Análisis de Componentes Principales

Jocelyn Dunstan Escudero

jdunstan@uc.cl

Departamento de Ciencia de la Computación
& Instituto de Matemática Computacional
Pontificia Universidad Católica de Chile

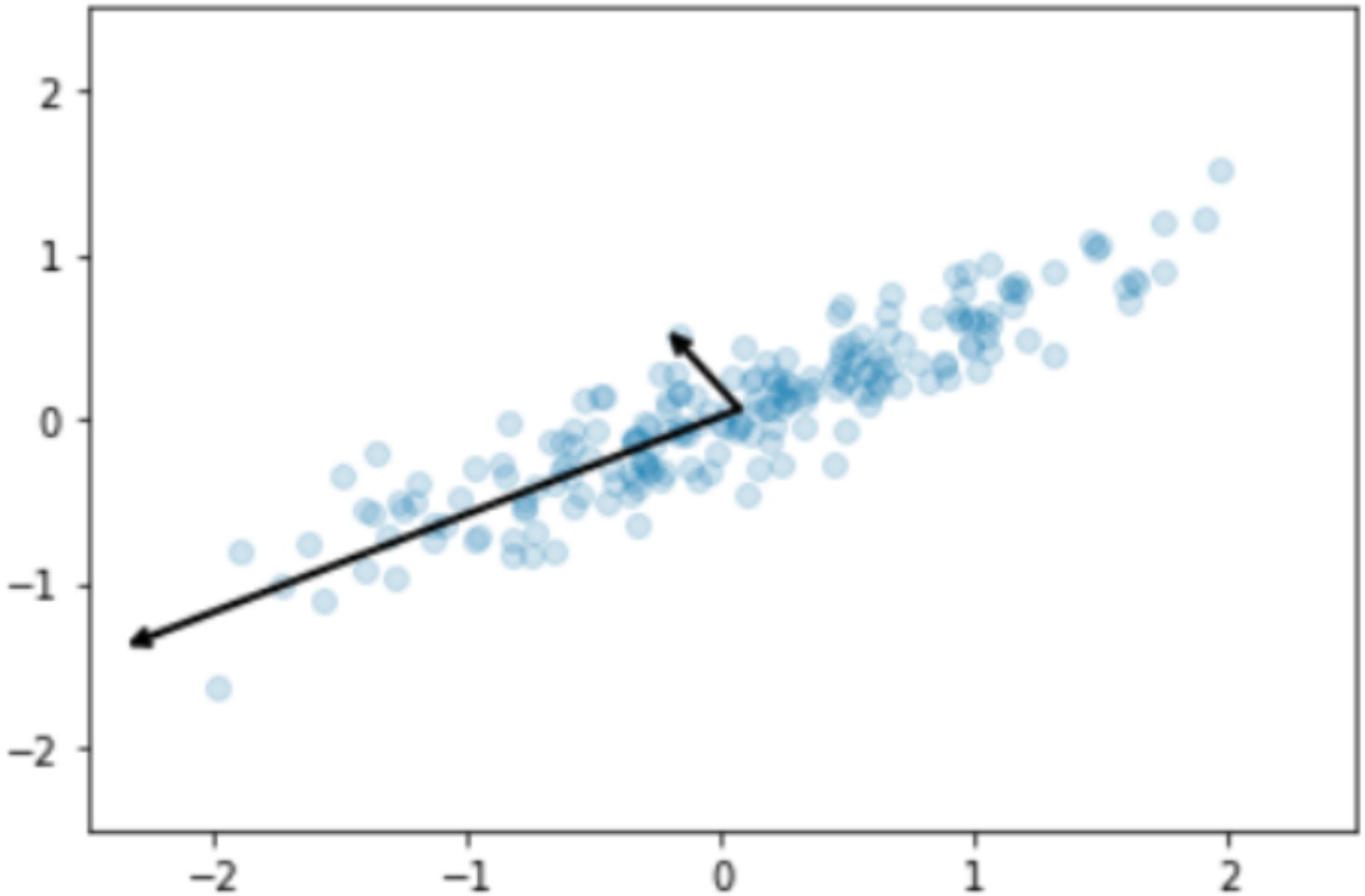
Santiago, Chile

22 de octubre de 2025

Objetivos

- Entender el análisis de componentes principales para describir un conjunto de datos en términos de nuevas componentes no correlacionadas.
- Conocer algunos *trade-offs* o compensaciones.

Principal component analysis (PCA)


2
1
0
−1
−2
−2
−1
0
1
2

Idea central

- Agrupar los predictores de forma que encontremos nuevos "ejes" en los que se explique mejor la varianza de los datos.

Idea central

- Agrupar los predictores de forma que encontremos nuevos "ejes" en los que se explique mejor la varianza de los datos.

- Pedimos que estos nuevos "ejes" sean perpendiculares entre sí. Encontramos estos "ejes" o componentes como un problema de álgebra lineal (descomposición de valores propios)

Idea central

- Agrupar los predictores de forma que encontremos nuevos "ejes" en los que se explique mejor la varianza de los datos.
- Pedimos que estos nuevos "ejes" sean perpendiculares entre sí. Encontramos estos "ejes" o componentes como un problema de álgebra lineal (descomposición de valores propios)
- El número de componentes principales será igual o menor al número de predictores.

Intuición detrás del cálculo de PCA

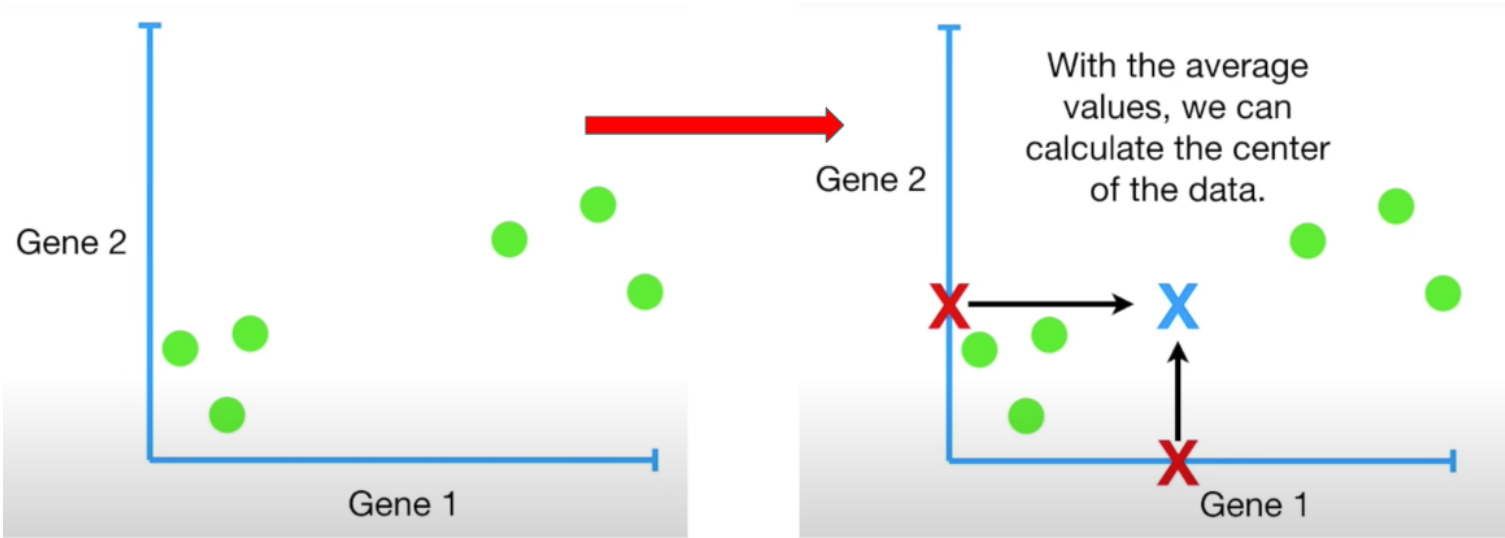
Hasta 3 dimensiones podemos visualizar observaciones y tratar de encontrar individuos parecidos, pero qué hacemos si hay más

	Mouse 1	Mouse 2	Mouse 3	Mouse 4	Mouse 5	Mouse 6
Gene 1	10	11	8	3	2	1
Gene 2	6	4	5	3	2.8	1
Gene 3	12	9	10	2.5	1.3	2
Gene 4	5	7	6	2	4	7

If we measured 4 genes, however, we can no longer plot the data - 4 genes require 4 dimensions.

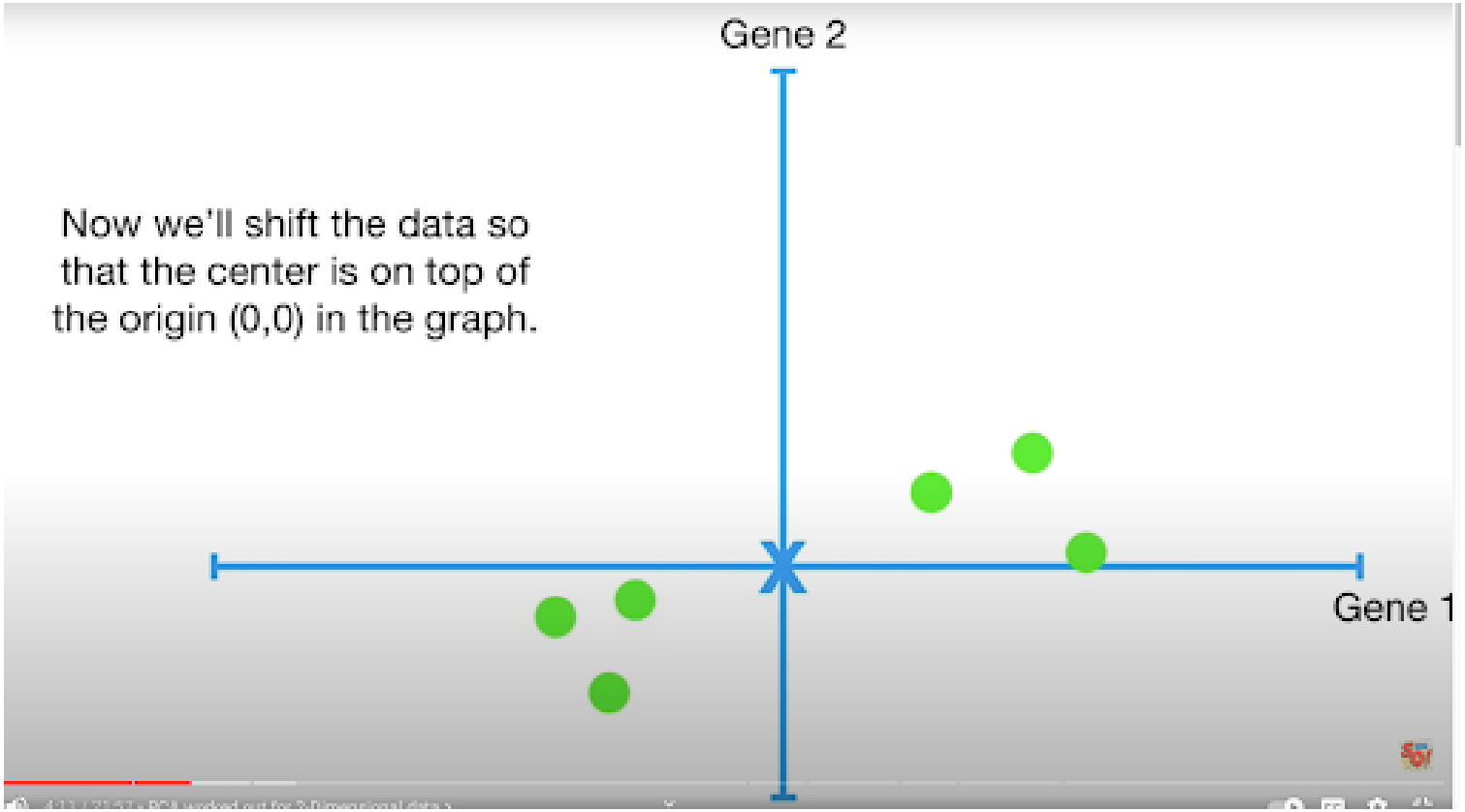
https://www.youtube.com/watch?v=FgakZw6K1QQ

