

# Inteligência Artificial

Raoni F. S. Teixeira

## Aula 10 - Redes Neurais - Treinamento

### 1 Introdução

Esta aula apresenta o método backpropagation, usado para treinar redes neurais artificiais. O termo 'backpropagation' ('propagação para trás dos erros') refere-se à aplicação da regra da cadeia para ajustar os parâmetros da rede e reduzir os erros de previsão.

### 2 Backpropagation

Uma rede neural possui dois componentes principais:

1. **Arquitetura da rede:** Número de camadas e de neurônios e tipo de conexões.
2. **Parâmetros:** valores ajustáveis que a rede aprende durante o treinamento, conhecidos também como pesos.

Os componentes fixos são definidos pela arquitetura da rede, enquanto os parâmetros ajustáveis são aprendidos durante o treinamento.

#### 2.1 Etapas do Treinamento

1. **Inicialização:** Os parâmetros são inicializados com valores pequenos e aleatórios, geralmente seguindo uma distribuição normal  $\mathcal{N}(0, 0.1)$ . A inicialização evita valores nulos que inviabilizam o aprendizado.
2. **Previsão (forward pass):** Para cada amostra de treinamento  $(x, y)$ , os dados de entrada  $x$  passam pela rede camada por camada. As ativações  $a^{[k]}$  e pré-ativações  $z^{[k]}$  são calculadas até gerar a previsão  $\hat{y}$ .

3. **Função de custo:** A previsão  $\hat{y}$  é comparada com a saída esperada  $y$  por meio da função custo. Para classificação, utiliza-se a função *log-loss*:

$$J(\hat{y}, y) = -[y \log(\hat{y}) + (1 - y) \log(1 - \hat{y})].$$

O valor de  $J$  é monitorado, e sua redução indica melhora no modelo.

4. **Propagação de erros (backward pass):** Nesta etapa, os parâmetros de cada camada  $\ell$  são ajustados para minimizar a função de custo  $J$ . A atualização segue as equações:

$$W^{[\ell]} = W^{[\ell]} - \alpha \frac{\partial J}{\partial W^{[\ell]}}, \quad b^{[\ell]} = b^{[\ell]} - \alpha \frac{\partial J}{\partial b^{[\ell]}}, \quad (1)$$

em que  $\alpha$  é a taxa de aprendizado.

Os gradientes são obtidos pela regra da cadeia, considerando o erro na camada  $\ell$ :

$$\delta^{[\ell]} = \frac{\partial J}{\partial z^{[\ell]}}. \quad (2)$$

O cálculo do erro e dos gradientes segue três passos principais:

- **Passo 1:** Calcular o erro na camada de saída:

$$\delta^{[L]} = a^{[L]} - y. \quad (3)$$

- **Passo 2:** Para cada camada  $\ell \in \{L - 1, L - 2, \dots, 2\}$ , propagar o erro para trás:

$$\delta^{[\ell]} = (W^{[\ell+1]} \circ \delta^{[\ell+1]}) \sigma'(z^{[\ell]}), \quad (4)$$

onde  $\circ$  representa a multiplicação elemento a elemento, e  $\sigma'$  é a derivada da função de ativação.

- **Passo 3:** Calcular os gradientes para atualização dos parâmetros:

$$\frac{\partial J}{\partial W^{[\ell]}} = \delta^{[\ell]} a^{[\ell-1]T}, \quad \frac{\partial J}{\partial b^{[\ell]}} = \delta^{[\ell]}. \quad (5)$$

As Equações 4 e 5 resultam da aplicação regra da cadeia, com os gradientes sendo propagados da camada  $\ell + 1$  para camada  $\ell$ :

$$\frac{\partial J}{\partial W^{[\ell]}} = \frac{\partial J}{\partial z^{[\ell+1]}} \frac{\partial z^{[\ell+1]}}{\partial a^{[\ell]}} \frac{\partial a^{[\ell]}}{\partial z^{[\ell]}} \frac{\partial z^{[\ell]}}{\partial W^{[\ell]}} \quad (6)$$

e

$$\frac{\partial J}{\partial b^{[\ell]}} = \frac{\partial J}{\partial z^{[\ell+1]}} \frac{\partial z^{[\ell+1]}}{\partial a^{[\ell]}} \frac{\partial a^{[\ell]}}{\partial z^{[\ell]}} \frac{\partial z^{[\ell]}}{\partial b^{[\ell]}}. \quad (7)$$

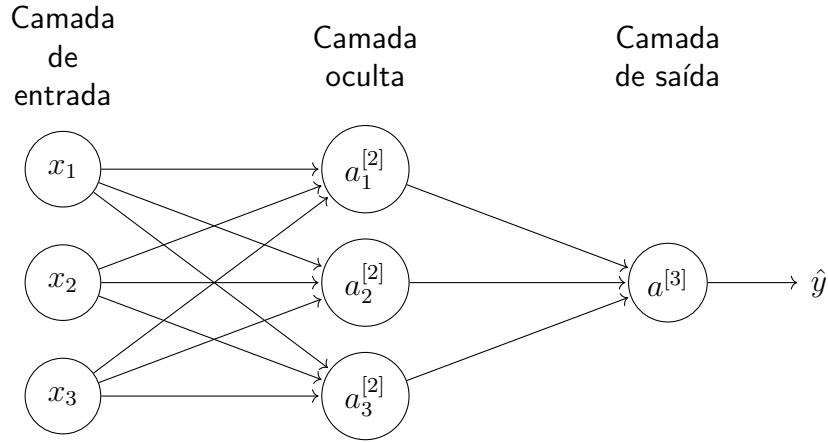


Figura 1: Rede neural com três camadas e ativação sigmoide.

