AGA 0505 - Análise de Dados em Astronomia

9. Aprendizado de Máquina: Princípios Gerais

Laerte Sodré Jr.

1o. semestre, 2026

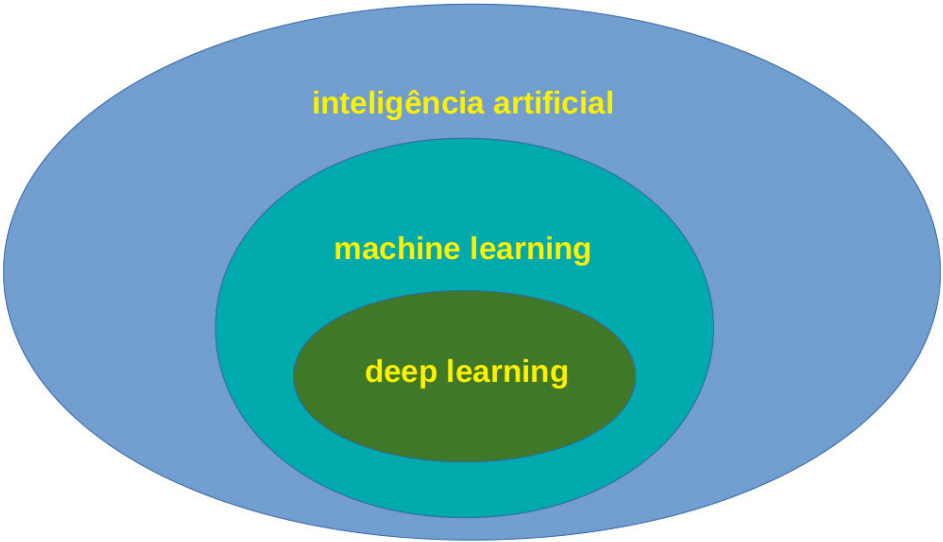
aula de hoje

1. inteligência artificial, machine learning e deep learning
2. dados
3. aprendizagem
4. tipos de aprendizagem
5. modelos paramétricos e não-paramétricos
6. generalização e overfitting
7. aplicações de ML: aprendizado não-supervisionado

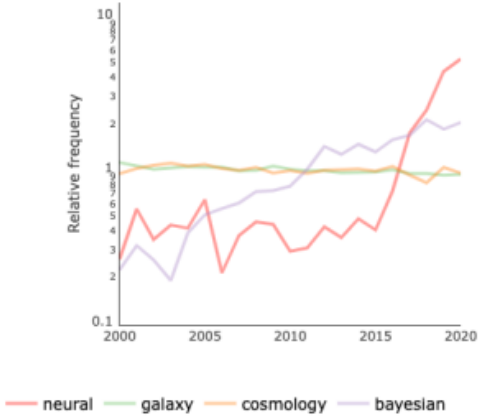
If a machine can think, it might think more intelligently than we do.

Alan Turing

inteligência artificial, machine learning e deep learning

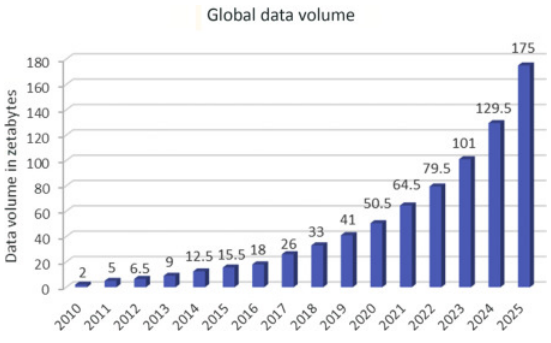


aprendizado de máquina em astronomia



arXiv:2210.01813

ML/DL: abordagem baseada em dados (*data-driven*) necessária para a era do *tsunami* de dados:



Lei & Kong, 2020

aprendizado de máquina x computação convencional

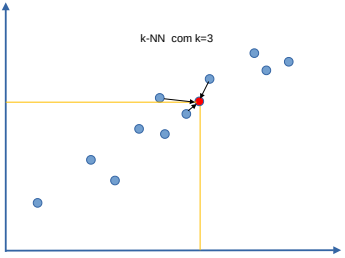
- programação clássica

  sequência de regras específicas ou algoritmos que um computador deve seguir para resolver um problema

```
npar=2

#função a ser amostrada
p = function(param){
z=(param[1]-medla.x)^2/sd.x^2-c3*(param[1]-medla.x)*(param[2]-medla.y)+(param[2]-medla.y)^2/sd.y^2
pxy=c1*exp(-c2*z)

# vamos trabalhar com o logaritmo da distribuição de probabilidades
return(log(pxy))
}

# função proposta gaussiana para cada parâmetro
funcao_proposta = function(param){rnorm(2,mean = param, sd= c(0.1,0.3))}

# mcmc adaptado para mais de uma variável
ncmc2 = function(xini, iterations){
    cadela = array(dim = c(iterations+1,npar))
    cadela[1,] = xini
    for (i in 1:iterations){
        proposta = funcao_proposta(cadela[i,])
# como a probabilidade está em log
        probab = exp(p(proposta) - p(cadela[i,]))
        if (runif(1) < probab){
            cadela[i+1,] = proposta}
        else{
            cadela[i+1,] = cadela[i,]
    }
    return(cadela)
}

        Agora inicializamos e rodamos a simulação:

# para medir o tempo de processamento deste módulo
t0 = Sys.time()

xini = c(0,10)
set.seed(2343)
cadelamc = mcmc2(xini, 100000)

# burn-in
burnin = 1000
aceitacao = 1-mean(duplicated(cadelamc[-(1:burnin),]))
aceitacao

# visualização sem o burn-in
par(mfrow = c(2,2))
hist(cadelamc[-(1:burnin),1],nclass=30, , main="distribuição de x", xlab="valor do input = linha vermelha",col='gold')
abline(v = mean(cadelamc[-(1:burnin),1]),lwd=2)
abline(v = medla.x, col="red",lwd=2)
hist(cadelamc[-(1:burnin),2],nclass=30, main="distribuição de y", xlab="valor do input = linha vermelha",col='gold')
```

- machine learning (ML)

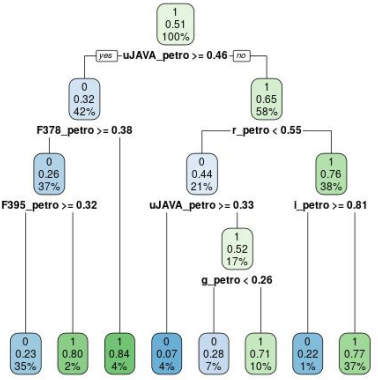
  sistemas que aprendem diretamente dos dados, sem serem explicitamente programados para uma tarefa específica



note que os algoritmos de ML são construidos com algoritmos de programação clássica (ex. C++)!

o que é *aprendizado* em ML

- um problema comum em astronomia: estimar uma variável y a partir de um conjunto de outras variáveis, x: $y = f(x; w)$
  w: parâmetros da função
- em ML f é, em geral, uma *caixa preta*
  e x e y podem ser escalares, vetores, tensores ...
- um algoritmo de ML promove um mapeamento de x para y: ele implementa uma **função** com parâmetros w
- aprendizado em ML: determinação de w
  ($\sim$ inferência de parâmetros)
- diferentes algoritmos de ML implementam diferentes funções e estratégias de aprendizado



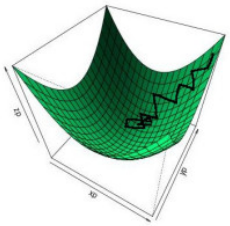
uma árvore de decisão usando fotometria do S-PLUS para classificação estrela/galáxia

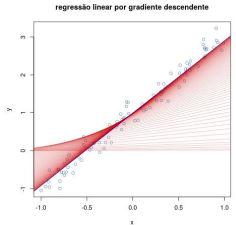
o motor do aprendizado: o algoritmo da *descida do gradiente*

