

# **Análisis y Reporte Sobre el Desempeño del Modelo**

Por : Sebastian Mora  
A01746423  
10 de Septiembre del 2023  
Inteligencia Artificial Avanzada  
ITESM

## **1. Justificación del Dataset**

El conjunto de datos de calidad del vino encapsula una serie de características químicas y físicas que definen el perfil de distintos vinos. Estas características, aunque se pueden considerar de manera individual, en conjunto juegan un papel crucial en la percepción de la calidad de un vino. Esta interdependencia y posible interacción no lineal entre las características hace que el análisis de este conjunto de datos sea intrincado y multidimensional.

Las redes neuronales, con su capacidad para modelar relaciones no lineales y complejas entre variables, son una herramienta ideal para abordar este tipo de desafíos. Su estructura permite identificar y aprender patrones sutiles y complejas

interacciones entre las características, que otros modelos más simples podrían pasar por alto. Además, las redes neuronales tienen la habilidad de generalizar a partir de los datos de entrenamiento, lo que las hace robustas frente a variaciones y particularidades en los datos.

Al abordar la calidad del vino como una tarea de clasificación tridimensional (malo, regular, bueno), se simplifica el problema, permitiendo que la red neuronal se enfoque en discernir las categorías en lugar de predecir un valor numérico exacto. Esta aproximación de clasificación puede ser más intuitiva y práctica, especialmente cuando el objetivo es categorizar vinos para recomendaciones o decisiones de marketing.

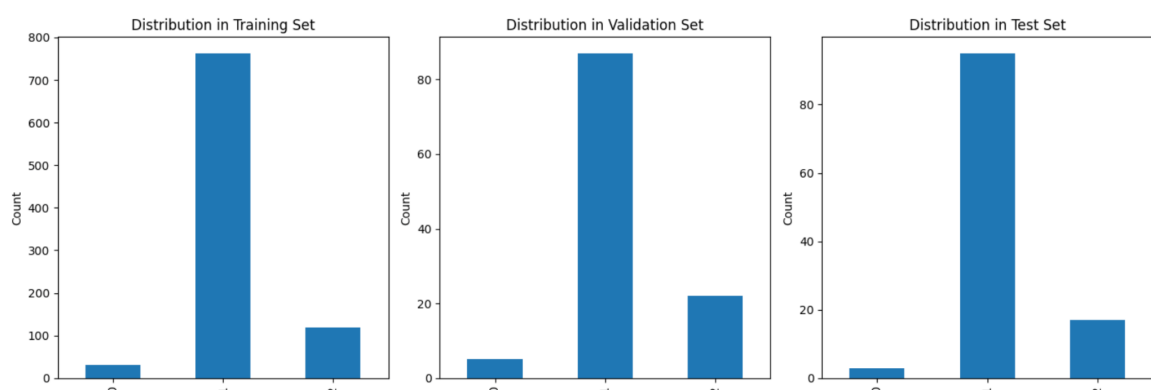
En conclusión, dada la naturaleza compleja y multidimensional del conjunto de datos de calidad del vino, y la capacidad superior de las redes neuronales para modelar interacciones no lineales y generalizar, utilizar una red neuronal para este dataset en modo de clasificación es una decisión acertada y estratégicamente beneficiosa.

## 2. Separación y evaluación del modelo con un conjunto de prueba y un conjunto de validación

El dataset completo consta de 1144 renglones, cada renglón consta de diversas características químicas y físicas que describen el perfil de diferentes vinos. El dataset será dividido en 3 subconjuntos; *test* (80% del total de renglones), *test* (10% del total de renglones) y *valid* (10% del total de renglones). Dejándonos con 3 sectores de la siguientes dimensiones :

```
Train set: X: (914, 11), y: (914,)  
Validation set: X: (114, 11), y: (114,)  
Test set: X: (115, 11), y: (115,)
```

