



UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Modelando la dinámica oculta de la divagación mental y el efecto del metilfenidato

Tesis de Licenciatura en Ciencias de Datos

Nicolás Ian Rozenberg

Director: Enzo Tagliazucchi

Codirector: Nicolás Bruno

Buenos Aires, 2025

MODELANDO LA DINÁMICA OCULTA DE LA DIVAGACIÓN MENTAL Y EL EFECTO DEL METILFENIDATO

La divagación mental, o *mind wandering* (MW) en inglés, es un fenómeno cognitivo en el que la atención se desplaza de la tarea actual hacia pensamientos internos no relacionados. Pocos estudios han abordado la dinámica de los estados atencionales asociados a dicho fenómeno. Por otra parte, el metilfenidato es un psicoestimulante utilizado en el tratamiento del Trastorno por Déficit de Atención con Hiperactividad (TDAH), pero poco se conoce sobre el impacto que posee sobre el *mind wandering*. En este trabajo, se modela la dinámica del MW en una tarea de atención sostenida mediante Modelos Ocultos de Markov (Hidden Markov Models, HMMs) bayesianos.

A partir de datos de tiempos de respuesta obtenidos en una tarea de atención sostenida, se construyen y comparan dos modelos dicotómicos que distinguen entre estados On Task (atención en la tarea) y Mind Wandering (atención desviada), basados en dos trabajos de Bastian and Sackur [3] y Mittner et al. (en prensa). La capacidad de los modelos para capturar estados atencionales se evalúa correlacionando sus estimaciones con indicadores de MW como medidas de rendimiento o reportes subjetivos.

Este estudio tiene como objetivo principal evaluar el efecto del metilfenidato sobre la dinámica de la divagación mental. Específicamente, se analiza cómo el fármaco modula las probabilidades de transición entre los estados On Task y Mind Wandering, las cuales se infieren de la distribución posterior de los HMMs ajustados. A partir de estas probabilidades, se derivan estimaciones cuantitativas sobre la duración promedio de los episodios en cada estado. Finalmente, se discuten los desafíos metodológicos encontrados y se proponen futuras líneas de investigación.

Palabras clave: Modelos gráficos probabilísticos, estimación bayesiana, neurociencia computacional, atención, mind wandering, TDAH, sistemas dinámicos.

MODELING THE HIDDEN DYNAMICS OF MIND WANDERING AND THE EFFECT OF METHYLPHENIDATE

Mind wandering (MW) is a cognitive phenomenon in which attention shifts from the current task to unrelated internal thoughts. Few studies have addressed the dynamics of attentional states associated with this phenomenon. On the other hand, methylphenidate is a psychostimulant used in the treatment of Attention Deficit Hyperactivity Disorder (ADHD), but little is known about its impact on mind wandering. This study models the dynamics of MW during a sustained attention task using Bayesian Hidden Markov Models (HMMs).

Based on response time data from a sustained attention task, two dichotomous models are constructed and compared. These models distinguish between On Task (task-focused attention) and Mind Wandering (attention diverted) states, following the approaches proposed by Bastian and Sackur [3] and Mittner et al. (in press). The models' ability to capture attentional states is evaluated by correlating their estimates with MW indicators such as performance measures and subjective reports.

The main objective of this study is to assess the effect of methylphenidate on the dynamics of mind wandering. Specifically, we analyze how the drug modulates the transition probabilities between On Task and Mind Wandering states, which are inferred from the posterior distribution of the fitted HMMs. From these probabilities, we derive quantitative estimates of the average episode duration in each state. Finally, methodological challenges are discussed, and future research directions are proposed.

Keywords: Probabilistic graphical models, Bayesian estimation, computational neuroscience, attention, mind wandering, ADHD, dynamical systems.

AGRADECIMIENTOS

Y llegó el momento de escribir esto...

Empiezo por Nico Bruno, mi codirector, persona a quien admiro infinitamente, tanto académicamente como humanamente. Nico me ha invitado a ser parte de su proyecto de *mind-wandering*, me ha ayudado a consolidar una gran idea de tesis, me ha ayudado a contactar con Matthias Mittner, pilar fundamental de este trabajo, ha dedicado una buena parte de su tiempo apoyándome con mis dudas y revisando el trabajo, y también apoyándome emocionalmente. Espero que esta amistad persista. Extiendo mi agradecimiento a Tomi D'Amelio y a la organización que juntos dirigen, *Neurotransmitiendo*¹. Una de las muchas cosas que hacen es brindar un curso de un año, llamado la *Neuro-diplomatura en Ciencias Cognitivas*, que cursé durante el 2024. Si estás leyendo esto y sos estudiante de datos, compu, física o matemática, y estás con ganas de meterte en el mundo de la neurociencia, aprovecho para recomendártelo. Creo que es el curso ideal para cualquier estudiante de estas carreras queriendo meterse en este mundo, o al menos en algún proyecto interdisciplinario.

Agradezco enormemente a Anto Pratto, mi compañera en este grupo de *mind-wandering*, quien se encargó de realizar la toma de prácticamente todos los sujetos y ha podido resolver un montón de problemas que fueron surgiendo prácticamente por su cuenta. Sin ella, este trabajo no habría sido posible.

Agradezco a Enzo Tagliazucchi, por su generosidad al dejarme ser parte del proyecto de *mind-wandering*, por aceptar ser mi director y por sus correcciones a este trabajo. Es una referencia constante para mí.

Agradezco infinitamente a mis padres Jorge y Magdalena, por todo lo que soy, por brindarme una educación de calidad y por haberme dado siempre la libertad de seguir mis propios intereses. En particular, por haber sido un sostén emocional invaluable durante este proceso. Hago extensivo este agradecimiento a mis hermanas Camila y Sofía, que siempre estuvieron presentes.

Agradezco a mi tía Margarita, a quien admiro muchísimo y que me ha inspirado a seguir una pasión por los temas donde la computación y la matemática están al servicio de problemas interdisciplinarios.

Agradezco a todos los involucrados para que la carrera de datos sea una realidad. Cuando en 2020 estaba entre hacer computación o física, esta carrera me vino como anillo al dedo.

Agradezco a la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, por haber sido, sin exagerar, mi segunda casa. A lo largo de estos años conocí acá a una cantidad increíble de personas con quienes comparto valores, intereses y pasión por lo que hacemos, que se han convertido en su gran mayoría en grandes amigos. Ya sea en mi rol de estudiante, ayudante, divulgador o participante de algún evento. No quiero hacer un listado ya que seguro que de alguien me voy a olvidar, pero me encargaré de ir agradeciéndoles a cada uno/a cuando tenga la oportunidad. Espero que la amistad que he forjado con todos/as persista para siempre.

Agradezco a mis amigos del Club Ciudad de Buenos Aires y al rugby, deporte que considero que me ha cambiado la forma de vivir la vida en mi adolescencia temprana y me ha regalado también un montón de amigos que espero que sean eternos.

¹ <https://www.neurotransmitiendo.org/>

Por último, agradezco a todos mis amigos de afuera de la facultad y a mis familiares no mencionados. Creo que soy un afortunado de tener a las personas que tengo a mi alrededor.

Índice general

1..	Introducción	1
1.1.	Motivación	1
1.2.	Objetivo general	2
1.3.	Estructura del trabajo	2
2..	Modelos gráficos probabilísticos	3
2.1.	Introducción a los modelos probabilísticos	3
2.1.1.	Elementos	4
2.1.2.	Estructuras típicas en modelos gráficos	5
2.2.	Modelos ocultos de Markov (HMMs)	8
2.2.1.	HMMs Canónicos	8
2.2.2.	Cálculo de la verosimilitud	10
2.2.3.	Decodificación: Cálculo de responsabilidades de cada estado por tiempo	12
2.2.4.	Problema de Identificabilidad	14
2.2.5.	Inferencia	15
3..	Inferencia y Análisis Bayesiano	17
3.1.	Conceptos fundamentales de la Estadística Bayesiana	17
3.1.1.	Elección de <i>priors</i>	18
3.1.2.	Estimación de parámetros	18
3.2.	Sobre el problema de calcular estadísticos de la distribución posterior en espacios de alta dimensión	18
3.2.1.	Markov Chain Monte Carlo (MCMC)	20
3.2.2.	Algoritmo Metropolis Hastings	21
3.2.3.	Algoritmo Hamiltonian Monte Carlo: conceptos fundamentales	22
3.3.	Análisis de resultados	24
3.3.1.	Herramientas de diagnóstico de ajuste	25
3.3.2.	Comparación de modelos	25
4..	Divagación Mental y metilfenidato	27
4.1.	Definición y caracterización	27
4.2.	Estudio experimental del mind-wandering	27
4.3.	Investigación sobre la dinámica del <i>mind-wandering</i>	29
4.4.	Sobre la utilización de los modelos gráficos en <i>mind-wandering</i>	29
4.5.	Pilares del presente trabajo	30
4.6.	Metilfenidato	33
5..	Métodos y Análisis	35
5.1.	Diseño experimental	35
5.1.1.	Muestra	35
5.1.2.	Tarea experimental	35
5.1.3.	Procedimiento	36

5.2. Análisis: Procedimiento General	37
5.3. Modelos	38
5.3.1. Modelo dicotómico no supervisado	39
5.3.2. Modelo jerárquico semisupervisado	41
6.. Resultados	47
6.1. Modelo dicotómico no supervisado	47
6.1.1. Métricas diagnósticas	47
6.1.2. Comparación de modelos	47
6.1.3. Análisis de coherencia de estados	47
6.2. Efecto del metilfenidato sobre los estados	51
6.3. Modelo jerárquico semisupervisado	51
6.3.1. Análisis de coherencia de estados	52
6.3.2. Estimaciones de transición y efectos del fármaco	54
7.. Discusión	57
7.1. Efecto del metilfenidato sobre los estados	57
7.2. Análisis de coherencia de los estados	57
7.2.1. Modelo no supervisado	57
7.2.2. Modelo jerárquico semisupervisado	58
7.3. Limitaciones	58
7.3.1. Métricas de diagnóstico	58
7.3.2. Diseño experimental y tamaño de la muestra	60
7.3.3. Interpretabilidad de los parámetros	61
7.4. Futuras líneas de investigación	61
7.5. Conclusión	62
Apéndice	63
A.. Marco Teórico	65
A.1. Demostración de la Propiedad de Markov en estructura causal gráfica de Cadena de Markov	65
A.2. Modelo teórico mecanístico de Mittner del Mind Wandering	66
B.. Análisis	69
B.1. Priors y reparametrizaciones del modelo jerárquico semisupervisado	69
B.2. Correlaciones entre parámetros de emisión y errores	70

1. INTRODUCCIÓN

"You seemed so far away," Miss Honey
whispered, awestruck.
"Oh, I was. I was flying past the stars
on silver wings," Matilda said.
"It was wonderful."

— Roald Dahl, *Matilda*

1.1. Motivación

Comprender los procesos cognitivos que subyacen a la atención humana constituye uno de los grandes desafíos de las neurociencias cognitivas contemporáneas. Dentro de este campo, el fenómeno de la divagación mental, de ahora en más denominado *mind-wandering* (MW) por su denominación en inglés, ha emergido como un objeto de estudio cuya popularidad ha crecido en los últimos años. Se lo define comúnmente como el desplazamiento de la atención desde una tarea principal hacia pensamientos internos [14, 47, 48].

Aunque el MW puede tener funciones adaptativas, como la resolución de problemas y la creatividad, también ha sido identificado como un factor que interfiere en tareas que requieren atención sostenida, como la comprensión lectora o el rendimiento académico [34]. Además, su alta prevalencia lo convierte en una variable potencialmente contaminante en muchos diseños experimentales, al introducir una fuente de variabilidad no relacionada directamente con la tarea [53].

Estudiar sus mecanismos subyacentes podría no solo contribuir a mitigar sus efectos negativos en contextos educativos y laborales, sino también mejorar la comprensión del funcionamiento atencional general del cerebro humano.

Por otra parte, en las últimas décadas las Ciencias Cognitivas han adoptado crecientemente los modelos gráficos probabilísticos, especialmente desde una perspectiva bayesiana. Uno de los motivos de dicha adopción es la idea de que muchos fenómenos cognitivos están guiados por estructuras ocultas planteadas en modelos teóricos, como creencias, intenciones o estados mentales, que no se ven directamente pero son modelables mediante estos modelos. Por lo tanto, dan una vía para inferirlos a partir de las observaciones provenientes de tareas experimentales [13].

El estudio del *mind-wandering* no ha estado apartado de dicha tendencia [16]. Al ser un fenómeno para el que no se conocen técnicas experimentales que permitan observarlo directamente en el tiempo, es razonable modelar su dinámica como una estructura oculta. Uno de los modelos gráficos propuestos más simples para modelar dicha dinámica son los Hidden Markov Models, que permiten representar sistemas en los que las observaciones dependen de estados ocultos que evolucionan a lo largo del tiempo siguiendo una cadena de Markov.

Ya se han realizado algunos pocos estudios que modelan la dinámica del *mind-wandering* con dichos modelos, utilizando distintos tipos de observaciones experimentales como datos. En especial, los trabajos de Bastian and Sackur [3] y Mittner et al. (en prensa) modelan

directamente a un estado atencional latente asociado al *mind-wandering*, con diferentes enfoques.

Por último, el metilfenidato es el fármaco más utilizado para tratar a pacientes con Trastorno de Déficit de Atención e Hiperactividad (TDAH), generalmente vendido bajo el nombre comercial de Ritalina. Diversos estudios han mostrado que las personas con TDAH presentan una mayor propensión a presentar patrones asociados al *mind-wandering*, particularmente en contextos que requieren atención sostenida. Esto ha llevado a sugerir que el *mind-wandering* podría ser facilitado por las dificultades atencionales observadas en dicho trastorno.

Sin embargo, hasta el momento no hay estudios que analicen de forma explícita el efecto que posee el metilfenidato en la dinámica del *mind-wandering* en general. Comprender cómo este fármaco modula no sólo la frecuencia sino también la transición entre distintos estados mentales podría aportar evidencia valiosa sobre sus efectos comportamentales y su relación con los patrones cognitivos característicos del TDAH.

1.2. Objetivo general

El objetivo de este trabajo es poder aportar estimaciones cuantitativas de la frecuencia y duración de los episodios de *mind-wandering* durante atención sostenida, así como de la posible modulación farmacológica de dichas variables mediante metilfenidato.

Para dicho fin, se busca replicar los enfoques presentados en los trabajos de Bastian and Sackur [3] y de Mittner et al. (en prensa) para modelar el *mind-wandering* en el tiempo mediante un enfoque bayesiano. La adopción de los mismos puede dar una metodología para abordar el objetivo principal de este trabajo. Asimismo, se discuten los desafíos metodológicos encontrados al aplicar estos modelos a los datos disponibles.

1.3. Estructura del trabajo

El **Capítulo 2** presenta los fundamentos de los modelos gráficos probabilísticos, haciendo énfasis en los Modelos Ocultos de Markov, que serán utilizados para modelar la dinámica atencional. El **Capítulo 3** introduce los conceptos fundamentales de la inferencia bayesiana y los algoritmos empleados para la estimación de los parámetros del modelo. En el **Capítulo 4** se introduce el fenómeno del *mind-wandering*, su caracterización y relevancia experimental, la literatura previa sobre el estudio de la dinámica del *mind-wandering*. Luego, se discutirá la importancia de los modelos gráficos para las ciencias cognitivas, y en especial para modelar el *mind-wandering* en el tiempo, presentando a los dos trabajos en los que más está basado este trabajo. Por último, se presentará el rol potencial del metilfenidato en su modulación. En el **Capítulo 5** se detallan los métodos, el conjunto de datos utilizado, y los modelos implementados. El **Capítulo 6** muestra los resultados principales del trabajo, y finalmente, el **Capítulo 7** discute los resultados obtenidos en línea con el estado del arte, implicancias del estudio, limitaciones y complicaciones a la hora de llevarlo a cabo y posibles líneas de trabajo futuro.

2. MODELOS GRÁFICOS PROBABILÍSTICOS

Este capítulo hará una breve introducción a los modelos gráficos probabilísticos, cuya importancia para este trabajo se discute en la Sección 4.3 del capítulo de *mind-wandering*. En primer lugar, se explicará la notación de grafos causales de Pearl, que es actualmente la forma estándar de definir la estructura de estos modelos. Luego se pasará a explicar los Modelos Ocultos de Markov, enmarcándolos dentro de la familia de modelos con variables latentes discretas, y elementos de importancia de dichos modelos para el presente estudio.

2.1. Introducción a los modelos probabilísticos

En las ciencias empíricas, entre las que se encuentran las Ciencias Cognitivas, se realizan experimentos que permiten recolectar datos con el objetivo de aprender sobre el proceso que los generó. Esto se debe a que aprender sobre el proceso es fundamental para explicar los fenómenos observados mediante teorías que den cuenta de su funcionamiento, predecir el comportamiento futuro del sistema en nuevas condiciones, o diseñar intervenciones informadas que puedan modificar o guiar dicho comportamiento [36]. Sin embargo, en general no se puede conocer con exactitud la forma de dicho proceso, por lo que se recurre a modelarlo a partir de ciertos supuestos teóricos.

El modelado probabilístico consiste en representar el proceso generador de los datos como una distribución de probabilidad conjunta sobre todas las variables consideradas relevantes en el sistema bajo estudio. Esto incluye tanto a las variables observables, cuyas realizaciones conforman los datos, como constructos teóricos no observables del modelo de los que dependen las variables observables, o cantidades potencialmente observables cuya medición no es posible.

Con el fin de potenciar la expresividad de estos modelos, se han desarrollado métodos gráficos que permiten especificar sus dependencias probabilísticas de forma clara y estructurada.

El método estándar actualmente para expresarlos se debe a Pearl [35], que es mediante un grafo donde los nodos son las variables de interés o parámetros, y las aristas, relaciones probabilísticas entre variables, entre variables y sus parámetros, y también entre parámetros (como se verá luego). Para este trabajo, son de interés los modelos donde el grafo es un grafo acíclico dirigido (DAG, por sus siglas en inglés). A continuación, se presenta la definición de grafo acíclico dirigido.

