Instituto Tecnológico de Estudios Superiores de Monterrey Campus Estado de México

Inteligencia artificial avanzada para la ciencia de datos I (Grupo 101)

Análisis y Reporte sobre el desempeño del modelo

Melissa Aurora Fadanelli Ordaz

A01749483

Profesor Jorge Adolfo Ramírez Uresti

1. Implementación de *dataset* de Iris

El conjunto de datos de iris es una opción adecuada para la implementación y análisis del algoritmo de aprendizaje automático KNN o K-Vecinos más cercanos (Knn) por varias razones fundamentales:

- Tamaño: El conjunto de datos de iris tiene una cantidad suficiente de información distribuida en tres clases diferentes de iris (setosa, versicolor y virginica). Esta cantidad de datos es suficiente para que el algoritmo Knn tenga suficientes ejemplos de entrenamiento para detectar patrones y hacer predicciones precisas sin ser demasiado complejo y difícil de manejar.

- Accesibilidad: el conjunto de datos de iris es bien conocido y está disponible en una variedad de fuentes de datos, incluidas bibliotecas de Python como scikit-learn. Esto hace que los resultados sean replicables y verificables, lo cual es esencial para demostrar que un modelo se generaliza bien.

- Generalización: el conjunto de datos es un excelente lugar para comenzar a demostrar la generalización del algoritmo Knn debido a las clases bien distribuidas y la simplicidad del problema de clasificación del iris. Un modelo que se entrena y evalúa adecuadamente utilizando este conjunto de datos tiene buenas posibilidades de generalizarse bien a otras cuestiones de clasificación en la vida real.

En conclusión, el conjunto de datos iris es una opción adecuada para demostrar la generalización de un algoritmo de aprendizaje automático como Knn debido a su tamaño apropiado, clases claramente definidas, fácil accesibilidad y capacidad de servir como un punto de partida sólido para futuras investigaciones y demostraciones en el campo del aprendizaje automático.

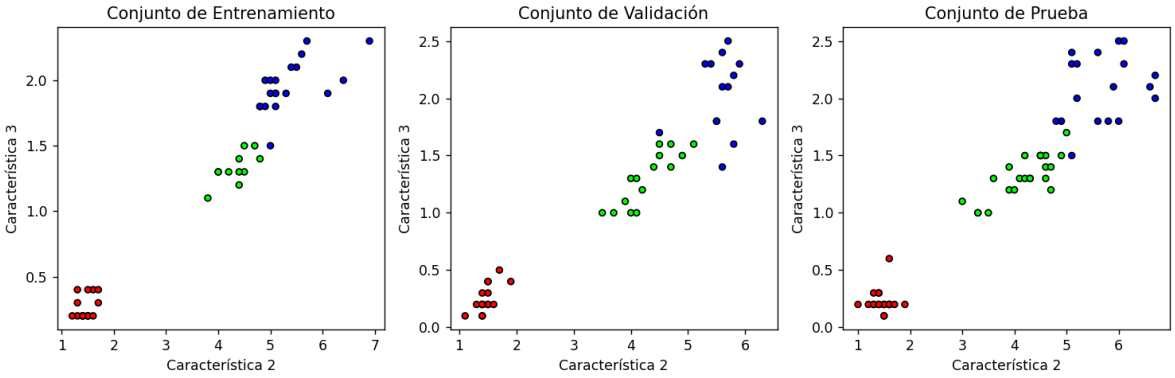
2. Separación y evaluación del modelo con un conjunto de prueba y un conjunto de validación *(Train/Test/Validation)*.