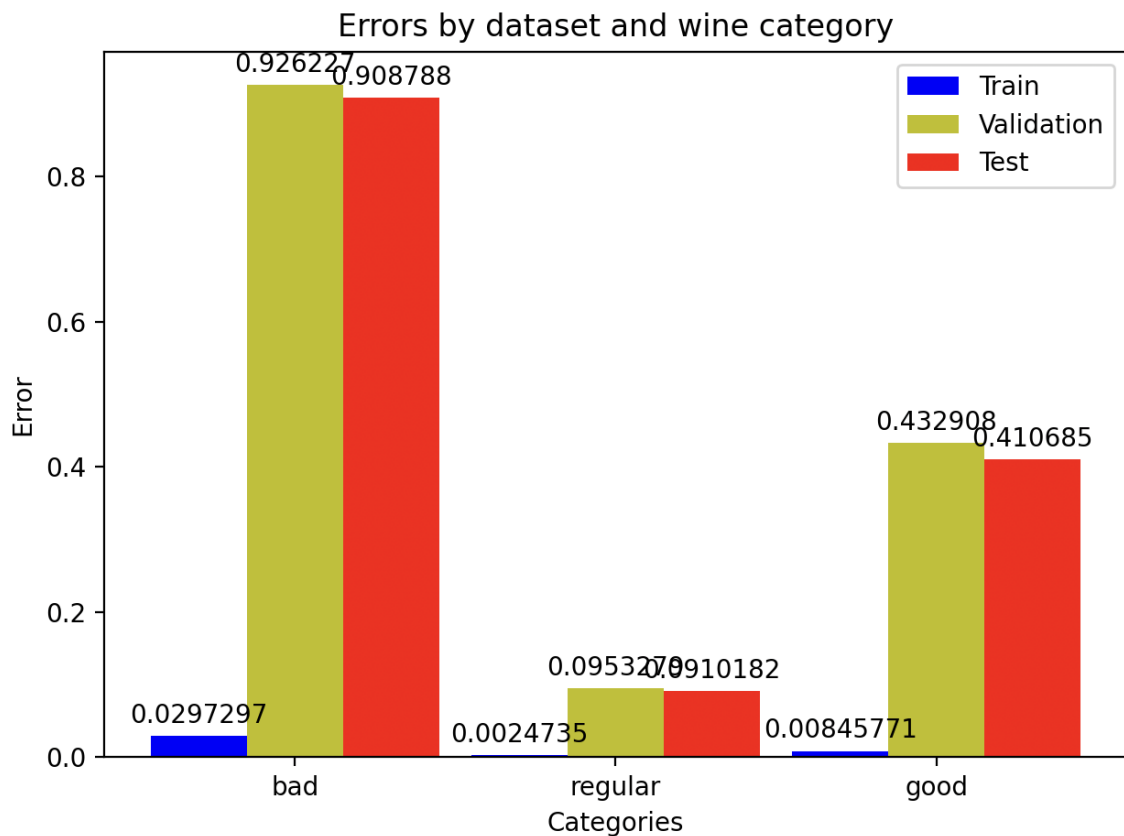
Por motivos de simplicidad y poder hacer un mejor análisis del funcionamiento del modelo, se ha convertido de un problema de regresión a un problema de clasificación, por lo que la *y* del dataset ha sido clasificada (de acuerdo a la calificación de cada vino) en uno de tres grupos; malo, regular y bueno. A continuación podemos ver una gráfica de la distribución de las clases en los 3 subconjuntos descritos anteriormente :