Definición 2.1.1 (Grafo Acíclico Dirigido). Un *grafo acíclico dirigido* (DAG) es un par ordenado (X, E) , donde $X = \{X_1, \dots, X_n\}$ es un conjunto finito de nodos, y $E \subseteq X \times X$ es un conjunto de arcos dirigidos tal que no existe ninguna secuencia $X_{i_1}, X_{i_2}, \dots, X_{i_k}$ con $k \geq 2$ donde $(X_{i_j}, X_{i_{j+1}}) \in E$ para todo $j = 1, \dots, k-1$, y $X_{i_1} = X_{i_k}$. Es decir, el grafo no contiene ciclos dirigidos.

Una propiedad es que para cada nodo se puede hablar de su conjunto padre. Es decir, está bien definida la función padre : $X \rightarrow \mathcal{P}(X)$ tal que

$$\text{padre}(X_k) = \{X_j \in X : (X_j, X_k) \in E\}.$$

Este tipo de modelos se conocen como modelos gráficos probabilísticos dirigidos, o redes bayesianas [8].

Por otra parte, se sabe que dado un sistema con K variables aleatorias, y un orden cualquiera de las mismas, $X_1, X_2, \dots, X_K$, se cumple la regla del producto para calcular la probabilidad conjunta:

$$P(X_1, X_2, \dots, X_K) = \prod_{k=1}^K P(X_k | X_1, \dots, X_{k-1}) \quad (2.1)$$

Sin embargo, al proveerle la estructura de red bayesiana al sistema, se cumple por definición que

$$P(X_1, X_2, \dots, X_K) = \prod_{k=1}^K P(X_k | \text{padre}(X_k)) \quad (2.2)$$

Intuitivamente, un arco de una variable X_j a una variable X_k representa que X_k está causado directamente por X_j , pero no en sentido contrario. Esta ecuación es importante ya que permite deducir propiedades acerca de las relaciones entre variables o realizar cálculos de interés sobre el modelo, algo que será visible en el resto del capítulo. A continuación, se presentarán los elementos estándar que componen la notación gráfica de Pearl.

2.1.1. Elementos

Los elementos fundamentales que poseen los modelos gráficos son las variables observables, las variables latentes, los parámetros, y las placas.

Las *variables observables* son aquellas cuyos valores pueden medirse directamente. En cambio, las *variables latentes* (u ocultas) son la forma de representar constructos no observables del modelo que tienen influencia sobre los datos, como se mencionó que se podía hacer en la sección anterior. En los gráficos, esta distinción se representa mediante el color de fondo: en este trabajo, las variables observables se indicarán con círculos verdes, mientras que las latentes se mostrarán con círculos de color gris claro.

Los *parámetros* del modelo caracterizan a la distribución conjunta, y se representarán mediante su símbolo, sin estar dentro de un círculo.

Por último, las *placas* permiten expresar repeticiones independientes de una estructura dentro del modelo. Se representan mediante un recuadro que engloba los elementos que se repiten, junto con una anotación que indica la cantidad de repeticiones.

Como ejemplo, la Figura 2.1 ilustra un modelo gráfico que incluye estos elementos. Definiendo $\theta = (\theta_{11}, \theta_{12}, \dots, \theta_{1N}, \theta_2)$, la distribución conjunta puede expresarse como

$$P_{\theta}(A = a, B = b, C, D, E) = \prod_{i=1}^N P_{\theta}(D_i) P_{\theta}(C_i | D_i) P_{\theta}(B_i = b_i | D_i) P_{\theta}(E_i) P_{\theta}(A_i = a_i | E_i, C_i)$$

donde $P_{\theta}(\cdot)$ puede denotar una probabilidad puntual o una función de densidad, según el caso.

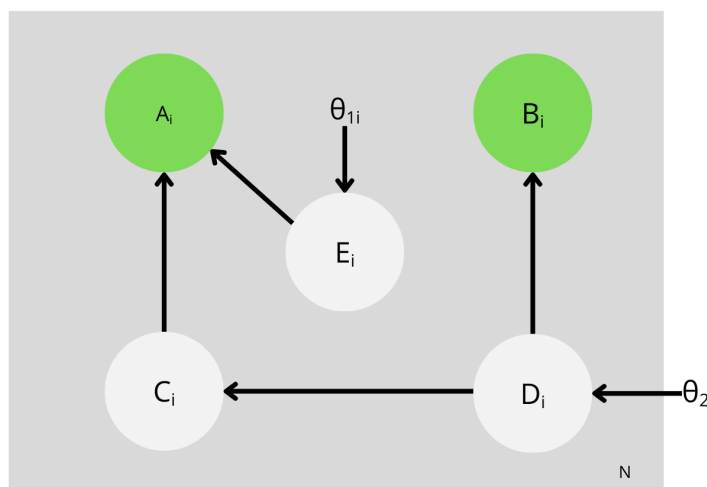


Fig. 2.1: Ejemplo de un modelo gráfico con todos los elementos introducidos en el texto. Nótese las variables latentes (círculos gris claro), las variables observadas (círculos verdes), los parámetros θ_{1i}, θ_2 las placas (recuadro gris oscuro) con el número de repeticiones abajo a la derecha (N).

La limitación que tiene esta notación es que no permite indicar los tipos de cada variable, ni qué forma tienen las dependencias entre variables. Para este trabajo, los gráficos de los modelos planteados siempre se agregarán explicitando aparte las dependencias entre variables y/o parámetros, cuando sea necesario.

Combinando estos elementos, se pueden identificar ciertas estructuras gráficas comunes que resultan especialmente útiles para modelar una gran variedad de situaciones en las ciencias cognitivas.

2.1.2. Estructuras típicas en modelos gráficos

A continuación, se presentan tres estructuras que se pueden encontrar en modelos gráficos probabilísticos, que son de particular interés para el presente trabajo.

2.1.2.1 Mezcla oculta de distribuciones

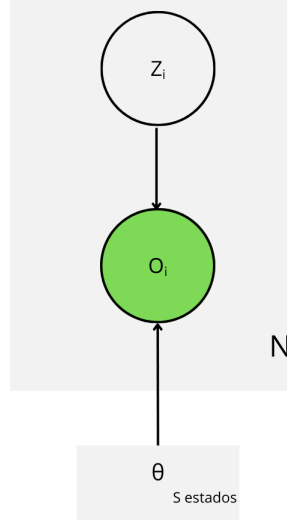


Fig. 2.2: Representación gráfica de una mezcla oculta de distribuciones

La estructura de mezcla oculta de distribuciones modela, intuitivamente, datos observados que provienen de una combinación de varias distribuciones subyacentes, cada una asociada a un grupo o proceso generador distinto. Sin embargo, la pertenencia de cada observación a una de estas distribuciones es latente, y debe inferirse a partir de los datos.

La Figura 2.2 muestra un esquema de una mezcla de distribuciones simple. Las variables Z_i son variables categóricas con una cantidad S de valores, las variables O_i son variables observables, y los parámetros $\theta_1, \dots, \theta_S$ son los parámetros que caracterizan a su respectiva componente de la mezcla. Es decir,

$$P(O_i = o_i \mid Z_i = s) = f_s(o_i; \theta_s)$$

donde f_s es la función de densidad o de probabilidad puntual que caracteriza al estado s .

El ejemplo clásico que sigue exactamente el esquema causal de la Figura 2.2 es el Modelo de Mezclas Gaussianas (Gaussian Mixture Model en inglés, GMM), que permite realizar agrupamiento difuso, o *soft clustering*, asumiendo que cada grupo tiene distribución normal. A diferencia de algoritmos como *k-means*, cada punto no es asignado completamente a algún grupo, sino que se le asigna una probabilidad, conocida como responsabilidad, de estar en cada grupo. De todas formas, no es necesario asumir independencia entre las variables latentes como se muestra en la Figura 2.2, para que un modelo sea considerado de mezcla de distribuciones.

2.1.2.2 Cadena de Markov

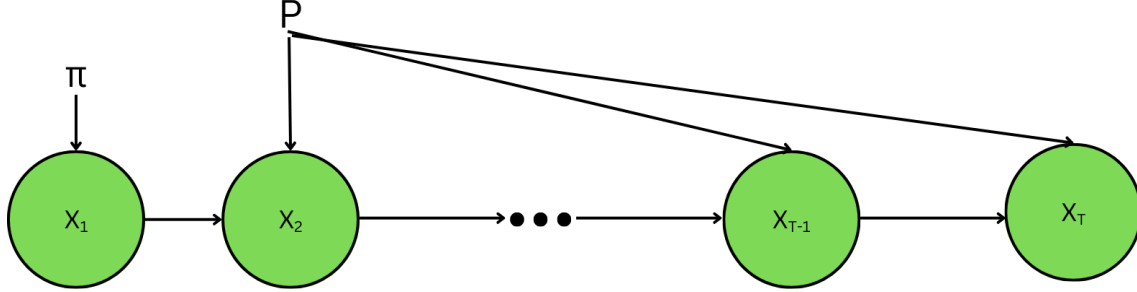


Fig. 2.3: Representación gráfica de una Cadena de Markov.

Una cadena de Markov se puede utilizar para modelar una secuencia de variables aleatorias discretas indexadas temporalmente $\{X_t\}_{t=1}^T$, tal que $P(X_1, \dots, X_T) \neq 0$. Se dice que esta secuencia forma una *cadena de Markov* si cumple la propiedad de Markov:

$$P(X_{t+1} \mid X_{1:t}) = P(X_{t+1} \mid X_t) \quad \text{para todo } t = 1, \dots, T-1. \quad (2.3)$$

donde la notación $X_{a:b}$ denota al conjunto de variables $X_a, X_{a+1}, \dots, X_b$. Es decir, el valor futuro depende únicamente del estado actual, y no del pasado.

Cuando el espacio de estados de X_t es finito, esta dependencia se puede representar mediante una *matriz de transición* $P \in R^{S \times S}$, donde S es la cantidad de posibles estados. Cada entrada P_{ij} denota la probabilidad de transición del estado i al estado j , es decir,

$$P_{ij} = P(X_{t+1} = j \mid X_t = i).$$

Además, esta estructura posee otro parámetro que es el vector de probabilidades iniciales $\pi \in R^S$, donde

$$\pi_i = P(X_1 = i).$$

La Figura 2.3 muestra la estructura gráfica causal de una Cadena de Markov. Esta sugiere intuitivamente que la Propiedad de Markov (Ecuación 2.3) se cumple, pero la misma se puede demostrar formalmente gracias a la factorización impuesta por la red bayesiana (Ecuación 2.2). En el anexo A.1, se incluye la demostración para resaltar la importancia de dicha factorización.

2.1.2.3 Estructura jerárquica

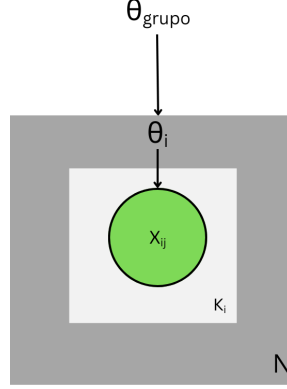


Fig. 2.4: Representación gráfica de una estructura jerárquica, en un caso donde se asume independencia entre los subgrupos y las observaciones dentro de cada subgrupo.

Intuitivamente, una estructura jerárquica modela datos que pueden organizarse en diferentes niveles de agrupamiento. En lugar de asumir que todos los elementos comparten los mismos parámetros, se introduce la idea de que cada grupo puede tener sus propios parámetros, los cuales a su vez están relacionados entre sí a través de una distribución superior.

La Figura 2.4 ilustra este tipo de estructura mediante un grafo causal en notación de Pearl. Allí, se observa un parámetro denominado *metaparámetro global* θ_{grupo} del cual se generan los parámetros específicos de cada subgrupo θ_i . A su vez, cada observación X_i es generada condicionalmente a partir de su parámetro correspondiente θ_i .

Desde una perspectiva probabilística, este tipo de modelos permite capturar la variabilidad tanto dentro de los grupos como entre los grupos. Por lo tanto, este tipo de modelado es especialmente útil en contextos donde las unidades están anidadas o agrupadas naturalmente. Por ejemplo, en estudios de Ciencias Cognitivas se suelen recoger observaciones tomadas de algún experimento, que suelen estar agrupadas por participante. Esto implica dos niveles de análisis: el nivel experimento, que agrupa a varios participantes; y el nivel participante, que agrupa a varias observaciones.

Este concepto resultará necesario más adelante para cuando se introduzca a uno de los modelos en los que está basado el presente trabajo.

2.2. Modelos ocultos de Markov (HMMs)

Los Modelos Ocultos de Markov, de ahora en más denominados Hidden Markov Models (HMMs), son la herramienta principal de análisis para el presente estudio. A continuación, se abordará profundamente el caso de los Modelos Ocultos de Markov canónicos, cuya teoría servirá para entender los análisis realizados.

2.2.1. HMMs Canónicos

Una forma de pensar a un Hidden Markov Model canónico es como un modelo de mezcla de distribuciones (Sección 2.1.2.1) donde los estados latentes no son independientes,

sino que poseen una dependencia en forma de Cadena de Markov (Sección 2.1.2.2). Está definido, por lo tanto, sobre dos secuencias de variables aleatorias:

- $\{Z_t\}_{t=1}^T$: una secuencia de variables latentes que forman una cadena de Markov de S estados.
- $\{O_t\}_{t=1}^T$: una secuencia de variables observables, donde cada O_t depende únicamente de Z_t .

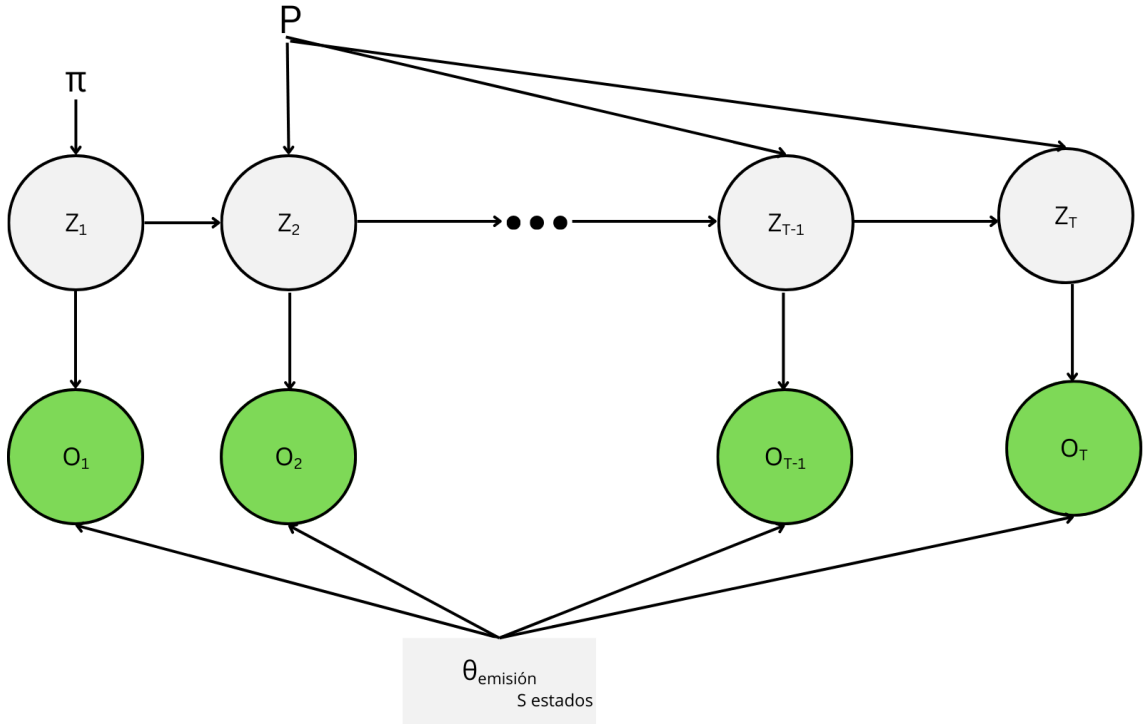


Fig. 2.5: Esta es una forma de representar gráficamente a un Hidden Markov Model canónico, utilizando la notación de grafos causales.

Es por la dependencia que poseen los estados ocultos impuesta por la cadena de Markov, que a los Hidden Markov Models se los conoce también como modelos de mezcla dependientes [16]. La Figura 2.5 ilustra el grafo causal de un Hidden Markov Model canónico. En cuanto a sus parámetros, hereda la matriz de transición P y el vector de probabilidades iniciales π de la cadena de Markov. Además, posee los denominados *parámetros de emisión* $\theta_{\text{emisión}}$ [39], que caracterizan a la distribución de cada observación dado el estado oculto correspondiente. Es decir,

$$P(O_t = o_t \mid Z_t = j) = f_j(o; \theta_{\text{emisión}})$$

donde f_j es la función de densidad o de probabilidad puntual que caracteriza al estado j .

Ahora bien, dado un Hidden Markov Model, dos cálculos útiles son la verosimilitud del modelo y las responsabilidades de cada estado por tiempo. A continuación se explicará qué son y para qué sirven estas cantidades, y se detallará cómo se computan eficientemente.