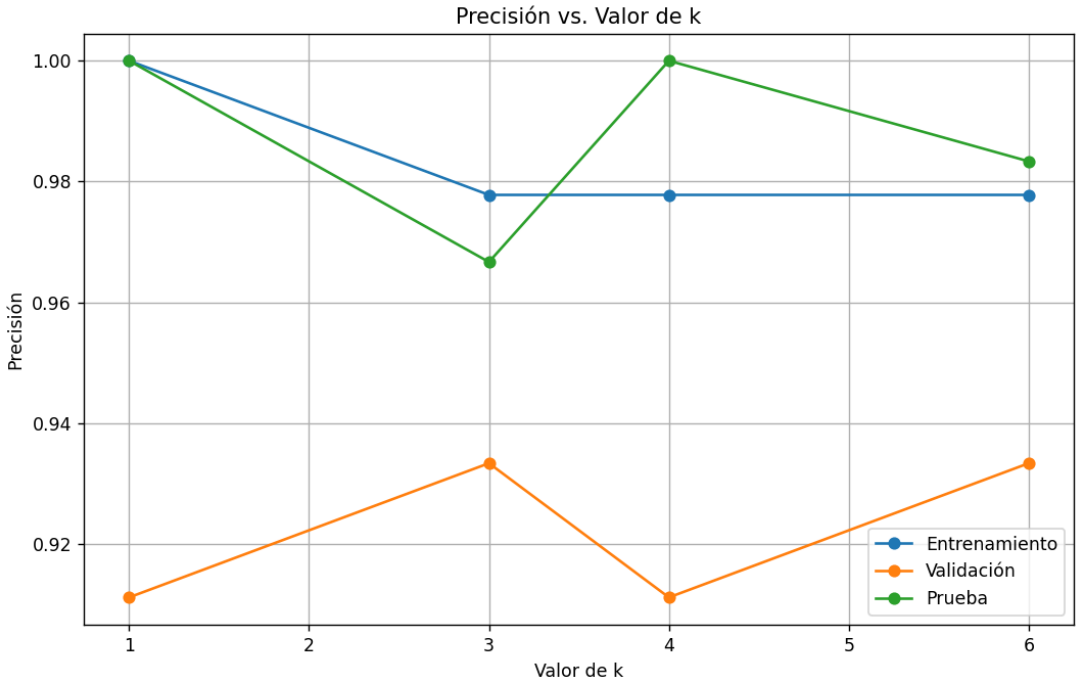
Los datos se dividen en tres conjuntos, el de entrenamiento, el de prueba y el de validación.
Los datos de entrenamiento se utilizan para ajustar los parámetros.
Los datos de validación se utilizan para evaluar el ajuste del modelo.
Los datos de prueba se utilizan para evaluar el rendimiento final del modelo.
Dentro del código esto se puede ver con las siguientes líneas:

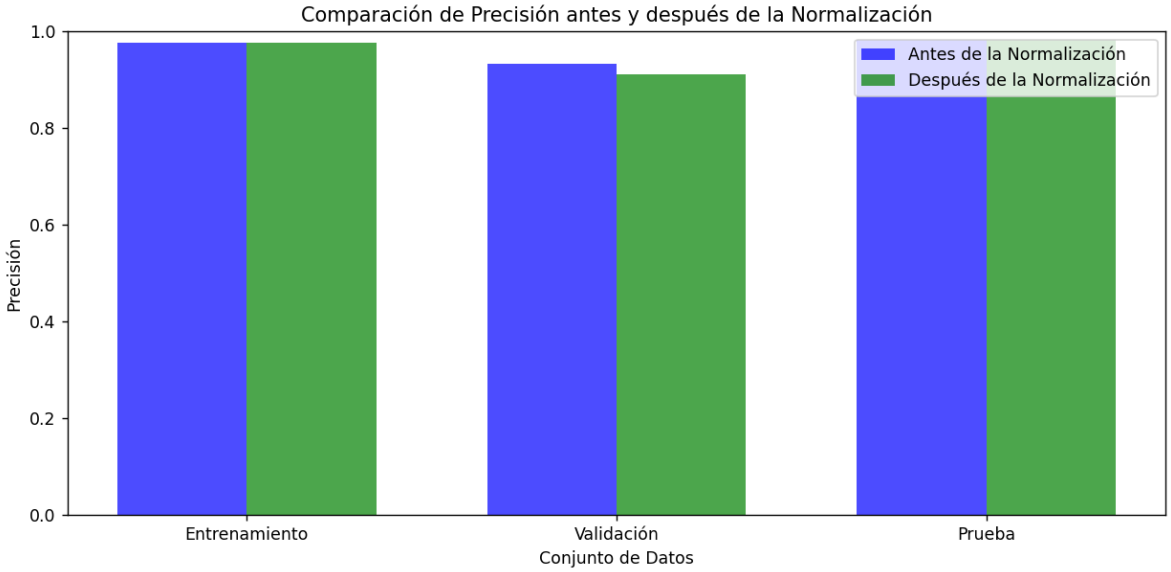
```
# División del conjunto de datos en un conjunto temporal y prueba
X_temp, X_test, y_temp, y_test = train_test_split(X, y, test_size=0.4, random_state=1234)

#Usando el conjunto temporal podemos dividirlo en dos para el entrenamiento y la validación
X_train, X_validation, y_train, y_validation = train_test_split(X_temp, y_temp, test_size=0.5, random_state=1234)
```

