



**UTEC** Posgrado



**UTEC** Posgrado



# REDUCCIÓN DE DIMENSIONALIDAD PCA, t-SNE Y UMAP

## ¿Qué aprenderemos hoy?

Comprender y aplicar técnicas de reducción de dimensionalidad (**PCA**, **t-SNE** y **UMAP**) para transformar datos de alta dimensión en representaciones visualizables, seleccionando la técnica más apropiada según las características del dataset y los objetivos del análisis.

**Enfoque práctico:** De la teoría a la aplicación en casos reales

# Motivación

El problema de alta dimensionalidad Por qué necesitamos reducir dimensiones



## El problema: Demasiadas dimensiones

**Situación típica:** Tenemos datos con muchas variables (features)

- ▶ Imagen  $100 \times 100$  pixels = 10,000 dimensiones



## El problema: Demasiadas dimensiones

**Situación típica:** Tenemos datos con muchas variables (features)

- ▶ Imagen  $100 \times 100$  pixels = **10,000 dimensiones**
- ▶ Dataset de ventas con 50 variables = **50 dimensiones**



## El problema: Demasiadas dimensiones

**Situación típica:** Tenemos datos con muchas variables (features)

- ▶ Imagen  $100 \times 100$  pixels = **10,000 dimensiones**
- ▶ Dataset de ventas con 50 variables = **50 dimensiones**
- ▶ Análisis genómico = **miles de dimensiones**



## El problema: Demasiadas dimensiones

**Situación típica:** Tenemos datos con muchas variables (features)

- ▶ Imagen  $100 \times 100$  pixels = **10,000 dimensiones**
- ▶ Dataset de ventas con 50 variables = **50 dimensiones**
- ▶ Análisis genómico = **miles de dimensiones**

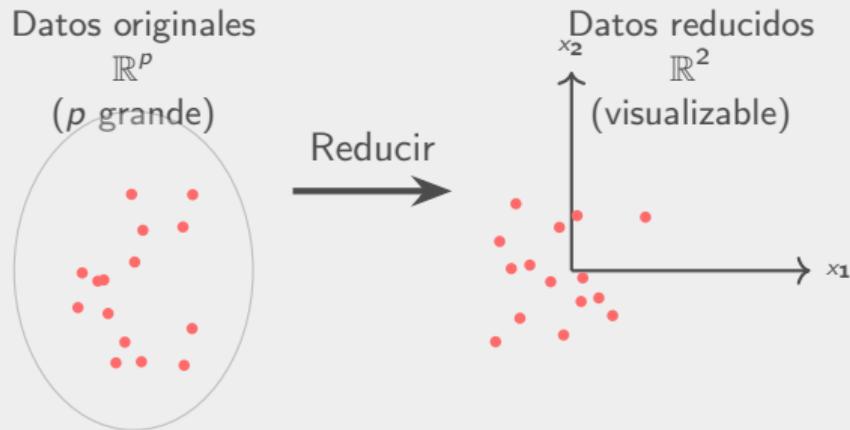
**Problema:** No podemos visualizar ni entender datos en alta dimensión

- ▶ Cerebro humano: máximo 3 dimensiones
- ▶ Computadoras: lentes con alta dimensionalidad
- ▶ Patrones ocultos en la complejidad



# ¿Qué es la reducción de dimensionalidad?

Idea central: Transformar datos de alta dimensión ( $p$  grande) a baja dimensión (2-3D) preservando información importante.



**Objetivo:** Perder la menor cantidad de información posible

## Las tres técnicas principales

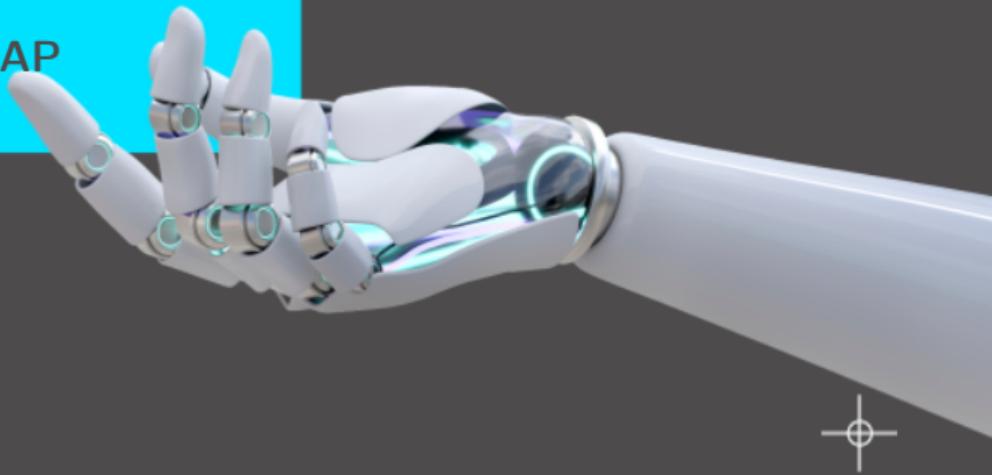
Técnica	Tipo	Velocidad	Mejor para
PCA	Lineal	Muy rápida	Estructura global
t-SNE	No lineal	Lenta	Visualizar clusters
UMAP	No lineal	Rápida	Balance global/local

Cada una tiene **ventajas y desventajas** según el caso de uso.



# Desarrollo

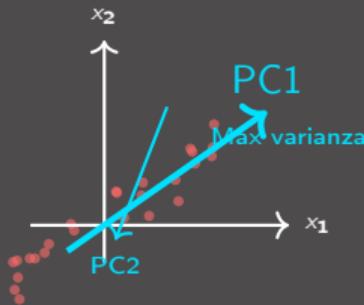
Las tres técnicas PCA, t-SNE y UMAP



# 1. PCA: Principal Component Analysis

**Idea simple:** Encuentra las direcciones de máxima variación

Analogía: Fotografiar un edificio

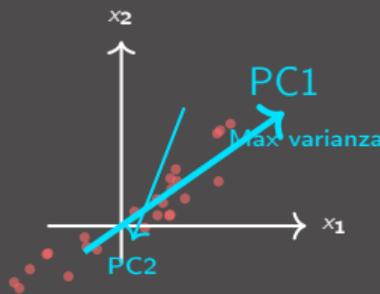


# 1. PCA: Principal Component Analysis

**Idea simple:** Encuentra las direcciones de máxima variación

**Analogía:** Fotografiar un edificio

- ▶ Hay infinitos ángulos posibles

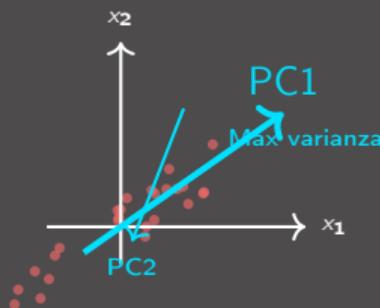


# 1. PCA: Principal Component Analysis

**Idea simple:** Encuentra las direcciones de máxima variación

**Analogía:** Fotografiar un edificio

- ▶ Hay infinitos ángulos posibles
- ▶ Algunos capturan más información

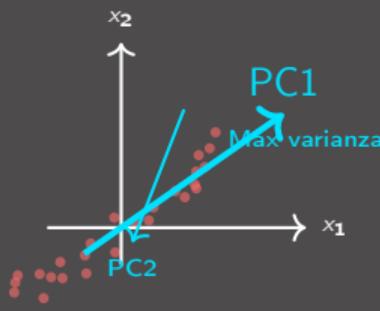


# 1. PCA: Principal Component Analysis

**Idea simple:** Encuentra las direcciones de máxima variación

**Analogía:** Fotografiar un edificio

- ▶ Hay infinitos ángulos posibles
- ▶ Algunos capturan más información
- ▶ PCA encuentra el **mejor** ángulo