Primero transformamos los datos de modo que tengan media cero



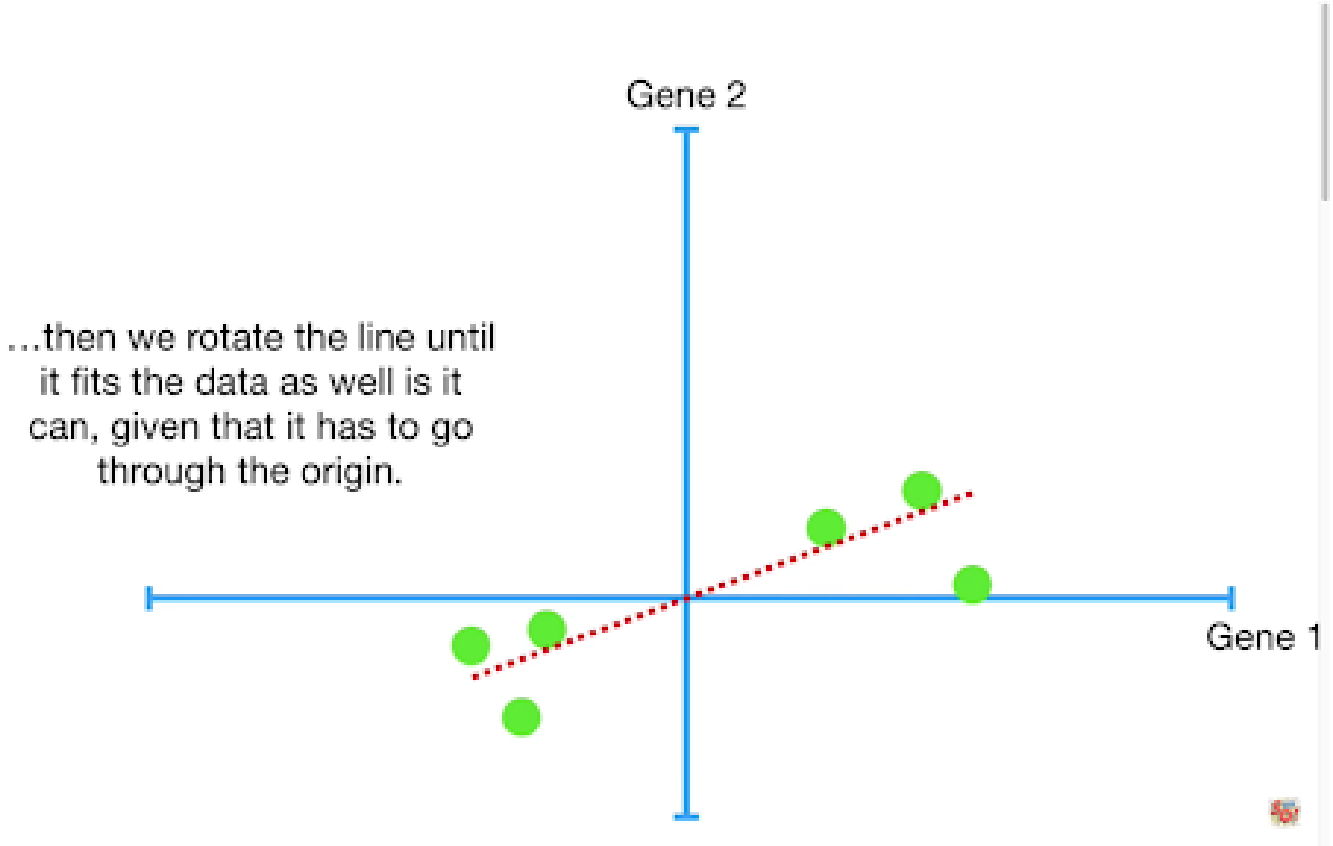
https://www.youtube.com/watch?v=FgakZw6K1QQ

Note que esto no cambia la ubicación relativa de los puntos



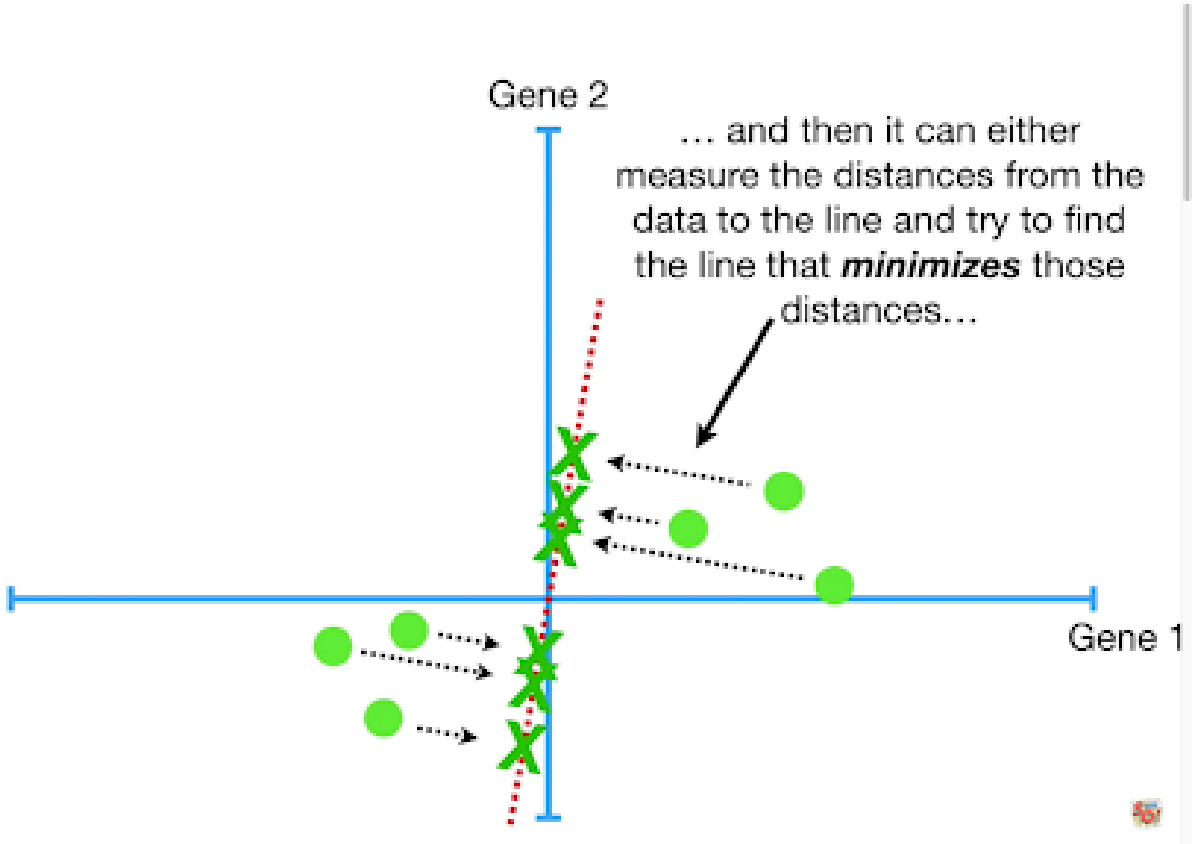
https://www.youtube.com/watch?v=FgakZw6K1QQ

Trato de encontrar la recta que mejor aproxima los datos



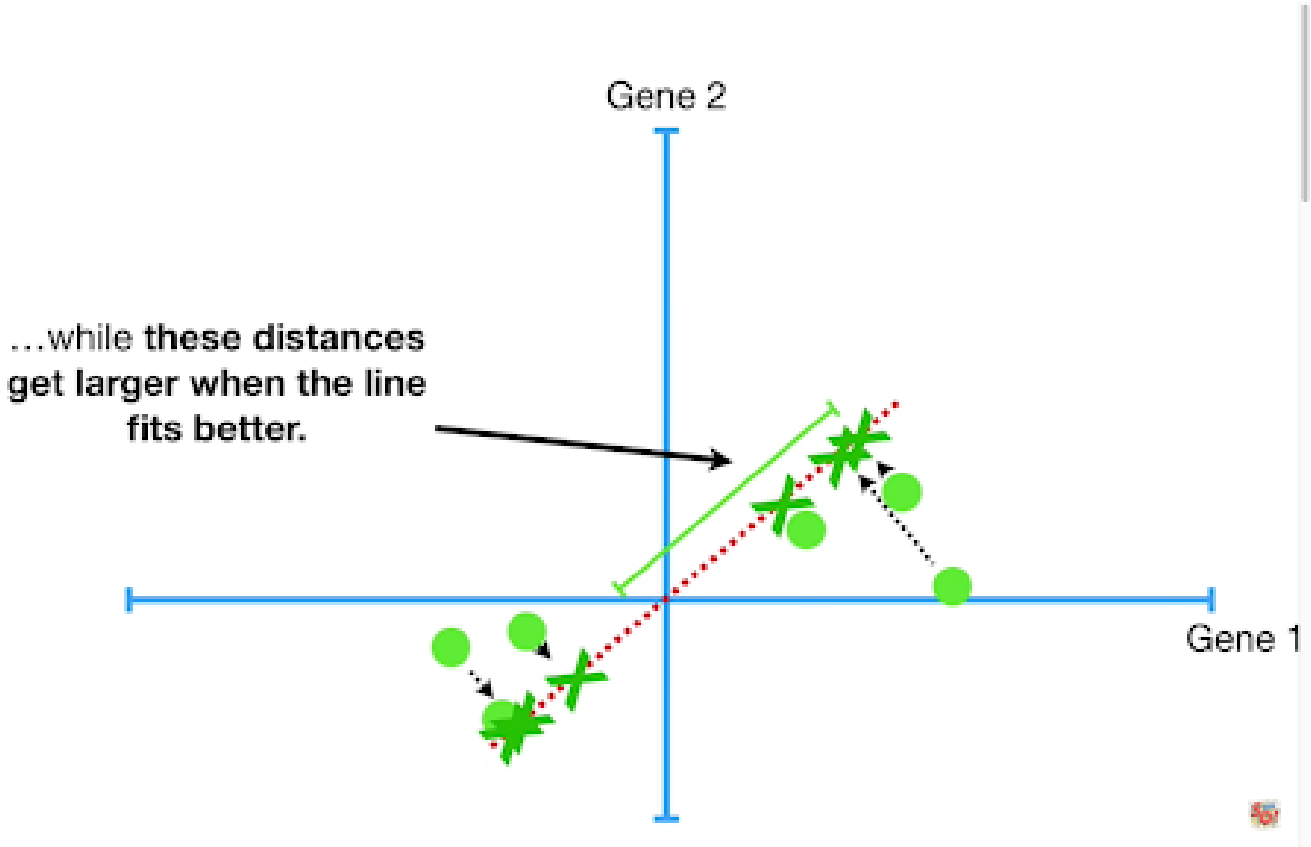
https://www.youtube.com/watch?v=FgakZw6K1QQ

