Proyecto de Aplicación:

Análisis de Componentes Principales

Anthony Javier Sanchez Romero No. Cuenta 20181900484 Andrew Sebastian Castejón Rodriguez No. Cuenta 20191000729 Centro de Innovación en Cómputo Científico Universidad Nacional Autónoma de Honduras

Curso: Metódos Lineales - Profesor: Lic. Devis Alvarado

CONTENTS

Cálci	ılo de las c	omponentes principales		
II-A	Proceso	extracción de loadings		
II-B	Proporci	ión de varianza		
II-C	Número	óptimo de PC		
II-D	Método	Método para la solución del Problema		
	II-D1	Descripción de los experimentos		
	II-D2	Resultados		

LIST OF FIGURES

Abstract

This document presents the method to perform a principal component analysis on a set of variables in order to optimize information.

I. Introducción

[3] Principal Component Analysis (PCA) es un método estadístico que permite simplificar la complejidad de espacios muestrales con muchas dimensiones a la vez que conserva su información. Supóngase que existe una muestra con n individuos cada uno con p variables (X_1, X_2, \ldots, X_p) , es decir, el espacio muestral tiene p dimensiones. PCA permite encontrar un número de factores subyacentes (z < p) que explican aproximadamente lo mismo que las p variables originales. Donde antes se necesitaban p valores para caracterizar a cada individuo, ahora bastan p valores. Cada una de estas p nuevas variables recibe el nombre de componente principal.

Principal Component Analysis pertenece a la familia de técnicas conocida como unsupervised learning. Los métodos de [4]supervised learning tienen el objetivo de predecir una variable respuesta Y a partir de una serie de predictores. Para ello, se dispone de p características (X_1, X_2, \ldots, X_p) y de la variable respuesta Y medidas en n observaciones. En el caso de unsupervised learning, la variable respuesta Y no se tiene en cuenta ya que el objetivo no es predecir Y sino extraer información empleando los predictores, por ejemplo, para identificar subgrupos. El principal problema al que se enfrentan los métodos de unsupervised learning es la dificultad para validar los resultados dado que no se dispone de una variable respuesta que permita contrastarlos.

El método de **PCA** permite por lo tanto "condensar" la información aportada por múltiples variables en solo unas pocas componentes. Esto lo convierte en un método muy útil de aplicar previa utilización de otras técnicas estadísticas tales como regresión, *clustering*... Aun así no hay que olvidar que sigue siendo necesario disponer del valor de las variables originales para calcular las componentes.

1

II. CÁLCULO DE LAS COMPONENTES PRINCIPALES

Es importante resaltar el hecho de que el concepto de mayor información se relaciona con el de mayor variabilidad o varianza. Cuanto mayor sea la variabilidad de los datos (varianza) se considera que existe mayor información, lo cual está relacionado con el concepto de entropía.

Se considera una serie de variables $X=(x_1,x_2,...,x_p)$ sobre un grupo de objetos o individuos y se trata de calcular, a partir de ellas, un nuevo conjunto de variables $Y=(y_1,y_2,...,y_p)$, incorreladas entre sí, cuyas varianzas vayan decreciendo progresivamente. Pasaremos $X\longrightarrow Y$, mediante una combinación lineal, de manera que:

$$y_j = a_{j1}x_1 + a_{j2}x_2 + \dots + a_{jp}x_p = a'_j X \text{ con } (j = 1, \dots p).$$

Denominaremos al vector de constantes o vector de pesos $a_j = (a_{j1}, \dots, a_{jp})$ como vector de Loadings o vector de pesos, el proposito de este sera máximizar la varianza de cada componente por el concepto entrópico visto anteriormente, De modo ideal, se buscan m; p variables que sean combinaciones lineales de las p originales y que estén incorreladas, recogiendo la mayor parte de la información o variabilidad de los datos. Si las variables originales están incorreladas de partida, entonces no tiene sentido realizar un análisis de componentes principales.