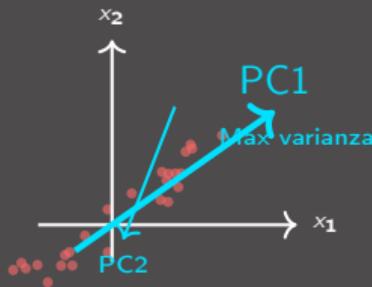


# 1. PCA: Principal Component Analysis

**Idea simple:** Encuentra las direcciones de máxima variación

**Analogía:** Fotografiar un edificio

- ▶ Hay infinitos ángulos posibles
- ▶ Algunos capturan más información
- ▶ PCA encuentra el **mejor** ángulo
- ▶ Siempre usa proyecciones lineales



Proceso paso a paso:

1. **Centrar los datos:** restar la media a cada variable



Proceso paso a paso:

1. **Centrar los datos:** restar la media a cada variable
2. **Calcular covarianza:** qué variables están correlacionadas



Proceso paso a paso:

1. **Centrar los datos:** restar la media a cada variable
2. **Calcular covarianza:** qué variables están correlacionadas
3. **Encontrar direcciones principales:** autovectores de la matriz de covarianza



Proceso paso a paso:

1. **Centrar los datos:** restar la media a cada variable
2. **Calcular covarianza:** qué variables están correlacionadas
3. **Encontrar direcciones principales:** autovectores de la matriz de covarianza
4. **Proyectar:** transformar datos a las nuevas direcciones



Proceso paso a paso:

1. **Centrar los datos:** restar la media a cada variable
2. **Calcular covarianza:** qué variables están correlacionadas
3. **Encontrar direcciones principales:** autovectores de la matriz de covarianza
4. **Proyectar:** transformar datos a las nuevas direcciones
5. **Retener componentes:** quedarse con los primeros 2-3 que capturan más varianza



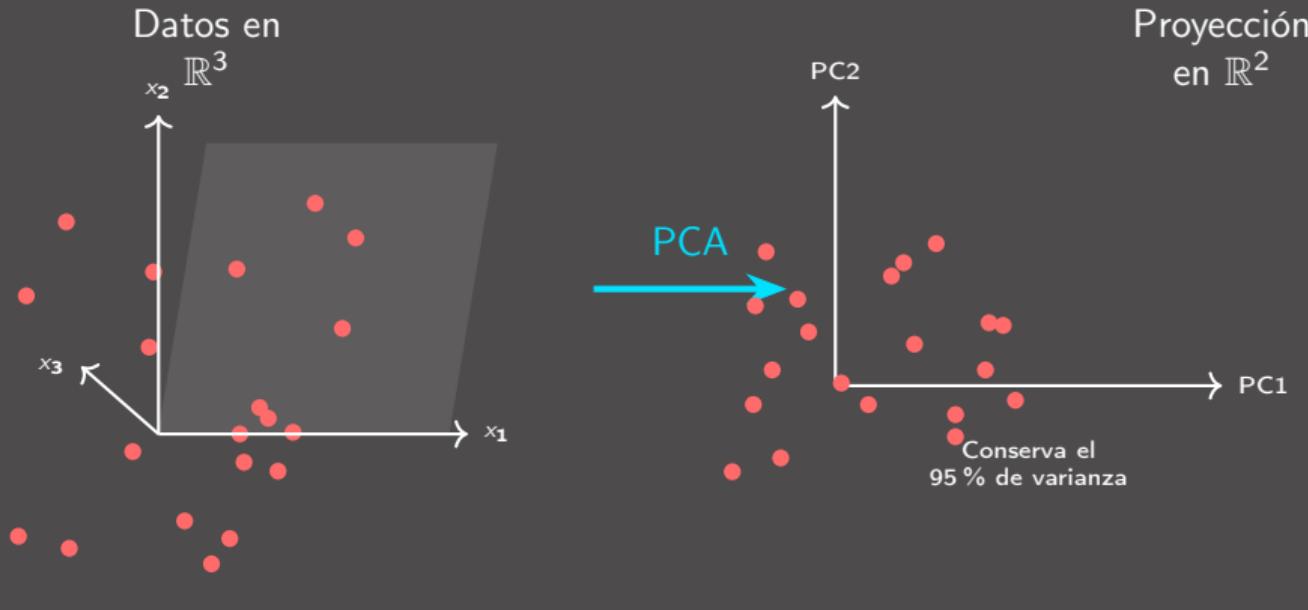
Proceso paso a paso:

1. **Centrar los datos:** restar la media a cada variable
2. **Calcular covarianza:** qué variables están correlacionadas
3. **Encontrar direcciones principales:** autovectores de la matriz de covarianza
4. **Proyectar:** transformar datos a las nuevas direcciones
5. **Retener componentes:** quedarse con los primeros 2-3 que capturan más varianza

**Característica clave:** Es determinista (siempre da el mismo resultado)



# PCA: Visión geométrica



# ¿Cuándo usar PCA?

Casos ideales:

- ▶ **Datos linealmente correlacionados**
  - ▶ Ejemplo: indicadores financieros (precio, volumen, volatilidad)



# ¿Cuándo usar PCA?

## Casos ideales:

- ▶ **Datos linealmente correlacionados**
  - ▶ Ejemplo: indicadores financieros (precio, volumen, volatilidad)
- ▶ **Necesitas velocidad**
  - ▶ Millones de puntos, cientos de variables



# ¿Cuándo usar PCA?

## Casos ideales:

- ▶ **Datos linealmente correlacionados**
  - ▶ Ejemplo: indicadores financieros (precio, volumen, volatilidad)
- ▶ **Necesitas velocidad**
  - ▶ Millones de puntos, cientos de variables
- ▶ **Quieres interpretabilidad**
  - ▶ Cada componente tiene significado: "factor de crecimiento", "factor de riesgo"