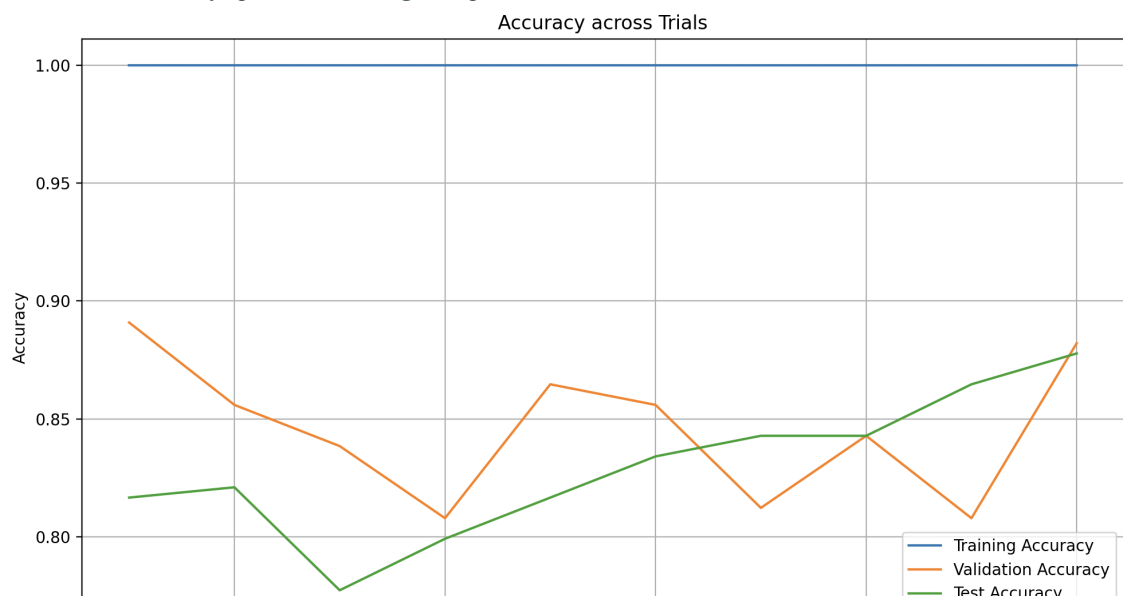
Gráficas de distribución de las clases en cada subconjunto; 0 malo, 1 regular, 2 bueno.

### 3. Diagnóstico de bias y fitting

Para poder hacer el diagnóstico, se entrenaron y evaluaron 10 modelos de red neuronal, recolectando los datos sobre su valor de f1 para cada uno de los subconjuntos de los dataset descritos anteriormente. A continuación, se muestran los gráficos para su posterior análisis y conclusión.



Valor de f1 para cada categoría, promediando todos los modelos.

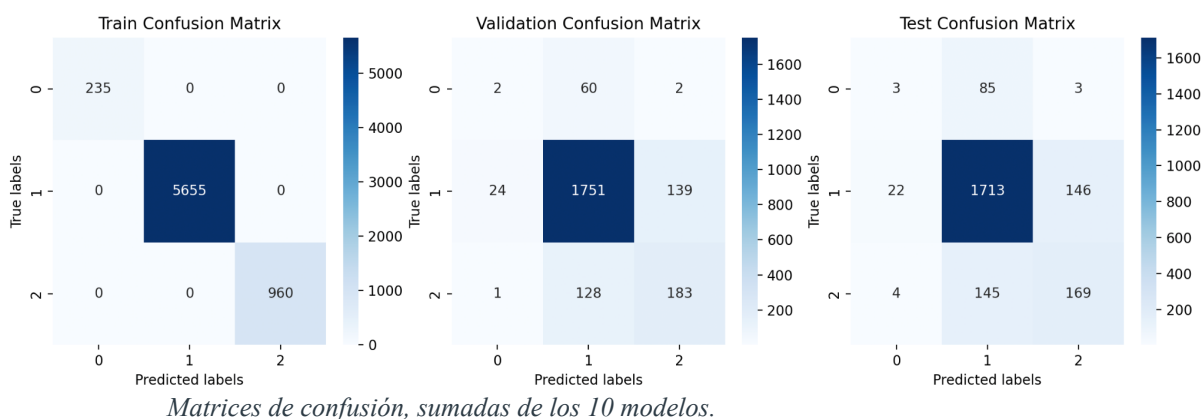


El modelo de clasificación presenta ciertos patrones que vale la pena destacar. En primer lugar, el desempeño al clasificar vinos de calidad "bad" es destacable, alcanzando un F1 score de 0.92. Esto sugiere una eficaz identificación de esta categoría. Sin embargo, el rendimiento para la clasificación de vinos "regular" es considerablemente bajo, con un F1 score cercano a 0.09, indicando dificultades en su correcta clasificación. En cuanto a los vinos de calidad "good", el modelo muestra un rendimiento moderado con un F1 score de 0.4.

Un aspecto crítico del modelo es su capacidad para ajustarse perfectamente a los datos de entrenamiento, logrando una precisión del 100%. Aunque esto podría parecer positivo a primera vista, es un claro indicador de sobreajuste, ya que el modelo está memorizando los datos en lugar de aprender patrones generalizables. Esta hipótesis se refuerza con la disminución observada en la precisión en los conjuntos de validación y prueba, que fluctúa entre 0.8 y 0.9.