2.2.2. Cálculo de la verosimilitud

La verosimilitud es una cantidad necesaria para cualquier modelo gráfico a la hora de hacer inferencia, y en general debe poder ser calculada eficientemente, pues la mayoría de los algoritmos de inferencia (bayesianos o frecuentistas) necesitan conocer la verosimilitud (se retomará en el Capítulo 3). La misma se define como la probabilidad conjunta de únicamente las variables observables dados los datos, entendida como función de los parámetros. Para el caso de los HMMs canónicos, la idea es calcular, dada una secuencia observada $o_{1:T}$, y los parámetros θ ,

$$\mathcal{L}(\theta) = P_\theta(O_{1:T} = o_{1:T}) \quad (2.4)$$

En primer lugar, utilizando la regla del producto para redes bayesianas (Ecuación 2.2), en un HMM canónico, la probabilidad conjunta de todas las variables dados los parámetros se calcula como

$$\begin{aligned} P_\theta(O_{1:T} = o_{1:T}, Z_{1:T} = z_{1:T}) \\ &= P_\theta(Z_1 = z_1) P_\theta(O_1 = o_1 | Z_1 = z_1) \prod_{t=2}^T P_\theta(Z_t = z_t | Z_{t-1} = z_{t-1}) P_\theta(O_t = o_t | Z_t = z_t) \\ &= \pi_{z_1} f_{z_1}(o_1) \prod_{t=2}^T P_{z_{t-1}, z_t} f_{z_t}(o_t) \end{aligned}$$

Sin embargo, al buscar conseguir la verosimilitud (Ecuación 2.4), que es el cálculo de interés, marginalizando sobre las secuencias ocultas la cuenta se convierte en

$$\mathcal{L}(\theta) = \sum_{z_{1:T}} P_\theta(O_{1:T} = o_{1:T}, Z_{1:T} = z_{1:T}) \quad (2.5)$$

Nótese que la cantidad de términos en la Ecuación 2.5 crece exponencialmente a medida que crece T , pues $\# \text{secuencias ocultas} = S^T$. Sin embargo, dicha cuenta se puede calcular eficientemente utilizando programación dinámica. El algoritmo se lo conoce como *Algoritmo Forward* (1). Crea la variable $\alpha_t(i) = P(O_1 = o_1, \dots, O_t = o_t, Z_t = i)$, y aprovecha que $\alpha_t(j) = \sum_i \alpha_{t-1}(i) P_{ij} f_j(o_t)$ en el paso recursivo.

Algorithm 1 Algoritmo Forward

Entrada: Observaciones $O_1, O_2, \dots, O_T$, matriz de transición $P \in R^{S \times S}$, funciones de densidad de emisión $f_1, \dots, f_S$, distribución inicial $\pi \in R^S$

Salida: Verosimilitud de la secuencia observada: $\mathcal{L} = P(O_{1:T})$

Inicialización:

Para $i = 1, \dots, S$:

$$\alpha_1(i) = \pi_i \cdot f_i(O_1)$$

Inducción:

Para $t = 2, \dots, T$, y $j = 1, \dots, S$:

$$\alpha_t(j) = \left(\sum_{i=1}^S \alpha_{t-1}(i) \cdot P_{ij} \right) \cdot f_j(O_t)$$

Terminación:

$$\mathcal{L} = \sum_{i=1}^S \alpha_T(i)$$

Demostración de correctitud del algoritmo Forward (1). Caso base ($t = 1$):

Para el primer paso, se tiene:

$$\alpha_1(j) = P_\theta(O_1 = o_1, Z_1 = j) = P(Z_1 = j) \cdot P(O_1 = o_1 \mid Z_1 = j) = \pi_j f_j(o_1)$$

donde $\pi_j = P_\theta(Z_1 = j)$ es la distribución inicial sobre los estados ocultos.

Paso inductivo:

Utilizando la ley de la probabilidad total y marginalizando sobre todos los posibles estados anteriores $Z_{t-1} = i$:

$$\alpha_t(j) = \sum_{i=1}^S P_\theta(O_1 = o_1, \dots, O_t = o_t, Z_{t-1} = i, Z_t = j)$$

Aplicando la regla del producto para redes bayesianas (Ecuación 2.2):

$$\alpha_t(j) = \sum_{i=1}^S P_\theta(O_1 = o_1, \dots, O_{t-1} = o_{t-1}, Z_{t-1} = i) \cdot P_\theta(Z_t = j \mid Z_{t-1} = i) \cdot P_\theta(O_t = o_t \mid Z_t = j)$$

Reconociendo a:

- $P_\theta(O_1 = o_1, \dots, O_{t-1} = o_{t-1}, Z_{t-1} = i) = \alpha_{t-1}(i)$.
- $P_\theta(Z_t = j \mid Z_{t-1} = i) = P_{ij}$.
- $P_\theta(O_t = o_t \mid Z_t = j) = f_j(o_t)$.

Entonces:

$$\alpha_t(j) = \sum_{i=1}^S \alpha_{t-1}(i) P_{ij} f_j(o_t)$$

Lo que demuestra la correctitud de las variables $\alpha_t(j)$. Ahora bien, la terminación se demuestra marginalizando sobre Z_T ,

$$\mathcal{L}(\theta) = P_\theta(O_{1:T} = o_{1:T}) = \sum_{i=1}^S P_\theta(O_{1:T} = o_{1:T}, Z_T = i) = \sum_{i=1}^S \alpha_T(i)$$

□

Notar que, por el paso inductivo, este algoritmo tiene un orden de complejidad lineal en T y cuadrático en S , lo cual puede considerarse eficiente para las necesidades del presente estudio.

2.2.3. Decodificación: Cálculo de responsabilidades de cada estado por tiempo

Otro cálculo de interés que se puede realizar dado un HMM es, para cada tiempo t y estado i , la probabilidad de que el sistema se encuentre en dicho estado habiendo observado toda la secuencia $O = o$. Esta cantidad, conocida como **responsabilidad** del estado i en el tiempo t , y denotada como $\gamma_t(i)$, se define como:

$$\gamma_t(i) = P_\theta(Z_t = i \mid O = o) \quad (2.6)$$

Para su cálculo, adicional a las variables $\alpha_t(i)$, se introducen las variables $\beta_t(i)$, definidas como:

$$\beta_t(i) = P_\theta(O_{t+1:T} \mid Z_t = i)$$

En primer lugar, las variables $\beta_t(i)$ también pueden calcularse de forma eficiente utilizando programación dinámica mediante el *algoritmo Backward*, de manera análoga al algoritmo Forward para las $\alpha_t(i)$. Para el paso inductivo, aprovecha la siguiente igualdad:

$$\beta_t(i) = \sum_{j=1}^S P_{ij} \cdot f_j(o_{t+1}) \cdot \beta_{t+1}(j)$$

Algorithm 2 Algoritmo Backward

Entrada: Observaciones $O_1, O_2, \dots, O_T$, matriz de transición P , densidades de emisión $f_1, \dots, f_S$

Salida: Matrices $\beta_t(i) \in R^{T \times S}$

Inicialización:

Para $i = 1, \dots, S$:

$$\beta_T(i) = 1$$

Inducción:

Para $t = T - 1, \dots, 1$, y $i = 1, \dots, S$:

$$\beta_t(i) = \sum_{j=1}^S P_{ij} \cdot f_j(O_{t+1}) \cdot \beta_{t+1}(j)$$

Demostración de correctitud del algoritmo Backward (2). Caso base ($t = T$):

$$\beta_T(i) = P(O_{T+1:T} \mid Z_T = i) = 1 \quad (\text{por convención, no hay observaciones futuras})$$

Paso inductivo: Supongamos que la fórmula es válida para $\beta_{t+1}(j)$, se quiere demostrar para $\beta_t(i)$.

Aplicando probabilidad total:

$$\beta_t(i) = P_\theta(O_{t+1:T} \mid Z_t = i) = \sum_{j=1}^S P_\theta(Z_{t+1} = j \mid Z_t = i) \cdot P(O_{t+1:T} \mid Z_{t+1} = j)$$

Separando la observación O_{t+1} :

$$\begin{aligned} \beta_t(i) &= \sum_{j=1}^S P_{ij} \cdot P_\theta(O_{t+1} \mid Z_{t+1} = j) \cdot P_\theta(O_{t+2:T} \mid Z_{t+1} = j) \\ &= \sum_{j=1}^S P_{ij} \cdot f_j(o_{t+1}) \cdot \beta_{t+1}(j) \end{aligned}$$

por hipótesis inductiva. □

Cálculo de las responsabilidades ($\gamma_t(i)$):

Una vez obtenidas las variables $\alpha_t(i)$ y $\beta_t(i)$, la probabilidad posterior de estar en el estado i en el tiempo t , dados los datos observados, se puede calcular como:

$$\gamma_t(i) = \frac{\alpha_t(i) \cdot \beta_t(i)}{\sum_{j=1}^S \alpha_t(j) \cdot \beta_t(j)} = P_\theta(Z_t = i \mid O = o) \quad (2.7)$$

Demostración (Ecuación 2.7). Por definición de probabilidad condicional:

$$P_{\theta}(Z_t = i \mid O = o) = \frac{P_{\theta}(Z_t = i, O = o)}{P_{\theta}(O = o)}$$

El numerador puede expresarse como:

$$P_{\theta}(Z_t = i, O = o) = P_{\theta}(O_1 = o_1, \dots, O_T = o_T, Z_t = i)$$

Esto se puede factorizar como:

$$P_{\theta}(O_1 = o_1, \dots, O_T = o_T, Z_t = i) = \alpha_t(i) \cdot \beta_t(i)$$

donde:

- $\alpha_t(i) = P_{\theta}(O_1 = o_1, \dots, O_t = o_t, Z_t = i)$
- $\beta_t(i) = P_{\theta}(O_{t+1} = o_{t+1}, \dots, O_T = o_T \mid Z_t = i)$

El denominador es otra forma de calcular la verosimilitud, al marginalizar sobre todos los estados ocultos en un tiempo particular:

$$P_{\theta}(O = o) = \sum_{j=1}^S P_{\theta}(Z_t = j, O = o) = \sum_{j=1}^S \alpha_t(j) \cdot \beta_t(j)$$

Por lo tanto:

$$\gamma_t(i) = \frac{\alpha_t(i) \cdot \beta_t(i)}{\sum_{j=1}^S \alpha_t(j) \cdot \beta_t(j)}$$

□

2.2.4. Problema de Identificabilidad

Un concepto importante a la hora de trabajar con los Hidden Markov Models, o más ampliamente con mezclas ocultas de distribuciones, es el Problema de Identificabilidad, que es necesario introducir particularmente para este estudio.

En primer lugar, un modelo probabilístico se denomina *identificable* si cada proceso generador de datos es único. Es decir, para cualquier par de configuraciones de parámetros distintas $\theta_1 \neq \theta_2$ se inducen distribuciones de probabilidad diferentes sobre el espacio observacional, es decir,

$$P(X \mid \theta = \theta_1) \neq P(X \mid \theta = \theta_2)$$

El Hidden Markov Model canónico explicado en este capítulo no es identificable en primer lugar por un motivo simple: si se plantean S estados ocultos, existen $S!$ formas de renombrar a los estados. Por lo tanto, dada cualquier configuración de parámetros, existen $S! - 1$ configuraciones equivalentes distintas.

Este problema será retomado luego en la Sección 4.5, donde se explicará cómo los estudios en los que se basa este trabajo resuelven este problema.

2.2.5. Inferencia

Ahora bien, luego de tener planteado un modelo, es de interés obtener parámetros que se ajusten a los datos observados. Esto se puede encarar de manera frecuentista o bayesiana. Para el primer enfoque, se consiguen los estimadores de máxima verosimilitud. En el caso de los HMMs, esto se realiza mediante un caso específico del algoritmo de Expectation-Maximization utilizado para ajustar modelos de mezclas de distribución, llamado Baum-Welch [39]. No obstante, este algoritmo presenta limitaciones cuando se aplica a estructuras que se desvían incluso moderadamente del Hidden Markov Model canónico, como la inclusión de estructuras jerárquicas. Además, algunas distribuciones de emisión pueden ser intratables analíticamente para la implementación de dicho algoritmo.

Para el presente estudio, se abordará un enfoque bayesiano, donde los parámetros no se consideran fijos y desconocidos, sino que son realizaciones de variables aleatorias cuya distribución representa la creencia que se posee sobre los valores que puede tomar, hasta el momento de hacer inferencia. En el Capítulo 3 se explicarán los métodos que existen para realizar inferencia bayesiana.

3. INFERENCIA Y ANÁLISIS BAYESIANO

Este capítulo comenzará explicando los conceptos fundamentales de la estadística bayesiana. Luego se explicarán herramientas de la inferencia bayesiana, y de análisis de resultados. Debido a que el campo de la estadística bayesiana es sumamente amplio, la elección de elementos que conforman esta introducción se realizará con un foco en las necesidades del presente estudio.

3.1. Conceptos fundamentales de la Estadística Bayesiana

La estadística bayesiana propone una forma alternativa al enfoque frecuentista de entender la incertidumbre y de hacer inferencia estadística. A diferencia del enfoque frecuentista, donde los parámetros de un modelo se consideran fijos pero desconocidos, el enfoque bayesiano los modela como realizaciones de variables aleatorias, sobre las cuales se puede razonar y actualizar creencias a medida que se dispone de nueva información.

El núcleo de este enfoque es el Teorema de Bayes, que establece cómo actualizar una distribución de probabilidad inicial (llamada distribución *a priori*, o *prior*) sobre los parámetros de interés, en función de los datos observados sobre las variables observables. El resultado de esta actualización es la distribución posterior, que refleja la nueva creencia sobre los parámetros después de ver los datos.

Teorema de Bayes

$$P(\Theta = \theta \mid X = x) = \frac{P(X = x \mid \Theta = \theta) P(\Theta = \theta)}{P(X = x)}$$

donde:

- Θ representa el vector aleatorio que genera a los parámetros del modelo θ .
- x denota los datos observados sobre las variables observables X .
- $P(\Theta = \theta)$ es la distribución *a priori*.
- $P(X = x \mid \Theta = \theta)$ es la verosimilitud (likelihood), que describe cómo se generan los datos dado un valor de los parámetros.
- $P(\Theta = \theta \mid X = x)$ es la distribución *posterior*.
- $P(X = x)$ es la evidencia o verosimilitud marginal, y cumple el rol de constante de normalización:

$$P(X = x) = \int P(X = x \mid \Theta = \theta) P(\Theta = \theta) d\theta$$

En todo este capítulo, por comodidad, se considerará que los parámetros Θ son variables aleatorias continuas, puesto que es infrecuente encontrar casos donde se busque realizar inferencia sobre parámetros discretos.

3.1.1. Elección de *priors*

La elección de los *priors* determina cuánto conocimiento previo se incorpora al proceso de inferencia y, por lo tanto, condiciona la forma de la distribución posterior. Cuando se opta por *priors* no informativos (o “débilmente informativos”), se busca que su influencia sea mínima, de modo que los datos dominen la actualización; típicamente se recurre a distribuciones uniformes amplias o de varianza alta para reflejar incertidumbre casi total sobre los parámetros. Esto resulta útil cuando se dispone de escasa evidencia previa o se quieren evitar sesgos fuertes. En contraste, los *priors* informativos condensan conocimiento teórico, o resultados experimentales anteriores.

3.1.2. Estimación de parámetros

En el marco bayesiano, una realización x de las variables observables X se considera que fue generada por una configuración de parámetros θ , que a su vez es una realización de la variable aleatoria Θ , la cual sigue una distribución a priori $p(\theta)$. El objetivo es estimar el valor de θ mediante un estimador $\hat{\theta}(x)$ que incorpore tanto información de los datos x como de la creencia previa, algo que se conoce como estimación *a posteriori*. Una forma es minimizando el riesgo de Bayes cuadrático definido como

$$r(\hat{\theta}(X), \Theta) = E[(\hat{\theta}(X) - \Theta)^2] \quad (3.1)$$

El estimador de Bayes es, por definición, aquel que minimiza este riesgo. En este caso, se puede demostrar que el estimador que lo minimiza es la media de la distribución posterior:

$$\hat{\theta}_{\text{Bayes}}(x) = E[\Theta \mid X = x]$$

A diferencia de la inferencia clásica, donde se utilizan intervalos de confianza construidos a partir de la distribución muestral del estimador, en la inferencia bayesiana se utilizan intervalos de credibilidad. Un intervalo de credibilidad del 95 % es un intervalo $[a, b]$ tal que

$$P(a \leq \Theta \leq b \mid X = x) = 0,95$$

Este intervalo se obtiene directamente a partir de la distribución posterior $p(\theta \mid x)$. Una forma es construir intervalo central que deja un 2,5 % de probabilidad en cada cola. Otra forma común de construirlo es mediante el intervalo de mayor densidad posterior (Highest Density Interval o HDI), que es el intervalo más corto que contiene el 95 % de la masa de probabilidad posterior.

3.2. Sobre el problema de calcular estadísticos de la distribución posterior en espacios de alta dimensión

La utilidad que posee conocer la distribución posterior no se limita a estimar los parámetros que generaron a las observaciones. Es importante, en un sentido más amplio, para obtener estadísticos de interés que den información de cómo se actualizó la creencia sobre los parámetros dados los datos. Es decir, es útil hacer cálculos de la forma:

$$E[f \mid X = x] = \int_{\text{Sop}\pi} f(\theta) \pi(\theta) d\theta$$

donde $\pi(\theta)$ es la densidad de la distribución posterior conseguida, y f es la función cuya esperanza es el estadístico deseado. Por ejemplo, utilizando a $f = \mathbf{1}_{\{\theta > 0\}}$, se puede dar una estimación a $P(\Theta > 0 \mid X = x)$.

Desafortunadamente, son escasas las ocasiones en las que dicha integral se puede calcular analíticamente. A pesar de que la forma de la función f puede a veces convertir a la integral en intratable analíticamente, el problema también ocurre por el hecho de que la distribución posterior no es una distribución conocida para modelos con cierta complejidad como los modelos gráficos introducidos en el capítulo 2. Existen algunos modelos donde la distribución posterior es de la misma familia que la distribución a priori, denominados modelos de distribuciones conjugadas, como por ejemplo los modelos Beta-Binomial, Gamma-Poisson, Normal-Normal [18]. Sin embargo, dichos modelos son la excepción.

Una forma ingenua para resolver este problema es realizar una aproximación discretizando el espacio de parámetros con una grilla, calcular el valor de la densidad de la distribución posterior en algún punto representativo para toda celda de la grilla, y luego aproximar la integral como una suma ponderada. Esta idea funciona en espacios de dimensión baja (por ejemplo, uno o dos parámetros), pero no escala con la dimensión. Esto se debe a lo que se conoce como la **maldición de la dimensionalidad**: si cada parámetro se discretiza en k valores, el número total de puntos evaluados crece como k^d , donde $d = \dim \text{Sop}\pi$. Esto implica que con $k = 10$ y $d = 10$ ya se necesitan 10^{10} evaluaciones. Este crecimiento exponencial hace que la estrategia de grilla sea inviable incluso para modelos moderadamente complejos.

