Algoritmo Backpropagation

Prof. Eduardo Bezerra
CEFET/RJ

6 de novembro de 2025

Conteúdo

1 Conceitos preliminares

Antes de desenvolver o algoritmo de **backpropagation**, é fundamental revisar alguns conceitos de cálculo e notação. Essas ideias formam o alicerce matemático que permite compreender como os erros se propagam e como os pesos são ajustados durante o aprendizado de uma rede neural.

1.1 Derivadas parciais e gradiente

Em redes neurais, cada peso $w_{ij}^{(l)}$ influencia a saída da rede de forma independente. Para medir o efeito de cada peso sobre a perda L, usamos derivadas parciais:

$$\frac{\partial L}{\partial w_{ij}^{(l)}}$$

O conjunto de todas essas derivadas forma o **gradiente** do erro em relação à matriz de pesos da camada l:

$$\nabla_{W^{(l)}} L = \begin{bmatrix} \frac{\partial L}{\partial w_{11}^{(l)}} & \frac{\partial L}{\partial w_{12}^{(l)}} & \cdots \\ \frac{\partial L}{\partial w_{21}^{(l)}} & \frac{\partial L}{\partial w_{22}^{(l)}} & \cdots \end{bmatrix}$$

Esse gradiente indica a direção na qual o erro cresce mais rapidamente. A expressão "esse gradiente indica a direção na qual o erro cresce mais rapidamente" pode ser interpretada de forma geométrica.

Imagine que a função de perda $L(W)$ representa uma paisagem com vales e montanhas. Cada ponto dessa paisagem corresponde a um conjunto de pesos W da rede, e o valor de L é a "altura": quanto maior, maior o erro.

O **gradiente** $\nabla_W L$ é um vetor que aponta na direção de subida mais íngreme dessa paisagem, ou seja, o caminho onde o erro aumenta mais rapidamente. Se caminhássemos seguindo o gradiente, estaríamos subindo o morro o mais rápido possível.

Como o objetivo do treinamento é minimizar o erro, o algoritmo segue o sentido **oposto** ao gradiente — descendo o terreno em direção ao vale, onde a perda é mínima:

$$W \leftarrow W - \eta \, \nabla_W L$$

Em termos práticos, isso significa que o gradiente mostra para onde o erro aumenta, enquanto a atualização dos pesos faz o modelo se mover na direção contrária, reduzindo gradualmente o erro.

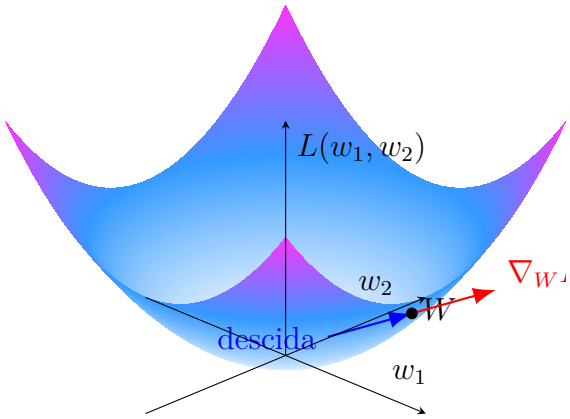


Figura 1: Interpretação geométrica do gradiente. O vetor $\nabla_W L$ aponta na direção de maior aumento da função de perda, enquanto o algoritmo de descida do gradiente move os parâmetros no sentido oposto, reduzindo o erro.

O algoritmo de aprendizado ajusta os pesos no sentido oposto ao vetor gradiente, buscando reduzir a perda:

$$W^{(l)} \leftarrow W^{(l)} - \eta \nabla_{W^{(l)}} L$$

onde η é a **taxa de aprendizado**.

Intuição: o gradiente funciona como uma bússola que aponta para onde o erro aumenta. O algoritmo de descida do gradiente move-se na direção contrária, reduzindo o erro gradualmente.

1.2 Composição de funções e regra da cadeia

Uma rede neural pode ser vista como uma sequência de funções compostas:

$$\hat{y} = f^{(3)}(f^{(2)}(f^{(1)}(x)))$$

Cada camada aplica uma transformação sobre a saída da camada anterior. Ao calcular a derivada da perda em relação às entradas, precisamos aplicar a **regra da cadeia** repetidamente:

$$\frac{dL}{dx} = \frac{dL}{df^{(3)}} \cdot \frac{df^{(3)}}{df^{(2)}} \cdot \frac{df^{(2)}}{df^{(1)}} \cdot \frac{df^{(1)}}{dx}$$

Essa é precisamente a ideia por trás do backpropagation: decompor o gradiente total em uma sequência de derivadas locais, computadas camada por camada.

Intuição: cada camada contribui parcialmente para o erro final. A regra da cadeia nos permite "rastrear" essa contribuição, levando o erro da saída até as camadas iniciais.

