T2.3 Probabilidad, regla de Bayes y distribuciones

Índice

- 1 Introducción (opcional)
 - 1.1 ¿Qué es probabilidad?
 - 1.2 Tipos de incertidumbre
 - 1.3 Probabilidad como extensión de la lógica
 - 1.3.1 Probabilidad de un evento
 - 1.3.2 Probabilidad de una conjunción de dos eventos
 - 1.3.3 Probabilidad de una unión de dos eventos
 - 1.3.4 Probabilidad condicional de un evento dado otro
 - 1.3.5 Independencia de eventos
 - 1.3.6 Independencia condicional de eventos
 - 1.4 Variables aleatorias
 - 1.4.1 Variables aleatorias discretas
 - 1.4.2 Variables aleatorias continuas
 - 1.4.2.1 Función de distribución acumulada (cdf)
 - 1.4.2.2 Función de densidad de probabilidad (pdf)
 - 1.4.2.3 Cuantiles
 - 1.4.3 Conjuntos de variables aleatorias relacionadas
 - 1.4.4 Independencia e independencia condicional
 - 1.4.5 Momentos de una distribución
 - 1.4.5.1 Media de una distribución
 - 1.4.5.2 Varianza de una distribución
 - 1.4.5.3 Moda de una distribución
 - 1.4.5.4 Momentos condicionales
 - 1.4.6 Limitaciones de la estadística descriptiva

2 Regla de Bayes

- 2.1 Ejemplo: Test de COVID-19
- 2.2 Ejemplo: El problema de Monty Hall
- 2.3 Problemas inversos

3 Distribuciones discretas

- 3.1 Distribución de Bernoulli
- 3.2 Función logística o sigmoide
 - 3.2.1 Función logística o sigmoide
 - 3.2.2 Función logit
- 3.3 Codificación one-hot y distribución categórica
- 3.4 La función softmax
- 4 Distribuciones continuas
 - 4.1 Gaussiana univariada
 - 4.2 Covarianza
 - 4.3 Gaussiana multivariada
 - 4.3.1 Definición
 - 4.3.2 Simulación
 - 4.4 Distancia de Mahalanobis

1 Introducción (opcional)

1.1 ¿Qué es probabilidad?

Frecuentista: frecuencia (asintótica) de eventos repetitivos

Bayesiana: modelo de incertidumbre sobre eventos

1.2 Tipos de incertidumbre

Epistémica: incertidumbre sobre el modelo

Aleatórica: incertidumbre de los datos

1.3 Probabilidad como extensión de la lógica

1.3.1 Probabilidad de un evento

Evento: variable binaria A

Probabilidad de que el evento A sea cierto: $\Pr(A)$

Restricción de probabilidad: $0 \leq \Pr(A) \leq 1$

Evento imposible: Pr(A) = 0 significa que es **imposible** que A ocurra (falso)

Evento seguro: $\Pr(A) = 1$ significa que es **seguro** que A ocurra (cierto)

Probabilidad de que el evento A no ocurra: $\Pr(\bar{A}) = 1 - \Pr(A)$

1.3.2 Probabilidad de una conjunción de dos eventos

Probabilidad conjunta de que A y B ocurran: $\Pr(A \wedge B) = \Pr(A,B)$

Probabilidad conjunta de eventos independientes: si A y B son independientes, entonces $\Pr(A,B) = \Pr(A)\Pr(B)$

Ejemplo: si X e Y se escogen uniformente al azar de $\mathcal{X}=\{1,2,3,4\},\ A$ es el evento $X\in\{1,2\}$ y B el evento $Y\in\{3\}$; entonces A y B son independientes (pues X e Y se escogen independientemente) y $\Pr(A,B)=\Pr(A)\Pr(B)=\frac{1}{2}\cdot\frac{1}{4}=\frac{1}{8}$

1.3.3 Probabilidad de una unión de dos eventos

Probabilidad de que el evento A o B ocurran (uno solo o los dos): $\Pr(A \vee B) = \Pr(A) + \Pr(B) - \Pr(A \wedge B)$

Caso A y B mútuamente excluyentes (no pueden darse a la vez): $\Pr(A \vee B) = \Pr(A) + \Pr(B)$

Ejemplo: Si X se escoge uniformente al azar de $\mathcal{X}=\{1,2,3,4\},\ A$ es el evento $X\in\{1,2\}$ y B el evento $X\in\{3\};$ entonces $\Pr(A\vee B)=\frac{2}{4}+\frac{1}{4}$

1.3.4 Probabilidad condicional de un evento dado otro

Probabilidad condicional de que un evento B ocurra sabiendo que otro evento dado, A, ha ocurrido: $\Pr(B \mid A) = \frac{\Pr(A,B)}{\Pr(A)}$

Nota: no está definida si $\Pr(A)=0$ pues no tiene sentido condicionar sobre la base de un evento imposible

1.3.5 Independencia de eventos

Eventos independientes: A y B son independientes sii $\Pr(A,B) = \Pr(A)\Pr(B)$

Notación: $A \perp B \circ A \perp \!\!\! \perp B$

1.3.6 Independencia condicional de eventos

Eventos condicionalmente independientes: A y B son condicionalmente independientes dado C sii

$$\Pr(A, B \mid C) = \Pr(A \mid C) \Pr(B \mid C)$$

Notación: $A \perp B \mid C \circ A \perp\!\!\!\perp B \mid C$

1.4 Variables aleatorias

Variable aleatoria: valor desconocido de interés X

Espacio muestral: conjunto de valores posibles ${\mathcal X}$

Evento: subconjunto de valores en ${\mathcal X}$

Ejemplo: variable aleatoria X= "valor obtenido al lanzar un dado" definida sobre el espacio muestral $\mathcal{X}=\{1,\ldots,6\}$

- ullet Evento X=1
 ightarrow "sale 1"
- Evento $X \in \{1,3,5\}
 ightarrow$ "sale valor impar"
- Evento $1 \leq X \leq 3 o$ "sale entre 1 y 3"

1.4.1 Variables aleatorias discretas

Variable aleatoria discreta: \mathcal{X} discreto, finito o infinito contable

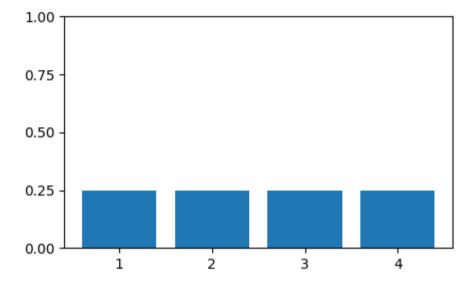
Probabilidad del evento "X toma el valor x": $\Pr(X=x)$

