Principal Components Analysis

Descripción del Dataset

El dataset Breast Cancer Wisconsin (Diagnostic) pertenece al área médica y se utiliza para la detección de cáncer de mama.

El objetivo del dataset es clasificar tumores como:

- 0 = Maligno
- 1 = Benigno

Los datos fueron obtenidos a partir de imágenes digitalizadas de muestras tomadas mediante biopsia (Fine Needle Aspirate).

El dataset contiene 30 variables predictoras numéricas. Estas variables describen características de las células, como:

- Radio
- Textura
- Perímetro
- Área
- Suavidad
- Compacidad
- Concavidad
- Simetría
- Dimensión fractal

Cada una de estas características se calcula en tres versiones:

- Promedio (mean)
- Error estándar (se)
- Peor valor observado (worst)

En total, el dataset contiene 569 observaciones.

In [5]:
```
import pandas as pd

df = pd.read_csv("data.csv")
df.head()
```

Out[5]:

	id	diagnosis	radius_mean	texture_mean	perimeter_mean	area_mean	smoothness_mean	compactness_mean	concavity_mean	concave points_mean	...	texture_worst	perimeter_worst	area_worst	smoothness_worst	compactness_worst	concavity_wo
0	842302	M	17.99	10.38	122.80	1001.0	0.11840	0.27760	0.3001	0.14710	...	17.33	184.60	2019.0	0.1622	0.6656	0.71
1	842517	M	20.57	17.77	132.90	1326.0	0.08474	0.07864	0.0869	0.07017	...	23.41	158.80	1956.0	0.1238	0.1866	0.24
2	84300903	M	19.69	21.25	130.00	1203.0	0.10960	0.15990	0.1974	0.12790	...	25.53	152.50	1709.0	0.1444	0.4245	0.45
3	84348301	M	11.42	20.38	77.58	386.1	0.14250	0.28390	0.2414	0.10520	...	26.50	98.87	567.7	0.2098	0.8663	0.68
4	84358402	M	20.29	14.34	135.10	1297.0	0.10030	0.13280	0.1980	0.10430	...	16.67	152.20	1575.0	0.1374	0.2050	0.40

5 rows × 33 columns

,,

Limpieza de datos

El conjunto de datos contiene una columna de identificación ("id") que no proporciona información predictiva. Además, el conjunto de datos incluye una columna vacía ("Sin nombre: 32") que solo contiene valores faltantes.

Estas columnas se eliminarán, ya que no contribuyen a la tarea de clasificación.

In [6]:
```
df.columns

df = df.drop(columns=["id", "Unnamed: 32"])

df.head()
```

Out[6]:

	diagnosis	radius_mean	texture_mean	perimeter_mean	area_mean	smoothness_mean	compactness_mean	concavity_mean	concave points_mean	symmetry_mean	...	radius_worst	texture_worst	perimeter_worst	area_worst	smoothness_worst	compactness_
0	M	17.99	10.38	122.80	1001.0	0.11840	0.27760	0.3001	0.14710	0.2419	...	25.38	17.33	184.60	2019.0	0.1622	0
1	M	20.57	17.77	132.90	1326.0	0.08474	0.07864	0.0869	0.07017	0.1812	...	24.99	23.41	158.80	1956.0	0.1238	0
2	M	19.69	21.25	130.00	1203.0	0.10960	0.15990	0.1974	0.12790	0.2069	...	23.57	25.53	152.50	1709.0	0.1444	0
3	M	11.42	20.38	77.58	386.1	0.14250	0.28390	0.2414	0.10520	0.2597	...	14.91	26.50	98.87	567.7	0.2098	0
4	M	20.29	14.34	135.10	1297.0	0.10030	0.13280	0.1980	0.10430	0.1809	...	22.54	16.67	152.20	1575.0	0.1374	0

5 rows × 31 columns

Ahora verificamos si el conjunto de datos contiene valores faltantes.

In [7]:
```
df.isnull().sum()
```

Out[7]:

	0
diagnosis	0
radius_mean	0
texture_mean	0
perimeter_mean	0
area_mean	0
smoothness_mean	0
compactness_mean	0
concavity_mean	0
concave points_mean	0
symmetry_mean	0
fractal_dimension_mean	0
radius_se	0
texture_se	0
perimeter_se	0
area_se	0
smoothness_se	0
compactness_se	0
concavity_se	0
concave points_se	0
symmetry_se	0
fractal_dimension_se	0
radius_worst	0
texture_worst	0
perimeter_worst	0
area_worst	0
smoothness_worst	0
compactness_worst	0
concavity_worst	0
concave points_worst	0
symmetry_worst	0
fractal_dimension_worst	0

dtype: int64

La variable objetivo "diagnóstico" es categórica (M = Maligno, B = Benigno). Se codificará como:

M → 0 B → 1

Esta codificación convierte el problema en una tarea de clasificación binaria.