Otra idea que ha surgido para resolver este problema es utilizar el azar. Los métodos de *Monte Carlo* se han desarrollado para estimar las propiedades de distribuciones teóricas extrayendo muestras aleatorias de la misma, y calculando los estimadores muestrales correspondientes. Por ejemplo, si uno pudiera generar muestras $\theta^{(1)}, \dots, \theta^{(N)}$ de la distribución posterior π , entonces se podría aproximar la esperanza deseada como:

$$E_{\pi}[f] \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(\theta^{(i)})$$

Esta técnica es sumamente poderosa, pero requiere una condición fundamental: la capacidad de muestrear directamente de la distribución posterior. Sin embargo, esta condición rara vez se cumple, ya que no se cuenta con una forma directa de generar muestras independientes de dicha distribución en espacios de alta dimensión. Además, incluso si se contara con un muestreador perfecto, la maldición de la dimensionalidad afecta también a este enfoque. Idealmente, el muestreo debería concentrarse en regiones de interés donde la densidad es más alta. En alta dimensión, el volumen de dichas regiones de interés se convierte en despreciable con respecto a su vecindario. Una ilustración gráfica de dicho fenómeno se puede observar en la Figura 3.1. Por lo tanto las muestras aleatorias tienden a concentrarse en regiones de baja densidad, lo que genera varianza alta en las estimaciones e ineficiencia general del método.

Basándose en la técnica de *Monte Carlo*, y creado originalmente para resolver problemas similares en el contexto de la mecánica estadística, surge un nuevo concepto que utiliza la propiedad de Markov descrita en el capítulo anterior, pero esta vez con una utilidad diferente. A continuación se dará una breve introducción a los métodos de Markov Chain Monte Carlo (MCMC).

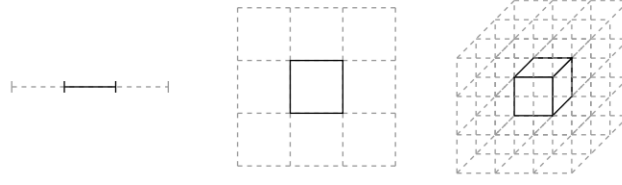


Fig. 3.1: Se puede observar que para una dimensión (izquierda), la región de interés representa $\frac{1}{3}$ de todo su vecindario. Para dos dimensiones, representa $\frac{1}{9}$, y para tres, $\frac{1}{27}$. Es decir, el volumen de una región específica se hace exponencialmente despreciable a medida que aumenta la cantidad de dimensiones. Adaptado de [6]

3.2.1. Markov Chain Monte Carlo (MCMC)

Los métodos que se derivan de Markov Chain Monte Carlo (MCMC) son de los más utilizados para conocer la distribución posterior de un modelo de alta dimensionalidad. A pesar de que esta técnica lleva en el nombre *Markov Chain* (Cadena de Markov), técnicamente no utiliza Cadenas de Markov en el sentido estricto en que fueron definidas en el capítulo de Modelos Gráficos para introducir los Modelos Ocultos de Markov, sino una estructura relacionada pero más general. Para clarificar esta distinción, se introducirá el concepto de proceso de Markov.

Definición 3.2.1 (Proceso de Markov). Un **proceso de Markov** es una familia de variables aleatorias $\{X_t\}_{t \in T}$ con valores en un espacio de estados S , tal que cumple la propiedad de *Markov*:

$$P(X_{t_{n+1}} \in A \mid X_{t_n} = x_{t_n}, X_{t_{n-1}} = x_{t_{n-1}}, \dots, X_{t_1} = x_{t_1}) = P(X_{t_{n+1}} \in A \mid X_{t_n} = x_{t_n})$$

para cualquier $A \subseteq S$ medible y cualquier secuencia estrictamente creciente $t_1, \dots, t_n, t_{n+1} \in T$. Al igual que en las cadenas de Markov, el futuro del proceso depende únicamente del estado actual, y no del pasado.

Dependiendo de la naturaleza del tiempo T y del espacio de estados S , se distinguen varios tipos de procesos de Markov:

- Si $T \subseteq N$ (tiempo discreto) y S es un espacio de estados discreto, se habla de una **Cadena de Markov**.
- Si $T \subseteq N$ y S es continuo (por ejemplo, $S \subseteq R^n$), se trata de un **proceso de Markov a tiempo discreto y espacio continuo**.
- Si $T \subseteq R^+$ (tiempo continuo) y S es discreto, se habla de una **Cadena de Markov en tiempo continuo**.
- Si tanto T como S son continuos, se tiene un **proceso de difusión** o **proceso de Markov continuo**.

De esta manera, mientras que las Cadenas de Markov son un caso particular de proceso de Markov con tiempo discreto y espacio de estados discreto, los métodos de MCMC emplean procesos de Markov con tiempo discreto pero espacio de estados continuo.

Ahora bien, los métodos de MCMC consisten en construir procesos de Markov que tengan como espacio de estados al soporte conjunto de todos los parámetros dada su

distribución a priori. Es la secuencia de estados que forma la que permite explorar el espacio de manera que, en el límite, la distribución de los estados visitados se aproxime a la distribución posterior. En la práctica, se realiza una cantidad de iteraciones en el orden de los miles, y se toma un período de **burn-in**, donde se descartan las primeras iteraciones hasta un número dado, puesto que pueden no representar correctamente la distribución objetivo. A continuación se comenzará introduciendo el algoritmo de Metrópolis-Hastings, que es uno de los primeros métodos de MCMC, para luego introducir Hamiltonian Monte Carlo, que es el algoritmo utilizado por los principales paquetes de software de inferencia bayesiana.

3.2.2. Algoritmo Metropolis Hastings

En primer lugar, dados los datos observados X , se denotará como $\pi(\theta)$ como la densidad de la distribución posterior sin normalizar.

$$\pi(\theta) = P(X | \theta) P(\theta)$$

A pesar de que el objetivo es explorar la distribución posterior real, como se explicará luego tanto para Metrópolis-Hastings como para Hamiltonian Monte Carlo, las constantes no impactan en el muestreo. Para realizar la exploración, el algoritmo introduce un *kernel de propuesta* $q(\theta' | \theta)$ que permite generar candidatos θ' a partir del estado actual θ . Luego, dichos candidatos se aceptan o rechazan con cierta probabilidad.

Algorithm 3 Metropolis-Hastings

Entrada: Distribución objetivo $\pi(\theta)$, distribución propuesta $q(\theta' | \theta)$

1. Inicializar en algún estado θ_0
2. Para cada iteración $t = 1, 2, \dots$:
 - a) Proponer un nuevo estado $\theta' \sim q(\theta' | \theta_{t-1})$
 - b) Calcular la tasa de aceptación:

$$\alpha(\theta_{t-1}, \theta') = \min \left(1, \frac{\pi(\theta') q(\theta_{t-1} | \theta')}{\pi(\theta_{t-1}) q(\theta' | \theta_{t-1})} \right)$$

Notar que este paso elimina cualquier constante que multiplica a π , como la constante normalizadora $\frac{1}{P(X)}$

- c) Con probabilidad $\alpha(\theta_{t-1}, \theta')$, aceptar la propuesta: $\theta_t = \theta'$. En caso contrario, rechazarla: $\theta_t = \theta_{t-1}$
-

Este procedimiento genera una secuencia de muestras que si el proceso es irreducible, es decir, si el kernel elegido es tal que cualquier estado es accesible desde cualquier estado inicial, converge en distribución a la distribución posterior [31]. Es decir, representa un sistema ergódico.

Un caso particular del algoritmo es cuando el kernel de propuesta es simétrico, es decir, $q(\theta' | \theta) = q(\theta | \theta')$, que es el algoritmo original. En este caso, la tasa de aceptación se

simplifica a:

$$\alpha(\theta, \theta') = \min\left(1, \frac{\pi(\theta')}{\pi(\theta)}\right)$$

En la práctica, se realizan algunos ajustes como tomar logaritmos a $\pi(\theta)$ para prevenir inestabilidades numéricas. Si bien Metropolis-Hastings es versátil y sencillo de implementar, lamentablemente también enfrenta algunas consecuencias de la maldición de la dimensionalidad: a medida que la dimensión del espacio de parámetros aumenta, la cantidad de direcciones posibles en las que puede proponerse un salto aumenta exponencialmente. Esto hace que muchas propuestas aleatorias tengan una probabilidad muy baja de ser aceptadas, ya que tienden a caer en regiones de baja densidad posterior. Como consecuencia, las tasas de aceptación disminuyen y la exploración del espacio se vuelve lenta e ineficiente. Además, al no considerar la geometría de la distribución, el movimiento aleatorio puro puede generar trayectorias erráticas y altamente correlacionadas entre sí. Estas dificultades son la razón de por qué Metropolis-Hastings no es el algoritmo más utilizado en la actualidad, y motivan la introducción de métodos más sofisticados como Hamiltonian Monte Carlo, que aprovechan información geométrica del espacio de parámetros para proponer saltos más informados y eficientes [6].

3.2.3. Algoritmo Hamiltonian Monte Carlo: conceptos fundamentales

El algoritmo de Hamiltonian Monte Carlo (HMC), es un algoritmo mucho más reciente que Metrópolis-Hastings. Está basado en el formalismo hamiltoniano clásico sobre la evolución de un sistema. En este, el estado de un sistema se describe mediante dos conjuntos de variables: las posiciones $\theta \in \mathbb{R}^d$ y los momentos conjugados $r \in \mathbb{R}^d$. Estas variables conforman el espacio de fases del sistema.

La evolución del sistema en el tiempo está gobernada por una función escalar llamada Hamiltoniano, $H(\theta, r)$, que representa la energía total del sistema como suma de energía cinética y potencial:

$$H(\theta, r) = U(\theta) + K(r, \theta)$$

donde $U(\theta)$ es la energía potencial (dependiente de la posición) y $K(r, \theta)$ es la energía cinética (dependiente del momento y de la posición).

La dinámica del sistema está determinada por las ecuaciones de Hamilton:

$$\begin{aligned}\frac{d\theta_i}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial r_i} \\ \frac{dr_i}{dt} &= -\frac{\partial H}{\partial \theta_i}\end{aligned}$$

Estas ecuaciones definen un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias que describen cómo el estado (θ, r) evoluciona en el tiempo.

Ahora bien, en HMC las posiciones están representadas por los parámetros θ , y los momentos conjugados r_i para cada parámetro θ_i son variables auxiliares del algoritmo. Las componentes del Hamiltoniano ahora son:

$$K(r, \theta) = \frac{1}{2} r^\top M^{-1} r$$

siendo M una matriz de masa (generalmente la identidad), y

$$U(\theta) = -\log \pi(\theta)$$

actúa como potencial, donde $\pi(\theta)$ es la distribución objetivo,

Como fue mencionado previamente, el algoritmo propone nuevos estados de manera más informada que Metropolis-Hastings. La idea es que a partir de un estado (θ, r) , se simula la trayectoria del sistema según la dinámica hamiltoniana durante un tiempo finito para proponer un nuevo estado (θ', r') .

Como las ecuaciones de Hamilton rara vez pueden resolverse de forma analítica, se emplea un esquema de integración numérica llamado *leapfrog*.

Leapfrog es un algoritmo de integración numérica, como lo es el Método de Euler, diseñado específicamente para ofrecer resultados estables al resolver sistemas hamiltonianos de ecuaciones diferenciales. Es el algoritmo más utilizado por los paquetes actuales de inferencia bayesiana para resolver las ecuaciones Hamiltonianas, y el empleo del mismo se debe a estudios previos en cómo simular eficientemente la dinámica Hamiltoniana [24].

Como otros métodos numéricos, Leapfrog avanza en el tiempo mediante pasos discretos de tamaño ε . El algoritmo comienza generando un nuevo valor para el momento r , de manera independiente de la posición θ o del valor anterior del momento:

$$r \sim \mathcal{N}(0, M)$$

Luego, realiza una secuencia alternada de actualizaciones: medio paso para el momento y paso completo para la posición. La dinámica básica es:

$$r \leftarrow r - \frac{\varepsilon}{2} \nabla_{\theta} U(\theta)$$

$$\theta \leftarrow \theta + \varepsilon M^{-1} r$$

$$r \leftarrow r - \frac{\varepsilon}{2} \nabla_{\theta} U(\theta)$$

Al aplicar L pasos de Leapfrog, se simula un trayecto de longitud total $L \cdot \varepsilon$ en el espacio de fases. Se denota al estado resultante al final de este proceso como (θ', r') , donde θ' será una nueva propuesta. Finalmente, se aplica una corrección Metropolis, en donde dicha propuesta puede ser aceptada o rechazada.

Algorithm 4 Hamiltonian Monte Carlo

Entrada: Estado actual θ_t , masa M , cantidad de pasos L , tamaño de paso ϵ

1. Muestrear momento inicial: $r_t \sim \mathcal{N}(0, M)$
2. Aplicar L pasos del método *leapfrog* con paso ϵ para obtener una propuesta (θ', r')
3. Calcular la probabilidad de aceptación:

$$\alpha = \min(1, \exp(-H(\theta', r') + H(\theta_t, r_t)))$$

Notar que este paso hace que la constante normalizadora no afecte el resultado. Si se tomara $\tilde{\pi}(\theta) = \pi(\theta)/Z$, entonces:

$$\log \tilde{\pi}(\theta) = \log \pi(\theta) - \log Z$$

y

$$\begin{aligned} H(\theta', r') - H(\theta_t, r_t) &= [-\log \pi(\theta') + \log Z + K(r', \theta)] \\ &\quad - [-\log \pi(\theta_t) + \log Z + K(r_t, \theta)] \\ &= [-\log \pi(\theta') + K(r', \theta)] - [-\log \pi(\theta_t) + K(r_t, \theta)] \end{aligned}$$

donde desaparece la constante Z .

4. Aceptar la propuesta con probabilidad α . Si se acepta, poner $\theta_{t+1} = \theta'$; en caso contrario, $\theta_{t+1} = \theta_t$
-

HMC permite una exploración más eficiente del espacio de parámetros, con trayectorias largas que mantienen alta la tasa de aceptación, especialmente en distribuciones posteriores con correlaciones, como lo son los modelos jerárquicos, o geometrías complicadas. Sin embargo, requiere especificar cuidadosamente hiperparámetros como el tamaño de paso ϵ , el número de pasos L y la matriz de masa M . Para abordar este problema, se han desarrollado variantes adaptativas como el No-U-Turn Sampler (NUTS), que ajusta automáticamente estos valores durante el muestreo [17], que también es el estándar en los paquetes de software utilizados.

3.3. Análisis de resultados

Una vez planteado un modelo de lo que se desea estudiar y de haber obtenido muestras de la distribución posterior, el siguiente paso es evaluar el ajuste del modelo a los datos y al conocimiento sustantivo disponible sobre el fenómeno en cuestión. Para ello, se utilizan herramientas de diagnóstico del muestreo, así como criterios de evaluación y comparación entre modelos.

3.3.1. Herramientas de diagnóstico de ajuste

Una parte fundamental del análisis bayesiano es asegurarse de que las muestras obtenidas mediante métodos MCMC representen correctamente la distribución posterior. Para esto, se emplean herramientas como:

- **Estadístico de Gelman-Rubin ($\hat{R}$):** compara la varianza dentro de cada cadena con la varianza entre diferentes cadenas. Si las cadenas han convergido a la misma distribución, estas varianzas deberían ser similares. El valor ideal es cercano a 1. Valores significativamente mayores a 1 (por ejemplo, $\hat{R} > 1,1$) sugieren que las cadenas aún no han convergido y que se requieren más iteraciones o una mejor inicialización.
- **Tamaño efectivo de muestra (ESS) y tamaño relativo efectivo de muestra (RESS):** estima cuántas muestras independientes serían equivalentes para un cierto parámetro, en términos de información, a las muestras correlacionadas obtenidas mediante MCMC. Un ESS bajo para un parámetro indica una alta autocorrelación entre muestras, lo que sugiere una exploración deficiente de la distribución posterior de dicho parámetro. El RESS es la proporción que representa el ESS obtenido sobre la cantidad de muestras.
- **Porcentaje de divergencias:** en Hamiltonian Monte Carlo, las divergencias ocurren cuando la integración numérica del algoritmo *leapfrog* falla al seguir correctamente la trayectoria propuesta. Un porcentaje alto de divergencias indica problemas en la geometría del espacio posterior, lo que puede llevar a estimaciones no confiables. Idealmente, este porcentaje debería ser cercano a cero.

Estas herramientas permiten evaluar la confiabilidad de las estimaciones obtenidas y determinar si el muestreo fue suficiente para realizar inferencias válidas.

3.3.2. Comparación de modelos

Una vez que se han ajustado uno o más modelos, puede ser necesario elegir cuál de ellos generaliza mejor a nuevos datos. Una forma de realizar esta comparación es mediante técnicas de validación cruzada, donde se entrena el modelo con un subconjunto de datos y se evalúa su rendimiento con el resto. Sin embargo, cuando se trabaja con modelos bayesianos complejos, el reentrenamiento puede ser computacionalmente costoso, haciendo que la validación cruzada resulte impracticable. Esta situación ha motivado el desarrollo de criterios alternativos. Se introducirá el criterio WAIC (Watanabe-Akaike Information Criterion)[56], que permite comparar modelos bayesianos sin necesidad de reentrenarlos múltiples veces, balanceando el ajuste a los datos observados con la complejidad del modelo para evitar el sobreajuste.

El criterio frecuentista en el cual está basado es el AIC (Akaike Information Criterion). Este penaliza la verosimilitud del modelo según la cantidad de parámetros. Para esta métrica, valores más bajos de AIC indican modelos preferibles. Su fórmula es:

$$\text{AIC} = -2 \log \mathcal{L}_{\text{máx}} + 2k$$

donde $\mathcal{L}_{\text{máx}}$ es la máxima verosimilitud alcanzada por el modelo, y k es el número de parámetros estimados. Se prefiere el modelo con menor AIC.