Lo cual puede ser minimizando las distancia de los puntos a la recta



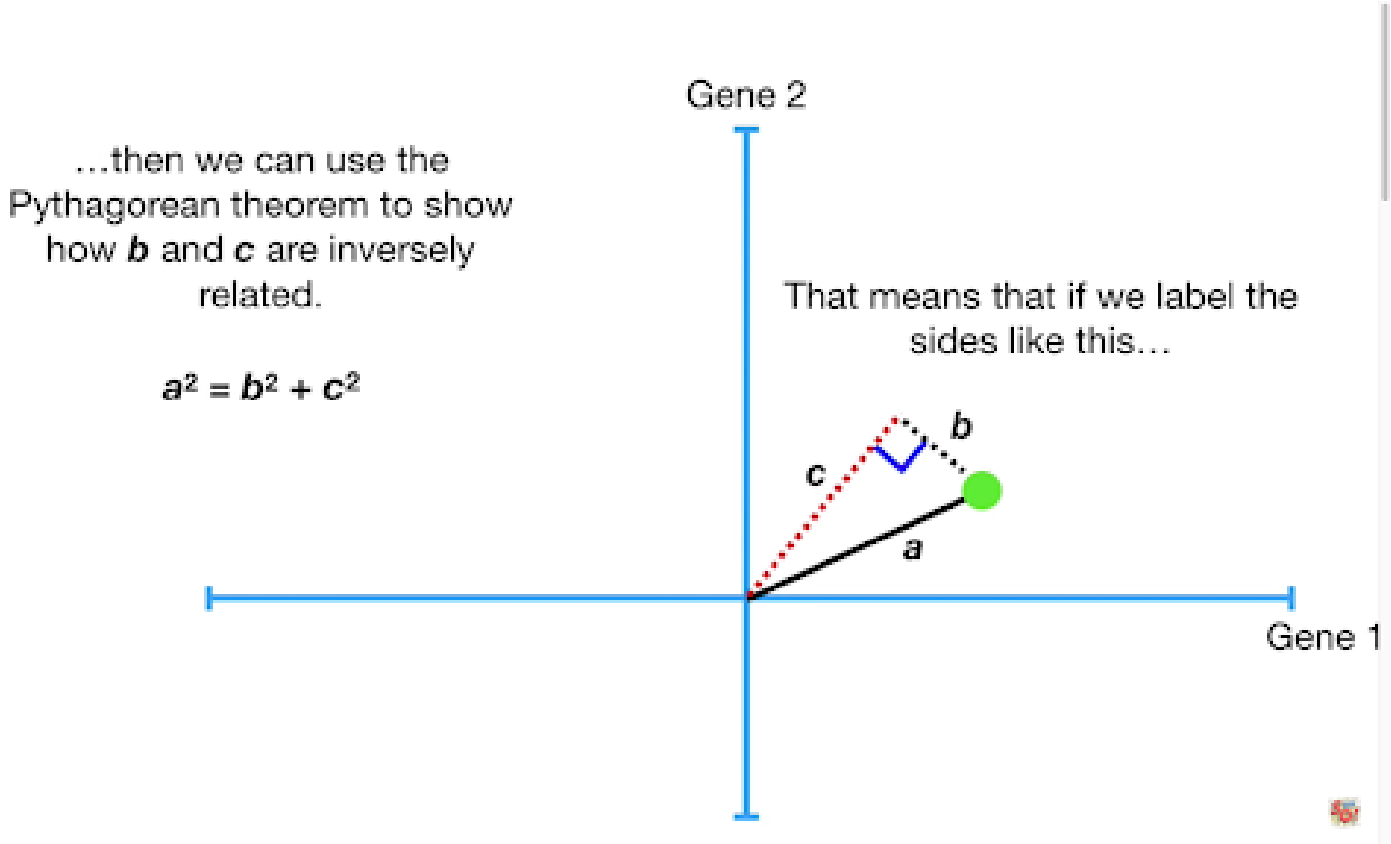
https://www.youtube.com/watch?v=FgakZw6K1QQ

O maximizando las proyección de los puntos en la recta! (esto es poco intuitivo)



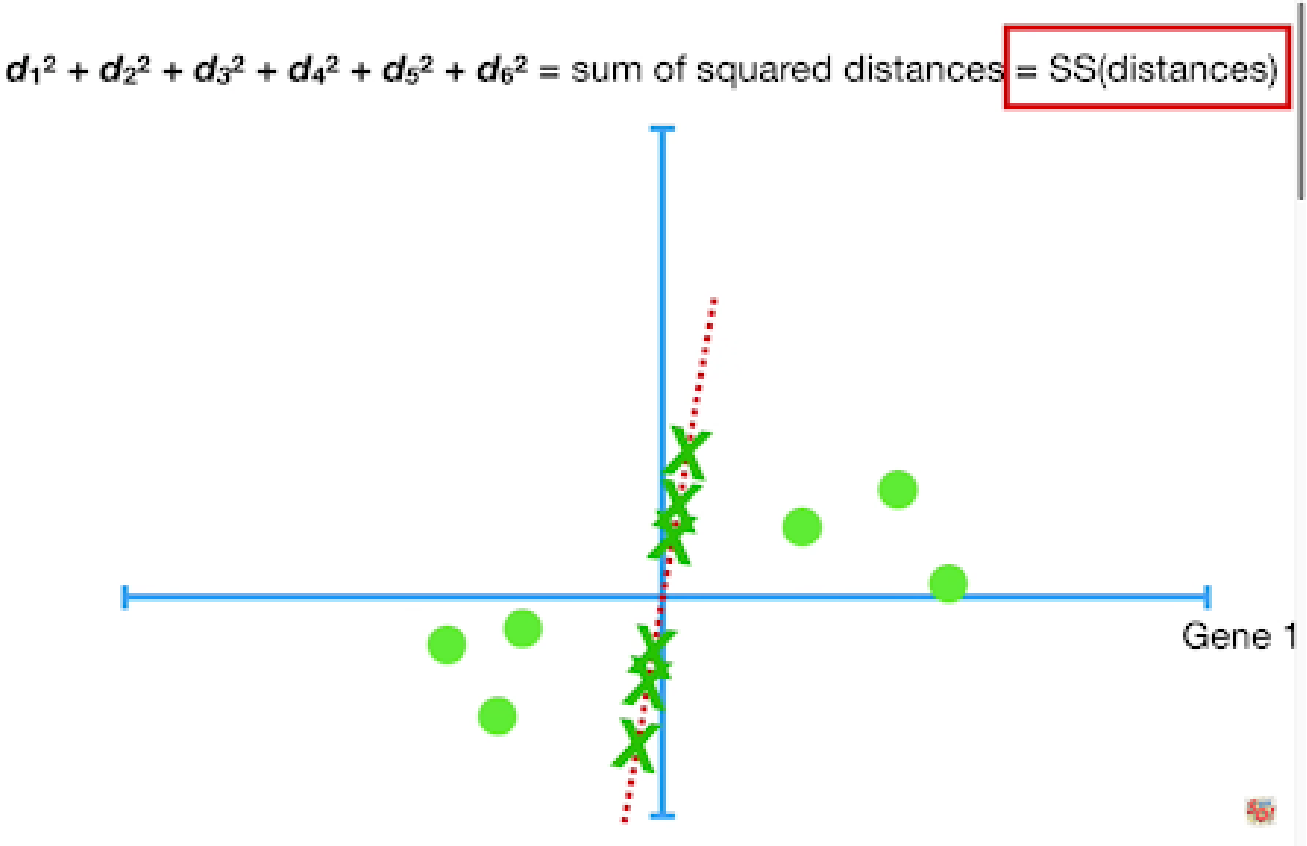
https://www.youtube.com/watch?v=FgakZw6K1QQ

Consideremos un solo punto y por Pitágoras vemos que las distancias c y b están relacionadas: si una aumenta la otra disminuye



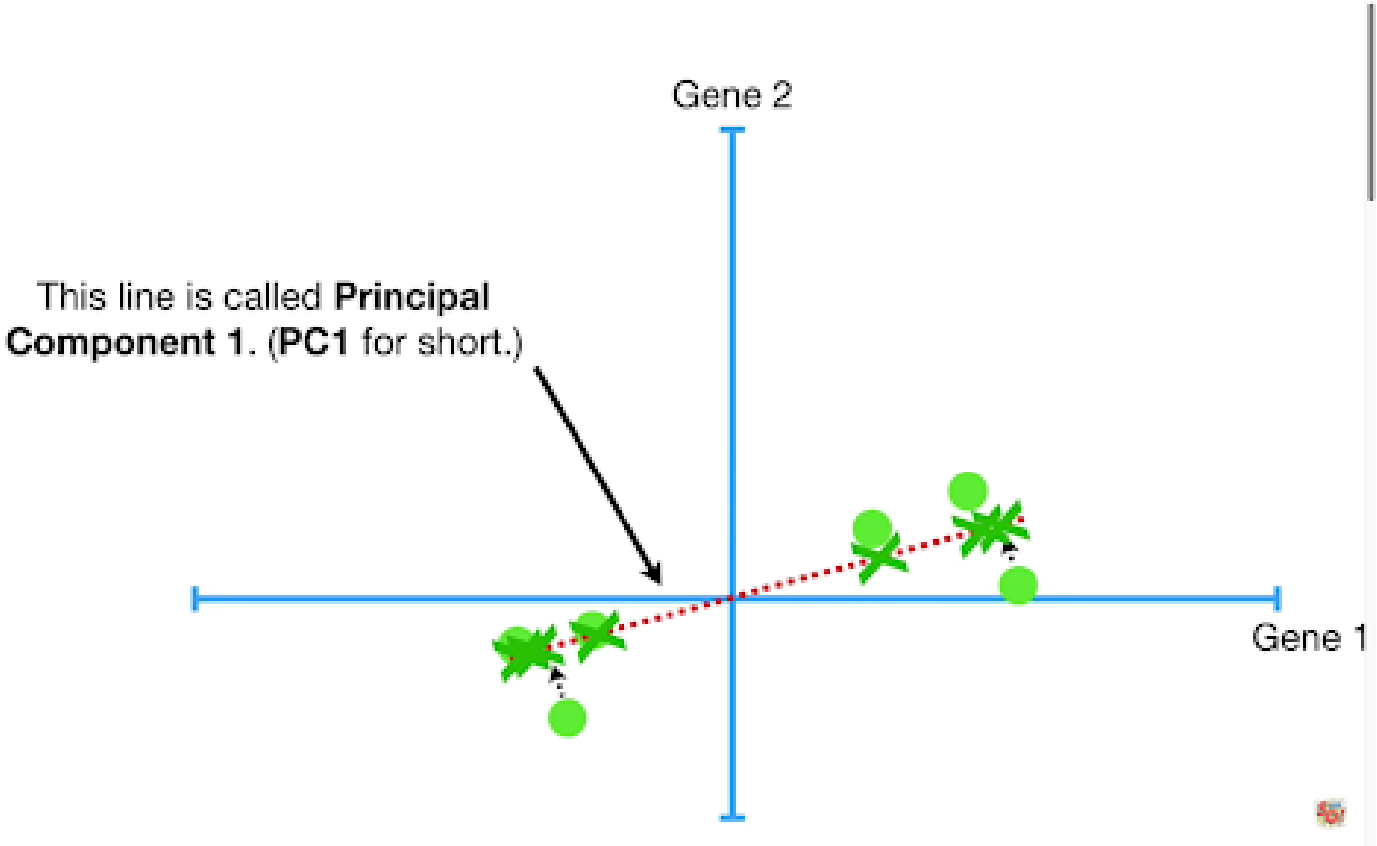
https://www.youtube.com/watch?v=FgakZw6K1QQ

