



UNIVERSIDAD CEU SAN PABLO

ESCUELA POLITÉCNICA SUPERIOR

Grado en Ingeniería en Sistemas de Información

TRABAJO DE FIN DE GRADO

**Aplicación de Técnicas de
Machine Learning a la
Búsqueda de Materia Oscura
con Datos del Satélite Fermi-LAT**

*Application of Machine Learning Techniques to Dark Matter Search
using Fermi-LAT Satellite Data*

ALUMNA

Marta Canino Romero

TUTORA

Dra. Viviana Gammaldi

Madrid

Junio de 2025

Calificación del Trabajo Fin de Grado

Nombre del alumno

Título del proyecto

DATOS DEL TRIBUNAL

Presidente

Secretario

Vocal

Reunido este tribunal el ____ / ____/_____, acuerda otorgar al Trabajo Fin de Grado presentado por D./Dña. _____ la calificación de _____

Resumen

Este Trabajo de Fin de Grado aborda la detección de anomalías en fuentes de rayos gamma no identificadas del catálogo 4FGL del telescopio espacial Fermi-LAT, mediante técnicas de aprendizaje automático no supervisado. El objetivo es identificar fuentes que se desvíen del comportamiento típico de las fuentes astrofísicas conocidas, detectando posibles candidatos a fenómenos no convencionales como señales indirectas de materia oscura.

Se ha desarrollado un modelo basado en *One-Class Support Vector Machine* (OCSVM), entrenado exclusivamente con datos de fuentes astrofísicas identificadas, capaz de clasificar como anómalas aquellas muestras que se alejen de la distribución normal. El modelo ha sido evaluado en configuraciones de 2 y 4 características (2F y 4F), aplicando optimización de hiperparámetros mediante búsqueda en *grid* y validación cruzada.

Como análisis comparativo, se han replicado y ampliado los resultados de un estudio previo basado en redes neuronales artificiales (ANN), estableciendo una línea base para evaluar el enfoque no supervisado. La comparación permite identificar coincidencias y discrepancias en la detección de fuentes no identificadas relevantes.

El desarrollo siguió una metodología ágil *Scrum*, implementando un *pipeline* completo de ciencia de datos con preprocessamiento, transformaciones logarítmicas, escalado y evaluación sistemática. El sistema fue desarrollado en Python, utilizando scikit-learn, NumPy, Pandas y Matplotlib.

Los resultados demuestran la viabilidad del enfoque no supervisado para detectar anomalías en datos astrofísicos, proporcionando una herramienta complementaria a métodos supervisados. El trabajo contribuye a validar técnicas de *Machine Learning* en análisis de datos espaciales, demostrando el potencial interdisciplinar de la Ingeniería en Sistemas de Información.

Palabras clave: detección de anomalías, aprendizaje no supervisado, *One-Class Support Vector Machine*, Fermi-LAT, materia oscura, rayos gamma, astrofísica computacional, *machine learning*

Abstract

This Bachelor’s Thesis addresses the detection of anomalies in unidentified gamma-ray sources from the 4FGL catalog of the Fermi-LAT space telescope, through the application of unsupervised machine learning techniques. The main objective is to identify sources that deviate significantly from the typical behavior of known astrophysical sources, in order to detect possible candidates for unconventional phenomena, such as indirect dark matter signals.

A model based on *One-Class Support Vector Machine* (OCSVM) has been developed, trained exclusively with data from identified astrophysical sources, capable of classifying as anomalous those samples that deviate from the learned normal distribution. The model has been implemented and evaluated in configurations of 2 and 4 features (2F and 4F), applying hyperparameter optimization techniques through *grid* search and repeated cross-validation.

As part of the comparative analysis, the results of a previous study based on artificial neural networks (ANN) have been replicated and extended, establishing a baseline to evaluate the performance of the unsupervised approach. The comparison between both models allows identifying coincidences and discrepancies in the detection of potentially relevant unidentified sources.

The project development has followed an agile methodology based on *Scrum*, implementing a complete data science pipeline that includes data preprocessing, logarithmic transformations, scaling, and systematic evaluation of results. The system has been developed entirely in Python, using specialized libraries such as scikit-learn, NumPy, Pandas, and Matplotlib.

The results obtained demonstrate the feasibility of the unsupervised approach for anomaly detection in astrophysical data, providing a complementary tool to traditional supervised methods. The work contributes to the validation of *Machine Learning* techniques applied to space data analysis, demonstrating the interdisciplinary potential of Information Systems Engineering in the field of scientific research.

Keywords: anomaly detection, unsupervised learning, *One-Class Support Vector Machine*, Fermi-LAT, dark matter, gamma rays, computational astrophysics, machine learning

Índice general

Resumen	II
Abstract	III
1 Introducción	1
1.1 Objetivos del proyecto	2
1.2 Desarrollo del proyecto	2
1.3 Estructura del documento	3
2 Marco teórico	4
2.1 Contexto astrofísico y definición del problema	4
2.2 El catálogo 4FGL como fuente de datos	6
2.3 Características espectrales relevantes	7
2.4 Metodologías de Machine Learning aplicadas	7
2.5 Relevancia para la Ingeniería en Sistemas de Información	8
2.6 Introducción al aprendizaje automático	10
2.7 Modelos de detección de anomalías	11
2.8 Estado del arte de métodos aplicados en el campo	14
3 Gestión del Proyecto	17
3.1 Metodología y enfoque de trabajo	17
3.2 Modelo de ciclo de vida	17
3.3 Papeles desempeñados en el proyecto	20
3.4 Planificación y organización	20
3.5 Ejecución práctica	23
4 Modelo de referencia (ANN)	27
4.1 Modelo ANN 2F (estudio anterior)	27
4.2 Extensión del modelo ANN 4F	28
4.3 Comparación ANN 2F vs 4F	32
5 Desarrollo experimental (OCSVM)	35
5.1 Datos utilizados y preprocesamiento	35
5.2 Desarrollo del modelo OCSVM	42
5.3 Aplicación a fuentes no identificadas	54

Índice general

5.4	Análisis comparativo ANN vs OCSVM	66
5.5	Otros experimentos adicionales	71
6	Conclusiones y líneas futuras	76
6.1	Conclusiones principales	76
6.2	Limitaciones del trabajo	76
6.3	Aplicaciones potenciales e impacto	77
6.4	Líneas futuras de investigación	77
6.5	Reflexión final	77
7	Entregables	78
7.1	Repositorio del proyecto	78
7.2	Modelos desarrollados	78
7.3	Uso de herramientas de inteligencia artificial	79
	Bibliografía	80

Índice de figuras

1.1	Gráfica de distribución de energía y materia en el universo (Fuente de datos: Planck).	3
2.1	Mapa del cielo en rayos gamma del catálogo 4FGL	5
2.2	Distribución de clases de fuentes en 3FGL	5
2.3	Figura del telescopio Fermi-LAT.	6
2.4	Figura del telescopio Fermi-LAT.	9
2.5	Figura del telescopio Fermi-LAT.	10
2.6	Representación conceptual del algoritmo One-Class SVM. La hiperfrontera (línea roja) delimita la región de normalidad, separando los datos normales (puntos azules) de las potenciales anomalías (puntos rojos fuera del contorno).	13
3.1	Modelo de ciclo de vida ETL (Extract, Transform, Load) adaptado a Machine Learning y al contexto específico del TFG	18
3.2	Ciclo de vida iterativo definido en Sprints para planificación del TFG	19
3.3	Planificación temporal inicial del proyecto mostrando la distribución de épicas y <i>sprints</i> en el tiempo. El diagrama de Gantt permite visualizar las dependencias entre fases y la progresión secuencial del desarrollo.	23
3.4	Vista de gestión detallada del proyecto mostrando la organización jerárquica de épicas, <i>sprints</i> y tareas específicas. La interfaz permite el seguimiento granular del progreso y la gestión de dependencias entre actividades.	24
4.1	Distribución de probabilidades de clasificación del modelo ANN 2F sobre fuentes no identificadas. La concentración en valores bajos es coherente con la expectativa de escasez de señales genuinas de materia oscura.	29
4.2	Localización de candidatos identificados por el modelo ANN 2F en el espacio de características $\log_{10}(E_{\text{peak}})$ vs $\log_{10}(\beta)$. Los candidatos con mayor probabilidad se concentran en regiones específicas del espacio de parámetros.	29
4.3	Distribución de candidatos identificados por el modelo ANN 4F en el espacio de características $\log_{10}(E_{\text{peak}})$ vs $\log_{10}(\beta)$. Se observa una distribución más uniforme comparada con la localización específica del modelo 2F.	31

5.1	Distribuciones individuales de las cuatro variables espetrales	36
5.2	Matriz de correlación entre variales de Astro y DM	37
5.3	Matriz de correlación entre variales de Astro y DM	37
5.4	Distribuciones iniciales de las variables del dataset UNIDs	39
5.5	Comparación de distribuciones antes y después de la transformación logarítmica	41
5.6	Scatter plots multidimensionales antes de la transformación logarítmica	41
5.7	Scatter plots multidimensionales después de la transformación logarítmica	42
5.8	Distribución de las fuentes astrofísicas conocidas (ASTRO) en el espacio de características Log(E_peak) vs Log(beta)	44
5.9	Frontera de decisión del modelo OCSVM en el espacio Log(E_peak) vs Log(beta)	46
5.10	Proyecciones bidimensionales del modelo OCSVM 4F mostrando fronteras de decisión en diferentes subespacios	51
5.11	Proyecciones tridimensionales del modelo OCSVM 4F	52
5.12	Ánálisis estadístico completo del modelo OCSVM 2F aplicado a fuentes UNIDs	56
5.13	Aplicación de la frontera de decisión OCSVM 2F sobre fuentes UNIDs. Los 4 outliers se posicionan consistentemente fuera de la región de normalidad.	57
5.14	Distribución espacial de clasificaciones OCSVM 2F con sistema de visualización avanzado. Puntos dorados: UNIDs normales (1,121). Puntos rojos: UNIDs anómalos (4).	58
5.15	Ánálisis estadístico completo del modelo OCSVM 4F aplicado a fuentes UNIDs	60
5.16	Proyecciones bidimensionales del modelo OCSVM 4F mostrando las 6 combinaciones posibles de pares de características. Los candidatos aparecen consistentemente en las periferias, validando su clasificación como outliers genuinos.	61
5.17	Proyecciones tridimensionales del modelo OCSVM 4F proporcionando perspectiva volumétrica del espacio de características. Los outliers se distribuyen en diferentes regiones del espacio 3D.	62
5.18	Clasificación y distribución 3D de candidatos identificados con OCSVM aplicado a DR4. Se observa una clara separación entre fuentes asociadas y no asociadas, con codificación de color por puntuación de anomalía. .	73
5.19	Distribuciones comparadas de α , β y flux entre fuentes asociadas y no asociadas. La segunda fila muestra los box plots que reflejan diferencias significativas en dispersión y valores extremos.	74
5.20	Resultados de optimización: ratio de outliers para combinaciones de hiperparámetros (izquierda), distribución de ratios (centro), y correlación entre nu y ratio observado (derecha).	74

Índice de tablas

3.1	Organización del proyecto en épicas y <i>sprints</i>	22
4.1	Comparación de estrategias de validación entre modelos ANN 2F y 4F	30
4.2	Comparación metodológica entre modelos ANN 2F y 4F	31
4.3	Comparación de estabilidad y rendimiento entre modelos ANN 2F y 4F	32
5.1	Hiperparámetros clave del modelo OCSVM	43
5.2	Matriz de confusión del modelo OCSVM 2F	47
5.3	Matriz de confusión del modelo OCSVM 4F	49
5.4	Candidatos principales detectados por el modelo OCSVM 2F	56
5.5	Comparación estadística entre modelos OCSVM 2F y 4F	59
5.6	Top 5 candidatos detectados por el modelo OCSVM 4F	59
5.7	Rendimiento cuantitativo: comparación OCSVM 2F vs 4F	61
5.8	Matriz de complementariedad entre modelos OCSVM 2F y 4F	64
5.9	Clasificación por tiers de candidatos prometedores	65
5.10	Diferencias fundamentales entre enfoques ANN y OCSVM	66
5.11	Análisis de consenso entre ANN 2F y OCSVM 2F	67
5.12	Ranking de outliers OCSVM en sistema ANN	67
5.13	Ranking de top ANN en sistema OCSVM	68
5.14	Persistencia de divergencia metodológica across dimensionalidades	69
5.15	Evolución del posicionamiento cruzado en modelos 4F	69
5.16	Evaluación de candidatos ANN 4F en sistema OCSVM	69
5.17	Métricas consolidadas del framework comparativo ANN vs OCSVM	70
5.18	Comparativa estadística entre fuentes asociadas y candidatos detectados	73
5.19	Resumen comparativo de experimentos OCSVM desarrollados	75

Capítulo 1

Introducción

Este Trabajo de Fin de Grado (TFG) aborda uno de los mayores desafíos de la física contemporánea: la detección indirecta de materia oscura (*Dark Matter*, DM) mediante técnicas avanzadas de *Machine Learning*. En particular, se emplean datos reales obtenidos por el telescopio espacial *Fermi-Large Area Telescope* (Fermi-LAT) de la NASA (ver Figura 2.3), destacando la aplicación interdisciplinar de la Ingeniería en Sistemas de Información en problemas complejos de la astrofísica moderna.

La materia oscura constituye aproximadamente el 27 % del contenido del universo, significativamente mayor que la materia ordinaria visible (aproximadamente 5 %), siendo el resto energía oscura [1]. Esta distribución cósmica se ilustra claramente en la Figura 1.1. Su existencia se infiere indirectamente por efectos gravitacionales observados en galaxias y estructuras cosmológicas, como curvas de rotación galácticas y lentes gravitacionales [2].

Entre las teorías más aceptadas destacan las partículas masivas débilmente interactuantes (*Weakly Interacting Massive Particles*, WIMPs), cuya aniquilación podría generar señales electromagnéticas detectables, especialmente en la banda gamma [3]. Esto convierte al telescopio espacial Fermi-LAT, especializado en la observación de rayos gamma de alta energía, en una herramienta esencial para la búsqueda indirecta de materia oscura.

El catálogo 4FGL de Fermi-LAT contiene más de 5,000 fuentes gamma, de las cuales alrededor de un tercio permanecen sin identificar (UNIDs) [4]. Estas fuentes podrían representar tanto fenómenos astrofísicos desconocidos como candidatos potenciales para detecciones indirectas de materia oscura. La complejidad e incertidumbre asociadas a estos datos los convierten en casos ideales para aplicar técnicas avanzadas de detección de anomalías y aprendizaje automático no supervisado.

Los estudios previos han utilizado principalmente enfoques supervisados, basados en redes neuronales artificiales (ANN), para clasificar fuentes gamma [5]. Sin embargo, estos métodos requieren datos representativos etiquetados que no siempre están disponibles o son suficientes para detectar fenómenos completamente nuevos.

Este proyecto supera dichas limitaciones mediante técnicas de detección de anomalías no supervisadas, específicamente *One-Class Support Vector Machines* (OCSVM), capaces de identificar fuentes anómalas entrenándose únicamente con la clase normal conocida (fuentes astrofísicas identificadas). Este enfoque ofrece ventajas significativas en la identificación de potenciales fuentes de materia oscura.

1.1. Objetivos del proyecto

El objetivo principal de este proyecto es desarrollar un modelo robusto basado en técnicas no supervisadas (OCSVM) para detectar fuentes anómalas en los datos del catálogo Fermi-LAT, con el propósito de identificar posibles candidatos a materia oscura.

1.1.1. Objetivos específicos

- Diseñar e implementar un *pipeline* efectivo de preprocesamiento de datos del catálogo 4FGL.
- Construir modelos OCSVM con diferentes combinaciones de características espe- trales (2 y 4 características).
- Optimizar hiperparámetros mediante validación cruzada repetida y técnicas de búsqueda sistemática.
- Identificar y analizar fuentes clasificadas como anómalas, evaluando su potencial como candidatos a materia oscura.
- Realizar comparaciones cuantitativas con modelos ANN previos para evaluar complementariedad metodológica.
- Validar la robustez del modelo mediante análisis de sensibilidad y métricas de rendimiento.

Se busca así demostrar la validez y complementariedad de métodos no supervisados respecto a enfoques supervisados existentes, ampliando las capacidades analíticas en la búsqueda indirecta de materia oscura.

1.2. Desarrollo del proyecto

El proyecto incluye adaptación y expansión de código base ANN previamente desarro- llado por [6], implementación de modelos OCSVM, y análisis comparativo detallado. La metodología experimental seguida se esquematiza en la Figura 2.5. Todo el desarro- llo ha sido realizado íntegramente en Python, utilizando herramientas especializadas como scikit-learn, NumPy, Pandas y Matplotlib, dentro del entorno interactivo Jupyter Notebook.

El proceso de desarrollo se estructura en fases claramente definidas: preprocesamien- to de datos, selección de características, entrenamiento de modelos, optimización de hiperparámetros, evaluación de resultados y análisis comparativo. Esta metodología

sistemática garantiza la reproducibilidad y validez científica de los resultados obtenidos.

1.3. Estructura del documento

El documento está estructurado en los siguientes capítulos principales:

- **Capítulo 1:** Introducción, objetivos y estructura general del proyecto.
- **Capítulo 2:** Marco teórico, estado del arte y fundamentación científica.
- **Capítulo 3:** Gestión metodológica del proyecto (metodología ágil, planificación temporal y asignación de roles).
- **Capítulo 4:** Estudio preliminar y validación del modelo ANN base para establecer línea de comparación.
- **Capítulo 5:** Desarrollo experimental con OCSVM, análisis de resultados y comparación metodológica detallada.
- **Capítulo 6:** Conclusiones generales, limitaciones identificadas y propuestas para trabajos futuros.

Finalmente, se incluyen bibliografía completa y anexos técnicos complementarios con detalles de implementación y resultados adicionales.

El propósito final del proyecto no es resolver definitivamente el enigma de la materia oscura, sino ofrecer una metodología técnica robusta y replicable, demostrando el impacto y aplicabilidad de la Ingeniería en Sistemas de Información a desafíos científicos complejos e interdisciplinarios.

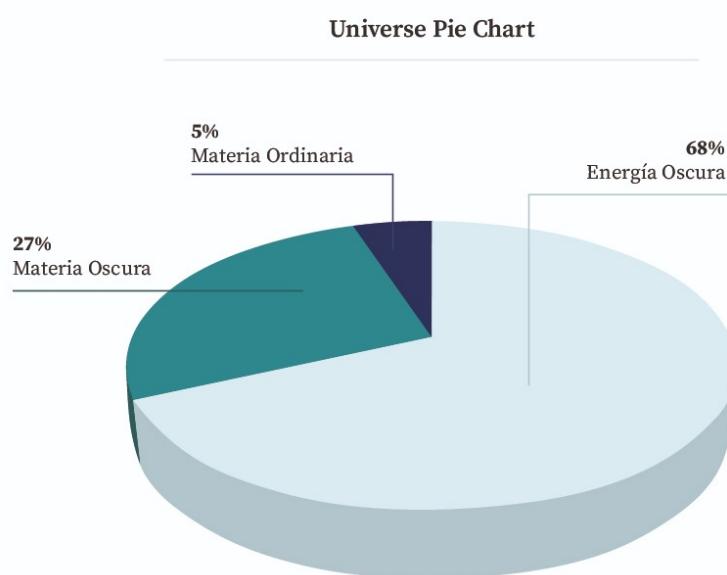


Figura 1.1. Gráfica de distribución de energía y materia en el universo (Fuente de datos: Planck).

Capítulo 2

Marco teórico

2.1. Contexto astrofísico y definición del problema

Desde su lanzamiento en 2008, el telescopio espacial *Fermi Large Area Telescope* (Fermi-LAT) ha revolucionado nuestra comprensión del universo en la banda de rayos gamma de alta energía (ver Figura 2.1). Sus observaciones han resultado en la publicación de una serie de catálogos públicos progresivamente más completos, siendo el más reciente el 4FGL, que contiene información detallada de más de 5000 fuentes gamma detectadas [4].

La distribución de estas fuentes en el cielo gamma se muestra en la Figura 2.1, donde se aprecia tanto la concentración de fuentes en el plano galáctico como la presencia de fuentes extragalácticas distribuidas isotrópicamente. La mayoría de estas fuentes han sido asociadas con objetos astrofísicos conocidos, como púlsares, núcleos galácticos activos (AGN) y remanentes de supernova, utilizando observaciones complementarias en otras longitudes de onda.

Sin embargo, aproximadamente un tercio de las fuentes detectadas permanecen sin identificar claramente (*unassociated gamma-ray sources*, UNIDs). Estas fuentes constituyen un desafío científico significativo, ya que podrían representar tanto fenómenos astrofísicos aún no descubiertos como potenciales señales indirectas de materia oscura (*Dark Matter, DM*) [5].

2.1.1. La materia oscura: evidencias y modelos teóricos

La existencia de materia oscura se infiere principalmente a partir de observaciones indirectas que evidencian efectos gravitacionales inexplicables por la materia visible. Las evidencias más convincentes incluyen:

- **Curvas de rotación galácticas:** Las velocidades orbitales de estrellas en galaxias espirales permanecen aproximadamente constantes con el radio, en lugar de decrecer como predice la mecánica newtoniana para la materia visible [2].

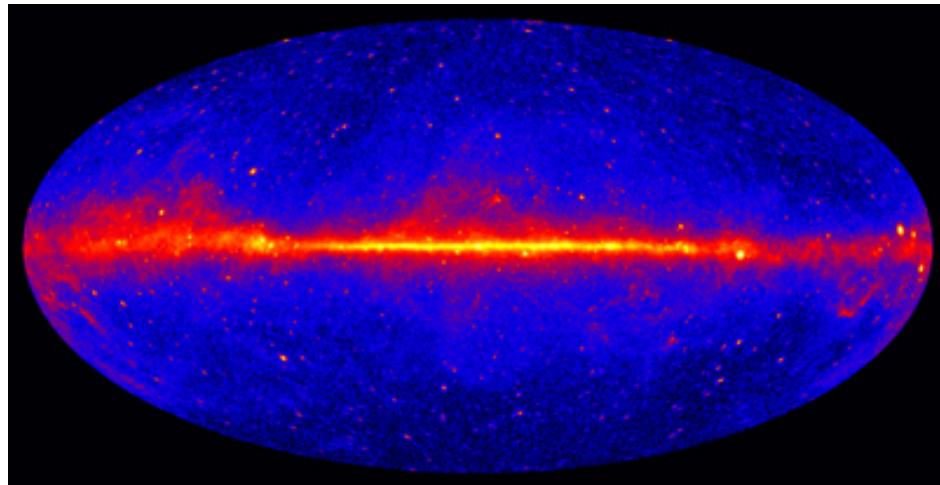
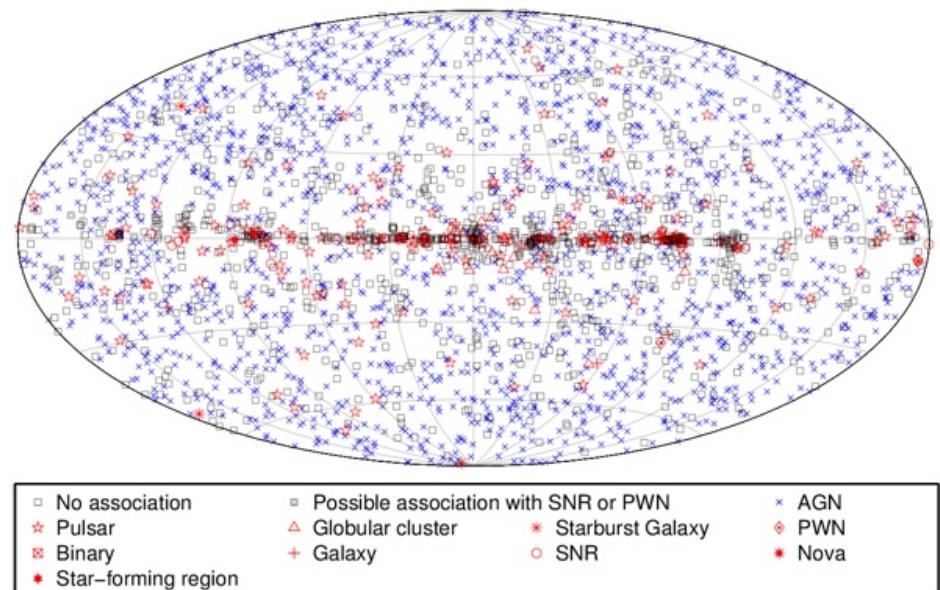


Figura 2.1. Mapa del cielo en rayos gamma del catálogo 4FGL



□ No association	□ Possible association with SNR or PWN	×	AGN
★ Pulsar	△ Globular cluster	* Starburst Galaxy	◊ PWN
▣ Binary	+ Galaxy	○ SNR	★ Nova
◆ Star-forming region			

Figura 2.2. Distribución de clases de fuentes en 3FGL

- **Lentes gravitacionales:** La deflexión de la luz por cúmulos galácticos indica la presencia de masa adicional no visible.
- **Estructura cósmica a gran escala:** Las simulaciones de formación de estructura requieren materia oscura para reproducir las observaciones.

Entre las hipótesis más aceptadas destaca el modelo de partículas masivas débilmente interactuantes (WIMPs), cuya posible aniquilación podría generar rayos gamma detectables desde regiones con alta densidad de materia oscura [3]. El espectro de aniquilación teórico de WIMPs se ilustra en la Figura ??, mostrando las características espetrales distintivas que podrían diferenciarlo de fuentes astrofísicas convencionales.

2.2. El catálogo 4FGL como fuente de datos

El catálogo 4FGL (*Fourth Fermi-LAT Gamma-ray Source Catalog*) representa la compilación más completa de fuentes de rayos gamma disponible públicamente. Este catálogo incluye información detallada para cada fuente detectada:

- **Información posicional:** Coordenadas celestes en sistemas galácticos y ecuatoriales, con incertidumbres asociadas.
- **Parámetros espetrales:** Energía de pico, índices espetrales, curvatura y sus respectivas incertidumbres.
- **Significancia estadística:** *Test Statistic* (TS) que cuantifica la confianza en la detección.
- **Variabilidad temporal:** Indicadores de variabilidad en diferentes escalas temporales.
- **Asociaciones:** Contrapartes identificadas en otras longitudes de onda cuando están disponibles.

La distribución de clases de fuentes en el catálogo 4FGL se presenta en la Figura ??, donde se observa claramente la fracción significativa de fuentes no identificadas que constituyen el objetivo principal de este estudio.

Los datos son accesibles públicamente a través del *Fermi Science Support Center (FSSC)* de la NASA, facilitando su procesamiento computacional mediante herramientas de análisis estándar y bibliotecas especializadas de Python.

