Aprendizaje profundo basado en la física

Semana 7: Cuantificación de incertidumbre

Docente: José I. Robledo - 21/05/2026

Cuantificación de incertidumbre

Introducción

- La mayoría de los modelos de aprendizaje automático producen predicciones puntuales.

- No suele alcanzar con esto, muchas veces necesitamos saber qué tan confiable es la predicción

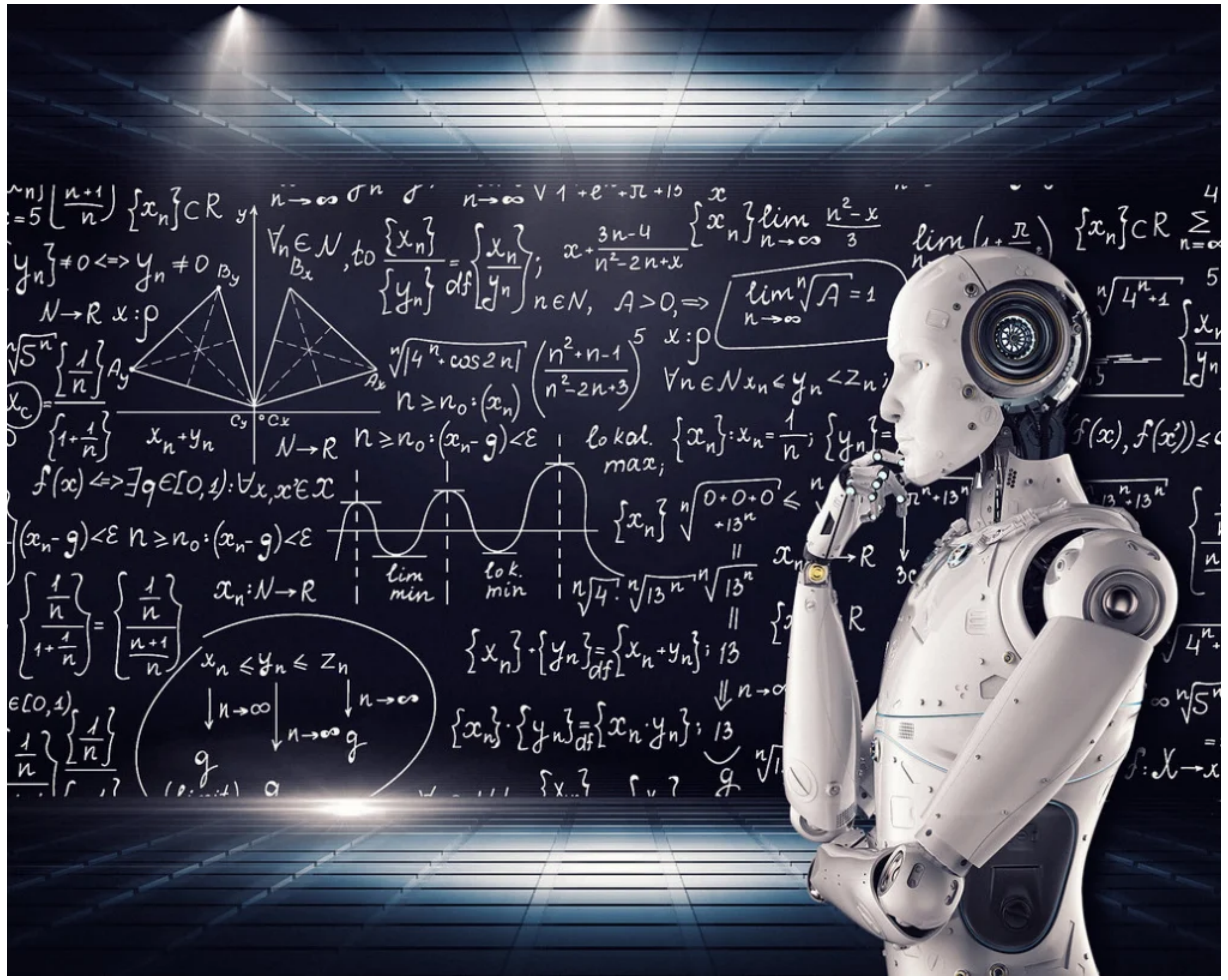
La **cuantificación de incertidumbre (UQ)** en ML busca medir y representar el grado de confianza de un modelo sobre sus propias salidas

Uncertainty Toolbox

Cuantificación de incertidumbre

Para qué sirve?