Esses gradientes são definidos como:

$$\frac{\partial J}{\partial z^{[\ell+1]}} = \delta^{[\ell+1]}, \quad \frac{\partial z^{[\ell+1]}}{\partial a^{[\ell]}} = W^{[\ell+1]}, \quad \frac{\partial a^{[\ell]}}{\partial z^{[\ell]}} = \sigma'(z^{[\ell]}), \quad \frac{\partial z^{[\ell]}}{\partial W^{[\ell]}} = a^{[\ell-1]T}, \quad \frac{\partial z^{[\ell]}}{\partial b^{[\ell]}} = 1. \quad (8)$$

Para verificar a consistência do método de propagação de erros com a regra da cadeia, seguimos os passos abaixo: A Figura 1 mostra uma rede neural com três camadas e ativação sigmoide. Os parâmetros dessa rede são definidos como:

- $W^{[2]} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ ,  $b^{[2]} \in \mathbb{R}^{1 \times 3}$ ,
- $W^{[3]} \in \mathbb{R}^{1 \times 3}$ ,  $b^{[3]} \in \mathbb{R}^{1 \times 1}$ .

As ativações  $a^{[k]}$  e pré-ativações  $z^{[k]}$  são definidas como:

1.  $z^{[2]} = W^{[2]}x + b^{[2]}$ ,
2.  $a^{[2]} = \sigma(z^{[2]})$ ,
3.  $z^{[3]} = W^{[3]}a^{[2]} + b^{[3]}$ ,
4.  $a^{[3]} = \sigma(z^{[3]})$ .

Usando o método de propagação de erros, temos:

$$\frac{\partial J}{\partial W^{[2]}} = (W^{[3]} \circ \delta^{[3]})\sigma'(z^{[2]}) = (W^{[3]T} \circ \sigma'(z^{[2]}))(a^{[3]} - y)x^T. \quad (9)$$

Aplicando a regra da cadeia o gradiente é:

$$\frac{\partial J}{\partial W^{[2]}} = \frac{\partial J}{\partial a^{[3]}} \frac{\partial a^{[3]}}{\partial z^{[3]}} \frac{\partial z^{[3]}}{\partial a^{[2]}} \frac{\partial a^{[2]}}{\partial z^{[2]}} \frac{\partial z^{[2]}}{\partial W^{[2]}}. \quad (10)$$

Sabendo que  $\sigma'(z) = \sigma(z)(1 - \sigma(z))$ , o erro na camada de saída é:

$$\begin{aligned}
 \delta^{[3]} &= \frac{\partial J}{\partial z^{[3]}} \\
 &= -\frac{\partial}{\partial z^{[3]}} [(1 - y) \log(1 - \hat{y}) + y \log \hat{y}] \\
 &= -(1 - y) \frac{\partial}{\partial z^{[3]}} \log(1 - \sigma(z^{[3]})) - y \frac{\partial}{\partial z^{[3]}} \log(\sigma(z^{[3]})) \\
 &= -(1 - y) \frac{1}{1 - \sigma(z^{[3]})} (-1) \sigma'(z^{[3]}) - y \frac{1}{\sigma(z^{[3]})} g'(z^{[3]}) \\
 &= (1 - y) a^{[3]} - y(1 - a^{[3]}) \\
 &= a^{[3]} - y.
 \end{aligned} \tag{11}$$

Os demais gradientes são definidos como:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial z^{[3]}}{\partial a^{[2]}} &= W^{[3]T}, \\
 \frac{\partial a^{[2]}}{\partial z^{[2]}} &= \sigma'(z^{[2]}), \\
 \frac{\partial z^{[2]}}{\partial W^{[2]}} &= x^T.
 \end{aligned}$$

Substituindo os termos, temos:

$$\frac{\partial J}{\partial W^{[2]}} = (a^{[3]} - y) W^{[3]T} \sigma'(z^{[2]}) x^T. \tag{12}$$

Para verificar a consistência, considere as dimensões:

$$\underbrace{\frac{\partial J}{\partial W^{[2]}}}_{3 \times 3} = \underbrace{(a^{[3]} - y)}_{1 \times 1} \underbrace{W^{[3]T}}_{3 \times 1} \circ \underbrace{\sigma'(z^{[2]})}_{3 \times 1} \underbrace{x^T}_{1 \times 3}. \tag{13}$$

Reorganizando:

$$\frac{\partial J}{\partial W^{[2]}} = (W^{[3]T} \circ \sigma'(z^{[2]})) (a^{[3]} - y) x^T, \tag{14}$$

confirmando a consistência com o método de propagação de erros.