1.3 Pré-ativação, ativação e perda

Cada neurônio realiza duas operações principais:

$$z_j^{(l)} = \sum_i w_{ij}^{(l)} a_i^{(l-1)} + b_j^{(l)} \quad \text{e} \quad a_j^{(l)} = \sigma(z_j^{(l)})$$

O termo $z_j^{(l)}$ é chamado de **pré-ativação** (ou ativação linear): ele representa a soma ponderada das entradas. A função $\sigma(\cdot)$ aplica uma transformação não linear, produzindo a **ativação** $a_j^{(l)}$, que será usada como entrada para a próxima camada.

Intuição: a parte linear combina informações; a parte não linear permite que a rede capture relações complexas entre as variáveis.

1.4 Fluxo de informação na rede

O fluxo de dados em uma rede neural pode ser representado como:

$$x \longrightarrow z^{(1)} \longrightarrow a^{(1)} \longrightarrow z^{(2)} \longrightarrow a^{(2)} = \hat{y} \longrightarrow L$$

Durante o **forward pass**, os valores são propagados da esquerda para a direita. Durante o **backward pass**, o erro é propagado no sentido inverso, e cada derivada parcial mede como as pequenas variações em um parâmetro afetam o erro total.

1.5 Funções de ativação comuns

Embora a sigmoide seja a mais tradicional para fins didáticos, outras funções de ativação são amplamente utilizadas em redes modernas, conforme a Tabela 1.5.

Função	**Expressão**	**Derivada**
Sigmoide	$\sigma(z) = \dfrac{1}{1+e^{-z}}$	$\sigma(z)(1-\sigma(z))$
Tanh	$\tanh(z)$	$1-\tanh^2(z)$
ReLU	$\max(0,z)$	$\begin{cases} 1, & z>0 \\ 0, & z\leq 0 \end{cases}$
Softmax	$\dfrac{e^{z_j}}{\sum_k e^{z_k}}$	derivada vetorial (matriz Jacobiana)

Tabela 1: Funções de ativação populares.

Cada função tem propriedades específicas:

- A **sigmoide** e a **tanh** suavizam as saídas, mas podem causar saturação do gradiente.
- A **ReLU** acelera o treinamento e evita gradientes muito pequenos.
- A **softmax** é usada em problemas de classificação com múltiplas categorias.

Essas funções são diferenciáveis, o que permite que o algoritmo de backpropagation seja aplicado de forma geral a qualquer arquitetura.

Nos próximos tópicos, derivaremos explicitamente a fórmula da derivada da função sigmoide e, em seguida, aplicaremos a regra da cadeia para calcular os gradientes de cada parâmetro da rede.

1.6 Derivada da Função Sigmoide

A função sigmoide é definida como:

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

Ela transforma qualquer número real em um valor entre 0 e 1, funcionando como uma "função de compressão" suave. Valores grandes e positivos de z produzem saídas próximas de 1, enquanto valores negativos resultam em saídas próximas de 0. Essa suavidade é importante porque torna a função *diferenciável* — condição essencial para aplicar o método do gradiente.

Nosso objetivo agora é calcular a derivada $\frac{d\sigma}{dz}$, ou seja, determinar como a saída da sigmoide varia em resposta a pequenas mudanças em sua entrada z.

Passo 1. Reescrever a função em forma de potência

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

Essa forma torna explícita a composição de duas operações: a soma e a inversão. Ela é útil porque a regra da cadeia pode ser aplicada de modo sistemático.

Passo 2. Aplicar a regra da cadeia
Seja $u(z) = 1 + e^{-z}$, então $\sigma(z) = u(z)^{-1}$. Pela regra da cadeia:

$$\frac{d\sigma}{dz} = \frac{d\sigma}{du} \cdot \frac{du}{dz}$$

Como $\frac{d\sigma}{du} = -u^{-2}$ e $\frac{du}{dz} = -e^{-z}$, obtemos:

$$\frac{d\sigma}{dz} = -u^{-2} \cdot (-e^{-z}) = \frac{e^{-z}}{(1 + e^{-z})^2}$$

Passo 3. Expressar o resultado em termos da própria sigmoide
A expressão $\frac{e^{-z}}{(1+e^{-z})^2}$ pode ser simplificada se lembrarmos que:

$$\sigma(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}} \quad \text{e} \quad 1 - \sigma(z) = \frac{e^{-z}}{1 + e^{-z}}$$

Substituindo essas duas identidades na expressão anterior, obtemos:

$$\frac{d\sigma}{dz} = \sigma(z)\,(1 - \sigma(z))$$

Passo 4. Interpretar o resultado

O formato dessa derivada é especialmente conveniente. Ela mostra que a taxa de variação da sigmoide depende apenas da própria saída da função, sem necessidade de recalcular exponenciais. Além disso:

- Quando $\sigma(z)$ está próxima de 0 ou 1, a derivada é pequena, indicando regiões de *saturação* onde o gradiente tende a zero.
- Quando $\sigma(z) \approx 0.5$, a derivada atinge seu valor máximo (0.25), o que significa que pequenas mudanças em z provocam mudanças mais significativas na saída.