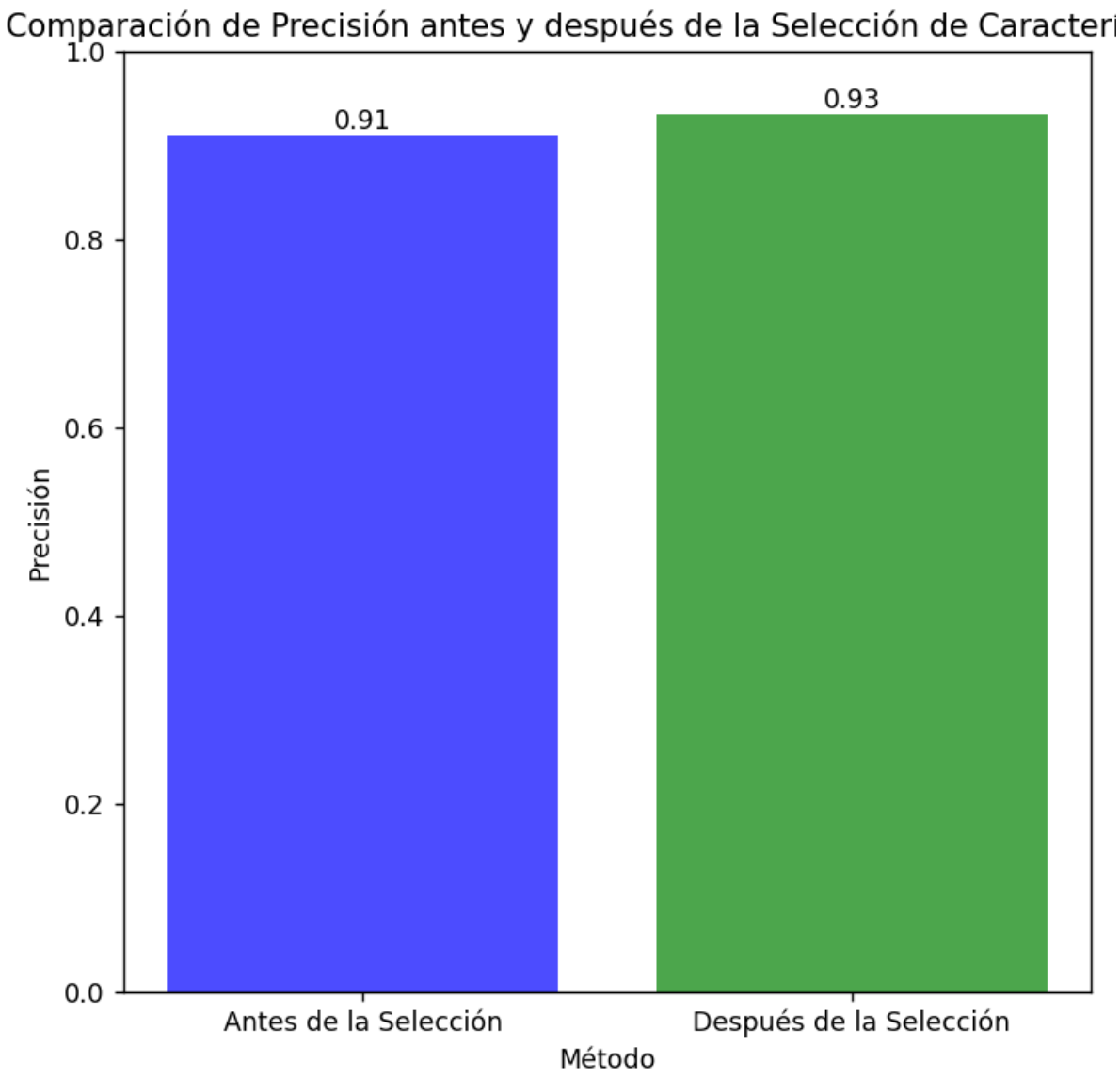
Aquí se divide primeramente en los datos de prueba y otro conjunto temporal que será dividido nuevamente para poder sacar el conjunto de entrenamiento y el de validación.
Con los tres conjuntos podemos realizar el entrenamiento y la validación, para finalmente utilizar los datos de prueba. En la siguiente imagen se puede apreciar el uso de los conjuntos con los métodos de evaluación del modelo.