Function de masa de probabilidad (pmr): $p(x) = \Pr(A = x)$

Condiciones de una pmf:
$$0 \leq p(x) \leq 1$$
 y $\displaystyle \sum_{x \in \mathcal{X}} p(x) = 1$

Ejemplo: distribución uniforme en $\mathcal{X} = \{1, 2, 3, 4\}, \ p(x) = 1/4$

```
import numpy as np; import matplotlib.pyplot as plt
X = np.arange(1, 5); pmf = np.repeat(1.0/len(X), len(X))
fig = plt.subplots(figsize=(5,3)); plt.xticks(X);
plt.yticks(np.linspace(0, 1, 5)); plt.ylim((0, 1)); plt.bar(X, pmf, align='center');
```



1.4.2 Variables aleatorias continuas

Variable aleatoria continua: $\mathcal X$ es $\mathbb R$

Necesidad de particionar $\mathcal X$ en un número discreto de intervalos:

- ullet No podemos asociar X a un número discreto de valores distintos
- Sí podemos asociar X a un número discreto de **intervalos** que particionen $\mathcal X$
- ullet Asociando eventos con que X pertenezca a cada uno de los intervalos, razonamos con ellos como si fueran valores del caso discreto
- ullet La probabilidad de que X tome un valor específico se aproxima tomando un intervalo de talla infinitesimal

1.4.2.1 Función de distribución acumulada (cdf)

Función de distribución acumulada (cdf) de una v.a. $X: P(x) = Pr(X \le x)$

(...)

Probabilidad de que X se encuentre en un semi-abierto $C = (a < X \le b)$, con a < b:

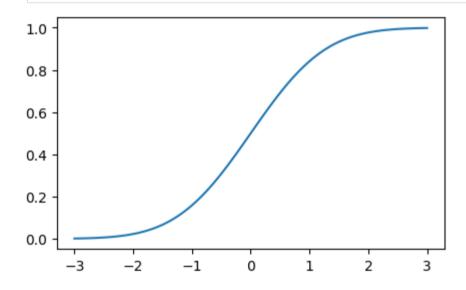
- Sean $A=(X\leq a)$ y $B=(X\leq b)$
- Dado que $B=A\vee C$ y que A y C son mútuamente excluyentes, $\Pr(B)=\Pr(A)+\Pr(C)$
- Por tanto, $\Pr(C) = \Pr(B) \Pr(A) = P(b) P(a)$

Monotonicidad: las cdfs son funciones monótonas no decrecientes

Ejemplo: cdf de la normal estándard

In [2]:

```
import numpy as np; import matplotlib.pyplot as plt; from scipy.stats import norm
X = np.linspace(-3, 3, 100); fig = plt.subplots(figsize=(5,3)); plt.plot(X, norm.cdf(X));
```



1.4.2.2 Función de densidad de probabilidad (pdf)

Función de densidad de probabilidad (pdf): derivada de la cdf (donde existe), $p(x)=rac{d}{dx}P(x)$

Probabilidad de que X se encuentre en un semi-abierto $\ C = (a < X \leq b), \ \mathsf{con} \ a < b$:

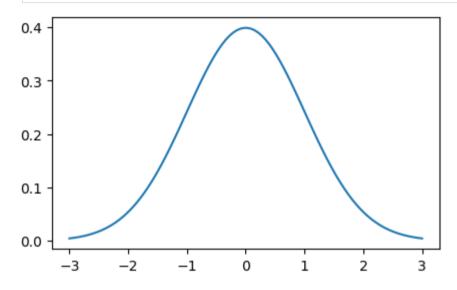
$$\Pr(a < X \leq b) = \int_a^b p(x) \, dx = P(b) - P(a)$$

Aproximación a la probabilidad de que X tome un valor específico x: la probabilidad de que X "caiga" en un pequeño intervalo alrededor de x es aproximadamente igual a la densidad en x por la amplitud del intervalo

$$\Pr(x < X \le x + dx) \approx p(x) dx$$

Ejemplo: pdf de la normal estándar

import numpy as np; import matplotlib.pyplot as plt; from scipy.stats import norm
X = np.linspace(-3, 3, 100); fig = plt.subplots(figsize=(5,3)); plt.plot(X, norm.pdf(X));



1.4.2.3 Cuantiles

Cdf inversa o función cuantil de una cdf P: para todo $q \in (0,1)$

 $P^{-1}(q) = \{x : P(x) = q\}$ si P es monótona estricta $P^{-1}(q) = \inf\{x : P(x) \ge q\}$ si P no es monótona estricta (con saltos o llanos)

Cuantil q de P: $x_q = P^{-1}(q)$ tal que $\Pr(X \leq x_q) = q$

Mediana de $P: P^{-1}(0.5)$

Cuartiles inferior y superior de P: $P^{-1}(0.25)$ y $P^{-1}(0.75)$

Ejemplo: si Φ es la cdf de la normal estándard y Φ^{-1} su inversa, el intervalo centrado en el origen con un 95% de probabilidad es

$$(\Phi^{-1}(0.025), \Phi^{-1}(0.975)) = (-1.96, 1.96)$$

1.4.3 Conjuntos de variables aleatorias relacionadas

Distribución conjunta de dos variables aleatorias X e Y: p(x,y)=p(X=x,Y=y)

Caso finito: si X e Y son finitas, su distribución conjunta puede representarse en una tabla 2d cuyas entradas suman uno en total **Ejemplo**:

$$p(X,Y)$$
 $Y = 0$ $Y = 1$
 $X = 0$ 0.2 0.3
 $X = 1$ 0.3 0.2

Distribución marginal de una variable aleatoria: también llamada regla suma o de la probabilidad total

$$p(X=x) = \sum_y p(X=x,Y=y)$$
 $p(Y=y) = \sum_x p(X=x,Y=y)$

Ejemplo (cont.): marginales en los márgenes de la tabla

Distribución condicional de Y dada X: $p(Y=y\mid X=x)=rac{p(X=x,Y=y)}{p(X=x)}$

Ejemplo (cont.):

$$\begin{array}{cccc} p(Y \mid X) & Y = 0 & Y = 1 \\ X = 0 & 0.4 & 0.6 \\ X = 1 & 0.6 & 0.4 \end{array}$$

Regla producto: reordenando factores, $p(X=x,Y=y)=p(X=x)p(Y=y\mid X=x)$

Regla de la cadena: extiende la regla producto a D variables

$$p(oldsymbol{x}_{1:D}) = p(x_1)\,p(x_2\mid x_1)\,p(x_3\mid x_1,x_2)\cdots p(x_D\mid oldsymbol{x}_{1:D-1})$$

