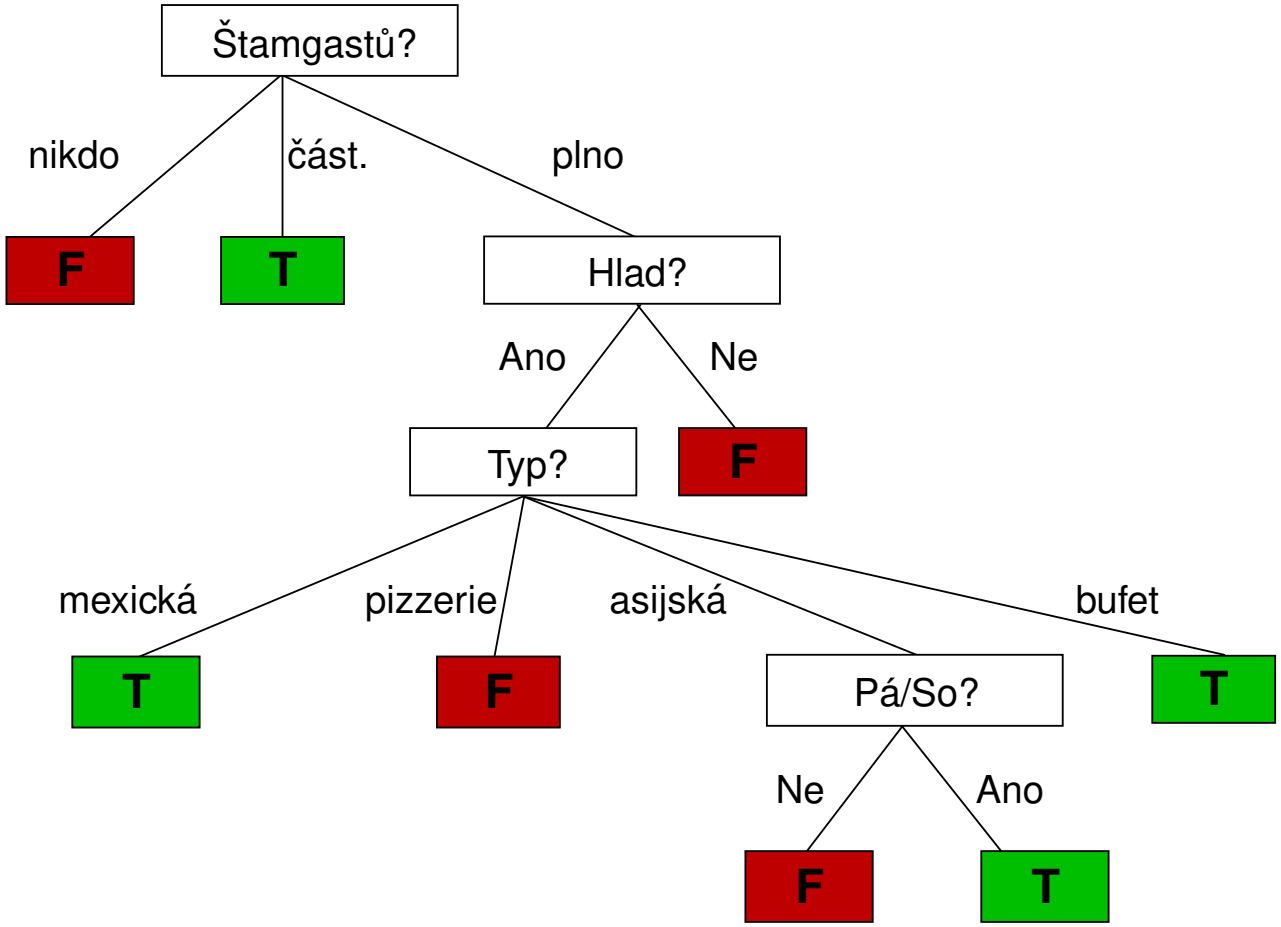
```
% induce_tree( Attributes, Examples, Tree)
induce_tree( _, [], null) :- !.
induce_tree( _, [example( Class,_ ) | Examples], leaf( Class)) :-
    not (member( example( ClassX, _), Examples), ClassX \== Class), !. % ∀ příklady stejné klasifikace
induce_tree( Attributes, Examples, tree( Attribute, SubTrees)) :-
    choose_attribute( Attributes, Examples, Attribute), !,
    del( Attribute, Attributes, RestAtts),
    attribute( Attribute, Values),
    induce_trees( Attribute, Values, RestAtts, Examples, SubTrees).
induce_tree( _, Examples, leaf( ExClasses)) :-      % žádný užitečný atribut, list s stribucí klasifikací
     findall( Class, member( example( Class, _), Examples), ExClasses).

% induce_trees( Att, Values, RestAtts, Examples, SubTrees):
%   najdi podstromy SubTrees pro podmnožiny příkladů Examples podle hodnot (Values) atributu Att
induce_trees( _, [], _, _, [] ).      % No attributes, no subtrees
induce_trees( Att, [Val1 | Vals], RestAtts, Exs, [Val1 : Tree1 | Trees]) :-
    attval_subset( Att = Val1, Exs, ExampleSubset),
    induce_tree( RestAtts, ExampleSubset, Tree1),
    induce_trees( Att, Vals, RestAtts, Exs, Trees).

% attval_subset( Attribute = Value, Examples, Subset):
%   Subset je podmnožina příkladů z Examples, které splňují podmínku Attribute = Value
attval_subset( AttributeValue, Examples, ExampleSubset) :-
    findall( example( Class, Obj),
             (member( example( Class, Obj), Examples), satisfy( Obj, [ AttributeValue])),
             ExampleSubset).
```

Algoritmus IDT – učení formou rozhodovacích stromů pokrač.

```
% satisfy( Object, Description)
satisfy( Object, Conj) :- not (member( Att = Val, Conj), member( Att = ValX, Object), ValX \== Val).

% vybíráme atribut podle " čistoty " množin, na které rozdělí příklady, setof je setřídí podle Impurity
choose_attribute( Atts, Examples, BestAtt) :-
    setof( Impurity/Att, (member( Att, Atts), impurity1(Examples, Att, Impurity)), [MinImpurity/BestAtt|_]).

impurity1( Exs, Att, Imp) :- attribute( Att, AttVals), term_sum( Exs, Att, AttVals, 0, Imp).

% term_sum( Exs, Att, AttVals, PartialSum, Sum) - vážená suma "čistoty" přes ∀ hodnoty atributu Att
term_sum( _, _, [], Sum, Sum).
term_sum( Exs, Att, [Val | Vals], PartSum, Sum) :- length( Exs, N),
    findall( C, (member( example(C,Desc), Exs), satisfy( Desc, [Att=Val])), ExClasses),
    % ExClasses = seznam klasifikací (s opakováním) všech příkladů s Att=Val
    length( ExClasses, NV), NV > 0, !,
    findall( P, (bagof( 1, member( Class, ExClasses), L), length( L, NVC), P is NVC/NV), ClassDistribution),
    gini( ClassDistribution, GiniI),
    NewPartSum is PartSum + GiniI*NV/N,
    term_sum( Exs, Att, Vals, NewPartSum, Sum)
    ; term_sum( Exs, Att, Vals, PartSum, Sum).      % žádné příklady nesplňují Att = Val

% gini( ProbabilityList, GiniIndex) - míra " čistoty ", GiniIndex = Σ_{∀i,j:i≠j} P_i · P_j ≡ 1 - Σ_{∀i} P_i · P_i
gini( Probs, Index) :- square_sum( Probs, 0, SquareSum), Index is 1 - SquareSum.

square_sum( [], S, S).
square_sum( [P | Ps], PartS, S) :- NewPartS is PartS + P*P, square_sum( Ps, NewPartS, S).
```