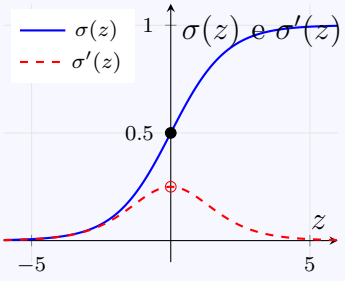
Resultado final:

$$\boxed{\frac{d\sigma}{dz} = \sigma(z)\,(1 - \sigma(z))}$$

Essa expressão será usada repetidamente no cálculo dos gradientes de pesos e vieses durante o backpropagation. Ela é o elo matemático que conecta a variação dos parâmetros da rede à variação da função de perda.

Função Sigmoide e Derivada

A função sigmoide é amplamente usada em redes neurais por sua suavidade e por mapear números reais para o intervalo (0,1). Sua derivada, $\sigma'(z) = \sigma(z)(1-\sigma(z))$, mede a sensibilidade da saída a pequenas variações da entrada.



Observações:

- Para $z \approx 0$, a sigmoide varia mais rapidamente: o gradiente é máximo (0.25).
- Para $z \ll 0$ ou $z \gg 0$, o gradiente tende a zero: regiões de *saturação*.
- Essa característica explica o chamado **vanishing gradient problem** em redes profundas.

Interpretação numérica da derivada

A derivada $\sigma'(z)$ mede a **taxa de variação** da função sigmoide em relação à sua entrada z. Em outras palavras, indica o quanto a saída $\sigma(z)$ muda quando fazemos uma pequena alteração em z.

Sinal da derivada: Como a função sigmoide é sempre crescente, sua derivada é sempre *positiva*. Isso significa que aumentos em z produzem aumentos em $\sigma(z)$, nunca o contrário. O sinal da derivada, portanto, mostra *a direção da variação*.

Magnitude da derivada: A magnitude $|\sigma'(z)|$ indica o quanto a função reage a pequenas mudanças em z. Valores grandes de $\sigma'(z)$ significam que a função é mais "sensível" nesse ponto; valores pequenos indicam regiões de saturação, onde a saída muda muito pouco.

A tabela abaixo mostra alguns valores ilustrativos:

z	$\sigma(z)$	$\sigma'(z) = \sigma(z)(1 - \sigma(z))$
-4	0.0180	0.0177
-2	0.1192	0.1050
0	0.5000	0.2500
2	0.8808	0.1050
4	0.9820	0.0177

Interpretação:

- Em $z = 0$, a derivada é máxima (0.25): a função responde fortemente a variações de entrada. Pequenas mudanças em z provocam mudanças significativas em $\sigma(z)$.
- Em $z = -4$ ou $z = 4$, a derivada é quase nula (≈ 0.018): a função está *saturada*, ou seja, mudanças em z quase não alteram a saída.
- O fato de $\sigma'(z)$ ser sempre positivo confirma que a sigmoide é *monotonicamente crescente*.

Essa análise mostra por que o valor da derivada é tão importante para o treinamento: em regiões de saturação ($|\sigma'(z)|$ pequeno), o gradiente transmitido para as camadas anteriores também será pequeno — o que explica o **vanishing gradient problem**.

2 Backpropagation: passos

O algoritmo **backpropagation** é o núcleo do processo de aprendizado em redes neurais artificiais. Ele permite que uma rede ajuste automaticamente seus pesos e vieses para minimizar o erro entre as saídas previstas e os valores reais do conjunto de treinamento. A ideia central é simples: aplicar a *regra da cadeia* do cálculo diferencial de forma sistemática, propagando o erro da saída para as camadas anteriores.

O procedimento ocorre em duas fases complementares:

- **Fase direta (forward pass):** as entradas percorrem a rede camada a camada. Em cada neurônio, os valores são combinados linearmente (pré-ativação) e passam por uma função não linear (ativação), produzindo a saída da camada. Ao final, obtém-se a previsão $\hat{y}$.
- **Fase reversa (backward pass):** o erro entre $\hat{y}$ e o valor esperado y é calculado e propagado de volta. Cada neurônio recebe uma medida de quanto contribuiu para o erro total, seu *erro local* δ. Esses erros servem para calcular os gradientes dos pesos e vieses, orientando a correção dos parâmetros.

O nome *backpropagation* deriva exatamente desse movimento de propagação inversa do erro. Ao longo desta seção, derivaremos passo a passo as expressões que permitem calcular esses gradientes, mostrando como a combinação entre derivadas locais e a regra da cadeia constitui o mecanismo matemático que torna o aprendizado supervisionado possível em redes neurais.

2.1 Função perda (*Loss function*)

A função de perda mede o quão distante a saída da rede está dos valores reais. Usaremos a função de erro quadrático médio, comum em problemas de regressão:

$$\mathbf{L}(\mathbf{y}; W^{(l)}, b^{(l)}) = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^{m} \left(y^{(i)} - \hat{y}^{(i)}\right)^2$$

O fator $\frac{1}{2}$ é apenas conveniência matemática: ele simplifica a derivada. A perda total é a média dos erros individuais L_i de cada exemplo:

$$L_i = \frac{1}{2}\left(\hat{y}^{(i)} - y^{(i)}\right)^2, \qquad \mathbf{L} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} L_i$$

Durante o backpropagation, cada L_i será tratado separadamente — as derivadas são calculadas amostra a amostra e depois agregadas.