# ¿Cuándo usar PCA?

## Casos ideales:

- ▶ **Datos linealmente correlacionados**
  - ▶ Ejemplo: indicadores financieros (precio, volumen, volatilidad)
- ▶ **Necesitas velocidad**
  - ▶ Millones de puntos, cientos de variables
- ▶ **Quieres interpretabilidad**
  - ▶ Cada componente tiene significado: "factor de crecimiento", "factor de riesgo"
- ▶ **Necesitas reconstruir datos**
  - ▶ Compresión de imágenes, eliminación de ruido



# ¿Cuándo usar PCA?

## Casos ideales:

- ▶ **Datos linealmente correlacionados**
  - ▶ Ejemplo: indicadores financieros (precio, volumen, volatilidad)
- ▶ **Necesitas velocidad**
  - ▶ Millones de puntos, cientos de variables
- ▶ **Quieres interpretabilidad**
  - ▶ Cada componente tiene significado: "factor de crecimiento", "factor de riesgo"
- ▶ **Necesitas reconstruir datos**
  - ▶ Compresión de imágenes, eliminación de ruido

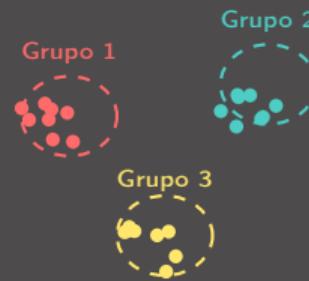
**Limitación:** No captura bien relaciones **no** lineales



## 2. t-SNE: t-Distributed Stochastic Neighbor Embedding

**Idea simple:** Agrupa puntos similares y separa puntos diferentes

Analogía: Organizar tu escritorio



## 2. t-SNE: t-Distributed Stochastic Neighbor Embedding

**Idea simple:** Agrupa puntos similares y separa puntos diferentes

**Analogía:** Organizar tu escritorio

- ▶ Tienes papeles dispersos



## 2. t-SNE: t-Distributed Stochastic Neighbor Embedding

**Idea simple:** Agrupa puntos similares y separa puntos diferentes

**Analogía:** Organizar tu escritorio

- ▶ Tienes papeles dispersos
- ▶ Agrupas por tema: facturas juntas, recibos juntos



Clusters bien separados



## 2. t-SNE: t-Distributed Stochastic Neighbor Embedding

**Idea simple:** Agrupa puntos similares y separa puntos diferentes

**Analogía:** Organizar tu escritorio

- ▶ Tienes papeles dispersos
- ▶ Agrupas por tema: facturas juntas, recibos juntos
- ▶ Cada grupo **bien separado**



## 2. t-SNE: t-Distributed Stochastic Neighbor Embedding

**Idea simple:** Agrupa puntos similares y separa puntos diferentes

**Analogía:** Organizar tu escritorio

- ▶ Tienes papeles dispersos
- ▶ Agrupas por tema: facturas juntas, recibos juntos
- ▶ Cada grupo **bien separado**
- ▶ No importa **dónde** quede cada grupo



## 2. t-SNE: t-Distributed Stochastic Neighbor Embedding

**Idea simple:** Agrupa puntos similares y separa puntos diferentes

**Analogía:** Organizar tu escritorio

- ▶ Tienes papeles dispersos
  - ▶ Agrupas por tema: facturas juntas, recibos juntos
  - ▶ Cada grupo **bien separado**
  - ▶ No importa **dónde** quede cada grupo
- ▶ Preserva **vecindad local**, no distancias globales



# Cómo funciona t-SNE

Proceso (simplificado):

## 1. Medir similitudes en alta dimensión

- ▶ Para cada punto: ¿quiénes son sus vecinos cercanos?



Proceso (simplificado):

- 1. Medir similitudes en alta dimensión**
  - ▶ Para cada punto: ¿quiénes son sus vecinos cercanos?
- 2. Inicializar aleatoriamente en 2D**
  - ▶ Puntos empiezan en posiciones al azar



Proceso (simplificado):

- 1. Medir similitudes en alta dimensión**
  - ▶ Para cada punto: ¿quiénes son sus vecinos cercanos?
- 2. Inicializar aleatoriamente en 2D**
  - ▶ Puntos empiezan en posiciones al azar
- 3. Mover puntos iterativamente**
  - ▶ Acercar vecinos que estaban cerca en alta dimensión
  - ▶ Alejar puntos que estaban lejos



Proceso (simplificado):

- 1. Medir similitudes en alta dimensión**
  - ▶ Para cada punto: ¿quiénes son sus vecinos cercanos?
- 2. Inicializar aleatoriamente en 2D**
  - ▶ Puntos empiezan en posiciones al azar
- 3. Mover puntos iterativamente**
  - ▶ Acercar vecinos que estaban cerca en alta dimensión
  - ▶ Alejar puntos que estaban lejos
- 4. Iterar hasta convergencia**
  - ▶ Puede tomar cientos o miles de iteraciones



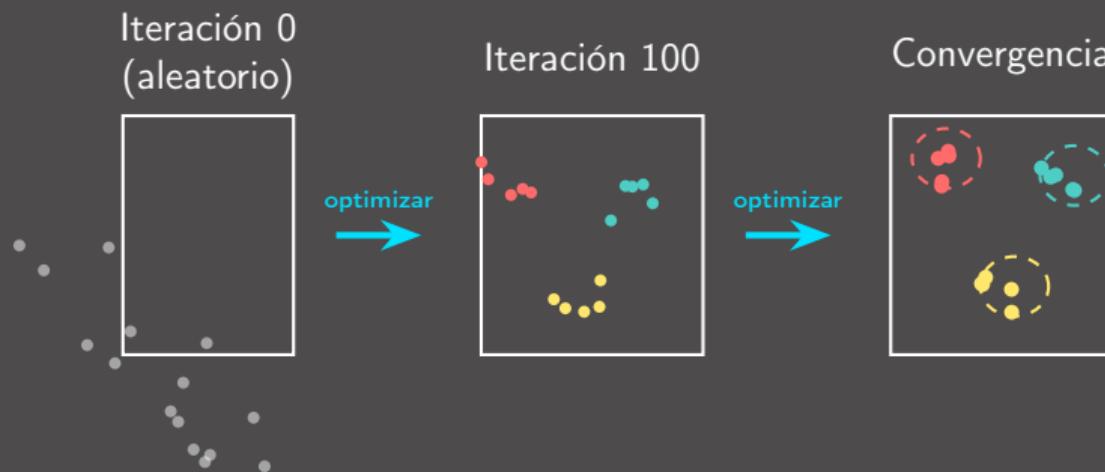
Proceso (simplificado):

- 1. Medir similitudes en alta dimensión**
  - ▶ Para cada punto: ¿quiénes son sus vecinos cercanos?
- 2. Inicializar aleatoriamente en 2D**
  - ▶ Puntos empiezan en posiciones al azar
- 3. Mover puntos iterativamente**
  - ▶ Acercar vecinos que estaban cerca en alta dimensión
  - ▶ Alejar puntos que estaban lejos
- 4. Iterar hasta convergencia**
  - ▶ Puede tomar cientos o miles de iteraciones