Cantidad a maximizar



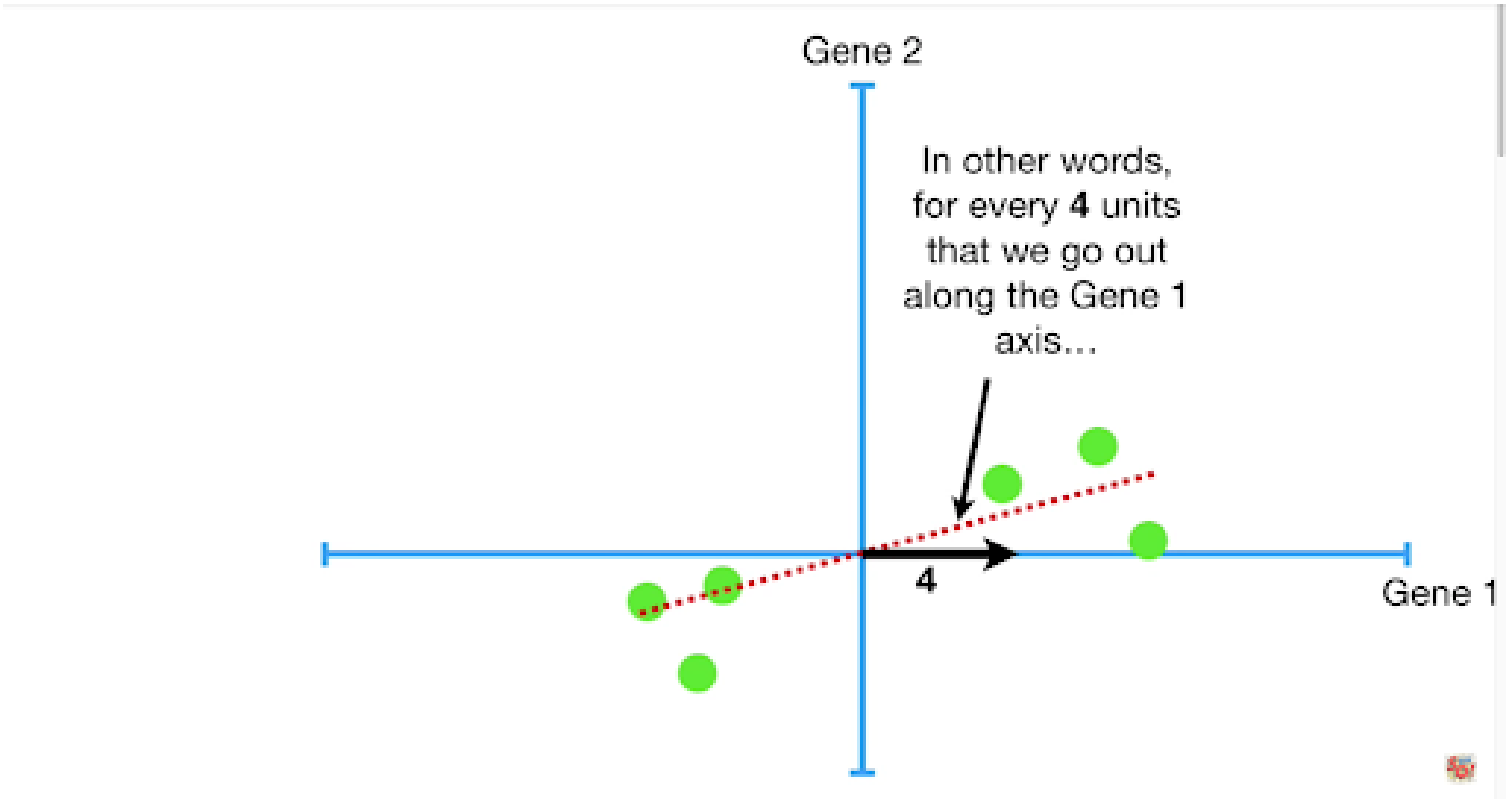
https://www.youtube.com/watch?v=FgakZw6K1QQ

En este caso la pendiente de la recta es 0.25 lo que indica cómo los genes 1 y 2 construyen la componente