In [8]:
```
df["diagnosis"] = df["diagnosis"].map({"M": 0, "B": 1})

df.head()
```

Out[8]:

	diagnosis	radius_mean	texture_mean	perimeter_mean	area_mean	smoothness_mean	compactness_mean	concavity_mean	concave points_mean	symmetry_mean	...	radius_worst	texture_worst	perimeter_worst	area_worst	smoothness_worst	compactness_
0	0	17.99	10.38	122.80	1001.0	0.11840	0.27760	0.3001	0.14710	0.2419	...	25.38	17.33	184.60	2019.0	0.1622	0
1	0	20.57	17.77	132.90	1326.0	0.08474	0.07864	0.0869	0.07017	0.1812	...	24.99	23.41	158.80	1956.0	0.1238	0
2	0	19.69	21.25	130.00	1203.0	0.10960	0.15990	0.1974	0.12790	0.2069	...	23.57	25.53	152.50	1709.0	0.1444	0
3	0	11.42	20.38	77.58	386.1	0.14250	0.28390	0.2414	0.10520	0.2597	...	14.91	26.50	98.87	567.7	0.2098	0
4	0	20.29	14.34	135.10	1297.0	0.10030	0.13280	0.1980	0.10430	0.1809	...	22.54	16.67	152.20	1575.0	0.1374	0

5 rows × 31 columns

Análisis de datos

Es importante conocer cuántos casos son benignos y cuántos malignos, ya que esto nos permite entender si el dataset está balanceado.

In [9]:
```
df["diagnosis"].value_counts()
```

Out[9]:

diagnosis	count
1	357
0	212

dtype: int64

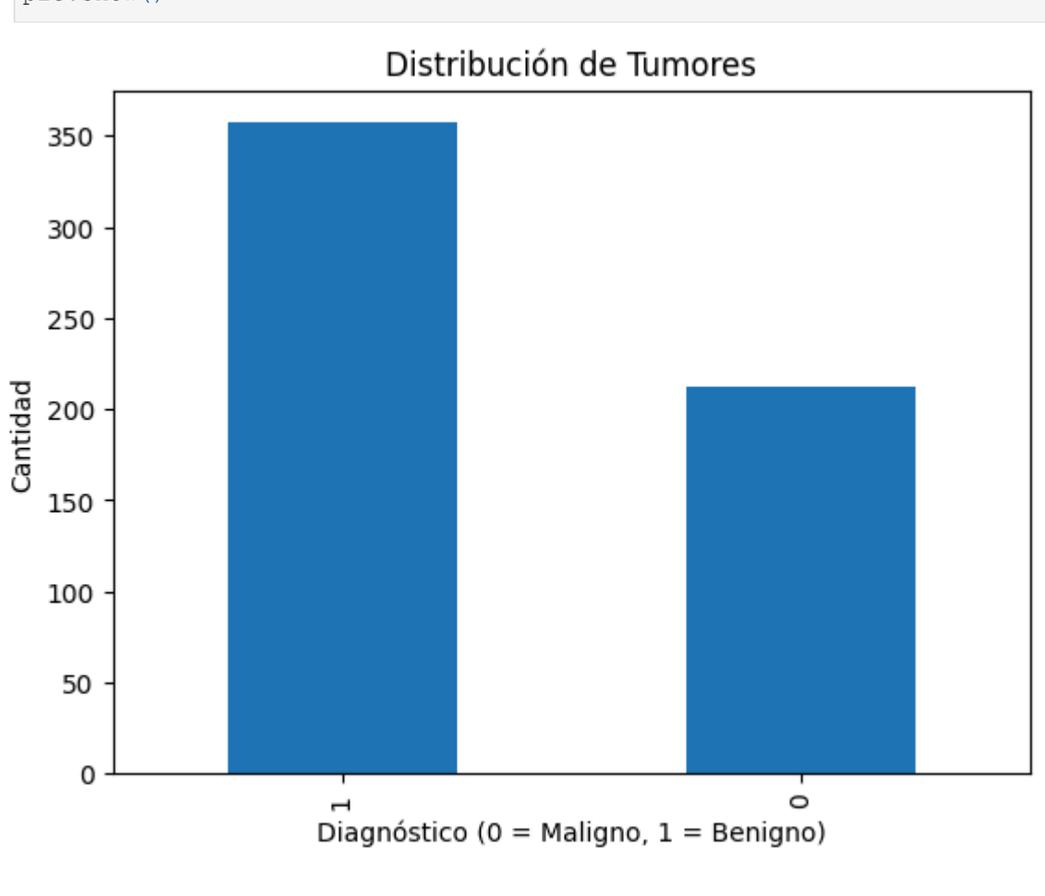
Se observa que el dataset contiene más casos benignos que malignos.

Sin embargo, la diferencia no es extremadamente grande, por lo que el dataset puede considerarse razonablemente balanceado.

