# AGA 0505 - Análise de Dados em Astronomia

# 9. Aprendizado de Máquina: Princípios Gerais

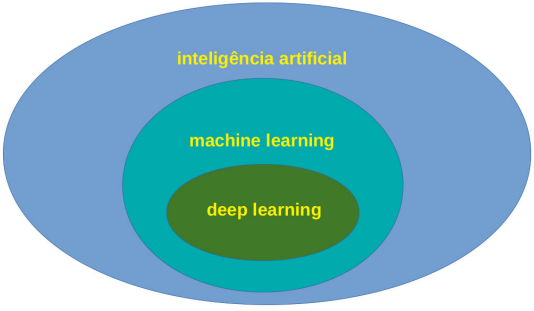
Laerte Sodré Jr.

1o. semestre, 2023

# 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

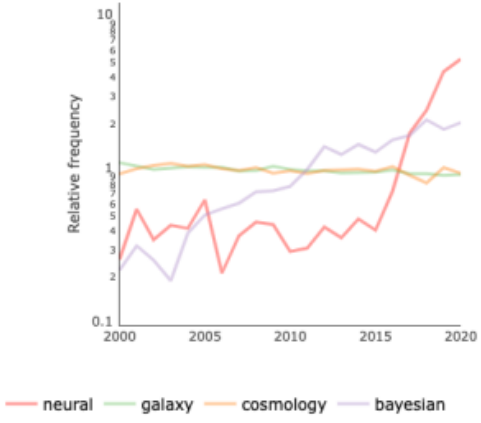
aprendizado de máquina = *machine learning* (ML)




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

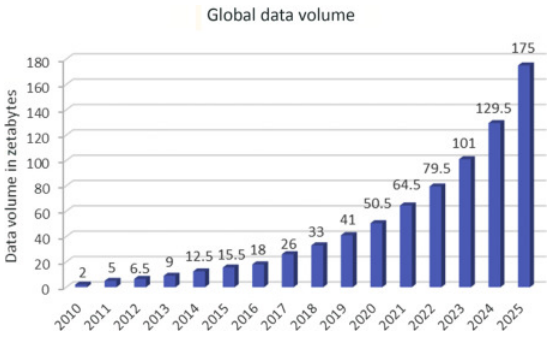
*Alan Turing*

# aprendizado de máquina em astronomia




arXiv:2210.01813

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

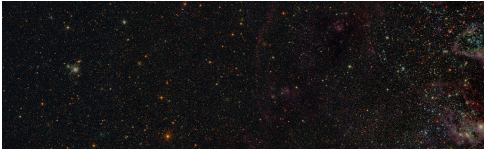



Lei & Kong, 2020

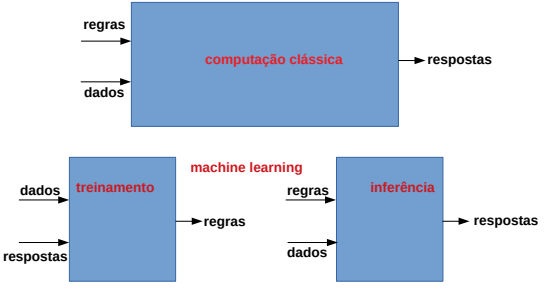
# aprendizado de máquina x computação convencional

**exemplo: estrela ou galáxia?**

- programação clássica
  - sequência de regras específicas ou algoritmos que um computador deve seguir para resolver um problema
  - ex.: SExtractor: a partir da análise de imagens, constrói catálogos de objetos e suas propriedades e usa essas propriedades para calcular a *estelaridade* de um objeto

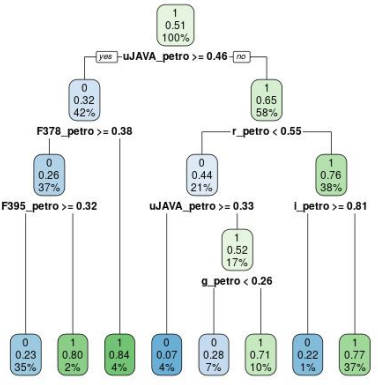


- machine learning
  sistemas que aprendem diretamente dos dados, sem serem explicitamente programados para uma tarefa específica



# o que é *aprendizado* em ML

- um problema comum em astronomia: estimar uma variável $y$ a partir de um conjunto de outras variáveis, $x$: $y = f(x; w)$
  $x$ and $y$ podem ser escalares, vetores, tensores ...
- um algoritmo de ML promove um mapeamento de $x$ para $y$: ele implementa uma **função** com parâmetros $w$
- aprendizado: determinação de $w$
  ($\sim$otimização de modelos,
  $\sim$ 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

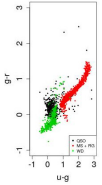
# tipos de aprendizado

**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 (alvos ou *targets*)
- classificação- $y$ é uma variável qualitativa ou categórica ou discreta:
'estrela', 'galáxia Scd', 'detectado', 'classe 3', ...
- regressão: $y$ is é um número real:
redshift, metalicidade, massa ...