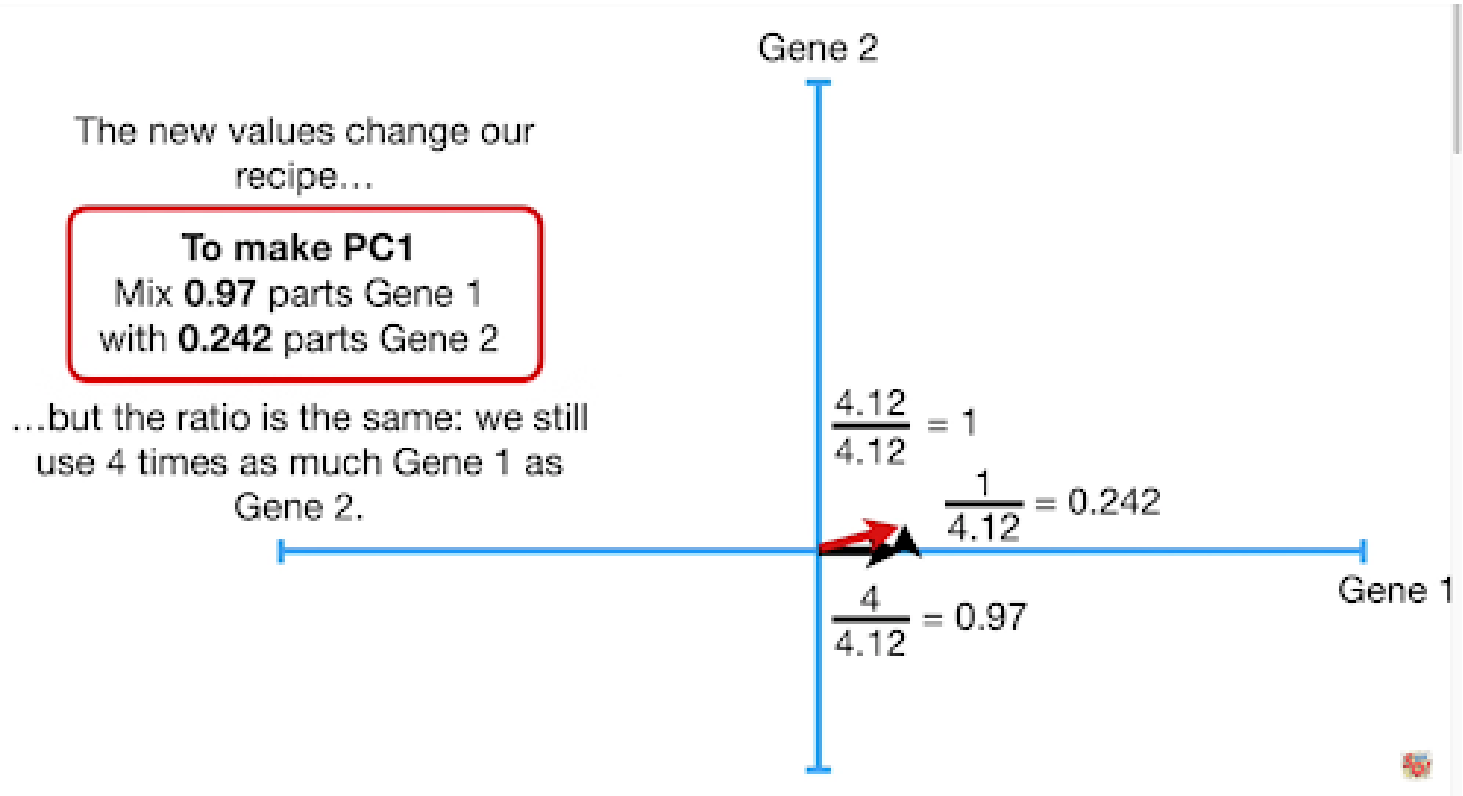


https://www.youtube.com/watch?v=FgakZw6K1QQ

Construimos el vector unitario de PC1

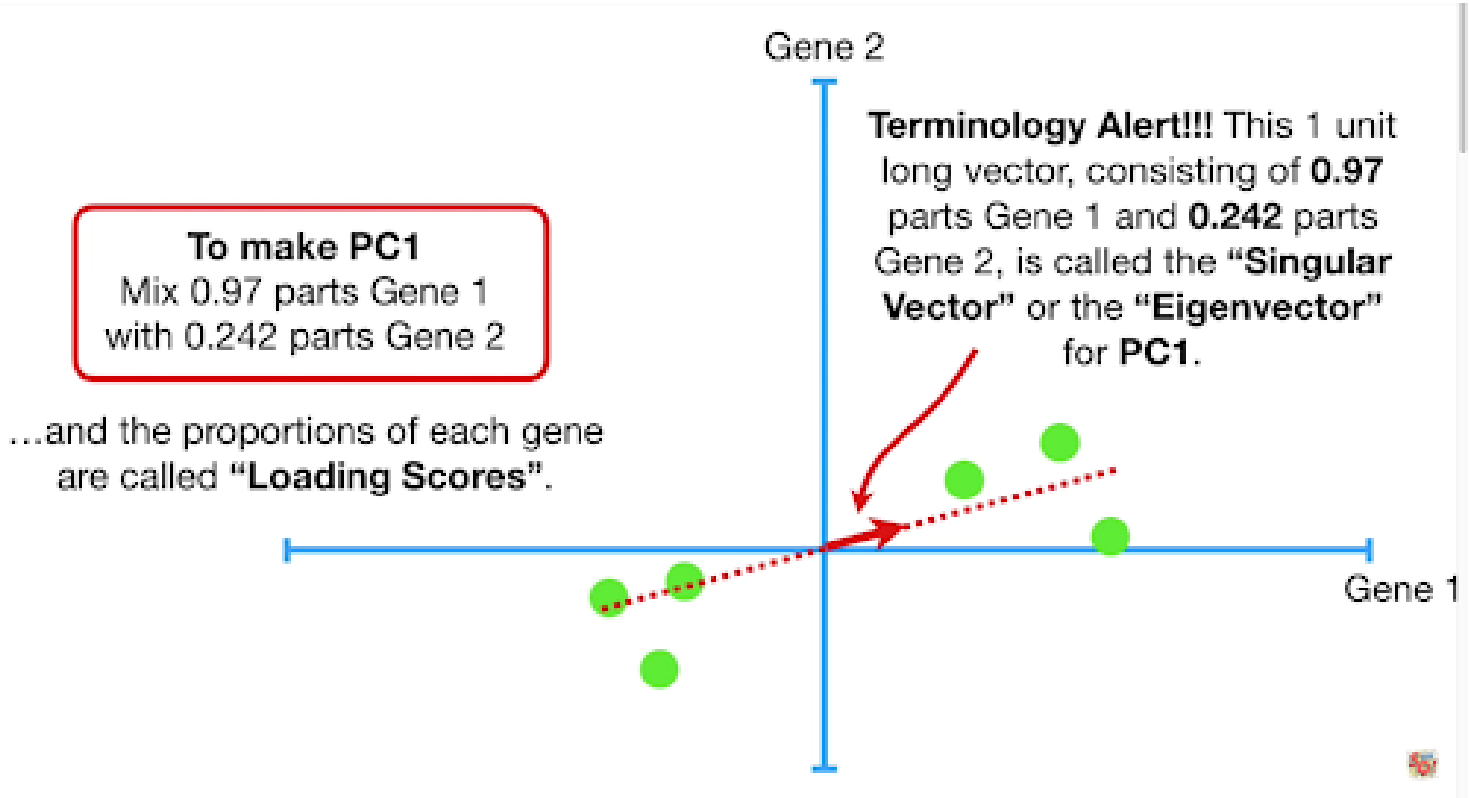


https://www.youtube.com/watch?v=FgakZw6K1QQ



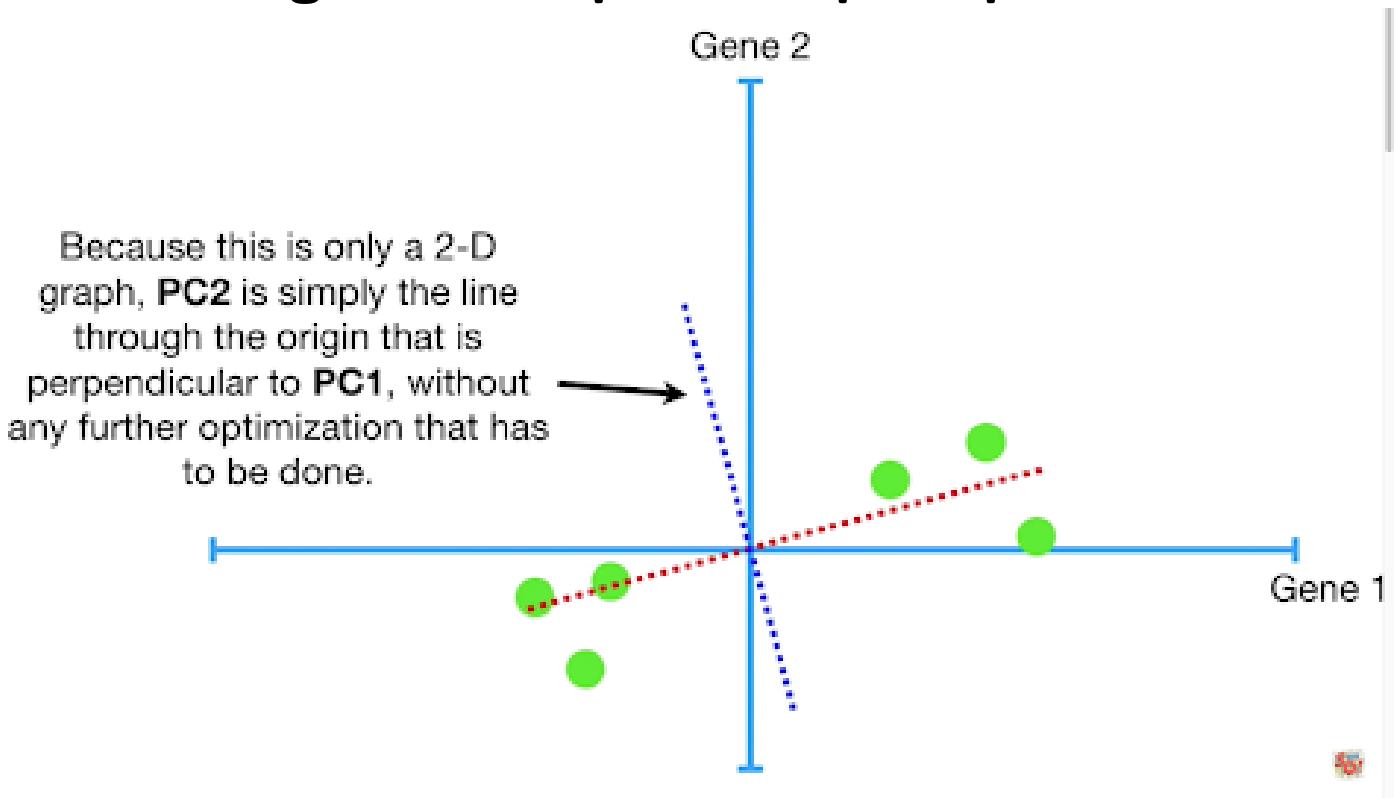
https://www.youtube.com/watch?v=FgakZw6K1QQ

Segunda componente principal



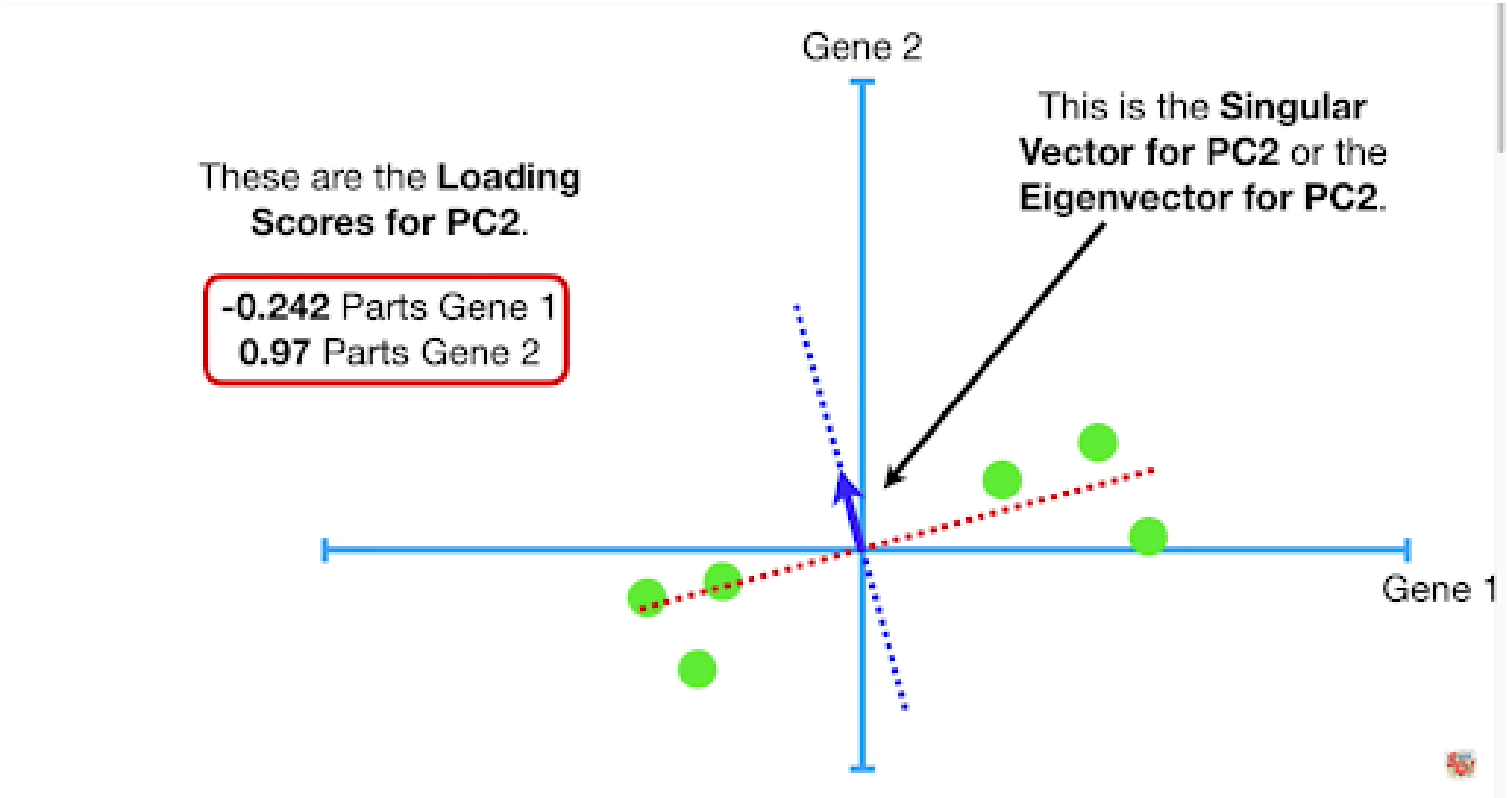
https://www.youtube.com/watch?v=FgakZw6K1QQ

Segunda componente principal



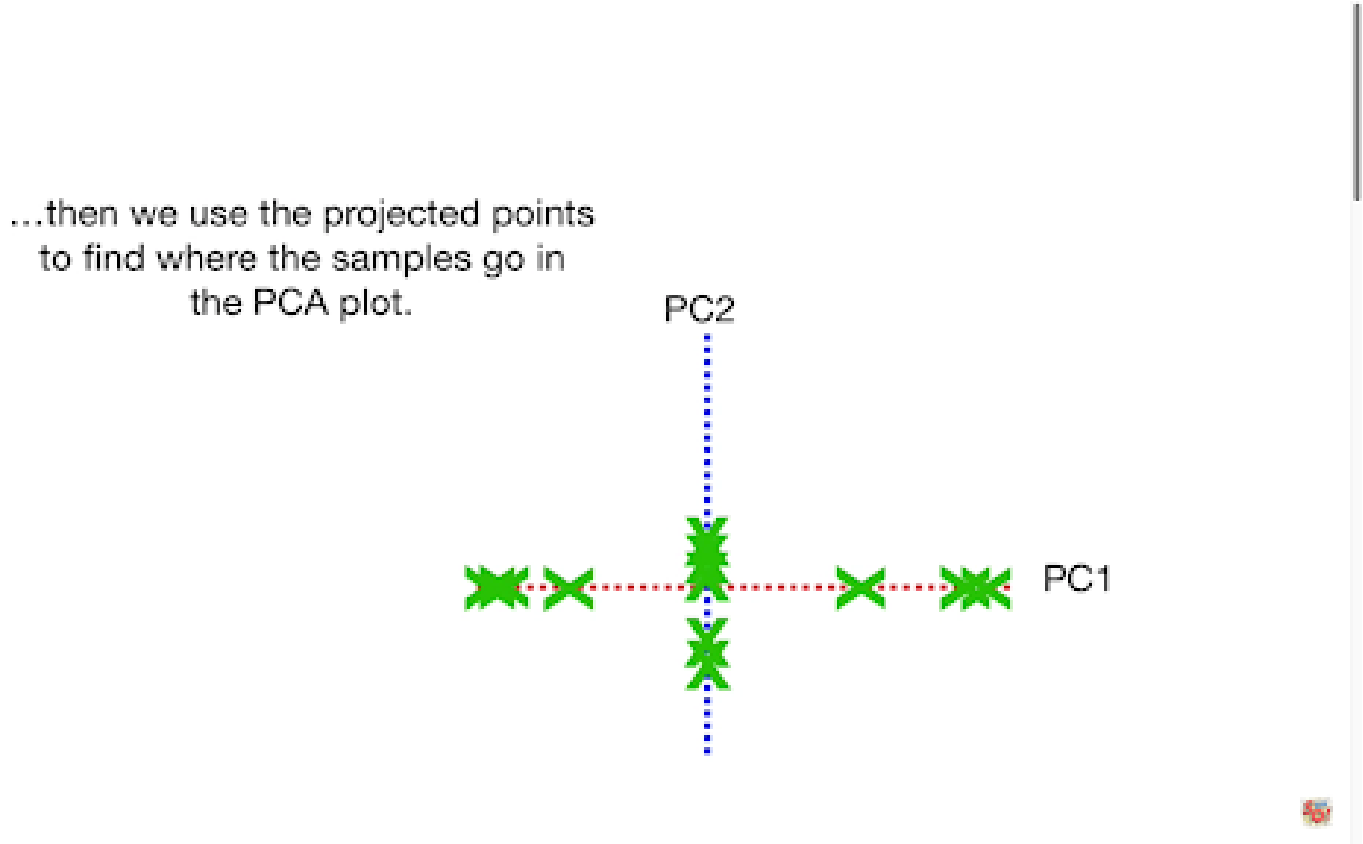
https://www.youtube.com/watch?v=FgakZw6K1QQ

Graficando en los nuevos ejes



https://www.youtube.com/watch?v=FgakZw6K1QQ

Porcentaje de la varianza explicada



https://www.youtube.com/watch?v=FgakZw6K1QQ

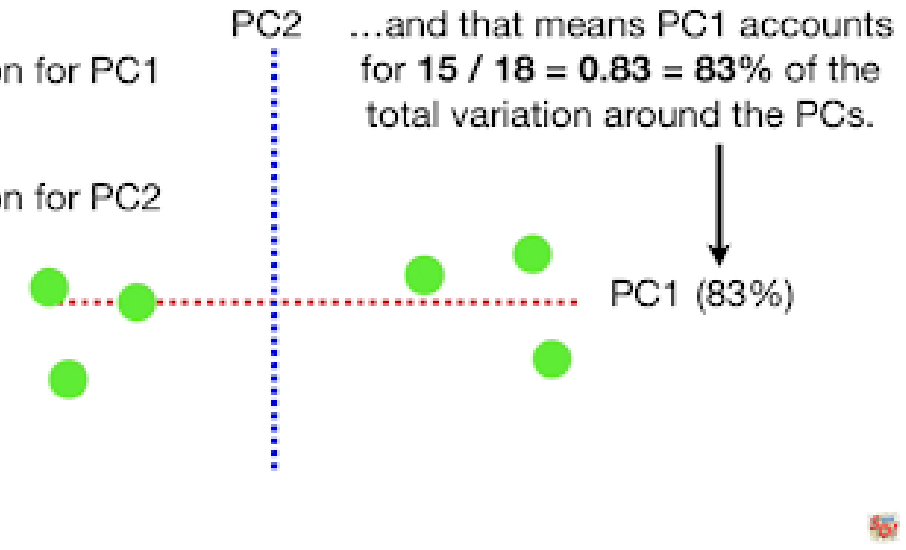
Scree plot (considerando que tenemos 3PC)

For the sake of the example, imagine that the Variation for **PC1 = 15**, and the variation for **PC2 = 3**.

That means that the total variation around both PCs is **15 + 3 = 18**...