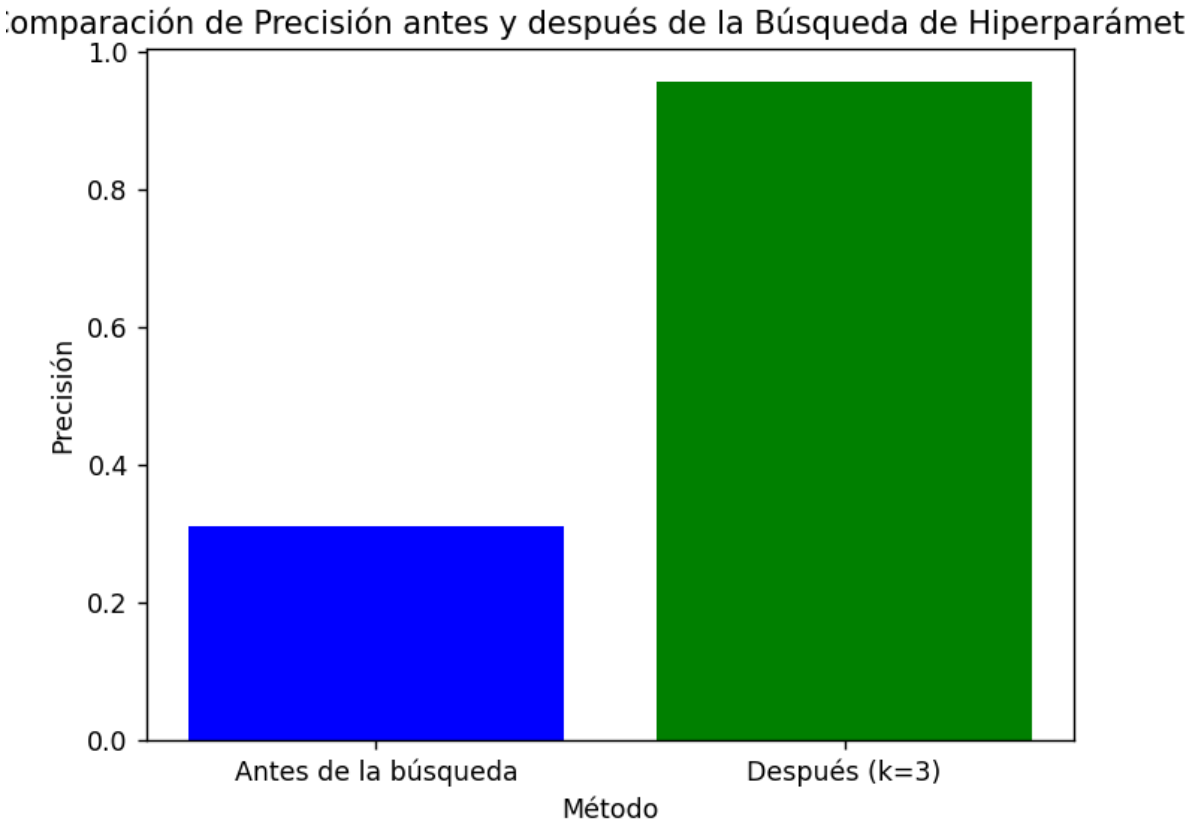
3. Gráficas comparativas




Precisión vs. Valor de k
Precisión
Valor de k
1.00
0.98
0.96
0.94
0.92
1
2
3
4
5
6
Entrenamiento
Validación
Prueba