- o aprendizado é baseado apenas nos dados, usando um *conjunto de treinamento* onde se conhece tanto x quanto y
- aprendizado como inferência de parâmetros: minimização de uma *função de custo* $l(w)$ com os dados do conjunto de treinamento
- $l(w)$ mede os erros no ajuste do modelo aos dados
- depois de *treinado*, o modelo pode ser aplicado a novos dados
- treinamento com *descida do gradiente (gradient descent)*:

$$w \longleftarrow w - \lambda \times \nabla l(w)$$

λ: taxa de aprendizado (*hiperparâmetro*)





tipos de aprendizado

aprendizado supervisionado

- temos variáveis de entrada e saída, x e y, e o algoritmo *aprende* um mapeamento de x em y usando exemplos de x em um *conjunto de treinamento* para o qual os valores de y são conhecidos
- esses valores de y são denominados alvos ou *targets*
- *classificação*- y é uma variável qualitativa ou categórica ou discreta:
  'estrela', 'galáxia Scd', 'detectado', 'classe 3', ...
- *regressão*: y é um número real:
  redshift, metalicidade, massa ...

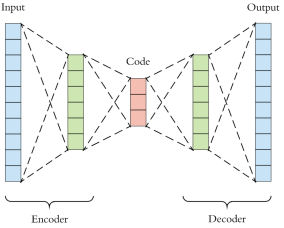
aprendizado não-supervisionado

- temos os dados x e o objetivo é identificar estruturas ou propriedades interessantes nos dados
- útil para exploração dos dados:
  "estatística descritiva" com ML
  - análise de agrupamento (*cluster analysis*)
  - estimativa de densidade
  - redução de dimensionalidade

tipos de aprendizado

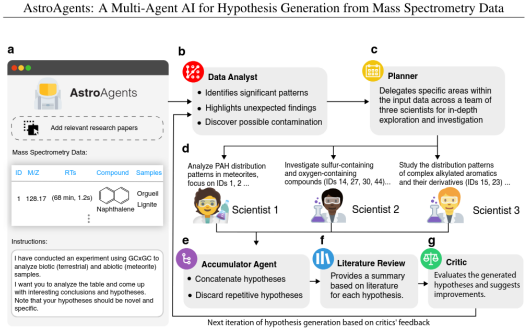
aprendizado auto-supervisionado

- tipo de aprendizado supervisionado “sem” intervenção humana (∼aprendizado não-supervisionado)
- autoencoders: o algoritmo aprende o *input*



aprendizado com reforço

- um agente aprende ações que maximizam o sucesso ou a recompensa: veículos autônomos, jogos, busca por *outliers*

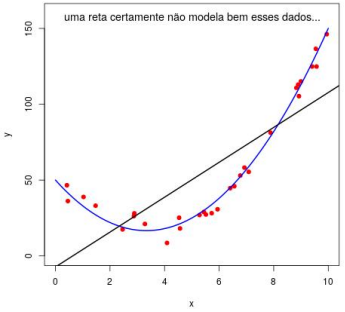


https://arxiv.org/pdf/2503.23170

modelos paramétricos e não-paramétricos

- **modelos paramétricos: aprendizado supervisionado**
  - modelos com uma forma funcional conhecida, com um número finito de parâmetros w
  - exemplo: regressão linear $y = w_1 + w_2 x$
  - a predição de y para uma nova observação x depende apenas de w, não dos dados:
    - os parâmetros são estimados dos dados: $P(w|D)$
    - a predição de y depende só de w: $y = f(x; w)$
    - nesse caso ML implementa uma função

