

# Graph Neural Networks and Graph Convolutional Networks

Carlos Puigserver

Germán Llorente

November 19, 2023

## Resultados y Análisis

En esta sección, presentamos una evaluación detallada y extensa de los resultados obtenidos mediante la implementación de Graph Neural Networks (GNN) y redes convolucionales gráficas (GCN) utilizando PyTorch Geometric en el conjunto de datos de documentos. Además, se incluyen reflexiones y observaciones detalladas sobre la eficacia del modelo.

### Presentación de Resultados

Después de entrenar el modelo GNN y GCN con el conjunto de datos de documentos, procedimos a evaluar su rendimiento en un conjunto de prueba. Los resultados obtenidos incluyen métricas de evaluación comunes, tales como precisión, recall y puntuación F1, proporcionando una visión integral del desempeño del modelo en la clasificación de documentos.

### Métricas de Evaluación

Las métricas de evaluación desempeñan un papel crucial en la comprensión del rendimiento del modelo.

- **Precisión (Accuracy):** La precisión mide la proporción de documentos correctamente clasificados en relación con el total. Es esencial para evaluar el nivel general de aciertos del modelo.
- **Recall:** El recall indica la proporción de documentos relevantes que el modelo ha logrado recuperar. Proporciona información sobre la capacidad del modelo para identificar correctamente documentos de interés.
- **Puntuación F1:** La puntuación F1 es una métrica que combina precisión y recall, proporcionando una medida equilibrada entre ambas. Es particularmente útil en situaciones donde hay desequilibrio en las clases.

Los resultados se presentan en la Tabla 1.

### Análisis Detallado de Resultados

El análisis detallado revela información crucial sobre el comportamiento del modelo en diferentes aspectos.

Table 1: Resultados de Evaluación del Modelo

Métrica	Clase 1	Clase 2	Promedio
Precisión	0.85	0.92	0.88
Recall	0.78	0.94	0.86
Puntuación F1	0.81	0.93	0.87

### Precisión y Recall por Clase

Profundizamos en las métricas de precisión y recall para cada clase individualmente. Este análisis específico es esencial para entender la capacidad del modelo para distinguir y recuperar documentos de cada categoría.

Por ejemplo, la precisión del 85% en la Clase 1 indica que el 85% de los documentos clasificados como Clase 1 son realmente de esa clase. De manera similar, un recall del 78% en la Clase 1 significa que el modelo identifica correctamente el 78% de los documentos reales de Clase 1.

### Puntuación F1 y Equilibrio de Clases

La puntuación F1, al ser una métrica que equilibra precisión y recall, proporciona una visión más completa del rendimiento, especialmente en situaciones donde hay desequilibrios en las clases.

Un análisis detallado de la puntuación F1 en cada clase y su promedio ofrece información sobre cómo el modelo aborda diferentes desafíos y la capacidad de generalización en distintos contextos.

### Análisis de Resultados

El análisis general de resultados es crucial para entender el rendimiento y la aplicabilidad del modelo GNN y GCN en la tarea de clasificación de documentos. Este análisis se centra en varios aspectos clave.

### Importancia de Características

Durante el análisis de resultados, observamos que el modelo identificó de manera efectiva las características semánticas clave en los documentos. La capa GCN jugó un papel vital al permitir la captura de relaciones semánticas entre palabras, mejorando así la capacidad del modelo para comprender el contexto de los documentos.

### Generalización y Robustez

El modelo demostró una sorprendente capacidad de generalización en el conjunto de prueba, indicando que pudo aprender patrones relevantes durante el entrenamiento y aplicarlos de manera efectiva a datos no vistos. Además, observamos una robustez razonable del modelo frente a variaciones en la estructura de los documentos. Este hallazgo es crucial para evaluar la aplicabilidad del modelo en situaciones del mundo real, donde la diversidad de datos es inevitable.

### Reflexiones y Observaciones Detalladas

Este análisis se cierra con reflexiones adicionales y observaciones más detalladas.

## **Interpretabilidad del Modelo**

Aunque el modelo logra altas métricas de rendimiento, la interpretación de cómo toma decisiones sigue siendo un desafío. En respuesta a este desafío, se ha realizado un análisis exhaustivo utilizando métodos avanzados como atención y saliency maps. Estos métodos proporcionan una comprensión más profunda de las decisiones del modelo, destacando las áreas específicas en las que se basa para realizar predicciones.

## **Optimización de Hiperparámetros**

La búsqueda de hiperparámetros se extendió a través de técnicas más avanzadas, como la optimización bayesiana. Este enfoque permitió una exploración más eficiente y sistemática del espacio de hiperparámetros. Se realizaron experimentos detallados ajustando múltiples parámetros simultáneamente para encontrar la combinación óptima que mejora significativamente el rendimiento del modelo.

## **Exploración de Otros Conjuntos de Datos**

La evaluación en conjuntos de datos adicionales se extendió a dominios más específicos y desafiantes. Esta extensión proporciona una comprensión más completa de la versatilidad del modelo y su aplicabilidad en diferentes contextos. Se exploraron conjuntos de datos que presentan características únicas y desafíos específicos para evaluar la capacidad del modelo para adaptarse a diversas situaciones.

En conjunto, esta sección de análisis detallado de resultados ofrece una visión profunda y completa del rendimiento del modelo GNN y GCN en la clasificación de documentos. Subraya la eficacia del modelo en diferentes aspectos y proporciona información valiosa para futuras mejoras y aplicaciones en escenarios del mundo real.