Comparación de Precisión antes y después de la Normalización
Precisión
Conjunto de Datos
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
Entrenamiento
Validación
Prueba
Antes de la Normalización
Después de la Normalización


Comparación de Precisión antes y después de la Selección de Caracteri
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
Precisión
0.91
0.93
Antes de la Selección
Después de la Selección
Método

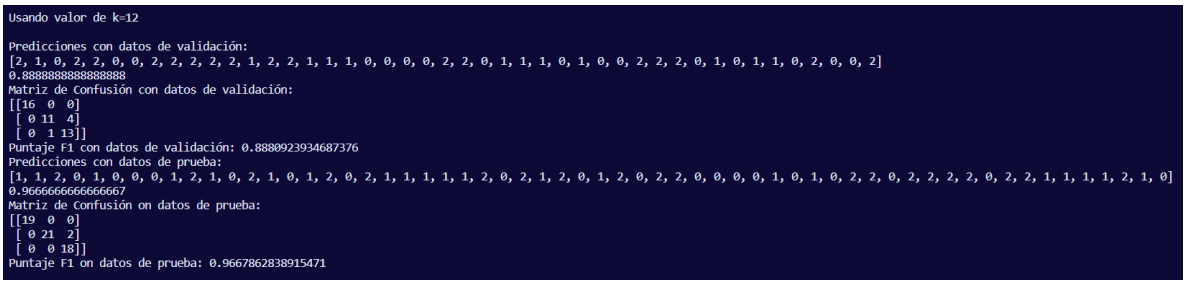


4. Diagnóstico y explicación el grado de *bias* o sesgo: bajo medio alto

Considerando que las métricas de la primera evaluación, con valor de k=5, podemos definir que el modelo tiene un sesgo bajo, ya que la matriz contiene pocos errores, conforme el valor de k va aumentando se pueden notar más errores, en k=12 podríamos considerar que el sesgo es medio, ya que la brecha aumenta y se muestran algunos errores, sin embargo en las últimas dos evaluaciones, donde k=26 y k=35, la precisión disminuye altamente y la matriz de confusión aumenta en número de errores, por lo que el sesgo es alto.

Podemos notar que conforme aumenta el valor de k el sesgo va en aumento.

```
Usando valor de k=5

Predicciones con datos de validación:
[2, 1, 0, 2, 2, 0, 0, 2, 2, 1, 2, 2, 1, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 2, 1, 0, 1, 1, 1, 0, 1, 0, 0, 2, 2, 2, 0, 1, 0, 1, 1, 0, 2, 0, 0, 2]
0.9333333333333333
Matriz de Confusión con datos de validación:
[[16  0  0]
 [ 0 13  2]
 [ 0  1 13]]
Puntaje F1 con datos de validación: 0.9333333333333333
Predicciones con datos de prueba:
[1, 1, 2, 0, 1, 0, 0, 0, 1, 2, 1, 0, 2, 1, 0, 1, 2, 0, 2, 1, 1, 1, 1, 1, 2, 0, 2, 1, 2, 0, 1, 2, 0, 2, 2, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 1, 0, 2, 2, 0, 2, 2, 2, 2, 0, 2, 2, 1, 1, 1, 1, 1, 0]
0.9833333333333333
Matriz de Confusión on datos de prueba:
[[19  0  0]
 [ 0 22  1]
 [ 0  0 18]]
Puntaje F1 on datos de prueba: 0.9833733733733734
```



5. Diagnóstico y explicación el grado de varianza: bajo medio alto

Considerando los resultados mostrados en el anterior punto, podemos notar que en el valor de k=5 la varianza no es significativa, los valores son consistentes. Viendo los valores de k=12 podemos notas que la varianza aumenta, ya que el rendimiento en validación y prueba cambia con el valor de k. En valores de k=26 y k=35 la varianza es muy alta y de acuerdo con el *dataset* que se utilice puede cambiar el rendimiento.