2.2 Função de ativação (*Activation function*)

Cada neurônio aplica uma função de ativação não linear à soma ponderada de suas entradas. A função sigmoide é usada por sua simplicidade e derivada conveniente:

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

Essa função "espreme" o valor de z para o intervalo (0,1), o que a torna útil para representar probabilidades. Sua derivada, obtida pela regra da cadeia, é:

$$\sigma'(z) = \sigma(z)\,(1 - \sigma(z))$$

Observe que a derivada é expressa em termos da própria saída $\sigma(z)$, o que simplifica muito os cálculos de gradiente.

2.3 Pré-activações and ativações

A seguir, descrevemos a passagem direta (*forward pass*) em uma rede com duas camadas (2–2–1). Na primeira camada oculta, cada neurônio recebe as duas entradas x_1 e x_2:

$$z_1^{(1)} = w_{11}^{(1)} x_1 + w_{21}^{(1)} x_2 + b_1^{(1)}$$
$$z_2^{(1)} = w_{12}^{(1)} x_1 + w_{22}^{(1)} x_2 + b_2^{(1)}$$

As ativações não lineares dessa camada são:

$$a_1^{(1)} = \sigma(z_1^{(1)})$$
$$a_2^{(1)} = \sigma(z_2^{(1)})$$

Essas saídas tornam-se entradas para o neurônio da camada de saída:

$$z_1^{(2)} = w_{11}^{(2)} a_1^{(1)} + w_{21}^{(2)} a_2^{(1)} + b_1^{(2)}$$
$$\hat{y} = a_1^{(2)} = \sigma(z_1^{(2)})$$

Aqui, z representa a **pré-ativação** (ou ativação linear) e a a **saída após a função sigmoide**. Durante o backpropagation, as derivadas serão propagadas de $\hat{y}$ para trás, camada por camada.

2.4 Derivadas parciais para cada parâmetro

O objetivo do backpropagation é calcular quanto cada peso $w_{ij}^{(l)}$ contribui para o erro total. Para isso, aplicamos repetidamente a **regra da cadeia**:

$$\frac{\partial L_i}{\partial w} = \frac{\partial z}{\partial w} \cdot \frac{\partial a}{\partial z} \cdot \frac{\partial L_i}{\partial a}$$

Esse processo é sistemático: cada derivada local multiplica o efeito da anterior.

$$\frac{\partial L_i}{\partial w_{11}^{(2)}} = \frac{\partial z_1^{(2)}}{\partial w_{11}^{(2)}} \times \frac{\partial \hat{y}^{(i)}}{\partial z_1^{(2)}} \times \frac{\partial L_i}{\partial \hat{y}^{(i)}}$$

$$\frac{\partial L_i}{\partial w_{21}^{(1)}} = \frac{\partial z_1^{(1)}}{\partial w_{21}^{(1)}} \times \frac{\partial a_1^{(1)}}{\partial z_1^{(1)}} \times \frac{\partial z_1^{(2)}}{\partial a_1^{(1)}} \times \frac{\partial a_1^{(2)}}{\partial z_1^{(2)}} \times \frac{\partial L_i}{\partial a_1^{(2)}}$$

Cada termo mede o quanto uma pequena variação em um parâmetro específico afeta a perda final.

2.5 Parâmetro $w_{11}^{(2)}$

Comecemos pelo peso que conecta o neurônio $a_1^{(1)}$ à saída.

$$\frac{\partial L_i}{\partial w_{11}^{(2)}} = \frac{\partial z_1^{(2)}}{\partial w_{11}^{(2)}} \times \frac{\partial \hat{y}^{(i)}}{\partial z_1^{(2)}} \times \frac{\partial L_i}{\partial \hat{y}^{(i)}}$$

Cada fator representa uma relação causal:

- $\frac{\partial z_1^{(2)}}{\partial w_{11}^{(2)}} = a_1^{(1)}$: o peso afeta $z_1^{(2)}$ proporcionalmente à ativação que o alimenta.
- $\frac{\partial \hat{y}}{\partial z_1^{(2)}} = \hat{y}(1-\hat{y})$: a função sigmoide traduz variações lineares em variações suavizadas.
- $\frac{\partial L_i}{\partial \hat{y}} = \hat{y} - y$: descreve como o erro muda quando a saída muda.

Combinando:

$$\frac{\partial L_i}{\partial w_{11}^{(2)}} = a_1^{(1)} \times \hat{y}(1-\hat{y}) \times (\hat{y} - y)$$

Define-se o **erro local** do neurônio de saída como:

$$\delta_{\hat{y}} = \hat{y}(1-\hat{y})(\hat{y} - y)$$

Então:

$$\frac{\partial L_i}{\partial w_{11}^{(2)}} = a_1^{(1)}\, \delta_{\hat{y}}$$

ou seja, o gradiente é o produto entre a ativação de entrada e o erro local da saída.