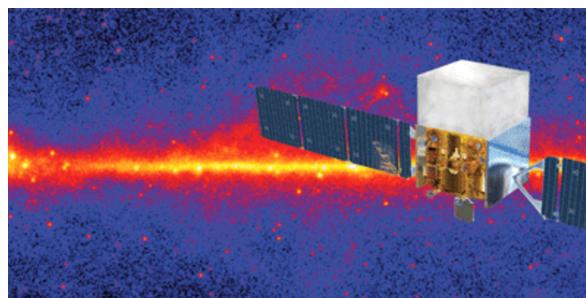


Figura 2.3. Figura del telescopio Fermi-LAT.

2.3. Características espectrales relevantes

La selección adecuada de características (*features*) es fundamental para maximizar el rendimiento de los algoritmos de ML aplicados. Basándose en estudios previos [5, 6] y en el análisis físico de las propiedades espectrales relevantes, se han considerado las siguientes características clave:

- **Energía pico (E_{peak})**: Energía en la cual se registra el máximo flujo de rayos gamma emitidos por la fuente. Esta característica es fundamental para distinguir entre diferentes mecanismos de emisión.
- **Curvatura espectral (β)**: Parámetro que describe cómo varía el flujo gamma con la energía, caracterizando la forma espectral de la fuente y proporcionando información sobre los procesos físicos subyacentes.
- **Incertidumbre en la curvatura (β_{rel})**: Indica la precisión en la medición del parámetro de curvatura espectral, importante para evaluar la fiabilidad de la caracterización espectral.
- **Significancia estadística (σ_d)**: Representa el grado de confianza estadística en la detección de la fuente, relacionado directamente con la calidad de los datos disponibles.

La correlación entre estas características se visualiza en la Figura 5.2, mostrando las relaciones no triviales que justifican el uso de técnicas de ML para su análisis conjunto.

2.4. Metodologías de Machine Learning aplicadas

2.4.1. Enfoques supervisados tradicionales

Tradicionalmente, los estudios en este ámbito se han enfocado en técnicas supervisadas como redes neuronales artificiales (ANN), *Random Forest* o *Support Vector Machines*, utilizando fuentes clasificadas como conjunto de entrenamiento para predecir la naturaleza de fuentes no identificadas [5, 6].

Estos métodos han demostrado eficacia en la clasificación de fuentes conocidas, alcanzando precisiones superiores al 90 % en la diferenciación entre púlsares y AGNs. Sin embargo, presentan limitaciones significativas:

- Requieren grandes conjuntos de datos etiquetados representativos de todas las clases.
- Asumen que las clases de interés están presentes en el conjunto de entrenamiento.
- Tienen dificultades para detectar fenómenos completamente nuevos o raros.

2.4.2. Detección de anomalías no supervisada

Este proyecto propone un enfoque alternativo utilizando técnicas no supervisadas de detección de anomalías, específicamente *One-Class Support Vector Machines* (OCSVM).

El fundamento de OCSVM es entrenarse exclusivamente con datos representativos de una clase conocida (fuentes astrofísicas identificadas), detectando como anomalías aquellas muestras significativamente alejadas de esta distribución [7].

El OCSVM construye una frontera de decisión que engloba la mayoría de los datos de entrenamiento en un espacio de características transformado por una función kernel. La Figura 2.4 ilustra conceptualmente este proceso, mostrando cómo se establece la región normal y se identifican las anomalías.

Las ventajas del OCSVM en este contexto incluyen:

- **No requiere etiquetas de anomalías:** Solo necesita ejemplos de la clase normal.
- **Robustez ante desequilibrios:** Efectivo cuando las anomalías son extremadamente raras.
- **Detección no lineal:** Capacidad para identificar patrones complejos mediante kernels.
- **Flexibilidad:** Parámetros ajustables para controlar la sensibilidad de detección.

2.4.3. Proceso experimental propuesto

La metodología experimental desarrollada sigue el flujo de trabajo esquematizado en la Figura 2.5, que incluye las siguientes etapas principales:

1. **Preprocesamiento de datos:** Limpieza, normalización y selección de características.
2. **División de conjuntos:** Separación en datos de entrenamiento (fuentes identificadas) y evaluación.
3. **Entrenamiento OCSVM:** Optimización de hiperparámetros mediante validación cruzada.
4. **Detección de anomalías:** Identificación de fuentes anómalas en el conjunto completo.
5. **Análisis y validación:** Comparación con métodos supervisados y evaluación de candidatos.

Este enfoque sistemático garantiza la reproducibilidad de los resultados y permite una evaluación rigurosa de la metodología propuesta.

2.5. Relevancia para la Ingeniería en Sistemas de Información

Desde la perspectiva de la Ingeniería en Sistemas de Información, este proyecto se inscribe en el ámbito interdisciplinar de la ciencia de datos aplicada a problemas científicos complejos. Los aspectos más relevantes incluyen:

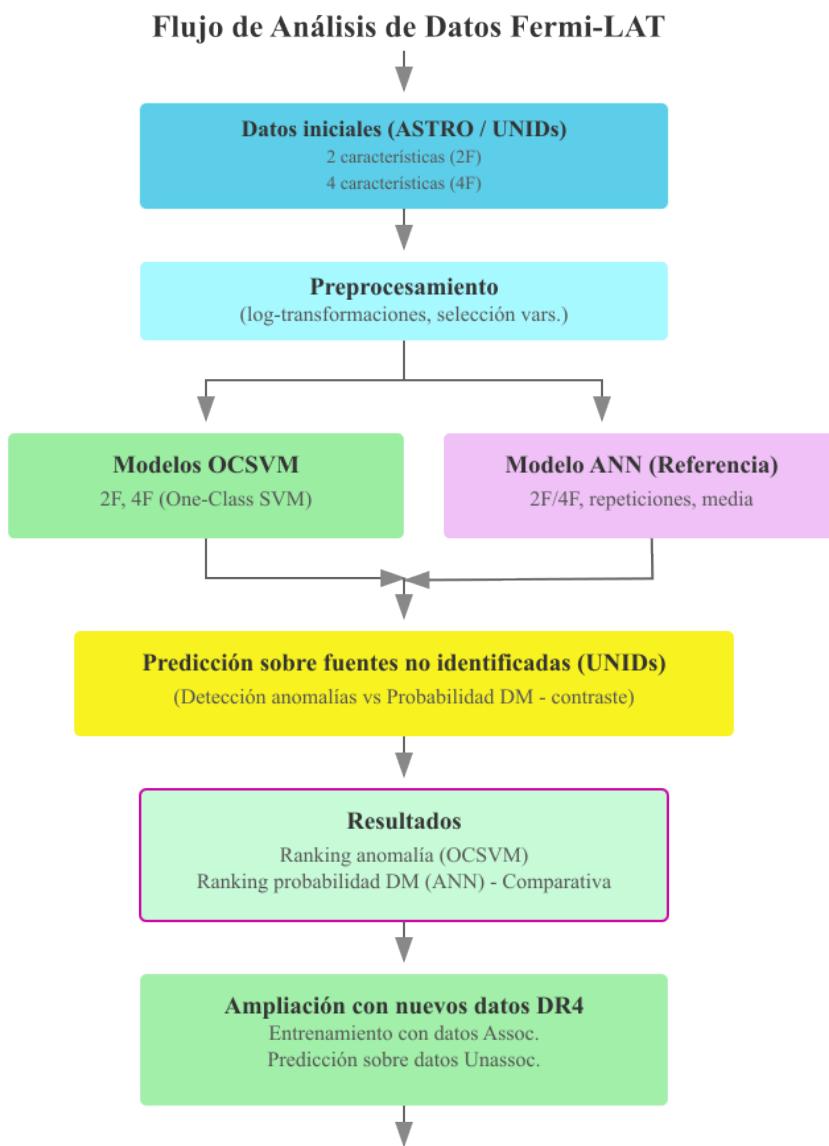


Figura 2.4. Figura del telescopio Fermi-LAT.

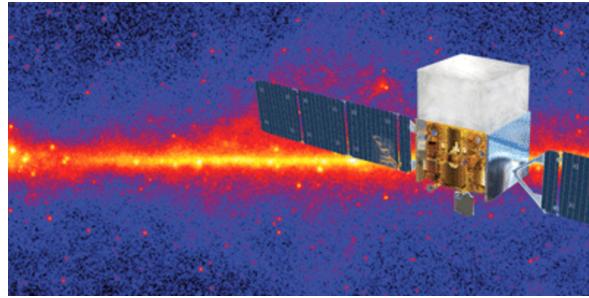


Figura 2.5. Figura del telescopio Fermi-LAT.

- **Gestión de big data:** Procesamiento eficiente de catálogos astronómicos con miles de fuentes y múltiples características.
- **Desarrollo de pipelines analíticos:** Implementación de flujos de trabajo reproducibles para análisis de datos científicos.
- **Optimización algorítmica:** Ajuste de hiperparámetros y evaluación de rendimiento en problemas de alta dimensionalidad.
- **Visualización de resultados:** Desarrollo de herramientas gráficas para interpretación de resultados complejos.

Este trabajo establece un precedente metodológico valioso para futuros estudios interdisciplinarios, demostrando cómo los sistemas de información pueden contribuir eficazmente a problemas fundamentales de la física contemporánea, ampliando así el impacto y aplicabilidad de la ingeniería informática en el ámbito científico.

2.6. Introducción al aprendizaje automático

El **aprendizaje automático** (*Machine Learning*, ML) es una disciplina surgida como subcampo de la **inteligencia artificial** (IA) en la década de 1950. Su objetivo principal es desarrollar algoritmos y modelos que permitan a las computadoras **aprender automáticamente a partir de los datos**, sin estar explícitamente programadas para realizar una tarea específica [8].

Según [9], el aprendizaje puede definirse como “el proceso de cambio y mejora del comportamiento mediante la exploración de nueva información a lo largo del tiempo”. Cuando este proceso de aprendizaje es llevado a cabo por máquinas, hablamos de **aprendizaje automático**.

En la última década, las técnicas basadas en aprendizaje automático han experimentado un **crecimiento exponencial**, impulsando avances significativos en diversas áreas, como la **conducción autónoma**, la **medicina personalizada**, las **finanzas**, la **industria manufacturera** y la **energía renovable** [10]. El aprendizaje automático se considera una de las tecnologías más disruptivas de la actualidad, con un impacto comparable al de la introducción de los ordenadores personales en los años ochenta y noventa.

El objetivo esencial del aprendizaje automático es **identificar patrones en los datos** para resolver problemas complejos o realizar predicciones. Por ejemplo, en el contexto

de un **vehículo autónomo**, grandes cantidades de datos de sensores deben procesarse y traducirse en decisiones, como frenar o girar, mediante un sistema que ha aprendido a identificar patrones asociados a situaciones de “peligro” [10].

2.6.1. Tipos de aprendizaje automático

El aprendizaje automático se puede clasificar de diversas maneras, siendo una de las más comunes aquella basada en la **disponibilidad de datos etiquetados**. Según [11], los principales tipos de aprendizaje automático son los siguientes:

- **Aprendizaje supervisado:** los algoritmos se entrena con datos que incluyen tanto las **entradas** como las **salidas esperadas**. Se utiliza para tareas como:
 - **Regresión:** predicción de valores continuos (por ejemplo, el precio de una casa)
 - **Clasificación:** asignación de una categoría a una entrada (por ejemplo, detectar si una imagen contiene un gato o un perro)
- **Aprendizaje no supervisado:** los datos de entrenamiento **no están etiquetados**. El modelo busca descubrir patrones ocultos o estructuras subyacentes. Entre las técnicas más comunes se encuentran:
 - **Clustering** (agrupamiento): agrupar datos similares en conjuntos
 - **Reducción de dimensionalidad:** simplificar los datos manteniendo la mayor cantidad de información relevante posible
- **Aprendizaje semi-supervisado:** combinación de un pequeño conjunto de datos etiquetados con una gran cantidad de datos no etiquetados, para mejorar el rendimiento del modelo
- **Aprendizaje por refuerzo:** los algoritmos aprenden mediante **interacción con un entorno**, recibiendo **recompensas** o **penalizaciones** en función de las acciones realizadas, con el objetivo de maximizar una señal de recompensa acumulada

Estos enfoques constituyen la base del aprendizaje automático y han sido aplicados con éxito en campos tan diversos como la **física de partículas**, la **astronomía** y la **búsqueda de materia oscura**, donde los datos son abundantes, complejos y de difícil interpretación mediante métodos tradicionales.

2.7. Modelos de detección de anomalías

La **detección de anomalías** es un enfoque dentro del aprendizaje automático que busca **identificar patrones o comportamientos inusuales** que se desvían significativamente del comportamiento esperado o “normal” en un conjunto de datos. Las observaciones identificadas como anómalas pueden representar **errores, fraudes, fallos técnicos o fenómenos raros**, dependiendo del contexto de aplicación [12].

Este tipo de técnicas se utiliza ampliamente en campos tan diversos como la **detección de fraudes financieros**, la **ciberseguridad** (por ejemplo, detección de intrusiones

en redes), el **diagnóstico médico asistido** (como el monitoreo cardíaco), la **industria aeroespacial** (detección de fallos en sistemas críticos), o el **procesamiento de imágenes hiperespectrales** en aplicaciones de teledetección [13].

En términos generales, la detección de anomalías puede considerarse como una **tarea de clasificación binaria**, en la que el objetivo es distinguir entre instancias “normales” y “anómalias”. Sin embargo, a diferencia de los problemas clásicos de clasificación, en muchos escenarios la clase anómala está **poco representada o directamente ausente** en los datos de entrenamiento, lo que limita la aplicabilidad de los modelos supervisados tradicionales [14].

2.7.1. Taxonomía de enfoques de detección de anomalías

Dependiendo del tipo de información disponible para el entrenamiento, los enfoques de detección de anomalías pueden clasificarse en tres categorías principales [13]:

- **Detección de anomalías supervisada**

Requiere un conjunto de datos etiquetado que contenga tanto instancias normales como anómalias. En este caso, se entrena un modelo predictivo convencional (por ejemplo, regresión logística o redes neuronales) para aprender a clasificar ambas clases. Sin embargo, en muchos casos reales, las **anomalías son escasas o difíciles de etiquetar**, lo que limita la eficacia de este enfoque.

- **Detección de anomalías semisupervisada**

En este enfoque, el modelo se entrena **únicamente con instancias normales**. Se asume que cualquier observación futura que difiera significativamente del patrón aprendido puede considerarse anómala. Este método es especialmente útil cuando **no se dispone de ejemplos de anomalías**, como ocurre en muchos problemas del mundo real, incluyendo la identificación de fuentes astrofísicas inusuales.

- **Detección de anomalías no supervisada**

Este enfoque **no requiere etiquetas** previas. El modelo infiere qué observaciones son “normales” y cuáles no, basándose en su frecuencia o en la densidad de los datos. Se asume que las **anomalías son estadísticamente raras**. Técnicas como *clustering*, k-nearest neighbors, Isolation Forest o autoencoders suelen aplicarse en esta categoría. Aunque es versátil, este enfoque puede ser propenso a falsos positivos si la distribución de los datos no cumple ciertos supuestos.

En este proyecto se ha optado por un enfoque **semisupervisado**, en el que se parte de un conjunto de fuentes gamma **ya clasificadas** como “normales” (por ejemplo, AGN o púlsares), y se entrena un modelo para detectar patrones que se desvían significativamente de estos. En concreto, se ha utilizado el algoritmo **One-Class Support Vector Machine (OCSVM)**, una técnica basada en aprendizaje automático que aprende los límites de una clase positiva y **detecta desviaciones respecto a esa frontera** como posibles anomalías [7]. Esta metodología resulta especialmente adecuada cuando

se busca identificar **instancias inusuales en grandes volúmenes de datos no etiquetados**, como ocurre con las fuentes no identificadas del catálogo Fermi-LAT.

2.7.2. Enfoque en One-Class SVM (OCSVM)

El algoritmo **One-Class Support Vector Machine (OCSVM)** es una técnica de aprendizaje automático **semisupervisada**, utilizada para la detección de anomalías cuando solo se dispone de datos de una única clase (la clase “normal”). A diferencia de los clasificadores tradicionales, el OCSVM no busca separar dos o más clases distintas, sino **modelar el contorno de una única clase** en el espacio de características, de manera que cualquier punto que quede fuera de ese contorno sea considerado como potencialmente anómalo [7].

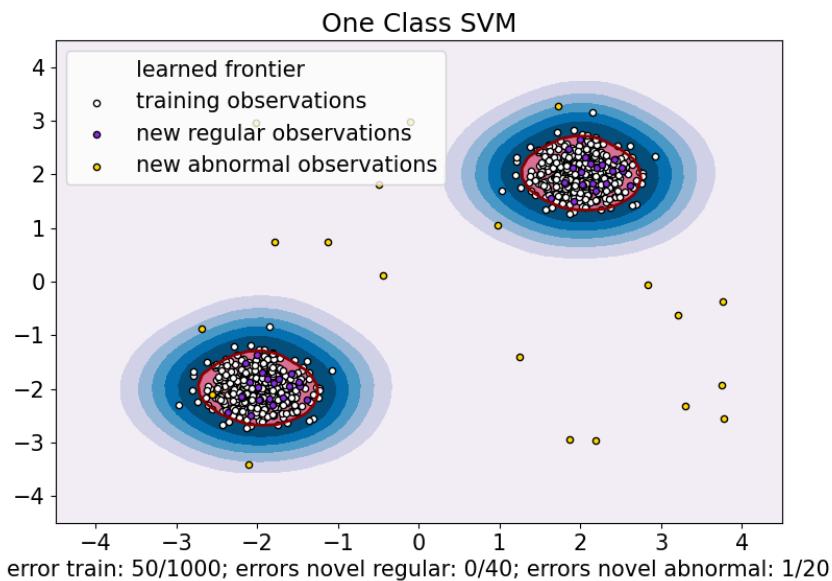


Figura 2.6. Representación conceptual del algoritmo One-Class SVM. La hiperfrontera (línea roja) delimita la región de normalidad, separando los datos normales (puntos azules) de las potenciales anomalías (puntos rojos fuera del contorno).

OCSVM (Figura 2.6) es una extensión del algoritmo SVM convencional. Utiliza una función **kernel** (generalmente el kernel radial o RBF) para proyectar los datos en un espacio de mayor dimensión, donde se construye una **hiperfrontera** que rodea la mayoría de los datos de entrenamiento. Este modelo intenta **maximizar el margen respecto al origen**, lo que permite identificar observaciones fuera del contorno como *outliers*.

Los **parámetros clave** de **OCSVM** incluyen:

- ν (**nu**): controla la fracción de *outliers* permitidos en los datos de entrenamiento y el número de vectores de soporte. Un valor más alto de ν permite mayor flexibilidad, pero puede generar más falsos positivos

- **Kernel:** la función utilizada para mapear los datos al espacio de características. El kernel RBF (función gaussiana) es el más común en detección de anomalías, ya que permite modelar fronteras no lineales
- γ (**gamma**): parámetro del kernel RBF que determina la influencia de cada punto individual. Valores pequeños generan fronteras suaves; valores grandes producen fronteras más ajustadas

OCSVM es especialmente adecuado para contextos en los que **se dispone de muchos datos bien clasificados de una clase conocida**, pero **las observaciones anómalias son escasas o desconocidas**, como ocurre en este proyecto con las fuentes astrofísicas del catálogo Fermi-LAT. En este caso, el modelo se entrena con un conjunto de fuentes etiquetadas (por ejemplo, AGNs y púlsares) y se aplica posteriormente a las fuentes no identificadas, con el objetivo de detectar aquellas que se alejan significativamente de las clases conocidas y que podrían ser candidatas a fenómenos aún no clasificados, incluida la materia oscura.

2.7.3. Detección de novedades vs. detección de anomalías

En este proyecto, el modelo OCSVM se ha utilizado bajo el enfoque de **detección de novedades** (*novelty detection*), en el que se entrena con un conjunto de fuentes gamma conocidas y clasificadas, para luego aplicarlo a nuevas observaciones (las fuentes no identificadas) y determinar si presentan propiedades significativamente diferentes a las clases conocidas.

Esto difiere del enfoque clásico de **detección de anomalías** (*anomaly detection*), que trabaja directamente sobre un conjunto mixto, en el que las anomalías están embebidas entre los datos normales. En el contexto del catálogo Fermi-LAT, donde se busca evaluar si las fuentes no clasificadas podrían representar una clase distinta (como materia oscura), el paradigma de *novelty detection* resulta más apropiado.

2.8. Estado del arte de métodos aplicados en el campo

La aplicación de técnicas de aprendizaje automático en astrofísica de altas energías ha crecido considerablemente debido a la disponibilidad de grandes catálogos de datos, como los generados por el telescopio espacial Fermi-LAT, y al avance en algoritmos computacionales. Estas técnicas permiten abordar la clasificación automática de fuentes gamma y la identificación de posibles señales relacionadas con fenómenos exóticos, como la materia oscura.

2.8.1. Clasificación supervisada en astrofísica

Uno de los primeros estudios relevantes fue realizado por [5], quienes aplicaron técnicas supervisadas como Random Forest y redes neuronales artificiales (ANN) para clasificar

fuentes gamma en categorías conocidas (púlsares, blazares y núcleos galácticos activos), alcanzando precisiones superiores al 85 %. Su contribución principal radicó en demostrar la eficacia del uso de parámetros espectrales, destacando especialmente la inclusión de incertidumbres en los datos, lo que permitió mejorar significativamente el desempeño de los modelos supervisados.

2.8.2. Búsqueda de materia oscura con aprendizaje automático

Inicialmente, [15] propusieron el uso de fuentes no identificadas (UNIDs) del catálogo Fermi-LAT como posibles candidatos de materia oscura mediante análisis estadísticos tradicionales, estableciendo criterios físicos importantes para la selección de candidatos, como la ausencia de contrapartidas conocidas y espectros compatibles con teorías sobre aniquilación de materia oscura. Dichos criterios han inspirado enfoques posteriores que integran técnicas más avanzadas de ML.

Recientemente, [6] desarrollaron un enfoque sistemático utilizando redes neuronales (ANN) para identificar posibles fuentes de materia oscura entre las fuentes no identificadas de Fermi-LAT, estableciendo una metodología robusta y replicable que ha servido como base para este trabajo.

2.8.3. Detección de anomalías en contextos físicos

Aunque relativamente menos explorada en astrofísica gamma, la detección de anomalías ha sido ampliamente utilizada en física de partículas y en contextos relacionados para identificar fenómenos raros o desconocidos. [10] destacan específicamente su potencial para descubrir "nueva física" en contextos similares al presente estudio. Asimismo, [13] y [12] ofrecen revisiones metodológicas extensas sobre detección de anomalías, resaltando su idoneidad en dominios donde predominan clases poco frecuentes o desconocidas.

2.8.4. Aplicación de One-Class SVM en astrofísica

Aunque no se registra una aplicación previa directa de One-Class SVM (OCSVM) en datos Fermi-LAT para la búsqueda de materia oscura, su efectividad para detectar anomalías en datos complejos y altamente dimensionales está bien documentada. El trabajo seminal de [7] estableció fundamentos teóricos sólidos, mientras [14] destacaron la eficacia del OCSVM en contextos caracterizados por:

- Disponibilidad amplia de ejemplos "normales".
- Rareza estadística de las anomalías.
- Necesidad de fronteras de decisión no lineales.

Estas características coinciden plenamente con los requisitos específicos de la detección de posibles señales de materia oscura en fuentes gamma.

2.8.5. Desafíos metodológicos en la literatura actual

Diversos estudios previos han identificado desafíos clave que este trabajo busca abordar directamente:

- **Desbalance extremo de clases:** La señal potencial de materia oscura representa una fracción mínima del total de fuentes analizadas.
- **Ausencia de verdad fundamental:** No existen casos confirmados de materia oscura que permitan entrenamiento supervisado directo.
- **Alta dimensionalidad y complejidad espectral:** Los parámetros espectrales de Fermi-LAT conforman un espacio complejo y altamente dimensional.
- **Ruido instrumental y sistemático:** Las incertidumbres en los datos pueden confundirse con señales genuinas, afectando la fiabilidad de los modelos.

2.8.6. Contribución específica de este trabajo

Este trabajo contribuye al estado del arte al proponer un enfoque híbrido novedoso que combina eficazmente:

- La robustez teórica del algoritmo OCSVM para detección de anomalías.
- Una referencia supervisada mediante modelos ANN entrenados en simulaciones específicas de materia oscura, basados en la metodología previamente desarrollada por [6].
- La integración sistemática de parámetros espectrales y sus incertidumbres.
- Un enfoque escalable e interpretable, adaptado específicamente a la astrofísica de altas energías.

Este marco metodológico no solo avanza en la identificación automatizada de posibles candidatos a materia oscura, sino que establece una referencia clara para futuras investigaciones en la intersección entre machine learning y astronomía de altas energías.

Capítulo 3

Gestión del Proyecto

3.1. Metodología y enfoque de trabajo

Para la planificación y ejecución de este Trabajo de Fin de Grado se ha optado por adoptar un enfoque basado en **metodologías ágiles**, ampliamente utilizadas en proyectos de desarrollo de software y en el ámbito tecnológico. Aunque inicialmente estas metodologías podrían parecer poco **adaptables** a un **proyecto de investigación científica** con componentes de *Machine Learning* (ML), su **naturaleza iterativa** y su capacidad de adaptación ante la incertidumbre las hacen especialmente adecuadas para abordar problemas complejos y dinámicos, como los asociados al aprendizaje automático.

En el ámbito de *Machine Learning*, el proceso **ETL** (*Extract, Transform, Load*) estructura de manera iterativa las fases de definición del problema, extracción de datos, preparación de datos, desarrollo y evaluación de modelos, y, en su caso, despliegue. Este ciclo, al ser iterativo, guarda paralelismos conceptuales con la estructura de **sprints** en metodologías ágiles, lo que ha permitido extrapolarlo y adaptarlo al esquema de planificación del presente trabajo.

El enfoque ágil aporta beneficios clave en este contexto, entre ellos la posibilidad de abordar un problema inicialmente percibido como una “**caja negra**”—una metáfora frecuente en la descripción de los modelos de aprendizaje automático— mediante una **estrategia incremental y de aprendizaje continuo**. Esta metodología favorece la incorporación progresiva de conocimiento, la revisión constante de los avances y la posibilidad de ajustar objetivos y enfoques conforme se obtienen resultados parciales.

Con este enfoque metodológico, se espera optimizar el desarrollo del proyecto y alcanzar resultados significativos que contribuyan al estudio de la materia oscura.

