Práctica 2

Lauro Reyes Rosas Claudia Ximena Paz Cendejas

November 2024

0.1 Parte I. SVD & PCA

Análisis de Componentes Principales (PCA)

```
[5]: import pandas as pd
import numpy as np
import seaborn as sns
import matplotlib.pyplot as plt
```

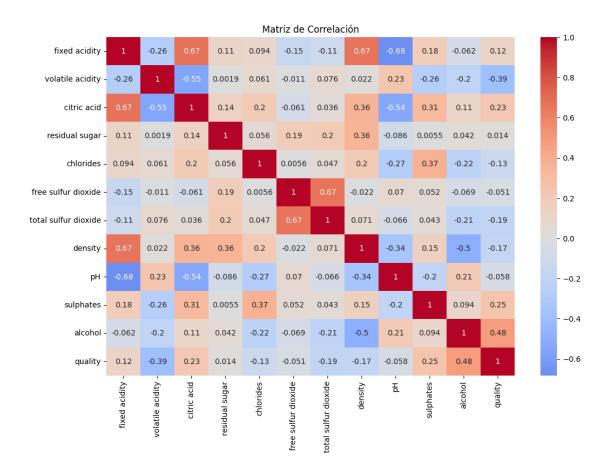
```
[2]: df = pd.read_csv("data/winequality-red.csv")
```

1. Prepara los datos: para cada variable, centra alrededor del cero restando las medias y estandariza la escala dividiendo entre la varianza (np.std). Haz un mapa de calor con la matriz de correlaciones de la base de datos estandarizada.

```
[3]: df_standardized = (df - df.mean()) / df.std()

correlation_matrix = df_standardized.corr()
```

```
[4]: plt.figure(figsize=(12, 8))
    sns.heatmap(correlation_matrix, annot=True, cmap='coolwarm', center=0)
    plt.title('Matriz de Correlación')
    plt.show()
```



Observando la matriz de correlaciones, encontramos algunas variables con alta correlación como "density" con "fixed acidity" y "free sulfur dioxide" con "total sulfur dioxide" También podemos ver las variables que tienen una alta correlación "quality" que es nuestra variable de interés como "volatile acidity" y "alcohol" por lo que tenerlas en cuenta en el análisis es importante.

2. Realiza la reducción de dimensionalidad mediante PCA calculando los eigenvalores y eigenvectores de la matriz de varianza-covarianza $(A^T A)$.

```
[5]: cov_matrix = np.cov(df_standardized.T)

# valores propios y vectores propios
eigenvalues, eigenvectors = np.linalg.eig(cov_matrix)

print("Valores propios:")
print(eigenvalues)
print("\nVectores propios:")
print(eigenvectors)
```

Valores propios:

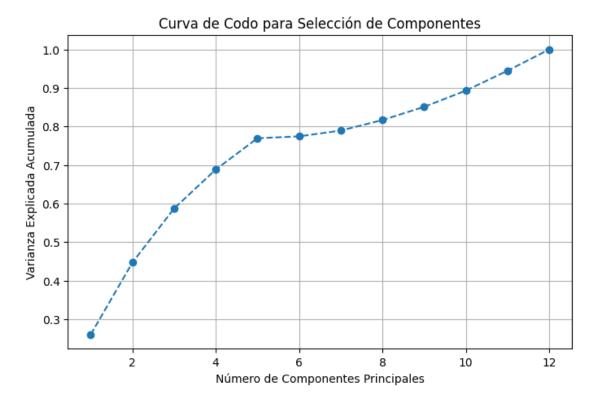
```
[3.1211677 2.24188204 1.68291969 1.21502087 0.97326362 0.05951792 0.18021863 0.32791939 0.41130754 0.50587256 0.6183178 0.66259224]
```