IDT – VÝSLEDNÝ ROZHODOVACÍ STROM

rozhodovací strom **naučený** z 12-ti příkladů:



podstatně jednodušší než strom “z tabulky příkladů”

Hodnocení úspěšnosti učícího algoritmu

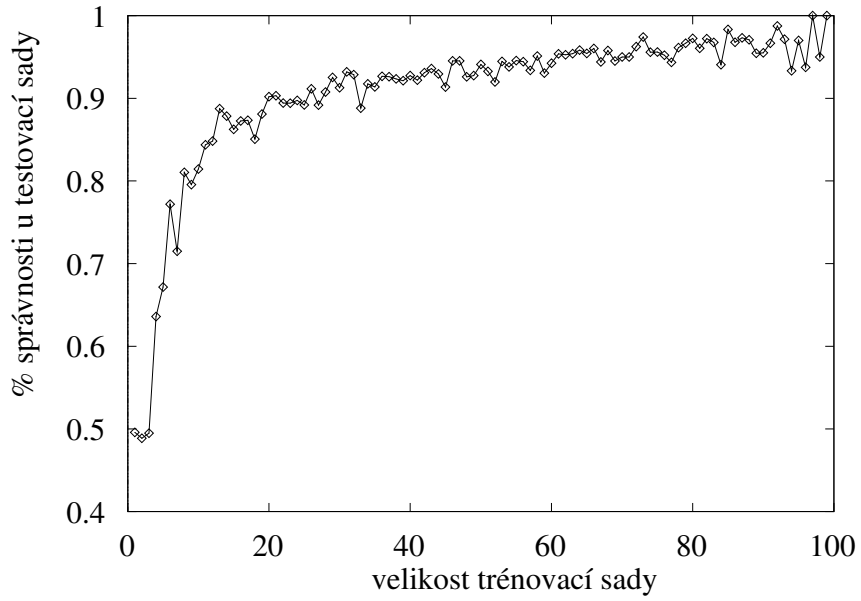
jak můžeme zjistit, zda $h \approx f$?

- dopředu — použít věty Teorie komputačního učení
- po naučení — kontrolou na **jiné trénovací sadě**

používaná **metodologie**:

1. vezmeme velkou množinu příkladů
2. rozdělíme ji na 2 množiny – **trénovací** a **testovací**
3. aplikujeme učící algoritmus na *trénovací* sadu, získáme hypotézu h
4. změříme procento příkladů v *testovací* sadě, které jsou správně klasifikované hypotézou h
5. opakujeme kroky 2–4 pro různé velikosti trénovacích sad a pro náhodně vybrané trénovací sady

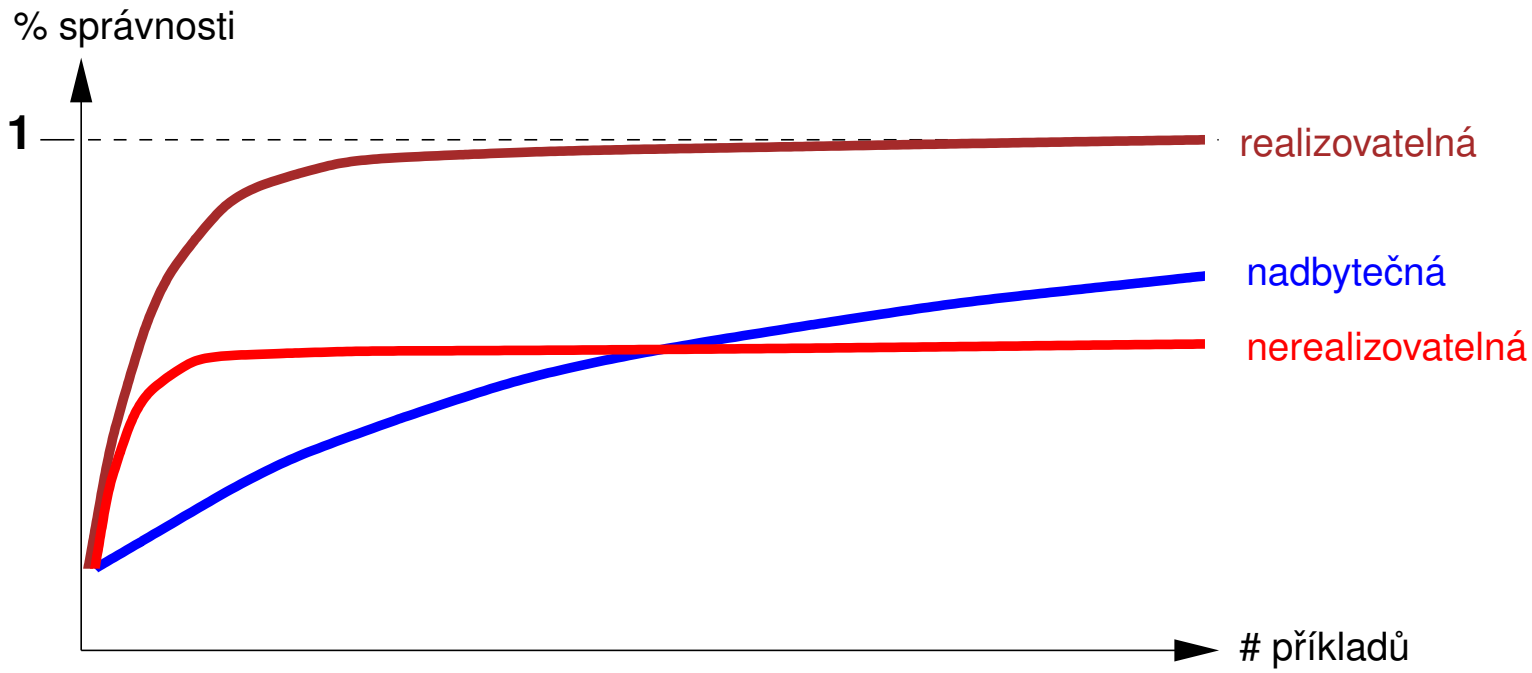
křivka učení – závislost velikosti trénovací sady na úspěšnosti