**aprendizado não-supervisionado**

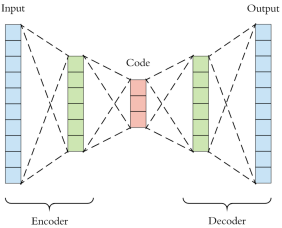
- temos os dados $x$ e o objetivo é identificar estruturas ou propriedades interessantes nos dados
- exploração dos dados:
  - análise de agrupamento (*cluster analysis*)
  - estimativa de densidade
  - redução de dimensionalidade



# tipos de aprendizado

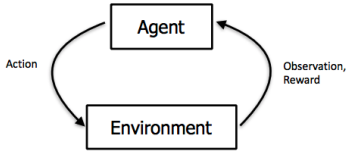
**aprendizado auto-supervisionado**

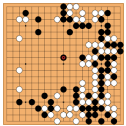
- tipo de aprendizado supervisionado “sem” intervenção humana (∼aprendizado não-supervisionado)
- autoencoders: o algoritmo aprende o *input*




**aprendizado com reforço**

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



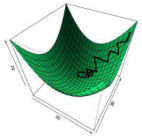



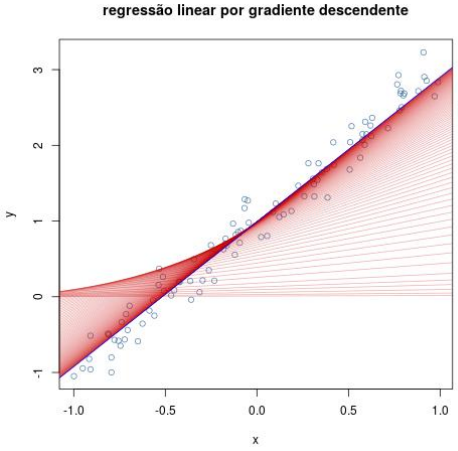
# o motor do aprendizado: o algoritmo da *descida do gradiente*

- aprendizado como inferência de parâmetros: minimização de uma *função de custo* $l(w)$ com os dados de um conjunto de treinamento
- $l(w)$ mede os erros no ajuste do modelo com dados do conjunto de treinamento
- algoritmo da descida do gradiente:
  - inicialização: valores "aleatórios" de $w$
  - atualização iterativa de $w$:

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

$\lambda$: taxa de aprendizado (*hiperparâmetro*)

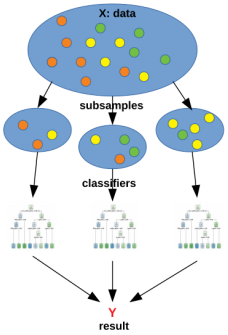




# modelos paramétricos e não-paramétricos

- **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*

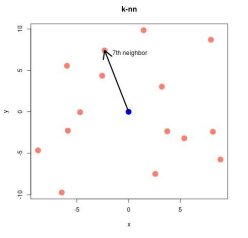


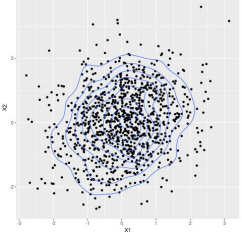

modelo de floresta aleatória

# 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 k-NN
  - *modelos flexíveis*: podem ser aplicados a dados de qualquer complexidade

- atenção: *modelos não-paramétricos têm hiperparâmetros*
- ex.: $k$ no algoritmo do $k$-ésimo vizinho mais próximo (k-NN)
- $k$ é um *hiperparâmetro* : parâmetro do algoritmo de aprendizagem