Vectores propios:

```
[[ 0.48788336 -0.00417321 -0.16482854 -0.23109808 -0.07877938 -0.63857976
  -0.25643792  0.18295601  -0.17457815  -0.20052866  0.30721496  -0.0555313 ]
 \begin{bmatrix} -0.26512898 & 0.33896786 & -0.22708884 & 0.04185824 & 0.29937933 & -0.00466168 \end{bmatrix} 
  0.37716123 \ -0.15510563 \ -0.06022334 \ -0.14612614 \ \ 0.62623369 \ -0.297287
[ 0.47333547 -0.1373581
                          0.10022856 -0.0567358 -0.12014871 0.07003691
  0.62432783 -0.34608556 -0.22097505 -0.29633271 -0.24414858 -0.13663328]
[ \ 0.13915442 \ \ 0.16773634 \ \ 0.24362014 \ \ -0.38303758 \ \ 0.70936319 \ \ -0.18364637 ]
  0.08807787 0.05223656 0.27818728 0.17062614 -0.28385429 -0.10931059]
[ \ 0.19742679 \ \ 0.18978819 \ -0.02660785 \ \ 0.65477782 \ \ 0.26623723 \ -0.05393118
 -0.20861667 0.00386273 -0.41993639 0.18692254 -0.23054697 -0.33733656
 \begin{bmatrix} -0.04588071 & 0.25948314 & 0.61611132 & -0.03371148 & -0.15941286 & 0.05192167 \end{bmatrix} 
  0.23793317  0.58538858 -0.31800012  0.01935607  0.13826041  0.04264807]
-0.35504684 -0.58918824 0.12182276 -0.08989655 0.11020865 -0.1159536 ]
[ 0.37030119  0.33078079  -0.16872267  -0.20069341
                                                  0.20879298 0.56664499
 -0.23145306 -0.0435381 -0.24907449 -0.07950023 0.12254646 0.42566742
[-0.43272085 -0.06544015 0.06977056 -0.00546618 0.25764682 -0.34123006
 -0.00559907 -0.20760989 -0.46191598 -0.31469303 -0.18569166 0.48035396]
 \begin{bmatrix} 0.25453535 & -0.10933362 & 0.21291324 & 0.56050237 & 0.21483493 & -0.06779298 \end{bmatrix} 
  0.09763703 0.07191857 0.45268884 -0.27549158 0.23340206 0.40374303]
[-0.07317678 -0.50270865 \ 0.22497138 -0.09170143 \ 0.25972635 \ 0.31764032
 -0.3199487
              0.11060525 -0.09652795 -0.47118865
                                                  0.12171879 -0.39217625]
0.05246571 - 0.26023979 - 0.24024309 0.61224719 0.41238785 0.14183046]
```

Analizando los resultados obtenidos, encontramos en los valores propios que las primeras componentes explican la mayor parte de la varianza en los datos, pues los números en estas son más grandes. Con los vectores propios nos damos una idea de la contribucipin de las características en cada componente.

3. Calcula la varianza total acumulada en las primeras k componentes principales.



```
Número de componentes seleccionados para explicar al menos el 95% de la varianza: 12

Datos con dimensionalidad reducida:

[[-1.77888507  1.15694121 -1.38614692 ... -0.04030734  0.11049301  0.97667713]

[-1.00387062  2.07118989  0.00775634 ...  0.17665867  1.37635916  -0.65756901]

[-0.91549679  1.39299841 -0.69906772 ...  0.08865889  0.72011277  -0.25474328]

...

[-1.36583781 -0.51739913  1.25030522 ...  0.12111645  0.19597753  0.55198938]
```

```
[-2.36640641 0.70332476 0.89920089 ... -0.60721025 -0.12662937 0.80550052]
[-0.28868597 -1.24045778 1.21771422 ... 0.11538553 -1.44296301 0.20286147]]
```

Con la gráfica podemos observar la curva que muestra cómo la varianza explicada crece con más componentes. Con ella podríamos decir que en el rango de 4-6 componentes es donde tenemos más beneficio y posteriormente se va aplanando. Aunque como vemos en el código, si queremeos explicar un 95% de la varianza tendríamos que utilizar 9 componentes. Así mismo podemos observar los datos ya con la dimensionalidad reducida eligiendo las 9 componentes principales

4. Analizando la forma de calcular la proyección (Y = AV), identifica los coeficientes de cada variable en las primeras componentes principales. Discute lo observado: ¿cuáles son las variables que más contribuyen con cada componente? Compara estos resultados con la matriz de correlaciones del paso 1