Hodnocení úspěšnosti učícího algoritmu pokrač.

tvar křivky učení závisí na ➜ je hledaná funkce **realizovatelná** × **nerealizovatelná**
funkce může být nerealizovatelná kvůli
- chybějícím atributům
- omezenému prostoru hypotéz

➜ naopak **nadbytečné expresivitě**
např. množství nerelevantních atributů



Induktivní učení – shrnutí

- učení je potřebné pro **neznámé prostředí** (a líné analytiky ☺)
- učící se agent – **výkonnostní komponenta** a **komponenta učení**
- **metoda** učení závisí na *typu výkonnostní komponenty*, dostupné *zpětné vazbě*, *typu* a *reprezentaci* části, která se má učením zlepšit
- u **učení s dohledem** – cíl je najít nejjednodušší hypotézu přibližně konzistentní s trénovacími příklady
- učení formou rozhodovacích stromů používá **míru informace**
- **kvalita učení** – přesnost odhadu změřená na testovací sadě

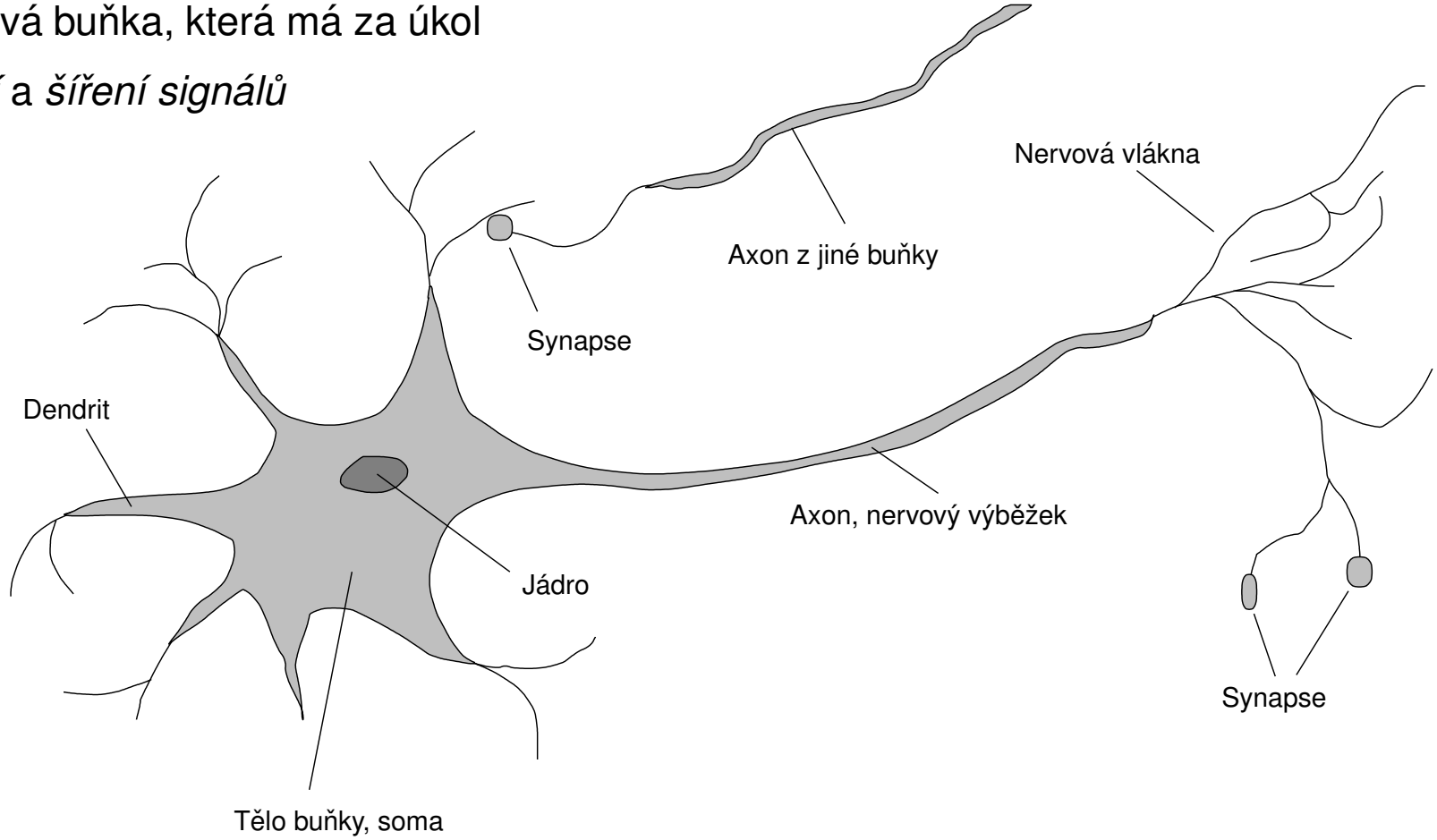
Neuron

mozek – 10^{11} neuronů > 20 typů, 10^{14} synapsí, 1ms–10ms cyklus

nosiče informace – signály = “výkyvy” elektrických potenciálů (se šumem)

neuron – mozková buňka, která má za úkol

sběr, *zpracování* a *šíření signálů*



Počítačový model – neuronové sítě

1943 – McCulloch & Pitts – matematický **model** neuronu

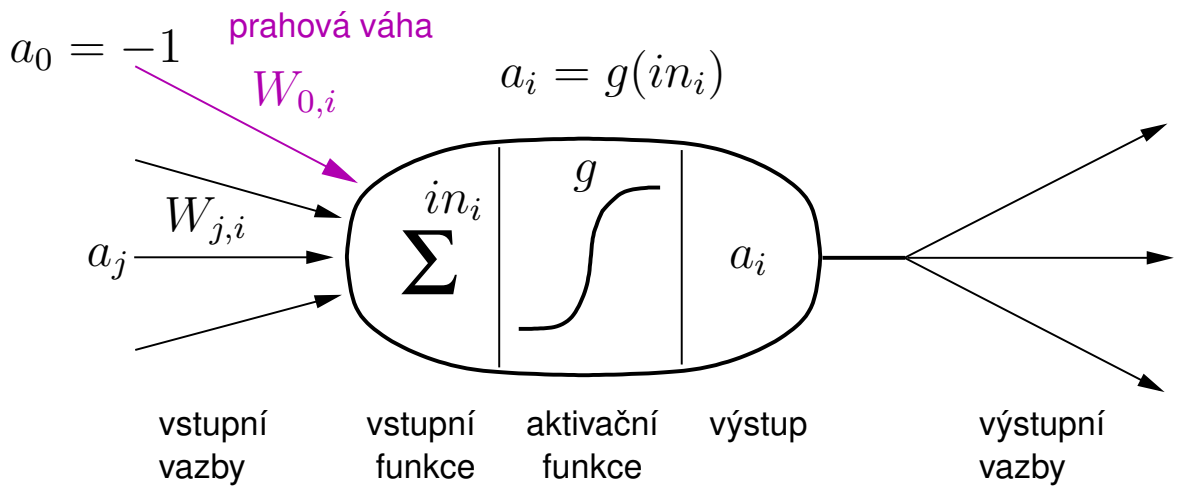
spojené do **neuronové sítě** – mají schopnost **tolerovat šum** ve vstupu a **učit se**

jednotky (*units*) v neuronové síti
- jsou propojeny **vazbami** (*links*)
- vazba z jednotky j do i propaguje **aktivaci** a_j jednotky j
- každá vazba má číselnou **váhu** $W_{j,i}$ (síla+znaménko)

funkce jednotky i:

1. spočítá váženou $\sum$ **vstupů** = in_i
2. aplikuje **aktivační funkci** g
3. tím získá **výstup** a_i

$$a_i = g(in_i) = \sum_j W_{j,i} a_j$$

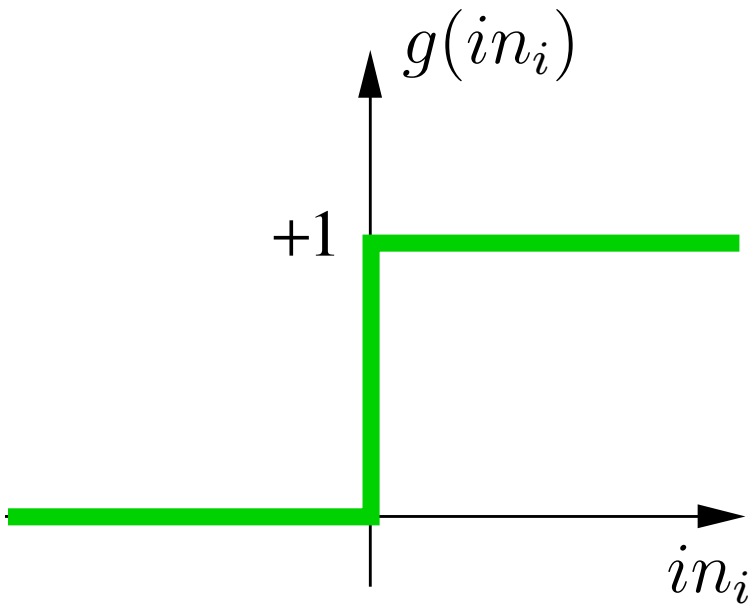


Aktivační funkce

účel aktivační funkce =
- jednotka má být **aktivní** ($\approx +1$) pro pozitivní příklady, jinak **neaktivní** ≈ 0
- aktivace musí být **nelineární**, jinak by celá síť byla lineární

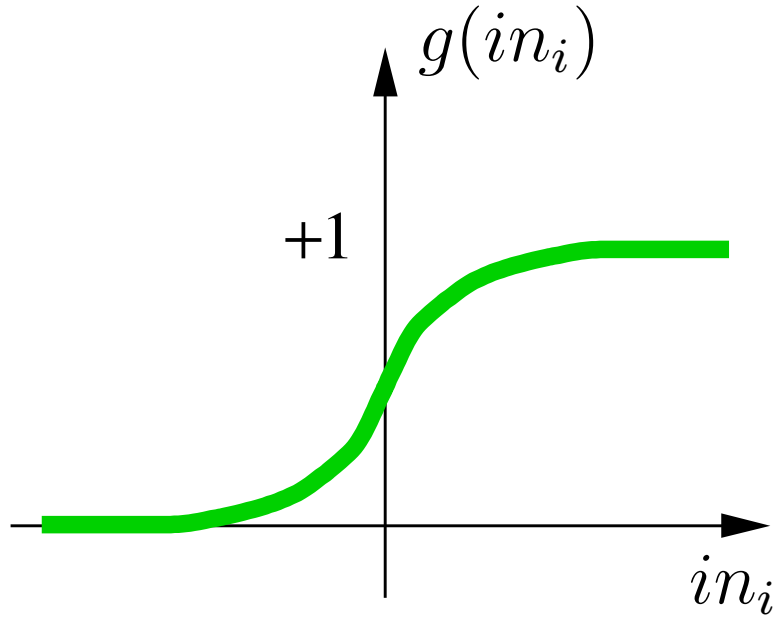
např.

a)



prahová funkce

b)

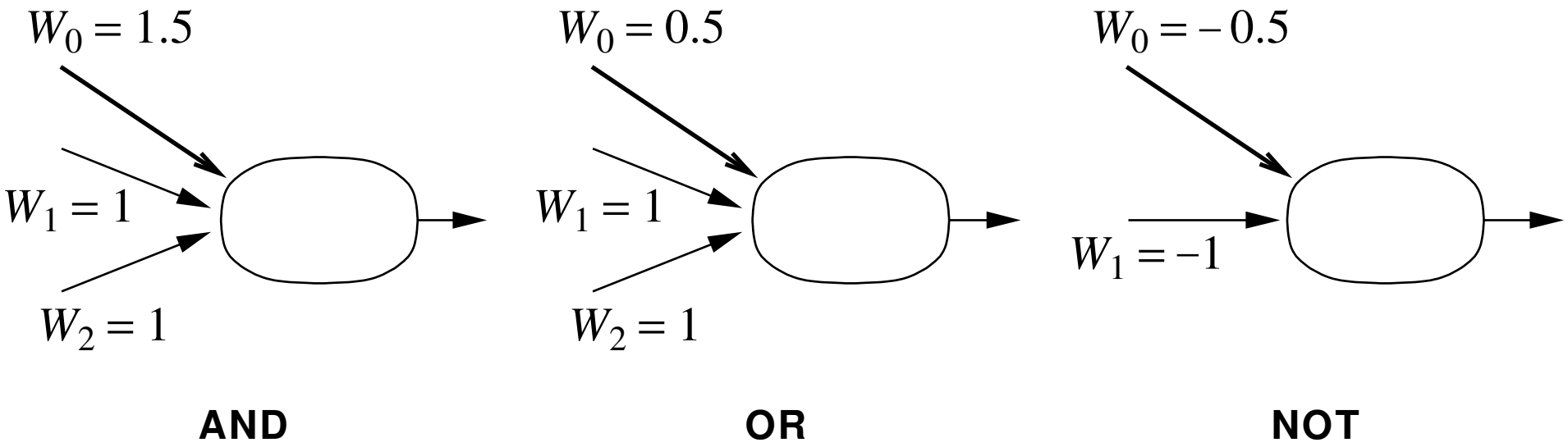


sigmoida $1/(1+e^{-x})$

je derivovatelná – důležité pro učení

změny prahové váhy $W_{0,i}$ nastavují nulovou pozicí – nastavují **práh** aktivace