1.4.4 Independencia e independencia condicional

Independencia (incondicional o marginal) de dos variables: $X \perp Y \iff P(X,Y) = P(X)\,P(Y)$

Independencia (mútua) de múltiples variables: X_1,\ldots,X_n independientes si, para todo $\{X_1,\ldots,X_m\}\subseteq\{X_1,\ldots,X_n\}$,

$$P(X_1,\ldots,X_m) = \prod_{i=1}^m P(X_i)$$

Independencia condicional de dos variables: X e Y son condicionalmente independientes dada Z sii su conjunta condicional puede expresarse como el producto de sus marginales condicionales

$$X \perp Y \mid Z \Leftrightarrow P(X,Y \mid Z) = P(X \mid Z) P(Y \mid Z)$$

1.4.5 Momentos de una distribución

1.4.5.1 Media de una distribución

Media o valor esperado:

$$\mu=\mathbb{E}[X]=\sum_{x\in\mathcal{X}}x\,p(x)$$
 para variables discretas (ordenadas) $\mu=\mathbb{E}[X]=\int_{\mathcal{X}}x\,p(x)\,dx$ para variables continuas

Linealidad de la esperanza: $\mathbb{E}[aX+b]=a\mathbb{E}[X]+b$

Esperanza de la suma de n variables aleatorias: $\mathbb{E}\left[\sum_{i=1}^n X_i\right] = \sum_{i=1}^n \mathbb{E}[X_i]$

Esperanza del producto de n variables aleatorias independientes: $\mathbb{E}\left[\prod_{i=1}^n X_i\right] = \prod_{i=1}^n \mathbb{E}[X_i]$

1.4.5.2 Varianza de una distribución

Varianza:
$$\sigma^2=\mathbb{V}[X]=\mathbb{E}[(X-\mu)^2]$$

$$\sigma^2=\mathbb{V}[X]=\sum_x (x-\mu)^2\,p(x) \qquad \text{para variables discretas (ordenadas)}$$

$$\sigma^2 = \mathbb{V}[X] = \int (x - \mu)^2 \, p(x) \, dx$$
 para variables continuas

Propiedad: "media del cuadrado menos cuadrado de la media"

$$egin{aligned} \mathbb{V}[X] &= \mathbb{E}[(X - \mathbb{E}[X])^2] \ &= \mathbb{E}[X^2 - 2X\mathbb{E}[X] + \mathbb{E}[X]^2] \ &= \mathbb{E}[X^2] - 2\mathbb{E}[X]\mathbb{E}[X] + \mathbb{E}[X]^2 \ &= \mathbb{E}[X^2] - \mathbb{E}[X]^2 \end{aligned}$$

Resultado útil: $\mathbb{E}[X^2] = \sigma^2 + \mu^2$

Desviación típica: $\sigma = \operatorname{std}[X] = \sqrt{\mathbb{V}[X]}$

Varianza de una variable aleatoria escalada y desplazada: $\mathbb{V}[aX+b]=a^2\mathbb{V}[X]$

Varianza de la suma de n variables aleatorias independientes: $\mathbb{V}\left[\sum_{i=1}^n X_i\right] = \sum_{i=1}^n \mathbb{V}[X_i]$

Varianza del producto de n variables aleatorias independientes:

$$egin{aligned} \mathbb{V}\left[\prod_{i=1}^{n}X_{i}
ight] &= \mathbb{E}\left[\left(\prod_{i}X_{i}
ight)^{2}
ight] - \left(\mathbb{E}\left[\prod_{i}X_{i}
ight]
ight)^{2} \ &= \mathbb{E}\left[\prod_{i}X_{i}^{2}
ight] - \left(\prod_{i}\mathbb{E}[X_{i}]
ight)^{2} \ &= \prod_{i}\mathbb{E}\left[X_{i}^{2}
ight] - \prod_{i}\left(\mathbb{E}[X_{i}]
ight)^{2} \ &= \prod_{i}\left(\mathbb{V}[X_{i}] + \left(\mathbb{E}[X_{i}]
ight)^{2}
ight) - \prod_{i}\left(\mathbb{E}[X_{i}]
ight)^{2} \ &= \prod_{i=1}^{n}(\sigma_{i}^{2} + \mu_{i}^{2}) - \prod_{i=1}^{n}\mu_{i}^{2} \end{aligned}$$

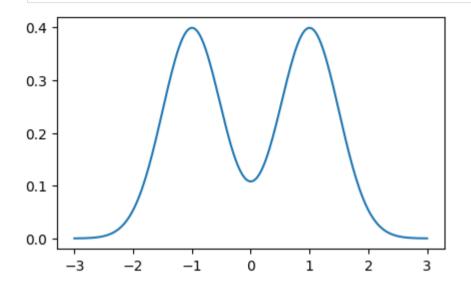
1.4.5.3 Moda de una distribución

Moda: valor de máxima (densidad de) probabilidad, $m{x}^* = \argmax_{m{x}} p(m{x})$

No unicidad de la moda: si la distribución es multimodal; por ejemplo

In [4]:

import numpy as np; import matplotlib.pyplot as plt; from scipy.stats import norm
X = np.linspace(-3, 3, 200); pdf = .5 * norm.pdf(X, loc=-1, scale=.5) + .5 * norm.pdf(X, loc=1, scale=.5)
fig = plt.subplots(figsize=(5,3)); plt.plot(X, pdf);



1.4.5.4 Momentos condicionales

Ley de la esperanza total o esperanzas iteradas: $\mathbb{E}[X] = \mathbb{E}_Y[\mathbb{E}[X \mid Y]]$

$$\mathbb{E}_Y[\mathbb{E}[X\mid Y]] = \sum_y \left[\sum_x x\, p(X=x\mid Y=y)
ight] p(Y=y) = \sum_{x,y} x\, p(X=x,Y=y) = \sum_x x \sum_y p(X=x,Y=y) = \mathbb{E}[X]$$

Ejemplo: X="vida de una bombilla en horas", $Y\in\{1,2\}$ es la fábrica

- Fábrica 1: produce el 60% de las bombillas y duran 5000 horas de media
- Fábrica 2: produce el 40% de las bombillas y duran 4000 horas de media

$$\mathbb{E}[X] = \mathbb{E}[X \mid Y = 1] \, p(Y = 1) + \mathbb{E}[X \mid Y = 2] \, p(Y = 2) = 5000 \cdot 0.6 + 4000 \cdot 0.4 = 4600$$

Ley de la varianza total o fórmula de la varianza condicional: $\mathbb{V}[X] = \mathbb{E}_Y[\mathbb{V}[X \mid Y]] + \mathbb{V}_Y[\mathbb{E}[X \mid Y]]$