Cargas de las variables en las primeras componentes principales:

	Componente 1	Componente 2	Componente 3	Componente 4	\
fixed acidity	0.487883	-0.004173	-0.164829	-0.231098	
volatile acidity	-0.265129	0.338968	-0.227089	0.041858	
citric acid	0.473335	-0.137358	0.100229	-0.056736	
residual sugar	0.139154	0.167736	0.243620	-0.383038	
chlorides	0.197427	0.189788	-0.026608	0.654778	
free sulfur dioxide	-0.045881	0.259483	0.616111	-0.033711	
total sulfur dioxide	0.004067	0.363971	0.540732	-0.028460	
density	0.370301	0.330781	-0.168723	-0.200693	
рН	-0.432721	-0.065440	0.069771	-0.005466	
sulphates	0.254535	-0.109334	0.212913	0.560502	
alcohol	-0.073177	-0.502709	0.224971	-0.091701	
quality	0.112489	-0.473166	0.223369	-0.036669	
	Componente 5	Componente 6	Componente 7	Componente 8	\
fixed acidity	-0.078779	-0.638580	-0.256438	0.182956	
volatile acidity	0.299379	-0.004662	0.377161	-0.155106	
citric acid	-0.120149	0.070037	0.624328	-0.346086	
residual sugar	0.709363	-0.183646	0.088078	0.052237	
chlorides	0.266237	-0.053931	-0.208617	0.003863	
free sulfur dioxide	-0.159413	0.051922	0.237933	0.585389	
total sulfur dioxide	-0.218453	-0.069793	-0.355047	-0.589188	
density	0.208793	0.566645	-0.231453	-0.043538	
рН	0.257647	-0.341230	-0.005599	-0.207610	
sulphates	0.214835	-0.067793	0.097637	0.071919	

alcohol	0.259726	0.317640	-0.319949	0.110605
quality	0.137584	-0.008470	0.052466	-0.260240
	Componente 9	Componente 10	Componente 11	\
fixed acidity	-0.174578	-0.200529	0.307215	
volatile acidity	-0.060223	-0.146126	0.626234	
citric acid	-0.220975	-0.296333	-0.244149	
residual sugar	0.278187	0.170626	-0.283854	
chlorides	-0.419936	0.186923	-0.230547	
free sulfur dioxide	-0.318000	0.019356	0.138260	
total sulfur dioxide	0.121823	-0.089897	0.110209	
density	-0.249074	-0.079500	0.122546	
рН	-0.461916	-0.314693	-0.185692	
sulphates	0.452689	-0.275492	0.233402	
alcohol	-0.096528	-0.471189	0.121719	
quality	-0.240243	0.612247	0.412388	
	Componente 12			
fixed acidity	-0.055531			
volatile acidity	-0.297287			
citric acid	-0.136633			
residual sugar	-0.109311			
chlorides	-0.337337			
free sulfur dioxide	0.042648			
total sulfur dioxide	-0.115954			
density	0.425667			
рН	0.480354			
sulphates	0.403743			
alcohol	-0.392176			
quality	0.141830			

Veamos un pequeño resumen de las variables que más contribuyen en cada componente: Componente 1: fixed acidity (0.487883), citric acid (0.473335) y pH (-0.432721). Componente 2: alcohol (-0.502709), total sulfur dioxide (0.363971) y density (0.330781). Componente 3: free sulfur dioxide (0.616111) y total sulfur dioxide (0.540732). Componente 4: chlorides (0.654778) y sulphates (0.560502). Componente 5: residual sugar (0.709363). Componentes posteriores: Vemos que el impacto es menor a comparación de las otras componentes.