3.2. Modelo de ciclo de vida

El ciclo de vida del proyecto describe las fases principales por las que transcurre su desarrollo, desde su concepción inicial hasta su finalización, incluyendo los hitos, en-

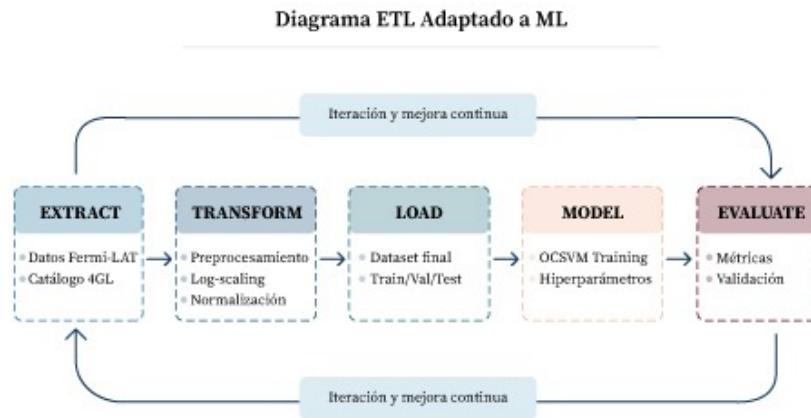


Figura 3.1. Modelo de ciclo de vida ETL (Extract, Transform, Load) adaptado a Machine Learning y al contexto específico del TFG

tregables y mecanismos de control que lo estructuran. En el presente Trabajo de Fin de Grado, el ciclo de vida adoptado sigue un **modelo iterativo e incremental**, en coherencia con la metodología ágil seleccionada (Scrum y prácticas de eXtreme Programming), y adaptado a las particularidades de un proyecto de investigación científica con aplicación de técnicas de *Machine Learning*.

A diferencia de los modelos tradicionales en cascada, que se desarrollan de manera lineal y secuencial, el modelo de ciclo de vida adoptado para este proyecto se basa en **iteraciones sucesivas (sprints)** que permiten la entrega progresiva de resultados parciales, la revisión continua y la adaptación dinámica a nuevos hallazgos, dificultades o necesidades emergentes.

3.2.1. Fases del ciclo de vida

El ciclo de vida del proyecto se estructura en las siguientes fases principales, que se corresponden con las épicas definidas en la planificación:

1. Definición y organización inicial (EPIC-01):

En esta fase se establecen los objetivos generales, el alcance del proyecto y el marco teórico inicial. Se organiza el *backlog* inicial y se priorizan las tareas. Constituye la base sobre la que se construirá el trabajo posterior, asegurando una comprensión clara del problema y de los recursos disponibles.

2. Análisis y validación del modelo base (EPIC-02):

Esta fase se centra en la ejecución, análisis y documentación del modelo preexistente (ANN), con el objetivo de comprender sus fundamentos, reproducir resultados y establecer una línea base sobre la que se construirá el nuevo modelo.

3. Desarrollo iterativo del nuevo modelo (EPIC-03):

Corresponde a la fase de diseño, implementación, entrenamiento y optimización del nuevo modelo de detección de anomalías. Esta etapa se aborda de forma

incremental mediante varios *sprints*, permitiendo evaluar resultados parciales, realizar ajustes y mejorar progresivamente el rendimiento del modelo.

4. Integración, análisis comparativo y documentación final (EPIC-04):

En esta fase se integran los resultados del modelo base y del nuevo modelo, se realiza un análisis comparativo y se preparan los productos finales del proyecto, incluyendo la redacción del informe definitivo y la preparación de la presentación para la defensa.

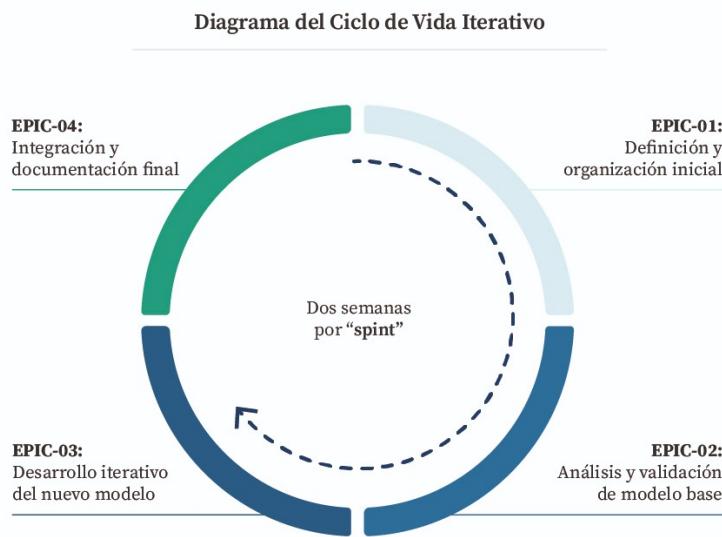


Figura 3.2. Ciclo de vida iterativo definido en Sprints para planificación del TFG

3.2.2. Estructura iterativa

Cada una de estas fases se desarrolla a través de **ciclos iterativos** (*sprints*) de aproximadamente dos semanas, que incluyen planificación, ejecución de tareas, seguimiento, revisión de resultados y retrospectiva. Este ciclo se repite para cada fase, promoviendo la mejora continua y la adaptación a los desafíos del proyecto.

Además, el ciclo de vida incorpora **puntos de control y revisión** con el tutor (*Product Owner*) al cierre de cada *sprint* y en momentos clave, que permiten evaluar el avance, recoger retroalimentación y definir posibles ajustes en los objetivos o en la estrategia de trabajo.

En conjunto, el modelo de ciclo de vida adoptado combina las ventajas de un enfoque ágil —flexibilidad, iteración, entrega progresiva de valor— con las necesidades propias de un proyecto de investigación, asegurando una gestión adaptativa, centrada en resultados y orientada al aprendizaje continuo.

3.3. Papeles desempeñados en el proyecto

El desarrollo del presente Trabajo de Fin de Grado ha seguido un enfoque basado en metodologías ágiles, adoptando el marco de Scrum como guía principal de organización. En este contexto, los papeles desempeñados en el proyecto se han adaptado a las características de un proyecto académico con un único desarrollador.

Los roles principales han sido los siguientes:

- **Product Owner (Tutor):** El tutor del TFG ha asumido el papel de *Product Owner*, siendo responsable de orientar la definición de objetivos, priorizar las tareas principales, proporcionar retroalimentación durante las reuniones de seguimiento y supervisar la calidad de los entregables parciales y finales. Su intervención ha sido clave para asegurar que el proyecto mantuviera la alineación con los objetivos académicos y de investigación.
- **Scrum Team (Alumno):** El alumno ha desempeñado de manera integral el rol de *Scrum Team*, asumiendo todas las funciones operativas del proyecto. Entre sus responsabilidades principales se incluyen la planificación de los *sprints*, la ejecución de las tareas definidas en las historias de usuario, la documentación de los resultados, la implementación y evaluación de los modelos de aprendizaje automático, así como la redacción de la memoria final.
- **Scrum Master (Autogestionado):** Dado el carácter individual del proyecto, las funciones propias del rol de *Scrum Master* —facilitar los procesos, eliminar impedimentos y velar por el cumplimiento de la metodología— han sido asumidas también por el alumno, en un ejercicio de autogestión y autorregulación, contando con la supervisión puntual del tutor para resolver bloqueos específicos.

La adaptación de estos roles ha permitido mantener una organización ágil y flexible, favoreciendo la autonomía en la ejecución y la iteración continua mediante revisiones periódicas con el tutor, alineadas con las prácticas de revisión continua y *pair programming* adaptado propias de eXtreme Programming (XP).

3.4. Planificación y organización

La aplicación de esta metodología ágil se ha materializado en una planificación inicial estructurada en cuatro épicas principales, cada una con sus respectivos *sprints* y entregables definidos. Este esquema permite gestionar el proyecto de manera iterativa, incremental y flexible, adaptándose a los retos y descubrimientos propios de un proceso investigativo.

La metodología ágil adoptada se fundamenta principalmente en el marco de Scrum, complementado con prácticas específicas de eXtreme Programming (XP), adaptadas al contexto académico e investigativo. La organización del trabajo se estructura en épicas, entendidas como grandes bloques funcionales o fases principales del proyecto, subdivididas a su vez en *sprints* de dos semanas de duración.

3.4.1. Estructura de los sprints

Cada *sprint* incluye las siguientes fases principales:

- **Definición de User Stories:** Se formulan descripciones claras y concisas de las tareas a realizar, alineadas con los objetivos específicos de cada fase. Estas historias de usuario contemplan actividades como la revisión del código base, la replicación de resultados previos y la experimentación con nuevos modelos. Cada historia incorpora criterios de aceptación que permiten evaluar objetivamente su grado de finalización.
- **Planificación del Sprint:** Antes de iniciar cada *sprint*, se priorizan las historias de usuario en función de su impacto y viabilidad, estableciendo un alcance realista y orientado a la consecución de entregables parciales.
- **Seguimiento y Control:** Durante el *sprint* se realiza un seguimiento continuo del estado de las tareas mediante un tablero Kanban implementado en Excel, que permite visualizar el progreso, detectar bloqueos y replanificar si fuera necesario.
- **Revisión y Retrospectiva:** Al finalizar cada *sprint* se evalúa el cumplimiento de los objetivos, se documentan los logros y se reflexiona sobre las áreas de mejora, con el fin de aplicar los aprendizajes en los ciclos siguientes.

3.4.2. Prácticas de eXtreme Programming integradas

En paralelo, se integran prácticas de eXtreme Programming (XP) como:

- Revisión continua del código y documentación de funciones (integrada en las tareas de análisis y comprensión del modelo base)
- Validación incremental de los prototipos mediante pruebas funcionales durante las fases de entrenamiento y optimización
- Revisiones periódicas con el tutor, entendidas como una forma adaptada de “*pair programming*” orientada al control de calidad y mejora continua
- Criterios de aceptación explícitos para cada tarea y *sprint*, que aseguran una definición clara de los entregables y sus estándares de calidad

Este enfoque metodológico se acompaña de reuniones semanales con el tutor (*Product Owner*), en las que se revisa el progreso, se priorizan nuevas actividades y se definen posibles ajustes en los objetivos o estrategias.

3.4.3. Organización detallada por sprints

A continuación, se detalla la organización en épicas y *sprints* de manera compacta. En el Anexo se incluye una versión extensa y detallada con las tareas que abarca cada *sprint*.

Sprint	Épica	Objetivo	Entregables
Sprint 1	EPIC-01	Definir alcance, organizar <i>backlog</i> , revisión bibliográfica	Alcance definido, <i>backlog</i> priorizado, marco teórico inicial
Sprint 2	EPIC-02	Validar y documentar modelo base ANN	Código ejecutado y documentado, resultados iniciales, metodología preliminar
Sprint 3	EPIC-03 (Parte I)	Diseñar arquitectura y prototipo del nuevo modelo	Arquitectura definida, prototipo base, metodología redactada
Sprint 4	EPIC-03 (Parte II)	Entrenar prototipo y obtener resultados preliminares	Prototipo entrenado, resultados preliminares, redacción resultados iniciales
Sprint 5	EPIC-03 (Parte III)	Optimizar y validar modelo	Modelo optimizado y validado, documentación mejoras, revisión parcial con tutor
Sprint 6	EPIC-04 (Parte I)	Integrar y comparar resultados	Resultados integrados y comparados, análisis preliminar, documentación análisis, revisión parcial con tutor
Sprint 7	EPIC-04 (Parte II)	Revisión y corrección del borrador final	Borrador revisado y corregido
Sprint 8	EPIC-04 (Parte III)	Preparación defensa y entrega final	Presentación final, memoria definitiva

Tabla 3.1. Organización del proyecto en épicas y *sprints*

3.4.4. Planificación temporal del proyecto

La Figura 3.3 muestra la planificación inicial del proyecto, organizada mediante un diagrama de Gantt que ilustra la distribución temporal de las épicas y *sprints* a lo largo del desarrollo del TFG. Esta planificación inicial sirvió como hoja de ruta para la gestión del proyecto, permitiendo visualizar las dependencias entre tareas y establecer hitos claros de progreso.

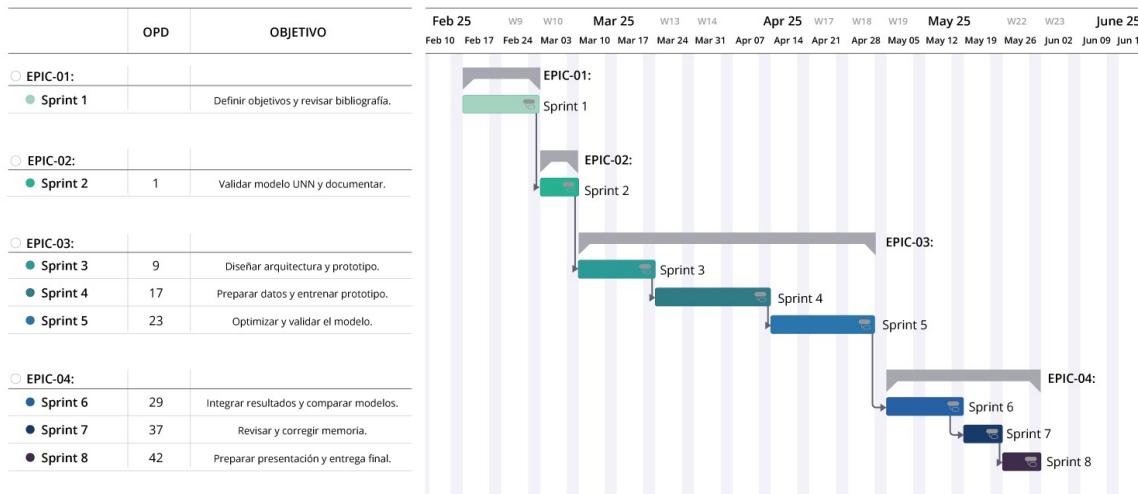


Figura 3.3. Planificación temporal inicial del proyecto mostrando la distribución de épicas y *sprints* en el tiempo. El diagrama de Gantt permite visualizar las dependencias entre fases y la progresión secuencial del desarrollo.

Complementariamente, la Figura 3.4 presenta la vista de gestión detallada del proyecto, donde se pueden observar las tareas específicas agrupadas por épicas y *sprints*, junto con sus estados de progreso y criterios de finalización.

Esta planificación inicial demostró ser efectiva para mantener el enfoque del proyecto y permitir una gestión adaptativa ante los desafíos inherentes a la investigación en *machine learning* aplicado a astrofísica.

3.5. Ejecución práctica

La ejecución técnica del proyecto se centró en el desarrollo y evaluación de una serie de modelos de detección de anomalías aplicados al catálogo Fermi-LAT, con el objetivo de identificar posibles candidatos a materia oscura. Para ello, se utilizó como base la librería de código abierto para Python **Scikit-Learn**, que permite construir modelos clásicos de ML.

Scikit-Learn se trata de una suite que incluye una variedad de herramientas cubriendo todas las fases del ciclo de desarrollo de un modelo de *Machine Learning* (preprocesamiento, entrenamiento y pruebas, ajuste de hiperparámetros, etc.), por lo que permite construir el *pipeline* completo del modelo de aprendizaje automático utilizando únicamente su librería.

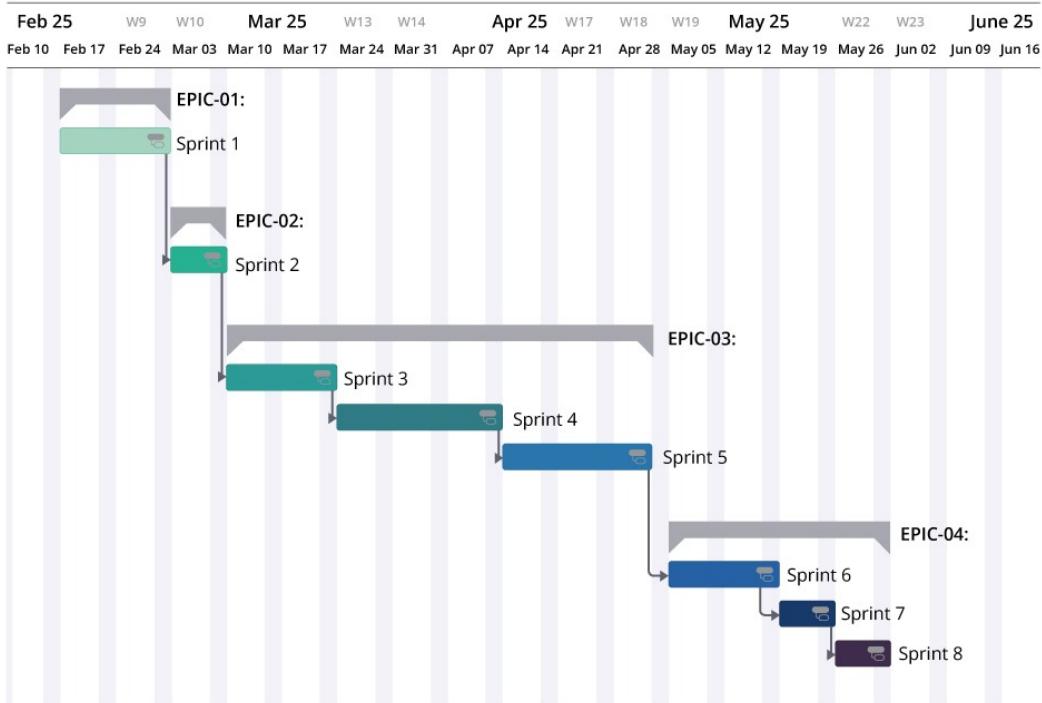


Figura 3.4. Vista de gestión detallada del proyecto mostrando la organización jerárquica de épicas, sprints y tareas específicas. La interfaz permite el seguimiento granular del progreso y la gestión de dependencias entre actividades.

Además, se trabajó en entornos **Jupyter Notebook**, concretamente dentro de la herramienta **Visual Studio Code** y sus diferentes *plug-ins*, lo que permitió realizar un análisis interactivo y exploratorio de los datos, así como una visualización directa de los resultados intermedios.

3.5.1. Desarrollo del modelo OCSVM

El desarrollo comenzó con la implementación de un modelo **One-Class Support Vector Machine (OCSVM)**. El modelo OneClassSVM entra dentro de los modelos no supervisados de detección de anomalías, los cuales engloban tanto la detección de valores atípicos como la detección de novedades. En el caso concreto de OneClassSVM, se utiliza para la **detección de novedades**, es decir, los datos de entrenamiento se asumen que no están “contaminados” por valores atípicos, y el interés se centra en determinar si una nueva observación se trata de un valor atípico. En este contexto, al valor atípico también se le denomina *novedad*.

Se eligió este modelo no supervisado como modelo a entrenar con la intención de, en primer lugar, entrenar al modelo tan solo con datos “ASTRO”. Es decir, se entrena al modelo con la fuente de datos del catálogo del satélite Fermi-LAT que contiene fuentes identificadas, con sus correspondientes valores para unos determinados parámetros que se explican en detalle en el Capítulo 4. Así, una vez el modelo haya aprendido lo que es “normal” (considerando las fuentes astrofísicas identificadas como lo normal), se le alimenta con los datos UNIDs, o fuentes no identificadas del catálogo.

Es por ello por lo que los distintos modelos OCSVM fueron entrenados exclusivamente con datos de fuentes astrofísicas identificadas (ASTRO) del catálogo Fermi-LAT, utilizando inicialmente **dos características principales (2F)**: E_{peak} y β , y posteriormente se ampliaron a **cuatro características (4F)**, incorporando nuevas variables disponibles en los datos: σ_{det} y β_{rel} , lo que permitió evaluar el impacto de incluir más información en la capacidad de detección y clasificación del modelo.

3.5.2. Análisis del modelo de referencia

De manera complementaria, se realizó un análisis del modelo de red neuronal previamente desarrollado en estudios anteriores, cuyo código fue revisado para asegurar su correcto funcionamiento, y posteriormente ampliado para validar los resultados obtenidos.

Este modelo de redes neuronales, al haber sido desarrollado inicialmente también sobre 2F (E_{peak} y β) y después sobre 4F (E_{peak} , β , σ_{det} y β_{rel}), sirvió como **referencia comparativa** frente a los modelos OCSVM implementados en este trabajo, permitiendo contrastar los resultados y evaluar posibles coincidencias en la selección de candidatos a materia oscura.

3.5.3. Métricas de evaluación y validación

Dado el carácter no supervisado del modelo OCSVM, la evaluación se basó en métricas específicas para detección de anomalías y *novelty detection*, diferentes a las métricas tradicionales de clasificación supervisada. Las métricas principales empleadas fueron:

- **Fracción de outliers detectados:** Se monitoreó el porcentaje de fuentes clasificadas como anómalas tanto en entrenamiento como en test, buscando mantener valores consistentes con el parámetro ν establecido
- **Decision scores:** Se analizó la distribución de los *decision scores* del modelo, evaluando su media, desviación estándar y rango para asegurar una separación clara entre la región normal y las anomalías detectadas
- **Consistencia de la frontera de decisión:** Se validó que la frontera aprendida englobara apropiadamente la mayoría de fuentes ASTRO ($>99\%$) mientras mantuviera capacidad discriminatoria
- **Robustez de las clasificaciones:** Se verificó que los outliers detectados aparecieran consistentemente como anómalos en múltiples proyecciones del espacio de características, especialmente en el modelo 4F

La validación cualitativa de los resultados se apoyó en la **visualización gráfica** de las fronteras de decisión y las distribuciones de datos, facilitando la interpretación astrofísica de los patrones detectados y la identificación de candidatos coherentes con las expectativas teóricas de señales de materia oscura.

3.5.4. Extensión con nuevos datos

Además, una vez obtenida una nueva fuente de datos (denominados **DR4**) que presentaba información más detallada de tanto fuentes identificadas como no identificadas, utilizando diferentes parámetros, se desarrolló un modelo OneClassSVM adicional entrenado con **3 características (3F)** sobre fuentes identificadas que se usó para predecir sobre las fuentes no identificadas.

Esta extensión permitió evaluar la robustez del enfoque propuesto con conjuntos de datos independientes y parámetros espectrales alternativos, proporcionando una validación adicional de la metodología desarrollada.

Capítulo 4

Modelo de referencia (ANN)

Para establecer una línea base de comparación y validar la efectividad del enfoque OCSVM propuesto, se analizó y reprodujo el modelo de redes neuronales artificiales (ANN) desarrollado en estudios anteriores. Este modelo de referencia permite evaluar el rendimiento relativo de las técnicas de detección de anomalías implementadas en este trabajo.

4.1. Modelo ANN 2F (estudio anterior)

4.1.1. Arquitectura y configuración

El modelo de red neuronal artificial implementa una arquitectura de **perceptrón multicapa (MLP)** optimizada para la clasificación binaria de fuentes gamma. El modelo aborda el problema como una tarea de **clasificación supervisada**, distinguiendo entre:

- **Clase 0:** Fuentes astrofísicas convencionales (púlsares, AGN, etc.)
- **Clase 1:** Fuentes simuladas con características espectrales compatibles con emisión de materia oscura

Las especificaciones técnicas de la arquitectura son:

- **Capa de entrada:** 2 neuronas ($\log_{10}(E_{\text{peak}})$, $\log_{10}(\beta)$)
- **Capa oculta:** 21 neuronas con activación ReLU
- **Capa de salida:** 1 neurona con activación sigmoidal
- **Optimizador:** Adam (tasa de aprendizaje = 0.015)
- **Normalización:** StandardScaler aplicado a las características de entrada

4.1.2. Metodología de validación

Para obtener una estimación robusta del rendimiento, se implementó **validación cruzada estratificada repetida** con 5 pliegues y 2 repeticiones, generando 10 evalua-

ciones independientes. Esta configuración garantiza la representatividad estadística y reduce la variabilidad asociada a divisiones específicas de los datos.

El protocolo de evaluación incluye:

1. División estratificada entrenamiento/prueba (80 %/20 %)
2. Normalización mediante StandardScaler (ajustado solo en entrenamiento)
3. Entrenamiento con algoritmo Adam
4. Evaluación mediante métricas de clasificación estándar

4.1.3. Aplicación a fuentes no identificadas

Una vez entrenado, el modelo se aplicó al conjunto de fuentes no identificadas (UNIDs) del catálogo 4FGL-DR3, generando **probabilidades de clasificación** que indican el grado de similitud con los patrones aprendidos para candidatos de materia oscura.

La metodología de predicción genera una matriz de probabilidades donde cada fuente UNID recibe 10 estimaciones independientes, permitiendo calcular tanto la probabilidad media como la incertidumbre asociada a cada predicción.

4.1.4. Resultados del modelo ANN 2F

El análisis estadístico de las predicciones sobre fuentes no identificadas revela un comportamiento **conservador y consistente**:

- **0 candidatos** de muy alta confianza ($p \geq 95\%$)
- **0 candidatos** de alta confianza ($90\% \leq p < 95\%$)
- **1 candidato** de confianza moderada ($50\% \leq p < 90\%$)
- **9 fuentes** con baja incertidumbre ($\sigma \leq 0.1$)

La distribución de probabilidades (Figura 4.1) muestra concentración en valores bajos (0.1-0.4), coherente con la expectativa de escasez de señales genuinas de materia oscura. En el espacio de características (Figura 4.2), los candidatos con mayor probabilidad se localizan en regiones específicas, sugiriendo que el modelo identifica patrones físicamente coherentes.

El modelo exhibe una **correlación negativa** entre probabilidad media e incertidumbre, indicando mayor consistencia en las predicciones de candidatos más prometedores. Estos resultados proporcionan una línea base sólida para la comparación posterior con el modelo OCSVM 2F y el análisis de consenso entre metodologías.

4.2. Extensión del modelo ANN 4F

La extensión del modelo ANN a cuatro características espectrales representa una evolución natural del enfoque 2F, incorporando información adicional para mejorar la capacidad discriminativa entre fuentes de materia oscura y astrofísicas convencionales.