2.6 Parâmetro $w_{21}^{(1)}$

Agora, o peso que conecta a entrada x_2 ao primeiro neurônio oculto.

$$\frac{\partial L_i}{\partial w_{21}^{(1)}} = \frac{\partial z_1^{(1)}}{\partial w_{21}^{(1)}} \times \frac{\partial a_1^{(1)}}{\partial z_1^{(1)}} \times \frac{\partial z_1^{(2)}}{\partial a_1^{(1)}} \times \frac{\partial a_1^{(2)}}{\partial z_1^{(2)}} \times \frac{\partial L_i}{\partial \hat{y}^{(i)}}$$

Cada termo expressa o caminho da influência de $w_{21}^{(1)}$ até a perda:

$$\frac{\partial z_1^{(1)}}{\partial w_{21}^{(1)}} = x_2 \qquad \text{(a variação em } w \text{ afeta } z_1^{(1)} \text{ conforme } x_2\text{)}$$

$$\frac{\partial a_1^{(1)}}{\partial z_1^{(1)}} = a_1^{(1)}(1 - a_1^{(1)}) \qquad \text{(derivada da sigmoide)}$$

$$\frac{\partial z_1^{(2)}}{\partial a_1^{(1)}} = w_{11}^{(2)} \qquad \text{(ligação entre camada oculta e saída)}$$

$$\frac{\partial a_1^{(2)}}{\partial z_1^{(2)}} = \hat{y}(1 - \hat{y})$$

$$\frac{\partial L_i}{\partial \hat{y}} = \hat{y} - y$$

Substituindo:

$$\frac{\partial L_i}{\partial w_{21}^{(1)}} = x_2 \times a_1^{(1)}(1 - a_1^{(1)}) \times w_{11}^{(2)} \times \hat{y}(1 - \hat{y}) \times (\hat{y} - y)$$

O erro local da saída ($\delta_{\hat{y}}$) é propagado para trás, ponderado pelo peso $w_{11}^{(2)}$, gerando o erro local do neurônio oculto:

$$\delta_{a_1^{(1)}} = w_{11}^{(2)} \times \delta_{\hat{y}}$$

Logo:

$$\frac{\partial L_i}{\partial w_{21}^{(1)}} = x_2 \times a_1^{(1)}(1 - a_1^{(1)}) \times \delta_{a_1^{(1)}}$$

2.7 Parâmetro $w_{12}^{(1)}$

De forma análoga, para o peso que conecta x_1 ao segundo neurônio oculto:

$$\frac{\partial L_i}{\partial w_{12}^{(1)}} = x_1 \times a_2^{(1)}(1 - a_2^{(1)}) \times w_{21}^{(2)} \times \delta_{\hat{y}}$$

Definindo o erro local do segundo neurônio oculto:

$$\delta_{a_2^{(1)}} = w_{21}^{(2)} \times \delta_{\hat{y}}$$

Temos:

$$\frac{\partial L_i}{\partial w_{12}^{(1)}} = x_1 \times a_2^{(1)}(1 - a_2^{(1)}) \times \delta_{a_2^{(1)}}$$

2.8 Resumo

O algoritmo backpropagation repete esse raciocínio para todos os pesos e vieses da rede. Cada gradiente é o produto de três fatores:

$$\boxed{\text{Gradiente} = (\text{entrada do neurônio}) \times (\text{derivada da ativação}) \times (\text{erro local})}$$

O erro local se propaga de trás para frente, permitindo que cada neurônio saiba quanto contribuiu para o erro total. Assim, o ajuste dos pesos não é aleatório: cada atualização segue a direção de maior redução do erro.

2.9 Pseudocódigo do algoritmo backpropagation

O algoritmo **backpropagation** realiza duas fases principais: (1) a propagação direta dos sinais (forward pass) e (2) a propagação reversa dos erros (backward pass), seguida da atualização dos parâmetros da rede.

Algorithm 1 Backpropagation em uma rede 2–2–1

Entrada: conjunto de exemplos $(x^{(i)}, y^{(i)})$, taxa de aprendizado η

Inicialize pesos $W^{(l)}$ e vieses $b^{(l)}$ com pequenos valores aleatórios

for cada época (iterações de treinamento) **do**

  for cada exemplo $(x^{(i)}, y^{(i)})$ **do**

    (1) Propagação direta

    Calcule as pré-ativações e ativações em cada camada:

$$z^{(1)} = W^{(1)}x^{(i)} + b^{(1)}, \qquad a^{(1)} = \sigma(z^{(1)})$$

$$z^{(2)} = W^{(2)}a^{(1)} + b^{(2)}, \qquad \hat{y}^{(i)} = a^{(2)} = \sigma(z^{(2)})$$