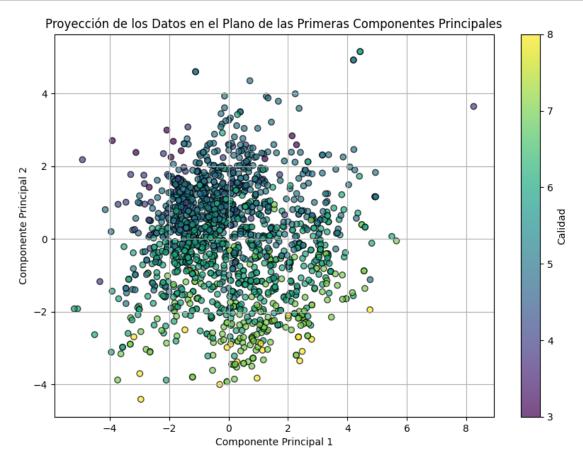
Comparando con la matriz de correlaciones, los componentes principales agrupan variables con correlaciones fuertes para maximizar la varianza. Por ejemplo, la fuerte carga de fixed acidity y citric acid en el Componente 1 refleja su correlación original. Variables como sulphates y chlorides con altas cargas en el Componente 4 también podrían reflejar relaciones significativas.

Las cargas muestran cómo las variables se combinan en cada componente para explicar la varianza y la relación con la matriz de correlaciones confirma que los componentes reflejan las correlaciones originales, transformando el espacio para maximizar la varianza y simplificar el análisis.

5. Grafica los datos en el(los) plano(s) de las primeras componentes principales, las que hayas elegido de acuerdo al criterio del paso 3. Colorea los puntos con sus categorías correspondientes: diagnóstico, calidad o tipo de actividad, respectivamente. Discute: ¿la reducción de

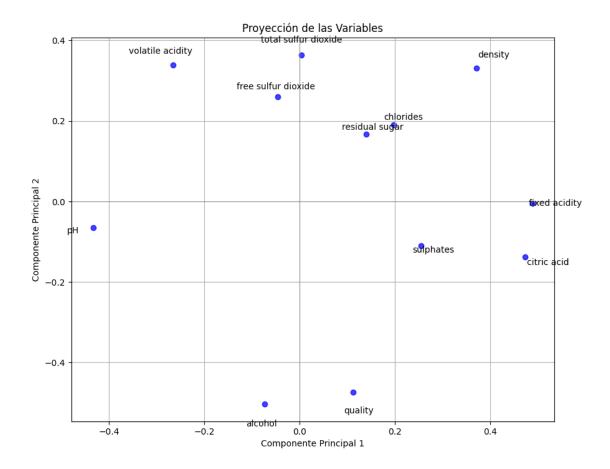
dimensionalidad parece facilitar tareas de clasificación de los datos?

```
[9]: #Solo se usaran las 2 primeras componentes
    df_reduced = pd.DataFrame(reduced_data[:, :2], columns=['Componente 1',__
     df_reduced['Categoría'] = df['quality'] # Cambia 'quality' según la categoría_
     ⇒que desees visualizar
    # Graficar los datos proyectados
    plt.figure(figsize=(10, 7))
    scatter = plt.scatter(df_reduced['Componente 1'], df_reduced['Componente 2'],__
     cmap='viridis', alpha=0.7, edgecolors='k')
    plt.colorbar(scatter, label='Calidad') # Cambia el título de la barra de coloru
     ⇒si usas otra variable
    plt.xlabel('Componente Principal 1')
    plt.ylabel('Componente Principal 2')
    plt.title('Proyección de los Datos en el Plano de las Primeras Componentes
     →Principales')
    plt.grid(True)
    plt.show()
```

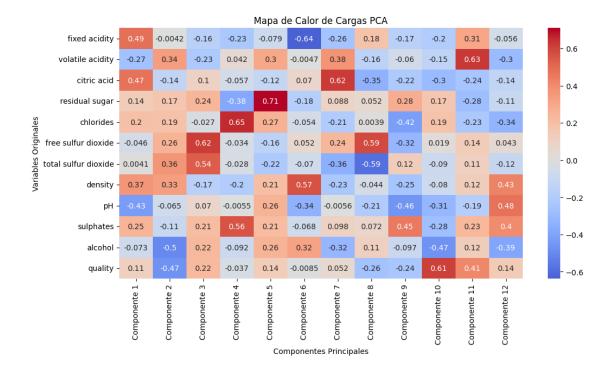


En la gráfica podemos ver los datos en dos componentes principales, mostrando cómo se distribuyen en función de la calidad de acuerdo a sus colores. Podemos decir que existe cierta dispersión, pues de cierto modo se diferencian los colores, sin embargo, no parece haber una clara separación de calidad según estas dos componentes, lo que sugiere una relación compleja.