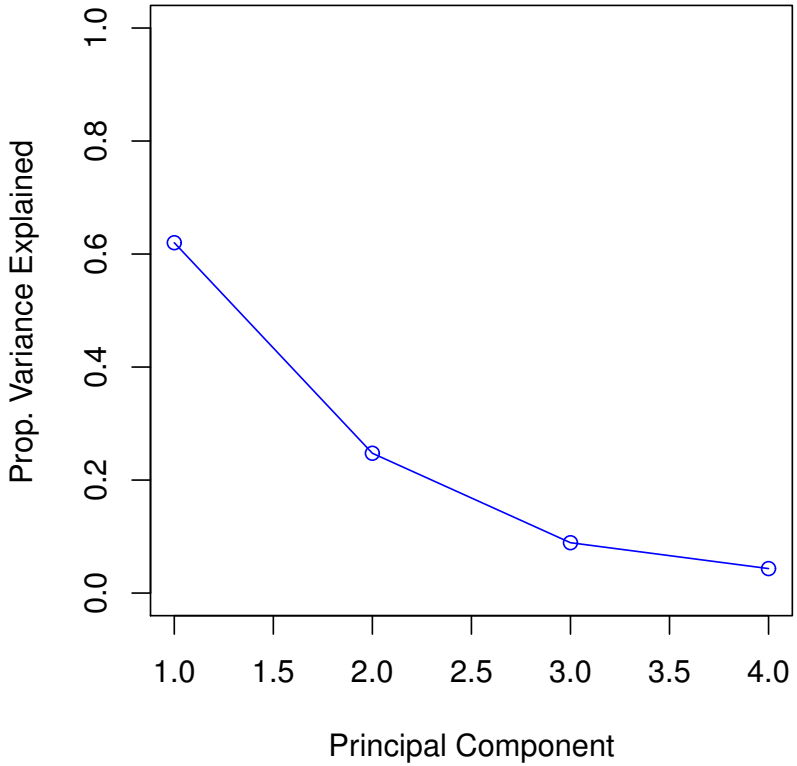
$$\frac{SS(\text{distances for PC1})}{n - 1} = \text{Variation for PC1}$$

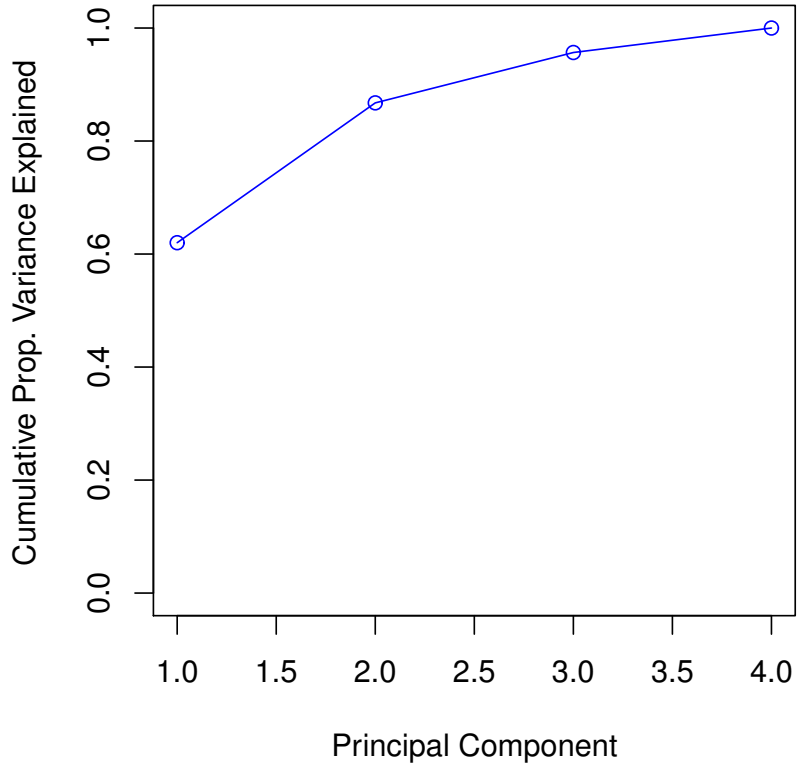
$$\frac{SS(\text{distances for PC2})}{n - 1} = \text{Variation for PC2}$$



https://www.youtube.com/watch?v=FgakZw6K1QQ

Scree plot

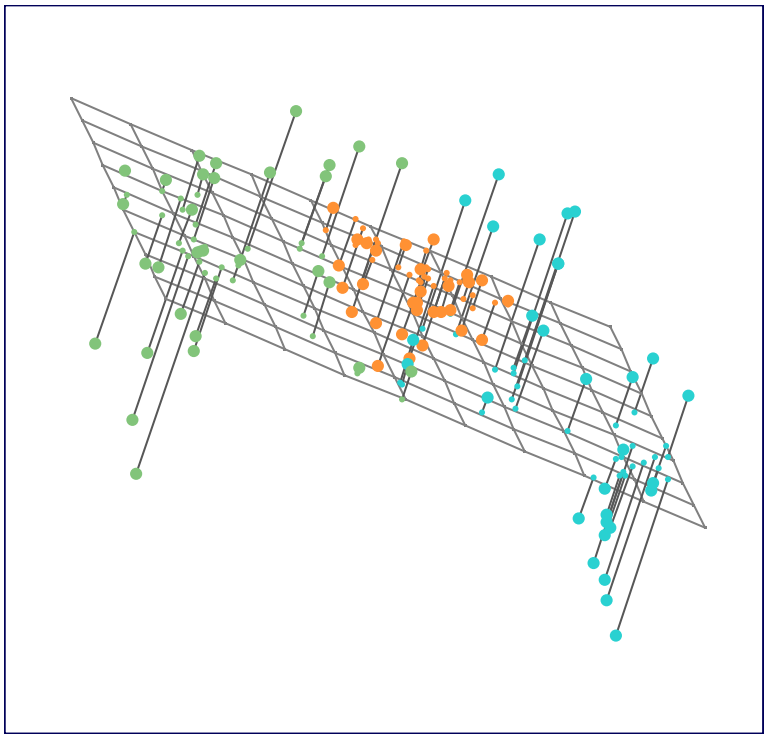




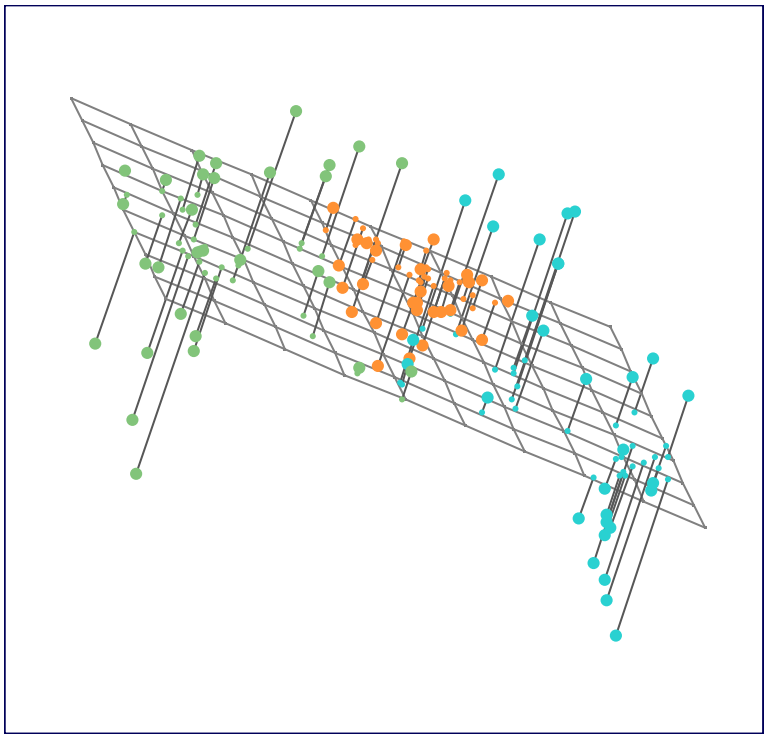
https://www.statlearning.com/

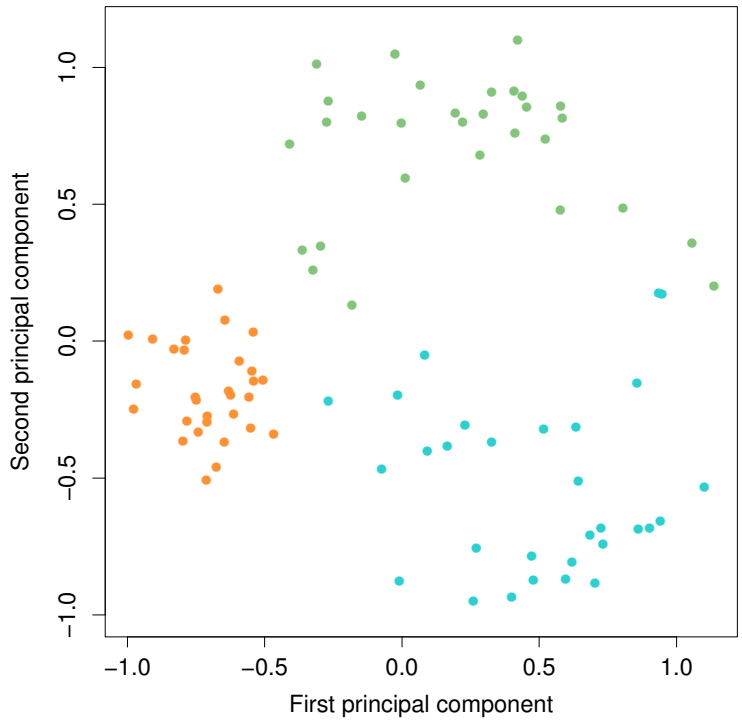
Interpretando datos graficados en componentes principales