**Característica clave:** Es estocástico (resultados pueden variar)



# t-SNE: Proceso iterativo



# ¿Cuándo usar t-SNE?

Casos ideales:

- ▶ **Visualización exploratoria de clusters**
  - ▶ Ejemplo: ver grupos de clientes, tipos de productos



# ¿Cuándo usar t-SNE?

## Casos ideales:

- ▶ **Visualización exploratoria de clusters**
  - ▶ Ejemplo: ver grupos de clientes, tipos de productos
- ▶ **Datasets pequeños/medianos (< 10,000 puntos)**
  - ▶ Con más datos se vuelve muy lento



# ¿Cuándo usar t-SNE?

## Casos ideales:

- ▶ **Visualización exploratoria de clusters**
  - ▶ Ejemplo: ver grupos de clientes, tipos de productos
- ▶ **Datasets pequeños/medianos (< 10,000 puntos)**
  - ▶ Con más datos se vuelve muy lento
- ▶ **Estructuras no lineales complejas**
  - ▶ Datos de imágenes, texto, biología



# ¿Cuándo usar t-SNE?

## Casos ideales:

- ▶ **Visualización exploratoria de clusters**
  - ▶ Ejemplo: ver grupos de clientes, tipos de productos
- ▶ **Datasets pequeños/medianos (< 10,000 puntos)**
  - ▶ Con más datos se vuelve muy lento
- ▶ **Estructuras no lineales complejas**
  - ▶ Datos de imágenes, texto, biología
- ▶ **Solo necesitas visualizar (no usar los datos después)**
  - ▶ No se puede aplicar a nuevos datos



# ¿Cuándo usar t-SNE?

## Casos ideales:

- ▶ **Visualización exploratoria de clusters**
  - ▶ Ejemplo: ver grupos de clientes, tipos de productos
- ▶ **Datasets pequeños/medianos (< 10,000 puntos)**
  - ▶ Con más datos se vuelve muy lento
- ▶ **Estructuras no lineales complejas**
  - ▶ Datos de imágenes, texto, biología
- ▶ **Solo necesitas visualizar (no usar los datos después)**
  - ▶ No se puede aplicar a nuevos datos

**Limitaciones:** Lento, no preserva distancias globales, no determinista



## 3. UMAP: Uniform Manifold Approximation & Projection

**Idea simple:** Preserva estructura local Y global simultáneamente

Analogía: Mapa del metro

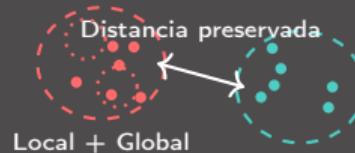


## 3. UMAP: Uniform Manifold Approximation & Projection

**Idea simple:** Preserva estructura local Y global simultáneamente

Analogía: Mapa del metro

- Simplifica la ciudad real



## 3. UMAP: Uniform Manifold Approximation & Projection

**Idea simple:** Preserva estructura local Y global simultáneamente

Analogía: Mapa del metro

- ▶ Simplifica la ciudad real
- ▶ Mantiene **estaciones cercanas** juntas (local)



## 3. UMAP: Uniform Manifold Approximation & Projection

**Idea simple:** Preserva estructura local Y global simultáneamente

Analogía: Mapa del metro

- ▶ Simplifica la ciudad real
- ▶ Mantiene **estaciones cercanas** juntas (local)
- ▶ Muestra **qué líneas conectan** (global)



## 3. UMAP: Uniform Manifold Approximation & Projection

**Idea simple:** Preserva estructura local Y global simultáneamente

Analogía: Mapa del metro

- ▶ Simplifica la ciudad real
- ▶ Mantiene **estaciones cercanas** juntas (local)
- ▶ Muestra **qué líneas conectan** (global)
- ▶ Es útil aunque no sea geográficamente exacto



## 3. UMAP: Uniform Manifold Approximation & Projection

**Idea simple:** Preserva estructura local Y global simultáneamente

Analogía: Mapa del metro

- ▶ Simplifica la ciudad real
  - ▶ Mantiene **estaciones cercanas** juntas (local)
  - ▶ Muestra **qué líneas conectan** (global)
  - ▶ Es útil aunque no sea geográficamente exacto
- 
- ▶ “Lo mejor de ambos mundos”: velocidad de PCA + calidad de t-SNE



# Cómo funciona UMAP

Proceso (simplificado):

1. **Construir grafo de vecindad en alta dimensión**
  - ▶ Conectar cada punto con sus  $k$  vecinos más cercanos



# Cómo funciona UMAP

Proceso (simplificado):

1. **Construir grafo de vecindad en alta dimensión**
  - ▶ Conectar cada punto con sus  $k$  vecinos más cercanos
2. **Asignar pesos a las conexiones**
  - ▶ Vecinos muy cercanos: peso alto
  - ▶ Vecinos lejanos: peso bajo



# Cómo funciona UMAP

Proceso (simplificado):

1. **Construir grafo de vecindad en alta dimensión**
  - ▶ Conectar cada punto con sus  $k$  vecinos más cercanos
2. **Asignar pesos a las conexiones**
  - ▶ Vecinos muy cercanos: peso alto
  - ▶ Vecinos lejanos: peso bajo
3. **Optimizar grafo en 2D**
  - ▶ Recrear estructura de vecindad en baja dimensión
  - ▶ Mantener conexiones fuertes



# Cómo funciona UMAP

Proceso (simplificado):

- 1. Construir grafo de vecindad en alta dimensión**
  - ▶ Conectar cada punto con sus  $k$  vecinos más cercanos
- 2. Asignar pesos a las conexiones**
  - ▶ Vecinos muy cercanos: peso alto
  - ▶ Vecinos lejanos: peso bajo
- 3. Optimizar grafo en 2D**
  - ▶ Recrear estructura de vecindad en baja dimensión
  - ▶ Mantener conexiones fuertes
- 4. Balance automático**
  - ▶ Preserva tanto vecindad local como relaciones globales



# Cómo funciona UMAP

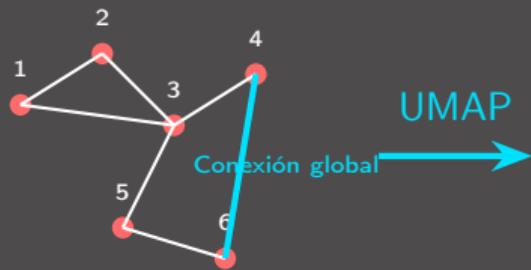
Proceso (simplificado):

1. **Construir grafo de vecindad en alta dimensión**
  - ▶ Conectar cada punto con sus  $k$  vecinos más cercanos
2. **Asignar pesos a las conexiones**
  - ▶ Vecinos muy cercanos: peso alto
  - ▶ Vecinos lejanos: peso bajo
3. **Optimizar grafo en 2D**
  - ▶ Recrear estructura de vecindad en baja dimensión
  - ▶ Mantener conexiones fuertes
4. **Balance automático**
  - ▶ Preserva tanto vecindad local como relaciones globales