6. Grafica las variables en el espacio latente: el de sus coeficientes en cada una de las componentes principales. Interpreta.



En la gráfica se observa la proyección de las variables originales en el espacio definido por las dos primeras componentes principales. Las variables "density", "citric acid", y "fixed acidity", tienen una mayor influencia en la variabilidad representada por estas dos componentes ya que se encuentran más alejadas del origen. "Volatile acidity" y "total sulfur dioxide" también muestran contribuciones destacadas. Por el contrario, "alcohol" y "quality" tienen una influencia menor sobre estas dos componentes ya que están más cercanas del origen.



La gráfica muestra cómo las características del vino contribuyen a los componentes principales del análisis PCA. Por ejemplo, residual sugar tiene alta influencia en el Componente 5, mientras que chlorides destaca en el Componente 6. La calidad del vino está más relacionada con los Componentes 9 y 11, lo que sugiere que estos capturan patrones clave asociados con su percepción. Este análisis ayuda a identificar las características más relevantes para explicar la calidad del vino.

0.2 Parte II. Mínimos cuadrados

Regresión generalizada

Dados n puntos (x_i, y_i) , el objetivo es encontrar el polinomio de grado máximo p que minimize la suma de los errores cuadrados:

$$\min \sum_{i=1}^{n} (y_i - f(x_i))^2$$

Discute los casos:

$$f(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_p x^p$$

$$f(x) = a_0 + a_1 \cos(x) + a_2 \cos(2x) + \dots + a_p \cos(px)$$

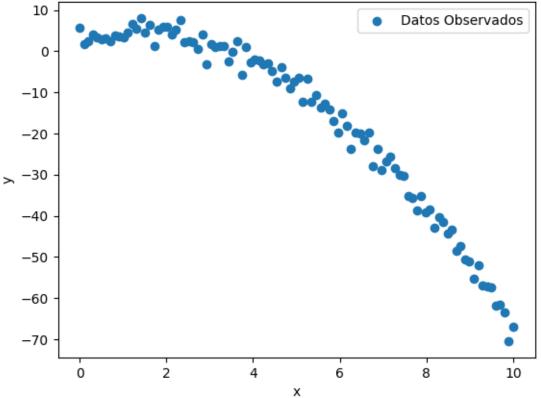
Generamos datos sintéticos con ruido en dos funciones, una que ajuste $f(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots + a_px^p$ y otra $f(x) = a_0 + a_1\cos(x) + a_2\cos(2x) + \cdots + a_p\cos(px)$, las cuales serán: 1. $y = 2 + 3x - x^2$ 2. $y = 2 + 3\cos(x) - \cos(2x)$

```
y = 2 + 3 * x - 1 * x**2
noise = np.random.normal(0, 2, size=n)
y_cosine = 2 + 3 * np.cos(x) + -1 * np.cos(2 * x)
y = y + noise
y_cosine = y_cosine + noise
```

Visualizamos cómo son los datos para ambas funciones

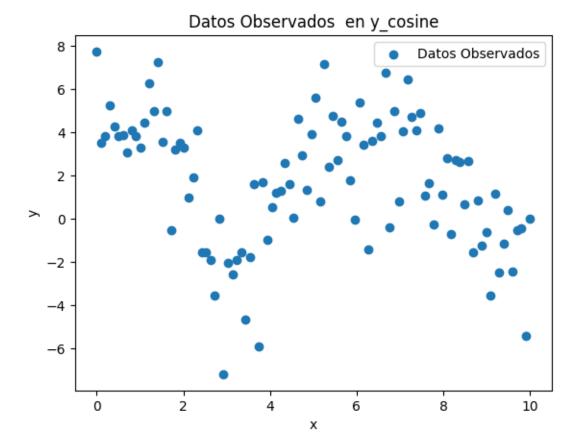
```
[7]: plt.scatter(x, y, label='Datos Observados')
   plt.xlabel('x')
   plt.ylabel('y')
   plt.title('Datos Observados en y')
   plt.legend()
   plt.show()
```