Visualización en componentes principales

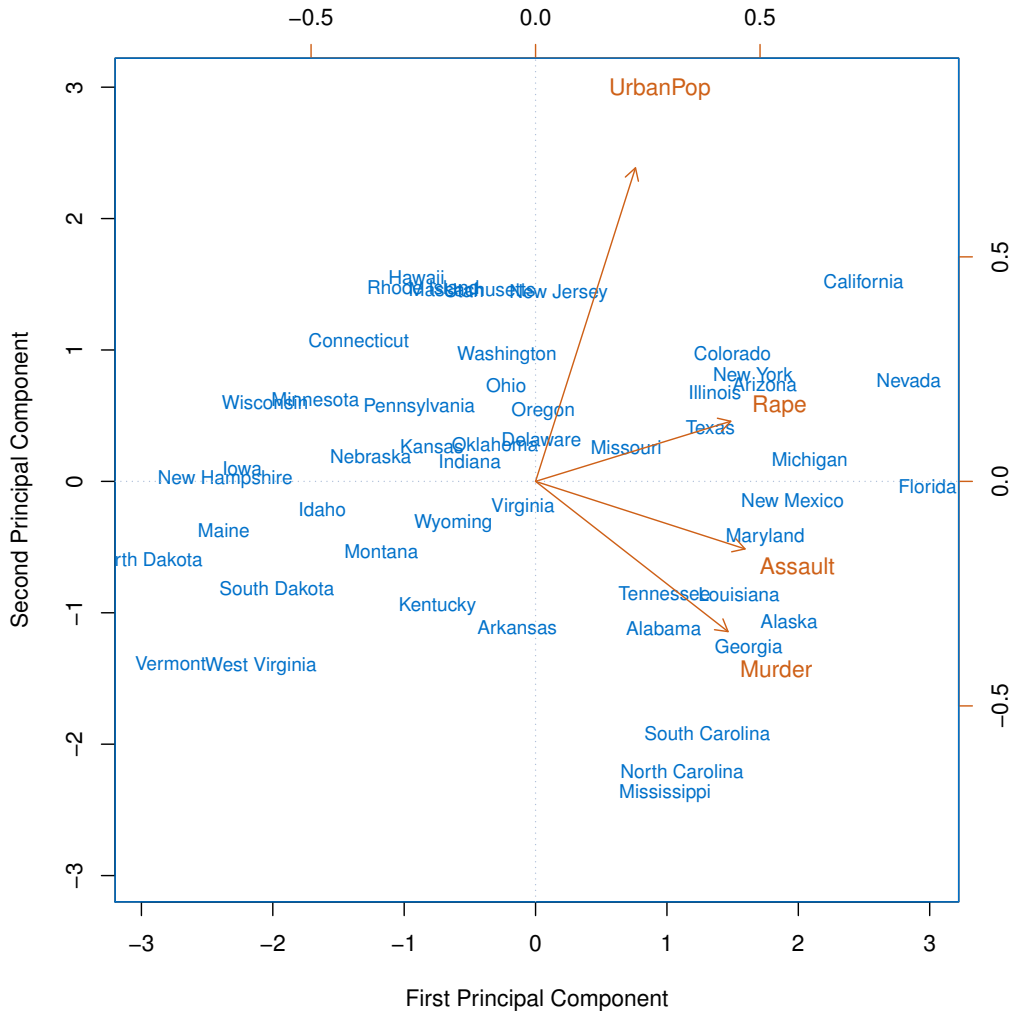


Visualización en componentes principales

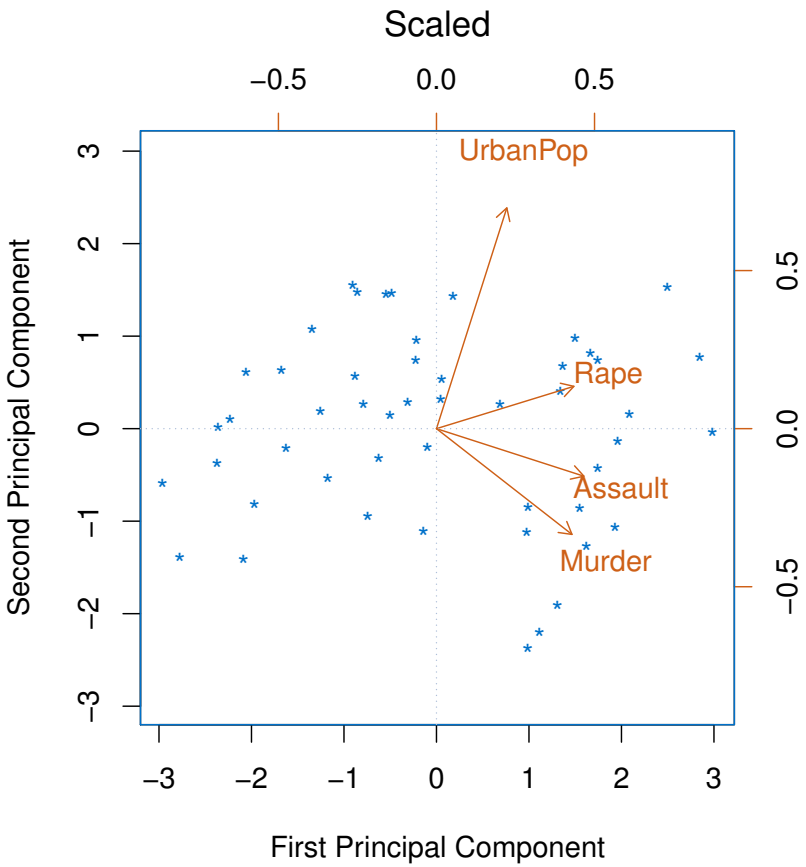


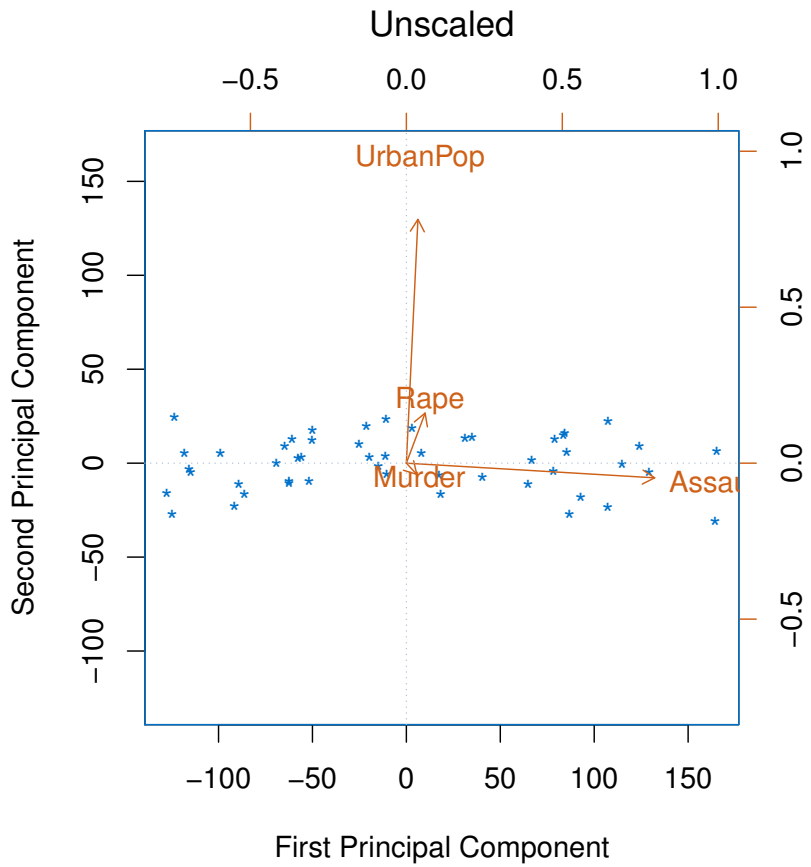


https://www.statlearning.com/

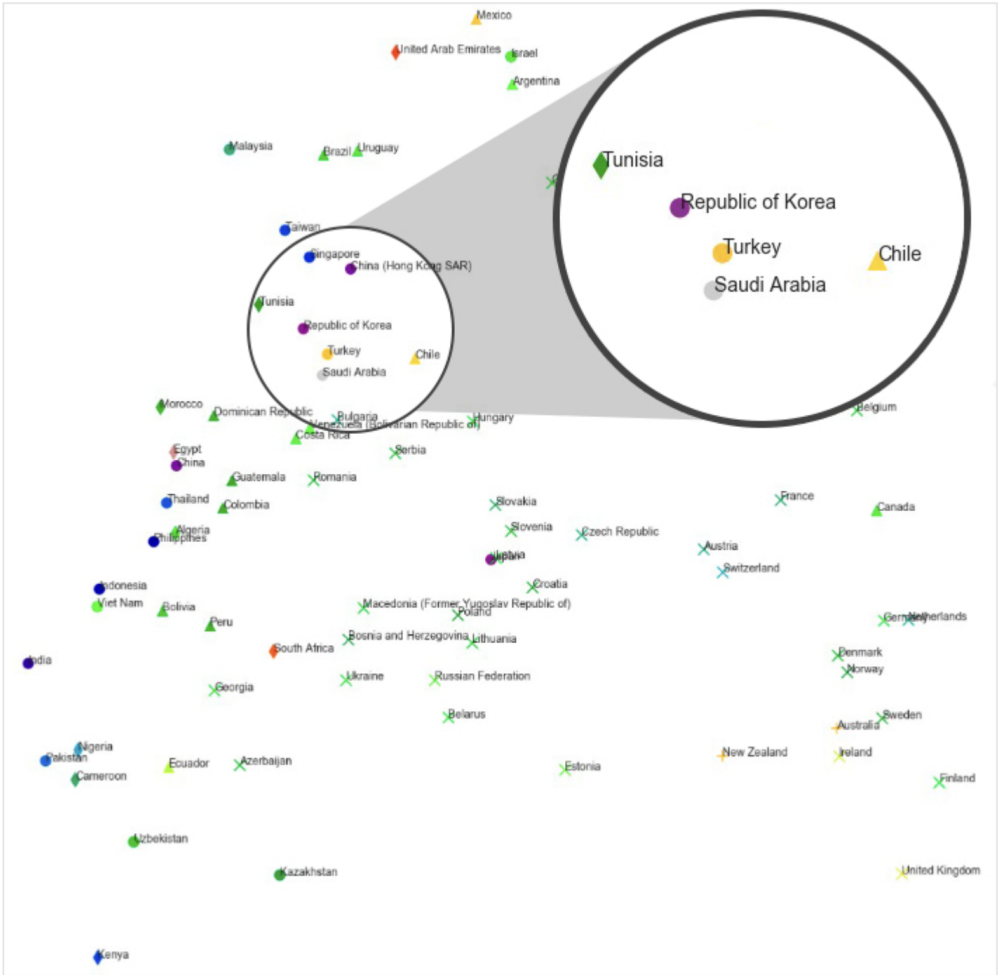


https://www.statlearning.com/





https://www.statlearning.com/



**Los colores indican la prevalencia de obesidad | Imagen referencial cortesía de Jocelyn Dunstan*

:tps://www.emol.com/noticias/Tecnologia/2019/07/30/956345/Chilena-que-proyecto-tasas-de-obesidad-en-72-
html

Free-lunch

There is no free lunch in statistics

No one method dominates all others over all possible data sets

Trade-offs

Recordemos que estamos haciendo

Sea X un vector con características (*input variables*) e Y la variable respuesta (*output variable*)

Recordemos que estamos haciendo

Sea X un vector con características (*input variables*) e Y la variable respuesta (*output variable*)

Diremos que X se relaciona con Y via f:

$$Y = f(X) + \varepsilon,$$

donde ε es un error aleatorio que no depende X y tiene promedio cero.

¿Por qué quisieramos estimar f?

- Predicción
- Inferencia

¿Por qué quisieramos estimar f?

- Predicción:

$$\hat{Y} = \hat{f}(X),$$

donde $\hat{Y}$ es la predicción y $\hat{f}$ es la estimacion de f.

¿Por qué quisieramos estimar f?

- Predicción:

$$\hat{Y} = \hat{f}(X),$$

donde $\hat{Y}$ es la predicción y $\hat{f}$ es la estimacion de f.

Trataremos de minimizar la distancia entre $f(x)$ y $\hat{f}(x)$ con la elección del modelo. Podemos usar métodos paramétricos (asumir la forma de la relación entre X e Y), o no paramétrico.

¿Por qué quisieramos estimar f?

- Predicción:

$$\hat{Y} = \hat{f}(X),$$

donde $\hat{Y}$ es la predicción y $\hat{f}$ es la estimacion de f.

Trataremos de minimizar la distancia entre $f(x)$ y $\hat{f}(x)$ con la elección del modelo. Podemos usar métodos paramétricos (asumir la forma de la relación entre X e Y), o no paramétrico.

- Inferencia:

¿Por qué quisieramos estimar f?