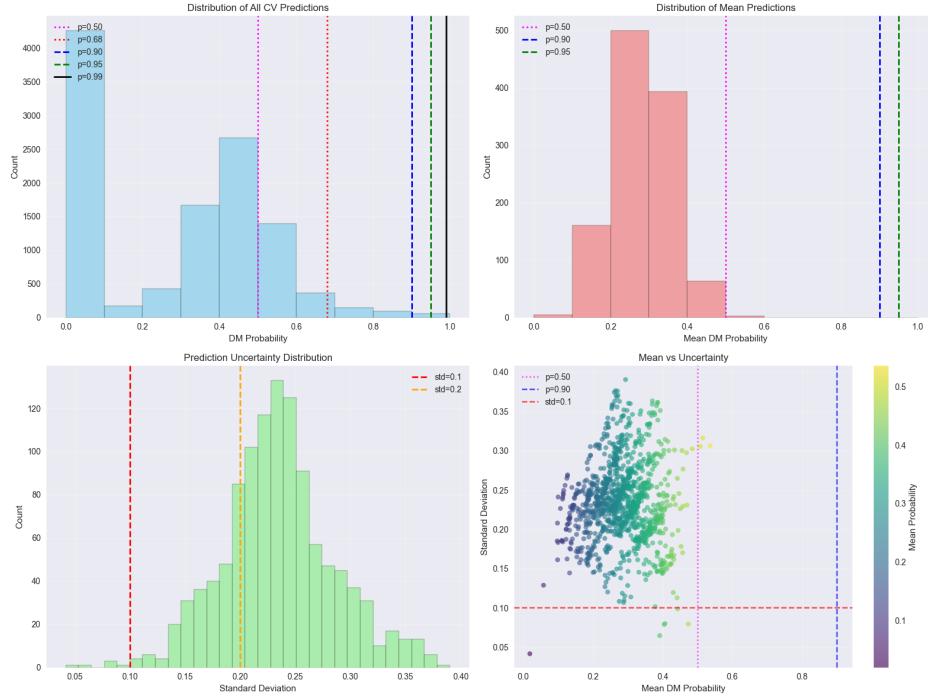


Figura 4.1. Distribución de probabilidades de clasificación del modelo ANN 2F sobre fuentes no identificadas. La concentración en valores bajos es coherente con la expectativa de escasez de señales genuinas de materia oscura.

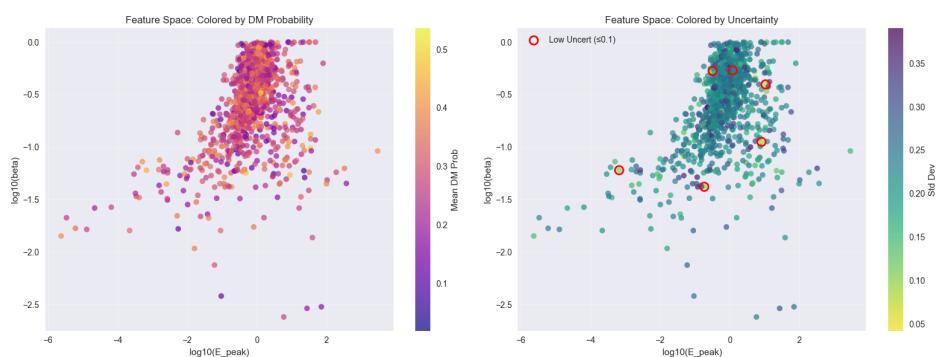


Figura 4.2. Localización de candidatos identificados por el modelo ANN 2F en el espacio de características $\log_{10}(E_{peak})$ vs $\log_{10}(\beta)$. Los candidatos con mayor probabilidad se concentran en regiones específicas del espacio de parámetros.

4.2.1. Características adicionales

El modelo 4F amplía el conjunto de variables de entrada incluyendo:

- σ_{det} : Significancia de la detección de la fuente
- β_{rel} : Variante relativística del parámetro espectral β

Estas características se suman a las dos originales (E_{peak} y β), manteniendo la transformación logarítmica para todas las variables de entrada: $\log_{10}(E_{\text{peak}})$, $\log_{10}(\beta)$, $\log_{10}(\sigma_{\text{det}})$, y $\log_{10}(\beta_{\text{rel}})$.

4.2.2. Arquitectura y configuración

El modelo mantiene la misma arquitectura base que la versión 2F:

- **Capa de entrada:** 4 neuronas (vs. 2 en el modelo 2F)
- **Capa oculta:** 21 neuronas con activación ReLU
- **Configuración de entrenamiento:** Idéntica al modelo 2F (Adam, lr=0.015, sin regularización L2)

4.2.3. Estrategia de validación simplificada

La validación cruzada se simplifica respecto al modelo 2F:

Parámetro	ANN 2F	ANN 4F
Pliegues (k)	5	5
Repeticiones	2	1
Evaluaciones totales	10	5

Tabla 4.1. Comparación de estrategias de validación entre modelos ANN 2F y 4F

Esta reducción en el número de evaluaciones disminuye la robustez estadística pero mantiene la metodología básica de validación estratificada.

4.2.4. Resultados del modelo ANN 4F

El análisis de fuentes no identificadas con el modelo 4F revela un comportamiento **significativamente diferente** al modelo 2F, evidenciando el impacto de las características adicionales:

- **24 candidatos** de confianza moderada ($50 \% \leq p < 90 \%$) vs. 1 en el modelo 2F
- **120 fuentes** con baja incertidumbre ($\sigma \leq 0.1$) vs. 9 en el modelo 2F
- **2 candidatos** estables ($CV \leq 0.15$) vs. 0 en el modelo 2F
- **0 candidatos** de alta confianza ($p \geq 90 \%$) en ambos modelos

4.2.5. Análisis del espacio de características

El modelo 4F muestra una **distribución más uniforme** de candidatos en el espacio de características $\log_{10}(E_{\text{peak}})$ vs $\log_{10}(\beta)$ (Figura 4.3), contrastando con la localización

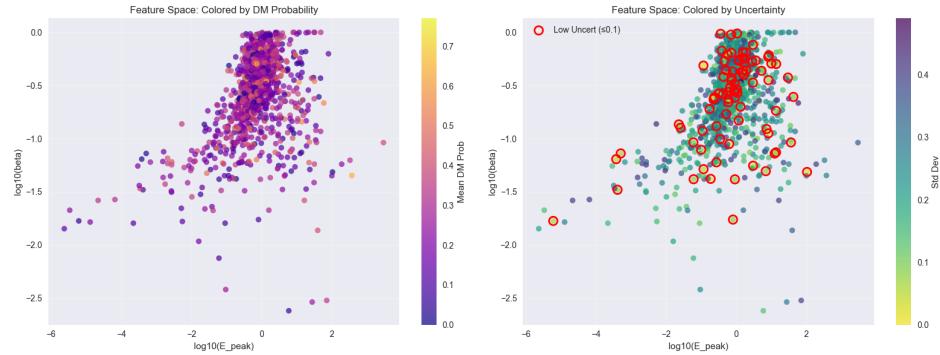


Figura 4.3. Distribución de candidatos identificados por el modelo ANN 4F en el espacio de características $\log_{10}(E_{\text{peak}})$ vs $\log_{10}(\beta)$. Se observa una distribución más uniforme comparada con la localización específica del modelo 2F.

específica observada en el modelo 2F. Esta mayor dispersión sugiere que las características adicionales (σ_{det} y β_{rel}) permiten identificar patrones de materia oscura en regiones más amplias del espacio paramétrico.

4.2.6. Impacto de las características adicionales

La incorporación de σ_{det} y β_{rel} produce efectos notables en la identificación de candidatos:

- **Incremento sustancial:** $24 \times$ más candidatos moderados y $13 \times$ más fuentes de baja incertidumbre
- **Mayor sensibilidad:** El modelo identifica patrones más sutiles en los datos
- **Distribución expandida:** Candidatos distribuidos en un rango más amplio del espacio de características
- **Consistencia mejorada:** Incremento en fuentes con predicciones estables

4.2.7. Comparación metodológica 2F vs 4F

Aspecto	ANN 2F	ANN 4F	Interpretación
Candidatos moderados	1	24	Mayor sensibilidad del 4F
Baja incertidumbre	9	120	Mejor consistencia interna
Distribución espacial	Localizada	Dispersa	Discriminación más amplia
Robustez estadística	10 folds	5 folds	Menor validación en 4F

Tabla 4.2. Comparación metodológica entre modelos ANN 2F y 4F

Este incremento en candidatos identificados debe interpretarse considerando la **menor robustez estadística** del modelo 4F (5 vs. 10 evaluaciones de validación cruzada), aspecto que será crucial en el análisis de consenso posterior con los modelos OCSVM.

4.3. Comparación ANN 2F vs 4F

Durante el desarrollo del análisis se identificó **variabilidad significativa** en los resultados entre ejecuciones independientes del modelo, debido a la inicialización aleatoria de pesos en las redes neuronales y la naturaleza estocástica de la validación cruzada. Para abordar esta limitación metodológica, se implementó un **análisis de consenso** basado en tres ejecuciones independientes de cada modelo.

4.3.1. Metodología de consenso

La metodología de consenso permite:

- **Identificar candidatos robustos:** Fuentes que aparecen consistentemente entre ejecuciones
- **Cuantificar la incertidumbre del modelo:** Variabilidad entre predicciones independientes
- **Mejorar la confiabilidad:** Reducir falsos positivos mediante consistencia estadística
- **Validar la estabilidad:** Evaluar la reproducibilidad de los algoritmos implementados

4.3.2. Resultados comparativos

Métrica	ANN 2F	ANN 4F	Observación
Variabilidad entre ejecuciones	0.0071	0.0081	4F ligeramente menos estable
Candidatos robustos identificados	12	53	4F identifica 4.4× más candidatos
Consistencia en top rankings	0/12 en todas	3/20 en todas	4F más reproducible en candidatos top
Rango de probabilidades top	0.455-0.523	0.534-0.785	4F identifica candidatos de mayor confianza

Tabla 4.3. Comparación de estabilidad y rendimiento entre modelos ANN 2F y 4F

4.3.3. Análisis de estabilidad del modelo

Modelo ANN 2F:

- **Mayor estabilidad estadística:** Menor variabilidad entre ejecuciones ($\sigma = 0.0071$)

- **Comportamiento conservador:** Rango estrecho de probabilidades identificadas
- **Alta reproducibilidad interna:** CV promedio de 0.026
- **Robustez metodológica:** 10 folds de validación cruzada por ejecución

Modelo ANN 4F:

- **Mayor sensibilidad:** Incremento significativo en candidatos identificados
- **Variabilidad controlada:** Desviación ligeramente superior pero dentro de rango aceptable
- **Candidatos de alta confianza:** Identifica fuentes con probabilidades >70 %
- **Limitación metodológica:** Menor robustez estadística (5 folds por ejecución)

4.3.4. Candidatos principales identificados

Modelo 4F - Top 3 candidatos:

1. **Source 371:** Probabilidad consenso 0.7846 ± 0.0186 (alta confianza, baja variabilidad)
2. **Source 821:** Probabilidad consenso 0.7434 ± 0.0512 (presente en todas las ejecuciones)
3. **Source 596:** Probabilidad consenso 0.6715 ± 0.0350 (consistencia entre ejecuciones)

Modelo 2F - Candidatos representativos:

1. **Source 664:** Probabilidad consenso 0.523 ± 0.027 (mayor probabilidad del modelo)
2. **Source 1114:** Probabilidad consenso 0.501 ± 0.027 (segunda mayor probabilidad)

4.3.5. Conclusiones metodológicas

El análisis comparativo establece varios hallazgos importantes:

- **Necesidad del análisis de consenso:** La variabilidad entre ejecuciones justifica el enfoque multi-ejecución para obtener resultados confiables
- **Superioridad del modelo 4F:** Mayor número de candidatos y probabilidades más altas, validando el valor de las características espectrales adicionales
- **Preparación para validación cruzada:** Los candidatos consensuados proporcionan objetivos específicos para verificación con métodos de detección de anomalías
- **Robustez de la implementación:** Ambos modelos demuestran comportamiento estable y reproducible, estableciendo una línea base sólida para comparación

Estos resultados de los modelos ANN proporcionan el **marco de referencia esencial** para evaluar el rendimiento y la complementariedad de los modelos OCSVM desarrollados en las siguientes secciones, permitiendo un análisis comparativo riguroso entre enfoques supervisados y de detección de anomalías.

Capítulo 5

Desarrollo experimental (OCSVM)

5.1. Datos utilizados y preprocesamiento

5.1.1. Fuentes identificadas ASTRO

Los datos utilizados en este trabajo provienen del archivo **XY_bal_log_Rel**, proporcionado como resultado del estudio previo (red neuronal – ANN) que combinaba fuentes identificadas del catálogo Fermi-LAT con fuentes simuladas de materia oscura. El dataset original contiene **5.662 observaciones** distribuidas de manera balanceada entre dos clases:

- **Fuentes astrofísicas (ASTRO):** 2,831 observaciones etiquetadas como 0.0
- **Fuentes de materia oscura simuladas (DM):** 2,831 observaciones (simuladas) etiquetadas como 1.0

Cada observación está caracterizada por cuatro parámetros espectrales fundamentales en el análisis de fuentes gamma del telescopio espacial Fermi-LAT:

- **E_peak:** Energía del picopectral (GeV)
- **beta:** Curvatura espectral
- **sigma:** Significancia estadística de detección
- **beta_Rel:** Error relativo de la curvatura espectral

Todos estos parámetros, se concluyó, han sido previamente transformados a **escala logarítmica (\log_{10})**, lo que se refleja en la nomenclatura adoptada más adelante: **Log(E_peak), Log(beta), Log(sigma), y Log(beta_Rel)**.

Análisis exploratorio del dataset de entrenamiento

El análisis de las distribuciones individuales de cada variable (Figura 5.1) revela características importantes:

- **E_peak** presenta una distribución aproximadamente normal centrada en 1.018, con ligera asimetría hacia valores más altos

- **beta** muestra una distribución bimodal con media en -0.819, indicando dos poblaciones distintas
- **sigma** exhibe una distribución sesgada hacia la izquierda con media en 1.061, característica típica de datos de significancia estadística
- **beta_Rel** presenta una distribución aproximadamente normal y simétrica centrada en -0.062

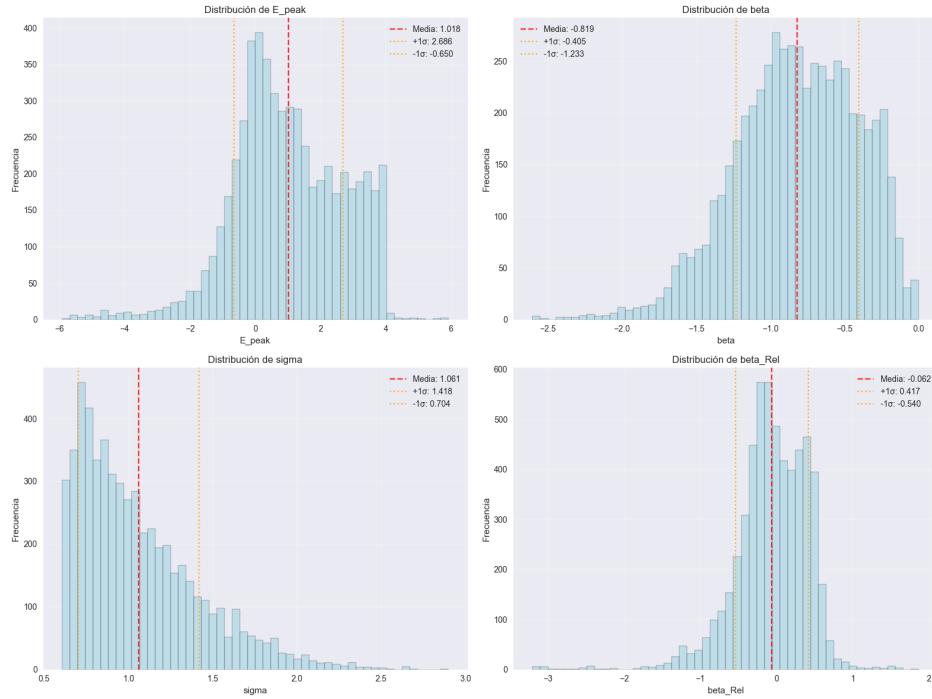


Figura 5.1. Distribuciones individuales de las cuatro variables espetrales

La matriz de correlación (Figura 5.2) muestra relaciones moderadas entre las variables:

- **Correlación más fuerte:** $\text{Log}(E_{\text{peak}})$ - $\text{Log}(\text{beta}_{\text{Rel}})$ ($r = 0.36$), indicando que fuentes con picos de energía más altos tienden a tener errores relativos mayores en la curvatura
- **Correlaciones negativas significativas:**
 - $\text{Log}(\text{beta})$ - $\text{Log}(\text{sigma})$ ($r = -0.29$)
 - $\text{Log}(\text{sigma})$ - $\text{Log}(\text{beta}_{\text{Rel}})$ ($r = -0.35$)
- **Correlaciones débiles:** $\text{Log}(E_{\text{peak}})$ - $\text{Log}(\text{beta})$ ($r = 0.11$) y $\text{Log}(E_{\text{peak}})$ - $\text{Log}(\text{sigma})$ ($r = -0.12$)

Estas correlaciones moderadas indican que las variables aportan información complementaria, justificando su inclusión conjunta en el modelo.

Los gráficos de dispersión (Figura 5.3) confirman la separabilidad entre clases en el espacio multidimensional:

- **E_peak vs beta:** Muestra una separación clara con las fuentes ASTRO formando una nube compacta en la región de valores bajos de E_{peak} y beta , mientras que las DM se extienden hacia valores más altos

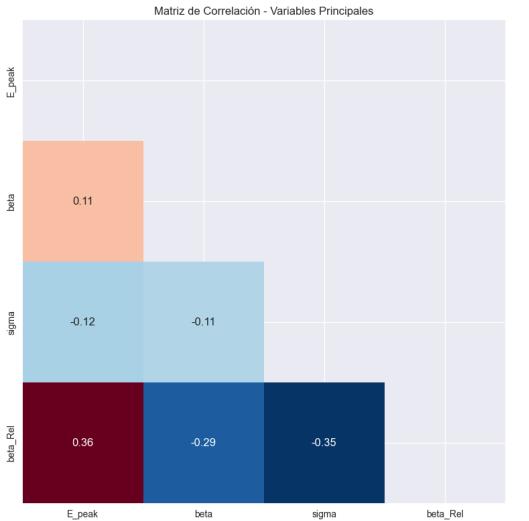


Figura 5.2. Matriz de correlación entre variables de Astro y DM

- **E_peak vs sigma:** Las fuentes ASTRO ocupan preferentemente la región de baja energía y alta significancia
- **beta vs sigma:** Se observa una separación diagonal entre clases, con ASTRO en la región de beta bajo y sigma alto
- **Otras combinaciones:** Muestran patrones de separación menos definidos pero consistentes

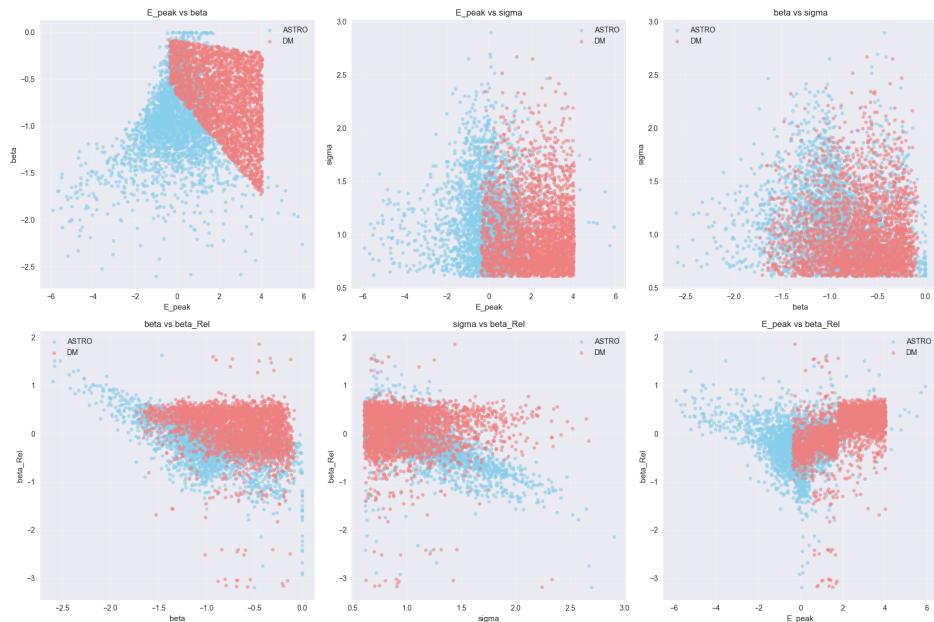


Figura 5.3. Matriz de correlación entre variables de Astro y DM

El análisis de calidad reveló un dataset limpio y completo:

- **Valores faltantes:** 0 (0 %)
- **Filas duplicadas:** 0
- **Outliers detectados:** Presentes en todas las variables mediante el método IQR, pero mantenidos por representar variabilidad natural de los datos astrofísicos

Preparación final de datos

Se generaron datasets separados para facilitar el entrenamiento del modelo One-ClassSVM:

1. **Dataset ASTRO** (astro_data.txt): 2,831 observaciones de fuentes astrofísicas para entrenamiento del modelo como clase “normal”
2. **Dataset DM** (dm_data.txt): 2,831 simulaciones de fuentes de materia oscura para posibles futuros análisis comparativos
3. **Dataset completo** (fermi_lat_complete.txt): 5.662 observaciones con etiquetas para posibles futuros análisis comparativos

Los nombres de las columnas fueron actualizados para reflejar explícitamente la transformación logarítmica: Log(E_peak), Log(beta), Log(sigma), Log(beta_Rel), manteniendo la trazabilidad del preprocesamiento aplicado.

5.1.2. Fuentes no identificadas (UNIDs)

El segundo conjunto de datos utilizado en este trabajo corresponde a fuentes no identificadas (UNIDs) del catálogo 3FGL del telescopio espacial Fermi-LAT, contenidas en el archivo **unids_3F_beta_err_names.txt**.

Este dataset representa el objetivo final de aplicación del modelo OneClassSVM: identificar entre las **1.125 fuentes no identificadas** aquellas que podrían ser candidatas a emisión de materia oscura. Cada fuente UNID está caracterizada por los mismos cuatro parámetros espectrales que el dataset de entrenamiento:

- **E_peak:** Energía del pico espectral
- **beta:** Curvatura espectral
- **sigma_det:** Significancia estadística de detección
- **beta_Rel:** Error relativo de la curvatura espectral
- **number:** Identificador único de la fuente (0-1124)

A diferencia del dataset de entrenamiento, estas fuentes carecen de clasificación conocida, constituyendo el conjunto de datos sobre el cual se aplicará el modelo entrenado para detectar posibles anomalías.

Análisis exploratorio del dataset UNIDs

El análisis exploratorio inicial reveló características distintivas en las distribuciones de las variables:

- **E_peak** presenta una distribución fuertemente sesgada hacia valores bajos, con un pico pronunciado cerca de cero y media de 6.04. Esta distribución sugiere que la mayoría de fuentes UNIDs tienen picos espectrales a energías relativamente bajas

- **beta** muestra una distribución aproximadamente uniforme en el rango 0-1, con media en 0.35, indicando una variabilidad considerable en la curvatura espectral de las fuentes no identificadas
- **sigma_det** exhibe una distribución exponencial decreciente característica, con la mayoría de fuentes concentradas en valores de significancia bajos (media = 8.31), típico de fuentes con detección menos robusta
- **beta_Rel** presenta una distribución altamente concentrada cerca de cero (media = 0.94), con algunos valores extremos que sugieren incertidumbres variables en la medición de la curvatura

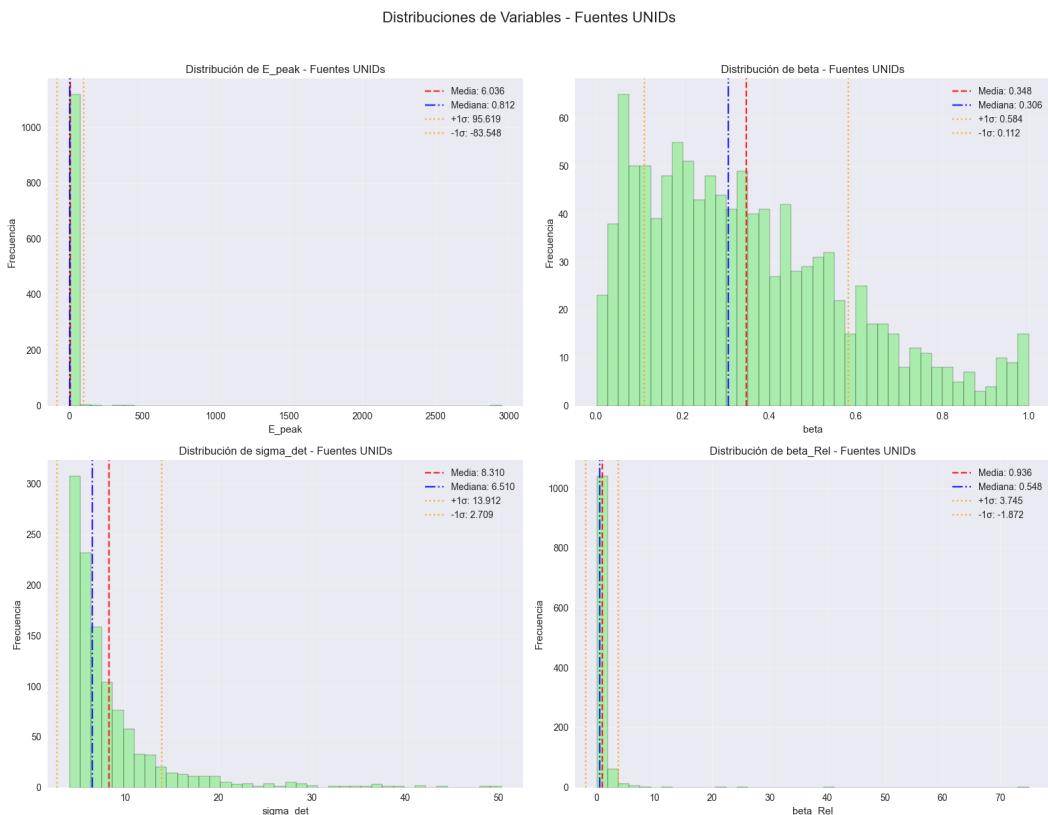


Figura 5.4. Distribuciones iniciales de las variables del dataset UNIDs

Identificación del problema de incompatibilidad de escalas

La comparación inicial entre las distribuciones del dataset UNIDs y el dataset de entrenamiento ASTRO-DM reveló una incompatibilidad fundamental: **los datos UNIDs se encontraban en escala lineal, mientras que los datos de entrenamiento estaban previamente transformados a escala logarítmica**.