A. Proceso extracción de loadings

Se elige a_1 de modo que se maximice la varianza de y_1 sujeta a la restricción de que $a'_j a_j = 1$, ademas nuestra función es $var(y_1) = var(a'_1 X) = a'_1 \Sigma a_1$. El método habitual para maximizar una función de varias variables sujeta a restricciones el método de los multiplicadores de Lagrange; nuestra incognita es a_1 , por lo que obtenemos:

Sea
$$L: L(a_1) = a_1' \Sigma a_1 - \lambda (a_1' a_1 - 1)$$

$$\implies \frac{\partial L}{\partial a_1} = 2\Sigma a_1 - 2\lambda a_1 = 0$$

$$= 2(\Sigma - \lambda I)a_1 = 0$$

Obtenemos entonces un sistema lineal, pero para que este tenga solución distinta de 0, $(\Sigma - \lambda I)$, Por el teorema de Roché-Frobenius, está matriz debe de ser singular

$$\implies |\Sigma - \lambda I| = 0$$
 es decir que λ es un autovalor de Σ
$$\implies var(y_1) = var(a_1'X) = a_1'\Sigma a_1 = \lambda a_1'a_1 = \lambda(1) = \lambda.$$

Suponiendo que Σ es definida positiva, disponemos de: $\lambda_1 > \lambda_2 > ... > \lambda_p$. Para maximizar la varianza de y_1 tomamos el mayor, λ_1 , con lo que a_1 es t.q, $\Sigma a_1 = \lambda_1 a_1$, a_1 es el autovector asociado a λ_1 . Sea $y_2 = a_2'X$, este componente se obtiene mediante un argumento parecido. Además, se quiere que y2 esté incorrelado con el anterior componente y_1 .

$$\implies cov(y_2, y_1) = a'_2 \Sigma a_1 = 0$$

$$\text{como } \Sigma a_1 = \lambda_1 a_1$$

$$\implies a'_2 a_1 = 0 \text{ (ortogonales)}$$

esto se suma a las otra restricción que teniamos antes:

$$\implies L(a_2) = a_2' \Sigma a_2 - \lambda (a_2' a_2 - 1) - \delta (a_2' a_1)$$
 con lo que
$$\frac{\partial L}{\partial a_2} = 2\Sigma a_2 - 2\lambda a_2 - \delta a_1 = 0$$

Multiplicamos $\frac{\partial L}{\partial a_2}$ por a_1' :

$$a'_1 \frac{\partial L}{\partial a_2} = 2a'_1 \Sigma a_2 - 2\lambda a'_1 a_2 - \delta a'_1 a_1 = 0$$

$$= 2a'_1 \Sigma a_2 - \delta = 0$$

$$\implies \delta = 2a'_1 \Sigma a_2 = 2cov(y_2, y_1) = 0$$

$$\implies \frac{\partial L}{\partial a_2} = 2\Sigma a_2 - 2\lambda a_2 - \delta a_1 = 2(\Sigma - \lambda I)a_2 = 0$$

Análogamente al caso anterior, elegimos λ como el segundo mayor autovalor de la matriz Σ con su autovector asociado a_2 . Podemos llegar hasta el j-ésimo componente y le correspondera el j-ésimo autovector; sus restricciones nuevas están dadas por:

$$a'_{j}a_{j} = 1$$

$$cov(y_{1}, y_{j}) = 0$$

$$cov(y_{2}, y_{j}) = 0$$

$$\vdots$$

$$cov(y_{p}, y_{j}) = 0$$

Obtendriamos:

$$Y = AX = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1p} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{p1} & \cdots & a_{pp} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_p \end{pmatrix}$$

con A matriz ortogonal $\implies A^{-1} = A'$, y ademas:

$$\Delta = var(Y) = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & \lambda_p \end{pmatrix}$$

B. Proporción de varianza

Asumiendo que las variables se han normalizado para tener media cero, la varianza total presente en el set de datos se define como:

$$\sum_{j=1}^{p} Var(X_j) = \sum_{j=1}^{p} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_{ij}^2$$

y la varianza explicada por la componente m es

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}z_{im}^{2} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(\sum_{j=1}^{p}\phi_{jm}x_{ij}\right)^{2}$$