Demo: dados
$$\mu_{X\mid Y}=\mathbb{E}[X\mid Y], \quad s_{X\mid Y}=\mathbb{E}[X^2\mid Y]$$
 y $\sigma^2_{X\mid Y}=\mathbb{V}[X\mid Y]=s_{X\mid Y}-\mu^2_{X\mid Y}$

$$\mathbb{V}[X] = \mathbb{E}[X^2] - (\mathbb{E}[X])^2 = \mathbb{E}_Y[s_{X|Y}] - (\mathbb{E}_Y[\mu_{X|Y}])^2 = \mathbb{E}_Y[\sigma_{X|Y}^2] + \mathbb{E}_Y[\mu_{X|Y}^2] - (\mathbb{E}_Y[\mu_{X|Y}])^2 = \mathbb{E}_Y[\mathbb{V}[X \mid Y]] + \mathbb{V}_Y[\mu_{X|Y}]$$

Ejemplo:
$$X=\pi_1\,\mathcal{N}(X\mid \mu_1,\sigma_1)+\pi_2\,\mathcal{N}(X\mid \mu_2,\sigma_2),$$
 con $\pi_1=\pi_2=0.5,\ \mu_1=0,\ \mu_2=2$ y $\sigma_1=\sigma_2=0.5;\ Y\in\{1,2\}$ es

una variable oculta que indica la componente

$$\mathbb{E}_{Y}[\mathbb{V}[X\mid Y]] = \pi_{1}\sigma_{1}^{2} + \pi_{2}\sigma_{2}^{2} = 0.25$$
 $\mathbb{V}_{Y}[\mathbb{E}[X\mid Y]] = \pi_{1}(\mu_{1} - \bar{\mu})^{2} + \pi_{2}(\mu_{2} - \bar{\mu})^{2} = 0.5(0 - 1)^{2} + 0.5(2 - 1)^{2} = 0.5 + 0.5 = 1$
 $\mathbb{V}[X] = 0.25 + 1 = 1.25$

1.4.6 Limitaciones de la estadística descriptiva

Limitaciones de la estadística descriptiva: resumir una distribución con estadísticos simples (media y varianza) supone gran pérdida de información

Ejemplo: conjuntos de datos con mismas medias y varianzas

```
In [5]:
          import warnings; warnings.filterwarnings('ignore'); import seaborn as sns
          sns.set theme(style="ticks"); df = sns.load dataset("anscombe")
          g = sns.lmplot(x="x", y="y", col="dataset", hue="dataset", data=df, col wrap=4, ci=None, palette="muted",
                          height=4, scatter kws={"s": 50, "alpha": 1}, truncate=False); g.set(xlim=(2.5, 20.5))
          for d in ['I', 'II', 'III', 'IV']:
              y = df[df['dataset'] == d]['y'].to numpy()
              print(f'{d} {y.mean():.2f} {y.var():.2f}')
       I 7.50 3.75
       II 7.50 3.75
       III 7.50 3.75
        IV 7.50 3.75
                      dataset = I
                                                     dataset = II
                                                                                                                 dataset = IV
                                                                                   dataset = III
         12
         10
       > 8
         4
                                      20
                                                                     20
                                                                                                   20
                       10
                                                     10
                                                             15
                                                                                   10
                                                                                           15
                                                                                                                  10
                                                                                                                                 20
```

2 Regla de Bayes

variables: information desconocida u oculta (nidden) H y datos observados I

Distribución a priori: p(H) es nuestra creencia sobre H antes de observar datos

Distribución de observaciones: $p(Y \mid H = h)$ es la distribución sobre los posibles valores de Y que esperamos ver si H = h

Verosimilitud: $p(Y=y\mid H=h)$ es la evaluación de $p(Y\mid H=h)$ con las observaciones reales y

Distribución conjunta: $p(H=h,Y=y)=p(H=h)\,p(Y=y\mid H=h)$

Verosimilitud marginal: p(Y = y) se obtiene marginalizando la conjunta

Distribución a posteriori o regla de Bayes: actualiza nuestra creencia sobre H tras observar datos

$$p(H=h|Y=y)=rac{p(H=h,Y=y)}{p(Y=y)}=p(H=h)\,rac{p(Y=y\mid H=h)}{p(Y=y)}$$

2.1 Ejemplo: Test de COVID-19

Variable oculta: H=1 infección positiva; H=0 infección negativa

Datos observados: Y = 1 test positivo; Y = 0 test negativo

Distribución a priori: p(H=1)=1% prevalencia de la infección

Verosimilitud:

Probabilidad de estar infectado si el test es positivo:

$$p(H=1 \mid Y=1) = p(H=1) \, rac{p(Y=1 \mid H=1)}{p(Y=1)} = 0.01 \, rac{0.875}{0.0335} = 26\%$$

2.2 Ejemplo: El problema de Monty Hall

Problema de Monty Hall: se basa en el concurso televisivo Let's Make a Deal (1963--) presentado por Monty Hall durante 30 años

1. El concursante elige una puerta de tres

2. El presentador abre otra y aparece una cabra; en las dos que siguen cerradas hay un coche y otra cabra

3. El concursante puede cambiar de puerta: ¿cambia de puerta?

Variable oculta: H=i indica que el coche está en la puerta i

Distribución a priori: $P(H=1)=P(H=2)=P(H=3)=rac{1}{3}$

Datos observados: $Y=j,j\in\{2,3\}$ es la puerta que escoge el presentador tras escoger la 1 el concursante

Distribución de observaciones:

$$\begin{array}{c|cccc} H & P(Y=2 \mid H) & P(Y=3 \mid H) \\ \hline 1 & 1/2 & 1/2 \\ 2 & 0 & 1 \\ 3 & 1 & 0 \\ \end{array}$$

Distribución conjunta y verosimilitud marginal:

H	P(H,Y=2)	P(H,Y=3)
1	1/6	1/6
2	0	1/3
3	1/3	0
$\overline{P(Y)}$	1/2	$\overline{1/2}$

Distribución a posteriori o regla de Bayes:

$$\begin{array}{c|ccc} H & P(H \mid Y=2) & P(H \mid Y=3) \\ \hline 1 & 1/3 & 1/3 \\ 2 & 0 & 2/3 \\ 3 & 2/3 & 0 \\ \end{array}$$

Conclusión: conviene cambiar ya que encontraremos el coche con probabilidad 2/3

2.3 Problemas inversos

Teoría de la probabilidad: predicción de salidas y a partir de conocimiento o asunciones sobre el estado de la naturaleza, h

Teoría de la probabilidad inversa: predicción de estados de la naturaleza h a partir de observaciones sobre la salida, y