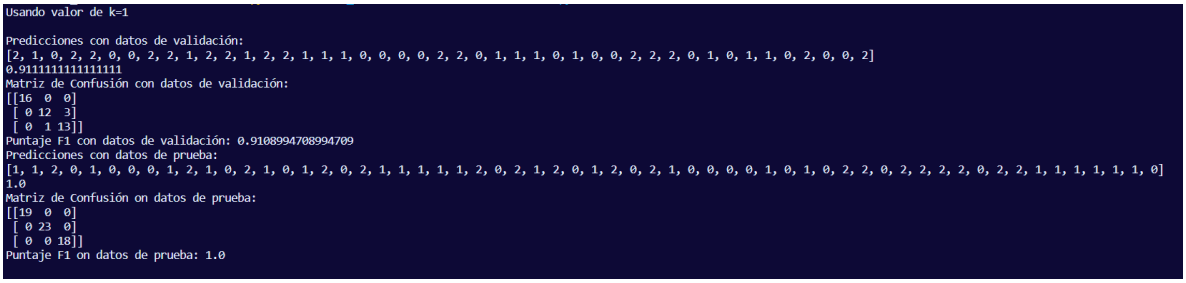
6. Diagnóstico y explicación el nivel de ajuste del modelo: *underfitt fitt overfitt*

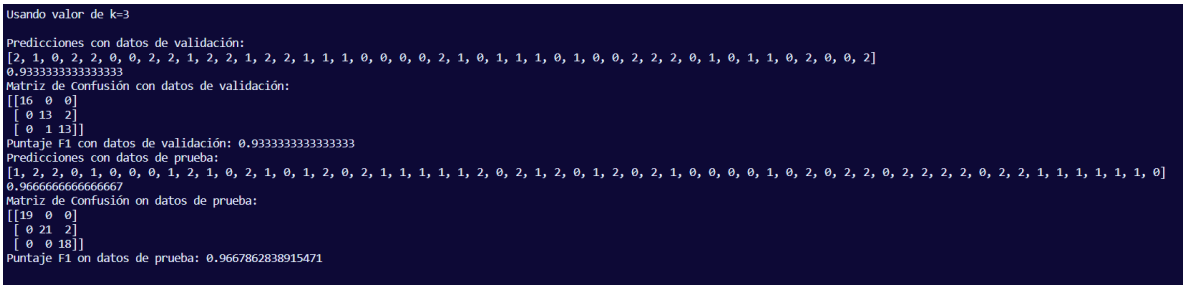
Para el diagnóstico del ajuste notamos que en k=5, siendo consistente también con los puntos anteriores, el rendimiento es bueno en los conjuntos de validación y prueba, sin embargo conforme va aumentando el valor de k, podemos notar una tendencia hacia la deficiencia del modelo, en los valores más altos de k (26 y 35) podemos ver que no se generaliza de forma adecuada, por lo que los ajustes adecuados para hacer sería encontrar el punto de los valores de k en los que se equilibre el sesgo con la varianza