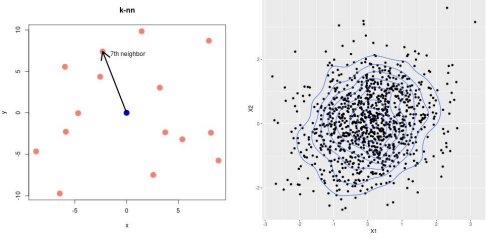
- a complexidade do modelo é limitada pela forma funcional considerada : modelos de *baixa flexibilidade*



modelos paramétricos e não-paramétricos

- **modelos não-paramétricos: aprendizado não-supervisionado**
  - modelos “sem suposições” sobre os dados
  - não temos y!
  - o objetivo é descobrir propriedades interessantes nos dados
  - úteis para exploração e visualização dos dados
  - os modelos não assumem nenhuma forma funcional: dependem apenas dos dados exemplo: estimativa de densidades com o k-ésimo vizinho mais próximo (k-NN)
  - *modelos flexíveis*: podem ser aplicados a dados de qualquer complexidade

- atenção: *modelos não-paramétricos têm hiperparâmetros*
- ex.: k no algoritmo k-NN
- k é um *hiperparâmetro* : parâmetro do algoritmo de aprendizagem

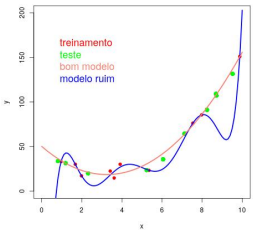


generalização

- modelos são treinados com dados de um conjunto de treinamento
  ("o prior está nos dados")
- como eles se comportam com novos dados?
- bons modelos devem ser capazes de fazer boas previsões
- bons modelos devem *generalizar* bem!
- em geral os dados são divididos em 3 partes: *conjuntos de treinamento, validação e teste*
- algumas vezes o conjunto de treinamento é usado também para validação

(ex.: 70%, 10%, 20%)

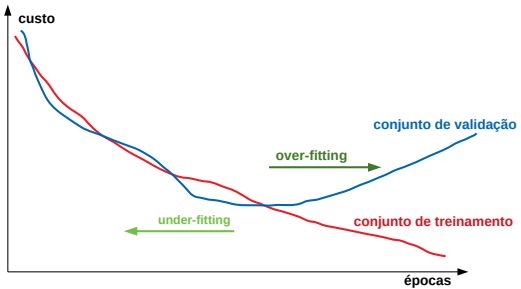
- conjunto de treinamento: usado para ajustar os parâmetros do modelo
- conjunto de validação: monitora o aprendizado do conjunto de treinamento
- conjunto de teste: usado para medir o desempenho do modelo treinado- não deve ser usado nem para treinamento nem para validação



generalização

- conforme o algoritmo vai aprendendo, a função de custo (erros) dos conjuntos de treinamento e validação decresce

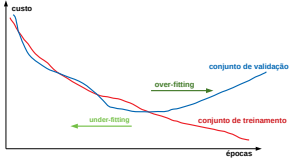
  o modelo está sendo otimizado
- depois de um certo ponto, o custo do conjunto de treinamento continua a cair (gradiente descendente), mas o do conjunto de validação começa a crescer
- este ponto maximiza a generalização

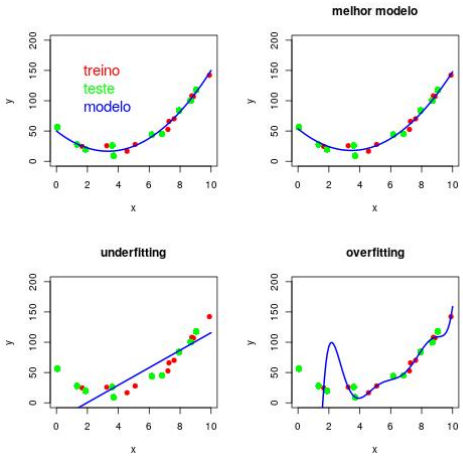


em cada época o algoritmo *processa* todo o conjunto de treinamento

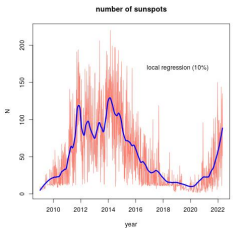
generalização

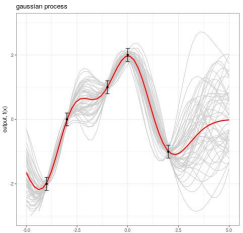
- interromper o aprendizado antes ou depois da época ótima leva a:
  - underfitting: o modelo não foi suficientemente treinado, ou
  - overfitting: o modelo começa a aprender padrões específicos do conjunto de treinamento (como o ruído), que não podem ser generalizados