Ahora visualizamos la distribución de la variable objetivo mediante una gráfica.

In [10]:
```
import matplotlib.pyplot as plt

df["diagnosis"].value_counts().plot(kind="bar")
plt.title("Distribución de Tumores")
plt.xlabel("Diagnóstico (0 = Maligno, 1 = Benigno)")
plt.ylabel("Cantidad")
plt.show()
```



A continuación observamos estadísticas descriptivas de las variables predictoras.

Esto nos permite entender la escala y variabilidad de los datos.

In [11]:
```
df.describe()
```

Out[11]:

	diagnosis	radius_mean	texture_mean	perimeter_mean	area_mean	smoothness_mean	compactness_mean	concavity_mean	concave points_mean	symmetry_mean	...	radius_worst	texture_worst	perimeter_worst	area_worst	smoothness_worst	con
count	569.000000	569.000000	569.000000	569.000000	569.000000	569.000000	569.000000	569.000000	569.000000	569.000000	...	569.000000	569.000000	569.000000	569.000000	569.000000	
mean	0.627417	14.127292	19.289649	91.969033	654.889104	0.096360	0.104341	0.088799	0.048919	0.181162	...	16.269190	25.677223	107.261213	880.583128	0.132369	
std	0.483918	3.524049	4.301036	24.298981	351.914129	0.014064	0.052813	0.079720	0.038803	0.027414	...	4.833242	6.146258	33.602542	569.356993	0.022832	
min	0.000000	6.981000	9.710000	43.790000	143.500000	0.052630	0.019380	0.000000	0.000000	0.106000	...	7.930000	12.020000	50.410000	185.200000	0.071170	
25%	0.000000	11.700000	16.170000	75.170000	420.300000	0.086370	0.064920	0.029560	0.020310	0.161900	...	13.010000	21.080000	84.110000	515.300000	0.116600	
50%	1.000000	13.370000	18.840000	86.240000	551.100000	0.095870	0.092630	0.061540	0.033500	0.179200	...	14.970000	25.410000	97.660000	686.500000	0.131300	
75%	1.000000	15.780000	21.800000	104.100000	782.700000	0.105300	0.130400	0.130700	0.074000	0.195700	...	18.790000	29.720000	125.400000	1084.000000	0.146000	
max	1.000000	28.110000	39.280000	188.500000	2501.000000	0.163400	0.345400	0.426800	0.201200	0.304000	...	36.040000	49.540000	251.200000	4254.000000	0.222600	

8 rows × 31 columns

Se observa que las variables tienen escalas muy diferentes.

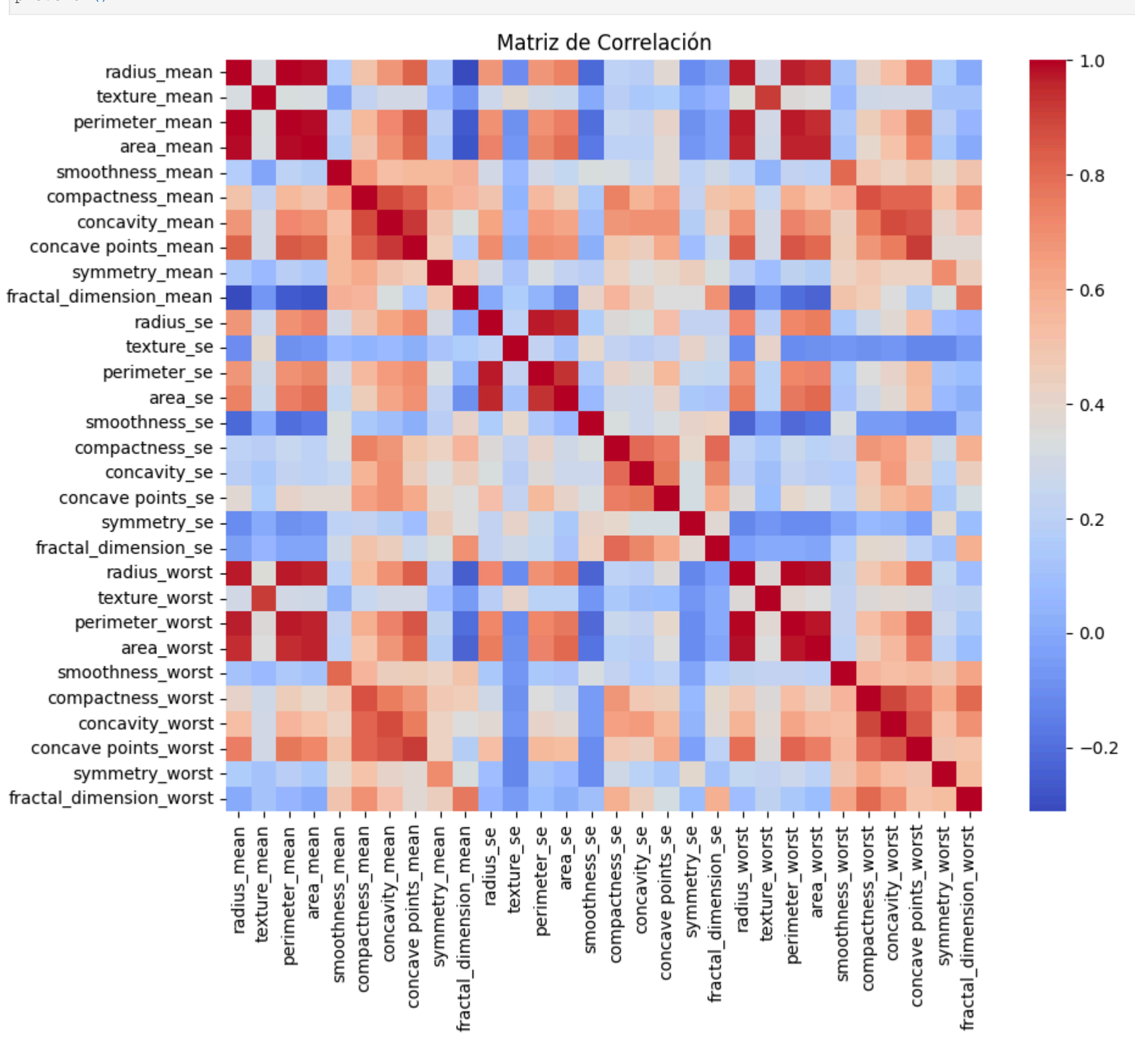
Por ejemplo, algunas variables como "area_mean" tienen valores mucho mayores que otras como "smoothness_mean".