Logické funkce pomocí neuronové jednotky



jednotka McCulloch & Pitts sama umí implementovat **základní Booleovské funkce**

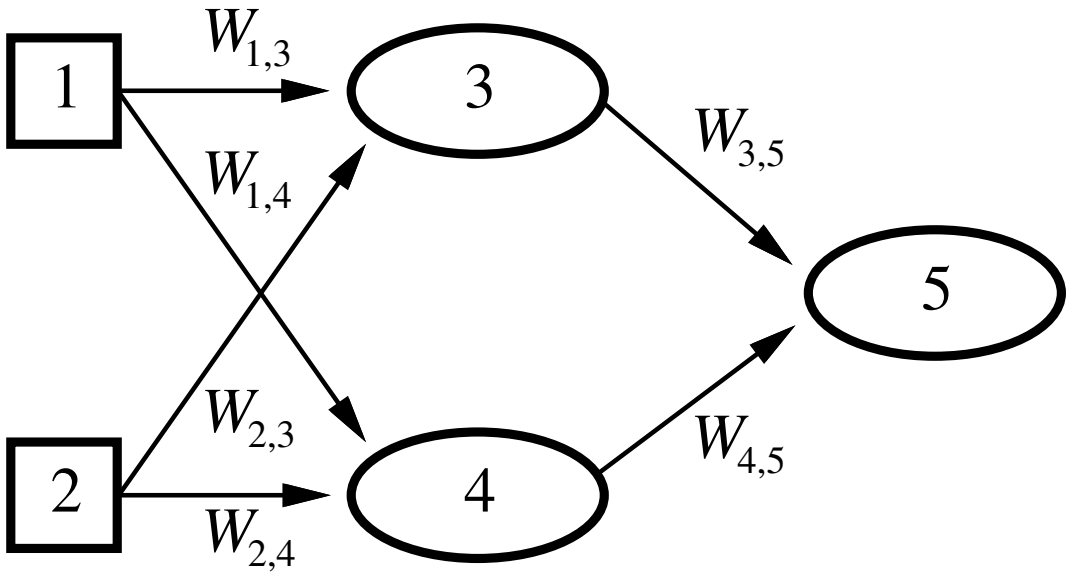
$\Rightarrow$ kombinacemi jednotek do sítě můžeme implementovat **libovolnou Booleovskou funkci**

Struktury neuronových sítí

- **sítě s předním vstupem** (*feed-forward networks*)
  - necyklické
  - implementují funkce
  - nemají vnitřní paměť
- **rekurentní sítě** (*recurrent networks*)
  - cyklické
  - vlastní výstup si berou opět na vstup
  - složitější a schopnější
  - výstup má (zpožděný) vliv na aktivaci = **paměť**
  - Hopfieldovy sítě – symetrické obousměrné vazby; fungují jako *asociativní paměť*
  - Boltzmannovy stroje – pravděpodobnostní aktivační funkce

Příklad sítě s předním vstupem

síť 5-ti jednotek – 2 vstupní jednotky, 1 skrytá vrstva (2 jednotky), 1 výstupní jednotka



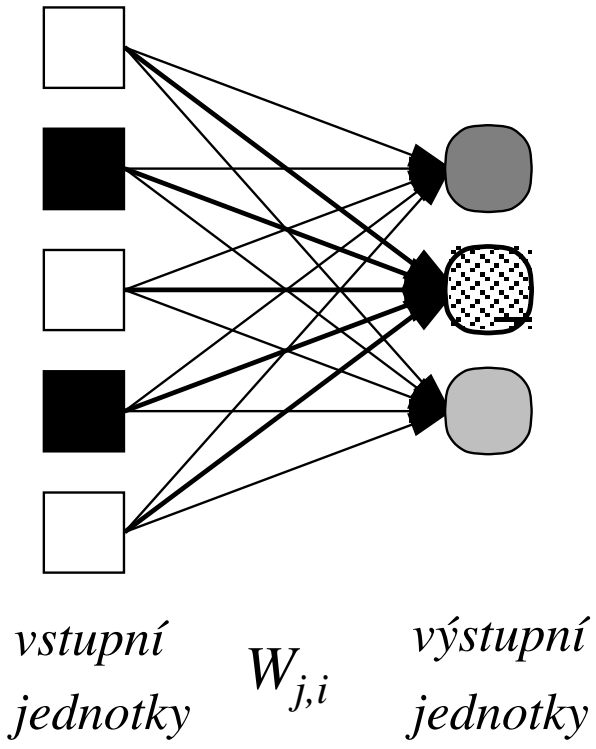
síť s předním vstupem = **parametrizovaná** nelineární funkce vstupu

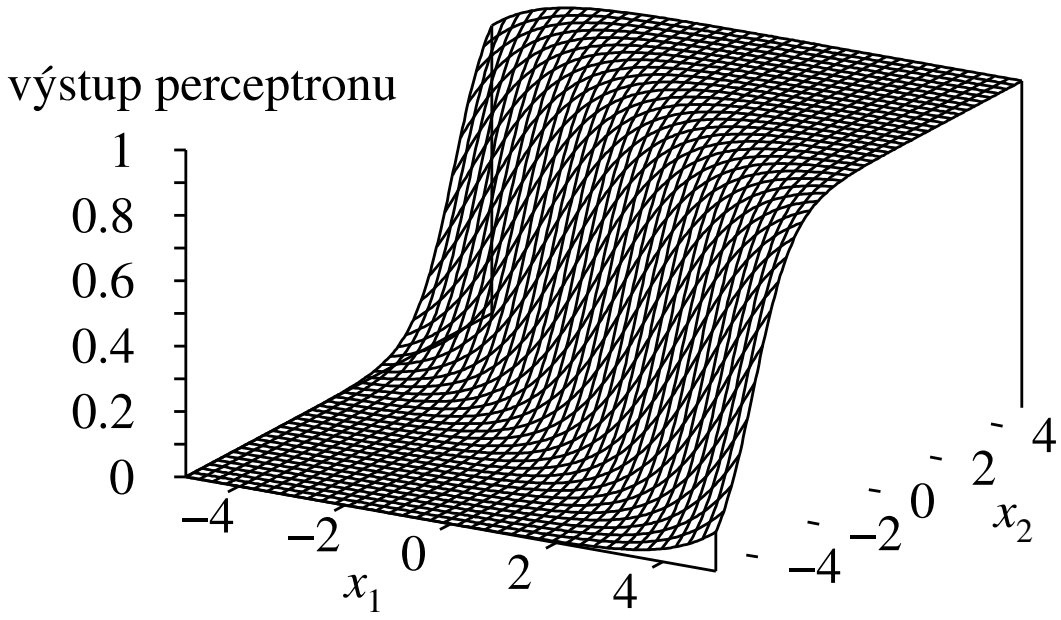
$$\begin{aligned} a_5 &= g(W_{3,5} \cdot a_3 + W_{4,5} \cdot a_4) \\ &= g\big(W_{3,5} \cdot g(W_{1,3} \cdot a_1 + W_{2,3} \cdot a_2) + W_{4,5} \cdot g(W_{1,4} \cdot a_1 + W_{2,4} \cdot a_2)\big) \end{aligned}$$