El WAIC, en cambio, se calcula utilizando toda la distribución posterior de los parámetros, lo que lo convierte en un criterio más adecuado para modelos bayesianos.

Su fórmula es:

$$\text{WAIC} = -2 \left(\sum_{i=1}^n \log \left(\frac{1}{S} \sum_{s=1}^S p(y_i | \theta^{(s)}) \right) - \sum_{i=1}^n \text{Var}_{s=1}^S \left[\log p(y_i | \theta^{(s)}) \right] \right)$$

donde:

- y_i es la observación número i ,
- $\theta^{(s)}$ es la muestra número s de la distribución posterior de los parámetros,
- S es el número total de muestras posteriori,
- $p(y_i | \theta^{(s)})$ es la verosimilitud puntual de la observación y_i bajo los parámetros $\theta^{(s)}$,
- la primera suma es una estimación del *logaritmo del promedio de verosimilitud predictiva* sobre las muestras.
- la segunda suma actúa como penalización por complejidad del modelo.

Al igual que con el AIC, valores más bajos de WAIC indican modelos preferibles. Es importante destacar que el valor de WAIC en sí mismo no es interpretable como una medida absoluta de bondad de ajuste, sino que se utiliza para comparar el ajuste entre modelos que comparten las mismas variables observables y fueron entrenados con los mismos datos. Un modelo que posee menor WAIC que otro sugiere que ha tenido mayor capacidad para identificar la distribución subyacente de los datos.

Otro punto relevante es que WAIC asume que las observaciones son independientes. En algunos casos, esta limitación puede ser abordada. Por ejemplo, si los datos corresponden a múltiples series de tiempo independientes, puede considerarse cada serie como una observación individual.

4. DIVAGACIÓN MENTAL Y METILFENIDATO

En este Capítulo, en primer lugar se desarrollará una introducción al fenómeno de la divagación mental (en adelante, *mind-wandering* o MW). Luego, se abordará la literatura relevante en el tema principal de este trabajo: la introducción de la variable temporal en el modelado del *mind-wandering* y su importancia. Se discutirá sobre la adopción de las estructuras gráficas probabilísticas introducidas en el Capítulo 2 para las Ciencias Cognitivas y específicamente en *mind-wandering*, y en los enfoques propuestos en algunos estudios para investigarlo.

4.1. Definición y caracterización

Aunque la definición de *mind-wandering* sigue siendo objeto de disputa [10, 11, 44], la definición más aceptada es la del fenómeno cognitivo que se caracteriza por el desplazamiento de la atención desde una tarea principal hacia pensamientos internos no relacionados con la misma [14, 47, 48].

El mismo ha sido asociado con una mayor tasa de errores y peor desempeño en tareas que requieren monitoreo continuo y procesamiento activo de información, como la comprensión lectora [34], o en el manejo al volante [59]. Sin embargo, a pesar de su aparente carácter distractor, hay diversos trabajos que han sugerido que puede desempeñar un papel funcional en la planificación futura [4], la resolución de problemas o la creatividad [25].

Una de las teorías más influyentes sobre el MW plantea que estos episodios están acompañados por un desacoplamiento perceptual (en inglés, *perceptual decoupling*) [47, 41, 48], es decir, una reducción en el procesamiento de estímulos sensoriales externos. Este desacoplamiento explicaría la disminución en el rendimiento durante tareas que requieren atención, dado que los recursos atencionales se redirigen hacia la actividad mental interna, comprometiendo la interacción eficaz con el ambiente.

Las implicaciones mencionadas tanto positivas como negativas hacen que el MW sea un objeto de creciente interés en la investigación cognitiva, para poder generar estrategias que permitan incrementar las positivas o disminuir las negativas según el contexto [48]. Sin embargo, el estudio del *mind-wandering* representa un desafío metodológico, dado que se trata de un fenómeno interno, no observable de manera directa.

4.2. Estudio experimental del mind-wandering

Para estudiar fenómenos como el MW, en las ciencias cognitivas experimentales se utilizan lo que se conoce como *paradigmas experimentales*, es decir, diseños estandarizados que permiten observar de manera controlada comportamientos y procesos mentales. Uno de los paradigmas clásicos en este campo es el paradigma *Go/No-Go*, que consiste en presentar estímulos a los cuales los participantes deben responder rápidamente (*Go*) o inhibir su respuesta (*No-Go*), dependiendo de sus características. Una variante específica de este paradigma, llamada *Sustained Attention to Response Task* (SART) [40], consiste en la presentación rápida y continua de estímulos simples (como dígitos del 1 al 9), en la que los participantes deben responder a todos los estímulos excepto a uno que ocurre en general

con baja frecuencia (por ejemplo, el número 3), ante el cual deben inhibir su respuesta. En experimentos de este estilo, a cada repetición se la conoce como ensayo, o *trial*. Esta estructura repetitiva y altamente automatizada favorece el deslizamiento atencional hacia pensamientos internos, lo que hace del SART una herramienta especialmente útil para inducir y detectar episodios de MW.

Durante la ejecución de estas tareas, es común incluir sondeos, o *probes* en inglés, que son preguntas breves que interrumpen momentáneamente el flujo de la actividad con el fin de indagar el estado atencional del participante justo antes de la interrupción. Un tipo frecuente de pregunta consiste en una escala Likert, donde se solicita al sujeto que puntúe, por ejemplo del 1 al 5, su nivel de desconexión con la tarea en ese preciso momento. Otro tipo de pregunta, empleada en estudios que buscan caracterizar los episodios de *mind-wandering*, indaga sobre el contenido de los pensamientos: se consulta si el participante estaba concentrado en la tarea y, en caso negativo, si sus pensamientos estaban relacionados o no con la tarea, y si eran deliberados o espontáneos, por ejemplo. Esta técnica se conoce como *thought sampling* (muestreo de pensamientos), y se basa en la idea de que los pensamientos reportados constituyen observaciones de un proceso aleatorio subyacente de pensamientos. Por lo tanto, la distribución de respuestas obtenidas debería reflejar la distribución real de pensamientos durante la tarea completa [48]. Si bien el *thought sampling* permite obtener medidas directas de *mind-wandering*, su implementación interfiere con la tarea y depende de la honestidad y capacidad de introspección de los participantes, lo cual justifica la incorporación de fuentes de información más objetivas.

A medida que el participante va completando los ensayos, se pueden tomar señales tanto conductuales como neurofisiológicas en el tiempo. Entre las conductuales están la secuencia de tiempos de respuesta y los errores. En el paradigma de *GO/NO-GO* se pueden distinguir los errores de *comisión* y *omisión*. Los errores de *comisión* ocurren en los ensayos donde el participante debía inhibir su respuesta pero no lo hizo, y los errores de *omisión* que ocurren cuando el participante debía responder pero no lo hizo. Entre las medidas neurofisiológicas se incluyen, por ejemplo, la actividad eléctrica cerebral registrada mediante electroencefalografía (EEG), la dilatación pupilar medida con pupilometría, la frecuencia cardíaca y la variabilidad de la frecuencia cardíaca (HRV) obtenidas con sensores fisiológicos, así como la conductancia de la piel (EDA). Sin embargo, estas son consideradas medidas indirectas del fenómeno a estudiar.

Una de las estrategias más utilizadas para su análisis es la combinación de medidas subjetivas y objetivas, lo que se conoce como *triangulación* [48]. Esta estrategia permite contrastar los reportes introspectivos de los participantes con indicadores conductuales y neurofisiológicos asociados al MW.

La literatura ha identificado con éxito factores generales asociados con la cantidad de MW utilizando la técnica de *triangulación*. En cuanto a los marcadores conductuales, se ha encontrado que un aumento en el coeficiente de variabilidad del tiempo de respuesta, conocido en inglés como *Response Time Coefficient of Variability* (RTCV), definido como el desvío estándar sobre la media de los tiempos de respuesta en un período dado (como un bloque de ensayos previo a un *probe*) [42, 1], así como un incremento en la tasa de errores [29], son indicadores confiables de MW, en la teoría del desacoplamiento perceptual del *mind-wandering*.

En cuanto a los marcadores neurofisiológicos, por ejemplo, se ha hallado que un incremento en el diámetro pupilar se asocia con la ocurrencia de MW [49], o que hay un aumento en la energía en las bandas theta (0.2-4 Hz) y delta (4-8 Hz), que son las frecuencias bajas

en las señales de Electroencefalografía (EEG) [9].

4.3. Investigación sobre la dinámica del *mind-wandering*

A pesar de los factores identificados que están asociados al *mind-wandering*, la mayoría de dichos estudios sólo permiten sacar conclusiones de los estados de atención justo en los momentos anteriores al *probe*, y no de cómo transcurren en el tiempo [48].

Por un lado, agregar la dimensión temporal podría ofrecer nuevas componentes medibles de la cantidad de episodios de *mind-wandering* que experimenta una persona, útiles a la hora de analizar el impacto de condiciones experimentales. Como señala Smallwood [46], dos de estas componentes medibles podrían ser la frecuencia y de la duración de los episodios. Esto podría dar herramientas para responder si ciertos contextos o condiciones favorecen la entrada o salida del estado de divagación mental. Por ejemplo, daría una forma directa de validar una hipótesis como que el entrenamiento en *mindfulness* lleva a episodios más breves de *mind-wandering*, y por lo tanto menor cantidad del mismo gracias a una mayor conciencia de su ocurrencia [41]. O que el tiempo total dedicado a la *mind-wandering* se reduce en una tarea demandante debido a una disminución en la frecuencia de los episodios. Al ser un fenómeno de alta prevalencia en el mundo actual, entender los mecanismos que modulan dichas variables podría ser de gran interés para mitigar los problemas que trae, o para evaluar el impacto que intervenciones farmacológicas, como es el caso de este trabajo.

Por otro lado, podría ser de interés en estudios donde el *mind-wandering* representa una variable contaminadora en el tiempo, especialmente cuando se busca responder una pregunta de investigación donde se requiere atención. En un estudio de Vandekerckhove et al. [53], se creó un modelo de mezcla oculta de distribuciones para identificar ensayos atípicos en tareas de tiempos de respuesta llevadas a cabo previamente, en los que se observaba un *inicio retrasado* del procesamiento. Aunque su enfoque no se centró específicamente en el *mind-wandering*, su modelo permitía distinguir respuestas generadas por procesos que se asumieron distintos al que se busca estudiar (por ejemplo, distracción o fatiga), y por lo tanto serían contaminantes. Esta idea resulta relevante al considerar que el *mind-wandering* podría producir patrones similares de respuesta anómala en experimentos donde se requiera atención. No obstante, este enfoque no considera la estructura temporal de los datos. Esto es una limitación ya que se podría esperar que la probabilidad de que un ensayo sea un contaminante no sólo dependa de la observación, sino también de las observaciones correspondientes a ensayos previos.

Una forma de agregar la variable temporal al estudio del *mind-wandering*, podría ser pedir a los participantes que estimen el tiempo que pasaron en dicho estado. Ya se han reportado estimaciones de tiempo de pensamientos conscientes [19, 20], pero carecen de medidas objetivas que validen su fiabilidad [3]. Además, el *mind-wandering* se caracteriza por una falta de conciencia introspectiva: los participantes a menudo se dan cuenta de que han estado divagando mentalmente después de un tiempo, sin haberlo notado en el momento en que comenzó [41].

4.4. Sobre la utilización de los modelos gráficos en *mind-wandering*

En los últimos años los modelos gráficos (Capítulo 2) han obtenido una gran adopción en las Ciencias Cognitivas, especialmente con un enfoque bayesiano. Se han escrito libros

con capítulos que muestran aplicaciones de estos modelos a las mismas [13, 23, 2, 15]. Son diversos los motivos de dicha popularidad. El motivo de dicha adopción que más concierne a este trabajo es la capacidad de modelar fácilmente variables ocultas. Muchos fenómenos cognitivos están guiados por estructuras ocultas planteadas en modelos teóricos, como creencias, intenciones o estados mentales, que no se ven directamente, pero podrían inferirse a partir de las observaciones provenientes de tareas experimentales [13].

El enfoque bayesiano, introducido en la Sección 2.2.5 y ampliado en el Capítulo 4, permite, en primer lugar, incorporar incertidumbre acerca de los parámetros que componen el modelo, algo que es especialmente aplicable cuando los mismos caracterizan estructuras ocultas teóricas [13, 22]. En segundo lugar, facilita la implementación de modelos jerárquicos o multinivel, que permiten modelar simultáneamente la variabilidad entre participantes y entre estímulos. Si bien estos modelos también pueden ser estimados desde un enfoque frecuentista, el enfoque bayesiano permite incorporar incertidumbre en todos los niveles jerárquicos y realizar inferencia conjunta sobre los parámetros, incluso con muestras pequeñas o estructuras complejas, evitando estimaciones puntuales poco robustas [13, 22]. Por último, una cuestión más práctica es que el enfoque bayesiano ofrece una notable flexibilidad para especificar modelos con estructuras complejas, sin necesidad de derivar estimadores o algoritmos de optimización específicos para cada nuevo modelo, como ocurre muchas veces en el enfoque frecuentista [22].

Esta popularidad se ha trasladado al estudio del *mind-wandering*. En una revisión literaria realizada por Hawkins et al. [16], se propuso que un tipo de modelos que puede ayudar a estudiar los procesos que generan el *mind-wandering* teniendo una estructura temporal son los Modelos Ocultos de Markov (explicados en la Sección 2.2.1). Estos modelos ya han sido aplicados en la investigación del MW en tareas de atención sostenida con diferentes tipos de observaciones, tales como los tiempos de respuesta [3], eye-tracking [21], conectividad funcional en electroencefalografía (EEG) [57], y dilatación pupilar en conjunto con observaciones conductuales (Mittner et al., en prensa).

4.5. Pilares del presente trabajo

Los dos estudios de interés para este trabajo son los de Bastian and Sackur [3] y Mittner et al. (en prensa). El primero está basado en la idea de que el incremento en *RTCV* (ver Sección 4.2) está asociado al desacoplamiento perceptual que explica al *mind-wandering*. Se tomaron como observaciones a los datos de tiempos de respuesta en 47 sujetos en una tarea de SART con estímulos visuales en varios bloques. Plantea un modelo dicotómico con dos estados: *On Task* y *Off Task*, donde este último estaría asociado con episodios de *mind-wandering*. La Figura 4.1 muestra el esquema gráfico causal con la notación de Pearl de los modelos que plantean. Se modelan los tiempos de respuesta con una distribución de emisión ex-gaussiana. Una variable aleatoria sigue una distribución $\text{exGauss}(\mu, \sigma, \tau)$ si es la suma de una variable $\mathcal{N}(\mu, \sigma)$ y una $\exp(1/\tau)$ independientes. La elección de dicha distribución es que es usualmente utilizada para caracterizar a los tiempos de respuesta Luce [27]. Además, como fue mencionado previamente, el *RTCV* se define como el desvío estándar sobre la media de los tiempos de respuesta en un período determinado. Para una variable ex-gaussiana, el desvío estándar está calculado como $\sqrt{\sigma^2 + \tau^2}$. Por lo tanto, los dos parámetros que aumentan el desvío estándar son σ y τ . La literatura ha identificado al τ que correlaciona positivamente con la probabilidad de estar diagnosticado con Trastorno de Déficit de Atención [26] y al σ como un parámetro correlacionado positivamente con

las tasas de errores [58].

En base a esto, se compararon dos modelos: uno llamado de *varianza*, donde

$$O_t \sim \begin{cases} \text{exGauss}(\mu, \sigma, \tau) & \text{si } Z_t = \text{On Task} \\ \text{exGauss}(\mu, \sigma + d, \tau) & \text{si } Z_t = \text{Off Task} \end{cases} \quad (4.1)$$

y un modelo *exponencial*

$$O_t \sim \begin{cases} \text{exGauss}(\mu, \sigma, \tau) & \text{si } Z_t = \text{On Task} \\ \text{exGauss}(\mu, \sigma, \tau + d) & \text{si } Z_t = \text{Off Task} \end{cases} \quad (4.2)$$

con $d > 0$ para ambos modelos. Nótese que esta adición de un parámetro de diferencia positivo entre los parámetros es la forma de resolver el problema de *no identificabilidad* discutido en la Sección 2.2.4, ya que le provee de un orden a los estados. El estado de *On Task* es el primer estado mientras que el de *Off Task* es el segundo.

Estos modelos fueron ajustados para los datos de cada sujeto de manera independiente. En primer lugar, se obtuvo que el modelo *exponencial* es el que mejor explicaba los datos de acuerdo con la métrica de comparación de modelos *Deviance Information Criterion* (DIC), similar a la métrica WAIC introducida en el Capítulo 3. Luego de un análisis de la coherencia del modelo, se obtuvieron estimaciones de las probabilidades de transición, como el promedio general de las medias de las distribuciones posteriores entre todos los participantes de dichos parámetros. En su caso, la probabilidad de transicionar de *On Task* a *Off Task* fue menor que la probabilidad de transicionar de *Off Task* a *On Task* (0,11 frente a 0,18), por lo que el estado de *Off Task* resultó ser más volátil. Por otra parte, esto les permitió dar una estimación de la duración de los episodios de *mind-wandering*, como

$$\frac{T}{P_{MW \rightarrow OT}} \quad (4.3)$$

donde $T = 2s$ es el tiempo entre trials, y $P_{MW \rightarrow OT}$ el promedio general de la probabilidad de transición entre *Off Task* a *On Task*, que fue de 11,1s.