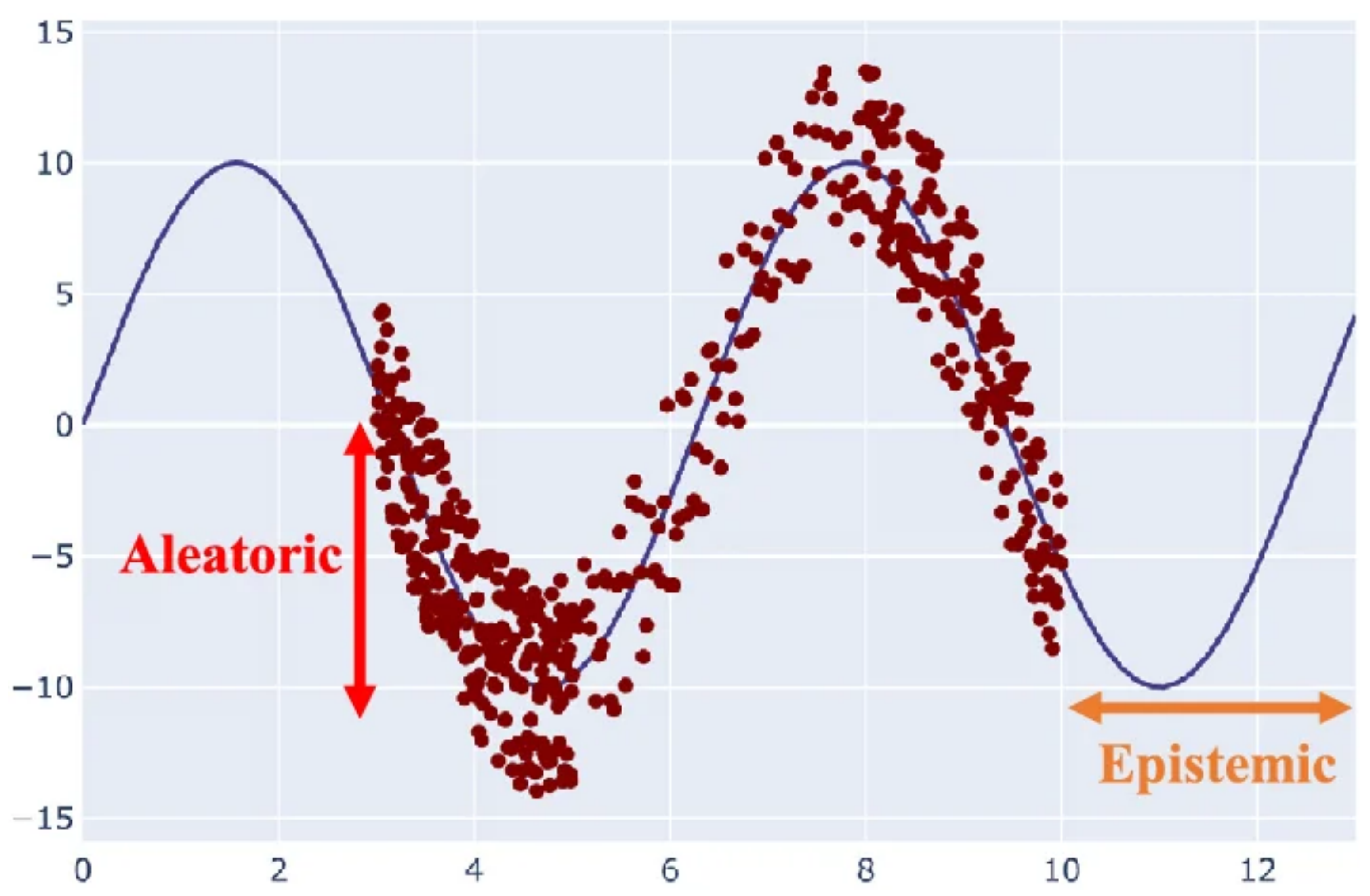
- Detectar casos ambiguos
- Abstenerse a decidir
- Pedir intervención humana
- Identificar datos fuera de distribución
- Mejorar calibración
- Priorizar adquisición de datos



Incertidumbres

Incertidumbre aleatoria

- Debida al **azar inherente del sistema:** fenómenos instrínsicamente estocásticos**.**
- Aunque conozcamos perfectamente el fenómeno, seguirá existiendo variabilidad (intrínseca al proceso).
- Es irreducible (no desaparece con más datos)!
- Asociada al ruido natural
- Se modela probabilísticamente