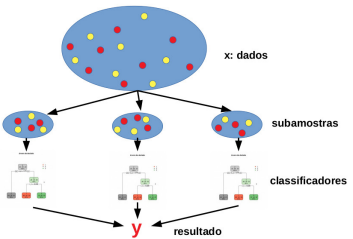


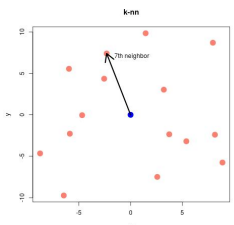


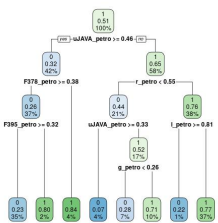
alguns algoritmos de ML

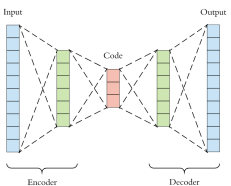


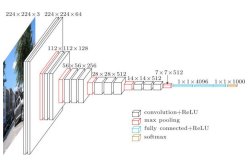












aplicações de ML

aplicações:

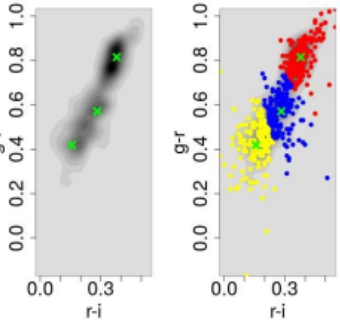
- classificação
- regressão
- estimativa de densidade
- análise de agrupamento
- redução de dimensionalidade
- detecção de anomalias
- séries temporais
- recuperação da informação
- sistemas de recomendação
- robótica e visão computacional
- jogos
- programação
- ???

a fauna:

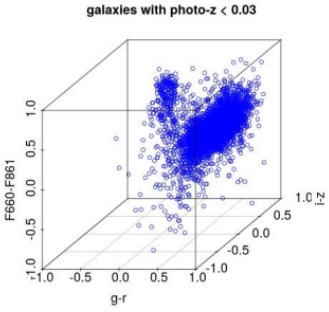
- regressão logística
- árvores de decisão
- *naive bayes*
- k-nn: k-ésimo vizinho mais próximo
- *support vector machines*- SVM
- floresta aleatória & *bagging*
- *boosting*
- redes neurais
- LLM: *large language models*- chatGPT

aplicações: exploração de dados

- estimativa de densidade
- análise de agrupamento
- redução de dimensionalidade



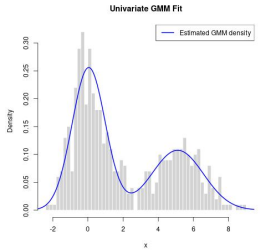
- ferramentas para descobertas!
- úteis para visualização de dados
- úteis para descrição dos dados

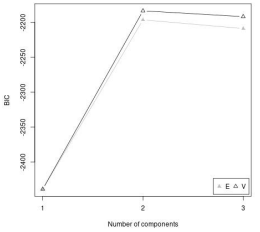


aplicações: estimativa de densidades

- objetivo: modelagem da distribuição de dados no *espaço de dados*
- permite determinar a função de distribuição de probabilidades dos dados
- exemplo de um algoritmo paramétrico: modelo de misturas gaussianas *gaussian mixture models*: GMM

  modelos de distribuições de densidades com uma superposição de gaussianas multivariadas com diferentes médias, variâncias e orientações
- o número de gaussianas pode ser determinado usando BIC ou AIC





aplicações: estimativa de densidades

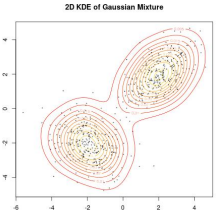
- exemplo de um algoritmo não-paramétrico: estimativa de densidade com kernel (*kernel density estimation*, KDE)
- densidade em um ponto x em um espaço de dados de dimensão D:

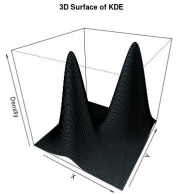
$$\hat{f}(x;h) = \frac{1}{Nh^D} \sum_{i=1}^{N} K\left(\frac{d(x,x_i)}{h}\right)$$

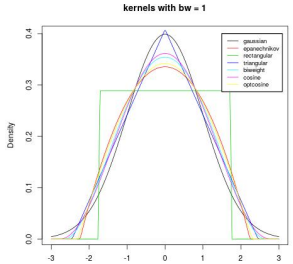
onde

- $K(u)$: função kernel
- $d(x_1, x_2)$: "distância" entre x_1 e x_2
- h: largura de banda do kernel
- N: número de pontos

- h é frequentemente estimado por *validação-cruzada*

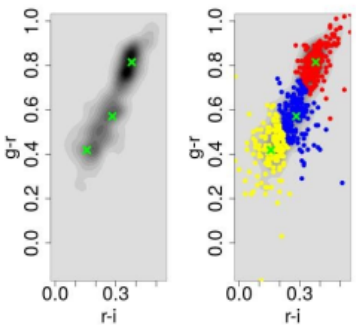






aplicações: análise de agrupamento (*cluster analysis*)

- objetivo: identificar grupos de dados (*clusters*) no espaço de dados
- grupos: objetos com propriedades similares
- técnica não-supervisionada: os grupos não são conhecidos a priori
- diferente da classificação, que é um procedimento supervisionado onde os objetos estão associados a classes/grupos pré-definidos
- algoritmos: K-means, métodos hierárquicos



aplicações: análise de agrupamento (*cluster analysis*)

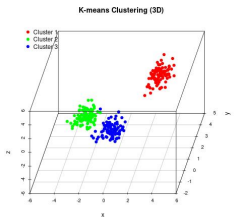
exemplo: algoritmo *K-means*

- objetivo: atribuir N objetos a K grupos, $K << N$
  supõe-se K conhecido!
- custo com distância euclidiana: o algoritmo minimiza iterativamente a quantidade

$$J = \sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} (\mathbf{x}_i - \mu_k)^2$$

onde μ_k é o centroide do k-ésimo grupo

- algoritmo:
  1. defina o número de grupos, K
  2. inicialize escolhendo K objetos ao acaso como centros dos grupos
  3. atribua cada objeto ao grupo mais próximo e recalcule o centróide do grupo
  4. repita até a convergência (os grupos “congelam”)

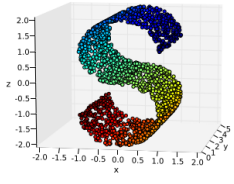


aplicações: redução de dimensionalidade

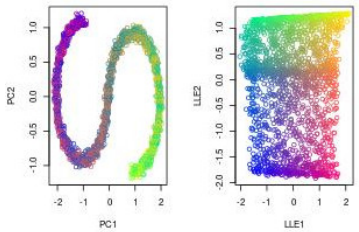
- útil para compressão de dados e visualização
- X: dados em D dimensões
- queremos uma nova representação de X, que chamaremos Y, em $d << D$ dimensões

$$X = \{x_1, x_2, ..., x_D\} \longrightarrow Y = \{y_1, y_2, ..., y_d\}$$

o espaço reduzido é denominado *espaço latente*



- método linear: *análise de componentes principais* (PCA)
- métodos não-lineares: LLE (*locally linear embedding*), IsoMap, t-SNE (*t-distributed stochastic neighbor embedding*), UMAP (*uniform manifold approximation and projection*)
- *embedding*: uma estrutura matemática está contida dentro de outra