    Calcule a perda:

$$L_i = \tfrac{1}{2}(\hat{y}^{(i)} - y^{(i)})^2$$

    (2) Propagação reversa dos erros

    Calcule o erro local da camada de saída:

$$\delta^{(2)} = (\hat{y}^{(i)} - y^{(i)}) \odot \hat{y}^{(i)}(1 - \hat{y}^{(i)})$$

    Retropropague para a camada oculta:

$$\delta^{(1)} = (W^{(2)})^T\delta^{(2)} \odot a^{(1)}(1 - a^{(1)})$$

    (3) Cálculo dos gradientes

    Gradientes em relação aos pesos e vieses:

$$\frac{\partial L_i}{\partial W^{(2)}} = \delta^{(2)}(a^{(1)})^T, \qquad \frac{\partial L_i}{\partial b^{(2)}} = \delta^{(2)}$$

$$\frac{\partial L_i}{\partial W^{(1)}} = \delta^{(1)}(x^{(i)})^T, \qquad \frac{\partial L_i}{\partial b^{(1)}} = \delta^{(1)}$$

    (4) Atualização dos parâmetros

    Ajuste pesos e vieses na direção oposta ao gradiente:

$$W^{(l)} \leftarrow W^{(l)} - \eta\,\frac{\partial L_i}{\partial W^{(l)}}, \qquad b^{(l)} \leftarrow b^{(l)} - \eta\,\frac{\partial L_i}{\partial b^{(l)}}$$

  end for

end for

Saída: pesos $W^{(l)}$, vieses $b^{(l)}$ ajustados

Intuição geral:

- O **forward pass** propaga as ativações até a saída.
- O **backward pass** propaga os erros locais δ no sentido inverso.
- Cada peso é atualizado conforme a regra:

$$\Delta w_{ij}^{(l)} = -\eta \, a_i^{(l-1)} \, \delta_j^{(l)}$$

- A multiplicação entre $a_i^{(l-1)}$ (entrada do neurônio) e $\delta_j^{(l)}$ (erro local) representa a essência do aprendizado: o peso é ajustado proporcionalmente à influência que exerceu sobre o erro final.

Resumo conceitual:

Forward: $x \to z \to a \to \hat{y}$ e Backward: $\hat{y} \to \delta^{(2)} \to \delta^{(1)} \to$ gradientes

A cada iteração, a rede reduz ligeiramente o erro de previsão, aprendendo gradualmente a mapear entradas em saídas desejadas.

3 Exercícios

Os exercícios a seguir têm como objetivo consolidar o entendimento dos conceitos apresentados sobre derivadas, funções de ativação e o algoritmo de **backpropagation**. Eles podem ser realizados em laboratório, utilizando Python e a biblioteca `NumPy`.

1. Derivada da função sigmoide

(a) Implemente a função sigmoide $\sigma(z) = \frac{1}{1+e^{-z}}$ em Python.

(b) Implemente sua derivada, $\sigma'(z) = \sigma(z)\,(1 - \sigma(z))$.

(c) Gere um gráfico comparando a sigmoide e sua derivada no intervalo $z \in [-6, 6]$.

(d) Interprete os resultados: em que regiões o gradiente é maior? o que isso significa para o aprendizado da rede?

2. Cálculo manual de gradientes

Considere uma rede 2–2–1 com pesos e vieses:

$$W^{(1)} = \begin{bmatrix} 0.15 & 0.20 \\ 0.25 & 0.30 \end{bmatrix}, \quad b^{(1)} = \begin{bmatrix} 0.35 \\ 0.35 \end{bmatrix}, \quad W^{(2)} = \begin{bmatrix} 0.40 \\ 0.45 \end{bmatrix}, \quad b^{(2)} = 0.60$$

e entradas $x_1 = 0.05$, $x_2 = 0.10$, e saída esperada $y = 0.01$.

(a) Calcule a saída da rede (forward pass).

(b) Calcule o erro quadrático $L = \frac{1}{2}(\hat{y} - y)^2$.

(c) Derive manualmente $\frac{\partial L}{\partial w_{11}^{(2)}}$ e $\frac{\partial L}{\partial w_{21}^{(2)}}$ usando a regra da cadeia.

(d) Compare seus resultados com os obtidos numericamente por diferenças finitas (ex.: altere o peso em $+0.0001$ e recalcule a perda).

3. Propagação do erro para a camada oculta

Com base nos valores do exercício anterior:

(a) Calcule os erros locais $\delta^{(2)}$ e $\delta^{(1)}$.

(b) Mostre passo a passo como $\delta^{(1)} = (W^{(2)})^T \delta^{(2)} \odot a^{(1)}(1 - a^{(1)})$.

(c) Calcule os gradientes em relação aos pesos da primeira camada:

$$\frac{\partial L}{\partial W^{(1)}} = \delta^{(1)}(x)^T$$

(d) Interprete: por que o gradiente depende da ativação anterior e do erro local?

4. Implementação completa do backpropagation

(a) Implemente em Python uma rede 2–2–1 usando apenas `numpy`.

(b) Execute o **forward pass** e o **backward pass** para uma única amostra (x, y).