Ejemplos: inferir una forma 3d a partir de una imagen 2d en **comprensión de escenas visuales,** o la intención h de un locutor a partir de lo que dice en **comprensión del lenguaje natural**

Problemas inversos: usamos la regla de Bayes para calcular la posterior, p(h|y), mediante un **modelo hacia adelante** p(y|h) y un prior p(h) que descarte estados de la naturaleza no plausibles

3 Distribuciones discretas

3.1 Distribución de Bernoulli

Distribución de Bernoulli: $Y \sim \mathrm{Ber}(\theta), \ \theta \in [0,1], \ \mathsf{si} \ \mathsf{su} \ \mathsf{pmf} \ p : \{0,1\} \to [0,1] \ \mathsf{es}$

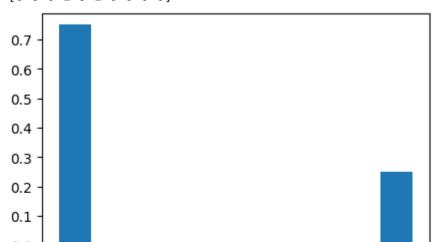
$$p(y \mid heta) = egin{cases} 1 - heta & ext{si } y = 0 \ heta & ext{si } y = 1 = heta y + (1 - heta)(1 - y) = heta^y (1 - heta)^{1 - y} \end{cases} \qquad (0^0 = 1, \, 0 \log 0 = 0)$$

Interpretación: Y es el resultado de un experimento con probabilidad de éxito (Y=1) θ y probabilidad de fracaso (Y=0) $1-\theta$

Ejemplo: $\theta=0.25$

```
import matplotlib.pyplot as plt; from scipy.stats import bernoulli
t = 0.25; Y = bernoulli(t); print(Y.rvs(10)); y = [0, 1]
fig = plt.subplots(figsize=(5,3)); plt.bar(y, Y.pmf(y), width=0.1);
```

[0 0 0 1 0 1 0 0 0 0]



Media:
$$\mathbb{E}[Y] = 0$$
 $p(0 \mid \theta) + 1$ $p(1 \mid \theta) = 0$ $(1 - \theta) + 1$ $\theta = \theta$

Media del cuadrado de una Bernoulli: $\ \mathbb{E}[Y^2] = 0^2 \, p(0 \mid heta) + 1^2 \, p(1 \mid heta) = heta$

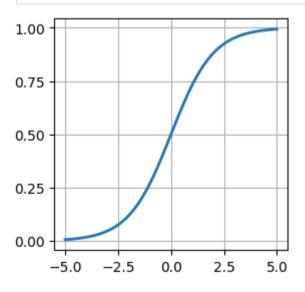
Varianza de una Bernoulli: $\mathbb{V}[Y] = \mathbb{E}[Y^2] - \mathbb{E}[Y]^2 = \theta - \theta^2 = \theta(1-\theta)$

3.2 Función logística o sigmoide

3.2.1 Función logística o sigmoide

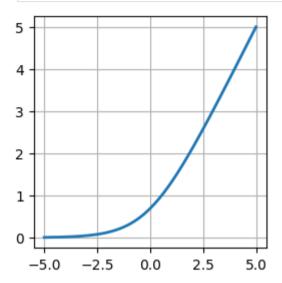
Función logística o sigmoide: función $\sigma:\mathbb{R} o [0,1]$ con forma de S, $\sigma(a)=rac{1}{1+e^{-a}}=rac{e^a}{1+e^a}$

```
import numpy as np; import matplotlib.pyplot as plt
def sigmoid(a):
    return 1 / (1 + np.exp(-a))
fig = plt.subplots(figsize=(3,3)); plt.grid(); plt.yticks(np.arange(0, 1.1, step=0.25))
a = np.linspace(-5, 5, 200); plt.plot(a, sigmoid(a), linewidth=2);
```



Función softplus: $\sigma_+(a) = \log(1+e^a)$

```
def softplus(a):
          return np.log1p(np.exp(a))
fig = plt.subplots(figsize=(3,3)); plt.grid();
a = np.linspace(-5, 5, 200); plt.plot(a, softplus(a), linewidth=2);
```



3.2.2 Función logit

Función logit: función $\mathrm{logit}:[0,1] o \mathbb{R}$ inversa de la sigmoide, $\mathrm{logit}(p) = \log\left(\frac{p}{1-p}\right)$

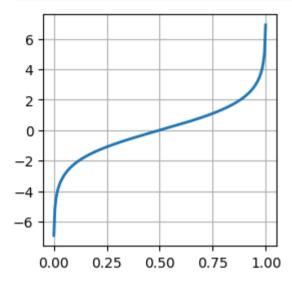
Interpretación: si p es la probabilidad de que un cierto evento ocurra, su logit es la log-posibilidad (log-odds) de que el evento ocurra frente a que no ocurra, por lo que tenemos tres casos

- 1. Más posibilidades de ocurrir que de no: odds mayor que 1 y log-odds positiva
- 2. Igual posibilidades de ocurrir que de no: odds 1 y log-odds nula
- 3. Menos posibilidades de ocurrir que de no: odds menor que $1\,\mathrm{y}$ log-odds negativa

Inversa de la sigmoide:

$$\sigma(a) = rac{1}{1 + e^{-a}} = rac{e^a}{1 + e^a} \ 1 - \sigma(a) = 1 - rac{1}{1 + e^{-a}} = rac{e^{-a}}{1 + e^{-a}} = rac{1}{1 + e^a} = \sigma(-a) \ ext{logit}(\sigma(a)) = \log\left(rac{\sigma(a)}{1 - \sigma(a)}
ight) = \log\left(rac{e^a}{1 + e^a} rac{1 + e^a}{1}
ight) = \log(e^a) = a$$

import numpy as np; import matplotlib.pyplot as plt
def logit(p):
 return np.log(p / (1 - p))
fig = plt.subplots(figsize=(3,3)); plt.grid(); plt.xticks(np.arange(0, 1.1, step=0.25))
p = np.linspace(.001, .999, 200); plt.plot(p, logit(p), linewidth=2);



Recordatorio: la sigmoide transforma log-odds en probabilidad y la logit probabilidad en log-odds

3.3 Codificación one-hot y distribución categórica

Propósito: generalizar la Bernoulli a C>2 clases, esto es, una distribución sobre un conjunto finito de etiquetas $\mathcal{C}=\{1,\ldots,C\}$

Codificación one-hot: de una variable categórica $y \in \{1, \dots, C\}$

$$ext{one-hot}(y) = oldsymbol{y} = egin{pmatrix} y_1 \ dots \ y_C \end{pmatrix} = egin{pmatrix} \mathbb{I}(y=1) \ dots \ \mathbb{I}(y=C) \end{pmatrix} \in \{0,1\}^C \quad ext{con} \quad \sum_c y_c = 1$$