**Ventaja:** Más rápido que t-SNE, mejor estructura que PCA

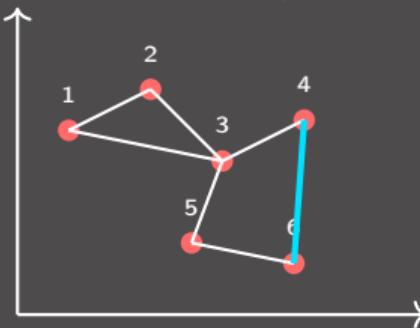
# UMAP: Grafo de vecindad

Alta dimensión  
Grafo de vecindad



UMAP

Baja dimensión  
Estructura preservada



# ¿Cuándo usar UMAP?

Casos ideales:

- ▶ Datasets grandes ( $> 10,000$  puntos)
  - ▶ Escala mejor que t-SNE



# ¿Cuándo usar UMAP?

## Casos ideales:

- ▶ Datasets grandes ( $> 10,000$  puntos)
  - ▶ Escala mejor que t-SNE
- ▶ Necesitas estructura local Y global
  - ▶ Ejemplo: datos genómicos, redes sociales



# ¿Cuándo usar UMAP?

## Casos ideales:

- ▶ **Datasets grandes (> 10,000 puntos)**
  - ▶ Escala mejor que t-SNE
- ▶ **Necesitas estructura local Y global**
  - ▶ Ejemplo: datos genómicos, redes sociales
- ▶ **Quieres aplicar a nuevos datos**
  - ▶ UMAP puede transformar datos no vistos en entrenamiento



# ¿Cuándo usar UMAP?

## Casos ideales:

- ▶ **Datasets grandes (> 10,000 puntos)**
  - ▶ Escala mejor que t-SNE
- ▶ **Necesitas estructura local Y global**
  - ▶ Ejemplo: datos genómicos, redes sociales
- ▶ **Quieres aplicar a nuevos datos**
  - ▶ UMAP puede transformar datos no vistos en entrenamiento
- ▶ **Buscas balance velocidad/calidad**
  - ▶ Más rápido que t-SNE, mejor que PCA para datos no lineales



# ¿Cuándo usar UMAP?

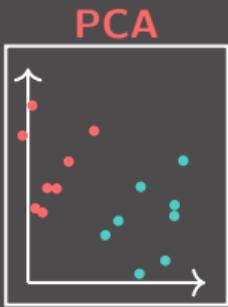
## Casos ideales:

- ▶ **Datasets grandes (> 10,000 puntos)**
  - ▶ Escala mejor que t-SNE
- ▶ **Necesitas estructura local Y global**
  - ▶ Ejemplo: datos genómicos, redes sociales
- ▶ **Quieres aplicar a nuevos datos**
  - ▶ UMAP puede transformar datos no vistos en entrenamiento
- ▶ **Buscas balance velocidad/calidad**
  - ▶ Más rápido que t-SNE, mejor que PCA para datos no lineales

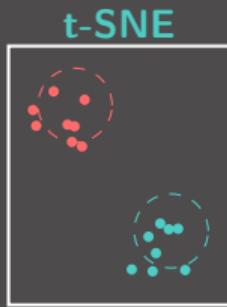
**Ventaja principal:** Versatilidad - funciona bien en muchos casos



# Comparación visual: Mismo dataset



Estructura global  
Clusters mezclados



Clusters separados  
Pierde global



Balance:  
Local + Global



# Comparación detallada

Aspecto	PCA	t-SNE	UMAP
<b>Tipo</b>	Lineal	No lineal	No lineal
<b>Velocidad</b>	Muy rápida	Lenta	Rápida
<b>Preserva local</b>	No	Sí	Sí
<b>Preserva global</b>	Sí	No	Sí
<b>Determinista</b>	Sí	No	No
<b>Nuevos datos</b>	Sí	No	Sí
<b>Interpretable</b>	Sí	No	Parcial
<b>Escalabilidad</b>	Excelente	Pobre	Buena



# Aclaración importante: Aplicación a nuevos datos

¿Qué técnica se asemeja a PCA?

Pregunta clave: ¿Puedo aplicar el modelo a datos nuevos sin reentrenar?

Técnica	Nuevos datos?	Cómo funciona
PCA	SÍ	Aplica componentes aprendidas
t-SNE	NO	Debe reentrenar todo
UMAP	SÍ	Aplica modelo aprendido



# Aclaración importante: Aplicación a nuevos datos

## ¿Qué técnica se asemeja a PCA?

Pregunta clave: ¿Puedo aplicar el modelo a datos nuevos sin reentrenar?

Técnica	Nuevos datos?	Cómo funciona
PCA	SÍ	Aplica componentes aprendidas
t-SNE	NO	Debe reentrenar todo
UMAP	SÍ	Aplica modelo aprendido

**Respuesta:** UMAP se asemeja a **PCA** en este aspecto.

Ambas pueden usar `transform()` para aplicar el modelo a nuevos datos.  
t-SNE requiere re-ejecutar `fit_transform()` con todos los datos.



# Aclaración importante: Aplicación a nuevos datos

## ¿Qué técnica se asemeja a PCA?

Pregunta clave: ¿Puedo aplicar el modelo a datos nuevos sin reentrenar?

Técnica	Nuevos datos?	Cómo funciona
PCA	SÍ	Aplica componentes aprendidas
t-SNE	NO	Debe reentrenar todo
UMAP	SÍ	Aplica modelo aprendido

**Respuesta:** UMAP se asemeja a PCA en este aspecto.

Ambas pueden usar `transform()` para aplicar el modelo a nuevos datos.

t-SNE requiere re-ejecutar `fit_transform()` con todos los datos.

**Implicación práctica:** Para sistemas en producción (ej: streaming de datos), usa PCA o UMAP, no t-SNE.



# Ejemplos de código: Nuevos datos

**PCA** - Puede aplicarse a nuevos datos:

```
pca = PCA(n_components=2)
X_train_pca = pca.fit_transform(X_train)
X_test_pca = pca.transform(X_test) ✓
```

**t-SNE** - NO puede aplicarse a nuevos datos:

```
tsne = TSNE(n_components=2)
X_train_tsne = tsne.fit_transform(X_train)
# X_test_tsne = tsne.transform(X_test) ✗ ERROR
```

**UMAP** - Puede aplicarse a nuevos datos:

```
reducer = umap.UMAP(n_components=2)
X_train_umap = reducer.fit_transform(X_train)
X_test_umap = reducer.transform(X_test) ✓
```

**Conclusión:** UMAP y PCA comparten esta ventaja clave sobre t-SNE

# Estructura Local vs Global: Comparación

¿Qué estructura preserva cada técnica?