- Predicción:

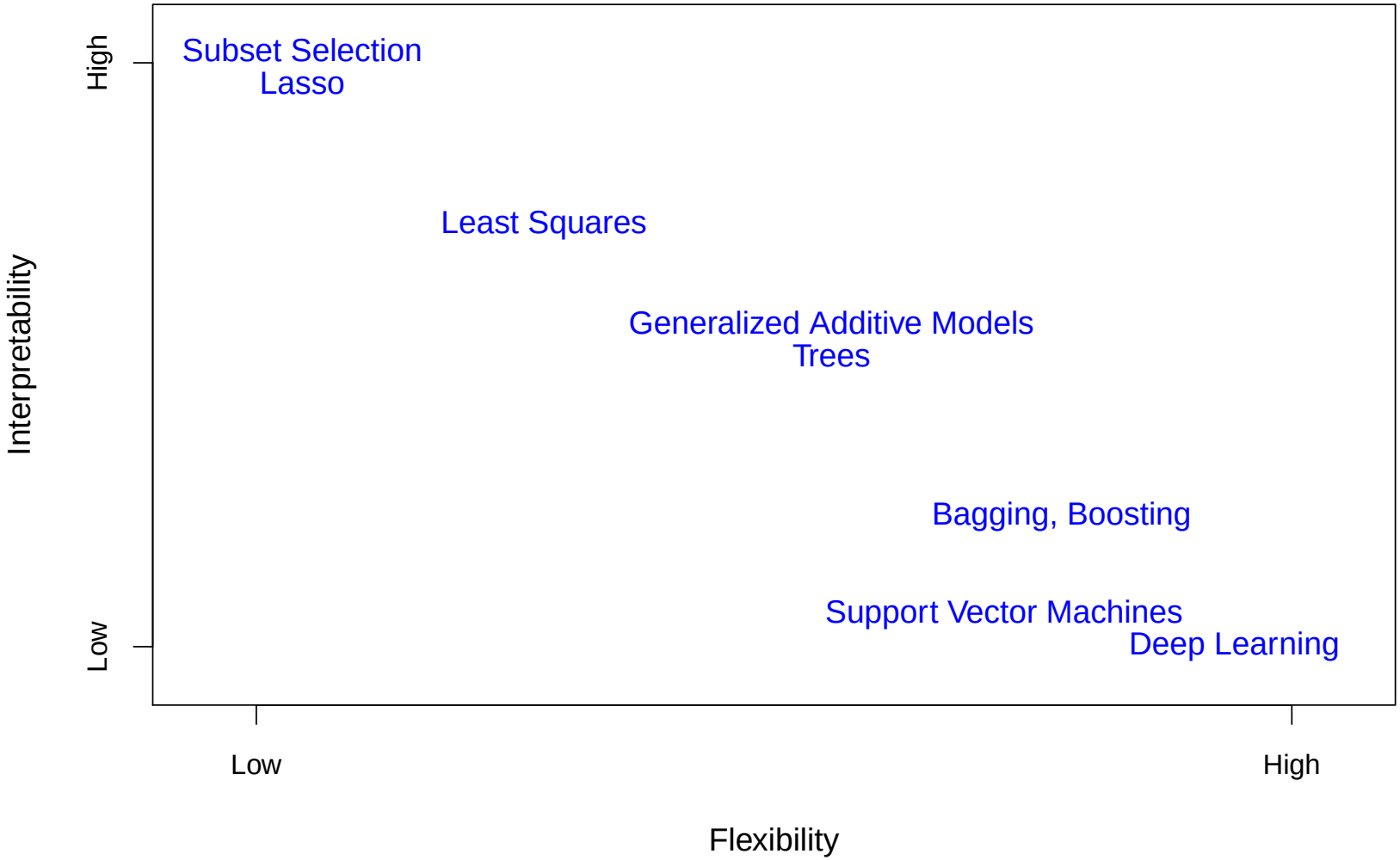
$$\hat{Y} = \hat{f}(X),$$

donde $\hat{Y}$ es la predicción y $\hat{f}$ es la estimacion de f.

Trataremos de minimizar la distancia entre $f(x)$ y $\hat{f}(x)$ con la elección del modelo. Podemos usar métodos paramétricos (asumir la forma de la relación entre X e Y), o no paramétrico.

- Inferencia: En este caso queremos entender la asociación entre Y y X. Por ej, ¿Qué predictores están asociados con la variable respuesta?, ¿Cuál es la relación entre la respuesta y cada predictor?, ¿Puedo asumir que la relación entre predictores y respuesta es lineal?

Trade-off entre precisión e interpretabilidad



https://www.statlearning.com/

Bias-Variance trade-off

- Varianza:
  - ¿Cuánto cambia $\hat{f}$ si lo estimo usando datos de entrenamiento distintos?

Bias-Variance trade-off

- Varianza:
  - ¿Cuánto cambia $\hat{f}$ si lo estimo usando datos de entrenamiento distintos?
  - Idealmente no debería cambiar mucho. Modelos más flexibles tienden a tener mayor varianza.

Bias-Variance trade-off

- Varianza:
  - ¿Cuánto cambia $\hat{f}$ si lo estimo usando datos de entrenamiento distintos?
  - Idealmente no debería cambiar mucho. Modelos más flexibles tienden a tener mayor varianza.

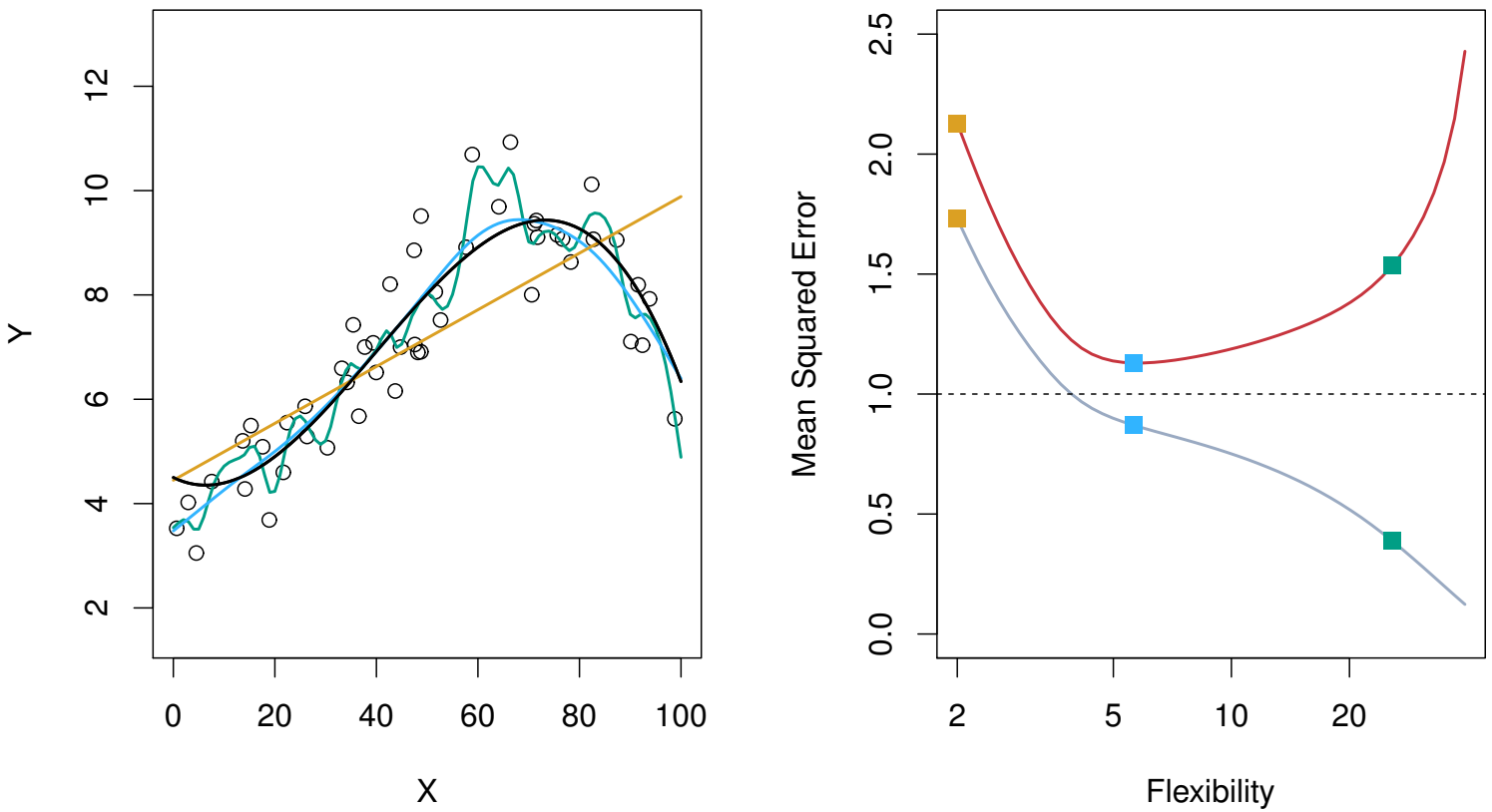
- Sesgo (*Bias*):
  - Error introducido por aproximar un problema de la vida real por un modelo más simple.

Bias-Variance trade-off

- Varianza:
  - ¿Cuánto cambia $\hat{f}$ si lo estimo usando datos de entrenamiento distintos?
  - Idealmente no debería cambiar mucho. Modelos más flexibles tienden a tener mayor varianza.

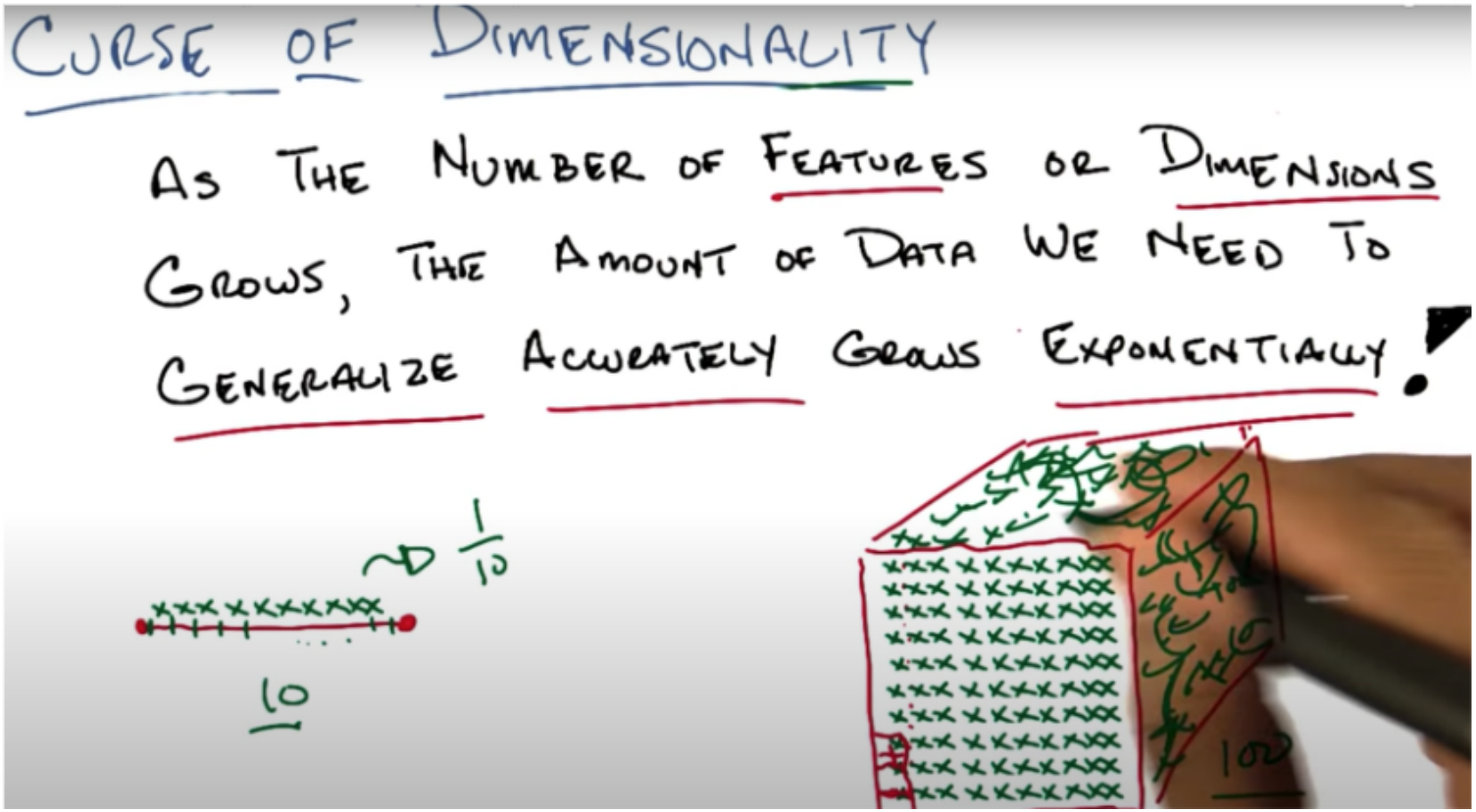
- Sesgo (*Bias*):
  - Error introducido por aproximar un problema de la vida real por un modelo más simple.
  - Modelos más flexibles tienden a tener menor *bias*.

Bias-Variance trade-off



Left: Data simulated from f , shown in black. Three estimates of f are shown: the linear regression line (orange curve), and two smoothing spline fits (blue and green curves). Right: Training MSE (grey curve), test MSE (red curve), and minimum possible test MSE over all methods (dashed line). Squares represent the training and test MSEs for the three fits shown in the left-hand panel.

Maldición de la dimensionalidad



https://www.youtube.com/watch?v=0yPcbeiwps8