Datos Observados en y



```
[8]: plt.scatter(x, y_cosine, label='Datos Observados')
    plt.xlabel('x')
    plt.ylabel('y')
    plt.title('Datos Observados en y_cosine')
    plt.legend()
```

plt.show()



diseñamos una función que ajuste el polinomio de grado p que minimize la suma de los errores cuadrados dado un conjunto de datos observados $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \ldots, (x_n, y_n)$, el objetivo es encontrar un polinomio de grado p:

$$f(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_p x^p$$

cuyos coeficientes a_0, a_1, \ldots, a_p minimicen el error cuadrático medio, definido como:

$$E = \sum_{i=1}^{n} (y_i - f(x_i))^2$$

Para resolver esto, el problema se formula en términos matriciales: 1. Se construye la matriz de diseño A, donde cada fila corresponde a una evaluación del polinomio en una entrada x_i :

$$A = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^p \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \cdots & x_2^p \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^p \end{bmatrix}$$

Esta matriz tiene dimensión $n \times (p+1)$. 2. Se resuelve el sistema normal asociado al método de mínimos cuadrados:

$$A^T A \mathbf{a} = A^T \mathbf{y}$$

donde: * A^T : la transpuesta de la matriz A, * $\mathbf{a} = [a_0, a_1, \dots, a_p]^T$: el vector de coeficientes que queremos encontrar, * $\mathbf{y} = [y_1, y_2, \dots, y_n]^T$: el vector de valores observados.

3. El sistema normal se resuelve usando la función **np.linalg.solve**, que encuentra **a** al resolver la ecuación:

$$a = (A^T A)^1 A^T y.$$

```
[9]: def polynomial_fit(x, y, p):
         Ajusta un polinomio de grado p a los datos dados y devuelve los valores.
      \rightarrow ajustados y los coeficientes.
         Args:
              x (array-like): Valores independientes.
              y (array-like): Valores dependientes.
             p (int): Grado del polinomio.
         Returns:
              tuple: y_fit (valores ajustados) y coefficients (coeficientes del_{\sqcup}
      \hookrightarrow polinomio).
         11 11 11
         # Inicializar la matriz de diseño A
         A = np.zeros((len(x), p + 1))
         for i in range(len(x)):
             for j in range(p + 1):
                 A[i, j] = x[i] ** j
         # calcular coeficientes del polinomio
         AtA = A.T @ A
         AtY = A.T @ y
         coefficients = np.linalg.solve(AtA, AtY)
         # calcular el valor de y con los coeficientes obtenidos
         def polynomial(x_vals, coeffs):
             y_vals = np.zeros_like(x_vals)
             for j, a_j in enumerate(coeffs):
                 y_vals += a_j * x_vals ** j
             return y_vals
         y_fit = polynomial(x, coefficients)
         return y_fit, coefficients
```

Mientras que para el caso de series coseno siguimos el mismo procedimiento solo que en este caso se ajustará una serie grado p:

$$f(x) = a_0 + a_1 \cos(x) + a_2 \cos(2x) + \dots + a_p \cos(px)$$

y A se representa como:

```
A = \begin{bmatrix} 1 & \cos(1 \cdot x_1) & \cos(2 \cdot x_1) & \cdots & \cos(p \cdot x_1) \\ 1 & \cos(1 \cdot x_2) & \cos(2 \cdot x_2) & \cdots & \cos(p \cdot x_2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \cos(1 \cdot x_n) & \cos(2 \cdot x_n) & \cdots & \cos(p \cdot x_n) \end{bmatrix}
```