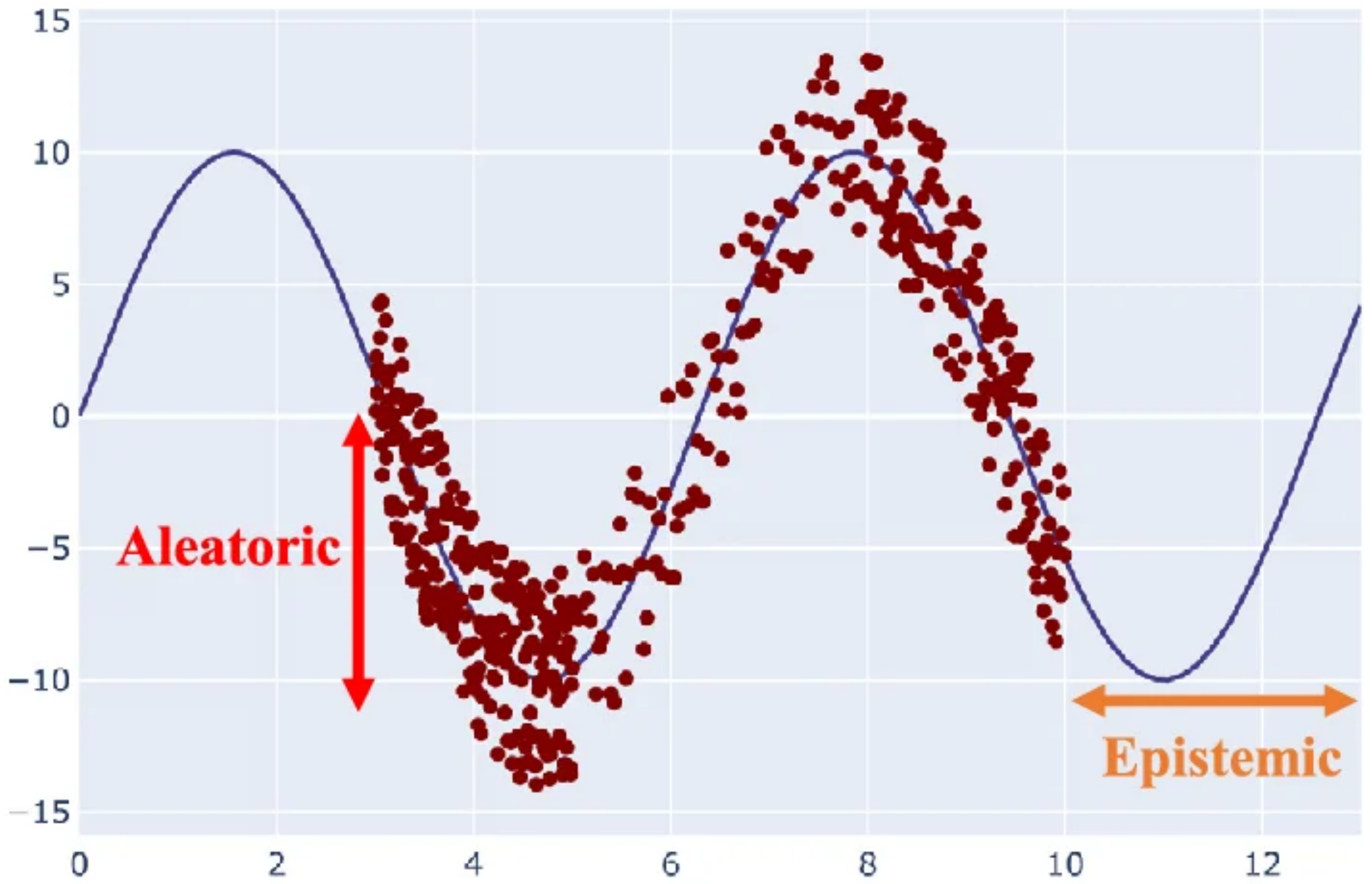
Incertidumbres

Incertidumbre aleatoria: Ejemplos

- Lanzamiento de un dado: aunque entendamos la física de tirar el dado, el resultado siempre será incierto
- Temperatura corporal: dos personas sanas pueden tener temperaturas distintas
- Sensores: ruido electrónico
- Imágenes borrosas, pueden ser ambiguas incluso para humanos

Incertidumbres

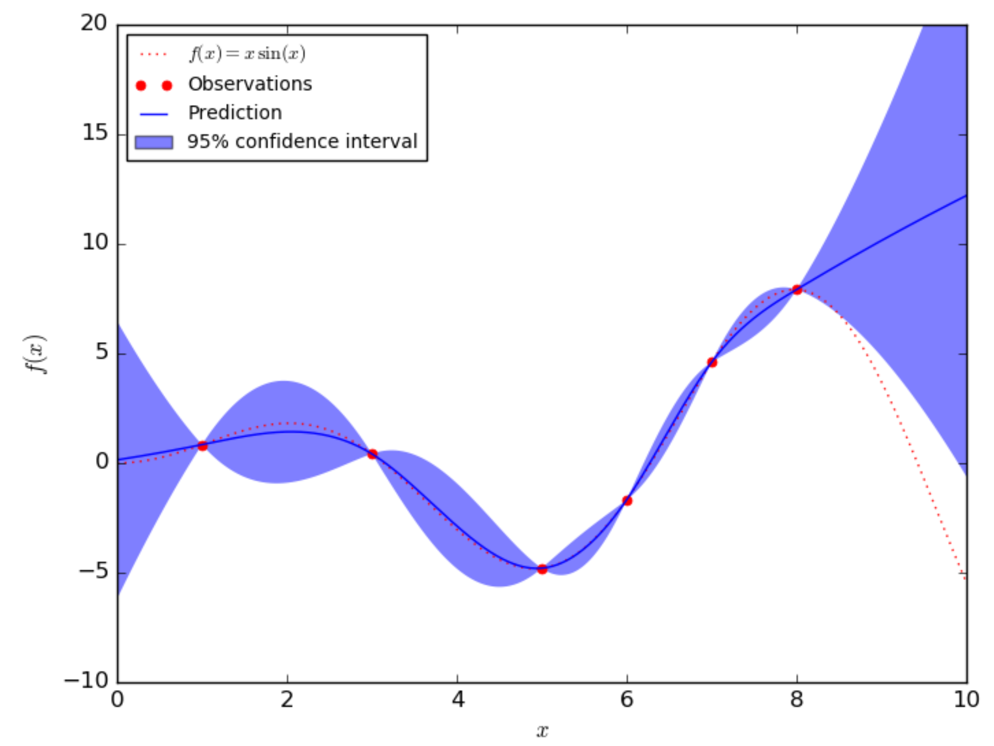
Incertidumbre epistémica



- Proviene de la falta de conocimiento del sistema (ignorancia)