Es necesario estandarizar los datos antes de aplicar PCA, ya que PCA es sensible a la escala.

Ahora analizamos la correlación entre variables.

In [12]:
```
import seaborn as sns

plt.figure(figsize=(10,8))
sns.heatmap(df.drop("diagnosis", axis=1).corr(), cmap="coolwarm")
plt.title("Matriz de Correlación")
plt.show()
```



Se observan correlaciones fuertes entre varias variables.

Por ejemplo, variables relacionadas con área, perímetro y radio presentan alta correlación.

Esto indica que existe redundancia en el dataset.

Estandarización de los datos

Es necesario estandarizar las variables predictoras.

Si una variable tiene valores mucho más grandes que otras, puede dominar el análisis y generar resultados incorrectos.

Por esta razón, transformamos cada variable para que tenga:

- Media igual a 0
- Desviación estándar igual a 1

In [13]:
```
from sklearn.preprocessing import StandardScaler

X = df.drop("diagnosis", axis=1) # Variables predictoras y variable objetivo
y = df["diagnosis"]

scaler = StandardScaler() # Estandarización
X_scaled = scaler.fit_transform(X)

X_scaled = pd.DataFrame(X_scaled, columns=X.columns)

X_scaled.head()
```

Out[13]:

	radius_mean	texture_mean	perimeter_mean	area_mean	smoothness_mean	compactness_mean	concavity_mean	concave points_mean	symmetry_mean	fractal_dimension_mean	...	radius_worst	texture_worst	perimeter_worst	area_worst	smoothness_worst
0	1.097064	-2.073335	1.269934	0.984375	1.568466	3.283515	2.652874	2.532475	2.217515	2.255747	...	1.886690	-1.359293	2.303601	2.001237	1.307686
1	1.829821	-0.353632	1.685955	1.908708	-0.826962	-0.487072	-0.023846	0.548144	0.001392	-0.868652	...	1.805927	-0.369203	1.535126	1.890489	-0.375612
2	1.579888	0.456187	1.566503	1.558884	0.942210	1.052926	1.363478	2.037231	0.939685	-0.398008	...	1.511870	-0.023974	1.347475	1.456285	0.527407
3	-0.768909	0.253732	-0.592687	-0.764464	3.283553	3.402909	1.915897	1.451707	2.867383	4.910919	...	-0.281464	0.133984	-0.249939	-0.550021	3.394275
4	1.750297	-1.151816	1.776573	1.826229	0.280372	0.539340	1.371011	1.428493	-0.009560	-0.562450	...	1.298575	-1.466770	1.338539	1.220724	0.220556

5 rows × 30 columns

Después de la estandarización, todas las variables tienen media cercana a 0 y desviación estándar igual a 1.

Esto asegura que ninguna variable tenga mayor influencia simplemente por tener valores más grandes.

Matriz de covarianza

Valores positivos indican que dos variables aumentan juntas. Valores negativos indican que cuando una aumenta, la otra disminuye.