Por lo tanto, la proporción de varianza explicada por la componente m viene dada por el ratio

$$\frac{\sum_{i=1}^{n} \left(\sum_{j=1}^{p} \phi_{jm} x_{ij}\right)^{2}}{\sum_{j=1}^{p} \sum_{i=1}^{n} x_{ij}^{2}}$$

Tanto la proporción de varianza explicada como la proporción de varianza explicada acumulada son dos valores de gran utilidad a la hora de decidir el número de componentes principales a utilizar en los análisis posteriores.

C. Número óptimo de PC

Por lo general, dada una matriz de datos de dimensiones $n \times p$, el número de componentes principales que se pueden calcular es como máximo de n-1 o p (el menor de los dos valores es el limitante).

Sin embargo, siendo el objetivo del PCA reducir la dimensionalidad, suelen ser de interés utilizar el número mínimo de componentes que resultan suficientes para explicar los datos.

D. Método para la solución del Problema

El método [5] Principal Components Regression PCR consiste en ajustar un modelo de regresión lineal por mínimos cuadrados empleando como predictores las componentes generadas a partir de un Principal Component Analysis (PCA). De esta forma, con un número reducido de componentes se puede explicar la mayor parte de la varianza de los datos.

En los estudios observacionales, es frecuente disponer de un número elevado de variables que se pueden emplear como predictores. A pesar de ello, un alto número de predictores no implica necesariamente mucha información. Si las variables están correlacionadas entre ellas, la información que aportan es redundante y además viola la condición de no colinealidad necesaria en la regresión por mínimos cuadrados. Dado que el **PCA** es útil eliminando información redundante, si se emplean como predictores las componentes principales se puede mejorar el modelo de regresión. Es importante tener en cuenta que, si bien el *Principal Components Regression* reduce el número de predictores del modelo, no se puede considerar como un método de selección de variables ya que todas ellas se necesitan para el cálculo de las componentes. La identificación del número óptimo de componentes principales que se emplean como predictores en **PCR** puede identificarse por *cross validation*.

El método **PCR** no deja de ser un ajuste lineal por mínimos cuadrados que emplea componentes principales como predictores, para que sea válido se tienen que cumplir las condiciones requeridas para la regresión por mínimos cuadrados.

1) Descripción de los experimentos:

La cuantificación del contenido en grasa de la carne pude hacerse mediante técnicas de analítica química, sin embargo, este proceso es costoso en tiempo y recursos. Una posible alternativa para reducir costes y optimizar tiempo es emplear un espectrofotómetro (instrumento capaz de detectar la absorbancia que tiene un material a diferentes tipos de luz en función de sus características). Para comprobar su efectividad se mide el espectro de absorbancia de 100 longitudes de onda en 215 muestras de carne, cuyo contenido en grasa se obtiene también por análisis químico para poder comparar los resultados. El set de datos **meatspec** del paquete **faraway** contiene toda la información.

El set de datos contiene 101 columnas. Las 100 primeras, nombradas como $v_1, ..., v_{100}$ recogen el valor de absorbancia para cada una de las 100 longitudes de onda analizadas, y la columna fat el contenido en grasa medido por técnicas químicas.

```
library(faraway)
data(meatspec)
dim(meatspec)
## [1] 215 101
```

Para poder evaluar la capacidad predictiva del modelo, se dividen las observaciones disponibles en dos grupos: uno de entrenamiento para ajustar el modelo (80% de los datos) y uno de test (20% de los datos).

```
training <- meatspec[1:172, ]
test <- meatspec[173:215, ]</pre>
```