- Reducible (disminuye con más datos o mejor modelo)

- Asociada a desconocimiento estructural



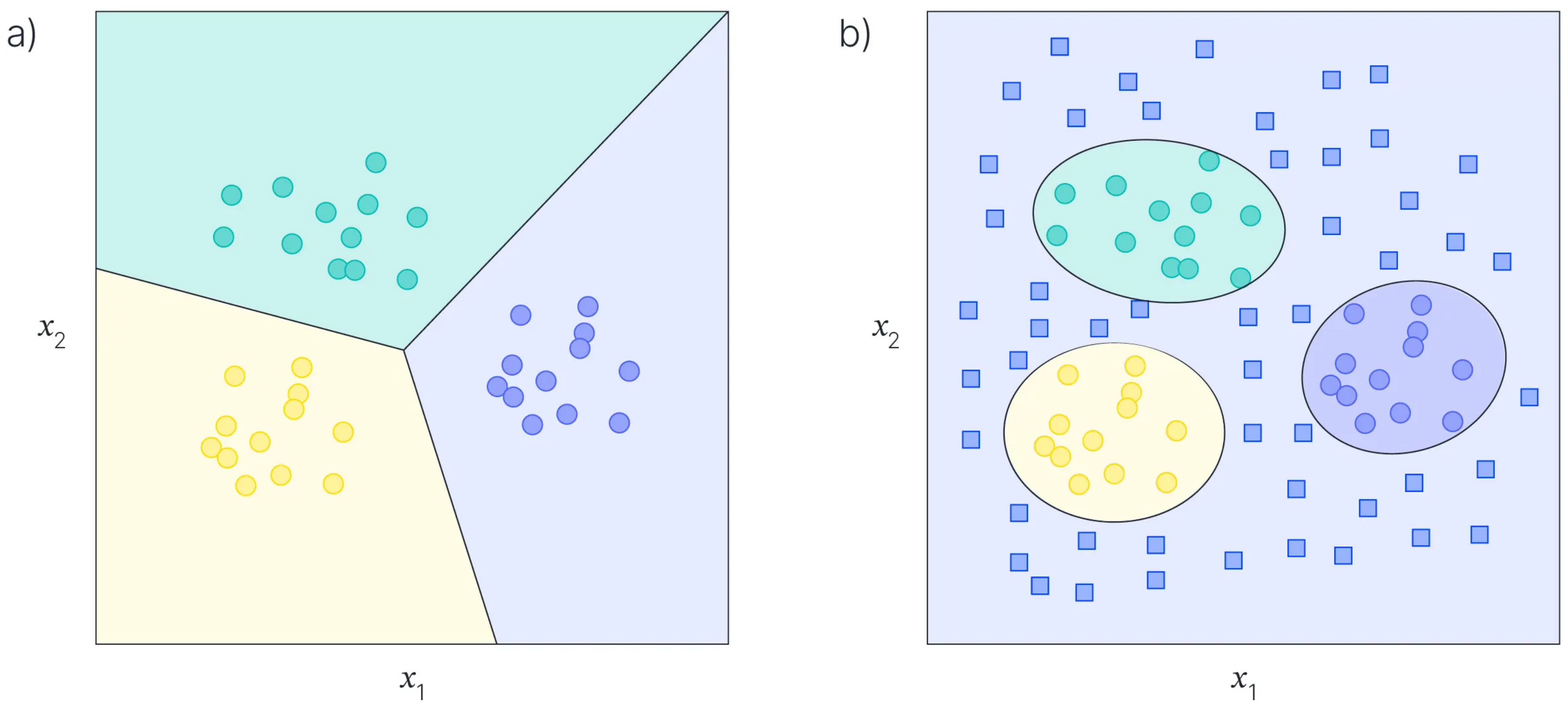
La atmósfera es caótica: aunque tengamos buen modelo, habrá variabilidad → Aleatoria

No contamos con suficientes sensores meteorológicos o el modelo es malo →Epistemica

Incertidumbres

Incertidumbre epistémica: ejemplos

- Si un modelo nunca vio ejemplos de cierta población, tendrá alta incertidumbre epistémica
- No saber el efecto de un medicamento nuevo
- Modelo incompleto del clima
- Out Of Distribution (OOD)



Modelos de Cuantificación de incertidumbre (UQ)

Ya vimos algunos! $\rightarrow$ Modelos probabilísticos: MDN, VAE, SBI

Aleatórica

$$p(y \mid \theta, x)$$

Epistémica

$$p(\theta \mid D)$$

Lo que veremos:

- Modelos de Ensambles
- Monte Carlo Dropout
- Redes Neuronales Bayesianas

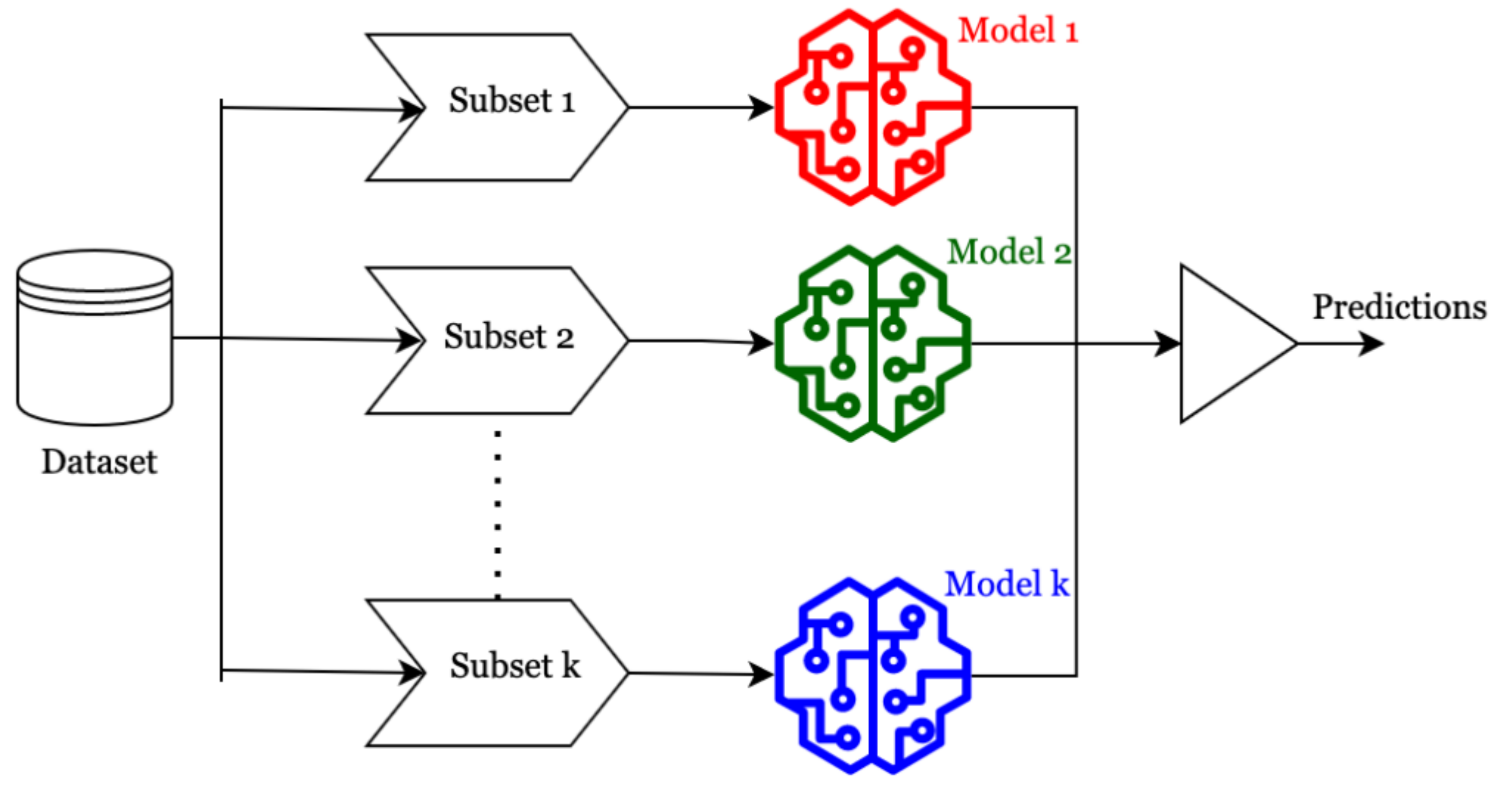
Modelos de UQ

Ensembles / deep ensembles

Entrenar múltiples modelos independientes y promediar (o votar sobre) los resultados tiene mejor capacidad predictiva y provee de un mecanismo natural de incertidumbre

$$f_1(x), f_2(x), \ldots, f_K(x)$$

$$\hat{y} = \frac{1}{K}\sum_{i=1}^{K} f_k(x) \qquad \hat{Var} = \frac{1}{K}\sum_{i=1}^{K} (f_k(x) - \hat{y})^2$$



Simple, robusto, buen rendimiento

La dispersión entre modelos aproxima incertidumbre epistémica.

Los ensambles funcionan porque distintos modelos representan distintas hipótesis plausibles dadas las observaciones.

https://arxiv.org/abs/1612.01474

Modelos de UQ

Monte Carlo Dropout (MCD)

Durante el entrenamiento, podemos apagar neuronas aleatoriamente!