In [14]:
```
import numpy as np

cov_matrix = np.cov(X_scaled.T)

cov_matrix[:5, :5]
```

Out[14]:
```
array([[ 1.00176056,  0.32435193,  0.99961207,  0.98909547,  0.17088151],
       [ 0.32435193,  1.00176056,  0.33011322,  0.32165099, -0.02342969],
       [ 0.99961207,  0.33011322,  1.00176056,  0.98824361,  0.20764309],
       [ 0.98909547,  0.32165099,  0.98824361,  1.00176056,  0.17734005],
       [ 0.17088151, -0.02342969,  0.20764309,  0.17734005,  1.00176056]])
```

La matriz de covarianza muestra cómo se relacionan las variables entre sí.

Se observan valores altos cercanos a 1, lo que indica que varias variables están fuertemente relacionadas.

Esto significa que existe redundancia en el dataset.

Por esta razón, PCA es útil, ya que puede reducir el número de variables sin perder demasiada información.

Eigenvalores y Eigenvectores

Los eigenvectores representan las nuevas direcciones del espacio. Estas direcciones se llaman componentes principales.

Los eigenvalores indican cuánta varianza explica cada componente principal.

El componente con mayor eigenvalor será el componente principal número 1 (PC1).

In [15]:
```
eigenvalues, eigenvectors = np.linalg.eig(cov_matrix)

eigenvalues[:10]
```

Out[15]:
```
array([13.30499079,  5.7013746 ,  2.82291016,  1.98412752,  1.65163324,
        1.20948224,  0.67640888,  0.47745625,  0.41762878,  0.35131087])
```

Los eigenvalores indican cuánta varianza explica cada componente principal.

El primer eigenvalor (13.30) es mucho mayor que los demás, lo que significa que el primer componente principal captura gran parte de la información del dataset.

Los valores disminuyen progresivamente, lo que indica que los primeros componentes son los más importantes.

Esto sugiere que podemos reducir dimensiones manteniendo solo los primeros componentes principales.

Porcentaje de varianza explicada

Cada eigenvalor representa la cantidad de varianza capturada por un componente principal.

Para determinar cuántos componentes conservar, calculamos el porcentaje de varianza explicada por cada componente.

In [16]:
```
explained_variance = eigenvalues / sum(eigenvalues) # Porcentaje de varianza

explained_variance[:10]
```

Out[16]:
```
array([0.44272026, 0.18971182, 0.09393163, 0.06602135, 0.05495768,
       0.04024522, 0.02250734, 0.01588724, 0.01389649, 0.01168978])
```

El primer componente principal explica aproximadamente 44% de la varianza total del dataset.

El segundo componente explica alrededor de 19%.

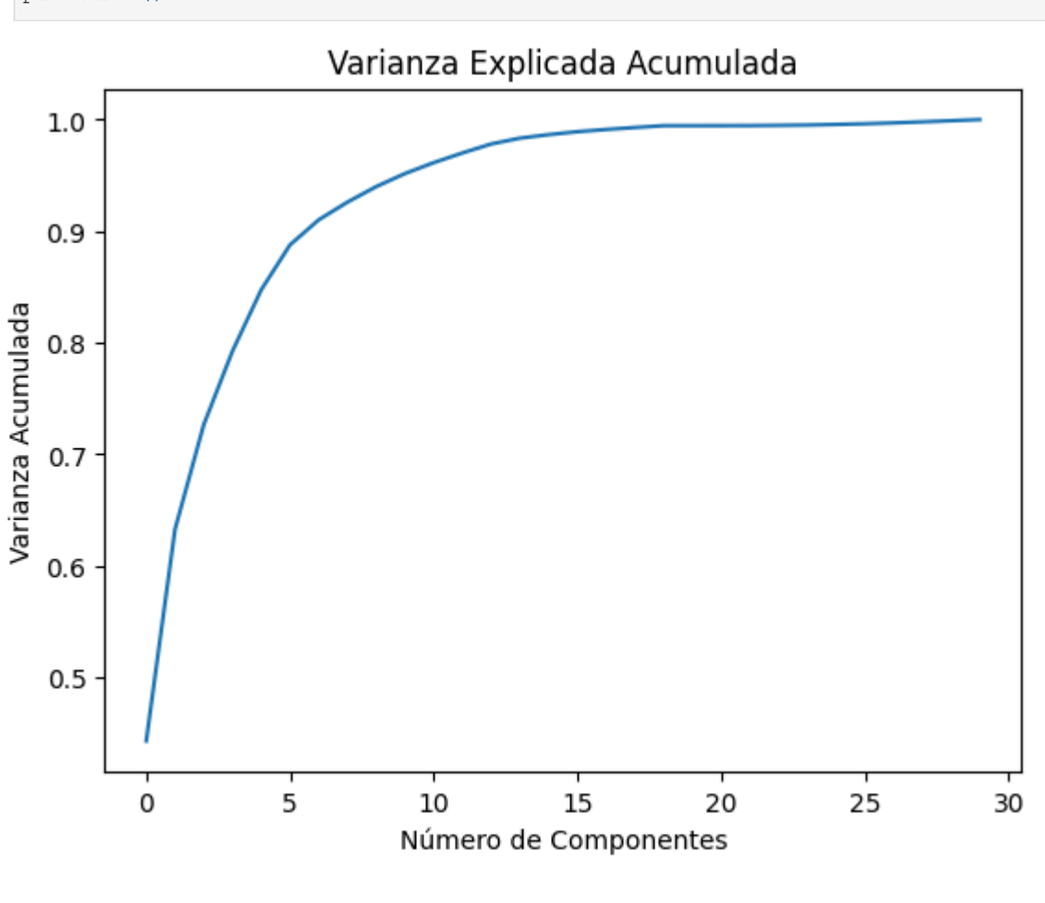
Esto significa que solo los dos primeros componentes ya explican más del 60% de la información total.

