Machine Learning

Formação Metodológica do MAPE

Felipe Lamarca

Instituto de Estudos Sociais e Políticos (IESP-UERJ)

2025-09-19

Itinerário

- O que é *machine learning*?
- Machine learning é modelagem/inferência estatística?
- Treinamento e avaliação de modelos

O que é Machine Learning?

Machine learning, a subset of AI, uses algorithms to analyze data, identify patterns, and make predictions. It learns from data on its own, improving over time. — Microsoft

Em geral, a ideia do aprendizado de máquina é encontrar a função f que melhor relaciona as variáveis preditoras à variável resposta, ou target. Podemos encontrar f de várias maneiras.

Um curso de ML, em média

Se tivéssemos um semestre, provavelmente falaríamos de:

- k-NN
- Regressão linear
- Regressão logística
- Processos gaussianos
- Técnicas de seleção de modelos
- Técnicas de redução de dimensionalidade
- Redes neurais
- ...

Hoje

Não falaremos dos vários algoritmos e modelos utilizados em machine learning. Antes, e talvez mais importante, vamos falar de *machine* learning como um **paradigma** próprio.

Uma anedota: machine learning \times modelagem estatística

No 5° período da graduação em ciência de dados, cursei machine learning e modelagem estatística. Uma aula era seguida da outra, às segundas e quartas.

Quais são as diferenças entre uma coisa e outra? Qual é mais legal?

Uma anedota: machine learning \times modelagem estatística

No 5° período da graduação em ciência de dados, cursei machine learning e modelagem estatística. Uma aula era seguida da outra, às segundas e quartas.

Qual é a diferença entre um e outro? Qual é mais legal?

\rm A saber

Esse foi o motivo pelo qual eu e minha namorada brigamos pela primeira vez!

Na aula de machine learning...



Figure 1: Diego Parente, professor de Machine Learning

"Isso não é um curso de modelagem estatística"

O tema da aula era regressão linear. Diego terminou a aula mostrando, sob certas condições, o estimador por máxima verossimilhanca e o estimador por MQO coincidem no caso normal:

$$\mathcal{L}(\beta) = (2\pi\sigma^2)^{-n/2} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}||y-X\beta||^2\right),$$

queremos β que minimiza a log-verossimilhança negativa $l(\beta)$:

$$-l(\beta) = \frac{n}{2}\log(2\pi) + \frac{n}{2}\log\sigma^2 + \frac{1}{2\sigma^2}||y - X\beta||^2$$

Então...

$$\min_{\beta} - l(\beta) = \min_{\beta} \, ||y - X\beta||^2$$

$$\hat{\beta}_{\mathsf{MLE}} \ = \ \arg\min_{\beta} \ \|y - X\beta\|^2 \ = \ (X^{\top}X)^{-1}X^{\top}y.$$

Uaul 🧶 😩 🤚





Na aula de modelagem estatística...



Figure 2: Luiz Max, professor de modelagem estatística

"Isso não é um curso de machine learning" O tema da aula era regressão linear. Max terminou a aula mostrando, sob certas condições, o estimador por máxima verossimilhanca e o estimador por MQO coincidem no caso normal:

$$\mathcal{L}(\beta) = (2\pi\sigma^2)^{-n/2} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}||y - X\beta||^2\right),$$

queremos β que minimiza a log-verossimilhança negativa $l(\beta)$:

$$-l(\beta) = \frac{n}{2}\log(2\pi) + \frac{n}{2}\log\sigma^2 + \frac{1}{2\sigma^2}||y - X\beta||^2$$

Então

$$\min_{\beta} - l(\beta) = \min_{\beta} \ ||y - X\beta||^2$$

$$\hat{\beta}_{\mathsf{MLE}} \ = \ \arg\min_{\beta} \ \|y - X\beta\|^2 \ = \ (X^\top X)^{-1} X^\top y.$$

Ué?! 🕮



E tem diferença, então?

Mas e aí? Tem diferença, então?

E tem diferença, então?

<u>Tem!</u> Mas a diferença não tá na matemática. Trata-se sobretudo de uma diferença de objetivos.

Eu destacaria, em particular: enquanto a modelagem estatística quer reconstruir o processo gerador dos dados (Lego I e II), machine learning quer acertar as previsões sobre a variável de interesse. Isso tem implicações:

- Foco em previsão ao invés de explicação
- Seleção automática de variáveis
- Menor preocupação com interpretabilidade
- Alta dimensionalidade, conjuntos enormes de dados

São duas culturas

Statistical Science 2001, Vol. 16, No. 3, 199-231

Statistical Modeling: The Two Cultures

Leo Breiman

Abstract. There are two cultures in the use of statistical modeling to reach conclusions from data. One assumes that the data are generated by a given stochastic data model. The other uses algorithmic models and treats the data mechanism as unknown. The statistical commitment based to irrelevant theory, questionable conclusions, and has kept statisticians from working on a large range of interesting current problems. Algorithmic modeling, both in theory and practice, has developed rapidly in fields outside statistics. It can be used both on large complex data sets and as a more accurate and informative alternative to data modeling on smaller data sets. If our goal as a field is to use data to solve problems, then we need to move away from exclusive dependence on data models and adout a more diverse set of tools.