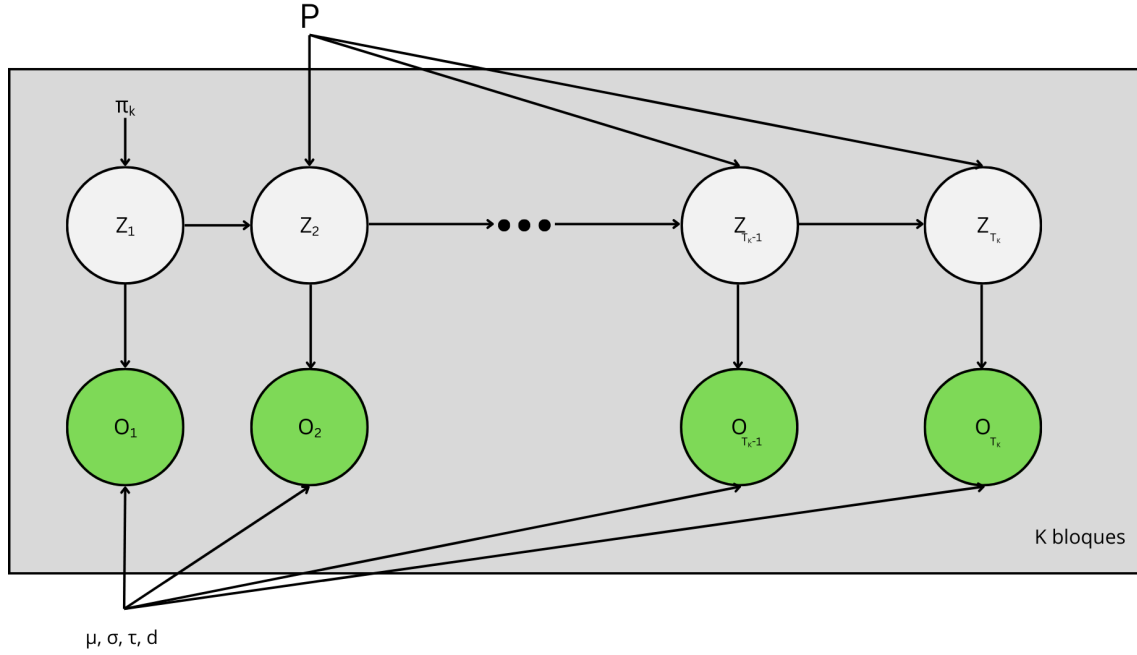


Fig. 4.1: Esquema gráfico de los HMMs planteados en el trabajo de Bastian and Sackur [3]. Esta es la estructura utilizada para modelar los datos de un sujeto en particular. Se crean K cadenas de markov ocultas, una por cada bloque de ensayos, todas con la misma probabilidad de transición P . De estas dependen las observaciones, que son tiempos de respuesta, y siguen la distribución ex-gaussiana correspondiente.

El trabajo de Mittner et al. (en prensa), por su parte, tiene un diseño experimental similar pero con una tarea de atención sostenida diferente a la de SART: emplearon la tarea de generación aleatoria de secuencias mediante golpeteo de dedos (FT-RSGT, por sus siglas en inglés *finger-tapping random-sequence generation task*), en la cual los participantes completaron bloques experimentales y de control de un minuto de duración en orden pseudorandomizado. En los bloques experimentales, debían generar secuencias de toques con los dedos izquierdo y derecho lo más impredecibles posible, mientras que en los bloques de control debían alternar sistemáticamente entre ambas manos (izquierda-derecha-izquierda-derecha, etc.). Además, también se incluye una escala de Likert al final de cada bloque, preguntando por cuán focalizado estaba el participante en la tarea.

En cuanto al modelo, este resuelve el problema de la no identificabilidad de los estados de otra forma planteando un modelo *semisupervisado*. En este, el último estado atencional previo a cada reporte se asume como una variable observada con el valor reportado. Además, el primer estado atencional también se asume como observado en el estado de *On Task*.

Además, introduce una estructura jerárquica (ver Sección 2.1.2.3) en los parámetros de emisión donde existen parámetros globales de las observaciones que caracterizan a todos los sujetos, y parámetros particulares para cada sujeto generados a partir de los globales. El esquema causal gráfico se puede observar en la Figura 4.2.

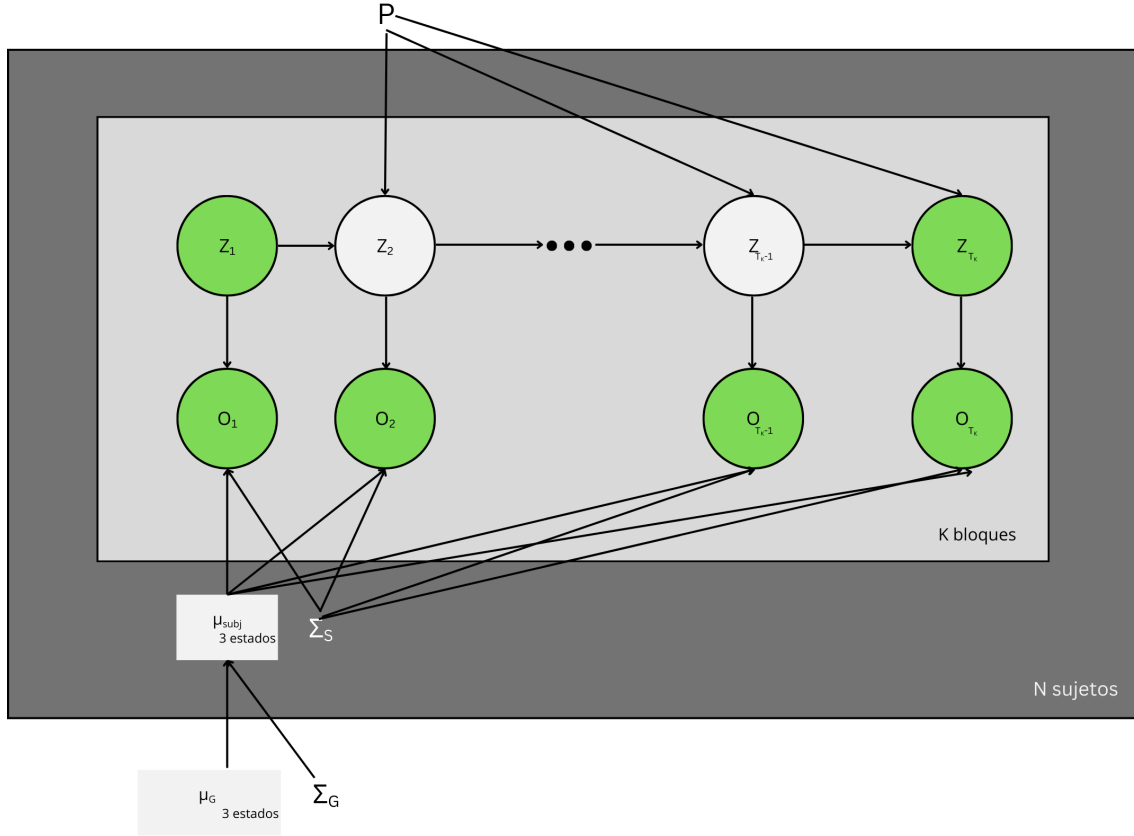


Fig. 4.2: Esquema gráfico del HMM planteado en el trabajo de Matthias et al. (en prensa). Aquí se puede apreciar la idea del enfoque semisupervisado: el primer estado mental se considera observado con estado *On Task*, y el último también se lo considera observado con la respuesta que dio el participante en el *probe*. A diferencia del de Bastian and Sackur [3], este crea un único modelo para todos los sujetos. Nótese la estructura jerárquica en los parámetros de emisión, donde las medias μ_{subj} tienen una distribución que depende de una media global μ_G , y una matriz de covarianza Σ_G que cuantifica la variabilidad intersujeto. La variabilidad intrasujeto Σ_S no se modeló jerárquicamente.

En cuanto a las observaciones, se tomaron observaciones del diámetro pupilar y métricas de variabilidad conductuales relacionadas a la tarea, que en conjunto se modelan con distribuciones de emisión normales multivariadas. Además, se modelan tres estados latentes: *On Task*, *Off-focus* y *mind-wandering*, donde únicamente *On Task* y *mind-wandering* son los estados que se pueden reportar en los *probes*. El estado de *Off focus* es un estado planteado en el modelo teórico propuesto por Mittner et al. [33], trabajo en el que está basado, que intenta dar una explicación mecánica de las fluctuaciones atencionales que subyacen al *mind-wandering*. En el Anexo A.2 se incluye una explicación concisa de dicho modelo. A la fecha de publicación del presente trabajo, no se han compartido resultados.

4.6. Metilfenidato

El *mind-wandering* ha sido observado con frecuencia en personas con Trastorno por Déficit de Atención e Hiperactividad (TDAH), y se considera uno de los síntomas más característicos del cuadro clínico, especialmente debido a que se lo ha asociado con la

formación de pensamientos no relacionados con la tarea de manera no deliberada [45, 43, 30]. De todos los desórdenes conductuales en niños, el TDAH es el desorden más comúnmente diagnosticado, con una prevalencia diagnóstica de 5–10 % en el mundo [38].

El tratamiento más utilizado para el TDAH es el metilfenidato (MTH), un estimulante del sistema nervioso central comercializado bajo el nombre de Ritalina. A pesar de su uso extendido, son pocos los estudios que han evaluado de forma específica cómo influye el metilfenidato sobre el *mind-wandering* de manera directa, y los resultados obtenidos hasta ahora son heterogéneos [51, 30, 55].

Por un lado, a nivel fisiológico, el metilfenidato aumenta la disponibilidad de dopamina y noradrenalina (también conocida como norepinefrina) en la corteza prefrontal [54, 51]. Este último es un neurotransmisor cuya producción en niveles altos en el Sistema Nervioso Central ha estado asociada con la formación de pensamientos autogenerados no relacionados con la tarea [46].

Por otro lado, uno de los estudios más relevantes sobre este tema es el de Sripada et al. [51], quienes investigaron cómo el metilfenidato influye en el rendimiento cognitivo bajo condiciones de fatiga mental, en adultos sin diagnóstico de TDAH. Utilizaron un diseño de doble tarea: primero, los participantes realizaban una tarea demandante en términos de control mental. Y luego una segunda tarea que requería atención sostenida. Encontraron que las personas que no habían ingerido metilfenidato mostraban una mayor variabilidad en el tiempo de reacción (RTCV, ver Sección 4.2) luego del esfuerzo mental, lo que indica una caída en la estabilidad de la atención. Sin embargo, quienes habían recibido el fármaco no mostraron este cambio, manteniendo un rendimiento más constante. Esto sugiere que el metilfenidato puede ayudar a sostener la atención y evitar que se desvíe hacia pensamientos irrelevantes, especialmente en contextos de demanda cognitiva elevada.

Por último, Merrill et al. [30] estudiaron los efectos del metilfenidato en niños con diagnóstico de TDAH. En su experimento, los participantes realizaron una tarea de SART con imágenes personales (del propio niño) o neutras (de otros niños), que buscaban inducir *mind-wandering*. También utilizaron la variabilidad del tiempo de reacción como medida de estabilidad atencional, y observaron que los niños con TDAH eran particularmente sensibles a las distracciones autorreferenciales, mostrando una RTCV más alta. La administración de metilfenidato redujo significativamente esta variabilidad, tanto con estímulos personales como neutrales.

Sin embargo, en cuanto al impacto en la frecuencia o en la duración de los episodios, no se han encontrado estudios en la literatura. Los Hidden Markov Models enriquecidos con hipótesis teóricas, podrían proveer de una vía para analizar particularmente esta cuestión. Más específicamente, se podría esperar que el metilfenidato pueda decrementar la frecuencia de los episodios de *mind-wandering*.

5. MÉTODOS Y ANÁLISIS

En este capítulo se describirá todo el proceso realizado en este trabajo. Desde el diseño experimental implementado, hasta los modelos elegidos con las hipótesis y decisiones de análisis elegidas.

5.1. Diseño experimental

A continuación se explicará el diseño experimental llevado a cabo para obtener los datos utilizados en este trabajo. Los datos recogidos tienen como objetivo conformar un conjunto de datos de acceso público para futuras investigaciones en el impacto del metilfenidato sobre el mind-wandering. A la fecha de la publicación de este trabajo, dicho conjunto de datos no ha sido publicado.

5.1.1. Muestra

La muestra estuvo compuesta por $n=30$ sujetos, 12 mujeres y 18 hombres de entre 18 a 36 años, quienes fueron capaces de dar su consentimiento informado y estar dispuestos a concurrir a dos sesiones. Se excluyeron quienes estuvieran actualmente en tratamiento por trastornos de personalidad, o del estado de ánimo, así como quienes estuvieran bajo tratamientos farmacológicos.

5.1.2. Tarea experimental

5.1.2.1 Sustained Attention to Response Task (SART)

En cada sesión cada participante debió completar tanto un SART (término introducido en la Sección 4.2) auditivo como un SART visual, además de otras tareas entre medio, desarrollado con Psychopy [37]. En este experimento, los estímulos eran dígitos del **1** al **9**, teniendo al **3** como estímulo inhibitorio. Durante la SART Visual, los estímulos se muestran en el monitor en un tamaño de 4cm dentro de un cuadrado, con una duración de 300 milisegundos. En el SART auditivo, los estímulos se presentan por medio de grabaciones generadas sintéticamente, que también duran un promedio de 300 ms, y se presenta el cuadrado vacío en pantalla para focalizar la mirada del participante. La duración de cada SART fue en promedio de 30 minutos, dividido en 16 bloques de entre 15 y 40 trials cada uno. La Figura 5.1 muestra una ilustración del SART visual.

5.1.2.2 Thought Sampling

Al final de cada bloque, los sujetos debían realizar reportes subjetivos de su estado atencional, o *probes*. Cómo fue explicado en la Sección 4.2, a esta técnica se la conoce como *thought sampling*. Se les hicieron cuatro preguntas por cada *probe*; la primera, que es la relevante para este trabajo, indaga dónde estaba su mente y la intencionalidad:

¿Dónde estaba tu mente justo ahora?

Se pide clasificar los pensamientos en el momento de la interrupción dentro de las siguientes siete categorías:

1. En la tarea (atención enfocada)
2. Pensamientos relacionados con la tarea
3. Distracción (interferencia interna o externa a estímulos)
4. Pensamientos deliberados no relacionados con la tarea
5. Pensamientos involuntarios no relacionados con la tarea
6. En blanco
7. Dormido

Las demás preguntas indagan en cuestiones metacognitivas del reporte de la primera pregunta: la segunda solicita calificar la seguridad del reporte anterior (de “Nada seguro” a “Completamente seguro”), la tercera mide cuán inmerso estaba el participante en el pensamiento reportado (de “Muy poco inmerso” a “Muy inmerso”) y, por último, se graba un audio libre donde el sujeto describe con sus propias palabras su estado mental previo a la interrupción.

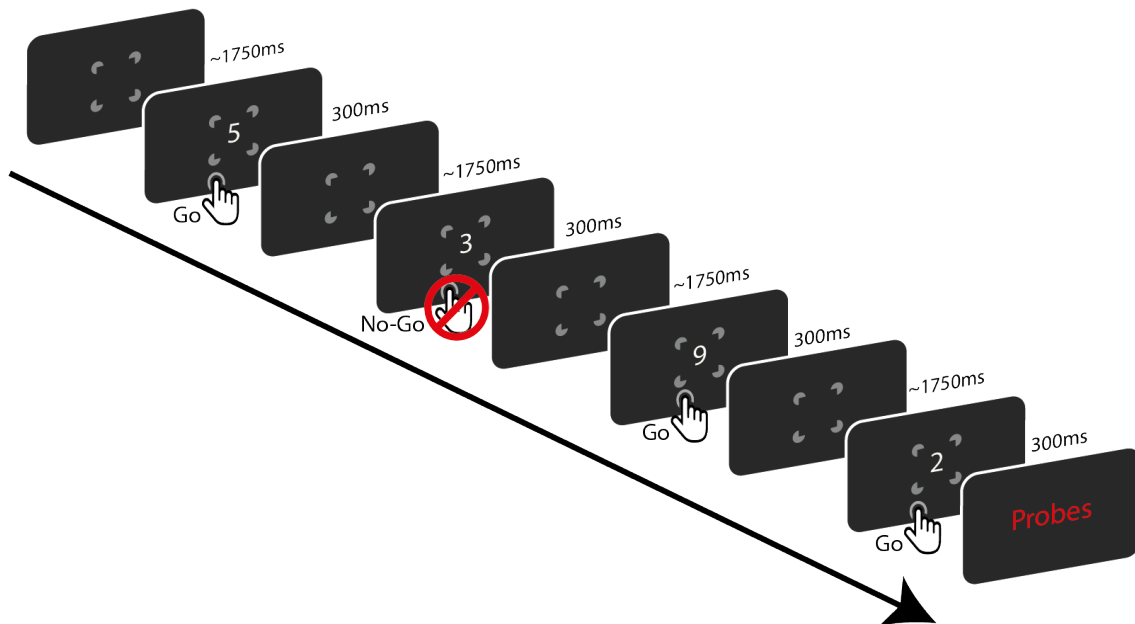


Fig. 5.1: Esquema del SART visual utilizado en el experimento

Es necesario aclarar, además, que al comenzar cada bloque se le pregunta al sujeto si se encuentra listo para retomar la tarea.

5.1.3. Procedimiento

La tarea experimental se llevó a cabo en el laboratorio de *Conciencia, Cultura y Complejidad* (COCUCO), perteneciente al Departamento de Física de la Facultad de Ciencias

Exactas y Naturales de la Universidad de Buenos Aires. Cada sujeto debió asistir a dos sesiones, separadas por un mínimo de siete días y un máximo de treinta días. Durante la primera sesión se firmó el consentimiento informado y se explicó el experimento y el uso de los dispositivos. En cada sesión se le proporcionó al comienzo una cápsula opaca, que podría corresponder a un placebo, o a una dosis media (20 mg) de metilfenidato, sin que al mismo se le informara en qué sesión le correspondería la ingesta de dicho fármaco.

Antes de comenzar la primera sesión de SART, los participantes completaron seis bloques de prueba para asegurarse de comprender en qué situación se espera que elijan cada opción de la primera pregunta.