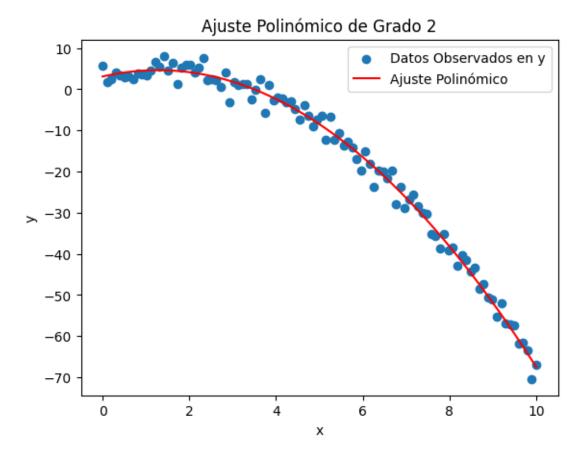
```
[10]: def cosine_series_fit(x, y, p):
          Ajusta una seri coseno de grado p\,a los datos dados y\,devuelve\,los valores_{\sqcup}
       \rightarrowajustados y los coeficientes.
          Args:
               x (array-like): Valores independientes.
               y (array-like): Valores dependientes.
               p (int): Grado de la serie.
          Returns:
               tuple: y\_fit (valores ajustados) y coefficients (coeficientes de la_{\sqcup}
       \hookrightarrow serie).
          # Inicializar la matriz de diseño A
          A = np.zeros((len(x), p + 1))
          for i in range(len(x)):
              for j in range(p + 1):
                   A[i, j] = np.cos(j * x[i])
          # calcular coeficientes del polinomio
          AtA = A.T @ A
          AtY = A.T @ y
          coefficients = np.linalg.solve(AtA, AtY)
          # calcular el valor de y con los coeficientes obtenidos
          def cosine_series(x_vals, coeffs):
              y_vals = np.zeros_like(x_vals)
               y_vals += coeffs[0] # Agregar el término constante a_0
              for j in range(1, len(coeffs)):
                   y_vals += coeffs[j] * np.cos(j * x_vals)
               return y_vals
          y_fit = cosine_series(x, coefficients)
          return y_fit, coefficients
```

Visualizamos el ajuste de diferentes polinomios para los datos de y

```
[11]: p = 2 # grado del polinomio
y_fit_poly, coefficients = polynomial_fit(x,y,p)
print('Coeficientes: ',coefficients)
# SSE para el ajuste polinómico
residuals = y - y_fit_poly
```

```
sse_poly = np.sum(residuals ** 2)
print("Suma de Errores Cuadrados para el Ajuste Polinómico:", sse_poly)
# Graficar los datos y el polinomio ajustado
plt.scatter(x, y, label='Datos Observados en y')
plt.plot(x, y_fit_poly, 'r', label='Ajuste Polinómico')
plt.xlabel('x')
plt.ylabel('y')
plt.title('Ajuste Polinómico de Grado {}'.format(p))
plt.legend()
plt.show()
```

Coeficientes: [3.07924725 2.42421994 -0.94848297] Suma de Errores Cuadrados para el Ajuste Polinómico: 380.72348781172815

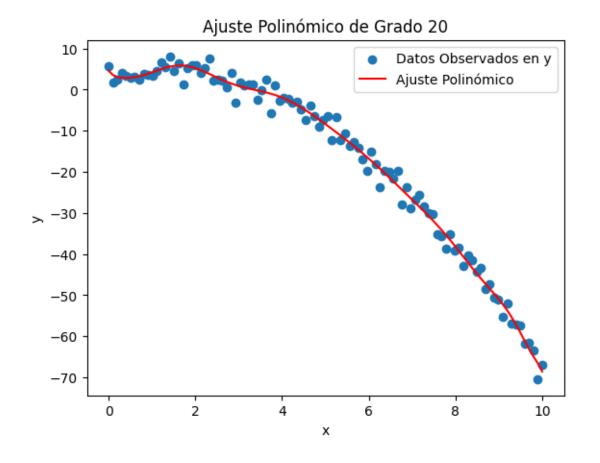


```
[12]: p = 20
y_fit_poly, coefficients = polynomial_fit(x,y,p)
print('Coeficientes: ',coefficients)
# SSE para el ajuste polinómico
residuals = y - y_fit_poly
sse_poly = np.sum(residuals ** 2)
```

```
print("Suma de Errores Cuadrados para el Ajuste Polinómico:", sse_poly)
# Graficar los datos y el polinomio ajustado
plt.scatter(x, y, label='Datos Observados en y')
plt.plot(x, y_fit_poly, 'r', label='Ajuste Polinómico')
plt.xlabel('x')
plt.ylabel('y')
plt.title('Ajuste Polinómico de Grado {}'.format(p))
plt.legend()
plt.show()
```

```
Coeficientes: [ 4.60076896e+00 -1.44759833e+01 4.89457219e+01 -9.47451697e+01 1.18569500e+02 -9.14800011e+01 4.36400603e+01 -1.29930269e+01 2.34149803e+00 -2.17518813e-01 1.19065208e-03 1.52137473e-03 -2.39717946e-05 -1.93377381e-05 1.53786873e-06 5.64489361e-08 -1.80808258e-08 1.97057606e-09 -1.54857647e-10 7.47380692e-12 -1.53489523e-13]
```