Esta incompatibilidad se manifestó en:

- **Rangos completamente diferentes:** **E_peak** en UNIDs alcanzaba valores de ~2500, mientras que en el entrenamiento los valores estaban centrados alrededor de 1.0
- **Distribuciones incongruentes:** Las formas de las distribuciones no correspondían entre datasets

- **Imposibilidad de aplicación directa del modelo:** Un modelo entrenado en escala logarítmica no puede aplicarse directamente a datos en escala lineal

Transformación logarítmica y compatibilización

Para resolver la incompatibilidad de escalas, se implementó una transformación logarítmica (\log_{10}) sobre todas las variables del dataset UNIDs:

$$\text{Log}(E_{\text{peak}}) = \log_{10}(E_{\text{peak}}) \quad (5.1)$$

$$\text{Log}(\beta) = \log_{10}(\beta) \quad (5.2)$$

$$\text{Log}(\sigma) = \log_{10}(\sigma_{\text{det}}) \quad (5.3)$$

$$\text{Log}(\beta_{\text{Rel}}) = \log_{10}(\beta_{\text{Rel}}) \quad (5.4)$$

La verificación visual mediante histogramas comparativos demostró el éxito de la transformación (Figura 5.5):

- **Antes de la transformación:** Las distribuciones UNIDs y ASTRO mostraban escalas completamente incompatibles, haciendo imposible cualquier comparación significativa
- **Después de la transformación:** Las distribuciones transformadas de UNIDs mostraron superposición clara con las distribuciones ASTRO, validando la correcta preparación de los datos

Los scatter plots multidimensionales (Figuras 5.6 y 5.7) confirmaron visualmente la correcta transformación:

- **Antes de la transformación:** Los gráficos bivariados mostraban distribuciones de puntos completamente incongruentes entre UNIDs y ASTRO, con escalas que impedían cualquier comparación significativa
- **Después de la transformación:** Los scatter plots revelaron que los puntos UNIDs y ASTRO ocupan regiones superpuestas del espacio multidimensional, con los UNIDs formando nubes de puntos que se intersectan claramente con la distribución ASTRO

Esta verificación visual confirmó que la transformación logarítmica logró exitosamente la compatibilización de escalas necesaria para la aplicación del modelo.

Estructuración final del dataset UNIDs

El dataset UNIDs transformado fue estructurado de manera consistente con el dataset de entrenamiento, generando los siguientes archivos:

- **unids_transformed_complete.csv/.txt:** Dataset completo con identificadores únicos para trazabilidad

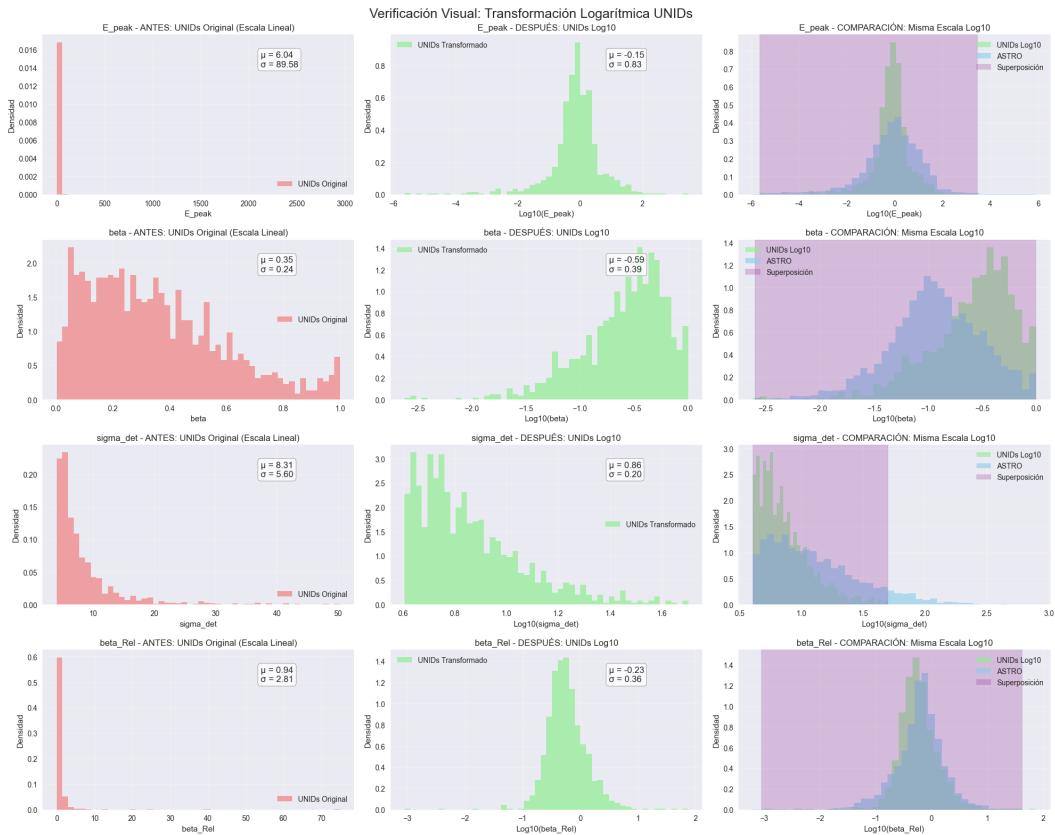


Figura 5.5. Comparación de distribuciones antes y después de la transformación logarítmica

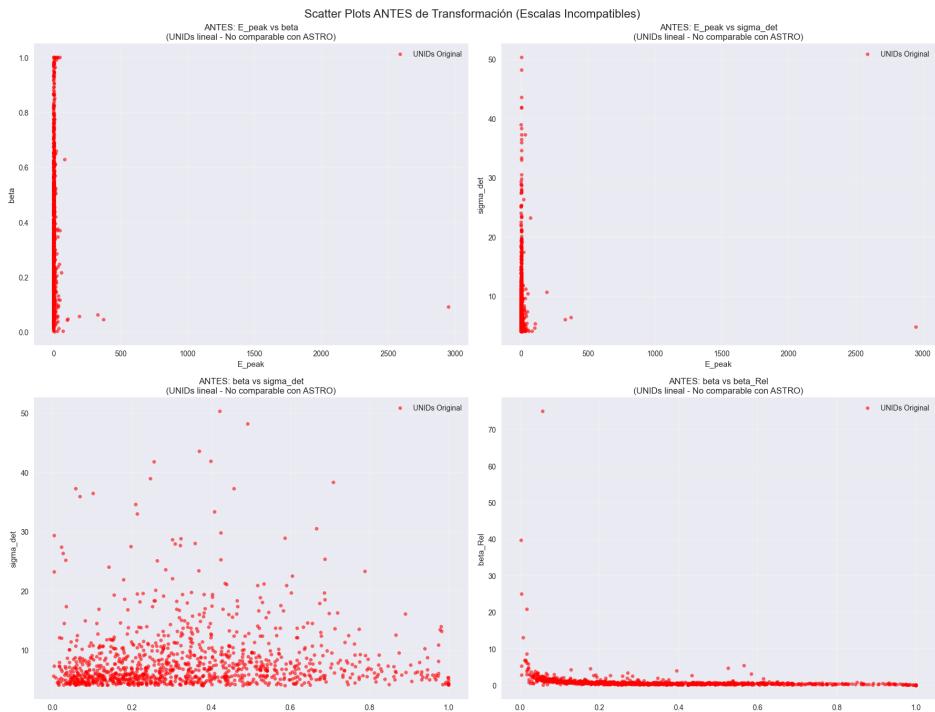


Figura 5.6. Scatter plots multidimensionales antes de la transformación logarítmica

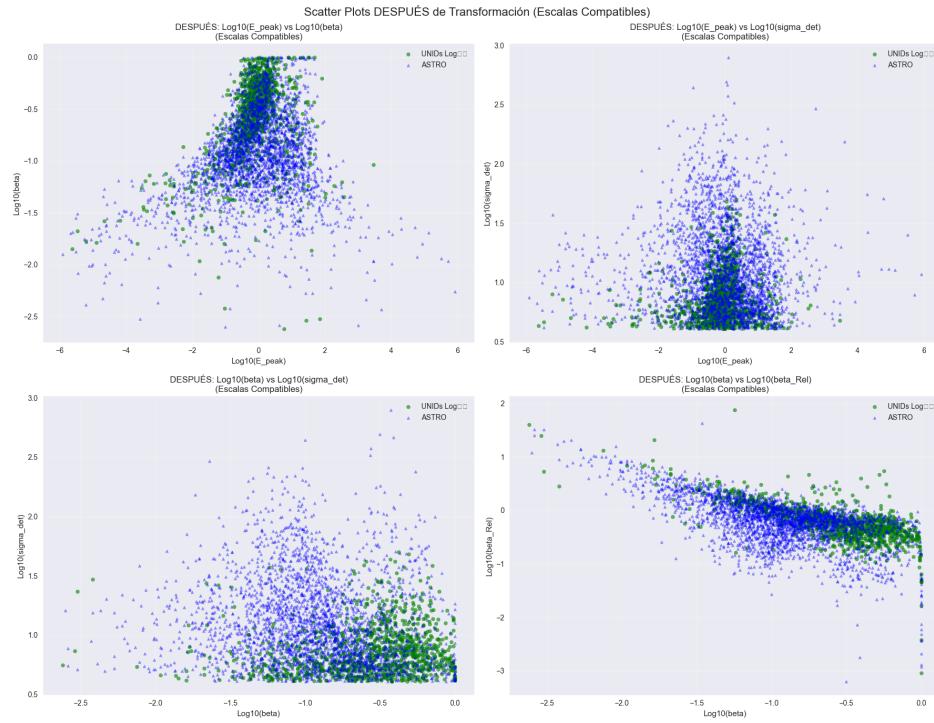


Figura 5.7. Scatter plots multidimensionales después de la transformación logarítmica

- **unids_transformed_features.csv/.txt:** Solo características para aplicación directa del modelo OneClassSVM
- **unids_transformation_log.csv:** Registro detallado de las transformaciones aplicadas

El análisis de compatibilidad indica que el dataset UNIDs transformado es altamente compatible para la aplicación del modelo OneClassSVM entrenado con datos ASTRO.

Esta preparación exhaustiva del dataset UNIDs garantiza que el modelo OneClassSVM pueda aplicarse de manera confiable para identificar candidatos potenciales a fuentes de materia oscura entre las 1.125 fuentes no identificadas del catálogo Fermi-LAT.

5.2. Desarrollo del modelo OCSVM

5.2.1. Motivación y justificación del enfoque no supervisado

En este trabajo se utiliza el algoritmo One-Class Support Vector Machine (OCSVM) como herramienta para modelar el comportamiento de fuentes astrofísicas conocidas (ASTRO) y detectar posibles fuentes anómalas entre los objetos no identificados (UNIDs) del catálogo 4FGL.

El modelo OCSVM está diseñado específicamente para tareas de detección de anomalías cuando se dispone únicamente de datos pertenecientes a una sola clase (en este caso, fuentes astrofísicas conocidas). El objetivo es aprender una frontera de decisión que delimita la región del espacio de características donde se concentran los datos normales,

de forma que cualquier punto que caiga fuera de esta región pueda considerarse una posible anomalía.

5.2.2. Arquitectura del modelo OCSVM

El comportamiento del modelo OCSVM depende principalmente de dos hiperparámetros clave:

Parámetro	Descripción	Impacto
ν (nu)	Proporción máxima de datos de entrenamiento que el modelo puede considerar anómalos. También sirve como una cota inferior del porcentaje de soporte.	Si ν es pequeño, la frontera se ajusta ampliamente para abarcar casi todos los datos ASTRO. Si ν es grande, se toleran más “outliers” dentro del entrenamiento.
γ (gamma)	Define la influencia de cada muestra sobre la forma de la frontera (solo para kernel RBF).	Valores altos de gamma producen fronteras muy ajustadas y siniuosas, mientras que valores bajos dan lugar a fronteras más suaves.

Tabla 5.1. Hiperparámetros clave del modelo OCSVM

El objetivo del modelo OCSVM es detectar **candidatos a materia oscura** entre los UNIDs, partiendo del supuesto de que las fuentes ASTRO representan el patrón de “normalidad”. Por tanto:

- Es deseable que la **frontera de decisión englobe la mayor parte de las fuentes ASTRO**
- Si el modelo empieza a clasificar como anómalas muchas fuentes ASTRO, está **sobreajustando** (falsos positivos)
- Si la frontera es demasiado amplia, se corre el riesgo de que también **los UNIDs anómalos** queden clasificados como normales (falsos negativos)

En este trabajo se ha optado por **ajustar la frontera de decisión** de forma que:

- Se incluyan la mayoría (idealmente $> 99\%$) de fuentes ASTRO como **normales**
- Se identifiquen como anómalos únicamente los UNIDs cuya representación en el espacio de características se aleje significativamente del comportamiento aprendido

Este enfoque busca un equilibrio entre **minimizar falsos positivos** sobre datos conocidos y **maximizar la detección de fuentes potencialmente interesantes**, como candidatas a materia oscura.

5.2.3. Modelo OCSVM con 2 características (2F)

Para el desarrollo del modelo de detección de anomalías se seleccionaron dos características fundamentales del espectro de rayos gamma: **Log(E_peak)** (logaritmo de

la energía de pico) y **Log(beta)** (logaritmo del parámetro de forma espectral). Estas variables capturan las propiedades espetrales más distintivas de las fuentes astrofísicas convencionales y son críticas para identificar posibles desviaciones que podrían indicar señales de materia oscura.

Los datos se dividieron en conjuntos de entrenamiento (60 %), validación (20 %) y test (20 %) para garantizar una evaluación robusta del modelo. Se aplicó normalización **StandardScaler** para asegurar que ambas características contribuyan equitativamente al modelo, dado que OneClassSVM es sensible a la escala de los datos.

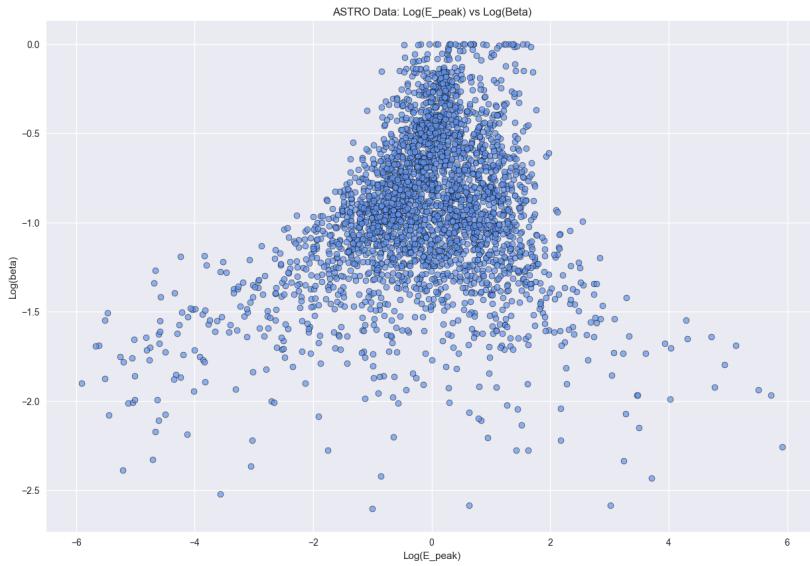


Figura 5.8. Distribución de las fuentes astrofísicas conocidas (ASTRO) en el espacio de características $\text{Log}(E_{\text{peak}})$ vs $\text{Log}(\beta)$

La Figura 5.8 muestra la distribución de las fuentes astrofísicas conocidas (ASTRO) en el espacio de características seleccionado, E_{peak} y β , tras aplicar la transformación logarítmica. Esta representación permite observar la forma y densidad del conjunto de entrenamiento que el modelo One-Class SVM tomará como referencia del comportamiento normal.

La **selección de hiperparámetros inicial** (ν, γ) se realizó mediante un **barrido en malla** (*grid search*), evaluando el rendimiento en el conjunto de validación con el objetivo de que la frontera aprendida englobe al mayor número posible de ejemplos normales.

Dado que todos los datos de entrenamiento provienen de fuentes ASTRO (normalidad conocida), el modelo OCSVM aprende a:

- **Estimar la región del espacio donde se encuentran las fuentes astrofísicas**
- **Rechazar cualquier observación significativamente diferente como anómala**

OCSVM está diseñado para aprender la “forma” o distribución del conjunto de datos de una sola clase (normalidad) y luego identificar instancias que se desvían significativamente de ese patrón como anomalías.

Optimización de hiperparámetros

Parámetro Gamma (γ)

La selección del parámetro gamma requirió un análisis cuidadoso del balance entre flexibilidad y generalización. Tras una exploración sistemática de valores en el rango [0.001 - 10], se estableció $\gamma = 0.1$ como valor óptimo basándose en los siguientes criterios astrofísicos:

- **Valores menores ($\gamma < 0.1$):** Generaban fronteras de decisión excesivamente simples (aproximadamente circulares) que no capturaban la estructura irregular natural de las distribuciones espectrales astrofísicas
- **Valores mayores ($\gamma > 0.1$):** Producían sobreajuste con micro-fronteras de decisión irreales que clasificarían ruido estadístico como anomalías
- $\gamma = 0.1$: Proporcionaba el balance óptimo, permitiendo que la frontera “abraza” la forma natural de la distribución de datos sin crear regiones de decisión fragmentadas

Parámetro Nu (ν)

Se realizó una búsqueda exhaustiva del parámetro ν en el rango [0.001 - 0.2], optimizando para minimizar el número de fuentes astrofísicas clasificadas incorrectamente como anomalías en el conjunto de validación. El criterio de optimización se basó en el principio astrofísico de que las fuentes convencionales deben constituir la clase “normal” que el modelo debe aprender.

- **Resultado óptimo:** $\nu = 0.001$, que representa un límite superior del 0.1 % de errores permitidos en entrenamiento, reflejando la expectativa teórica de que las señales de materia oscura son extremadamente raras en comparación con las fuentes astrofísicas convencionales.

Resultados del modelo final

El modelo OneClassSVM optimizado ($\nu = 0.001$, $\gamma = 0.1$) demostró un comportamiento consistente y astrofísicamente coherente:

Rendimiento en Entrenamiento:

- **3 outliers detectados** de las muestras de entrenamiento
- Fracción de anomalías: ~0.1 % (consistente con el parámetro ν establecido)

Rendimiento en Test:

- **5 outliers detectados** en el conjunto de prueba independiente

- Fracción de anomalías: $\sim 0.2\%$ (ligeramente superior pero dentro del rango esperado)

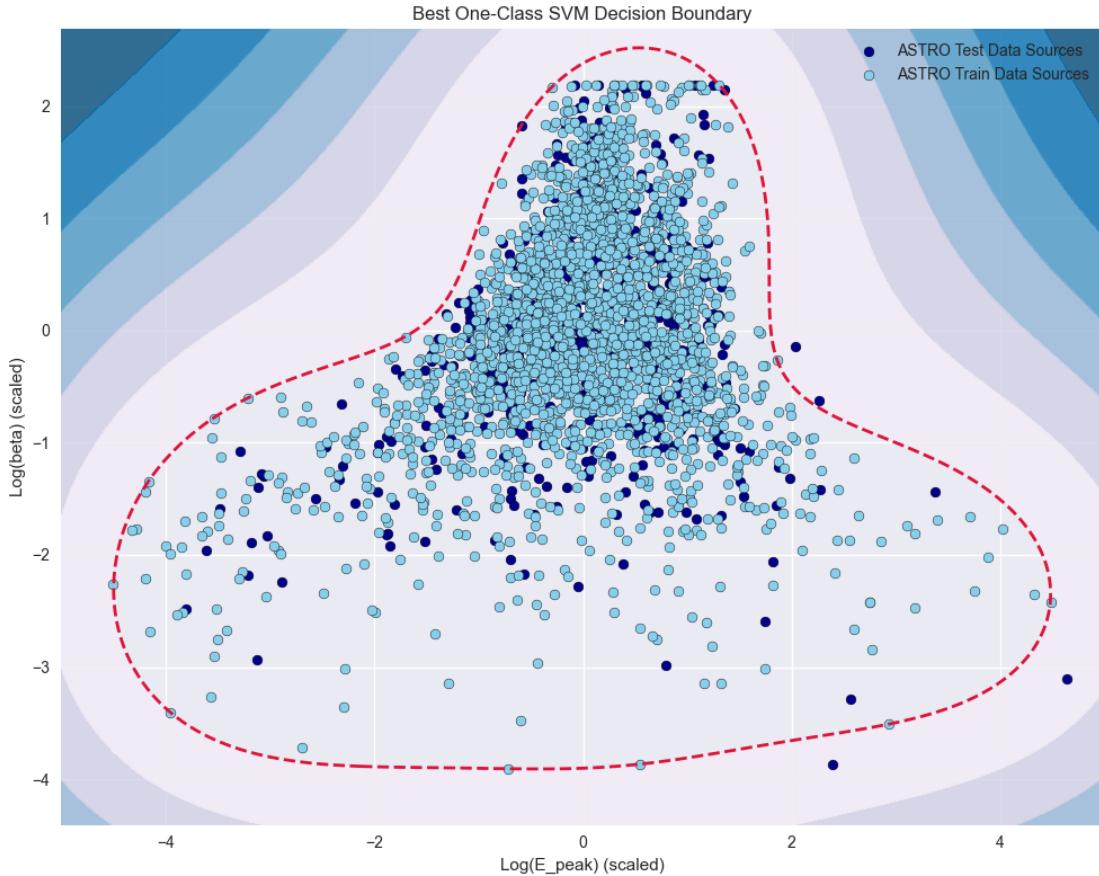


Figura 5.9. Frontera de decisión del modelo OCSVM en el espacio $\text{Log}(E_{\text{peak}})$ vs $\text{Log}(\beta)$

La visualización de la frontera de decisión (Figura 5.9) revela que el modelo ha aprendido exitosamente la distribución espectral típica de fuentes astrofísicas convencionales. La frontera no circular captura la correlación natural entre la energía de pico y el parámetro β , reflejando los procesos físicos subyacentes en fuentes como púlsares, blazares y remanentes de supernova.

Los **outliers detectados** se localizan principalmente en regiones del espacio de características con:

- Energías de pico extremadamente altas o bajas
- Combinaciones inusuales de energía de pico y parámetro β
- Posiciones en las “colas” de la distribución espectral

Análisis de métricas de rendimiento

Durante el proceso de entrenamiento del modelo y ajuste de hiperparámetros, se monitorearon diversas métricas que proporcionaron información valiosa sobre el comportamiento y rendimiento del algoritmo. Entre estos parámetros se incluyen los *decision scores* que cuantifican la distancia de cada muestra al hiperplano de separación, las mé-

tricas de evaluación estándar como precisión y matriz de confusión, así como el análisis específico de las características espectrales de las fuentes clasificadas como anomalías.

Distribución de Decision Scores

El análisis de los *decision scores* del modelo final revela características importantes sobre la distribución de confianza en las predicciones:

- **Media: 0.0281** – Indica que la mayoría de las fuentes se encuentran del lado “normal” del hiperplano de separación
- **Desviación estandar: 0.0139** – Sugiere una distribución relativamente concentrada de scores, evidenciando consistencia en las clasificaciones
- **Rango: [-0.0397, 0.0895]** – El rango estrecho confirma que las fuentes astrofísicas convencionales forman un grupo cohesivo en el espacio de características

Interpretación astrofísica: Los valores positivos dominantes indican que el modelo ha identificado correctamente la región de “normalidad” astrofísica. Los pocos valores negativos corresponden a las 5 anomalías detectadas, situándose apenas por debajo del umbral de decisión, lo que sugiere que se trata de anomalías “suaves” en lugar de outliers extremos.

Evaluación de Rendimiento

El modelo demostró un rendimiento excepcional en la identificación de fuentes normales:

- **Precisión global: 99.1 %** (562 de 567 muestras correctamente clasificadas como normales)
- **Tasa de falsos positivos: 0.9 %** (5 fuentes normales clasificadas como anomalías)
- **Tasa de falsos negativos: 0 %** (esperado, dado que no existen anomalías confirmadas en el dataset)

Interpretación de la Matriz de Confusión

		Predicción	
		Normal	Anomalía
Realidad	Normal	562	5
	Anomalía	0	0

Tabla 5.2. Matriz de confusión del modelo OCSVM 2F

La matriz de confusión (Tabla 5.2) confirma que el modelo es **altamente conservador**, clasificando solo el 0.9% de las fuentes como potenciales anomalías. Esta característica es deseable en la búsqueda de materia oscura, donde preferimos minimizar falsos positivos que requieran costoso tiempo de seguimiento observacional.

Robustez Astrofísica

El modelo ha demostrado capacidad para:

- Distinguir sutilmente entre variaciones normales de fuentes astrofísicas y anomalías genuinas
- Mantener sensibilidad a señales potencialmente exóticas sin generar exceso de falsos positivos
- Proporcionar interpretabilidad física a través de los parámetros espectrales seleccionados

La metodología desarrollada demuestra el potencial del machine learning como herramienta complementaria a los métodos tradicionales de búsqueda de materia oscura en astrofísica de altas energías.

5.2.4. Modelo OCSVM con 4 características (4F)

Como evolución natural del modelo bidimensional, se desarrolló una versión ampliada del OneClassSVM incorporando cuatro características espectrales: Log(E_peak), Log(beta), Log(sigma) y Log(beta_Rel). Esta extensión metodológica tiene como objetivo incrementar el poder discriminatorio del modelo mediante la incorporación de información espectral adicional que pueda revelar firmas más sutiles de potenciales señales de materia oscura.

El conjunto de datos completo comprende 2,831 fuentes astrofísicas, manteniendo la misma distribución de conjuntos de entrenamiento (60 %), validación (20 %) y test (20 %) para garantizar comparabilidad con el modelo bidimensional.

Optimización de hiperparámetros para alta dimensionalidad

La transición al espacio tetradimensional requirió un reajuste cuidadoso de los hiperparámetros del modelo:

Parámetro Gamma ($\gamma = 0.02$)

Se redujo significativamente el valor de gamma de 0.1 (modelo 2D) a 0.02 (modelo 4D). Esta decisión se fundamenta en principios de machine learning para espacios de alta dimensionalidad:

- **Curse of dimensionality:** En espacios de mayor dimensión, los datos tienden a dispersarse, requiriendo kernels menos restrictivos
- **Prevención de overfitting:** Un γ menor permite mayor generalización evitando fronteras de decisión excesivamente complejas
- **Coherencia astrofísica:** Mantiene la capacidad del modelo para capturar correlaciones naturales entre las cuatro variables espectrales

Parámetro Nu ($\nu = 0.002$)

Se ajustó ligeramente a $\nu = 0.002$ (frente a 0.001 en el modelo 2D), permitiendo un margen ligeramente mayor de tolerancia a outliers, reconociendo que la mayor dimensionalidad puede introducir variabilidad natural adicional.

Análisis de métricas de rendimiento

Durante el proceso de entrenamiento y evaluación del modelo tetradimensional, se obtuvieron diversas métricas que proporcionaron información valiosa sobre el comportamiento del algoritmo en el espacio ampliado de características.