Jednovrstvá síť – perceptron

perceptron – pro Booleovskou funkci 1 výstupní jednotka

– pro složitější klasifikaci – **více výstupních jednotek**





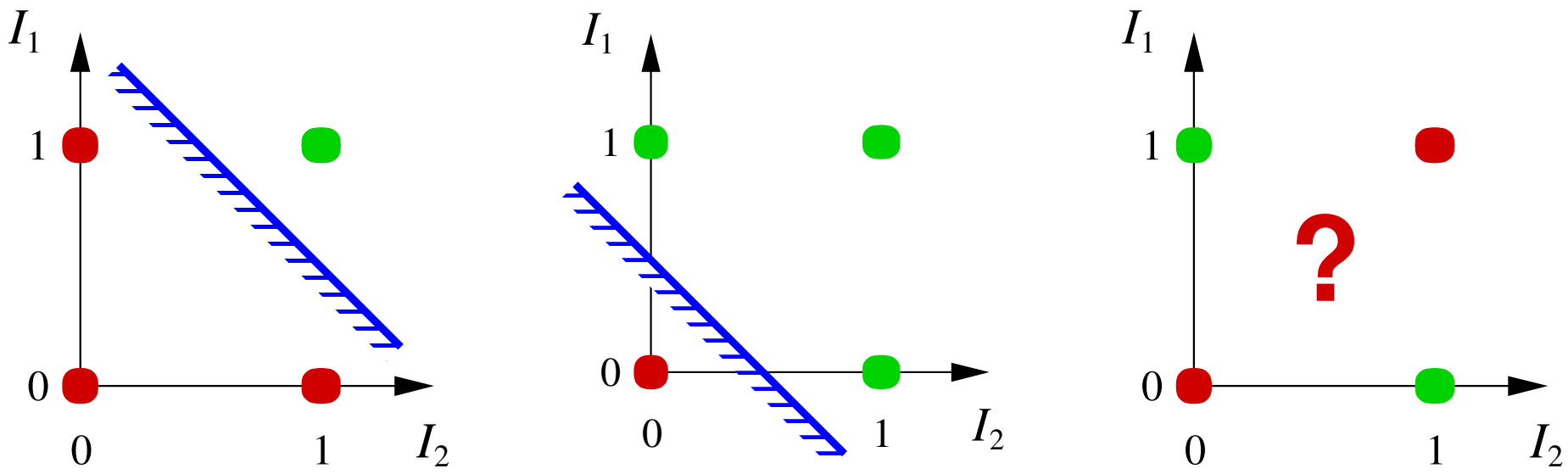
Vyjadřovací síla perceptronu

předpokládejme perceptron s g zvolenou jako prahová funkce (▁▔)

může reprezentovat hodně Booleovských funkcí – AND, OR, NOT, majoritní funkci, ...

$$\sum_j W_j x_j > 0 \quad \text{nebo} \quad \mathbf{W} \cdot \mathbf{x} > 0$$

reprezentuje **lineární separátor** (nadrovina) v prostoru vstupu:



a) I_1 **and** I_2 b) I_1 **or** I_2 c) I_1 **xor** I_2

Učení perceptronu

výhoda perceptronu – existuje jednoduchý **učící algoritmus** pro libovolnou lineárně separabilní funkci

učení perceptronu = upravování vah tak, aby se **snížila chyba** na trénovací sadě

kvadratická chyba E pro příklad se vstupem $\mathbf{x}$ a požadovaným (=správným) výstupem y je

$$E = \frac{1}{2}Err^2 \equiv \frac{1}{2}(y - h_{\mathbf{W}}(\mathbf{x}))^2,$$ kde $h_{\mathbf{W}}(\mathbf{x})$ je (vypočítaný) výstup perceptronu

váhy pro minimální chybu pak hledáme **optimalizačním prohledáváním** spojitého prostoru vah

$$\frac{\partial E}{\partial W_j} = Err \times \frac{\partial Err}{\partial W_j} = Err \times \frac{\partial}{\partial W_j}\big(y - g(\sum_{j=0}^{n} W_j x_j)\big) = -Err \times g'(in) \times x_j$$

pravidlo pro úpravu váhy $W_j \leftarrow W_j + \alpha \times Err \times g'(in) \times x_j$ α... učící konstanta (*learning rate*)

např. $Err = y - h_{\mathbf{W}}(\mathbf{x}) > 0 \quad \Rightarrow$ výstup $h_{\mathbf{W}}(\mathbf{x})$ je moc malý

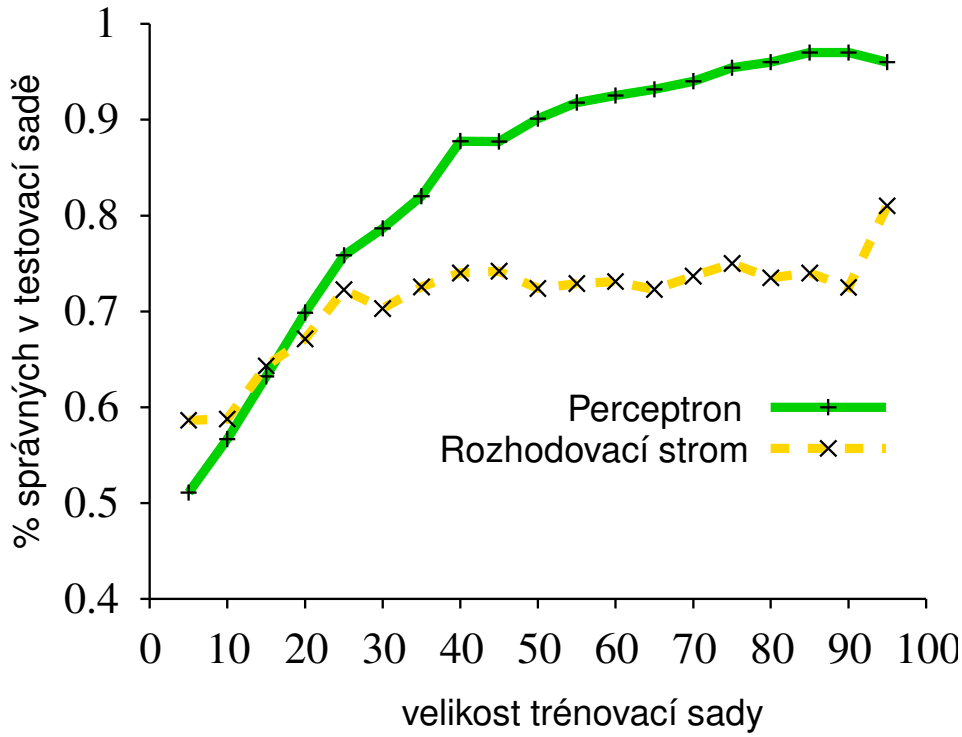
$\Rightarrow$ váhy se musí *zvýšit* pro pozitivní příklady a *snížit* pro negativní