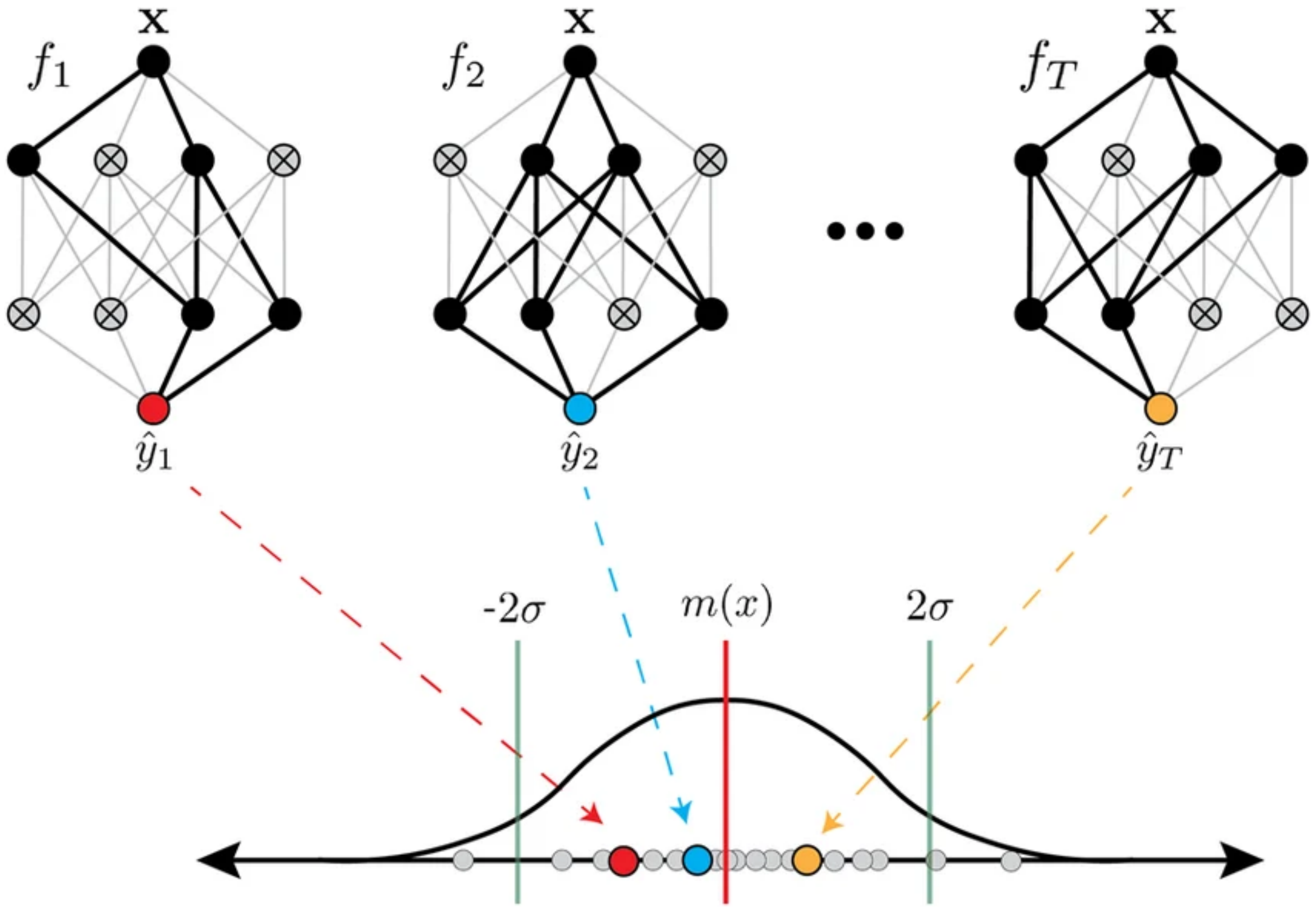
- Reduce overfitting
- Actúa como regularización

~~model.eval()~~

model.train()

Inclusive en evaluación!

Se puede probar que MCD es una aproximación bayesiana de la distribución posterior $p(\theta \mid D)$



$$\hat{y} = \frac{1}{K}\sum_{i=1}^{K} f_k(x) \qquad \hat{Var} = \frac{1}{K}\sum_{i=1}^{K} (f_k(x) - \hat{y})^2$$

https://arxiv.org/abs/1506.02142

Redes Neuronales Bayesianas

Del MLP a las BNN

- Las redes neuronales bayesianas extienden a las redes neuronales estándares tratando sus pesos y sesgos como **distribuciones de probabilidad** en vez de valores fijos.

- Esto permite que la red neuronal no sólo prediga un valor sino también cuantifique su incertidumbre.