Distribución categórica: $Y \sim \mathrm{Cat}(m{ heta}), \ m{ heta} \in [0,1]^C, \ \sum_c heta_c = 1, \ \mathsf{si} \ \mathsf{su} \ \mathsf{pmf} \ p: \mathcal{C} o [0,1] \ \mathsf{es}$

$$p(y \mid heta) = \prod_{c=1}^C heta_c^{\mathbb{I}(y=c)}$$
 o, en notación one-hot, $p(oldsymbol{y} \mid heta) = \prod_{c=1}^C heta_c^{y_c}$

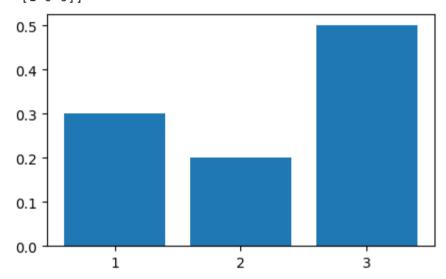
Interpretación: θ_c es la probabilidad de que y valga c, $p(y=c \mid \boldsymbol{\theta}) = \theta_c$

Sobre-parametrización: solo tenemos C-1 parámetros libres por las restricciones sobre $oldsymbol{ heta}$

Ejemplo: $C = 3, \theta^t = (0.3, 0.2, 0.5)$

import matplotlib.pyplot as plt; from scipy.stats import multinomial
t = [0.3, 0.2, 0.5]; Y = multinomial(1, t); print(Y.p, Y.rvs(3))
fig = plt.subplots(figsize=(5,3)); plt.xticks(range(1, 4)); plt.bar(range(1, 4), Y.p);

[0.3 0.2 0.5] [[0 0 1] [1 0 0] [1 0 0]]



Convención: $0^0 = 1$ i $0 \log 0 = 0$; por ejemplo, con $\boldsymbol{\theta} = (0.5, 0.5, 0)^t$, $\mathrm{Cat}(\boldsymbol{y} = (1, 0, 0)^t \mid \boldsymbol{\theta}) = 0.5^1 0.5^0 0^0 = 0.5$

3.4 La función softmax

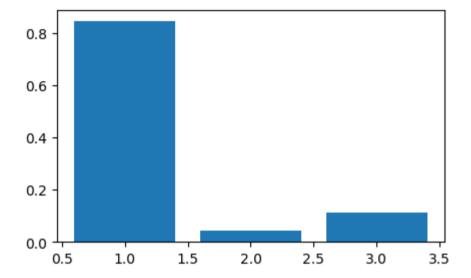
Función softmax: transforma logits $oldsymbol{a} \in \mathbb{R}^C$ en un vector de probabilidades $[0,1]^C$

$$\mathcal{S}(m{a}) = \left(rac{e^{a_1}}{\sum_{ ilde{c}}e^{a_{ ilde{c}}}}, \ldots, rac{e^{a_C}}{\sum_{ ilde{c}}e^{a_{ ilde{c}}}}
ight)^t \qquad ext{cumpli\'endose} \qquad 0 \leq \mathcal{S}(m{a})_c \leq 1 \quad ext{y} \quad \sum_{c=1}^C \mathcal{S}(m{a})_c = 1$$

$$\textbf{Ejemplo: } \boldsymbol{a} = (3,0,1)^t, \, \mathcal{S}(\boldsymbol{a}) = \left(\frac{e^3}{e^3+1+e}, \frac{1}{e^3+1+e}, \frac{e}{e^3+1+e}\right)^t = (0.8438, 0.0420, 0.1142)^t$$

Tn [1]:

```
import numpy as np; import matplotlib.pyplot as plt
def softmax(a):
    e = np.exp((1.0 * np.array(a))); return e / np.sum(e)
a = np.array([3, 0, 1]); fig = plt.subplots(figsize=(5,3));
plt.bar(np.arange(1, a.size+1), softmax(a));
```



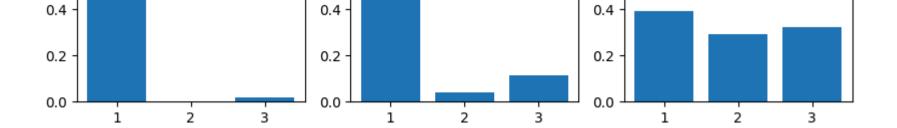
Softmax atemperada: normaliza logits mediante división por una constante de **temperatura** T>0

- ullet Bajas temperaturas: tiende a la argmax, $\lim_{T o 0^+}\,\mathcal{S}(m{a}/T)_c=\mathbb{I}(c=rgmax_{c'}\,a_{c'})$
- Altas temperaturas: tiende a la uniforme, $\lim_{T o \infty} \, \mathcal{S}(m{a}/T)_c = 1/C$

Ejemplo: $\boldsymbol{a} = (3,0,1)^t, \, T \in \{0.5,1,10\}$

axs[i].set ylim((0, 1)); axs[i].bar(np.arange(1, a.size+1), softmax(a/T));





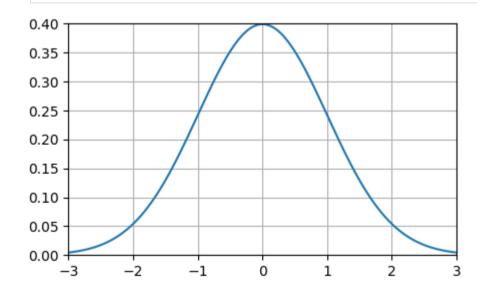
4 Distribuciones continuas

4.1 Gaussiana univariada

Función de densidad de probabilidad (pdf) Gaussiana: $Y \sim \mathcal{N}(y \mid \mu, \sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}(y-\mu)^2\right)$

```
In [1]:
```

```
import numpy as np; import matplotlib.pyplot as plt; from scipy.stats import norm
Y = norm(0, 1); y = np.linspace(-3, 3, 200); fig = plt.subplots(figsize=(5,3))
plt.grid(); plt.xlim(-3, 3); plt.ylim(0, .4); plt.plot(y, Y.pdf(y));
```



4.2 Covarianza

Covarianza entre dos variables aleatorias X e Y:

$$\operatorname{Cov}[X,Y] = \mathbb{E}[(X - \mathbb{E}[X])(Y - \mathbb{E}[Y])] = \mathbb{E}[XY] - \mathbb{E}[X]\mathbb{E}[Y]$$

Interpretación de la covarianza: mide hasta qué grado X e Y están (linealmente) relacionadas