Técnica	Local	Global	Aplicaciones ideales
PCA	No	Sí	<ul style="list-style-type: none"><li>• Análisis exploratorio inicial</li><li>• Compresión de datos</li><li>• Identificar tendencias generales</li><li>• Features para ML</li></ul>
t-SNE	Sí	No	<ul style="list-style-type: none"><li>• Descubrir subgrupos ocultos</li><li>• Segmentación de clientes</li><li>• Visualización de embeddings</li><li>• Detección de outliers locales</li></ul>
UMAP	Sí	Sí	<ul style="list-style-type: none"><li>• Estructuras jerárquicas</li><li>• Clasificación de tipos celulares</li><li>• Análisis de redes sociales</li><li>• Datasets con múltiples escalas</li></ul>

## Estructura Local:

- Vecinos cercanos permanecen juntos
- Clusters compactos bien definidos

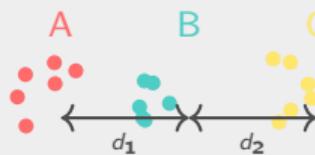
## Estructura Global:

- Distancias relativas entre grupos
- Relaciones jerárquicas



# Visualización: Local vs Global

Datos Originales (Alta Dimensión)    PCA (Global)

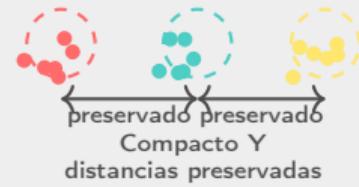


t-SNE (Local)



Distancias globales  
NO preservadas

UMAP (Local + Global)



Compacto Y  
distancias preservadas

# Escenarios: ¿Cuál usar?

Escenario	Técnica recomendada
Datos financieros correlacionados	PCA - Rápido, interpretable
Visualizar segmentación de clientes	t-SNE - Clusters claros
Análisis genómico (millones de células)	UMAP - Escala bien
Compresión de imágenes	PCA/SVD - Reversible
Explorar dataset nuevo (desconocido)	PCA primero - Rápido
Preparar datos para ML	PCA - Nuevos datos
Visualizar embeddings de texto	t-SNE o UMAP
Datos con jerarquía multiveli	UMAP - Local + global



# Caso 1: PCA es superior

Situación: Indicadores económicos de países

Variables:

- ▶ PIB per cápita
- ▶ Inflación
- ▶ Desempleo
- ▶ Deuda pública
- ▶ Crecimiento

Por qué PCA?



# Caso 1: PCA es superior

Situación: Indicadores económicos de países

Variables:

- ▶ PIB per cápita
- ▶ Inflación
- ▶ Desempleo
- ▶ Deuda pública
- ▶ Crecimiento

Por qué PCA?

- ▶ Variables linealmente correlacionadas



# Caso 1: PCA es superior

Situación: Indicadores económicos de países

Variables:

- ▶ PIB per cápita
- ▶ Inflación
- ▶ Desempleo
- ▶ Deuda pública
- ▶ Crecimiento

Por qué PCA?

- ▶ Variables **linealmente correlacionadas**
- ▶ Interpretación: PC1 = "desarrollo", PC2 = "estabilidad"



# Caso 1: PCA es superior

Situación: Indicadores económicos de países

Variables:

- ▶ PIB per cápita
- ▶ Inflación
- ▶ Desempleo
- ▶ Deuda pública
- ▶ Crecimiento

Por qué PCA?

- ▶ Variables linealmente correlacionadas
- ▶ Interpretación: PC1 = "desarrollo", PC2 = "estabilidad"
- ▶ Muy rápido (cientos de países)



## Caso 2: t-SNE es superior

Situación: Clasificación de imágenes de dígitos (0-9)

Datos:

- ▶ 5000 imágenes  $28 \times 28$
- ▶ 784 dimensiones por imagen
- ▶ 10 clases (dígitos)

Por qué t-SNE?



## Caso 2: t-SNE es superior

Situación: Clasificación de imágenes de dígitos (0-9)

Datos:

- ▶ 5000 imágenes  $28 \times 28$
- ▶ 784 dimensiones por imagen
- ▶ 10 clases (dígitos)

Por qué t-SNE?

- ▶ Relaciones altamente no lineales



## Caso 2: t-SNE es superior

Situación: Clasificación de imágenes de dígitos (0-9)

Datos:

- ▶ 5000 imágenes  $28 \times 28$
- ▶ 784 dimensiones por imagen
- ▶ 10 clases (dígitos)

Por qué t-SNE?

- ▶ Relaciones altamente no lineales
- ▶ Queremos **visualizar** grupos claramente



## Caso 2: t-SNE es superior

Situación: Clasificación de imágenes de dígitos (0-9)

Datos:

- ▶ 5000 imágenes  $28 \times 28$
- ▶ 784 dimensiones por imagen
- ▶ 10 clases (dígitos)

Por qué t-SNE?

- ▶ Relaciones altamente no lineales
- ▶ Queremos **visualizar** grupos claramente
- ▶ Dataset tamaño moderado (5k puntos)



## Caso 2: t-SNE es superior

Situación: Clasificación de imágenes de dígitos (0-9)

Datos:

- ▶ 5000 imágenes  $28 \times 28$
- ▶ 784 dimensiones por imagen
- ▶ 10 clases (dígitos)

Por qué t-SNE?

- ▶ Relaciones altamente no lineales
- ▶ Queremos **visualizar** grupos claramente
- ▶ Dataset tamaño moderado (5k puntos)
- ▶ No necesitamos aplicar a nuevas imágenes



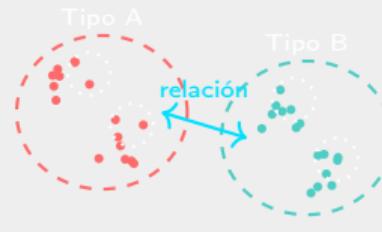
## Caso 3: UMAP es superior

Situación: Secuenciación de ARN de células (single-cell RNA-seq)

Datos:

- ▶ 100,000 células
- ▶ 20,000 genes por célula
- ▶ Jerarquía: tipos → subtipos

Por qué UMAP?



Local: subtipos

Global: tipos



## Caso 3: UMAP es superior

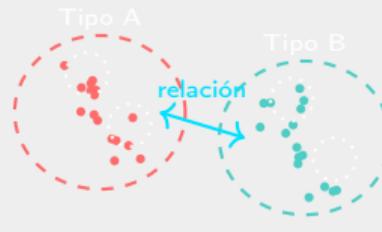
Situación: Secuenciación de ARN de células (single-cell RNA-seq)

Datos:

- ▶ 100,000 células
- ▶ 20,000 genes por célula
- ▶ Jerarquía: tipos → subtipos

Por qué UMAP?

- ▶ Dataset muy grande (100k células)



Local: subtipos

Global: tipos



## Caso 3: UMAP es superior

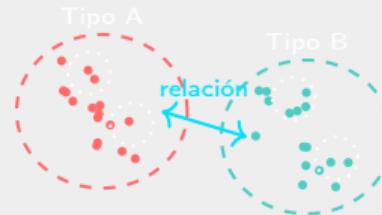
Situación: Secuenciación de ARN de células (single-cell RNA-seq)

Datos:

- ▶ 100,000 células
- ▶ 20,000 genes por célula
- ▶ Jerarquía: tipos → subtipos

Por qué UMAP?