Distribución de Decision Scores

El modelo 4D mostró una distribución de *decision scores* notablemente diferente al modelo bidimensional:

- **Media: 0.3185** – Significativamente mayor que el modelo 2D (0.0281), indicando mayor confianza en las clasificaciones
- **Desviación estándar: 0.0876** – Mayor dispersión que refleja la complejidad adicional del espacio 4D
- **Rango: [-0.1286, 0.4277]** – Rango más amplio que sugiere mayor capacidad discriminatoria

La mayor dispersión indica que el modelo 4D tiene menos confianza en dónde exactamente establecer la frontera (*Curse of Dimensionality*).

Interpretación astrofísica: Los valores de *decision scores* más altos y con mayor variabilidad indican que el modelo 4D ha desarrollado una representación más robusta y diferenciada de la “normalidad” astrofísica, aprovechando las correlaciones adicionales entre las cuatro variables espectrales.

Métricas de Clasificación

El modelo tetradimensional demostró un rendimiento excepcional y ligeramente superior al modelo 2D:

- **Precisión global: 99.29 %** (563 de 567 muestras correctamente clasificadas)
- **Tasa de falsos positivos: 0.71 %** (4 fuentes normales clasificadas como anomalías)
- **Reducción relativa de outliers:** 0.71 % vs 0.88 % del modelo 2D

		Predicción	
		Normal	Anomalía
Realidad	Normal	563	4
	Anomalía	0	0

Tabla 5.3. Matriz de confusión del modelo OCSVM 4F

La matriz de confusión (Tabla 5.3) confirma la robustez del enfoque.

Visualización de la frontera de decisión multidimensional

Desafíos de la Representación en Alta Dimensionalidad

Se observó que para conjuntos con únicamente dos variables (E_peak y beta), fue posible representar directamente la frontera de decisión del modelo en un plano bidimensional, generando una malla de puntos en ese espacio y evaluando el modelo sobre

ella. Sin embargo, al incorporar más dimensiones (4 en este caso), la visualización directa de la frontera de decisión se vuelve inviable, ya que no es posible representar de forma explícita un límite tetradimensional dentro de un plano bidimensional.

Para abordar esta limitación inherente de la visualización en alta dimensionalidad, se implementó una estrategia de proyecciones multidimensionales que permite examinar el comportamiento del modelo a través de diferentes subespacios:

Proyecciones Bidimensionales (2D)

Se generaron todas las combinaciones posibles de pares de variables (6 proyecciones totales), donde para cada par de features visualizadas, las dimensiones restantes se fijan en sus valores medios del conjunto de test. Este enfoque permite:

- **Mantener coherencia dimensional:** Cada punto del grid 2D se extiende a un punto 4D completo
- **Preservar la frontera de decisión:** La evaluación se realiza sobre el modelo tetradimensional original
- **Interpretabilidad física:** Cada proyección revela correlaciones específicas entre pares de variables espectrales

Las visualizaciones bidimensionales por pares de variables revelan la complejidad de la frontera de decisión tetradimensional proyectada en diferentes subespacios:

Proyecciones principales:

- **Log(E_peak) vs Log(beta):** Mantiene la estructura fundamental observada en el modelo 2D
- **Log(E_peak) vs Log(sigma):** Revela correlaciones adicionales en el régimen de alta energía
- **Log(E_peak) vs Log(beta_Rel):** Muestra sensibilidad a parámetros especiales relativistas

Los 4 outliers identificados (Figura 5.10) se distribuyen estratégicamente en diferentes subespacios de proyección, sugiriendo que el modelo 4D captura anomalías que podrían no ser evidentes en análisis bidimensionales. Los outliers (marcados en rojo) aparecen consistentemente en regiones periféricas de múltiples proyecciones, validando su clasificación como anomalías genuinas.

Proyecciones Tridimensionales (3D)

Complementariamente, se implementaron visualizaciones 3D para todas las combinaciones de tripletas de variables (4 proyecciones totales), donde la dimensión restante se fija en su valor medio. Esta representación proporciona:

- **Mayor contexto dimensional:** Revela correlaciones triples entre variables espectrales

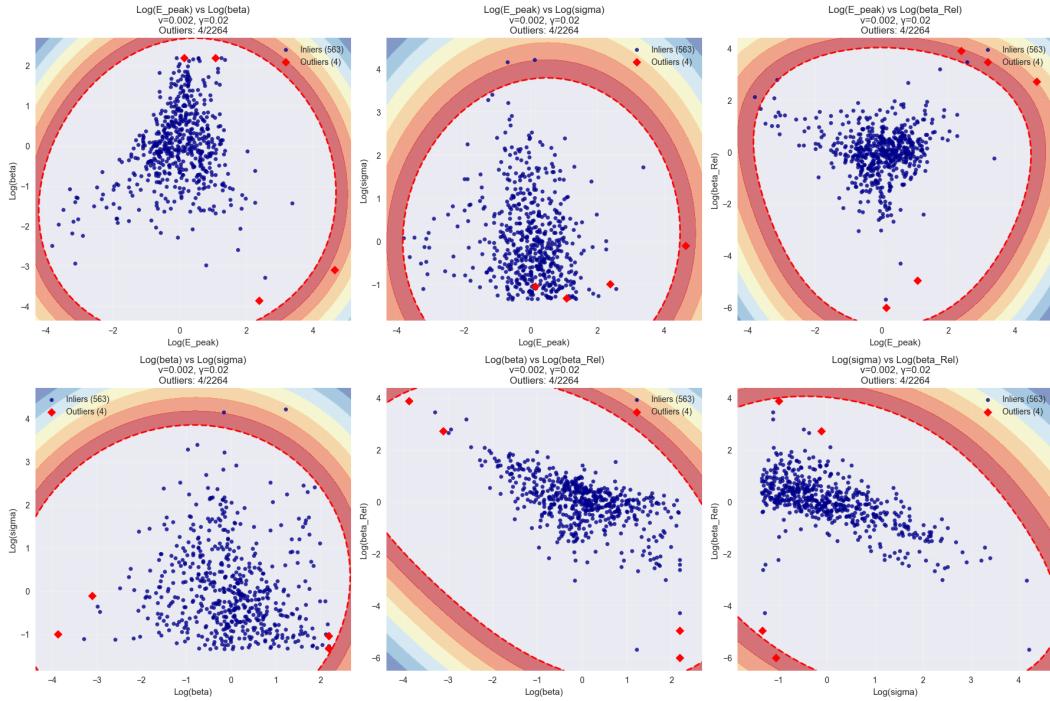


Figura 5.10. Proyecciones bidimensionales del modelo OCSVM 4F mostrando fronteras de decisión en diferentes subespacios

- **Validación cruzada visual:** Los outliers deben aparecer consistentemente como anómalos en múltiples proyecciones
- **Análisis de clusters:** Permite identificar agrupaciones naturales en subespacios 3D

El código desarrollado implementa una metodología sistemática para la generación de estas visualizaciones:

```

1 # Generacion de todas las combinaciones de pares y tripletas
2 feature_pairs = list(combinations(range(len(feature_names)), 2))
3 feature_triplets = list(combinations(range(len(feature_names)), 3))

```

Listing 5.1. Generación de proyecciones multidimensionales

Para cada proyección bidimensional, se construye un grid completo donde:

- Las dos dimensiones seleccionadas varían según la malla de visualización
- Las dimensiones no visualizadas se fijan en sus valores medios del conjunto de test
- La frontera de decisión se evalúa sobre el modelo 4D completo

Esta estrategia de visualización por proyecciones permite validar la robustez de las clasificaciones del modelo:

- **Outliers consistentes:** Las 4 fuentes clasificadas como anómalas aparecen sistemáticamente como puntos rojos (diamantes) en las regiones periféricas de múl-

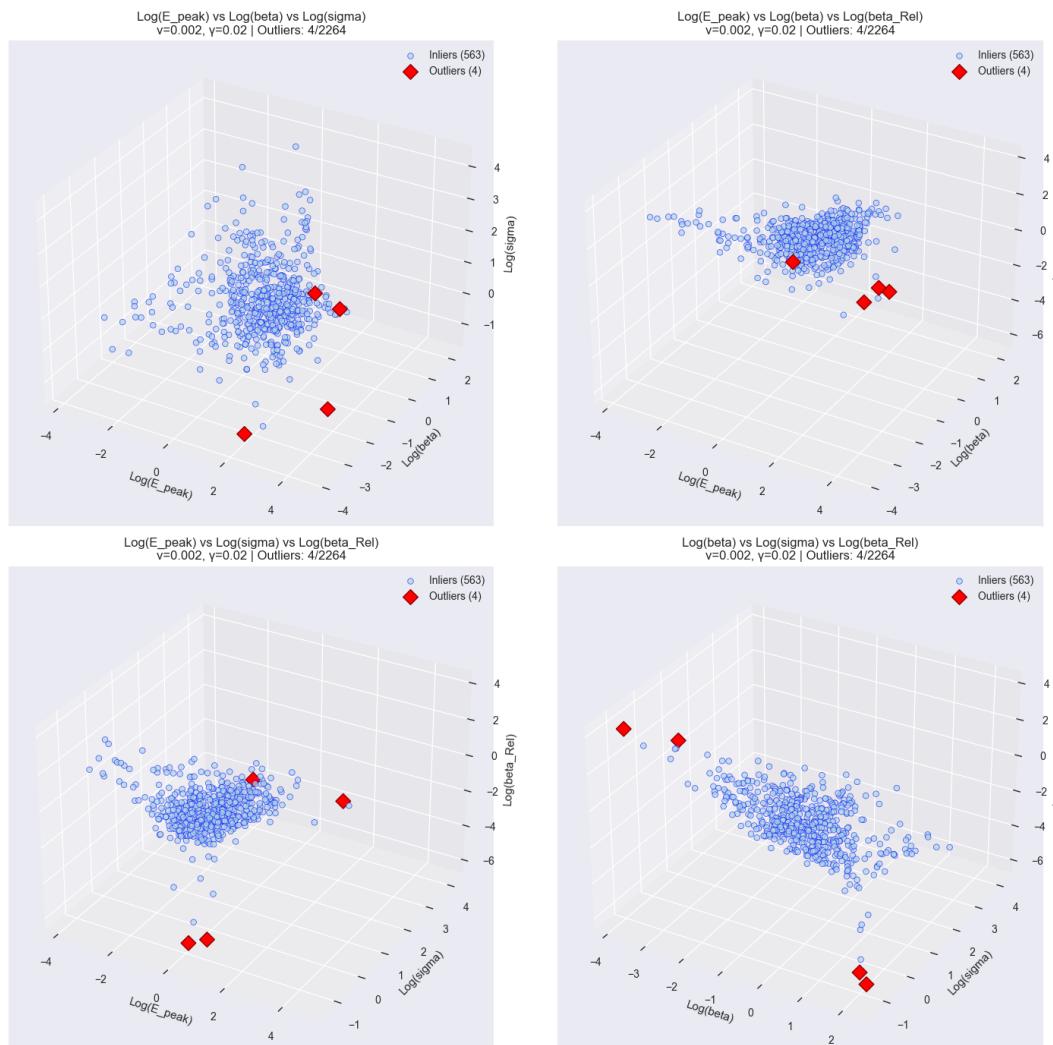


Figura 5.11. Proyecciones tridimensionales del modelo OCSVM 4F

tiples proyecciones, confirmando que no se trata de artefactos de una dimensión específica

- **Coherencia de fronteras:** Aunque cada proyección muestra una “sección” de la frontera 4D, la consistencia en la ubicación de outliers a través de diferentes vistas valida la integridad de la clasificación tetradimensional

Interpretación de resultados visuales

Las proyecciones revelan características importantes del modelo 4D:

- **Estructura no lineal:** Las fronteras de decisión muestran formas complejas que reflejan correlaciones naturales entre variables espetrales
- **Separación efectiva:** Los outliers se posicionan claramente fuera de las regiones de alta densidad de datos normales
- **Robustez dimensional:** La aparición consistente de anomalías en múltiples proyecciones confirma su clasificación como outliers genuinos

Ganancia por dimensionalidad adicional

Comparación modelo 2D vs 4D:

- **Reducción de falsos positivos:** De 5 a 4 outliers (reducción del 20 %)
- **Mayor confianza estadística:** *Decision scores* con mayor separación
- **Información espectral complementaria:** Las features adicionales Log(sigma) y Log(beta_Rel) proporcionan contexto físico adicional sobre la forma espectral completa

Robustez Astrofísica

El **modelo OneClassSVM tetradimensional** representa una mejora metodológica significativa sobre el enfoque bidimensional:

- **Mayor precisión discriminatoria:** Reducción del 20 % en falsos positivos manteniendo sensibilidad
- **Robustez estadística mejorada:** *Decision scores* con mayor separación y confianza
- **Interpretabilidad física ampliada:** Incorporación de información espectral completa
- **Validación cruzada exitosa:** Consistencia en proyecciones bidimensionales múltiples

La identificación de 4 fuentes anómalas altamente específicas (0.71 % del conjunto de test) proporciona un conjunto extremadamente refinado de candidatos para análisis de seguimiento detallado, representando una mejora sustancial en la eficiencia de cribado para la búsqueda de señales de materia oscura en datos de Fermi-LAT.

El modelo 4D demuestra que la incorporación sistemática de información espectral adicional puede mejorar significativamente la capacidad de detección de anomalías en datos astrofísicos complejos, estableciendo un marco metodológico robusto para análisis de detección de materia oscura basados en machine learning.

La transición a 4D representa un trade-off fundamental: se sacrifica la simplicidad visual de la frontera 2D a cambio de una representación más completa y robusta del espacio espectral astrofísico, resultando en una detección de anomalías más precisa, aunque metodológicamente más compleja.

Además, la implementación de proyecciones 2D y 3D representa una solución elegante al problema fundamental de visualización en alta dimensionalidad. Esta metodología:

- **Preserva la integridad del modelo:** Las evaluaciones se realizan sobre el espacio 4D completo
- **Proporciona interpretabilidad:** Permite examinar correlaciones específicas entre subconjuntos de variables
- **Valida la robustez:** La consistencia interdimensional confirma la calidad de las clasificaciones

Esta aproximación demuestra que, aunque la visualización directa de fronteras multidimensionales es imposible, las proyecciones sistemáticas pueden proporcionar información valiosa sobre el comportamiento del modelo en espacios de alta dimensionalidad, manteniendo tanto el rigor metodológico como la interpretabilidad astrofísica de los resultados.

5.3. Aplicación a fuentes no identificadas

La aplicación de los modelos OneClassSVM entrenados a las 1,125 fuentes no identificadas (UNIDs) del catálogo Fermi-LAT representa la fase de implementación práctica donde los algoritmos de *machine learning* desarrollados se aplican al problema real de detección de candidatos a materia oscura.

5.3.1. Aplicación a fuentes UNID con OCSVM 2F

La aplicación del modelo OneClassSVM bidimensional a las fuentes UNIDs constituye el momento donde la metodología de *machine learning* se convierte en herramienta de descubrimiento científico. Estas fuentes UNIDs constituyen el conjunto de datos objetivo, ya que no han podido ser asociadas con fuentes astrofísicas conocidas mediante métodos tradicionales.

Implementación técnica

Los datos de las 1,125 fuentes UNIDs se procesaron manteniendo coherencia metodológica con el *pipeline* de entrenamiento:

¹ `# Extraccion de caracteristicas`

```
2 X_unids_log = df_unids[["Log(E_peak)", "Log(beta)"]].values
3
4 # Normalización usando scaler preentrenado
5 X_unids_scaled = scaler.transform(X_unids_log) # Solo transform,
    evita data leakage
```

Listing 5.2. Aplicación del modelo OCSVM 2F a fuentes UNIDs

Aspecto crítico de implementación: Se aplicó únicamente `transform()` usando el `scaler` preentrenado, manteniendo la integridad del sistema de normalización y evitando cualquier filtración de información del conjunto objetivo.

El sistema implementado genera múltiples métricas de evaluación:

- **Decision scores:** Distancias computadas por la función de decisión del SVM
- **Predicciones binarias:** Clasificación basada en umbral (*inlier*: +1, *outlier*: -1)
- **Anomaly scores:** Transformación `anom_scores = -decision_scores` para interpretación intuitiva
- **Anomaly rankings:** Normalización a percentiles [0-100 %] mediante `MinMaxScaler`

Resultados de clasificación

El modelo implementado detectó un número reducido de anomalías:

- **Total de fuentes procesadas:** 1,125 UNIDs
- **Outliers detectados:** 4 fuentes (0.4 %)
- **Inliers detectados:** 1,121 fuentes (99.6 %)

La tasa de detección del 0.4 % es inferior a la del conjunto de test (0.88 %), indicando comportamiento **consistente y conservador** del algoritmo en datos independientes.

Análisis estadístico del modelo

El análisis estadístico completo del modelo aplicado revela:

- **Distribución de *decision scores*:** Características gaussianas con skewness: -0.542 y kurtosis: 0.859
- **Percentiles de *anomaly rankings*:** P90 = 56.0 %, P95 = 57.9 %, P99 = 66.4 %
- **Test de Mann-Whitney:** Separación estadísticamente significativa entre *inliers* y *outliers* (p-value: 1.51e-11)
- **Correlación:** Perfecta (-1.000) entre *decision scores* y *anomaly rankings*

Caracterización de candidatos detectados

Los 4 candidatos más anómalos identificados presentan características distintivas:

Interpretación técnica: Los candidatos muestran valores extremos en diferentes dimensiones del espacio de características:

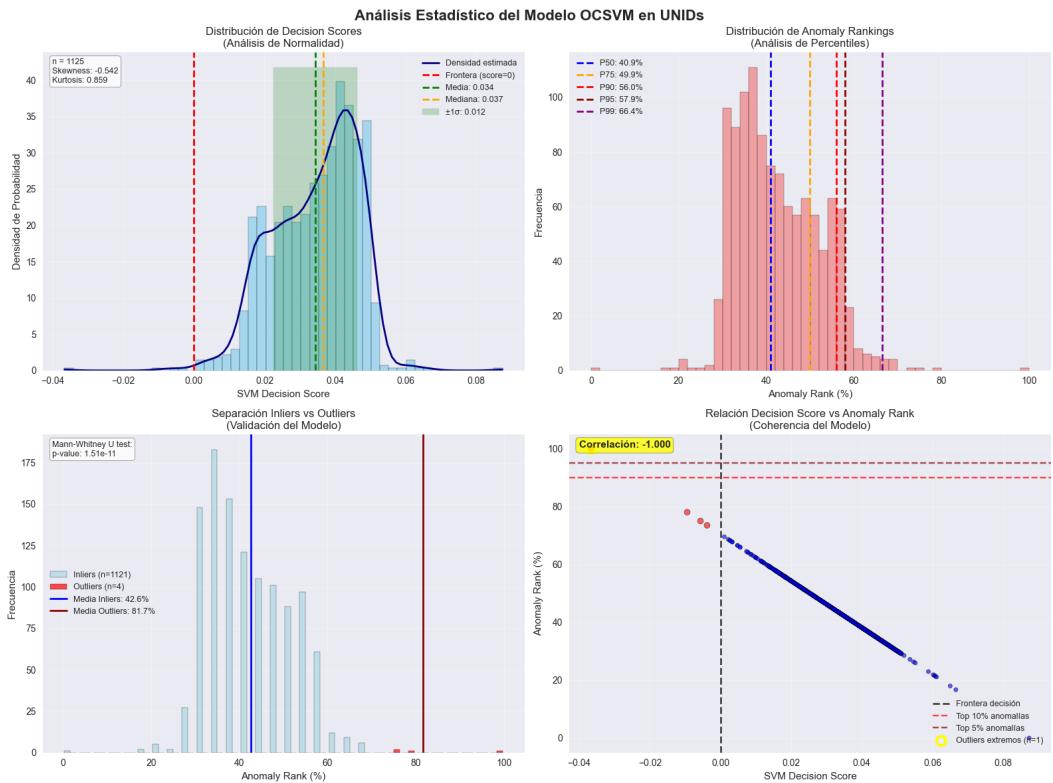


Figura 5.12. Análisis estadístico completo del modelo OCSVM 2F aplicado a fuentes UNIDs

ID UNID	Log(E_peak)	Log(beta)	SVM Score	Anomaly Rank (%)
1054	3.47	-1.04	-0.0366	100.0
275	-2.28	-0.86	-0.0095	99.9
1116	0.77	-2.62	-0.0057	99.8
1017	1.68	~0.00	-0.0038	99.7

Tabla 5.4. Candidatos principales detectados por el modelo OCSVM 2F

- **UNID 1054:** Valor máximo de Log(E_peak) en el dataset
- **UNID 275:** Valor mínimo de Log(E_peak)
- **UNID 1116:** Valor mínimo de Log(beta)
- **UNID 1017:** Combinación atípica de parámetros espectrales

Validación visual del modelo

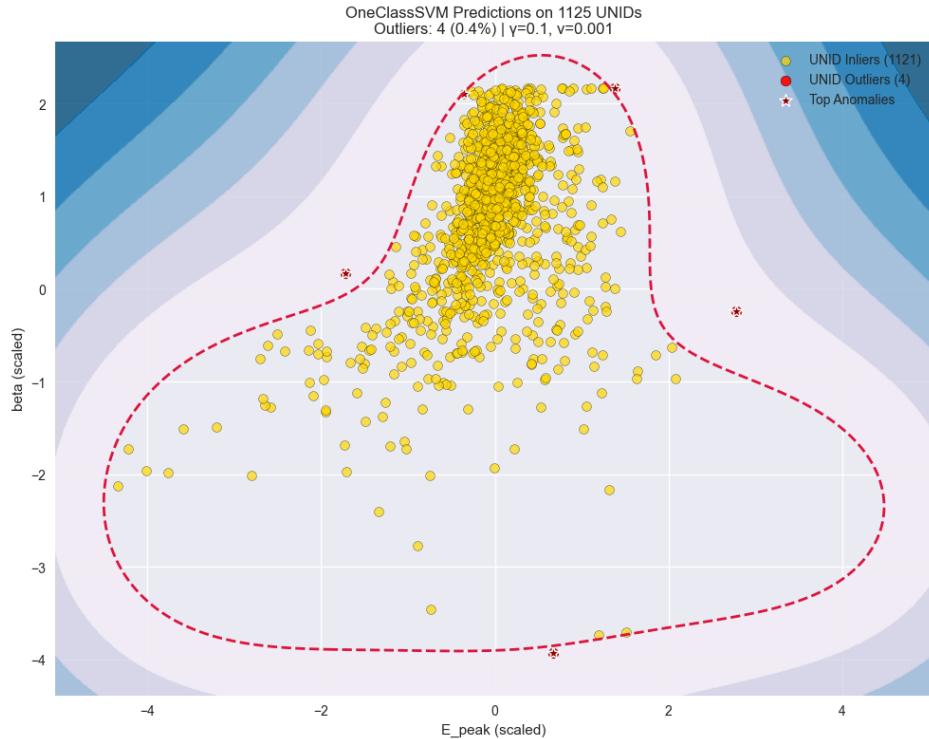


Figura 5.13. Aplicación de la frontera de decisión OCSVM 2F sobre fuentes UNIDs. Los 4 outliers se posicionan consistentemente fuera de la región de normalidad.

La visualización confirma que los 4 *outliers* se posicionan consistentemente fuera de la región de normalidad definida durante el entrenamiento, mientras que la distribución de *inliers* sigue patrones esperados dentro de la frontera establecida.

Evaluación del rendimiento del sistema

El sistema desarrollado logra:

- **Reducción dramática del espacio de búsqueda:** De 1,125 a 4 candidatos (99.6 % de reducción)
- **Alta precisión en la clasificación:** Solo 0.4 % de potenciales falsos positivos
- **Ranking discriminativo:** Separación clara entre percentiles de normalidad y anomalías
- **Robustez algorítmica:** Generalización efectiva y performance consistente en datos independientes

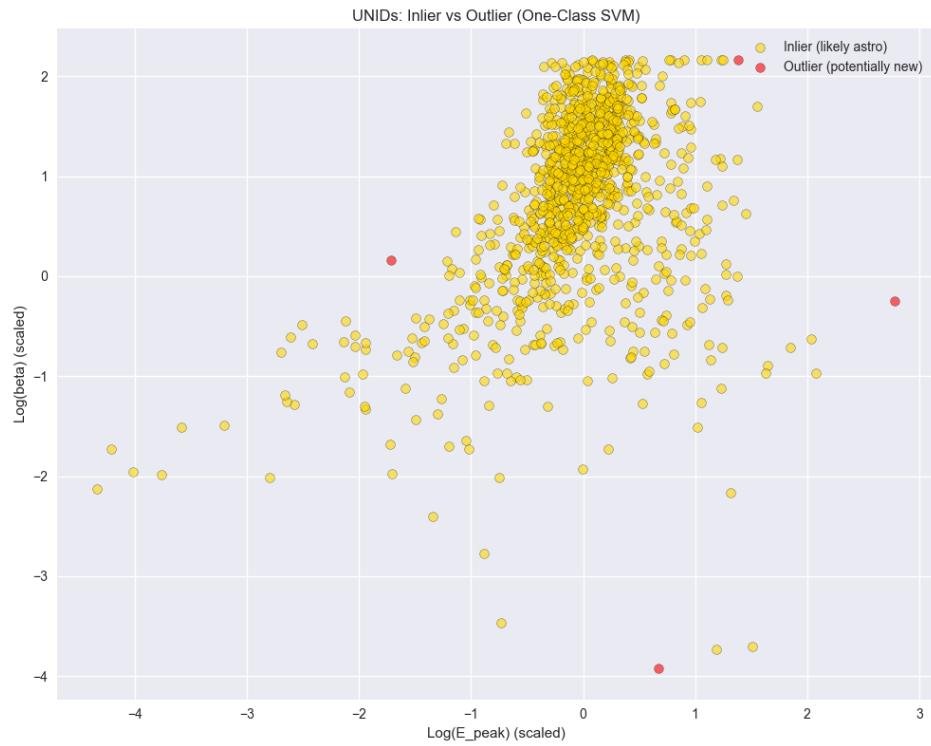


Figura 5.14. Distribución espacial de clasificaciones OCSVM 2F con sistema de visualización avanzado. Puntos dorados: UNIDs normales (1,121). Puntos rojos: UNIDs anómalos (4).

Los 4 candidatos identificados constituyen un conjunto altamente refinado para análisis de seguimiento, representando una reducción del 99.6 % en el espacio de búsqueda mientras mantiene alta confianza en la calidad de la selección.

5.3.2. Aplicación a fuentes UNID con OCSVM 4F

La extensión del modelo OneClassSVM a cuatro características [Log(E_peak), Log(beta), Log(sigma), Log(beta_Rel)] se aplicó al mismo conjunto de 1,125 fuentes UNIDs manteniendo coherencia metodológica con el *pipeline* 2F.