Los siguientes componentes explican cada vez menos varianza, lo que indica que los primeros son los más importantes.

Ahora calculamos la varianza acumulada. Esto nos permitirá visualizar cuántos componentes son necesarios para conservar la mayor parte de la información.

In [17]:
```
cumulative_variance = np.cumsum(explained_variance)

plt.plot(cumulative_variance)
plt.xlabel("Número de Componentes")
plt.ylabel("Varianza Acumulada")
plt.title("Varianza Explicada Acumulada")
plt.show()
```



La gráfica de varianza acumulada muestra que:

- Con 2 componentes se explica más del 60% de la información.
- Con 5 componentes se alcanza aproximadamente el 89%.
- Con 6 a 8 componentes se supera el 90% de varianza explicada.

Esto indica que no es necesario conservar las 30 variables originales. Podemos reducir el dataset a aproximadamente 6 u 8 componentes sin perder demasiada información.

Visualización con los primeros 2 componentes principales

Ahora aplicamos PCA conservando únicamente los primeros 2 componentes.

Esto nos permitirá visualizar los datos en un plano bidimensional y observar si existe separación entre tumores benignos y malignos.

In [18]:
```
from sklearn.decomposition import PCA

pca_2 = PCA(n_components=2) # PCA con 2 componentes
X_pca_2 = pca_2.fit_transform(X_scaled)

df_pca_2 = pd.DataFrame(X_pca_2, columns=["PC1", "PC2"])
df_pca_2["diagnosis"] = y.values

df_pca_2.head()
```

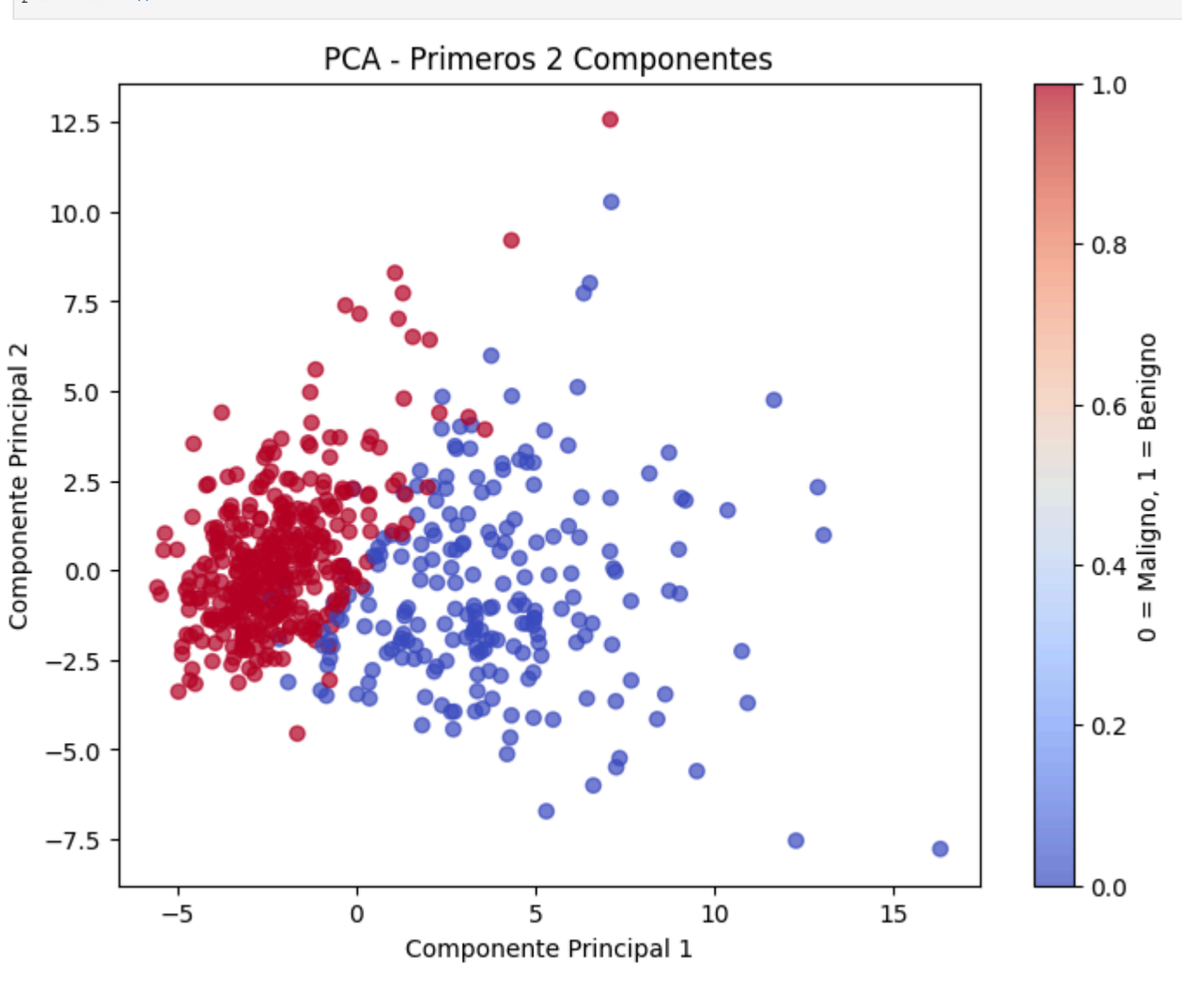
Out[18]:

	PC1	PC2	diagnosis
0	9.192837	1.948583	0
1	2.387802	-3.768172	0
2	5.733896	-1.075174	0
3	7.122953	10.275589	0
4	3.935302	-1.948072	0

In [19]:
```
plt.figure(figsize=(8,6))

plt.scatter(
    df_pca_2["PC1"],
    df_pca_2["PC2"],
    c=df_pca_2["diagnosis"],
    cmap="coolwarm",
    alpha=0.7
)

plt.xlabel("Componente Principal 1")
plt.ylabel("Componente Principal 2")
plt.title("PCA - Primeros 2 Componentes")
plt.colorbar(label="0 = Maligno, 1 = Benigno")
plt.show()
```



En la gráfica se muestran los datos proyectados en los dos primeros componentes principales.

Se observa una separación bastante clara entre los tumores malignos (0) y benignos (1).

La mayoría de los tumores malignos se agrupan hacia un lado del gráfico, mientras que los tumores benignos tienden a concentrarse en otra región.

Aunque existe un pequeño traslape entre ambas clases, la separación general es evidente.

Esto indica que los primeros dos componentes principales capturan información importante para distinguir entre tumores malignos y benignos, incluso reduciendo el dataset de 30 variables a solo 2 dimensiones.

Visualización con los primeros 3 componentes principales

Ahora aplicamos PCA conservando los primeros 3 componentes principales.

Esto nos permitirá observar la estructura del dataset en un espacio tridimensional y analizar si la separación entre tumores malignos y benignos mejora.

In [20]:
```
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D

pca_3 = PCA(n_components=3) # Aplicamos PCA con 3 componentes
X_pca_3 = pca_3.fit_transform(X_scaled)

df_pca_3 = pd.DataFrame(X_pca_3, columns=["PC1", "PC2", "PC3"])
df_pca_3["diagnosis"] = y.values

df_pca_3.head()
```

Out[20]:

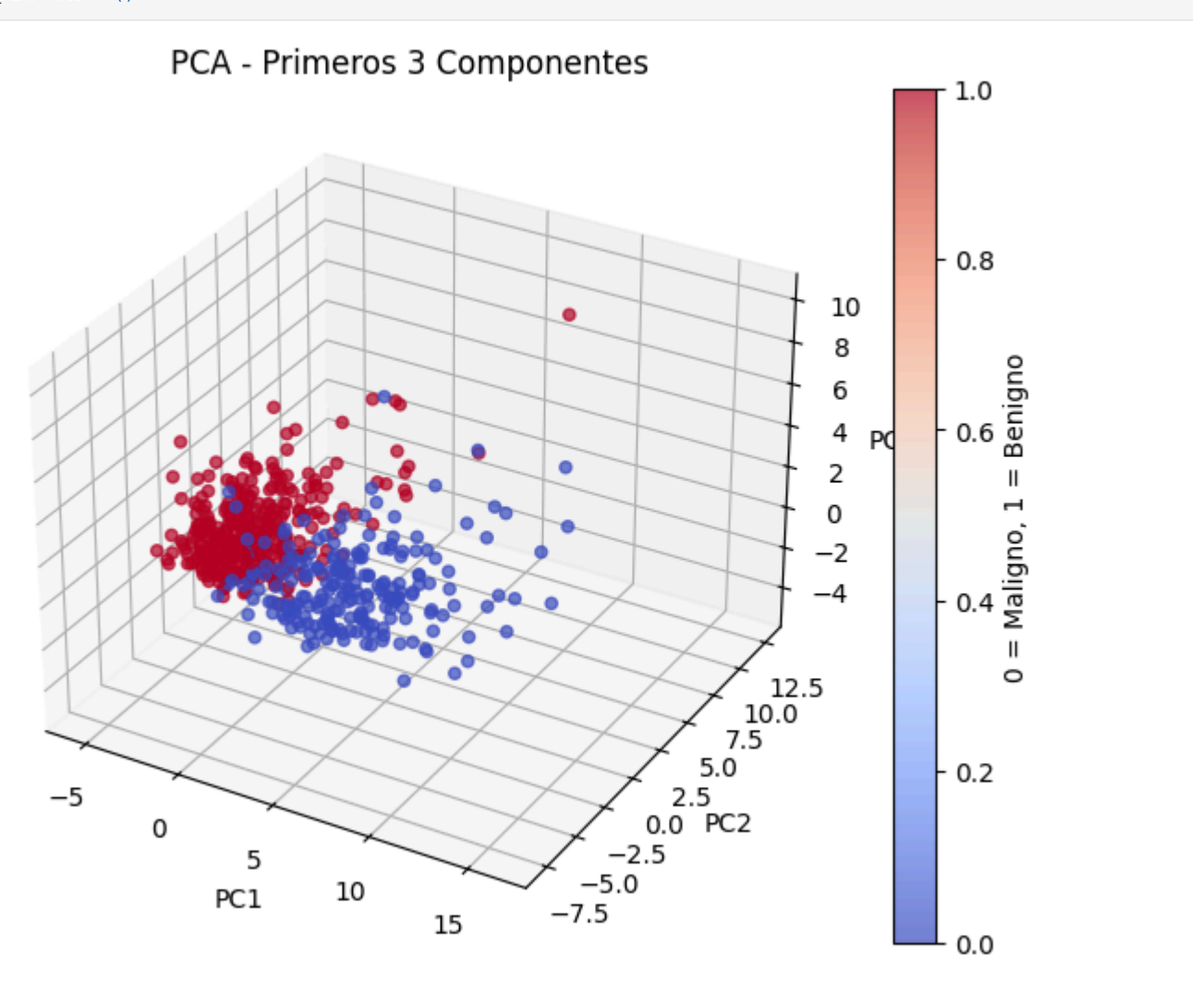
	PC1	PC2	PC3	diagnosis
0	9.192837	1.948583	-1.123166	0
1	2.387802	-3.768172	-0.529293	0
2	5.733896	-1.075174	-0.551748	0
3	7.122953	10.275589	-3.232790	0
4	3.935302	-1.948072	1.389767	0

In [21]:
```
fig = plt.figure(figsize=(8,6))
ax = fig.add_subplot(111, projection='3d')

scatter = ax.scatter(
    df_pca_3["PC1"],
    df_pca_3["PC2"],
    df_pca_3["PC3"],
    c=df_pca_3["diagnosis"],
    cmap="coolwarm",
    alpha=0.7
)

ax.set_xlabel("PC1")
ax.set_ylabel("PC2")
ax.set_zlabel("PC3")
ax.set_title("PCA - Primeros 3 Componentes")

fig.colorbar(scatter, label="0 = Maligno, 1 = Benigno")
plt.show()
```



La gráfica tridimensional muestra los datos proyectados sobre los tres primeros componentes principales.

Se observa una separación más clara entre tumores malignos (0) y benignos (1) en comparación con la gráfica en 2D.

Aunque todavía existe un pequeño traslape, la estructura general del dataset se mantiene bien definida.

Esto demuestra que los primeros tres componentes principales capturan la mayor parte de la información relevante del dataset, permitiendo reducir la dimensionalidad sin perder estructura importante.

Conclusiones

En este trabajo se aplicó el Análisis de Componentes Principales (PCA) al dataset Breast Cancer Wisconsin obtenido de Kaggle.

El análisis exploratorio mostró que el dataset contiene variables altamente correlacionadas, lo que genera redundancia en la información.

Al aplicar PCA, se observó que:

- El primer componente principal explica aproximadamente 44% de la varianza.
- Los primeros 2 componentes explican más del 60%.
- Con 6 a 8 componentes se supera el 90% de varianza explicada.

Esto demuestra que es posible reducir significativamente la dimensionalidad del dataset sin perder la mayor parte de la información.

Las visualizaciones en 2D y 3D mostraron una separación clara entre tumores malignos y benignos, lo que indica que los primeros componentes principales conservan información relevante para la clasificación.

Por lo tanto, PCA es una técnica efectiva para este dataset, ya que reduce la complejidad del modelo, disminuye redundancia y mantiene la estructura del problema.

El espacio reducido de características es adecuado para ser utilizado posteriormente en arquitecturas de redes neuronales para tareas de clasificación.

Dataset Source:

This dataset was obtained from Kaggle: Breast Cancer Wisconsin (Diagnostic) Dataset https://www.kaggle.com/datasets/uciml/breast-cancer-wisconsin-data