En términos generales, el modelo tiene un bajo bias, dado su alto rendimiento en el conjunto de entrenamiento, pero una alta varianza, reflejada en la discrepancia entre los resultados de entrenamiento y validación/prueba. Para abordar estos desafíos, sería recomendable considerar técnicas de regularización, posiblemente obtener o generar más datos, simplificar la arquitectura del modelo y revisar el balance de clases y las características proporcionadas.

#### 4. Diagnóstico y explicación el grado de varianza



El análisis de las matrices de confusión consolidadas para los subconjuntos de entrenamiento, validación y prueba revela información crucial sobre la varianza y el rendimiento general del modelo. Es notable que el cuadrante central de la matriz de confusión del conjunto de entrenamiento presenta un tono significativamente más oscuro, lo que indica que el modelo tiene una alta precisión al predecir la clase central, es decir, vinos de calidad "regular". Esto es coherente con las altas tasas de precisión observadas en el conjunto de entrenamiento.

No obstante, al examinar las matrices de validación y prueba, la intensidad del cuadrante central disminuye, sugiriendo una disminución en la precisión para la clase "regular". Aunque el modelo parece estar sobre ajustando a la clase "regular" durante el entrenamiento, este sobreajuste no se transfiere completamente a los conjuntos de validación y prueba.

El cuadrante inferior derecho, que representa la predicción de vinos de calidad "buena", muestra valores más altos que el cuadrante superior izquierdo, indicativo de vinos de calidad "mala". Esto sugiere que el modelo tiene un rendimiento relativamente mejor al predecir vinos de buena calidad en comparación con los de mala calidad. Sin embargo, aún es notable que la capacidad del modelo para predecir vinos de calidad "buena" y "mala" es inferior a su capacidad para identificar vinos "regulares".

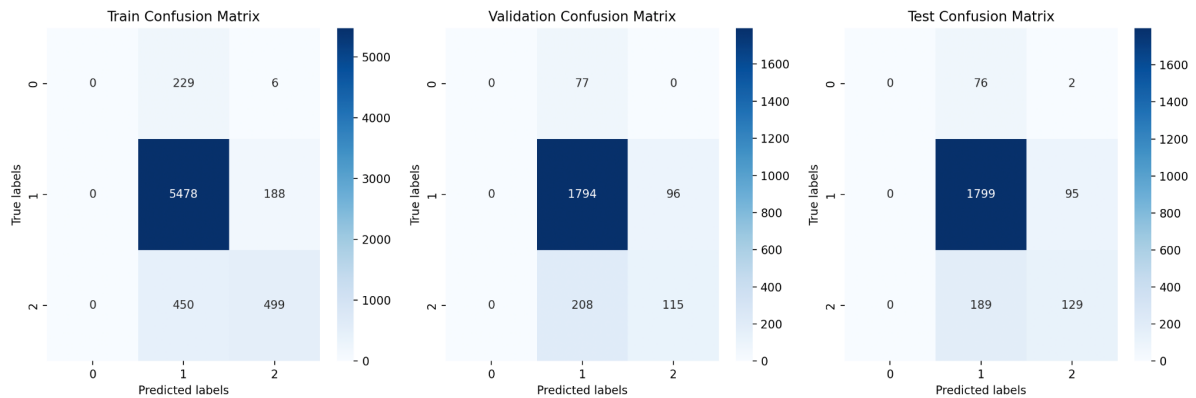
Si bien el modelo exhibe una notable precisión en el conjunto de entrenamiento, especialmente para vinos de calidad "regular", este rendimiento no se mantiene completamente en los conjuntos de validación y prueba, lo que indica una cierta varianza en el modelo. Además, la capacidad del modelo para predecir las clases "buena" y "mala" es inferior a su rendimiento con la clase "regular", lo que refleja posibles áreas de mejora en la clasificación multiclase.