Matriz de covarianzas de un vector aleatorio D-dimensional x: matriz simétrica y semi-definida positiva

$$oldsymbol{\Sigma} = \operatorname{Cov}[oldsymbol{x}] = \mathbb{E}\left[(oldsymbol{x} - \mathbb{E}[oldsymbol{x}])(oldsymbol{x} - \mathbb{E}[oldsymbol{x}])^t
ight] = egin{pmatrix} \mathbb{V}[X_1] & \operatorname{Cov}[X_1, X_2] & \cdots & \operatorname{Cov}[X_1, X_D] \\ \operatorname{Cov}[X_2, X_1] & \mathbb{V}[X_2] & \cdots & \operatorname{Cov}[X_2, X_D] \\ dots & dots & \ddots & dots \\ \operatorname{Cov}[X_D, X_1] & \operatorname{Cov}[X_D, X_2] & \cdots & \mathbb{V}[X_D] \end{pmatrix}$$

Resultado importante: $\mathbb{E}[oldsymbol{x}oldsymbol{x}^t] = oldsymbol{\Sigma} + oldsymbol{\mu}oldsymbol{\mu}^t$

Covarianza de una transformación lineal: $\operatorname{Cov}[\mathbf{A}m{x}+m{b}] = \mathbf{A}\operatorname{Cov}[m{x}]\mathbf{A}^t$

Covarianza cruzada entre dos vectores aleatorios: $\mathrm{Cov}[m{x},m{y}] = \mathbb{E}[(m{x}-\mathbb{E}[m{x}])(m{y}-\mathbb{E}[m{y}])^t]$

4.3 Gaussiana multivariada

4.3.1 Definición

Gaussiana multivariada: $m{x} \sim \mathcal{N}(m{\mu}, m{\Sigma})$, con $m{x} \in \mathbb{R}^D$, media $m{\mu} = \mathbb{E}[m{x}] \in \mathbb{R}^D$ y matriz de covarianzas $m{\Sigma} = \mathrm{Cov}[m{x}] \in \mathbb{R}^{D imes D}$

$$p(oldsymbol{x} \mid oldsymbol{\mu}, oldsymbol{\Sigma}) = rac{1}{(2\pi)^{D/2} |oldsymbol{\Sigma}|^{1/2}} \mathrm{exp} \left[-rac{1}{2} (oldsymbol{x} - oldsymbol{\mu})^t oldsymbol{\Sigma}^{-1} (oldsymbol{x} - oldsymbol{\mu})
ight]$$

 $\textbf{Gaussiana bivariada:} \ \boldsymbol{x} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}), \ \text{con} \ \boldsymbol{x}, \boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^2 \ \text{y} \ \boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \sigma_{12}^2 \\ \sigma_{21}^2 & \sigma_2^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \rho \sigma_1 \sigma_2 \\ \rho \sigma_1 \sigma_2 & \sigma_2^2 \end{pmatrix} \ \text{con} \ \rho = \frac{\sigma_{12}^2}{\sigma_1 \sigma_2}$

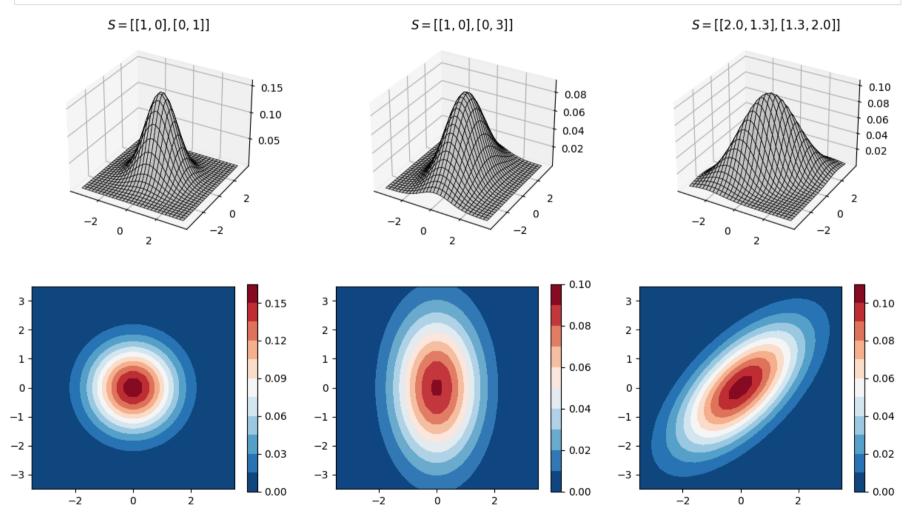
$$p(x_1,x_2) = rac{1}{2\pi\sigma_1\sigma_2\sqrt{1-
ho^2}} \mathrm{exp}\left(-rac{1}{2(1-
ho^2)} \Bigg[rac{(x_1-\mu_1)^2}{\sigma_1^2} + rac{(x_2-\mu_2)^2}{\sigma_2^2} - 2
ho\,rac{(x_1-\mu_1)}{\sigma_1}rac{(x_2-\mu_2)}{\sigma_2}\Bigg]
ight)$$

Tipos de Gaussianas según estructura de Σ :

- **Esférica:** $\Sigma = \sigma^2 \mathbf{I}$, con un único parámetro y curvas de iso-densidad hiper-esféricas
- **Diagonal:** $\Sigma = \mathrm{diag}(\sigma_1^2,\ldots,\sigma_D^2)$, con D parámetros y curvas de iso-densidad hiper-elipsoidales de semiejes paralelos a la base
- Conoral: $\mathbf{\Sigma}$ no diagonal con D(D+1)/2 parámetros y curvas do iso densidad hipos elipsoidales de semieiros obligues a la base

deficial. 2 no diagonal, con D(D+1)/2 parametros y curvas de iso-densidad imper-empsoidates de senniejes obticuos a la base

import numpy as np; import matplotlib.pyplot as plt; from scipy.stats import multivariate_normal
R = np.linspace(-3.5, 3.5, 30); x, y = np.meshgrid(R, R); me, Se = [0, 0], [[1, 0], [0, 1]]
md, Sd = [0, 0], [[1, 0], [0, 3]]; mg, Sg = [0, 0], [[2., 1.3], [1.3, 2.]]
fig = plt.figure(figsize=(15, 8)); fig.tight_layout()
for i, (m, S) in enumerate(zip((me, md, mg), (Se, Sd, Sg)), start=1):
 z = multivariate_normal(m, S).pdf(np.dstack((x, y)))
 ax = fig.add_subplot(2, 3, i, projection='3d'); ax.set_title(f'\$S={S}*.format(S))
 ax.plot_surface(x, y, z, color='white', edgecolor="black", lw=.5)
 ax = fig.add_subplot(2, 3, i+3, aspect='equal')
 cp = ax.contourf(x, y, z, 10, cmap='RdBu_r'); plt.colorbar(cp, ax=ax);