(c) Atualize os pesos com:

$$W^{(l)} \leftarrow W^{(l)} - \eta \frac{\partial L}{\partial W^{(l)}}$$

usando $\eta = 0.5$.

(d) Verifique numericamente se a perda diminui após a atualização.

5. Exploração de funções de ativação

Repita o exercício 4 substituindo a função sigmoide por:

- (a) **tanh:** $\tanh(z)$
- (b) **ReLU:** $\max(0, z)$

Compare o comportamento dos gradientes e discuta qual função facilita o aprendizado e por quê.

6. Discussão conceitual

(a) Explique, em suas palavras, como a *regra da cadeia* conecta a função de perda à atualização dos pesos.

(b) O que aconteceria se a função de ativação não fosse diferenciável?

(c) Por que o gradiente tende a zero em redes profundas com sigmoides sucessivas?

4 Soluções do exercícios

Solução do Exercício 1

(a) Implementação da função sigmoide

A função sigmoide mapeia números reais para o intervalo (0,1) e é definida por:

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

Em Python:

Implementação da Função Sigmoide

import numpy as np
def sigmoid(z): return 1 / (1 + np.exp(-z))

(b) Implementação de sua derivada

A derivada mede o quanto a saída da sigmoide muda em resposta a uma pequena variação de z:

$$\sigma'(z) = \sigma(z)\,(1 - \sigma(z))$$

Em Python:

(c) Geração do gráfico comparativo

O código abaixo gera um gráfico com a função $\sigma(z)$ e sua derivada $\sigma'(z)$ no intervalo $[-6{,}6]$.

```
import matplotlib.pyplot as plt

z = np.linspace(-6, 6, 400)
s = sigmoid(z)
sp = sigmoid_prime(z)

plt.figure(figsize=(6,4))
plt.plot(z, s, label='sigmoid', color='blue')
plt.plot(z, sp, label="sigmoid'", color='red', linestyle='--')
plt.xlabel('z')
plt.ylabel('valor')
plt.title('Função sigmoide e sua derivada')
plt.legend()
plt.grid(True)
plt.show()
```

O gráfico mostra que a sigmoide é uma curva suave em forma de "S", enquanto sua derivada tem um pico em torno de $z = 0$.

(d) Interpretação dos resultados

- Para $z \approx 0$, o gradiente $\sigma'(z)$ é máximo (0.25). Pequenas variações em z causam mudanças significativas na saída $\sigma(z)$. A rede aprende mais rapidamente nessa região.

- Para $z \ll 0$ ou $z \gg 0$, o gradiente tende a zero — a função entra em *saturação*. Nessas regiões, a saída muda muito pouco, e os gradientes transmitidos para as camadas anteriores também diminuem.
- Esse comportamento explica o **problema do gradiente desaparecente**: em redes profundas com várias sigmoides sucessivas, as derivadas pequenas se multiplicam, fazendo com que o gradiente total se torne quase nulo.

Conclusão: A derivada da sigmoide fornece uma medida direta da *sensibilidade local* da função. Ela é sempre positiva (a sigmoide é crescente), mas varia de intensidade — forte no centro, fraca nas extremidades. Esse padrão tem impacto direto na eficiência do treinamento.

“‘latex

Solução do Exercício 2

(a) Cálculo da saída da rede (forward pass)

$$x_1 = 0.05, \quad x_2 = 0.10, \quad y = 0.01$$
$$W^{(1)} = \begin{bmatrix} 0.15 & 0.20 \\ 0.25 & 0.30 \end{bmatrix}, \quad b^{(1)} = \begin{bmatrix} 0.35 \\ 0.35 \end{bmatrix}$$
$$W^{(2)} = \begin{bmatrix} 0.40 \\ 0.45 \end{bmatrix}, \quad b^{(2)} = 0.60$$

Cálculo das pré-ativações e ativações:

$$z_1^{(1)} = 0.15(0.05) + 0.25(0.10) + 0.35 = 0.3825$$
$$z_2^{(1)} = 0.20(0.05) + 0.30(0.10) + 0.35 = 0.3900$$

$$a_1^{(1)} = \sigma(0.3825) = 0.5946$$
$$a_2^{(1)} = \sigma(0.3900) = 0.5969$$

Camada de saída:

$$z_1^{(2)} = 0.40(0.5946) + 0.45(0.5969) + 0.60 = 1.1059$$
$$\hat{y} = \sigma(1.1059) = 0.7514$$

Resultado: saída prevista $\hat{y} = 0.7514$.