úpravu vah provádíme po každém příkladu $\longrightarrow$ opakovaně až do dosažení **ukončovacího kritéria**

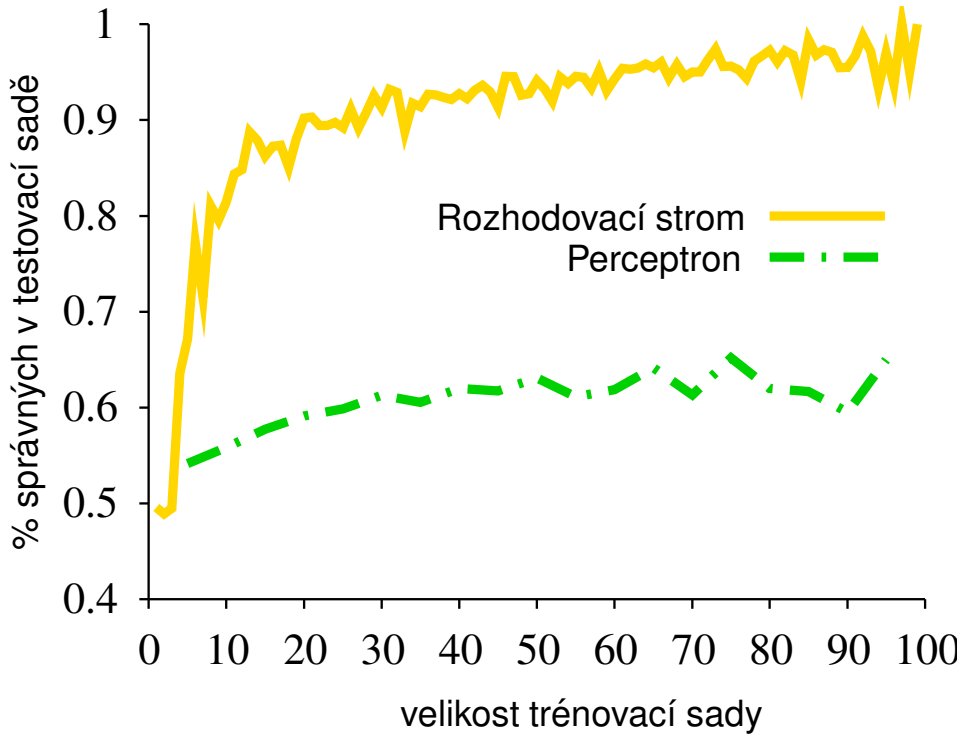
Učení perceptronu pokrač.

učící pravidlo pro perceptron **konverguje ke správné funkci** pro libovolnou **lineárně separabilní** množinu dat

a) učení majoritní funkce



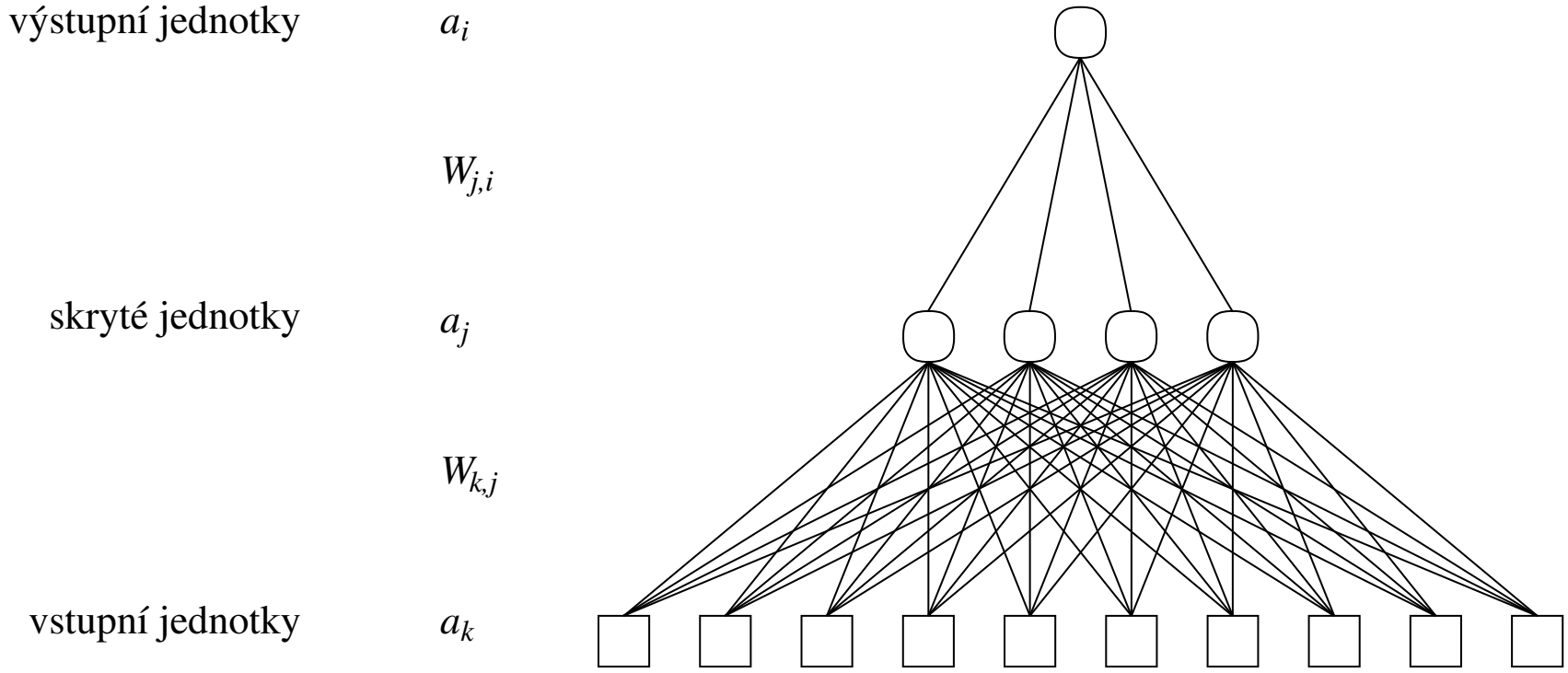
b) učení čekání na volný stůl v restauraci



