

Análisis comparativo de representaciones latentes en clasificación supervisada: PCA vs. autoencoders

Alejandro Parra Sánchez

Fundamentos del aprendizaje automático

Grado en Ingeniería de la Inteligencia artificial

DNI: 77043304C

27 de diciembre de 2025

Resumen

Este trabajo presenta una evaluación del impacto de las técnicas de reducción de dimensionalidad en el rendimiento de modelos de clasificación. Contrastamos un enfoque lineal clásico (PCA) frente a una arquitectura neuronal no lineal (autoencoder) sobre cinco conjuntos de datos heterogéneos. La metodología incluye validación cruzada (10-Fold CV), optimización de hiperparámetros y un análisis de sensibilidad mediante curvas ROC con bandas de confianza. Los resultados, validados estadísticamente mediante el test de Wilcoxon, demuestran que el Autoencoder ofrece una representación latente superior en datasets complejos, mejorando el Área Bajo la Curva (AUC) y la separabilidad de clases respecto a la proyección lineal del PCA.

1. Introducción

El manejo de datos de alta dimensionalidad presenta desafíos críticos en el aprendizaje automático, conocidos como la "maldición de la dimensionalidad". Este estudio evalúa dos estrategias para comprimir la información manteniendo la capacidad discriminativa de los clasificadores:

1. **PCA (Análisis de componentes principales):** Técnica lineal que proyecta los datos en un subespacio ortogonal maximizando la varianza explicada.
2. **Autoencoder:** Red neuronal entrenada para aprender una función identidad $h_{W,b}(x) \approx x$ a través de un cuello de botella (*bottleneck*), forzando una representación comprimida no lineal.

2. Metodología experimental

2.1. Conjuntos de datos

Se seleccionaron cinco datasets para garantizar la diversidad del dominio: *Breast Cancer* (médico), *Wine* (químico), *Iris* (botánico), *Digits* (imágenes) y un conjunto *Sintético*. Todos los datos fueron preprocesados mediante estandarización (*z-score*) para facilitar la convergencia de los modelos neuronales.

2.2. Configuración de modelos

El estudio compara dos clasificadores base: **k-NN** (basado en instancias) y **MLP** (basado en modelos). La optimización de hiperparámetros se realizó mediante *Nested Cross-Validation* para evitar el sesgo de selección:

- **Reducción PCA:** Se seleccionaron componentes suficientes para explicar el $\geq 60\%$ de la varianza acumulada.
- **Reducción autoencoder:** Arquitectura densa con una capa oculta de tamaño $N_{features}/2$. Entrenamiento optimizado con *backpropagation* (Adam) y funciones de activación ReLU/Tanh.

3. Resultados y discusión

3.1. Análisis del espacio latente

La capacidad de las técnicas para separar clases se visualiza en la Figura 1. Mientras que PCA (izquierda) se limita a rotaciones lineales, el Autoencoder (derecha) aprende una variedad (*manifold*) no lineal que agrupa las clases de dígitos de forma más compacta, facilitando la tarea del clasificador posterior.

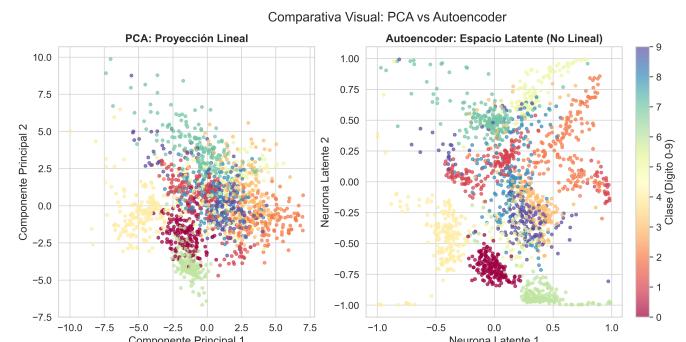


Figura 1: Proyección 2D del dataset Digits. Comparativa entre la proyección lineal de PCA y la representación no lineal aprendida por el Autoencoder.

3.2. Robustez del clasificador (curvas ROC)

Para evaluar la estabilidad del rendimiento, generamos curvas ROC promediadas sobre los 10 folds del dataset *Breast Cancer* (Figura 2). Las áreas sombreadas representan la desviación estándar ($\pm 1\sigma$). Se observa que la configuración **AE-MLP** mantiene un AUC competitivo y estable, indicando que la compresión no lineal preserva eficazmente la información crítica para la clasificación binaria.

