

## 1. PCA (Principal Component Analysis)

Modelo: Busca una proyección lineal ortogonal  $z = W^T x$

Problema de optimización: Encontrar la matriz de proyección  $W$  que maximiza la varianza de los datos proyectados

$\text{Var}(z) = W^T S W$  donde  $S$  es la matriz de covarianza con  $W^T W = I$ .

Usando un multiplicador de Lagrange  $\lambda$ :

$$\mathcal{L}(W, \lambda) = W^T S W - \lambda (W^T W - I)$$

Tomando la derivada con respecto a  $w$  e igualando a 0

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w} = 2Sw - 2\lambda w = 0$$

$$Sw = \lambda w$$

$$\text{Var}(z) = W^T S W = w^T \lambda w = \lambda w^T w = \lambda$$

## 2. UMAP (Uniform Manifold Approximation and Projection)

Modelo: Método no lineal que busca preservar la estructura topológica de los datos.

Problema de optimización: Minimizar la entropía cruzada entre las similitudes en el espacio de alta dimensión  $(p_{ij})$  y la del espacio de baja dimensión  $(q_{ij})$

$$\text{Min } CE(P, Q) = \sum_{i,j} \left[ p_{ij} \log \left( \frac{p_{ij}}{q_{ij}} \right) + (1 - p_{ij}) \log \left( \frac{1 - p_{ij}}{1 - q_{ij}} \right) \right]$$

Usa SGD (Descenso de Gradiente Estocástico) para encontrar las coordenadas de los puntos en el espacio de baja dimensión que minimizan esta divergencia.

## Naive Bayes (Gaussian NB).

Modelo: Modelo generativo basado en el teorema de Bayes con la suposición "ingenua" de I.I.D, independencia condicional de las características dada la clase.

$$p(y=k|x) \propto p(y=k) \prod_{i=1}^p p(x_i|y=k)$$

los parámetros a estimar son la media  $\mu_{kc}$  y la varianza  $\sigma_{kc}^2$  para cada característica  $k$ , clase  $c$ . La media y la varianza muestral calculadas a partir de las muestras de entrenamiento que pertenecen a la clase  $c$ .

## SGD Classifier.

Modelo: Método de optimización para modelos lineales como Regresión logística o SVC lineal.

Problema de Optimización: Minimizar una función de pérdida  $L(w)$  de forma iterativa. En cada paso, actualizar los pesos  $w$  usando el gradiente de una única muestra o mini-lote.

$$w_{t+1} = w_t - \eta \nabla L(w_t; x_n; y_n)$$

Para un modelo de regresión con pérdida de error cuadrático

$$L = \frac{1}{2} (y_n - w^T x_n)^2$$

el gradiente es:

$$\nabla L = (y_n - w^T x_n) x_n$$

la regla de actualización es:

$$w_{t+1} = w_t + \eta (y_n - w_t^T x_n) x_n.$$

## Regresión Logística

Modelo: En un modelo discriminativo que modela la probabilidad a posteriori de la clase  $k$  usando softmax.

$$p(y = k | x, w) = \frac{\exp(w_k^T x)}{\sum_{j=1}^K \exp(w_j^T x)}$$

donde  $w$  es la matriz de pesos.

Problema de optimización: Minimizar la entropía cruzada negativa.

$$L(w) = - \sum_{n=1}^N \sum_{k=1}^K t_{nk} \ln(y_{nk})$$

donde  $y_{nk} = p(y = k | x_n, w)$ .

Se busca el gradiente de  $L$  con respecto a los pesos de una clase  $j$ ,  $w_j$ . El gradiente de softmax es:

$$\frac{\partial y_{nk}}{\partial w_j} = y_{nk} (\delta_{kj} - y_{nj}) x_n.$$

Sustituyendo y simplificando la derivada tenemos:

$$\frac{\partial L}{\partial w_j} = \sum_{n=1}^N (y_{nj} - t_{nj}) x_n$$

Aplicando Descenso de Gradiente:

$$w_j^{(new)} = w_j^{(old)} - \eta \frac{\partial L}{\partial w_j}$$



## LDA (Linear Discriminant Analysis).

Modelo: Es un modelo generativo. Asume que la densidad de probabilidad de cada clase  $k$ ,  $p(x|y=k)$  es Gaussiana. todas las clases comparten la misma matriz de covarianza  $\Sigma$  pero tiene diferentes medias  $\mu_k$ .