En primer lugar se ajusta un modelo incluyendo todas las longitudes de onda como predictores.

```
modelo <- lm(fat ~ ., data = training)</pre>
summary (modelo)
##
## Call:
## lm(formula = fat ~ ., data = training)
##
## Residuals:
                10
       Min
                    Median
                                   30
  -2.09837 -0.35779 0.04555 0.38080 2.33860
##
## Coefficients:
                Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
                         2.012
                                    3.143 0.002439 **
                6.324
##
  (Intercept)
          12134.077 3659.798 3.316 0.001443 **
```

```
## V2
                           5971.891 -2.108 0.038605 *
                -12585.857
                                        -0.544 0.588200
## V3
                 -5107.556
                             9390.265
## V4
                 23880.493
                            17143.644
                                        1.393 0.167977
## V5
                -40509.555
                            22129.359
                                        -1.831 0.071360 .
## V6
                 28469.416
                            19569.400
                                        1.455 0.150134
## V7
                -20901.082
                            12501.639
                                        -1.672 0.098952
## V8
                             7515.467
                                         1.114 0.269193
                  8369.465
## V9
                 -1539.328
                             5397.505
                                       -0.285 0.776327
## V10
                  4706.267
                             7406.895
                                         0.635 0.527217
## V11
                  7012.943
                            11720.620
                                         0.598 0.551516
## V12
                 14891.444
                            20169.170
                                         0.738 0.462749
## V13
                -30963.902
                            26186.839
                                        -1.182 0.240983
## V14
                 34338.612
                            22323.830
                                        1.538 0.128444
                -22235.237
## V15
                            13842.268
                                        -1.606 0.112640
## V16
                 -7466.797
                             8558.172
                                        -0.872 0.385890
## V17
                  6716.653
                             6561.805
                                        1.024 0.309500
## V18
                 -2033.071
                             6741.330
                                        -0.302 0.763851
## V19
                 8541.212
                             9419.998
                                        0.907 0.367627
## V20
                            17300.433
                                        -0.096 0.923500
                -1667.207
## V21
               -31972.494
                            24622.615
                                        -1.299 0.198317
## V22
                 59526.389
                            27730.712
                                         2.147 0.035244 *
                -49241.388
## V23
                            23117.226
                                        -2.130 0.036632 *
## V24
                16184.597
                            16679.609
                                        0.970 0.335180
## V25
                12077.951
                            10751.912
                                         1.123 0.265081
## V26
               -12632.330
                             6774.573
                                       -1.865 0.066361 .
## V27
                -6298.837
                             7032.334
                                        -0.896 0.373442
## V28
                29625.988
                             9011.227
                                         3.288 0.001573 **
## V29
               -39374.835
                            13561.228
                                        -2.903 0.004914 **
## V30
                 31251.427
                            18742.000
                                         1.667 0.099829
## V31
                -27238.189
                            21335.756
                                        -1.277 0.205887
## V32
                 23009.543
                            19776.156
                                        1.163 0.248522
## V33
                 -4584.373
                            14572.471
                                        -0.315 0.753995
                 -5437.943
## V34
                            10344.728
                                        -0.526 0.600754
## V35
                 -6128.931
                             8762.663
                                        -0.699 0.486564
## V36
                 5599.605
                             6652.640
                                        0.842 0.402776
## V37
                 -5569.160
                             6670.198
                                       -0.835 0.406557
## V38
                    97.451
                             9291.480
                                        0.010 0.991661
## V39
                 36021.407
                            12574.711
                                         2.865 0.005488 **
## V40
                                       -3.166 0.002280 **
                -54273.400
                            17144.384
## V41
                 52084.876
                            21758.024
                                        2.394 0.019318 *
## V42
                -48458.089
                            23950.549
                                        -2.023 0.046813 *
## V43
                 29334.488
                            20232.617
                                         1.450 0.151500
## V44
               -18282.834
                                        -1.353 0.180200
                            13508.157
## V45
                 22110.934
                             9725.348
                                         2.274 0.026020 *
                -11735.692
                                        -1.770 0.081061
## V46
                             6631.245
                                       -0.135 0.892696
## V47
                  -514.521
                             3800.612
## V48
                  2551.480
                             6131.893
                                         0.416 0.678592
## V49
                  3707.639
                             8970.401