- ▶ Dataset muy grande (100k células)
- ▶ Necesita estructura jerárquica (tipos y subtipos)



## Caso 3: UMAP es superior

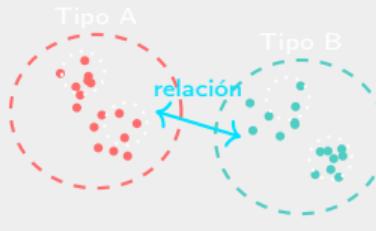
Situación: Secuenciación de ARN de células (single-cell RNA-seq)

Datos:

- ▶ 100,000 células
- ▶ 20,000 genes por célula
- ▶ Jerarquía: tipos → subtipos

Por qué UMAP?

- ▶ Dataset muy grande (100k células)
- ▶ Necesita estructura jerárquica (tipos y subtipos)
- ▶ Preservar tanto local como global



Local: subtipos

Global: tipos



## Caso 3: UMAP es superior

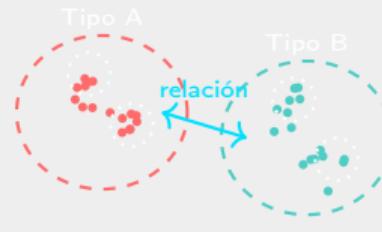
Situación: Secuenciación de ARN de células (single-cell RNA-seq)

Datos:

- ▶ 100,000 células
- ▶ 20,000 genes por célula
- ▶ Jerarquía: tipos → subtipos

Por qué UMAP?

- ▶ Dataset muy grande (100k células)
- ▶ Necesita estructura jerárquica (tipos y subtipos)
- ▶ Preservar tanto local como global
- ▶ t-SNE sería demasiado lento



Local: subtipos

Global: tipos



# Conclusiones

Resumen y recomendaciones Reflexión final



## Resumen: Las tres técnicas

1. **PCA:** Proyección lineal, rápida, interpretable

- Usa cuando: datos lineales, necesitas velocidad o interpretación



## Resumen: Las tres técnicas

1. **PCA:** Proyección lineal, rápida, interpretable
  - ▶ Usa cuando: datos lineales, necesitas velocidad o interpretación
2. **t-SNE:** Preserva vecindad local, visualiza clusters
  - ▶ Usa cuando: quieres ver grupos claramente, datos < 10k



## Resumen: Las tres técnicas

1. **PCA:** Proyección lineal, rápida, interpretable
  - ▶ Usa cuando: datos lineales, necesitas velocidad o interpretación
2. **t-SNE:** Preserva vecindad local, visualiza clusters
  - ▶ Usa cuando: quieres ver grupos claramente, datos < 10k
3. **UMAP:** Balance local/global, rápida y escalable
  - ▶ Usa cuando: datos grandes, necesitas ambas estructuras



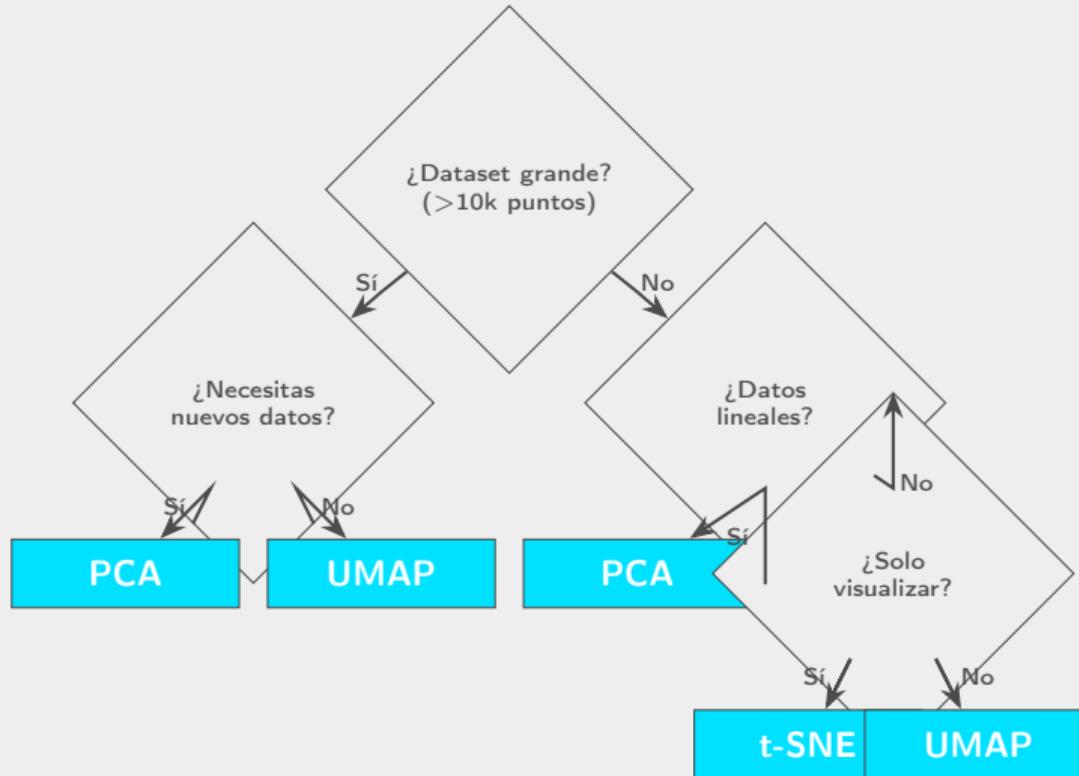
## Resumen: Las tres técnicas

1. **PCA:** Proyección lineal, rápida, interpretable
  - ▶ Usa cuando: datos lineales, necesitas velocidad o interpretación
2. **t-SNE:** Preserva vecindad local, visualiza clusters
  - ▶ Usa cuando: quieres ver grupos claramente, datos < 10k
3. **UMAP:** Balance local/global, rápida y escalable
  - ▶ Usa cuando: datos grandes, necesitas ambas estructuras

### Regla práctica:

- ▶ Empieza con **PCA** (rápido, simple)
- ▶ Si no funciona bien: prueba **t-SNE** o **UMAP**
- ▶ Para producción: **PCA** o **UMAP** (pueden aplicarse a nuevos datos)





## 1. Preprocesamiento es clave

- ▶ Estandarizar variables (media 0, desviación 1)
- ▶ Eliminar outliers extremos



## 1. Preprocesamiento es clave

- ▶ Estandarizar variables (media 0, desviación 1)
- ▶ Eliminar outliers extremos

## 2. PCA como primer paso

- ▶ Si tienes 1000+ dimensiones: PCA a 50D, luego t-SNE/UMAP a 2D
- ▶ Ahorra tiempo y mejora resultados