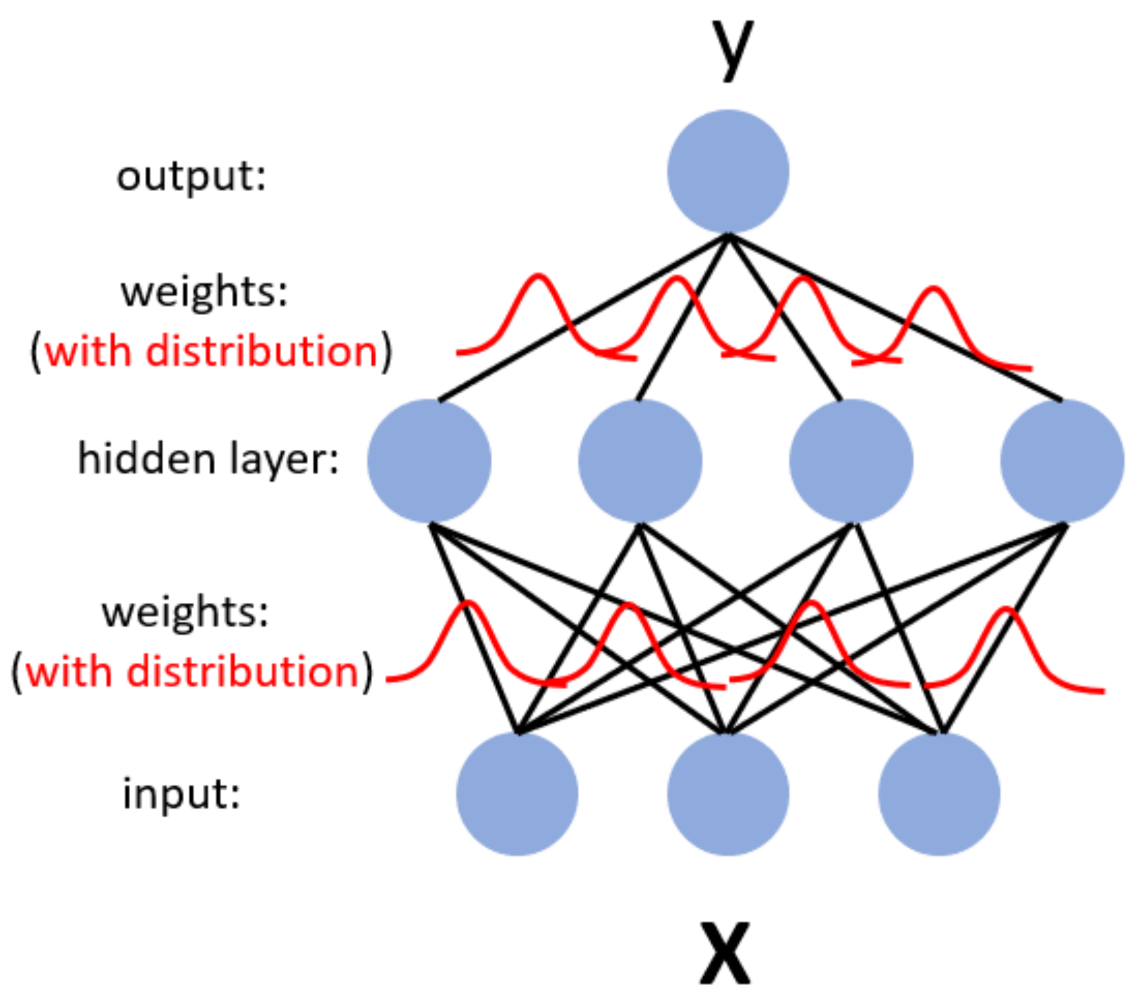
$$p(W|D) = \frac{p(D|W)p(W)}{p(D)}$$

Inferencia Variacional

$$q_\phi(W) \approx p(W|D)$$

$$q_\phi(W) = \mathcal{N}(\mu_\phi, \sigma_\phi^2)$$

$$\mathcal{L}_{ELBO} = \mathbb{E}_{q_\phi(W)}[-\log p(D|W)] + KL(q_\phi(W)||p(W))$$



https://github.com/IntelLabs/bayesian-torch/tree/main

Redes Neuronales Bayesianas

Conexión con regularización

En NN clásica

$$\mathscr{L} = \sum_i (y_i - f(x_i; W))^2 + \lambda ||W||^2$$

Interpretación probabilistica, suponiendo verosimilitud Gaussiana

$$p(y_i | x_i, W) = \mathcal{N}(f(x_i; W), \sigma_y^2) \implies -\log(D | W) \propto \sum_i (y_i - f(x_i; W))^2$$

Suponemos prior sobre los pesos $p(W) = (0, \sigma_w^2 I)$

Bayes: $p(W | D) \propto p(D | W)p(W) \implies \log p(W | D) = \log p(D | W) + \log(p(W)) + C$