                                         0.413 0.680618
## V50
                -25762.703
                            10934.783
                                        -2.356 0.021236 *
## V51
                 46844.468
                            15367.852
                                         3.048 0.003233 **
## V52
                -47783.626
                            18069.344
                                        -2.644 0.010065 *
## V53
                 26233.604
                            18822.491
                                         1.394 0.167744
## V54
                    87.825
                            17403.836
                                         0.005 0.995988
## V55
                 -8475.119
                            13232.005
                                        -0.641 0.523908
## V56
                 3488.507
                             7228.428
                                         0.483 0.630858
## V57
                 -1520.733
                             4988.093
                                        -0.305 0.761355
## V58
                  2275.175
                             5495.630
                                         0.414 0.680124
```

```
## V59
                -5415.427
                             5721.475 -0.947 0.347099
                             4754.317
## V60
                 7152.015
                                       1.504 0.136935
## V61
                -4494.234
                             4512.937
                                       -0.996 0.322702
## V62
                 3662.045
                             4811.634
                                        0.761 0.449129
## V63
                13993.987
                             7098.106
                                        1.972 0.052563 .
## V64
               -23252.133
                             8973.839
                                       -2.591 0.011604
                 4373.731
                            10048.591
                                        0.435 0.664695
## V65
## V66
                 4580.913
                            10146.146
                                        0.451 0.653011
## V67
                 -837.676
                            10747.974
                                       -0.078 0.938097
## V68
                -7074.425
                            10852.430
                                       -0.652 0.516587
                 9506.571
## V69
                             9739.256
                                        0.976 0.332325
## V70
                -2765.100
                             9519.031
                                       -0.290 0.772295
## V71
                -1125.135
                             8586.061
                                       -0.131 0.896113
                -7295.096
## V72
                             7489.488
                                       -0.974 0.333341
## V73
                17059.811
                             6522.093
                                        2.616 0.010870
## V74
                -9889.553
                             6543.945
                                       -1.511 0.135162
## V75
                 -325.615
                             6125.973
                                       -0.053 0.957759
## V76
                  782.219
                             5421.002
                                        0.144 0.885677
                 8058.935
                             5793.416
                                        1.391 0.168554
##
  V77
## V78
               -15869.978
                             6448.208
                                       -2.461 0.016282 *
## V79
                             6435.678
                21768.619
                                       3.382 0.001172 **
## V80
               -28338.145
                             8180.874
                                       -3.464 0.000906
## V81
                 8523.317
                            10053.153
                                       0.848 0.399384
## V82
                22319.451
                            12098.046
                                       1.845 0.069226
## V83
               -17244.722
                            13991.685
                                       -1.232 0.221829
               -18325.836
                                       -1.225 0.224627
## V84
                            14959.964
## V85
                33345.457
                            13868.197
                                        2.404 0.018808 *
                                       -0.546 0.586813
## V86
                -7955.157
                            14571.278
## V87
                -7837.966
                            16141.553
                                       -0.486 0.628762
                -1815.552
## V88
                            17261.928
                                       -0.105 0.916532
## V89
                  631.595
                            15684.751
                                        0.040 0.967992
## V90
                -2701.955
                            16187.612
                                       -0.167 0.867911
                 4375.678
## V91
                            19400.005
                                        0.226 0.822199
## V92
                12925.188
                            16456.244
                                        0.785 0.434816
## V93
                -7441.235
                            12417.883
                                       -0.599 0.550923
## V94
                -2464.532
                            11815.234
                                       -0.209 0.835366
## V95
                -2090.635
                             9666.576
                                       -0.216 0.829394
                10912.352
                             9950.716
                                        1.097 0.276505
  V96
                                      -1.845 0.069270
## V97
               -20331.405
                           11022.234
## V98
                 3948.443
                             8227.133
                                        0.480 0.632753
## V99
                 6358.930
                             8652.372
                                        0.735 0.464800
## V100
                 -263.365
                             4104.463
                                       -0.064 0.949019
## ---
  Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
##
## Residual standard error: 1.074 on 71 degrees of freedom
## Multiple R-squared: 0.997, Adjusted R-squared:
## F-statistic: 237.5 on 100 and 71 DF, p-value: < 2.2e-16
```