Vícevrstvé neuronové sítě

vrstvy jsou obvykle **úplně propojené**

počet **skrytých jednotek** je obvykle volen experimentálně



Vyjadřovací síla vícevrstvých sítí

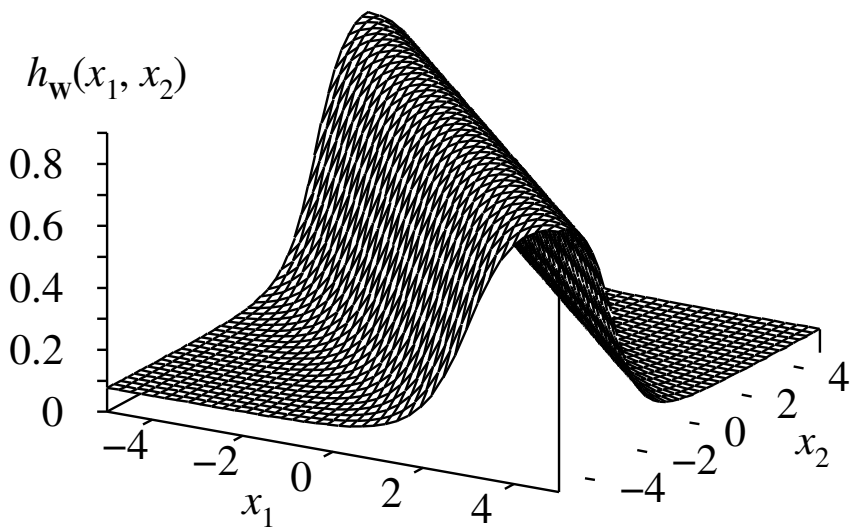
s jednou skrytou vrstvou – všechny spojité funkce

se dvěma skrytými vrstvami – všechny funkce

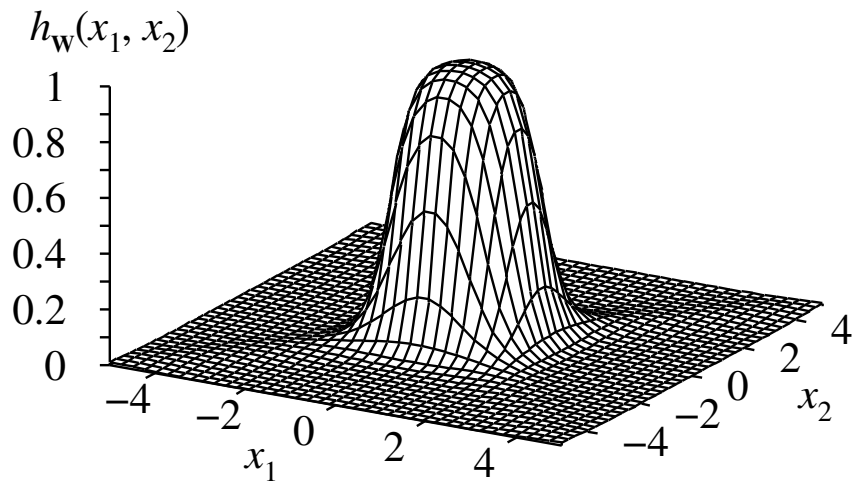
těžko se ovšem pro konkrétní síť zjišťuje její prostor reprezentovatelných funkcí

např.

dvě “opačné” skryté jednotky vytvoří *hřbet*



dva hřbety vytvoří *homoli*



Učení vícevrstvých sítí

pravidla pro úpravu vah:

- **výstupní vrstva** – stejně jako u perceptronu

$$W_{j,i} \leftarrow W_{j,i} + \alpha \times a_j \times \Delta_i \qquad \text{kde} \quad \Delta_i = Err_i \times g'(in_i)$$

- **skryté vrstvy** – **zpětné šíření** (*back-propagation*) chyby z výstupní vrstvy

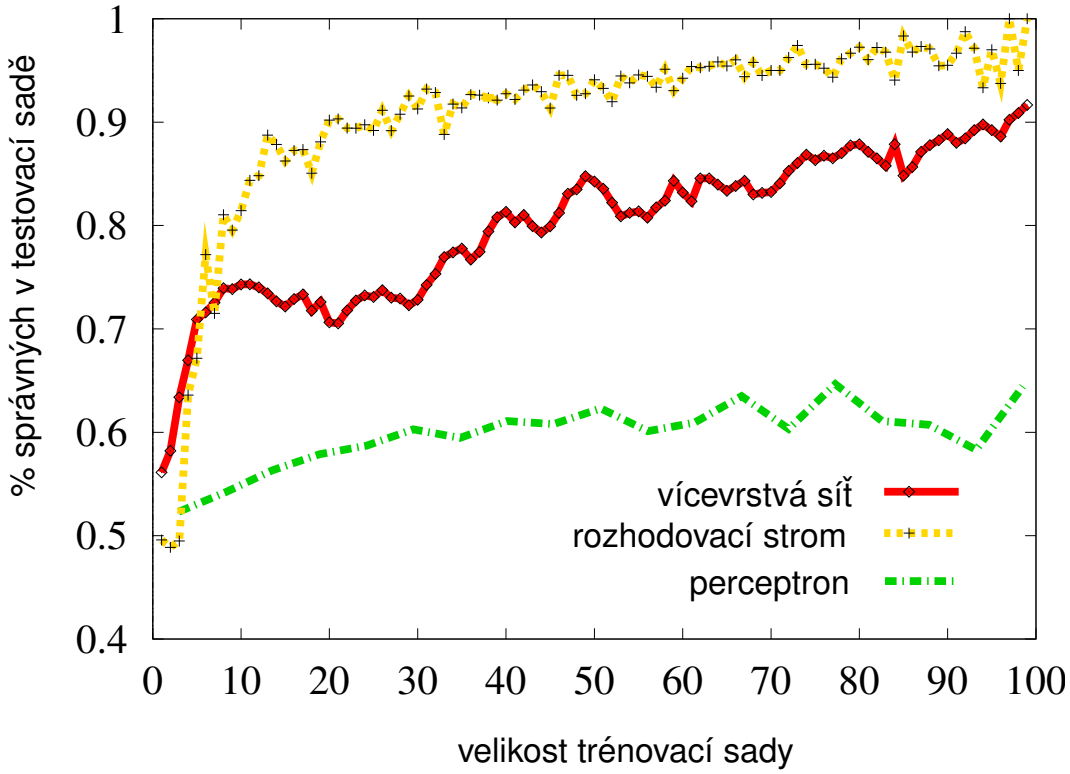
$$W_{k,j} \leftarrow W_{k,j} + \alpha \times a_k \times \Delta_j \qquad \text{kde} \quad \Delta_j = g'(in_j) \sum_i W_{j,i} \Delta_i$$

problémy učení:

- dosažení **lokálního minima** chyby
- příliš **pomalá konvergence**
- přílišné **upnutí** na příklady $\longrightarrow$ neschopnost generalizovat

Učení vícevrstvých sítí pokrač.

vícevrstvá síť se problém čekání na volný stůl v restauraci **učí znatelně líp** než perceptron



Neuronové sítě – shrnutí

- ➜ většina mozků má **velké množství** neuronů; každý **neuron** $\approx$ lineární prahová jednotka (?)
- ➜ **perceptrony** (jednovrstvé sítě) mají **nízkou** vyjadřovací sílu
- ➜ **vícevrstvé sítě** jsou **dostatečně silné**; mohou být trénovány pomocí **zpětného šíření chyby**
- ➜ velké množství reálných aplikací
  - rozpoznávání řeči
  - řízení auta
  - rozpoznávání ručně psaného písma
  - ...