Durante las sesiones del SART se registraron, por un lado, datos conductuales: tiempos de respuesta y errores; y, por otro, datos neurofisiológicos: señales de electroencefalografía (EEG), pupilometría, seguimiento ocular (*eye-tracking*) y medidas periféricas como respuesta galvánica de la piel (GSR), electrocardiograma (ECG) y frecuencia respiratoria.

5.2. Análisis: Procedimiento General

Para cada modelo considerado, se siguió el siguiente procedimiento general:

1. **Formulación del modelo:** Se especificó el modelo en el lenguaje de programación probabilística `Stan` [52], con la interfaz para Python `CmdStanPy`.
2. **Inferencia bayesiana:** A partir de distribuciones a priori elegidas sobre los parámetros, se obtuvieron muestras aproximadas de la distribución posterior de los parámetros mediante MCMC.

Para realizar esto, se le especificó no sólo la estructura del modelo con las distribuciones a priori correspondientes al muestreador de `Stan`. Fue necesario también especificarle cómo calcular la log-verosimilitud dados los parámetros de manera eficiente. Esto se realizó con algoritmos adaptados del algoritmo *Forward* explicado en la Sección 2.2.2 a los modelos planteados, cuyas adaptaciones serán explicadas. El muestreador también permite calcular cantidades generadas, como las responsabilidades de cada estado en cada tiempo. Estas también han sido calculadas con algoritmos adaptados del explicado en la Sección 2.2.3.

3. **Evaluación del ajuste de MCMC:** Se examinó el ajuste de MCMC de cada modelo mediante las herramientas diagnósticas explicadas en la Sección 3.3.
4. **Análisis de estados inferidos:** Se analizaron las características de los estados latentes identificados por el modelo, buscando asociaciones consistentes con hipótesis teóricas sobre el *mind-wandering*. Para cada modelo se ha realizado un análisis diferente, que será explicado en detalle.
5. **Estimación de dinámicas temporales:** Finalmente, se llegó al paso más importante de este estudio, que fue derivar estimaciones sobre la duración promedio de los episodios en cada estado y las probabilidades de transición entre estados, que permiten caracterizar cuantitativamente la dinámica del *mind-wandering* bajo cada formulación modelada.

5.3. Modelos

Para los modelos que se detallan a continuación, se utilizaron como observaciones los tiempos de respuesta únicamente de la tarea de SART Auditiva. Siguiendo el enfoque de Bastian and Sackur [3], se consideraron únicamente los tiempos correspondientes a ensayos *GO* con respuestas correctas. Los ensayos *NO-GO* incorrectos se excluyeron del análisis, por lo que tanto dichos ensayos como los ensayos *GO* incorrectos y los *NO-GO* correctos, donde de por sí no hay respuesta, fueron tratados como valores faltantes.

Para abordar la presencia de datos faltantes, se aplicó una ventana móvil de dos ensayos, en la que se calculó un promedio adaptado: si uno de los dos valores era faltante, se utilizó el valor observado restante.

Otra decisión importante tomada es que todos los modelos presentados a continuación modelan el estado de *On Task* (OT) y *mind-wandering* (MW). Para distinguir estos estados en los *probes*, se consideró a la respuesta *En la tarea* de la primera pregunta (ver Sección 5.1.2.2) como la opción que reporta al estado *On Task*. Todas las demás respuestas de la primera pregunta reportan el estado de *mind-wandering*.

En cuanto a los datos, se excluyeron del análisis los primeros cuatro sujetos, ya que sus tiempos de respuesta poseían valores negativos, resultando en $N = 26$ sujetos utilizados para el análisis.

5.3.0.1 Nomenclatura y notación

En primer lugar, algunas cuestiones de notación y nomenclatura importantes son:

- La palabra *sesión* se referirá a combinaciones entre sujeto y condición
- El término estimación *a posteriori* se refiere a la estimación que minimiza el riesgo de Bayes cuadrático (ver Ecuación 3.1). Es decir, es la media estimada de la distribución posterior.
- $N_{total} = 52$ a la cantidad de sesiones efectivamente utilizadas en el análisis.
- $N = 26$ a la cantidad de participantes utilizados efectivamente en el análisis, recordando que los primeros cuatro sujetos fueron descartados.
- $N_{samples}$ a la cantidad de muestreos del MCMC descontando el período de *burn-in*.
- $K = 16$ a la cantidad de bloques de cada sesión.
- Θ es la variable aleatoria de todos los parámetros del modelo en conjunto, y θ_i la i -ésima realización del MCMC.
- $cond : \{1, \dots, N_{total}\} \rightarrow \{Control, MTH\}$ la función que indica la condición correspondiente a la sesión s .
- Salvo indicación, la letra i indexará a las iteraciones del MCMC, la letra c indexará a la condición experimental, la letra s indexará a las sesiones, la letra k indexará a los bloques y la letra t indexará a cada ensayo o *trial*.
- $T_{s,k}$ representa la cantidad de ensayos que posee el bloque k de la sesión s , y $R_{s,k} \in \{OT, MW\}$ representa el estado reportado por el *probe* al final del bloque k .

5.3.1. Modelo dicotómico no supervisado

5.3.1.1 Formulación y ajuste del modelo

En primer lugar, se crearon los mismos modelos que los planteados en Bastian and Sackur [3] (ver Sección 4.5 y la Figura 4.1 con el esquema causal gráfico), y se añadió uno más, denominado de *locación*, donde el parámetro que varía es el parámetro de locación μ . Es decir,

$$O_t \sim \begin{cases} \text{exGauss}(\mu, \sigma, \tau) & \text{si } Z_t = \text{On Task} \\ \text{exGauss}(\mu - d, \sigma, \tau) & \text{si } Z_t = \text{MW} \end{cases}$$

Esto se debe a que otro factor que podría aumentar el *RTCV* puede ser una disminución de la media de los tiempos de respuesta, y para una variable con distribución $\text{exGauss}(\mu, \sigma, \tau)$, esta se calcula como $\mu + \tau$. Sin embargo, los estudios sugieren que en verdad la media aumenta en el estado de *mind-wandering* [12], lo que sugiere que este parámetro no modula la aparición de este fenómeno [5]. Por lo tanto, se espera que dicho modelo no ajuste mejor a los datos que los otros dos modelos.

En cuanto a los *priors*, se impusieron distribuciones similares a las utilizadas en el trabajo de Bastian and Sackur [3]:

- $\sigma \sim \mathcal{N}^+(0,5; 0,1)$ y $\tau \sim \mathcal{N}^+(0,1; 0,2)$, donde $\mathcal{N}^+$ denota una normal truncada a valores positivos.
- μ tiene un prior $\mu \sim \mathcal{N}(0,5; 0,2)$
- El parámetro de diferencia d , se utilizó $d \sim \mathcal{N}^+(0,1; 0,05)$ para los tres modelos.
- Las probabilidades iniciales π_k y los parámetros de las probabilidades de transición se le asignaron priors Dirichlet(1,1).

Para calcular la verosimilitud del modelo, se realizó una simple extensión del algoritmo *Forward 1* a múltiples secuencias independientes condicional a los parámetros. Por lo tanto, teóricamente basta con conseguir la verosimilitud de cada secuencia por separado y calcular el producto para obtener la verosimilitud total del modelo.

Con estos elementos, se ajustaron los modelos a cada sesión por separado, con un período de *burn-in* de 2000 iteraciones (ver Sección 3.2.1) y con $N_{\text{samples}} = 7000$ iteraciones definitivas, en cuatro cadenas.

5.3.1.2 Métricas diagnósticas

Para todos los ajustes de los tres modelos planteados, se obtuvo el porcentaje de divergencias del HMC, junto con el valor del estadístico de Gelman-Rubin ($\hat{R}$) y el tamaño relativo efectivo de la muestra (RESS), para los parámetros $\mu, \sigma, \tau, d, P_{\text{OT} \rightarrow \text{MW}}, P_{\text{MW} \rightarrow \text{OT}}$.

5.3.1.3 Análisis de coherencia de los estados

La verosimilitud de cada bloque fue utilizada para calcular la métrica *WAIC*, introducida en la Sección 3.3.2, para cada modelo, en cada sujeto, utilizando a los bloques como las observaciones independientes. De esta forma, se obtuvieron tres muestras pareadas $(\text{WAIC}_{\text{exponencial},s})_{s=1}^{N_{\text{Total}}}$, $(\text{WAIC}_{\text{varianza},s})_{s=1}^{N_{\text{Total}}}$ y $(\text{WAIC}_{\text{locacion},s})_{s=1}^{N_{\text{Total}}}$. Se compararon la muestra del modelo de *locación* con las demás en dos tests de Wilcoxon de

rango signado, teniendo como hipótesis alternativa que la media de las diferencias entre $(\text{WAIC}_{\text{locacion},s})_{s=1}^{N_{\text{Total}}}$ y las demás muestras fuera positiva. Es decir, que en general el modelo de *locación* tuviera menor capacidad para identificar la distribución subyacente de los datos. Este test funciona de manera similar al test de Student para muestras apareadas, pero donde no se puede asumir normalidad en las muestras. Luego, se compararon $(\text{WAIC}_{\text{exponencial},s})_{s=1}^{N_{\text{Total}}}$ y $(\text{WAIC}_{\text{varianza},s})_{s=1}^{N_{\text{Total}}}$, esperando que el modelo de *varianza* tenga mayores valores de WAIC, como se reportó en Bastian and Sackur [3].

Lo que sigue del análisis se realizó con el modelo de mejor ajuste. Aquí, primero se buscaron asociaciones entre las estimaciones a posteriori de los parámetros de emisión y tasas de errores de comisión u omisión (término introducido en 4.2), intentando reflejar resultados previos que asocian los parámetros de la distribución ex-gaussiana con patrones de mind-wandering [26, 58, 5], en los estados identificados. En particular, se espera ver que, de acuerdo con el modelo correspondiente, los valores base de σ_s y τ_s correlacionen positivamente con la tasa de errores de comisión, definida como

$$\text{err_com}_s := \frac{\#\text{ensayos no-go incorrectos}}{\#\text{ensayos no-go}}$$

y la tasa de errores de omisión, definida como

$$\text{err_om}_s := \frac{\#\text{ensayos go incorrectos}}{\#\text{ensayos go}}$$

Además, se esperó que $\sigma_{MW,s} = \sigma_s + d_s$ (si el modelo elegido fue *varianza*) o $\tau_{MW,s} = \tau_s + d_s$ (si el modelo elegido fue *exponencial*) correlacionen positivamente también, en mayor medida que los parámetros base.

Luego, se buscó observar mayor probabilidad a estar en estado en mind-wandering en ensayos previos a errores que en general, y menor probabilidad de mind-wandering en las sesiones de metilfenidato con respecto a las sesiones control. Esta respuesta la pueden otorgar las responsabilidades de cada estado en cada tiempo (término introducido en la Sección 2.2.3). Para calcularlas, basta con aplicar el algoritmo de *Forward-Backward* de forma separada para cada bloque. De esta forma, se calcularon los valores de las responsabilidades únicamente del estado de *mind-wandering*

$$\gamma_{s,k,t,i}(MW) = P(Z_{s,k,t} = MW \mid O_{s,k,1:t} = o_{s,k,1:t}, \Theta = \theta_i)$$

interpretados como la probabilidad estimada de que el sujeto en la sesión s esté en estado de *mind-wandering* en el ensayo t del bloque k dados los datos observados, y los parámetros de la i -ésima iteración del MCMC.

Además, se buscó analizar si los estados identificados por el modelo estaban relacionados con los estados reportados por los participantes en los *probes*. Para eso, se calculó la siguiente métrica:

$$\overline{\gamma_{s,k,-8,i}}(MW) := \frac{1}{8} \sum_{t=T_k-8}^{T_k} \gamma_{s,k,t,i}(MW)$$

que se puede interpretar como la probabilidad promedio a posteriori de estar en mind-wandering en los últimos 8 ensayos antes del *probe* en el k -ésimo bloque, si este posee T_k ensayos. Se esperó que los bloques con reportes de On Task poseyeran en general menores valores de sus estimaciones a posteriori de $\overline{\gamma_{s,k,-8,i}}(MW)$ respectivas que los bloques con reportes de mind-wandering.

5.3.1.4 Probabilidades de transición entre estados y la duración de los episodios de MW

Finalmente, una vez analizados los estados, se llegó a la cuestión principal de este trabajo, que era dar una estimación general para $P_{OT \rightarrow MW}$ y $P_{MW \rightarrow OT}$ tanto en sesiones de metilfenidato como control. Para este objetivo, en primer lugar se agruparon las sesiones por condición (metilfenidato o placebo). Se calculó la media de cada grupo para obtener las estimaciones globales. Por ejemplo, para $\overline{P_{OT \rightarrow MW_c}}$ se calculó

$$\overline{P_{OT \rightarrow MW_c}} = \frac{1}{N} \sum_{s/cond(s)=c} \frac{1}{N_{samples}} \sum_{i=1}^{N_{samples}} P_{OT \rightarrow MW_{s,i}}$$

donde $P_{OT \rightarrow MW_{s,i}}$ es la i -ésima realización de $P_{OT \rightarrow MW}$ de la sesión s . Se esperó que el estado de MW sea más volátil bajo el efecto del metilfenidato que en las sesiones control, y que el estado de On Task sea menos volátil bajo el efecto del metilfenidato. En términos de los estadísticos planteados, se esperó que $\overline{P_{MW \rightarrow OT_{MTH}}}$ sea menor que $\overline{P_{MW \rightarrow OT_{placebo}}}$, y que $\overline{P_{OT \rightarrow MW_{MTH}}}$ sea mayor que $\overline{P_{OT \rightarrow MW_{placebo}}}$.

Además, imitando el procedimiento de Bastian and Sackur [3], se calculó la duración promedio estimada de cada estado, como

$$\text{duracion}_{MW} := \frac{T}{P_{MW \rightarrow OT}} \quad (5.1)$$

y

$$\text{duracion}_{OT} := \frac{T}{P_{OT \rightarrow MW}} \quad (5.2)$$

donde $T = 2,05s$ es el tiempo entre trials.

5.3.2. Modelo jerárquico semisupervisado

5.3.2.1 Formulación y ajuste del modelo

El segundo modelo planteado se basa fuertemente en el modelo de Mittner et al. (en prensa), cuya estructura gráfica se puede observar en la Figura 5.2.

reparametrizaciones interpretables. Esto se realizó con el objetivo de conseguir mejores métricas de diagnóstico del muestreador de MCMC. Para dejar concisa esta sección, en el apéndice B.1 se explicitan los verdaderos parámetros con sus priors correspondientes, y las reparametrizaciones.

En cuanto al cálculo de la verosimilitud, necesaria para el muestreador, se debieron hacer algunos cambios con respecto a la verosimilitud explicada en la Sección 2.2.2. Sean $Z_{s,k,t}$ y $O_{s,k,t}$ las variables que determinan el estado oculto y la observación del t -ésimo ensayo del k -ésimo bloque de la sesión s , $o_{s,k,t}$ las realizaciones de las variables observables. Entonces la verosimilitud de este enfoque *semisupervisado* y jerárquico, termina siendo

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{mittner}(\theta) &= P\left(\bigcap_{s,k} Z_{s,k,1} = OT, Z_{s,k,T_{s,k}} = R_{s,k}, O_{s,k,1:T_{s,k}} = o_{s,k,1:T_{s,k}} \mid \Theta = \theta\right) \\ &\stackrel{\text{indep sesiones y bloques}}{=} \prod_{s,k} P(Z_{s,k,1} = OT, Z_{s,k,T_{s,k}} = R_{s,k}, O_{s,k,1:T_{s,k}} = o_{s,k,1:T_{s,k}} \mid \Theta = \theta) \\ &= \prod_{s,k} \mathcal{L}_{mittner,s,k}(\theta) \end{aligned}$$

Notar que los estados latentes iniciales y finales de cada bloque ($Z_{s,k,1}$ y $Z_{s,k,T_{s,k}}$) pasan a ser variables observables. Por lo tanto, se incluyen en el cálculo de la verosimilitud. El algoritmo 5 muestra la adaptación realizada para calcular la verosimilitud en cada bloque. Para alivianar la notación, el algoritmo que se muestra a continuación considera un modelo con una única sesión y un único bloque, por lo que se eliminan los subíndices s, k .

Algorithm 5 Algoritmo Forward adaptado a modelo semisupervisado

Entrada: Observaciones $O_1, O_2, \dots, O_T$, matriz de transición $P \in R^{2 \times 2}$, funciones de densidad de emisión f_{OT}, f_{MW} , reporte subjetivo R

Salida: Verosimilitud de la secuencia observada semisupervisada: $\mathcal{L}_{mittner} = P(O_{1:T}, Z_1 = OT, Z_T = R)$

Inicialización:

$$\alpha_1(OT) = 1, \alpha_1(MW) = 0$$

Inducción:

Para $t = 2, \dots, T$, y $j \in \{OT, MW\}$:

$$\alpha_t(j) = \left(\sum_{i \in \{OT, MW\}} \alpha_{t-1}(i) \cdot P_{ij} \right) \cdot f_j(O_t)$$

Terminación:

$$\mathcal{L}_{mittner} = \alpha_T(R)$$

Demostración de correctitud. Recordemos que $\alpha_t(i) = P(O_{1:T} = o_{1:T}, Z_t = i \mid \Theta = \theta)$, cuya correctitud ha sido demostrada Sección 2.2.2. Entonces

$$\alpha_T(R) = P(O_{1:T} = o_{1:T}, Z_T = R \mid \Theta = \theta)$$

A su vez, esta expresión se puede pensar como un marginalización sobre Z_1

$$\begin{aligned} P(O_{1:T} = o_{1:T}, Z_T = R \mid \Theta = \theta) &= \sum_{i \in \{OT, MW\}} P(Z_1 = i, O_{1:T} = o_{1:T}, Z_T = R \mid \Theta = \theta) \\ &= P(Z_1 = OT, O_{1:T} = o_{1:T}, Z_T = R \mid \Theta = \theta) \\ &= \mathcal{L}_{mittner}(\theta) \end{aligned}$$

como se buscaba, pues $P(Z_1 = MW, O_{1:T} = o_{1:T}, Z_T = R \mid \Theta = \theta) = 0$, por la inicialización. $\square$

Luego de haber especificado el modelo, se ajustó a todos los datos con un período de *burn-in* de 2000 iteraciones y con $N_{\text{samples}} = 7000$ iteraciones definitivas, en cuatro cadenas, al igual que los modelos no supervisados.