4.3.2 Simulación

Gaussiana general como afinidad de la estándar: $m{x}\sim\mathcal{N}_D(m{0}.m{I}), \quad m{y}=m{W}m{x}+m{\mu} \quad o \quad m{x}=m{W}^{-1}(m{y}-m{\mu})$

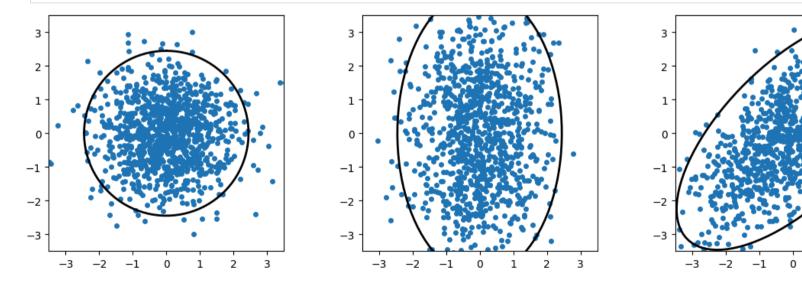
$$egin{aligned} p_{m{y}}(m{y}) &= p_{m{x}}(\mathbf{W}^{-1}(m{y}-m{\mu})) \, |\mathrm{det}(\mathbf{W}^{-1})| \ &= rac{1}{(2\pi)^{D/2} |\mathrm{det}(\mathbf{W})|} \mathrm{exp} \left[-rac{1}{2} (m{y}-m{\mu})^t \mathbf{W}^{-t} \mathbf{W}^{-1} (m{y}-m{\mu})
ight] \ &= rac{1}{(2\pi)^{D/2} |m{\Sigma}|^{1/2}} \mathrm{exp} \left[-rac{1}{2} (m{x}-m{\mu})^t m{\Sigma}^{-1} (m{x}-m{\mu})
ight] \quad \mathrm{con} \quad m{\Sigma} = \mathbf{W} \mathbf{W}^t \end{aligned}$$

Bola Gaussiana estándar de masa p: $P(\|\boldsymbol{x}\|_2^2 \le r) = P(\chi_D^2 \le r) = p$

Bola Gaussiana estándar 2d de masa p: $r = \sqrt{-2\log(1-p)}$ $p = 1 - e^{-r^2/2}$

In [2]:

```
import numpy as np; import matplotlib.pyplot as plt; from scipy.stats import multivariate_normal
me, Se = [0, 0], [[1, 0], [0, 1]]; md, Sd = [0, 0], [[1, 0], [0, 3]]; mg, Sg = [0, 0], [[2., 1.3], [1.3, 2.]]
p = .95; r = np.sqrt(-2.0*np.log(1.0-p)); t = np.linspace(0, 2.0*np.pi, 100);
C = np.array([np.cos(t), np.sin(t)]) * r; fig = plt.figure(figsize=(15, 4)); fig.tight_layout()
for i, (m, S) in enumerate(zip((me, md, mg), (Se, Sd, Sg)), start=1):
    ax = fig.add_subplot(1, 3, i, aspect='equal'); ax.set_xlim(-3.5, 3.5); ax.set_ylim(-3.5, 3.5)
    X = multivariate_normal(m, S).rvs(1000); ax.scatter(*X.T, s=16)
    La, U = np.linalg.eigh(S); k = La.argsort()[::-1]; La = La[k]; U = U[:,k]; W = U @ np.diag(np.sqrt(La))
    Y = W @ C; ax.plot(*Y, lw=2, color='black')
```



4.4 Distancia de Mahalanobis

Distancia de Mahalanobis entre y y μ con respecto a Σ^{-1} :

$$\Delta(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{\mu}; \boldsymbol{\Sigma}^{-1}) = \sqrt{(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\mu})^t \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\mu})}$$

Gaussiana multivariada en términos de Mahalanobis (al cuadrado):

$$p(oldsymbol{y} \mid oldsymbol{\mu}, oldsymbol{\Sigma}) = rac{1}{(2\pi)^{D/2} |oldsymbol{\Sigma}|^{1/2}} \mathrm{exp} \left[-rac{1}{2} \Delta^2(oldsymbol{y}, oldsymbol{\mu}; oldsymbol{\Sigma}^{-1})
ight]$$

Mahalanobis como afinidad de la Euclídea (al origen): $m{x}=(r\cos heta,r\sin heta), \quad m{\Sigma}=\mathbf{W}\mathbf{W}^t, \quad m{y}=\mathbf{W}m{x}+m{\mu}$

ax.arrow(0, 0, *r*W[:, 0], width=.05, length_includes_head=True)
ax.arrow(0, 0, *r*W[:, 1], width=.05, length_includes_head=True)

$$\Delta^2(oldsymbol{y},oldsymbol{\mu};oldsymbol{\Sigma}^{-1})=(oldsymbol{y}-oldsymbol{\mu})^toldsymbol{\Sigma}^{-1}(oldsymbol{y}-oldsymbol{\mu})=(\mathbf{W}oldsymbol{x})^t\mathbf{W}^{-t}\mathbf{W}^{-1}\mathbf{W}oldsymbol{x}=\|oldsymbol{x}\|_2^2=r^2$$

import numpy as np; import matplotlib.pyplot as plt; from scipy.stats import multivariate_normal
me, Se = [0, 0], [[1, 0], [0, 1]]; md, Sd = [0, 0], [[1, 0], [0, 3]]; mg, Sg = [0, 0], [[2., 1.3], [1.3, 2.]]
p = .8; r = np.sqrt(-2.0*np.log(1.0-p)); t = np.linspace(0, 2.0*np.pi, 100);
C = np.array([np.cos(t), np.sin(t)]) * r; fig = plt.figure(figsize=(15, 4)); fig.tight_layout()
for i, (m, S) in enumerate(zip((me, md, mg), (Se, Sd, Sg)), start=1):
 ax = fig.add_subplot(1, 3, i, aspect='equal'); ax.set_xlim(-3.5, 3.5); ax.set_ylim(-3.5, 3.5); ax.grid()
 La, U = np.linalg.eigh(S); k = La.argsort()[::-1]; La = La[k]; U = U[:,k]; W = U @ np.diag(np.sqrt(La))
 Y = W @ C; ax.plot(*Y, lw=2, color='black'); ax.set_title(f'\$S={S}\quad r={r:.2f}\$')