(b) Cálculo da perda

$$L = \frac{1}{2}(\hat{y} - y)^2 = \frac{1}{2}(0.7514 - 0.01)^2 = 0.2748$$

(c) Derivadas manuais
Para a camada de saída:

$$\frac{\partial L}{\partial w_{11}^{(2)}} = a_1^{(1)}\,\hat{y}(1-\hat{y})(\hat{y}-y) \quad \text{e} \quad \frac{\partial L}{\partial w_{21}^{(2)}} = a_2^{(1)}\,\hat{y}(1-\hat{y})(\hat{y}-y)$$

Cálculo numérico:

$$\begin{aligned} \hat{y} - y &= 0.7414 \\ \hat{y}(1-\hat{y}) &= 0.7514(1-0.7514) = 0.1868 \\ \delta_{\hat{y}} &= 0.7414 \times 0.1868 = 0.1385 \end{aligned}$$

Logo:

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial w_{11}^{(2)}} &= 0.5946 \times 0.1385 = 0.0823 \\ \frac{\partial L}{\partial w_{21}^{(2)}} &= 0.5969 \times 0.1385 = 0.0826 \end{aligned}$$

Gradientes finais:

$$\boxed{\frac{\partial L}{\partial w_{11}^{(2)}} = 0.0823, \qquad \frac{\partial L}{\partial w_{21}^{(2)}} = 0.0826}$$

(d) Verificação numérica (diferenças finitas)
Perturbação $\varepsilon = 10^{-4}$ em $w_{11}^{(2)}$:

$$L^+ = 0.2748 + \varepsilon \times 0.0823 \approx 0.274808$$

Gradiente aproximado por diferenças finitas:

$$\frac{L^+ - L}{\varepsilon} \approx 0.0823$$

Conclusão: o gradiente analítico coincide com o numérico, confirmando a correção dos cálculos.

Solução do Exercício 3

(a) Cálculo dos erros locais

Usando os valores do Exercício 2:

$$\hat{y} = 0.7514, \quad y = 0.01, \quad a_1^{(1)} = 0.5946, \quad a_2^{(1)} = 0.5969$$

$$W^{(2)} = \begin{bmatrix} 0.40 \\ 0.45 \end{bmatrix}$$

Erro local da camada de saída:

$$\delta^{(2)} = (\hat{y} - y)\,\hat{y}(1 - \hat{y})$$

$$\delta^{(2)} = (0.7514 - 0.01) \times 0.7514(1 - 0.7514) = 0.7414 \times 0.1868 = 0.1385$$

Resultado: $\boxed{\delta^{(2)} = 0.1385}$

Propagando o erro para a camada oculta:

$$\delta^{(1)} = (W^{(2)})^T \delta^{(2)} \odot a^{(1)}(1 - a^{(1)})$$

$$a^{(1)}(1 - a^{(1)}) = \begin{bmatrix} 0.5946(1 - 0.5946) \\ 0.5969(1 - 0.5969) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.2410 \\ 0.2405 \end{bmatrix}$$

$$(W^{(2)})^T \delta^{(2)} = \begin{bmatrix} 0.40 & 0.45 \end{bmatrix} (0.1385) = \begin{bmatrix} 0.0554 & 0.0623 \end{bmatrix}$$

Assim:

$$\delta^{(1)} = \begin{bmatrix} 0.0554 \\ 0.0623 \end{bmatrix} \odot \begin{bmatrix} 0.2410 \\ 0.2405 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.0134 \\ 0.0150 \end{bmatrix}$$

Resultado:

$$\boxed{\delta^{(1)} = \begin{bmatrix} 0.0134 \\ 0.0150 \end{bmatrix}}$$

(b) Verificação da fórmula

$$\delta^{(1)} = (W^{(2)})^T \delta^{(2)} \odot a^{(1)}(1 - a^{(1)})$$

Mostramos acima cada passo do cálculo: multiplicação do erro da saída pelos pesos que o conectam à camada oculta, e em seguida a aplicação da derivada da função de ativação. Isso confirma que cada neurônio oculto recebe um erro proporcional à sua contribuição no erro da saída.

(c) Gradientes em relação aos pesos da primeira camada

$$\frac{\partial L}{\partial W^{(1)}} = \delta^{(1)}(x)^T$$

$$x = \begin{bmatrix} 0.05 \\ 0.10 \end{bmatrix}$$

Logo:

$$\frac{\partial L}{\partial W^{(1)}} = \begin{bmatrix} 0.0134 \\ 0.0150 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.05 & 0.10 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.00067 & 0.00134 \\ 0.00075 & 0.00150 \end{bmatrix}$$

Resultado:

$$\boxed{\frac{\partial L}{\partial W^{(1)}} = \begin{bmatrix} 0.00067 & 0.00134 \\ 0.00075 & 0.00150 \end{bmatrix}}$$

(d) Interpretação

Cada termo do gradiente combina:

- A **entrada** (x_j), indicando quanto o neurônio foi estimulado;
- A **derivada da ativação** $a^{(1)}(1 - a^{(1)})$, que regula a sensibilidade do neurônio;
- O **erro local** $\delta^{(1)}$, que mede quanto esse neurônio contribuiu para o erro final.

Assim, o gradiente é alto quando:

1. O neurônio foi fortemente ativado (x_j grande),
2. A função de ativação está em região sensível (derivada alta),
3. O neurônio teve alta responsabilidade pelo erro da saída ($\delta^{(1)}$ grande).

Conclusão:

$$\boxed{\text{Gradiente} = (\text{entrada}) \times (\text{derivada da ativação}) \times (\text{erro local})}$$