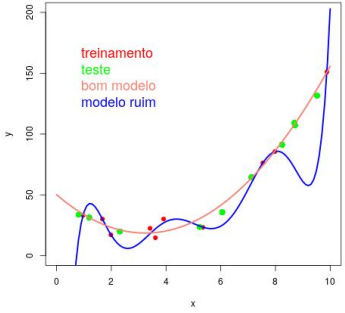



# generalização

- modelos são treinados com dados de um conjunto de treinamento
- 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

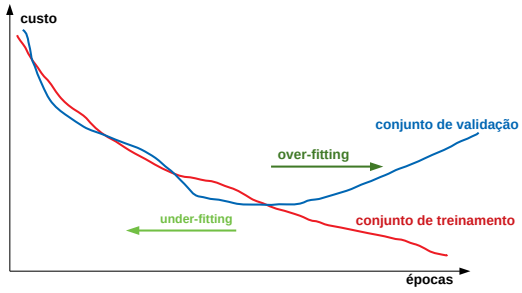


# generalização

| treinamento | validação | teste |
|---|---|---|

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

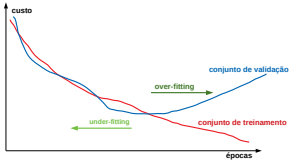
  o modelo está sendo otimizado
- depois de um certo ponto, o custo do conjunto de treinamento continua a cair, mas o do conjunto de validação começa a crescer
- este ponto maximiza a generalização

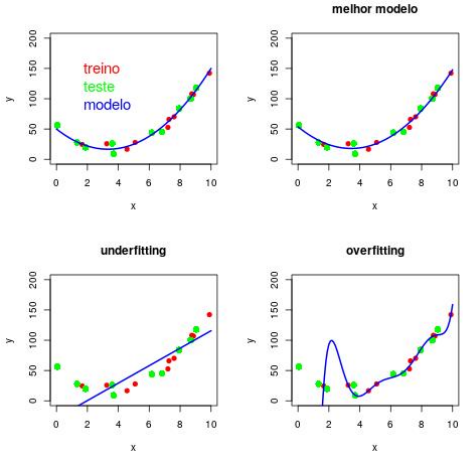



em cada época o algoritmo *processa* todo o conjunto de treinamento

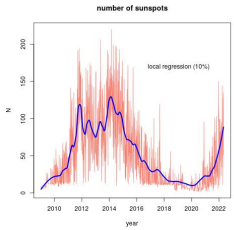
# generalização

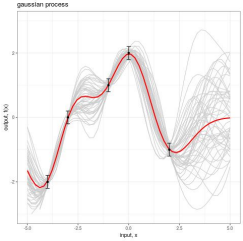
- interromper o aprendizado antes ou depois da época ótima leva a:
  - underfitting: o modelo não foi suficientemente treinado, ou
  - overfitting: o modelo começa a aprender padrões específicos do conjunto de treinamento (como o ruído), que não podem ser generalizados

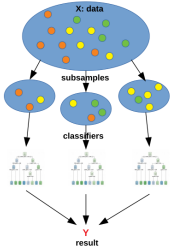


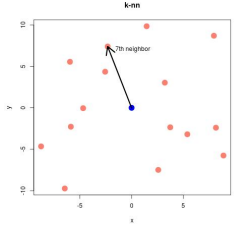



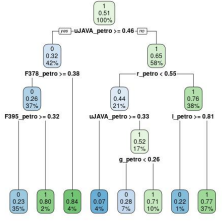
# alguns algoritmos de ML

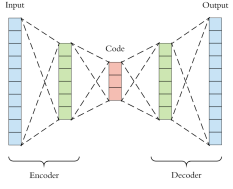


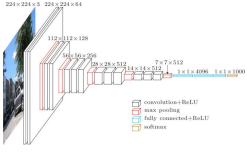



# aplicações de ML

**aplicações:**

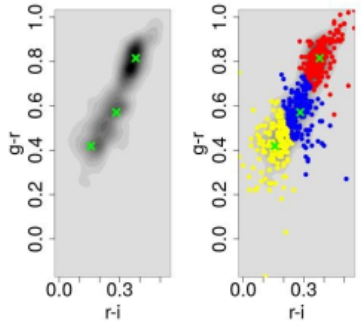
- classificação
- regressão
- estimativa de densidade
- análise de agrupamento
- redução de dimensionalidade
- detecção de anomalias
- séries temporais
- recuperação da informação
- sistemas de recomendação
- robótica e visão computacional
- jogos