## 5. Regularización para la mejora del modelo

En el código, se han introducido diversas técnicas de regularización y ajuste con el propósito de optimizar el rendimiento del modelo y abordar posibles problemas, como el sobreajuste. En primer lugar, se ha incorporado la **regularización L2**, que añade un término de penalización al modelo basado en los pesos de las neuronas. Esta penalización desincentiva los valores extremadamente grandes de los pesos, lo que a su vez evita que la red neuronal se vuelva excesivamente compleja y sea propensa al sobreajuste.

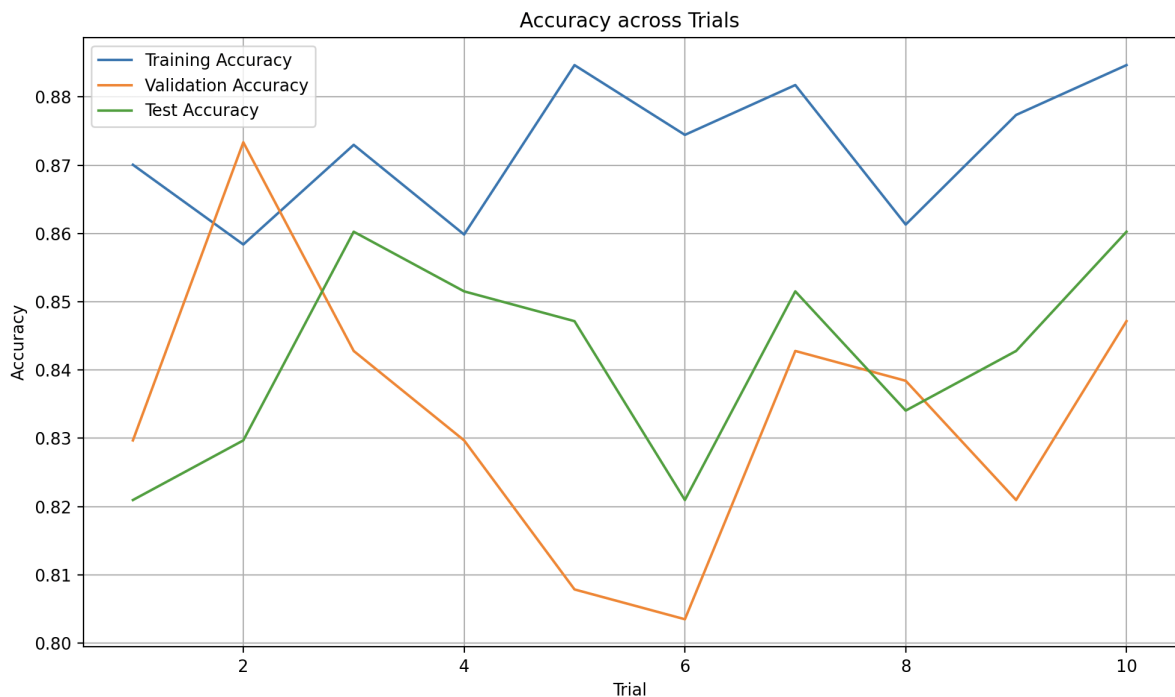
Adicionalmente, se ha incluido la técnica de **"Dropout"**, que durante el entrenamiento desactiva aleatoriamente un porcentaje de neuronas en las capas específicas. Esta desactivación impide que el modelo dependa demasiado de cualquier neurona individual, promoviendo una distribución más uniforme del aprendizaje y, por ende, mejorando la generalización en datos no vistos.

Por último, se ha modificado el **optimizador Adam**, ajustando la tasa de aprendizaje. El ajuste de la tasa de aprendizaje es fundamental para la convergencia del entrenamiento. Una tasa de aprendizaje demasiado alta podría hacer que el modelo oscile y no converja, mientras que una tasa demasiado baja podría hacer que el aprendizaje sea extremadamente lento. Al modificar esta tasa, buscamos un equilibrio que permita al modelo aprender de manera efectiva y eficiente.