El valor $R_{ajustado}^2$ obtenido es muy alto (0.9928) lo que indica que el modelo es capaz de predecir con gran exactitud el contenido en grasa de las observaciones con las que se ha entrenado. El hecho de que el modelo en conjunto sea significativo (p-value: $< 2.2e^{-16}$), pero que muy pocos de los predictores lo sean a nivel individual, es un indicativo de una posible redundancia entre los predictores (colinealidad).

¿Cómo de bueno es el modelo prediciendo nuevas observaciones que no han participado en ajuste? Al tratarse de un modelo de regresión, la estimación del error de predicción se obtiene mediante el $Mean\ Square\ Error\ (MSE)$.

$$MSE = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} (\hat{y}_i - y_i)^2$$

```
# MSE empleando las observaciones de entrenamiento
training_mse <- mean((modelo$fitted.values - training$fat)^2)
training_mse
## [1] 0.4765372</pre>
```

```
# MSE empleando nuevas observaciones
predicciones <- predict(modelo, newdata = test)
test_mse <- mean((predicciones - test$fat)^2)
test_mse
## [1] 14.54659</pre>
```

Se observa que el modelo tiene un MSE muy bajo (0.48) cuando predice las mismas observaciones con las que se ha entrenado, pero 30 veces más alto (14.54) al predecir nuevas observaciones. Esto significa que el modelo no es útil, ya que el objetivo es aplicarlo para predecir el contenido en grasa de futuras muestras de carne. A este problema se le conoce como *over fitting*. Una de las causas por las que un modelo puede sufrir *over fitting* es la incorporación de predictores innecesarios, que no aportan información o que la información que aportan es redundante.

Se recurre en primer lugar a la selección de predictores mediante *stepwise* selection empleando el AIC como criterio de evaluación:

```
modelo_step_selection <- step(object = modelo, trace = FALSE)

# Número de predictores del modelo resultante
length(modelo_step_selection$coefficients)
## [1] 73</pre>
```

```
# Training-MSE
training_mse <- mean((modelo_step_selection$fitted.values - training$fat)^2)
training_mse
## [1] 0.5034001</pre>
```

El proceso de stepwise selection devuelve como mejor modelo el formado por 73 de los 100 predictores disponibles. Al haber eliminado predictores del modelo, el $training\ MSE$ siempre aumenta, en este caso de 0.48 a 0.05, pero el test-MSE se ha reducido a 12.88986.

2) Resultados:

Véase ahora el resultado si se ajusta el modelo empleando las componentes principales:

```
# Cálculo de componentes principales. Se excluye la columna con la variable
# respuesta *fat*
pca <- prcomp(training[, -101], scale. = TRUE)</pre>
# Se muestra la proporción de varianza explicada y acumulada de las 9 primeras
# componentes
summary(pca)$importance[, 1:9]
##
                              PC1
                                       PC2
                                                  PC3
                                                            PC4
                                                                       PC5
## Standard deviation
                          9.92492 1.043606 0.5357885 0.3312792 0.07898436
## Proportion of Variance 0.98504 0.010890 0.0028700 0.0011000 0.00006000
## Cumulative Proportion 0.98504 0.995930 0.9988000 0.99999000 0.99996000
                                                        PC8
##
                                 PC6
                                            PC7
## Standard deviation
                          0.04974461 0.02700194 0.02059129 0.008603878
## Proportion of Variance 0.00002000 0.00001000 0.00000000 0.000000000
## Cumulative Proportion 0.99999000 0.99999000 1.00000000 1.000000000
```

El estudio de la proporción de varianza explicada muestra que la primera componente recoge la mayor parte de la información (98.5%), decayendo drásticamente la varianza en las sucesivas componentes.