**a fauna:**

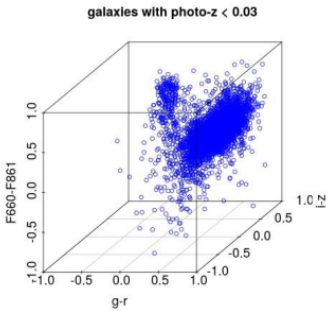
- regressão logística
- árvores de decisão
- *naive bayes*
- k-nn: k-ésimo vizinho mais próximo
- *support vector machines*- SVM
- floresta aleatória & *bagging*
- *boosting*
- redes neurais

# aplicações: exploração de dados

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



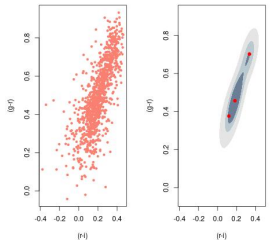

- ferramentas para descobertas!
- úteis para visualização de dados
- úteis para descrição dos dados

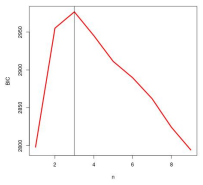


# aplicações: estimativa de densidades

- 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

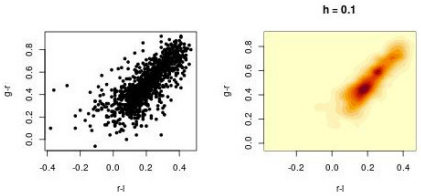
- exemplo de um algoritmo não-paramétrico: estimativa de densidade com kernel (*kernel density estimation*, KDE)
- densidade em um ponto $x$ em um espaço de dados de dimensão $D$:

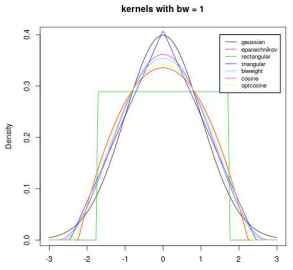
$$\hat{f}(x;h) = \frac{1}{Nh^D} \sum_{i=1}^{N} K\left(\frac{d(x,x_i)}{h}\right)$$

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

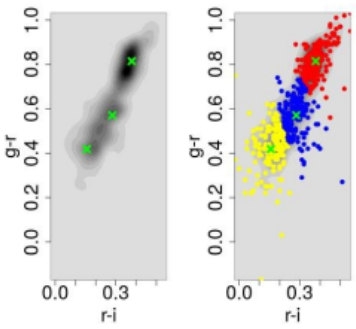
- $h$ é frequentemente estimado por *validação-cruzada*



# 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*)

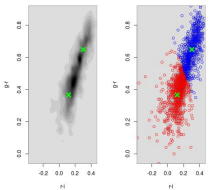
exemplo: algoritmo K-means

- 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 $\mu_k$ 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")

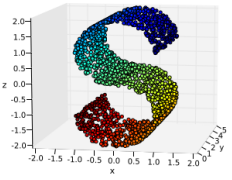


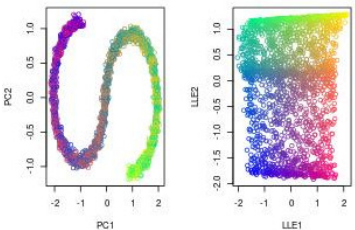
# aplicações: redução de dimensionalidade

- $X$: dados em $D$ dimensões
- queremos uma nova representação de $X$, que chamaremos $Y$, em $d << D$ dimensões

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

- útil para compressão de dados e visualização
- método linear: *análise de componentes principais* (PCA)
- métodos não-lineares: LLE (*locally linear embedding*), IsoMap, t-SNE (*t-distributed stochastic neighbor embedding*)
- *embedding*: uma estrutura matemática está contida dentro de outra



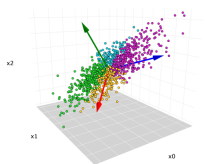



# aplicações: redução de dimensionalidade

**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!

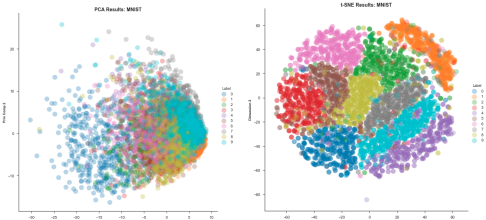



Casey Cheng, https://towardsdatascience.com/principal-component-analysis-pca-explained-visually-with-zero-math-1cbf392b9e7d

# 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

# 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