$$p(x|y=k) = \mathcal{N}(x|\mu_k, \Sigma)$$

Problema de optimización: Encontrar la proyección  $y = w^T x$  que maximiza el criterio de Fisher:

$$J(w) = \frac{\text{Varianza inter-clase}}{\text{Varianza intra-clase}} = \frac{w^T S_B w}{w^T S_W w}$$

derivando  $J(w)$  con respecto a  $w$  e igualando a 0

$$S_B w = J(w) S_W w$$

Reescribiendo como  $(S_W^{-1} S_B) w = J(w) w$

## K Neighbors Classifier (KNN).

Modelo: KNN es un modelo no paramétrico y basado en instancias (o "lazy learning")

Problema de optimización: Para una nueva muestra  $x_{\text{new}}$  se calcula la distancia entre  $x_{\text{new}}$  y cada una de las muestras  $x_n$ .

Se identifican los  $k$  muestras cuya distancias son las más pequeñas. Se calcula la moda y se etiquetan los vecinos.

## SVC (Support Vector Classifier).

Modelo: Es un hiperplano que actúa como límite de decisión. Este se define por  $w^T \phi(x) + b = 0$ , donde  $w$  es el vector de pesos,  $b$  el sesgo y  $\phi(x)$  es una función que mapea los datos de entrada a un espacio de mayor dimensión.

Problema de optimización: Encontrar el hiperplano que maximiza el margen y minimiza el error de clasificación ponderado por un hiperparámetro de regularización  $C$ .

$$\min_{w, b, \xi} \frac{1}{2} \|w\|^2 + C \sum_{n=1}^N \xi_n$$

$$\text{Sujeto a } y_n (w^T \phi(x_n) + b) \geq 1 - \xi_n,$$

$$\text{y } \xi_n \geq 0, \forall n.$$

## Random Forest Classifier

Modelo: Es un modelo de ensemble que consiste en una colección de múltiples árboles de decisión.

Problema de optimización: Es un proceso local y recursivo aplicado a cada árbol que resuelve en cada nodo:

Encontrar la característica  $j$  y el umbral  $t$  que producen la división que maximiza la pureza de los nodos hijos.

Esto es la maximización de la ganancia de información o la minimización de la impureza:

$$Gini(S) = 1 - \sum_{k=1}^K p_k^2$$

## Gaussian Process Classifier.

Modelo: Es un modelo Bayesiano no paramétrico. Se especifica mediante la función de media  $m(x)$  y una función de covarianza o kernel  $k(x, x')$

$$f(x) \sim GP(m(x), k(x, x'))$$

donde:

$$p(y = 1 | x) = \sigma(f(x)).$$

Problema de optimización: Calcular la distribución predictiva posterior. Encontrar una aproximación tratable a la distribución posterior  $p(f | X, y)$ :

$$p(f | X, y) = \frac{p(y | f) p(f | X)}{p(y | X)}.$$

## Clasificadores basados en deep learning.

Modelo: Composición de múltiples capas de transformaciones no lineales:  $a_l = g(w_l a_{l-1} + b_l)$

Problema de optimización: Minimizar la función de pérdida (típicamente entropía cruzada) sobre un gran número de parámetros ( $w_l, b_l$ ).

Se calcula a través de Backpropagation:

$$\frac{\partial L}{\partial w_{ij}^{(l)}} = \frac{\partial L}{\partial a_j^{(l)}} \frac{\partial a_j^{(l)}}{\partial z_j^{(l)}} \frac{\partial z_j^{(l)}}{\partial w_{ij}^{(l)}} = \delta_j^{(l)} a_i^{(l-1)}$$

donde  $\delta_j^{(l)}$  es el error de la neurona  $j$  de la capa  $l$ , que se propaga de la capa de salida. Se realiza con Descenso de gradiente estocástico.