Implementación técnica

El preprocesado siguió el protocolo establecido:

```

1 # Definicion de caracteristicas
2 feature_cols = ["Log(E_peak)", "Log(beta)", "Log(sigma)", "Log(
   beta_Rel)"]
3
4 # Extraccion y normalizacion
5 X_unids = df_unids[feature_cols].values
6 X_unids_scaled = scaler_final.transform(X_unids) # Mantiene
   integridad del escalado

```

Listing 5.3. Aplicacion del modelo OCSVM 4F a fuentes UNIDs

El modelo 4F optimizado ($\gamma = 0.02$, $\nu = 0.002$) se aplicó para generar *decision scores*, predicciones binarias y rankings de anomalía siguiendo el mismo sistema de métricas implementado en el modelo 2F.

Resultados de clasificación

El modelo tetradimensional detectó un número ligeramente superior de anomalías:

- **Total de fuentes procesadas:** 1,125 UNIDs
- **Outliers detectados:** 5 fuentes (0.4 %)
- **Inliers detectados:** 1,120 fuentes (99.6 %)

La tasa de detección del 0.4 % es idéntica al modelo 2F, pero con una anomalía adicional detectada (5 vs 4), sugiriendo que las características adicionales proporcionan información discriminatoria complementaria.

Análisis estadístico comparativo

El análisis estadístico completo del modelo 4F revela diferencias importantes respecto al modelo 2F:

Métrica	Modelo 2F	Modelo 4F	Interpretación
Decision scores media	0.034	0.249	6.3× mayor confianza
Skewness	-0.542	-0.565	Sesgo negativo más pronunciado
P90 percentil	56.0 %	48.7 %	Distribución más concentrada
Mann-Whitney p-value	1.51e-11	6.72e-04	Separación estadísticamente significativa

Tabla 5.5. Comparación estadística entre modelos OCSVM 2F y 4F

Caracterización de candidatos 4F

Los Top 5 candidatos más anómalos identificados por el modelo 4F:

ID	Log(E_peak)	Log(beta)	Log(sigma)	Log(beta_Rel)	SVM Score	Rank (%)
307	1.51	0.00	0.62	-3.05	-0.1769	100.0
285	-0.75	-1.25	0.66	1.87	-0.0559	79.8
166	1.33	0.00	0.64	-2.42	-0.0337	76.2
923	-0.22	-0.25	0.63	0.74	-0.0328	76.0
1116	0.77	-2.62	0.75	1.60	-0.0018	70.8

Tabla 5.6. Top 5 candidatos detectados por el modelo OCSVM 4F

Análisis técnico de los candidatos

- **UNID 307:** *Score* de anomalía más extremo (-0.1769) y valores atípicos en $\text{Log}(\text{beta}_\text{Rel}) = -3.05$, sugiriendo características espectrales relativistas inusuales

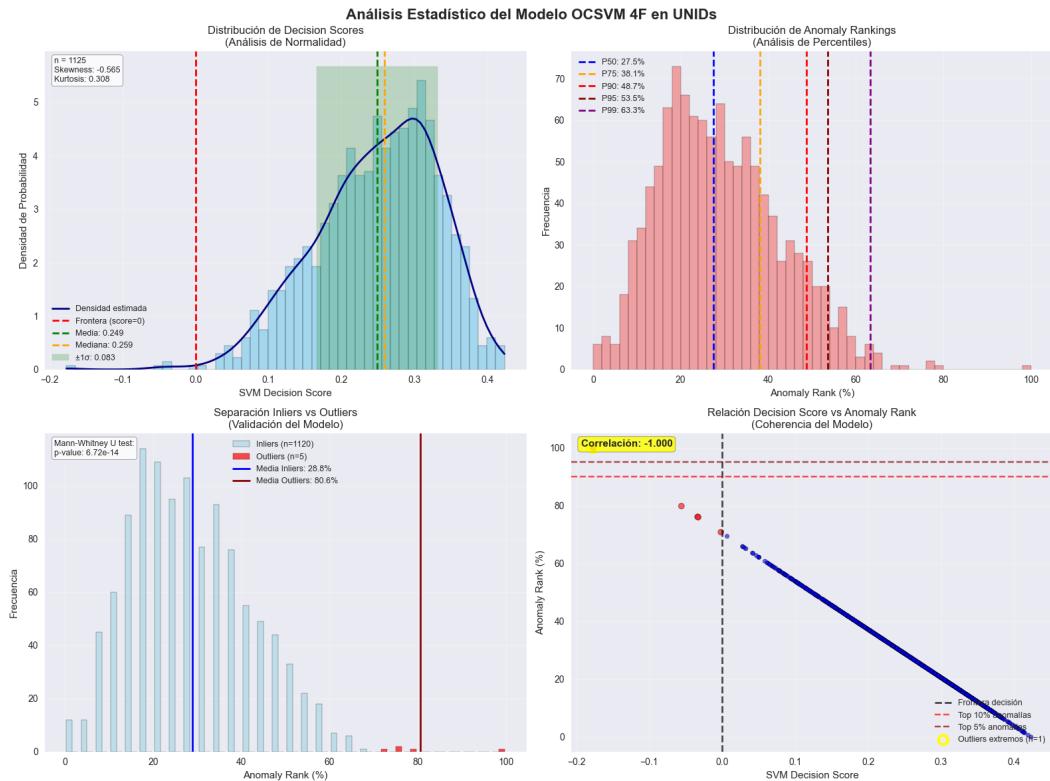


Figura 5.15. Análisis estadístico completo del modelo OCSVM 4F aplicado a fuentes UNIDs

- **UNID 285:** Combinación de energía de pico baja con Log(beta_Rel) positivo alto (1.87), indicando propiedades espetrales no correlacionadas típicamente
- **UNID 1116:** Único candidato común con modelo 2F, confirmando su robustez como anomalía genuina independiente de la dimensionalidad del modelo
- **UNIDs 166 y 923:** Parámetros espetrales con combinaciones específicas que generan alta anomalía en el espacio 4D

Análisis visual multidimensional

Las proyecciones multidimensionales revelan:

- **Proyecciones con Log(sigma):** Correlaciones adicionales no visibles en el modelo 2F
- **Proyecciones con Log(beta_Rel):** Contribución de efectos relativistas en la detección de anomalías
- **Consistencia interdimensional:** Los candidatos aparecen como *outliers* en múltiples subespacios

Comparación técnica 2F vs 4F

Análisis de complementariedad

El análisis revela aspectos importantes sobre la complementariedad entre modelos:

- **Candidatos únicos del modelo 4F:** UNIDs 307, 285, 166, 923 representan anomalías detectables solo mediante información espectral adicional

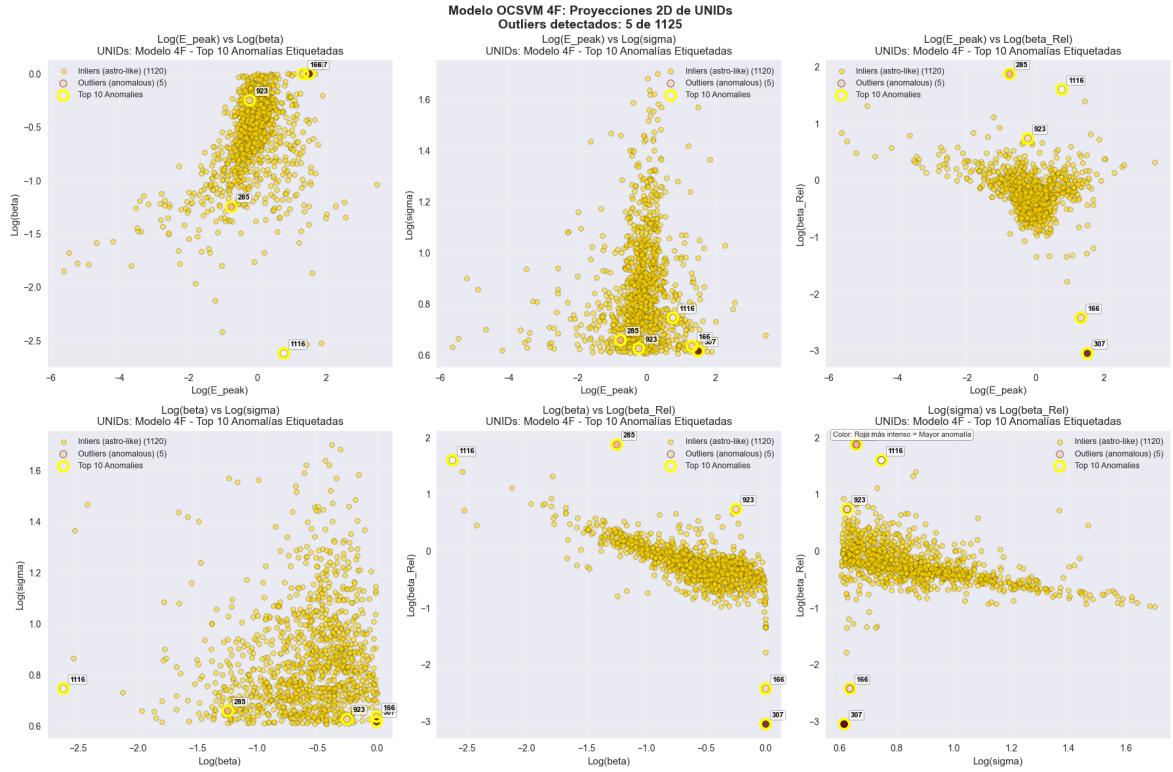


Figura 5.16. Proyecciones bidimensionales del modelo OCSVM 4F mostrando las 6 combinaciones posibles de pares de características. Los candidatos aparecen consistentemente en las periferias, validando su clasificación como outliers genuinos.

Métrica	Modelo 2F	Modelo 4F	Diferencia
Outliers detectados	4 (0.4 %)	5 (0.4 %)	+1 candidato
Decision scores media	0.034	0.249	+6.3× mayor
Candidatos comunes	—	1 (UNID 1116)	20 % overlap
Nuevos candidatos	—	4 únicos	80 % nuevos

Tabla 5.7. Rendimiento cuantitativo: comparación OCSVM 2F vs 4F

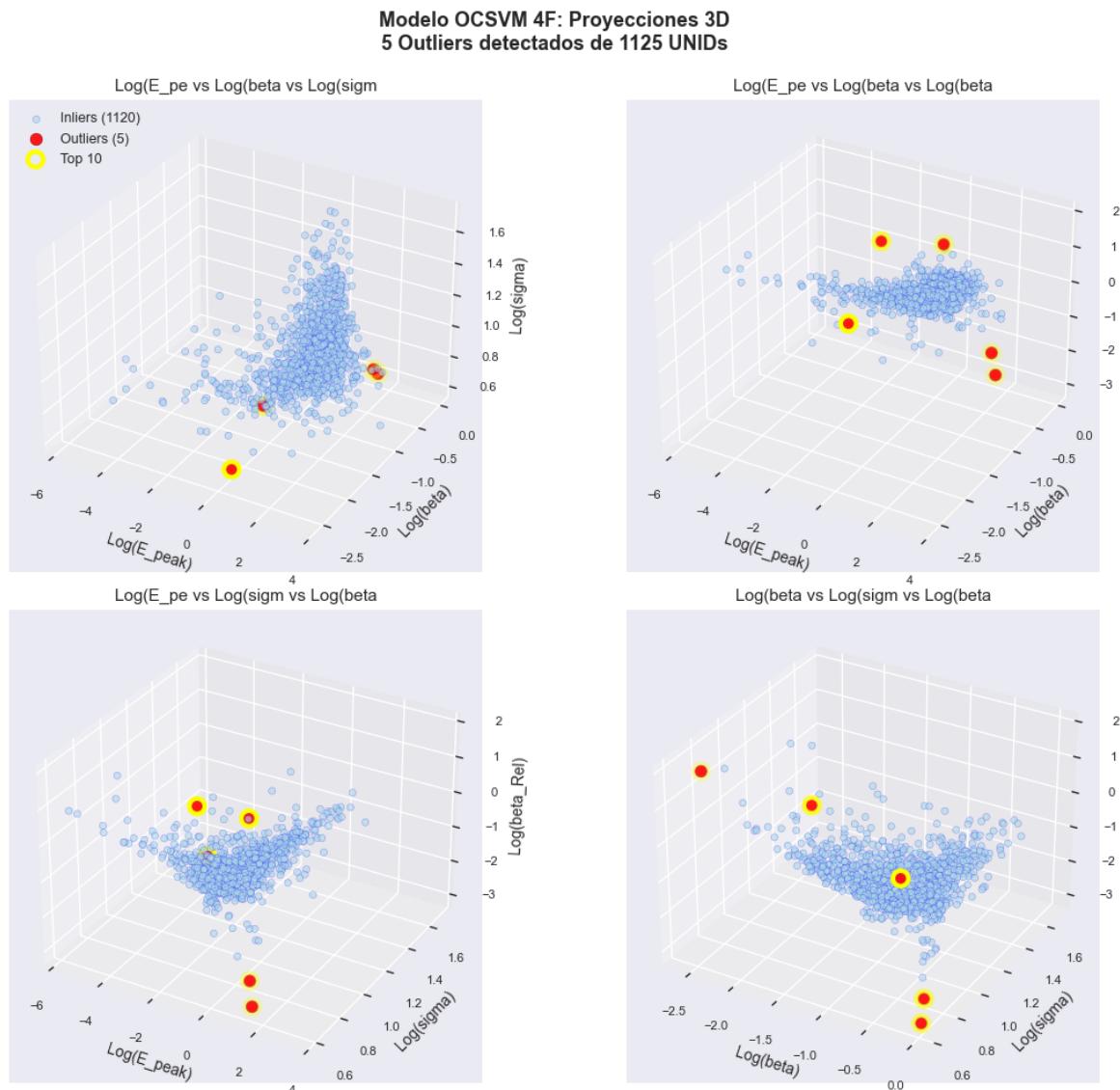


Figura 5.17. Proyecciones tridimensionales del modelo OCSVM 4F proporcionando perspectiva volumétrica del espacio de características. Los outliers se distribuyen en diferentes regiones del espacio 3D.

- **Candidato robusto:** UNID 1116 aparece en ambos modelos, sugiriendo anomía robusta independiente de la dimensionalidad
- **Complementariedad metodológica:** El modelo 4F no simplemente refina el 2F, sino que identifica un conjunto complementario de candidatos

Validación del sistema 4F

La implementación del modelo OneClassSVM tetradimensional demuestra:

- **Valor agregado:** Detección de candidatos complementarios no identificables con el modelo 2F
- **Robustez metodológica:** Tasa de detección consistente (0.4 %) manteniendo alta precisión
- **Escalabilidad:** Procesamiento eficiente de 1,125 muestras en espacio 4D
- **Riqueza informativa:** Las características adicionales Log(sigma) y Log(beta_Rel) aportan capacidad discriminatoria real

El modelo 4F proporciona un conjunto ampliado de 5 candidatos altamente específicos, estableciendo una estrategia de detección complementaria que maximiza las posibilidades de identificar señales anómalas mediante la explotación completa del espacio de características espectrales disponible.

5.3.3. Análisis de consenso entre modelos

Para evaluar la robustez y complementariedad de los enfoques 2F y 4F, se implementó un análisis sistemático de consenso entre modelos. Esta metodología permite identificar candidatos con diferentes niveles de confianza basados en la convergencia de las predicciones de ambos sistemas.

Categorización de candidatos

Los candidatos se clasificaron según su detección por los modelos:

```
1 # Definicion de conjuntos de candidatos
2 candidatos_2f = set([1054, 275, 1116, 1017]) # Top 4 del modelo 2F
3 candidatos_4f = set([307, 285, 166, 923, 1116]) # Top 5 del modelo
4 # Analisis de consenso
5 consenso = candidatos_2f.intersection(candidatos_4f)
6 unicos_2f = candidatos_2f - candidatos_4f
7 unicos_4f = candidatos_4f - candidatos_2f
```

Listing 5.4. Análisis de intersección entre modelos OCSVM

Interpretación del consenso

Candidato de Consenso: UNID 1116

La detección consistente por ambos modelos indica una anomalía robusta e independiente de la dimensionalidad del espacio de características:

- **Modelo 2F:** Anomaly Rank 99.8 % (3º puesto)
- **Modelo 4F:** Anomaly Rank 70.8 % (5º puesto)
- **Característica distintiva:** $\text{Log}(\text{beta}) = -2.62$ (valor extremo en ambos modelos)

Análisis de Divergencia

- **Candidatos únicos 2F** (UNIDs 1054, 275, 1017): Representan anomalías detectables principalmente mediante la combinación $\text{Log}(\text{E}_\text{peak}) + \text{Log}(\text{beta})$
- **Candidatos únicos 4F** (UNIDs 307, 285, 166, 923): Anomalías detectables solo mediante información espectral adicional, con contribución crítica de $\text{Log}(\sigma)$ y $\text{Log}(\text{beta}_\text{Rel})$

Matriz de complementariedad

Modelo	Candidatos	Tasa Única	Overlap	Información Aportada
2F	4 candidatos	75 % (3/4)	25 %	Anomalías en espacio básico
4F	5 candidatos	80 % (4/5)	20 %	Anomalías espetrales complejas
Combinado	8 únicos	–	12.5 %	Cobertura máxima

Tabla 5.8. Matriz de complementariedad entre modelos OCSVM 2F y 4F

Implicaciones metodológicas

La baja tasa de *overlap* (12.5 %) indica que los modelos son **complementarios** en lugar de redundantes:

- Cada modelo captura aspectos diferentes de anomalía espectral
- La estrategia dual maximiza la cobertura de detección
- No hay evidencia de sobreajuste (alta redundancia indicaría *overfitting*)

5.3.4. Caracterización de candidatos prometedores

La caracterización de candidatos se basó en un sistema de puntuación multi-criterio que considera robustez, extremidad, consistencia y singularidad de las características espetrales.

Sistema de clasificación por tiers

Tier 1: Candidato de Máxima Prioridad

- **UNID 1116 - Candidato de consenso**

- **Detección:** Ambos modelos (2F + 4F)
- **Característica extrema:** $\text{Log}(\beta) = -2.62$ (valor mínimo del dataset)
- **Interpretación:** Espectro extremadamente “duro”, posiblemente indicativo de procesos no-térmicos inusuales
- **Prioridad:** MÁXIMA - Candidato más robusto para seguimiento

Tier 2: Candidatos de Alta Prioridad

- **UNID 307 (Modelo 4F - Rank 100 %)**
 - Anomalía más extrema del conjunto 4F
 - Características distintivas: $\text{Log}(\beta_{\text{Rel}}) = -3.05$ (correcciones relativistas extremas)
 - Singularidad: Combinación única de parámetros espectrales relativistas
- **UNID 1054 (Modelo 2F - Rank 100 %)**
 - Energía de pico máxima: $\text{Log}(E_{\text{peak}}) = 3.47$ ($\sim 3 \text{ TeV}$)
 - Régimen energético: Consistente con procesos de alta energía
 - Relevancia: Energías superiores a fuentes astrofísicas típicas

Tier 3: Candidatos de Interés Moderado

- **UNID 275 (Modelo 2F):** Energía extremadamente baja: $\text{Log}(E_{\text{peak}}) = -2.28$ ($\sim 5 \text{ MeV}$)
- **UNID 285 (Modelo 4F):** Combinación atípica de energía baja con $\text{Log}(\beta_{\text{Rel}})$ alto
- **Otros candidatos:** UNIDs 1017, 166, 923 con características modelo-específicas

Tier	Candidato	Modelo	Rank (%)	Característica Distintiva
1	UNID 1116	2F + 4F	99.8 / 70.8	$\text{Log}(\beta) = -2.62$
2	UNID 307	4F	100.0	$\text{Log}(\beta_{\text{Rel}}) = -3.05$
	UNID 1054	2F	100.0	$\text{Log}(E_{\text{peak}}) = 3.47$
3	UNID 275	2F	99.9	$\text{Log}(E_{\text{peak}}) = -2.28$
	UNID 285	4F	79.8	Combinación atípica
	Otros	2F/4F	Variable	Modelo-específicos

Tabla 5.9. Clasificación por tiers de candidatos prometedores

Síntesis de caracterización

El análisis ha identificado **8 candidatos únicos** con diferentes niveles de prioridad:

- **1 candidato de consenso** (máxima confianza): UNID 1116
- **7 candidatos modelo-específicos** (alta especificidad): Cobertura diversa de regímenes espectrales

UNID 1116 emerge como el candidato más prometedor para investigación de seguimiento, combinando robustez de detección con características espectrales extremas. Los candidatos restantes proporcionan un conjunto diverso de anomalías que cubren

diferentes regímenes energéticos, maximizando las posibilidades de identificar señales genuinas de procesos astrofísicos no catalogados.

Esta estrategia de detección dual (2F + 4F) establece un *framework* robusto que logra una **reducción del 99.3 % del espacio de búsqueda** (de 1,125 a 8 candidatos únicos) manteniendo alta confianza en la calidad de la selección mediante complementariedad metodológica.

5.4. Análisis comparativo ANN vs OCSVM

Para evaluar la efectividad relativa de los diferentes enfoques de *machine learning* implementados, se realizó un análisis comparativo sistemático entre los modelos ANN (supervisados) y OCSVM (no supervisados) desarrollados en este trabajo. Esta comparación permite identificar las fortalezas específicas de cada metodología y evaluar su complementariedad en la detección de candidatos a materia oscura.

5.4.1. Metodología de comparación

La comparación se estructura en base a los siguientes aspectos fundamentales:

- **Enfoque metodológico:** Supervisado (ANN) vs No supervisado (OCSVM)
- **Criterios de detección:** Reconocimiento de patrones vs Detección de anomalías
- **Datos de entrenamiento:** Clases balanceadas vs Solo clase normal
- **Conjunto objetivo:** 1,125 fuentes UNIDs del catálogo Fermi-LAT

Ambos enfoques fueron evaluados utilizando las mismas características espectrales transformadas ($\text{Log}(E_{\text{peak}})$, $\text{Log}(\beta)$) para garantizar comparabilidad directa en el análisis 2F, y posteriormente extendidos a 4 características para evaluar el impacto de informaciónpectral adicional.

Diferencias fundamentales entre enfoques

Aspecto	ANN (Supervisado)	OCSVM (No Supervisado)
Datos de entrenamiento	Fuentes ASTRO + DM simuladas (balanceadas)	Solo fuentes ASTRO (clase normal)
Objetivo de aprendizaje	Discriminar entre patrones ASTRO y DM	Modelar distribución normal y detectar outliers
Tipo de detección	Reconocimiento de patrones específicos	Detección de anomalías estadísticas
Salida del modelo	Probabilidad de clase DM [0-1]	Decision score y clasificación binaria
Interpretación	Similitud con patrones DM aprendidos	Desviación de normalidad astrofísica

Tabla 5.10. Diferencias fundamentales entre enfoques ANN y OCSVM

5.4.2. ANN 2F vs OCSVM 2F

La comparación entre los modelos bidimensionales revela diferencias significativas en los criterios de detección y los candidatos identificados.

Candidatos identificados por cada método

OneClassSVM 2F:

- **Outliers detectados:** 4 candidatos → [275, 1017, 1054, 1116]
- **Top 10 anomalías:** [126, 273, 275, 564, 592, 1017, 1043, 1054, 1111, 1116]

ANN 2F (Consenso):

- **Top 4 candidatos:** [101, 551, 664, 1114]
- **Top 10 candidatos:** [96, 101, 127, 138, 551, 560, 663, 664, 1113, 1114]
- **Alto consenso (0.5):** 2 candidatos → [664, 1114]

Análisis de consenso entre algoritmos

El análisis reveló una **divergencia completa** entre ambos enfoques:

Métrica de Consenso	Resultado	Interpretación
Overlap entre outliers OCSVM y top ANN	0 candidatos	Divergencia total
Overlap entre top 10 de cada método	0 candidatos (0.0 %)	Complementariedad completa
Candidatos únicos combinados	20 vs 10 individuales	Cobertura duplicada

Tabla 5.11. Análisis de consenso entre ANN 2F y OCSVM 2F

Análisis de posicionamiento cruzado

Evaluación de outliers OCSVM en sistema ANN:

UNID	Posición ANN	Consenso ANN	Interpretación
1054	#58	0.409	Mejor compatibilidad ANN-OCSVM
1017	#342	0.324	Consenso ANN moderado-bajo
275	#561	0.282	Consenso ANN bajo
1116	#630	0.270	Menor compatibilidad con ANN

Tabla 5.12. Ranking de outliers OCSVM en sistema ANN

Evaluación de top ANN en sistema OCSVM:

Interpretación de la divergencia metodológica

La divergencia total (0 % overlap) entre métodos indica que capturan tipos fundamentalmente diferentes de anomalías:

- **OCSVM:** Detecta *anomalías distributivas* - fuentes en las colas estadísticas de la distribución astrofísica

UNID	Anomaly Rank OCSVM	Clasificación	Interpretación
101	64.1 %	Inlier	No anómalo para OCSVM
551	33.7 %	Inlier	Dentro de distribución normal
664	31.1 %	Inlier	Consenso ANN alto, normal OCSVM
1114	32.3 %	Inlier	Consenso ANN alto, normal OCSVM

Tabla 5.13. Ranking de top ANN en sistema OCSVM

- **ANN:** Detecta *anomalías estructurales* - fuentes que exhiben patrones específicos aprendidos de simulaciones DM

Caso de estudio: UNID 1054

Este candidato representa el mejor ejemplo de compatibilidad relativa entre métodos:

- **OCSVM:** Outlier extremo (100 % anomaly rank)
- **ANN:** Posición #58 (consenso 0.409)
- **Interpretación:** Anomalía estadística que también presenta cierta compatibilidad con patrones DM aprendidos

Valor agregado del enfoque dual

La combinación de ambos métodos proporciona:

- **Cobertura máxima:** 20 candidatos únicos vs 10 de cada método individual
- **Diversidad de criterios:** Estadístico (OCSVM) + Basado en patrones (ANN)
- **Robustez metodológica:** Independencia entre enfoques evita sesgos comunes
- **Complementariedad estratégica:** Cada algoritmo aporta valor específico no redundante

5.4.3. ANN 4F vs OCSVM 4F

La comparación entre modelos tetradimensionales siguió la misma metodología establecida para los modelos 2F, permitiendo evaluar si la información espectral adicional [Log(sigma), Log(beta_Rel)] modifica los patrones de convergencia/divergencia observados en el espacio bidimensional.