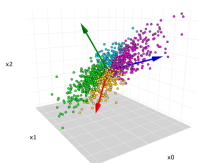


aplicações: redução de dimensionalidade

PCA: análise de componentes principais

- X: dados em um espaço de dados $\mathcal{D}$, d-dimensional
- interpretação geométrica:
  PCA define um conjunto de eixos ortogonais (PCs) em $\mathcal{D}$, tal que
  - PC1 é na direção de máxima variância de $\mathcal{D}$
  - PC2 é na direção de máxima variância do subespaço perpendicular a PC1
  - PC3 é na direção de máxima variância do subespaço perpendicular a PC1 e PC2
  - ...

- PCA é útil para representar os dados com $k << d$ variáveis
- PCA é resolvido como um problema de álgebra linear: é rápido
- cada PC é uma combinação linear de todas as variáveis de X: cuidado com a interpretação física!

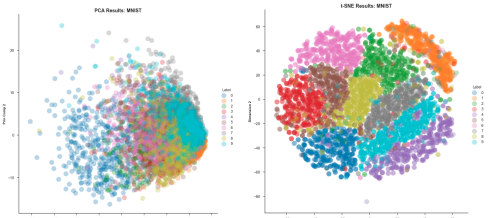


Casey Cheng, https://towardsdatascience.com/principal-component-analysis-pca-explained-visually-with-zero-math-1cbf392b9e7d

aplicações: redução de dimensionalidade

t-SNE: *t-Distributed Stochastic Neighbor Embedding*

- usado pricipalmente para *visualização*
- objetivo: representar dados multi-dimensionais X em um espaço Y de baixa dimensionalidade (2 ou 3 dimensões), preservando *similaridades locais* dos dados
- atenção: os resultados podem mudar cada vez que se roda o algoritmo; t-SNE pode produzir grupos sem significado físico



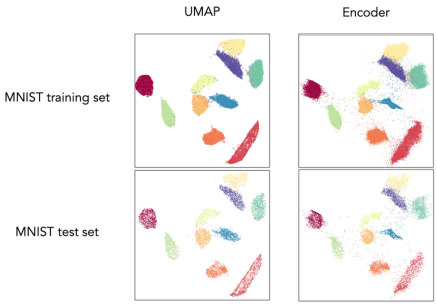
Andre Violante, https://towardsdatascience.com/an-introduction-to-t-sne-with-python-example-5a3a293108d1

aplicações: redução de dimensionalidade

UMAP:
Uniform Manifold Approximation and Projection
arXiv:1802.03426

- baseado em geometria riemanniana e topologia algébrica
- usado pricipalmente para *visualização*

- objetivo: representar dados multi-dimensionais X em um espaço Y de baixa dimensionalidade (2 ou 3 dimensões), preservando *similaridades locais* dos dados



Exploring Collections of research publications with Human Steerable AI, Martinez+ 2020

referências

- Statistics, Data Mining, and Machine Learning in Astronomy, Ivezić, Connolly, VanderPlas & Gray, 2014 (https://www.astroml.org/)
- An Introduction to Statistical Learning, James, Witten, Hastie & Tibishirani, 2021 (https://www.statlearning.com/)
- Deep Learning, Goodfellow, Bengio & Courville, 2016 (https://www.deeplearningbook.org/)
- Deep Learning with R, 2a. edição, Chollet, 2022 (https://www.manning.com/books/deep-learning-with-r-second-edition)
- Deep Learning with Python, Chollet, 2018 (https://www.manning.com/books/deep-learning-with-python)
- Modern Statistical Methods for Astronomy: With R Applications , Feigelson & Babu, 2012
- The Dawes Review 10: The impact of deep learning for the analysis of galaxy surveys, M. Huertas-Company & F. Lanusse, arXiv:2210.01813, 2022
- How to set up your first machine learning project in astronomy, J. Buchner & S. Fotopoulou, arXiv:2502.08222