### 3 Técnicas de Atualização de Parâmetros

Há três maneiras principais de aplicar a regra da Equação 1 em um conjunto com múltiplas amostras:

1. **Atualização em lote:** considera o conjunto inteiro a cada atualização.
2. **Atualização estocástica:** atualiza os parâmetros após cada amostra.
3. **Atualização em mini-lotes:** atualiza os parâmetros com pequenos subconjuntos de tamanho  $B$ .

A diferença principal é que a descida do gradiente calcula o gradiente exato com todos os exemplos, enquanto a descida estocástica aproxima esse valor com uma única amostra, introduzindo ruído. Apesar do ruído, a abordagem estocástica é eficiente para grandes conjuntos de dados.

Por outro lado, a descida em mini-lotes equilibra as duas técnicas. Ela oferece gradientes mais estáveis que os da abordagem estocástica e requer menos recursos computacionais do que a descida em lote.

## 4 Regularização e Controle de Overfitting

Seja  $W$  o conjunto de parâmetros  $W^{[\ell]}$  de cada camada da rede. Apenas esses pesos são regularizados na rede neural. A regularização L2 modifica a função de custo ao adicionar um termo:

$$\begin{aligned} J_{L2} &= J + \frac{\lambda}{2} \|W\|^2 \\ &= J + \frac{\lambda}{2} \sum_i W_i^2, \end{aligned}$$

onde  $J$  é a função de custo padrão,  $\lambda$  controla o peso da regularização (quanto maior  $\lambda$ , maior a regularização), e  $W$  contém todos os pesos do modelo.

A regra de atualização com regularização L2 é:

$$\begin{aligned} W &= W - \alpha \frac{\partial J}{\partial W} - \alpha \lambda W \\ W &= (1 - \alpha \lambda) W - \alpha \frac{\partial J}{\partial W}, \end{aligned}$$

onde  $\alpha$  é a taxa de aprendizado. Durante a descida do gradiente, minimizamos  $J$  enquanto adicionamos uma penalização proporcional a  $W$ . Essa penalização aumenta  $J$ , restringindo os pesos a valores menores. Como resultado, reduzimos o *overfitting*, limitando a capacidade do modelo de se ajustar excessivamente aos dados de treinamento.

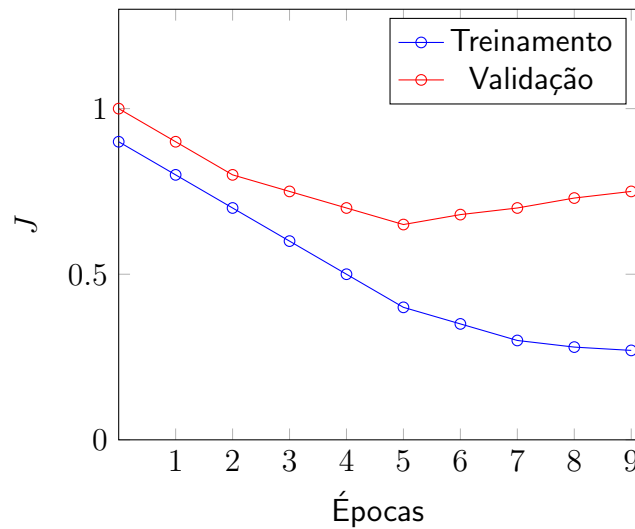


Figura 2: Função log-loss medida ao longo de 10 épocas.

## Exercícios

1. Explique por que a inicialização dos parâmetros com valores iguais a zero inviabiliza o aprendizado da rede neural. Descreva também como isso impactaria o treinamento da rede.
2. Calcule  $\frac{\partial J}{\partial W^{[1]}}$ ,  $\frac{\partial J}{\partial b^{[1]}}$  e  $\frac{\partial J}{\partial b^{[2]}}$  para a rede neural apresentada na Figura 1. Compare os resultados obtidos com os calculados pelo método de propagação de erros.
3. Para a função de custo utilizada na regressão linear,  $J(\hat{y}, y) = \frac{1}{2}(\hat{y} - y)^2$ , calcule  $\frac{\partial J}{\partial z^{[3]}}$  e explique como essa derivada é usada no treinamento do modelo.
4. Durante o treinamento de uma rede neural, o valor da função de custo  $J$  é monitorado e registrado tanto para o conjunto de treinamento quanto para o conjunto de validação. A Figura 2 mostra os valores de  $J$  medidos ao longo de 10 épocas.
  - (a) Identifique no gráfico o ponto em que o modelo começa a apresentar overfitting. Justifique sua resposta.
  - (b) Descreva como a regularização L2 poderia influenciar o comportamento das curvas de treinamento e validação, considerando o impacto da penalização nos pesos.