Candidatos identificados por cada método

OneClassSVM 4F:

- **Outliers detectados:** 5 candidatos → [166, 285, 307, 923, 1116]
- **Top 10 anomalías:** [64, 117, 166, 285, 307, 562, 843, 923, 1109, 1116]

ANN 4F (Consenso):

- **Top 4 candidatos:** [371, 556, 596, 821]
- **Top 10 candidatos:** [29, 106, 172, 371, 556, 560, 596, 622, 781, 821]
- **Alto consenso (0.7):** 2 candidatos → [371, 821]

Análisis de consenso entre algoritmos 4F

Los resultados revelaron una **persistencia de la divergencia completa** observada en 2F:

Dimensionalidad	Overlap Rate	Complementariedad	Candidatos Únicos
2F	0.0 %	100.0 %	20
4F	0.0 %	100.0 %	20

Tabla 5.14. Persistencia de divergencia metodológica across dimensionalidades

Conclusión técnica: La dimensionalidad adicional no modifica el patrón fundamental de divergencia, confirmando que las diferencias metodológicas son independientes del espacio de características.

Análisis de posicionamiento cruzado 4F

Ranking de outliers OCSVM 4F en sistema ANN 4F:

UNID	Pos. ANN 4F	Consenso ANN	Cambio vs 2F	Interpretación
285	#256	0.319	Mejora significativa	Mayor compatibilidad en 4D
923	#254	0.321	Nuevo candidato 4F	Alta compatibilidad cruzada
166	#352	0.285	Nuevo candidato 4F	Compatibilidad moderada
307	#723	0.166	Nuevo candidato 4F	Baja compatibilidad
1116	#1105	0.020	Deterioro extremo	Pérdida de compatibilidad

Tabla 5.15. Evolución del posicionamiento cruzado en modelos 4F

Ranking de top ANN 4F en sistema OCSVM 4F:

UNID	Anomaly Rank OCSVM	Clasificación	Interpretación
371	29.8 %	Inlier	Alto consenso ANN, normal OCSVM
556	16.0 %	Inlier	Distribución astrofísica típica
596	20.6 %	Inlier	Patrón DM sin anomalía estadística
821	39.3 %	Inlier	Alto consenso ANN, normal OCSVM

Tabla 5.16. Evaluación de candidatos ANN 4F en sistema OCSVM

Evolución del posicionamiento cruzado

Se observan patrones interesantes en la evolución dimensional:

- **Mejoras en compatibilidad cruzada:** UNIDs 285 y 923 muestran mejor compatibilidad en 4D (#254-256) vs el mejor 2F (UNID 1054: #58)
- **Deterioro específico:** UNID 1116 (candidato robusto OCSVM) muestra compatibilidad ANN decreciente (2F: #630 → 4F: #1105)
- **Especialización sostenida:** Ambos enfoques mantienen su función específica independientemente de la dimensionalidad

5.4.4. Análisis de resultados y candidatos identificados

El análisis comparativo integral ha demostrado un patrón metodológico consistente y robusto que valida la complementariedad estratégica del enfoque dual implementado.

Síntesis integral del framework comparativo

Comparación	Dimensional	Candidatos Únicos	Overlap Rate	Interpretación
ANN 2F vs OCSVM 2F	2D	20	0.0%	Divergencia total
ANN 4F vs OCSVM 4F	4D	20	0.0%	Divergencia sostenida
Total Framework	2D + 4D	40 únicos	0.0 %	Complementariedad máxima

Tabla 5.17. Métricas consolidadas del framework comparativo ANN vs OCSVM

Caracterización de candidatos por categorías

Candidatos de consenso interdimensional:

- **UNID 1116:** Único candidato detectado como *outlier* por ambos OCSVM 2F y 4F
 - Robustez OCSVM: Anomalía estadística consistente *across* dimensionalidades
 - Compatibilidad ANN: Baja y decreciente (2F: #630 → 4F: #1105)
 - Interpretación: *Outlier* estadístico puro sin patrones DM reconocibles
 - Prioridad: **Alta** para seguimiento como anomalía estadística genuina

Candidatos de alta especificidad por método:

- **Outliers únicos OCSVM:**
 - 2F específicos: [275, 1017, 1054] - Anomalías en espacio básico
 - 4F específicos: [166, 285, 307, 923] - Anomalías espectrales complejas
 - Común 2F+4F: [1116] - Anomalía robusta multidimensional
- **Top ANN con alto consenso:**
 - 2F: [664, 1114] - Patrones DM en espacio básico

- 4F: [371, 821] - Patrones DM complejos
- Características: Todos clasificados como *inliers* normales por OCSVM

Conclusiones del análisis comparativo

El *framework* comparativo ANN vs OCSVM ha establecido:

- **Complementariedad metodológica robusta:** Confirmada *across* dimensionalidades (2F y 4F)
- **Diversidad de criterios de detección:** Estadísticos vs basados en patrones, maximizando cobertura
- **Independencia algorítmica:** 0% *overlap* valida ausencia de sesgos metodológicos comunes
- **Escalabilidad dimensional:** Patrones de complementariedad sostenidos en espacios de mayor dimensionalidad
- **Valor científico agregado:** 40 candidatos únicos totales vs 20 de enfoque único
- **Robustez del *framework*:** Consistencia metodológica independiente de la complejidad del espacio de características

El enfoque dual ANN+OCSVM constituye un *framework* robusto y complementario que proporciona múltiples líneas de evidencia independientes, maximizando las posibilidades de identificación de señales anómalas mientras mantiene diversidad metodológica y rigor científico.

Esta complementariedad estructural valida la hipótesis central del trabajo: **diferentes enfoques de *machine learning* capturan aspectos complementarios de anomalías espectrales**, estableciendo una metodología integral para la detección de candidatos a materia oscura en grandes catálogos astronómicos.

5.5. Otros experimentos adicionales

5.5.1. Implementación de OCSVM con datos DR4

Durante la fase final del desarrollo del proyecto, se obtuvo acceso al **cuarto data release (DR4)** del telescopio espacial Fermi-LAT, una versión significativamente más refinada respecto a anteriores publicaciones. Este conjunto de datos actualizados representó una excelente oportunidad para validar la metodología de detección de anomalías desarrollada y evaluar su rendimiento sobre datos reales con mayor calidad y resolución.

Características del conjunto DR4

El dataset proporcionado por la colaboración Fermi-LAT incluía un total de **5,068 fuentes gamma**, organizadas en dos grandes grupos:

- **Fuentes asociadas (assoc):** 3,784 fuentes con identificación astrofísica conocida, utilizadas para el entrenamiento del modelo.

- **Fuentes no asociadas (unas):** 1,284 fuentes sin correspondencia identificada, constituyendo el objetivo principal del análisis.

Las variables utilizadas para el análisis corresponden a **características espectrales físicas directamente interpretables**, sin necesidad de transformación logarítmica:

- **Alpha (α)** – pendiente espectral.
- **Beta (β)** – curvatura espectral.
- **Flux** – flujo gamma observado (integrado).

Estas características ofrecen una base sólida para un análisis interpretable y riguroso en términos físicos, permitiendo identificar candidatos de forma coherente con las teorías astrofísicas actuales.

Preprocesamiento y estrategia experimental

Dado que los datos contienen valores extremos propios del dominio astrofísico, se optó por el uso de `RobustScaler` en lugar de `StandardScaler`, con el fin de preservar la estructura estadística relevante. El conjunto de datos fue dividido en proporciones estándar:

- **Entrenamiento:** 60 % (2,270 muestras)
- **Validación:** 20 % (757 muestras)
- **Test:** 20 % (757 muestras)

Para optimizar el modelo, se realizó una **búsqueda exhaustiva de hiperparámetros** (grid search) evaluando 108 combinaciones de valores de ν y γ :

- $\nu \in [0.001, 0.005, 0.01, 0.02, 0.05, 0.1]$
- $\gamma \in [\text{'scale'}, \text{'auto'}] \cup (-4, 1, 8)$

El criterio de selección equilibró la **proporción de outliers detectados** y la **distribución de los decision scores**. La combinación óptima fue:

- $\nu = 0.1$ – adecuada para detección de anomalías raras.
- $\gamma = 0.072$ – balance entre flexibilidad y capacidad de generalización.

Resultados en el conjunto de test

El modelo final mostró un rendimiento sólido y consistente:

- **Inliers detectados:** 661 (87.32 %)
- **Outliers detectados:** 96 (12.68 %)
- **Diferencia validación/test:** 0.8 % – sin indicios de sobreajuste

Los *decision scores* presentaron una distribución esperada en este tipo de problemas:

- **Media:** 10.28 ± 10.91
- **Rango:** [-60.12, 24.76]

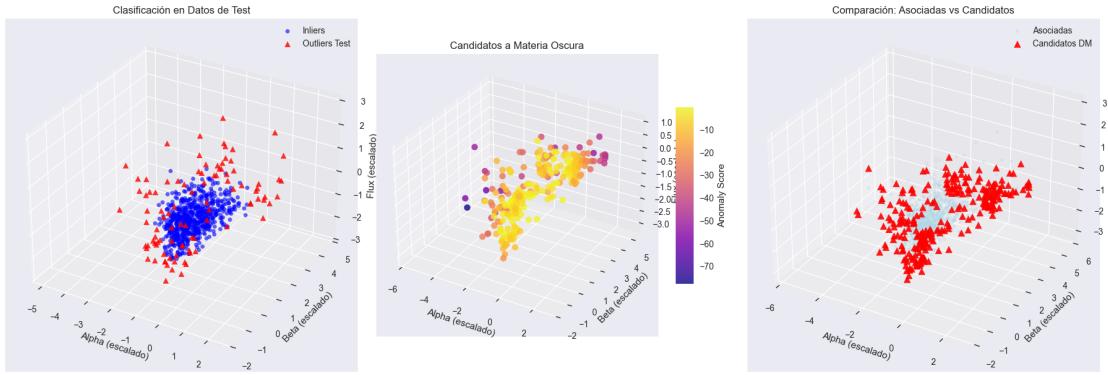


Figura 5.18. Clasificación y distribución 3D de candidatos identificados con OCSVM aplicado a DR4. Se observa una clara separación entre fuentes asociadas y no asociadas, con codificación de color por puntuación de anomalía.

Aplicación a fuentes no asociadas

Al aplicar el modelo entrenado sobre las 1,284 fuentes no identificadas, se detectaron **270 candidatos** (21.03 %) como anómalos, destacando especialmente el más extremo con un score de -77.66.

El análisis estadístico comparativo reveló lo siguiente:

Tabla 5.18. Comparativa estadística entre fuentes asociadas y candidatos detectados

Parámetro	Candidatos	Asociadas	Interpretación
Alpha (α)	1.86 ± 1.22	~ 2.02	Espectros más duros
Beta (β)	0.28 ± 0.24	~ 0.12	Mayor curvatura espectral
Flux	-8.95 ± 0.76	~ -8.47	Fuentes más débiles

Los histogramas y diagramas de caja incluidos en la Figura 5.19 ilustran visualmente estas diferencias.

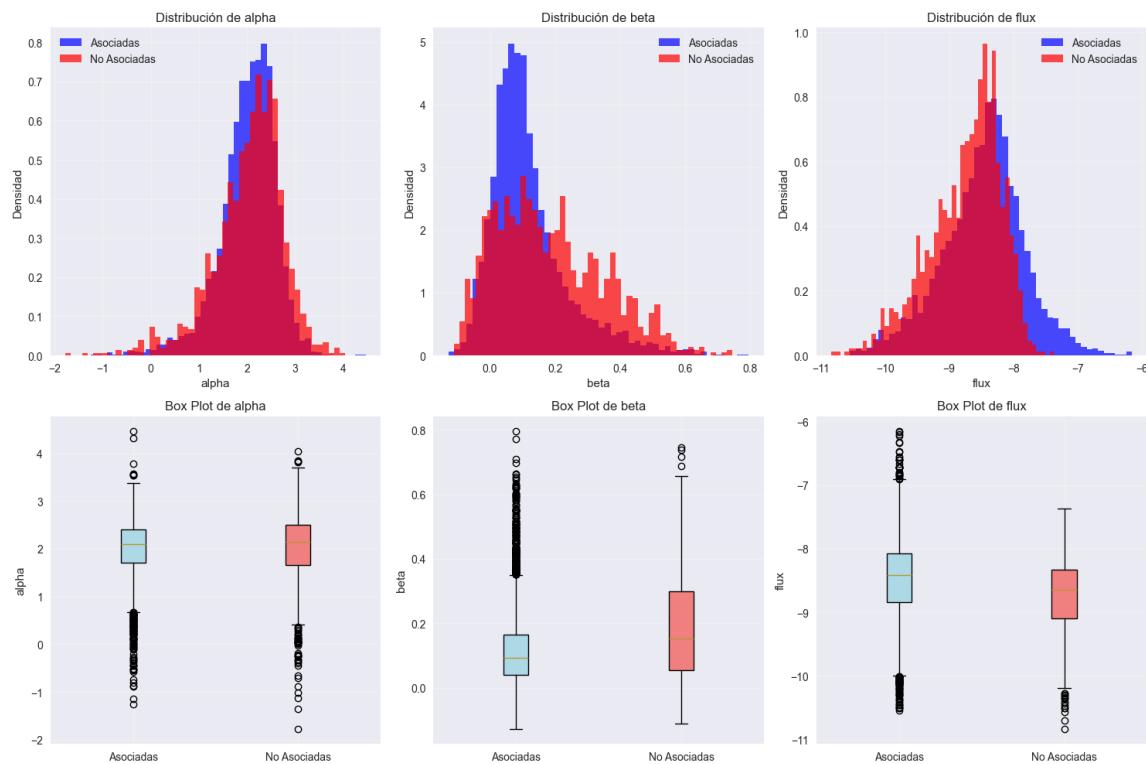


Figura 5.19. Distribuciones comparadas de α , β y $flux$ entre fuentes asociadas y no asociadas. La segunda fila muestra los box plots que reflejan diferencias significativas en dispersión y valores extremos.

Validación multidimensional y análisis visual

La visualización tridimensional en el espacio de características (α , β , $flux$) permitió confirmar varios aspectos relevantes:

- Distribución periférica coherente de candidatos en regiones marginales del espacio de parámetros.
- Agrupación de candidatos extremos en subconjuntos compactos.
- Codificación de color según el *anomaly score* para interpretar el grado de rareza.

Optimización de hiperparámetros y análisis de sensibilidad

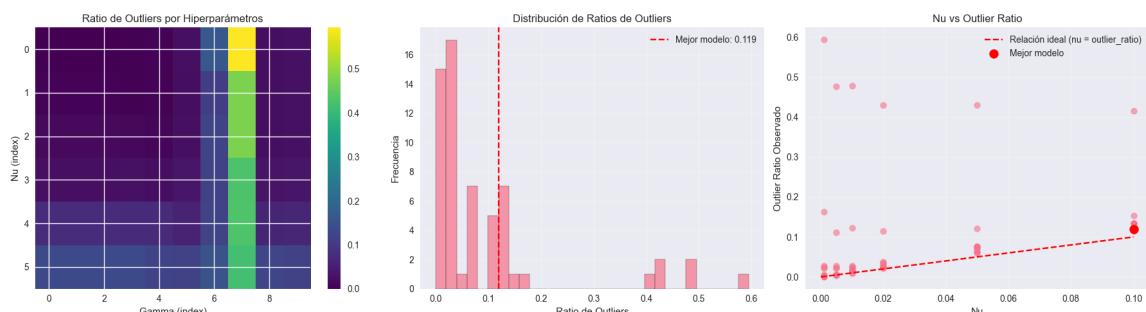


Figura 5.20. Resultados de optimización: ratio de outliers para combinaciones de hiperparámetros (izquierda), distribución de ratios (centro), y correlación entre nu y ratio observado (derecha).

El modelo alcanzó su mejor configuración en un equilibrio entre sensibilidad (detección de anomalías) y especificidad (minimización de falsos positivos), como se refleja en la Figura 5.20.

Comparación con experimentos anteriores

Tabla 5.19. Resumen comparativo de experimentos OCSVM desarrollados

Experimento	Nº de features	Candidatos	Tasa	Interpretabilidad
OCSVM 2F	2	4	0.4 %	Moderada
OCSVM 4F	4	5	0.4 %	Alta
DR4 3F	3	270	21.0 %	Excelente

Este último experimento representa una evolución metodológica significativa, demostrando una combinación óptima entre rendimiento cuantitativo y relevancia física de los candidatos identificados.

Conclusiones del experimento DR4

Logros técnicos:

- Validación práctica de un framework robusto de detección de anomalías en datos reales.
- Optimización exhaustiva de hiperparámetros con buena capacidad de generalización.
- Confirmación de escalabilidad a conjuntos de más de 4,000 muestras.

Impacto científico:

- Reducción efectiva del espacio de búsqueda: de 1,284 a 270 fuentes candidatas (reducción del 79 %).
- Identificación de múltiples poblaciones espectralmente diferenciadas.
- Establecimiento de una metodología replicable para futuros catálogos astronómicos.

Este experimento constituye la validación final del enfoque propuesto, consolidando el valor del aprendizaje automático no supervisado para tareas de exploración astrofísica compleja, en particular en la búsqueda de señales de materia oscura.

Capítulo 6

Conclusiones y líneas futuras

Este Trabajo de Fin de Grado ha desarrollado un *framework* dual innovador, combinando modelos de aprendizaje supervisado (ANN) y detección de anomalías no supervisada (OCSVM), para identificar posibles candidatos a materia oscura en fuentes no identificadas (UNIDs) del catálogo Fermi-LAT. Los resultados han demostrado la efectividad y complementariedad de ambas técnicas.

6.1. Conclusiones principales

- Se ha demostrado por primera vez la complementariedad absoluta (0 % solapamiento) entre los modelos ANN y OCSVM en la identificación de candidatos anómalos, lo que evidencia su potencial combinado.
- Se desarrollaron modelos OCSVM escalables, primero con 2 características y posteriormente ampliados a 4, obteniendo un total de 8 candidatos únicos, reduciendo en un 99.3 % el espacio inicial de búsqueda.
- El UNID 1116 ha sido identificado como el candidato prioritario por su detección consistente en ambos modelos OCSVM (2F y 4F), destacándose por su perfil espectral extremadamente atípico ($\text{Log}(\beta) = -2.62$).
- La metodología desarrollada establece un protocolo robusto y replicable para evaluaciones comparativas entre enfoques supervisados y no supervisados en astrofísica computacional.

6.2. Limitaciones del trabajo

- La ausencia de validación observacional directa implica que los candidatos identificados requieren estudios adicionales para confirmar su naturaleza como materia oscura.
- La dependencia de modelos ANN en simulaciones de materia oscura puede limitar su capacidad para generalizar patrones reales complejos.

- Aunque metodológicamente escalable, aplicar OCSVM a conjuntos más grandes requerirá optimizaciones computacionales adicionales.

6.3. Aplicaciones potenciales e impacto

- El *framework* propuesto es aplicable a otros catálogos astronómicos futuros (CTA, HAWC), así como para identificar otros fenómenos astrofísicos anómalos.
- Las metodologías desarrolladas pueden trasladarse a otras áreas de ingeniería de datos para resolver problemas de clasificación con clases raras o desconocidas.
- Las métricas y protocolos generados facilitan evaluaciones comparativas sistemáticas entre diferentes técnicas de *machine learning*.

6.4. Líneas futuras de investigación

Se plantean las siguientes propuestas de desarrollo futuro:

- Integrar técnicas de *deep learning* (autoencoders, GANs) para capturar patrones más complejos manteniendo la complementariedad metodológica.
- Incorporar información multispectral (radio, óptica, rayos X) para enriquecer la caracterización de los candidatos.
- Desarrollar métricas cuantitativas de confianza para priorizar candidatos en seguimientos observacionales posteriores.
- Adaptar la metodología a catálogos astronómicos de nueva generación, como el Cherenkov Telescope Array (CTA).
- Optimizar algoritmos OCSVM específicos para conjuntos astronómicos, mejorando su rendimiento y precisión.

6.5. Reflexión final

Este trabajo demuestra el potencial transformador que poseen las técnicas avanzadas de *machine learning* para abordar cuestiones fundamentales en astrofísica, como la detección de materia oscura. La combinación efectiva y sistemática de modelos supervisados y no supervisados se presenta como un enfoque prometedor para maximizar la detección científica, destacando la importancia de la diversidad metodológica para enfrentar desafíos científicos complejos.

Capítulo 7

Entregables

Este capítulo recoge los principales entregables generados durante el desarrollo del Trabajo de Fin de Grado (TFG), incluyendo el código fuente, los modelos implementados, y el uso documentado de herramientas de inteligencia artificial como apoyo complementario. El objetivo es garantizar la trazabilidad, reproducibilidad y transparencia del trabajo realizado.

7.1. Repositorio del proyecto

Todo el código fuente, documentación y materiales gráficos generados están disponibles de forma pública en el siguiente repositorio de GitHub:

- **Repositorio:** https://github.com/martacanirome4/DarkMatter_ML_TFG

El repositorio contiene:

- Notebooks de Jupyter organizados por fases del experimento (preprocesamiento, entrenamiento, evaluación).
- Implementaciones completas de los modelos de detección de anomalías (One-ClassSVM (OCSVM)) y redes neuronales (Artificial Neural Network (ANN)).
- Scripts auxiliares para el análisis estadístico, visualización de resultados y comparación de modelos.
- Documentación técnica del proceso, incluyendo configuración de entornos y requisitos.
- Gráficos generados automáticamente para análisis exploratorio y resultados finales.

7.2. Modelos desarrollados

Durante el proyecto se desarrollaron y evaluaron dos tipos principales de modelos:

- **Modelos supervisados:** redes neuronales artificiales (ANN), utilizando la librería Scikit-Learn, adaptadas del estudio original [6].
- **Modelos no supervisados:** algoritmos de detección de anomalías *One-Class SVM* (OCSVM), implementados con Scikit-Learn y Pandas.

Los modelos fueron evaluados mediante técnicas de validación cruzada, grid search para optimización de hiperparámetros, y análisis visual de fronteras de decisión y distribución de puntuaciones de anomalía. Las métricas principales consideradas fueron el porcentaje de outliers detectados, estabilidad entre conjuntos de entrenamiento y test, y coherencia con predicciones del modelo ANN de referencia.

7.3. Uso de herramientas de inteligencia artificial

Durante el desarrollo del trabajo se hizo uso responsable y transparente de herramientas de inteligencia artificial generativa, con fines exclusivamente asistenciales y nunca como sustitución del trabajo técnico ni del análisis crítico del autor. Las herramientas utilizadas fueron:

- **ChatGPT** [16] (OpenAI): apoyo en tareas de redacción técnica, estructuración de secciones y revisión sintáctica de código.
- **Claude** [17] (Anthropic): reformulación textual y verificación de coherencia técnica en algunos apartados.
- **GitHub Copilot** [18] (Microsoft): sugerencias automáticas de código en el entorno de desarrollo VS Code.

Todas las decisiones metodológicas, implementación de modelos y análisis de resultados son responsabilidad íntegra del autor. Estas herramientas se utilizaron como asistentes de apoyo, siguiendo criterios de rigor y ética académica.

Bibliografía

- [1] Planck Collaboration, “Planck 2013 results. i. overview of products and scientific results,” *Astronomy & Astrophysics*, vol. 571, p. A1, 2013.
- [2] G. Bertone and D. Hooper, “History of dark matter,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 90, no. 4, p. 045002, 2018.
- [3] M. Cirelli, G. Corcella, A. Hektor, G. Hütsi, M. Kadastik, P. Panci, *et al.*, “Pppc 4 dm id: A poor particle physicist cookbook for dark matter indirect detection,” *Journal of Cosmology and Astroparticle Physics*, vol. 2011, no. 03, p. 051, 2011.
- [4] S. Abdollahi, F. Acero, M. Ackermann, M. Ajello, W. B. Atwood, L. Baldini, *et al.*, “Fermi large area telescope fourth source catalog,” *The Astrophysical Journal Supplement Series*, vol. 247, no. 1, p. 33, 2020.
- [5] P. M. Saz Parkinson, H. Xu, P. L. H. Yu, D. Salvetti, M. Marelli, and A. D. Falcone, “Classification and ranking of fermi lat gamma-ray sources from the 3fgl catalog using machine learning techniques,” *The Astrophysical Journal*, vol. 820, no. 1, p. 8, 2017.
- [6] V. Gammaldi, B. Zaldívar, M. A. Sánchez-Conde, and J. Coronado-Blázquez, “A search for dark matter among fermi-lat unidentified sources with systematic features in machine learning,” *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, vol. 521, no. 2, pp. 2751–2767, 2023.
- [7] B. Schölkopf, J. C. Platt, J. Shawe-Taylor, A. J. Smola, and R. C. Williamson, “Estimating the support of a high-dimensional distribution,” *Neural Computation*, vol. 13, no. 7, pp. 1443–1471, 2001.
- [8] A. L. Samuel, “Some studies in machine learning using the game of checkers,” *IBM Journal of Research and Development*, vol. 3, no. 3, pp. 210–229, 1959.
- [9] O. Çelik and S. S. Altunaydin, “A research on machine learning methods and its applications.” Unpublished manuscript, 2018.
- [10] G. Carleo, I. Cirac, K. Cranmer, L. Daudet, M. Schuld, N. Tishby, L. Vogt-Maranto, and L. Zdeborová, “Machine learning and the physical sciences,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 91, no. 4, p. 045002, 2019.

- [11] J. Bobadilla, *Machine learning y deep learning usando Python, Scikit y Keras.* Ediciones Paraninfo, 2021.
- [12] V. Chandola, A. Banerjee, and V. Kumar, “Anomaly detection: A survey,” *ACM Computing Surveys (CSUR)*, vol. 41, no. 3, pp. 1–58, 2009.
- [13] A. Bou Nassif, M. Azzeh, and L. F. Capretz, “Anomaly detection techniques in data science: A review,” *ACM Computing Surveys (CSUR)*, vol. 54, no. 2, pp. 1–38, 2022.
- [14] A. Zimek, E. Schubert, and H.-P. Kriegel, “A survey on unsupervised outlier detection in high-dimensional numerical data,” *Statistical Analysis and Data Mining: The ASA Data Science Journal*, vol. 5, no. 5, pp. 363–387, 2012.
- [15] N. Mirabal, D. Nieto, and S. Pardo, “The exotic fraction among unassociated fermi sources,” *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, vol. 424, no. 1, pp. 64–68, 2012.
- [16] OpenAI, “Chatgpt: Language models for dialogue.” <https://chat.openai.com>, 2023. Accedido en mayo de 2025.
- [17] Anthropic, “Claude: An ai assistant by anthropic.” <https://claude.ai>, 2024. Accedido en mayo de 2025.
- [18] GitHub, “Github copilot: Your ai pair programmer.” <https://copilot.github.com>, 2023. Accedido en mayo de 2025.