## 1. Preprocesamiento es clave

- ▶ Estandarizar variables (media 0, desviación 1)
- ▶ Eliminar outliers extremos

## 2. PCA como primer paso

- ▶ Si tienes 1000+ dimensiones: PCA a 50D, luego t-SNE/UMAP a 2D
- ▶ Ahorra tiempo y mejora resultados

## 3. Experimenta con hiperparámetros

- ▶ t-SNE: perplexity (5-50)
- ▶ UMAP: n\_neighbors (5-50), min\_dist (0.0-0.99)



## 1. Preprocesamiento es clave

- ▶ Estandarizar variables (media 0, desviación 1)
- ▶ Eliminar outliers extremos

## 2. PCA como primer paso

- ▶ Si tienes 1000+ dimensiones: PCA a 50D, luego t-SNE/UMAP a 2D
- ▶ Ahorra tiempo y mejora resultados

## 3. Experimenta con hiperparámetros

- ▶ t-SNE: perplexity (5-50)
- ▶ UMAP: n\_neighbors (5-50), min\_dist (0.0-0.99)

## 4. Valida resultados

- ▶ Usa métricas: Silhouette Score, Trustworthiness
- ▶ Compara múltiples técnicas



## 1. Preprocesamiento es clave

- ▶ Estandarizar variables (media 0, desviación 1)
- ▶ Eliminar outliers extremos

## 2. PCA como primer paso

- ▶ Si tienes 1000+ dimensiones: PCA a 50D, luego t-SNE/UMAP a 2D
- ▶ Ahorra tiempo y mejora resultados

## 3. Experimenta con hiperparámetros

- ▶ t-SNE: perplexity (5-50)
- ▶ UMAP: n\_neighbors (5-50), min\_dist (0.0-0.99)

## 4. Valida resultados

- ▶ Usa métricas: Silhouette Score, Trustworthiness
- ▶ Compara múltiples técnicas

## 5. t-SNE/UMAP no son deterministas

- ▶ Ejecuta varias veces con diferentes semillas
- ▶ Verifica que los patrones sean consistentes



# Limitaciones a considerar

Técnica	Limitación principal	Cuándo es problema
PCA	Solo relaciones lineales	Datos con curvas, espirales, formas complejas
t-SNE	No preserva distancias globales	Cuando importa la separación real entre grupos
t-SNE	Muy lento	Datasets > 10,000 puntos
t-SNE	No aplica a nuevos datos	Sistemas en producción
UMAP	Menos interpretable	Cuando necesitas explicar cada dimensión
UMAP	No determinista	Resultados pueden variar entre ejecuciones



# Pregunta de reflexión

## ¿Pregunta para pensar?

Tienes un dataset de 50,000 transacciones bancarias con 100 variables cada una. Quieres:

1. Detectar patrones de fraude (clusters anómalos)
2. Aplicar el modelo a nuevas transacciones en tiempo real
3. Explicar a auditores qué variables son importantes

## ¿Qué técnica(s) usarías y por qué?



## Pregunta de reflexión

### ¿Pregunta para pensar?

Tienes un dataset de 50,000 transacciones bancarias con 100 variables cada una. Quieres:

1. Detectar patrones de fraude (clusters anómalos)
2. Aplicar el modelo a nuevas transacciones en tiempo real
3. Explicar a auditores qué variables son importantes

### ¿Qué técnica(s) usarías y por qué?

Pista: Considera múltiples técnicas en secuencia



# Possible solución

Estrategia híbrida:

## 1. PCA primero ( $100D \rightarrow 20D$ )

- ▶ Identificar variables importantes (interpretabilidad)
- ▶ Reducir ruido y acelerar siguientes pasos
- ▶ Puede aplicarse a nuevas transacciones



Estrategia híbrida:

1. **PCA primero** ( $100D \rightarrow 20D$ )
  - ▶ Identificar variables importantes (interpretabilidad)
  - ▶ Reducir ruido y acelerar siguientes pasos
  - ▶ Puede aplicarse a nuevas transacciones
2. **UMAP para visualización** ( $20D \rightarrow 2D$ )
  - ▶ Detectar clusters de fraude visualmente
  - ▶ Escala bien con 50k transacciones
  - ▶ Puede aplicarse a nuevas transacciones



Estrategia híbrida:

1. **PCA primero** ( $100D \rightarrow 20D$ )

- ▶ Identificar variables importantes (interpretabilidad)
- ▶ Reducir ruido y acelerar siguientes pasos
- ▶ Puede aplicarse a nuevas transacciones

2. **UMAP para visualización** ( $20D \rightarrow 2D$ )

- ▶ Detectar clusters de fraude visualmente
- ▶ Escala bien con 50k transacciones
- ▶ Puede aplicarse a nuevas transacciones

3. **t-SNE opcional** para reportes

- ▶ Solo para visualizar clusters en presentaciones
- ▶ No para el sistema en producción



Estrategia híbrida:

1. **PCA primero** ( $100D \rightarrow 20D$ )
  - ▶ Identificar variables importantes (interpretabilidad)
  - ▶ Reducir ruido y acelerar siguientes pasos
  - ▶ Puede aplicarse a nuevas transacciones
2. **UMAP para visualización** ( $20D \rightarrow 2D$ )
  - ▶ Detectar clusters de fraude visualmente
  - ▶ Escala bien con 50k transacciones
  - ▶ Puede aplicarse a nuevas transacciones
3. **t-SNE opcional** para reportes
  - ▶ Solo para visualizar clusters en presentaciones
  - ▶ No para el sistema en producción

**Lección:** Combinar técnicas suele ser la mejor estrategia

## No existe una técnica perfecta

- ▶ PCA: Tu herramienta de análisis rápido
  - ▶ Simple, rápida, interpretable



## No existe una técnica perfecta

- ▶ PCA: Tu herramienta de análisis rápido
  - ▶ Simple, rápida, interpretable
- ▶ t-SNE: Tu microscopio de clusters
  - ▶ Para ver detalles finos, grupos ocultos



## No existe una técnica perfecta

- ▶ PCA: Tu herramienta de análisis rápido
  - ▶ Simple, rápida, interpretable
- ▶ t-SNE: Tu microscopio de clusters
  - ▶ Para ver detalles finos, grupos ocultos
- ▶ UMAP: Tu navaja suiza
  - ▶ Versátil, rápida, escalable



## No existe una técnica perfecta

- ▶ PCA: Tu herramienta de análisis rápido
  - ▶ Simple, rápida, interpretable
- ▶ t-SNE: Tu microscopio de clusters
  - ▶ Para ver detalles finos, grupos ocultos
- ▶ UMAP: Tu navaja suiza
  - ▶ Versátil, rápida, escalable

**La mejor técnica depende de:**

Tus datos + Tu objetivo + Tus recursos



**UTEC** Posgrado



**UTEC** Posgrado