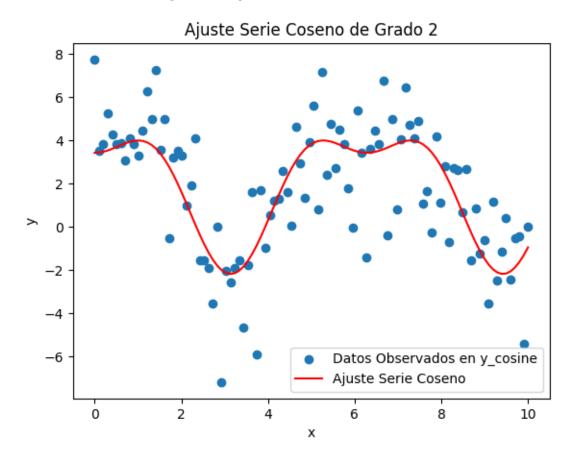
Suma de Errores Cuadrados para el Ajuste Polinómico: 353.17314368733156



Ahora para las series de coseno

```
[13]: p = 2 # grado de la serie
    y_fit_cosine, coefficients = cosine_series_fit(x,y_cosine,p)
    print('Coeficientes: ',coefficients)
# SSE para el ajuste Serie Coseno
    residuals = y_cosine - y_fit_cosine
    sse_cosine = np.sum(residuals ** 2)
    print("Suma de Errores Cuadrados para el Ajuste Serie Coseno:", sse_cosine)
# Graficar los datos y el polinomio ajustado
    plt.scatter(x, y_cosine, label='Datos Observados en y_cosine')
    plt.plot(x, y_fit_cosine, 'r', label='Ajuste Serie Coseno')
    plt.xlabel('x')
    plt.ylabel('y')
    plt.title('Ajuste Serie Coseno de Grado {}'.format(p))
    plt.legend()
    plt.show()
```

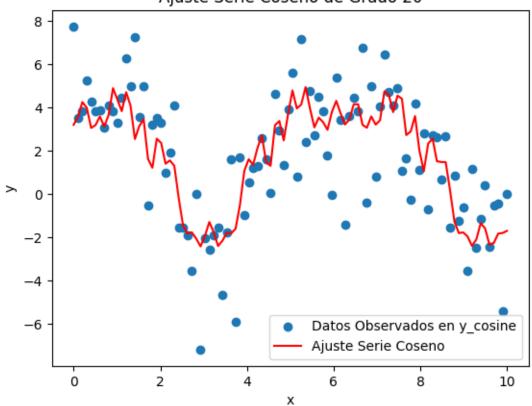
Coeficientes: [1.93215307 2.80411998 -1.31264802] Suma de Errores Cuadrados para el Ajuste Serie Coseno: 392.6763066600376



-0.01395928 -0.06994934 -0.08179421 -0.12863626 0.22096399 -0.35862857 -0.31476303 0.15184386 0.23809057]

Suma de Errores Cuadrados para el Ajuste Serie Coseno: 351.8275022801012

Ajuste Serie Coseno de Grado 20



Observamos que, en ambos casos, la serie se ajusta adecuadamente. Además, al aumentar el grado del polinomio o de la serie, se logra una reducción en la suma de errores cuadráticos.