*Matriz de confusión, después de las modificaciones mencionadas.*

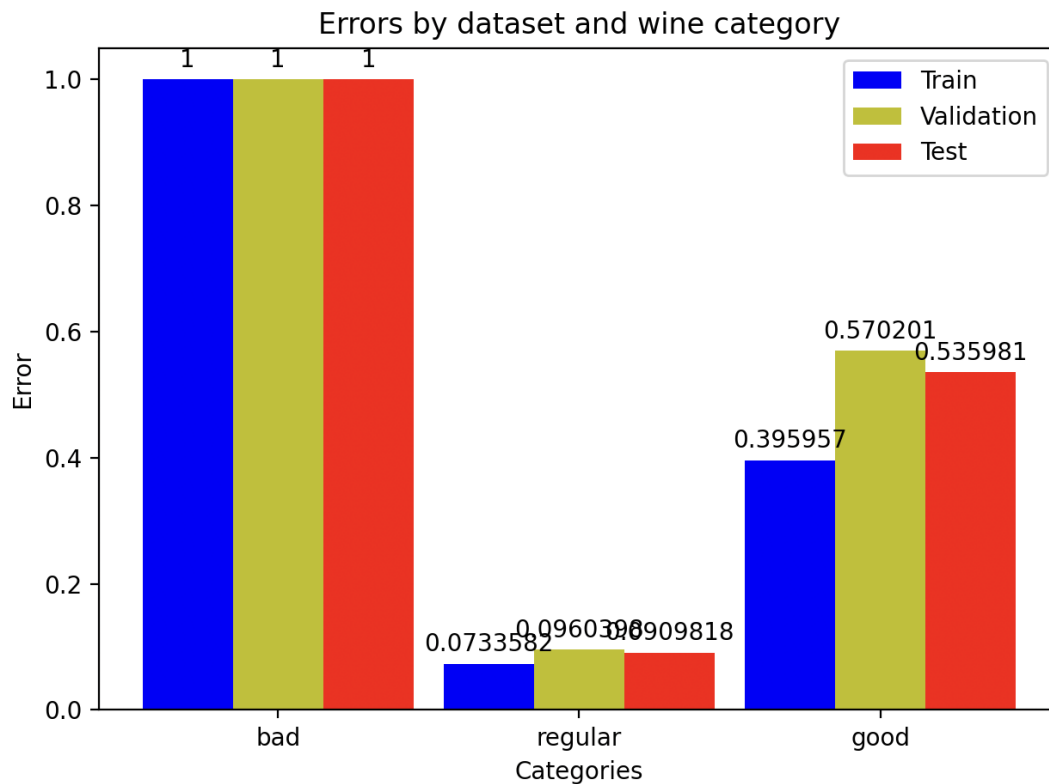
A partir de las modificaciones realizadas en el modelo, es posible discernir una serie de cambios positivos en su desempeño. En un análisis detallado de la matriz de confusión, aunque la clasificación aún se centra primordialmente en los vinos de categoría regular, lo que es realmente notable es la disminución apreciable en las confusiones de esta categoría con las de vinos malos y buenos. Esto se evidencia en los cuadrantes laterales de la matriz, que muestran valores más bajos en comparación con pruebas anteriores, reflejando una mejora en la capacidad discriminativa del modelo.



*Precisión de cada modelo, después de las mejores, en cada subconjunto del dataset*

En cuanto a la gráfica de precisión, se observa una mitigación del sobreajuste que se manifestaba en iteraciones previas. Esto es evidente al ver que la precisión durante el entrenamiento ya no se mantiene constante, sino que presenta ciertas fluctuaciones, lo cual es un indicador de que el modelo está generalizando mejor y no simplemente

memorizando los datos de entrenamiento. Pese a este ajuste, las métricas de validación y prueba mantienen una consistencia con las evaluaciones anteriores, lo que sugiere que las regularizaciones y ajustes no comprometen la capacidad del modelo para hacer predicciones acertadas en datos no vistos previamente.



*Valor de f1 para cada categoría, promediando todos los modelos.*

Finalmente, al observar la gráfica de error por categoría y subconjunto, es destacable el avance significativo en la métrica F1 para la categoría de vinos malos. Esta mejora es evidencia de que el modelo ha fortalecido su capacidad para identificar correctamente esta categoría, equilibrando la precisión y la exhaustividad. Además, también se nota una mejora sutil, pero importante, en la categoría regular. Estas mejoras en conjunto reflejan la eficacia de las técnicas de regularización y ajuste de parámetros aplicadas, consolidando un modelo más robusto y preciso.