Figure 3: Statistical Modeling: The Two Cultures

Retomando: o que é Machine Learning?

Machine learning, a subset of AI, uses algorithms to analyze data, identify patterns, and make predictions. It learns from data on its own, improving over time. — Microsoft

Em geral, a ideia do aprendizado de máquina é encontrar a função f que melhor relaciona as variáveis preditoras à variável resposta, ou target.

Regressão é machine learning

Suponha que nosso objetivo é estimar a **probabilidade** de um candidato ser eleito em 2026. Para isso, temos à nossa disposição um banco de dados históricos (2012-2020) que inclui o sexo biológico dos candidatos, seus gastos de campanha, uma variável que indica se o candidato é incumbente ou desafiante e o resultado das urnas.

Regressão é machine learning

Sendo X a matriz de covariáveis (preditores) e Y a variável resposta (target), podemos estimar os coeficientes de um modelo de regressão logística:

$$\mathbb{P}(Y_i=1) = \mathsf{logit}^{-1}(X_i\beta)$$

Estimados os coeficientes, podemos estimar a probabilidade de um candidato qualquer ser eleito. Machine learning é isso, mas de maneira um pouco mais sofisticada.

Tipos de problema

- Aprendizado supervisionado: quando o target é conhecido
- queremos estimar a probabilidade de um candidato ser eleito
- 2 Aprendizado não-supervisionado: quando o target é desconhecido
 - queremos agrupar os eleitores em grupos; fazemos análise temática de corpus textuais
- 3 Aprendizado por reforço: quando o agente aprende por tentativa e erro, recebendo recompensas ou punições
- humanos avaliam respostas do modelo para guiar comportamento (RLHF)

Treino, teste e validação

Em geral, dividimos o nosso banco de dados 2 ou 3 subconjuntos:

- O conjunto de treino é usado para ensinar o modelo a reconhecer padrões (i.e., treinar o modelo)
- O conjunto de teste contém dados nunca vistos pelo modelo e serve para medir sua capacidade de generalização (i.e., testar o modelo)
- O conjunto de validação ajuda a ajustar os hiperparâmetros, evitando overfitting.



Figure 4: Treino, teste e validação

Overfitting e underfitting

Underfitting

- Modelo muito simples, não consegue capturar os padrões dos dados.
- Erro alto no treino e no teste.

Overfitting

- Modelo muito complexo, "decora" o conjunto de treino.
- Erro baixo no treino, mas alto no teste.
- Objetivo: encontrar o equilíbrio → boa performance no treino e no teste.

Overfitting e underfitting



Figure 5: Overfitting e underfitting

Avaliação de modelos – Regressão

■ Erro Médio Absoluto (MAE): média dos erros em valor absoluto

$$\mathsf{MAE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i|$$

■ Erro Quadrático Médio (MSE): penaliza mais os erros grandes

$$\mathsf{MSE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2$$

Raiz do Erro Quadrático Médio (RMSE): raiz do MSE

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}$$

Avaliação de modelos – Classificação

As métricas de classificação se baseiam, principalmente, na matriz de confusão:

	Predicted Positive	Predicted Negative
Actual Positive Actual Negative	True Positive (TP) False Positive (FP)	False Negative (FN) True Negative (TN)

Avaliação de modelos – Classificação

Acurácia: proporção de acertos totais

$$Accuracy = \frac{TP + TN}{TP + TN + FP + FN}$$

■ Precisão: dos preditos como positivos, quantos realmente são positivos?

$$Precision = \frac{TP}{TP + FP}$$

Recall (Sensibilidade): dos positivos reais, quantos foram identificados?

$$Recall = \frac{TP}{TP + FN}$$

■ F1-Score: equilíbrio entre precisão e recall

$$F1 = 2 \cdot \frac{Precision \cdot Recall}{Precision + Recall}$$

É possível treinar modelos para maximizar uma ou outra métrica, dependendo do target.

Outros modelos – k-NN

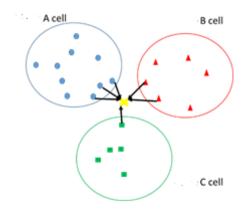
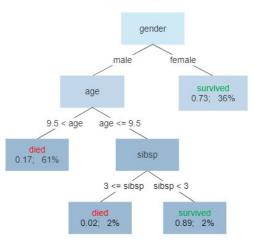


Figure 6: k-nearest neighbors

Outros modelos - Árvores de decisão

Survival of passengers on the Titanic



Outros modelos - Redes neurais

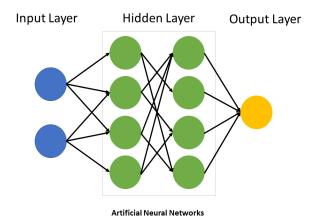


Figure 8: Neural networks

Tópicos especiais (que não veremos)

- Regularização (L1, L2, Dropout) para evitar overfitting
- k-fold cross-validation
- Técnicas de redução de dimensionalidade (PCA, UMAP, t-SNE)

Hands-on

Código!