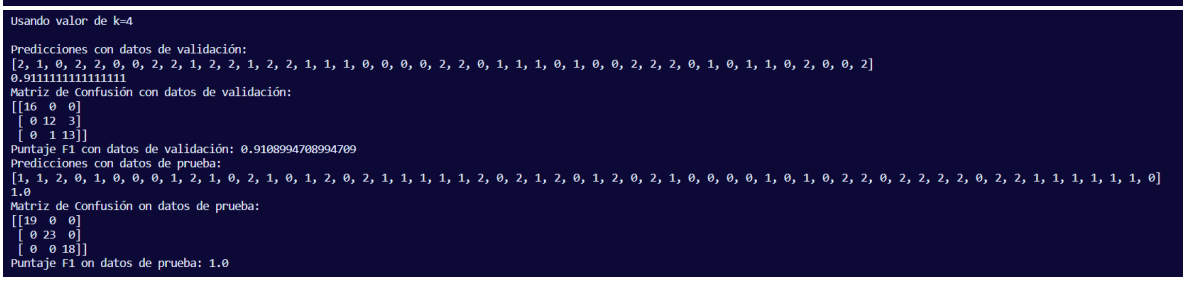
7. Mejorar el desempeño del modelo

Para este punto y de acuerdo con los diagnósticos que se hicieron podemos empezar notando que se necesita un ajuste en los valores de k, siendo los valores utilizados en la primera parte k= [5,12,26,35] y resultando en el valor de 5 siendo el mejor dentro de los aspectos de la evaluación del rendimiento, usaremos para una nueva evaluación los valores de k= [1,3,4,6]. Dejaremos de lado el cinco ya que lo utilizamos anteriormente y mostró resultados adecuados.
Utilizaremos el ajuste de hiperparámetros incluido en la librería *scikit-learn* para poder encontrar de forma más eficiente los valores de k, así podemos hacerlo de forma manual (tanteando los valores de k) y de forma automática (con la librería).

Para nuestros valores manuales los resultados muestran mejor rendimiento que cuando aumenta el valor de k, viendo estos resultados considero que el mejor valor de k para usar es k=4.







```
Usando valor de k=6

Predicciones con datos de validación:
[2, 1, 0, 2, 2, 0, 0, 2, 2, 1, 2, 2, 1, 2, 2, 1, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 2, 1, 0, 1, 1, 1, 0, 1, 0, 0, 2, 2, 2, 0, 1, 0, 1, 1, 0, 2, 0, 0, 2]
0.9333333333333333
Matriz de Confusión con datos de validación:
[[16  0  0]
 [ 0 13  2]
 [ 0  1 13]]
Puntaje F1 con datos de validación: 0.9333333333333333
Predicciones con datos de prueba:
[1, 1, 2, 0, 1, 0, 0, 0, 1, 2, 1, 0, 2, 1, 0, 1, 2, 0, 2, 1, 1, 1, 1, 1, 2, 0, 2, 1, 2, 0, 1, 2, 0, 2, 2, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 1, 0, 2, 2, 0, 2, 2, 2, 2, 0, 2, 2, 1, 1, 1, 1, 1, 0]
0.9833333333333333
Matriz de Confusión on datos de prueba:
[[19  0  0]
 [ 0 22  1]
 [ 0  0 18]]
Puntaje F1 on datos de prueba: 0.9833733733733734
```

Para el ajuste utilizando la librería, los resultados son los siguientes:

```
Precisiones antes de la búsqueda de hiperparámetros:
Validación con características seleccionadas: 0.3111111111111111

Precisiones después de la búsqueda de hiperparámetros:
Validación con k óptimo (3): 0.9555555555555556
```

Se utilizó también la técnica de normalización, demostrando como cambia y la importancia de normalizar los datos que llegan a tener escalas diferentes:

```
Precisiones antes de la normalización:
Entrenamiento: 0.9777777777777777
Validación: 0.9333333333333333
Prueba: 0.9833333333333333

Precisiones después de la normalización:
Entrenamiento: 0.9777777777777777
Validación: 0.9111111111111111
Prueba: 0.9833333333333333
```

Y también se utilizó la técnica de selección de características, que nos ayuda a reducir las características irrelevantes dentro del conjunto de datos:

```
Precisiones antes de la selección de características:
Validación: 0.9111111111111111

Precisiones después de la selección de características:
Validación con características seleccionadas: 0.9333333333333333
```

Podemos considerar entonces que los valores altos de k van empeorando el rendimiento del modelo, se aumenta el sesgo y la varianza, aumentando el valor de vecinos es también menos capaz de generalizar y de discriminar entre clases, provocando más errores en la clasificación.

Las técnicas utilizadas nos demuestran la importancia de mejorar el conjunto de datos, o de preprocesarlo antes de realizar predicciones, pues estas predicciones pueden verse afectada con los datos crudos o sin preprocesar.