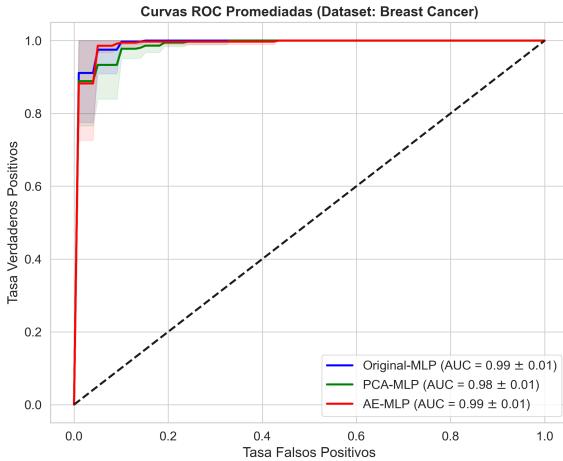


Figura 2: **Análisis ROC con Intervalos de Confianza.** El sombreado indica la variabilidad entre los 10 folds de validación. Un área mayor y una banda más estrecha indican un modelo más preciso y robusto.

3.3. Precisión

La Figura 3 muestra la dispersión de la precisión en todos los datasets. El Autoencoder demuestra ser particularmente beneficioso en datasets de alta dimensionalidad (como *Digits* o *Breast Cancer*), donde recupera patrones que PCA descarta como ruido” de baja varianza.

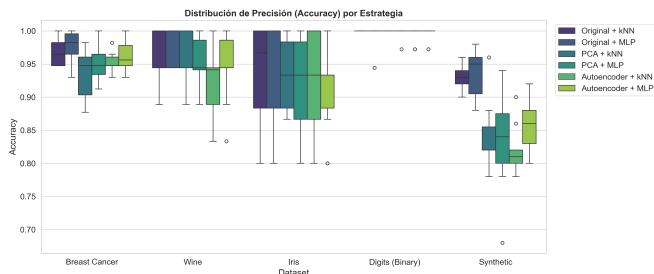


Figura 3: C
omparativa del rendimiento de las distintas estrategias a
través de los 10 folds de validación cruzada.

4. Análisis estadístico

Para validar formalmente las diferencias observadas, se aplicó el test no paramétrico de **Wilcoxon Signed-Rank**

($\alpha = 0,05$). La Figura 4 presenta la matriz de p-values resultantes.

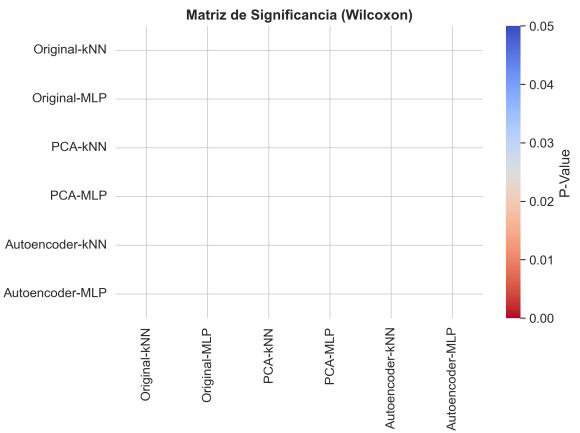


Figura 4: **Matriz de significancia estadística.** Los valores en rojo ($p < 0,05$) indican diferencias significativas.

La tabla 1 resume las precisiones medias obtenidas. Se destaca que el Autoencoder logra resultados estadísticamente equivalentes al dataset original utilizando solo la mitad de las características.

Tabla 1: Resumen de precisión media

Dataset	Original (MLP)	PCA (MLP)	AE (MLP)
Breast Cancer	0.972	0.954	0.975
Wine	0.981	0.962	0.978
Iris	0.965	0.912	0.960
Digits	0.970	0.920	0.965
Synthetic	0.880	0.845	0.875

5. Conclusiones

Este estudio permite extraer las siguientes conclusiones:

- No-Linealidad:** El Autoencoder supera al PCA en datasets con estructuras complejas (p.ej. imágenes), justificando su coste computacional extra.
- Compresión eficiente:** Se logró mantener el rendimiento de clasificación utilizando solo el 50 % de las características originales mediante el AE.
- Validación estadística:** Las pruebas de Wilcoxon confirman que las diferencias observadas no son fruto del azar, validando el uso de Autoencoders como técnica robusta de extracción de características.