$$MSE \quad + \quad \frac{1}{2\sigma_w^2} ||W||^2$$

Redes Neuronales Bayesianas

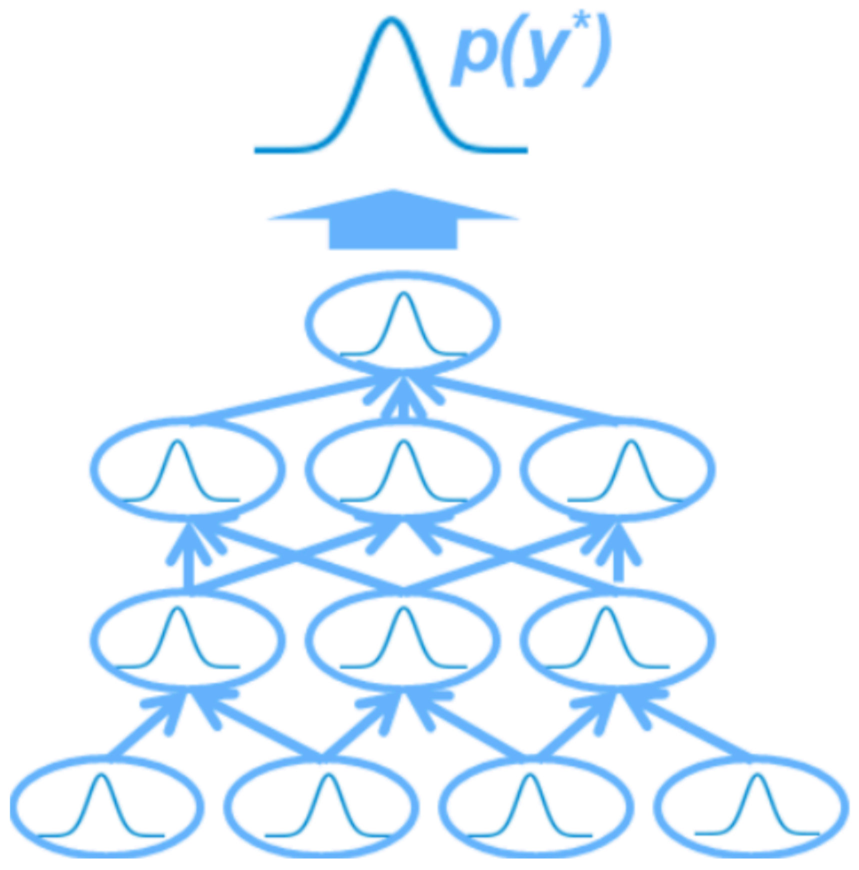
BNN probabilistica!

Combinamos incertidumbre epistémica con aleatoria en la misma red

BNN	**BNN probabilísticas**	
$W \sim q_\phi(W)$	$W \sim q_\phi(W)$	*epistemica*
$y = f(x_i; W)$	$y = \mathcal{N}(\mu(x), \sigma^2(x))$	*aleatoria*

La red produce $(\mu(x), \sigma(x))$

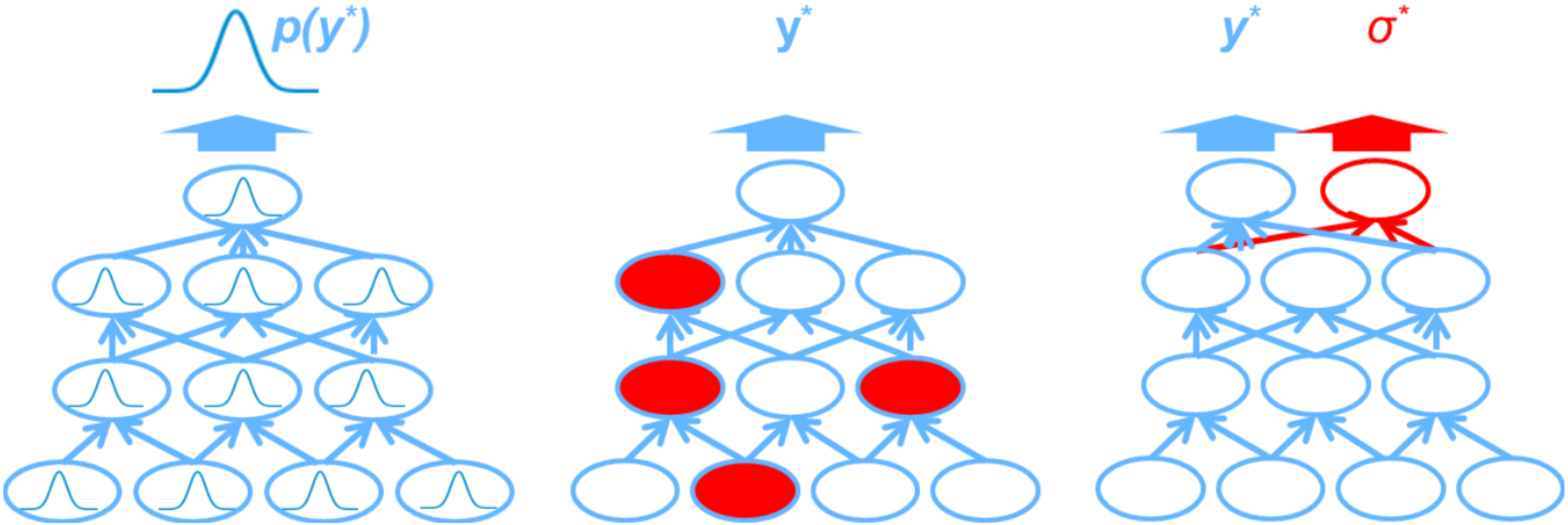
$$(\mu(x_i), \sigma(x_i)) = f(x_i; W)$$



$$\mathbb{E}[\sigma^2(x)] \rightarrow aleatoria$$

$$Var[\mu(x)] \rightarrow epistemica$$

Comparación



Bayesian Neural Nets   MC Dropout   Probabilistic Models

Notebook BNN

https://arxiv.org/pdf/2510.06007