Una vez obtenido el valor de las componentes para cada observación (principal component scores), puede ajustarse el modelo lineal empleando dichos valores junto con la variable respuesta que le corresponde a cada observación. Con la función 'pcr()' del paquete 'pls' se evita tener que codificar cada uno de los pasos intermedios.

Acorde a la proporción de varianza acumulada, emplear las 4 primeras componentes podría ser una buena elección, ya que en conjunto explican el 99.99100 % de varianza.

```
library(pls)
##
## Attaching package: 'pls'
## The following object is masked from 'package:stats':
##
## loadings
modelo_pcr <- pcr(formula = fat ~ ., data = training, scale. = TRUE, ncomp = 4)
# Test-MSE
predicciones <- predict(modelo_pcr, newdata = test, ncomp = 4)
test_mse <- mean((predicciones - test$fat)^2)
test_mse
## [1] 20.55699</pre>
```

El test-MSE obtenido (20.56) para el modelo que emplea como predictores las 4 primeras componentes es mucho mayor que el obtenido con el modelo generado por stepwise selection (12.89) e incluso que el obtenido incluyendo todos los predictores (14.54659). Esto significa que, o bien el hecho de emplear componentes principales como predictores no es útil para este caso, o que el número de componentes incluido no es el adecuado.

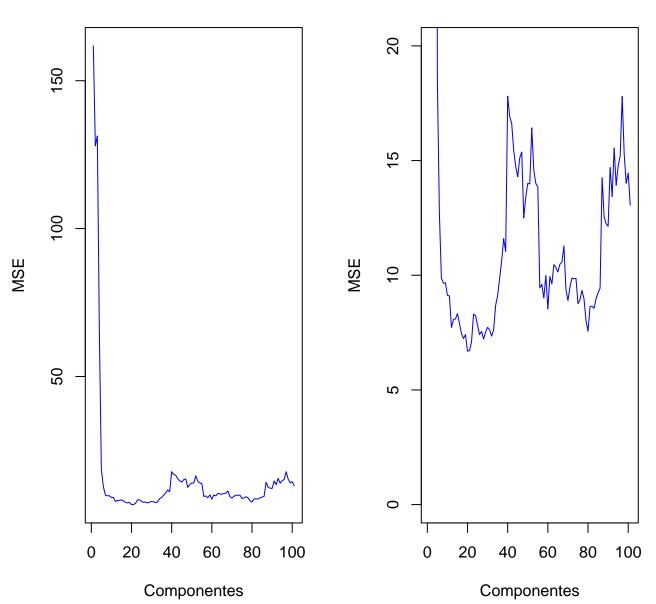
La función 'pcr()' incluye la posibilidad de recurrir a *cross validation* para identificar el número óptimo de componentes con el que se minimiza el MSE.

```
modelo_pcr_CV <- MSEP(modelo_pcr, estimate = "CV")
which.min(modelo_pcr_CV$val)
## [1] 20</pre>
```

```
par(mfrow = c(1,2))
plot(modelo_pcr_CV$val, main = "MSE vs n° componentes", type = "l",
        ylab = "MSE",
        col = "blue", xlab = "Componentes")
plot(modelo_pcr_CV$val, main = "zoom", type = "l", ylab = "MSE",
        xlab = "Componentes", col = "blue", ylim = c(0,20))
```

MSE vs nº componentes

zoom



```
# Test-MSE
predicciones <- predict(modelo_pcr, newdata = test, ncomp = 18)
test_mse <- mean((predicciones - test$fat)^2)
test_mse
## [1] 4.524698</pre>
```

El número óptimo de componentes principales identificado por $cross\ validation$ es de 18. Empleando este número en la PCR se consigue reducir el test-MSE a 4.52, un valor muy por debajo del conseguido con los otros modelos.

REFERENCES

- Gareth James, Daniela Witten, Trevor Hastie and Robert Tibshirani, Introduction to Statistical Learning.
 Julian J.Faraway, Linear Models with R.
 Principal Component Analysis
 Supervised
 Principal Components Regression
 Repositorio