5.3.2.2 Métricas diagnósticas

Para todos los ajustes del modelo planteado, se obtuvo el porcentaje de divergencias del HMC, junto con el valor del estadístico de Gelman-Rubin ($\hat{R}$) y el tamaño relativo efectivo de la muestra (RESS), para los parámetros de emisión globales $\mu_{OT,G}$, $\sigma_{OT,G}$, $\tau_{OT,G}$, $\mu_{MW,G}$, $\sigma_{MW,G}$, $\tau_{MW,G}$, y para los parámetros de las matrices de transición $P_{OT \rightarrow MW, MTH}$, $P_{MW \rightarrow OT, MTH}$, $P_{OT \rightarrow MW, \text{placebo}}$, $P_{MW \rightarrow OT, \text{placebo}}$.

5.3.2.3 Análisis de coherencia de los estados

Como se realizó en el modelo no supervisado, se planteó encontrar una correlación positiva entre los parámetros de emisión y las tasas de errores, particulares a cada sesión. Específicamente, se esperó una correlación positiva entre las estimaciones *a posteriori* de $\sigma_{OT,s}$, $\sigma_{MW,s}$, $\tau_{OT,s}$, $\tau_{MW,s}$ y la tasa de errores de comisión, y de omisión, donde los parámetros del estado de mind-wandering correlacionen en mayor medida.

Por otra parte, se esperó observar que $\sigma_{MW,G} > \sigma_{OT,G}$, y que $\tau_{MW,G} > \tau_{OT,G}$. Para ello, se realizaron estimaciones *a posteriori* de $P(\sigma_{MW,G} > \sigma_{OT,G})$ y $P(\tau_{MW,G} > \tau_{OT,G})$, esperando que sean cercanas a 1.

Luego, se analizaron las responsabilidades del estado de MW en los ensayos $\gamma_{s,k,t}(MW)$. Para calcular estas cantidades también se tuvo que realizar una modificación a la forma en la que se calculan en la Sección 2.2.3. Específicamente, en el algoritmo *Backward* (algoritmo 2). De manera similar al caso de la verosimilitud, se eliminarán los subíndices de la sesión y el bloque, para alivianar la notación

Algorithm 6 Algoritmo Backward adaptado

Entrada: Observaciones $O_1, O_2, \dots, O_T$, matriz de transición P , densidades de emisión f_{OT}, f_{MW} , reporte subjetivo R

Salida: Matrices $\beta_t(i) \in R^{Tx2}$

Inicialización:

$$\beta_T(R) = 1, \beta_T(\neg R) = 0$$

donde $\neg R$ es el estado contrario al reportado.

Inducción:

Para $t = T - 1, \dots, 2$, y $i \in \{OT, MW\}$:

$$\beta_t(i) = \sum_{j \in \{OT, MW\}} P_{ij} \cdot f_j(O_{t+1}) \cdot \beta_{t+1}(j)$$

Paso T=1:

$$\beta_1(OT) = \sum_{j \in \{OT, MW\}} P_{ij} \cdot f_j(O_2) \cdot \beta_2(j)$$

$$\beta_1(MW) = 0$$

Demostración del algoritmo Backward adaptado. Recordemos que $\beta_t(i) = P_\theta(O_{t+1:T} \mid Z_t = i)$. A pesar de que esta expresión no está definida para $t = T$, en la inicialización del algoritmo original 2 se tomaba $\beta_T(i) = 1$ para todos los estados, implicando que todos los estados finales son posibles. Sin embargo, aquí se asigna $\beta_T(\neg R) = 0$. Este cambio asegura que se descarte cualquier secuencia de estados que termine en un estado diferente al reportado por el participante, ya que su probabilidad se anula al multiplicar por $\beta_T(\neg R)$.

Por otro lado, al ser $P(Z_1 = MW) = 0$, $\beta_1(MW) = 0$ no está definido. Se le asigna un valor de 0 por convención, aunque en realidad no es necesario darle algún valor específico.

Por otra parte, dadas las variables $\alpha_t(i)$ y $\beta_t(i)$ calculadas con los algoritmos *Forward* y *Backward* modificados, el paso final del cálculo de las responsabilidades (Ecuación 2.7) no requiere modificaciones, pues su demostración sólo depende de la definición de las variables $\alpha_t(i)$ y $\beta_t(i)$, que es la misma. □

Ahora bien, con las estimaciones a posteriori de las responsabilidades $\gamma_{s,k,t}(MW)$, se planteó un análisis similar al del modelo no supervisado. Se buscó observar que los ensayos tuvieran en general mayor probabilidad de estar en mind-wandering en las sesiones control que en las sesiones de metilfenidato, y que en los ensayos previos a errores las probabilidades de estar en mind-wandering sean mayores.

5.3.2.4 Probabilidades de transición entre estados y la duración de los episodios de MW

Para el reporte de las probabilidades de transición, se calcularon las estimaciones a posteriori de $P_{OT \rightarrow MW_c}$ y de $P_{MW \rightarrow OT_c}$ para cada condición c . Además, se calculó un intervalo de credibilidad HDI del 95 %. También se realizaron estimaciones a posteriori de

la probabilidad de que el estado de OT en sesiones de metilfenidato sea más estable que en sesiones control (P_1), y la probabilidad de que MW sea más volátil en metilfenidato que en sesiones control (P_2).

6. RESULTADOS

En este capítulo se presentan los resultados de los análisis propuestos en la Sección 5.2.

6.1. Modelo dicotómico no supervisado

6.1.1. Métricas diagnósticas

La tabla 6.1 muestra el promedio y desvío estándar del porcentaje de divergencias del HMC, y de los valores del diagnóstico de Gelman-Rubin ($\hat{R}$) y del tamaño efectivo relativo de la muestra (RESS) de los parámetros de emisión y de la matriz de transición, para cada uno de los tres modelos.

Métrica	Exponencial	Varianza	Locación
Porcentaje de divergencias [%]	47.04 (sd=11.66)	11.27 (sd=8.46)	2.36 (sd=4.96)
$\hat{R} \mu$	1.0005 (sd=0.0003)	1.0004 (sd=0.0004)	1.0681 (sd=0.1885)
$\hat{R} \sigma$	1.0004 (sd=0.0003)	1.0003 (sd=0.0002)	1.0680 (sd=0.1886)
$\hat{R} \tau$	1.0008 (sd=0.0006)	1.0004 (sd=0.0004)	1.0681 (sd=0.1886)
$\hat{R} d$	1.0005 (sd=0.0004)	1.0002 (sd=0.0002)	1.0575 (sd=0.1739)
$\hat{R} P_{OT \rightarrow MW}$	1.0004 (sd=0.0003)	1.0002 (sd=0.0002)	1.0680 (sd=0.1886)
$\hat{R} P_{MW \rightarrow OT}$	1.0004 (sd=0.0002)	1.0002 (sd=0.0002)	1.0559 (sd=0.1546)
RESS μ [%]	39.68 (sd=5.88)	37.92 (sd=11.74)	53.92 (sd=31.97)
RESS σ [%]	52.18 (sd=14.45)	55.45 (sd=13.68)	64.43 (sd=37.59)
RESS τ [%]	25.16 (sd=5.86)	34.74 (sd=10.13)	62.71 (sd=40.88)
RESS d [%]	49.03 (sd=14.32)	94.52 (sd=14.64)	78.45 (sd=39.04)
RESS $P_{OT \rightarrow MW}$ [%]	47.69 (sd=12.70)	98.46 (sd=20.94)	98.77 (sd=65.17)
RESS $P_{MW \rightarrow OT}$ [%]	47.21 (sd=13.17)	98.13 (sd=22.98)	97.40 (sd=61.81)

Tab. 6.1: Resumen de métricas de diagnóstico para cada modelo de inferencia bayesiana en el HMM. Los valores reportados son promedios entre todas las sesiones, junto con su respectivo desvío estándar.

6.1.2. Comparación de modelos

El modelo de *localización* mostró mayores valores de WAIC que el modelo *exponencial* ($V = 797, p < 10^{-3}$) y que el de *varianza* ($V = 642, p = 0,008$), de acuerdo con el test de rango signado de Wilcoxon. Entre los modelos restantes, el modelo de *varianza* presentó en general un mayor WAIC que el modelo *exponencial* ($V = 825, p < 10^{-3}$). Por lo tanto, se utilizó el modelo *exponencial* para lo que queda del análisis del modelo dicotómico no supervisado.

6.1.3. Análisis de coherencia de estados

Con el modelo *exponencial* se vio una correlación significativamente negativa entre los errores de comisión globales de cada sesión, con los parámetros σ_s ($r=-0.35, p=0.02$) y

τ_s ($r=-0.42$, $p=0.006$), aunque una correlación positiva moderadamente significativa con $\tau_{MW,s}$ ($r=0.27$, $p=0.09$). Con respecto a los errores de omisión, se han encontrado una correlación positiva significativa con $\tau_{MW,s}$ ($r=0.45$, $p=0.003$) y moderadamente significativa con σ_s ($r=0.28$, $p=0.07$). Por último, con respecto a los errores en general, sólo se ha encontrado una correlación significativa positiva con $\tau_{MW,s}$ ($r=0.33$, $p=0.031$). En el Anexo B.2 se pueden observar todas las correlaciones entre los parámetros de emisión y los errores de comisión (Figura B.1) y de omisión (Figura B.2).

En cuanto al análisis de las responsabilidades $\gamma_{s,k,t}$, se ha observado una bimodalidad en todos los gráficos obtenidos. Sin embargo, en primer lugar no han observado mayores responsabilidades de MW en los ensayos previos a errores y menores responsabilidades con respecto a la distribución global de las responsabilidades, como se puede apreciar en la Figura 6.1.

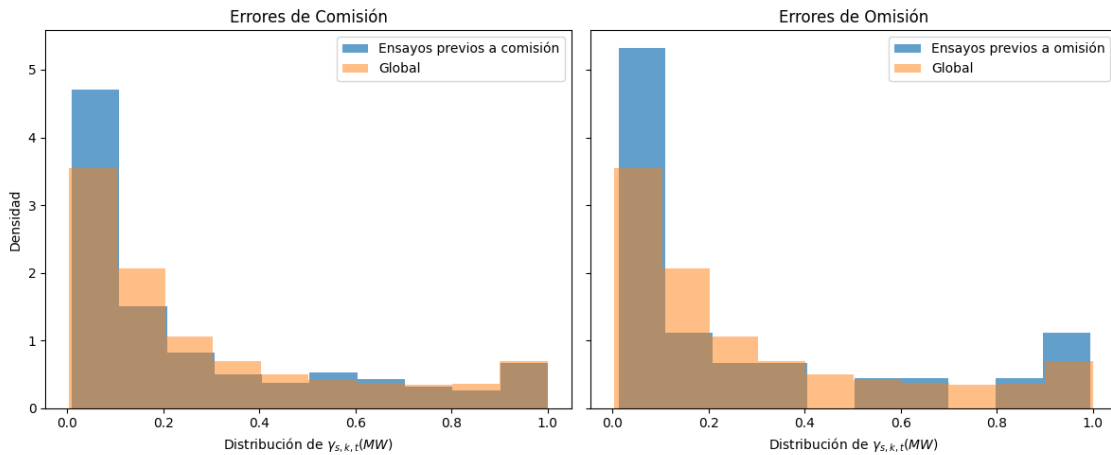


Fig. 6.1: Histograma de la distribución de las estimaciones a posteriori de las responsabilidades de *mind-wandering* $\gamma_{s,k,t}(MW)$, en ensayos previos a errores tanto de comisión (izquierda) como de omisión (derecha), comparados con la distribución de todas las responsabilidades (naranja).

Por otra parte, se han observado responsabilidades levemente menores de MW en sesiones de metilfenidato con respecto a sesiones control (ver Figura 6.6).

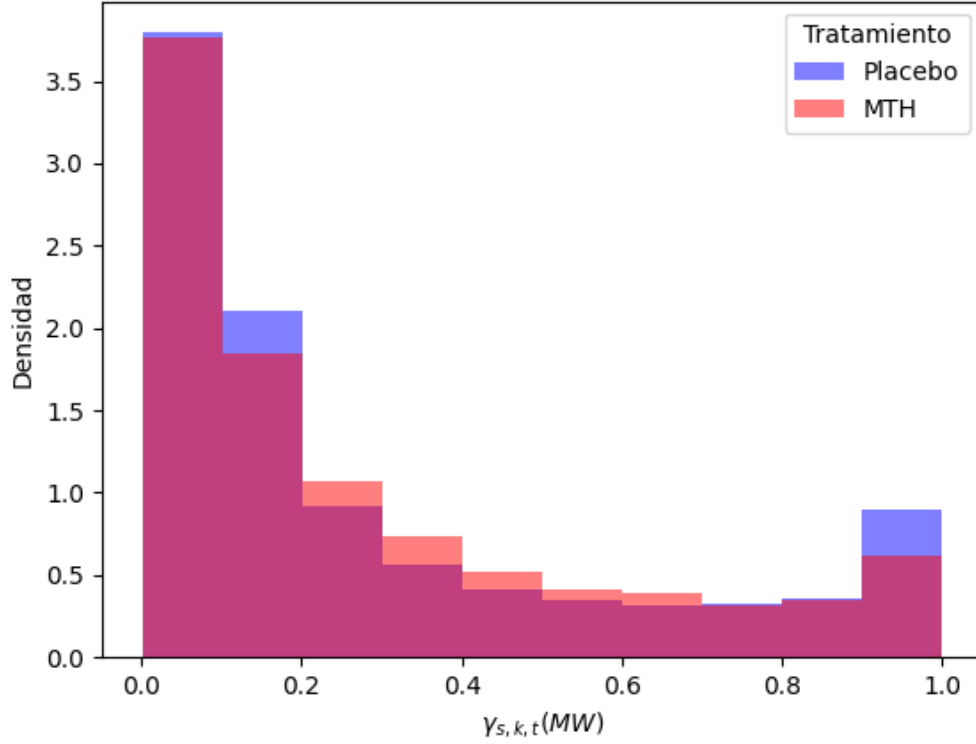
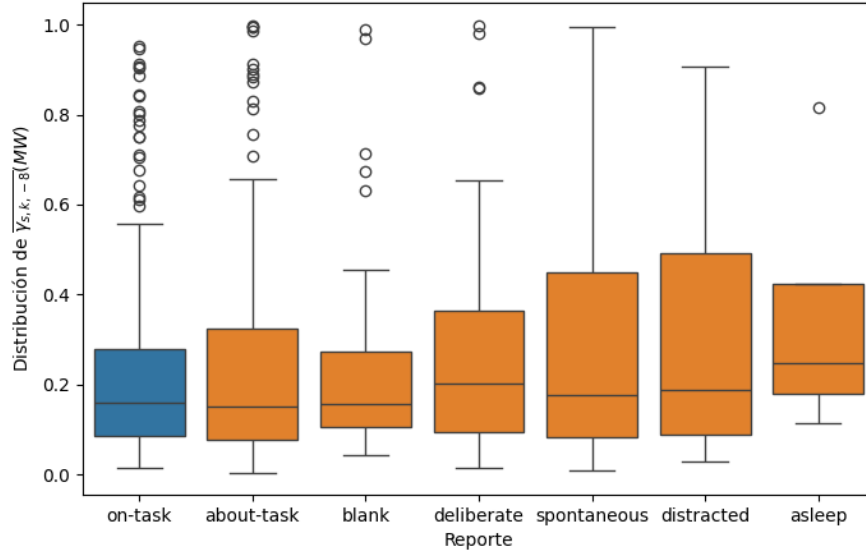
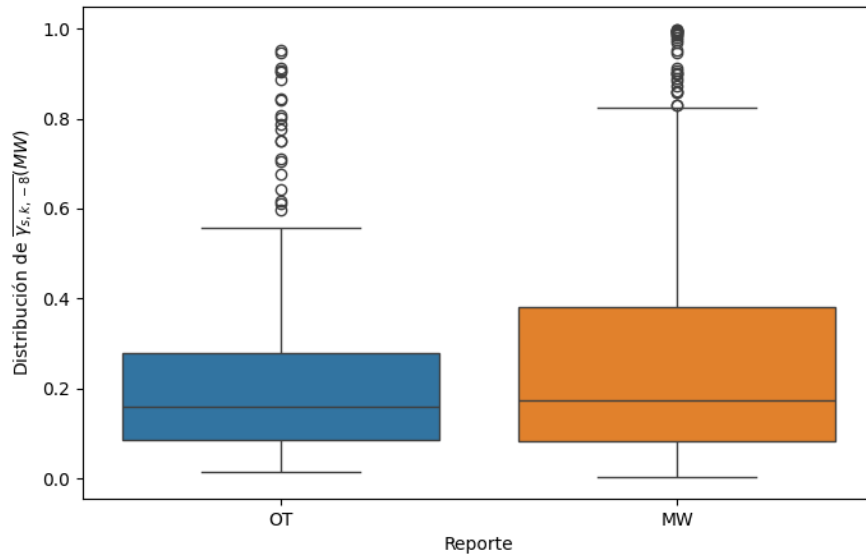


Fig. 6.2: Histograma de la distribución de todas las estimaciones a posteriori de las responsabilidades de *mind-wandering* $\gamma_{s,k,t}(MW)$, agrupadas por condición. Se puede observar una moda derecha levemente menos densa en sesiones de metilfenidato que en sesiones control.

En cuanto a los estadísticos $\overline{\gamma_{s,k,-8}}(MW)$ planteados, que cuantifican la probabilidad promedio de estar en estado *mind-wandering* en los últimos ocho ensayos previo a un reporte, se pudo observar que en los bloques donde se reportó OT son moderadamente menores que en los que se reportó MW. Esto se puede observar en la Figura 6.3b. También, se puede observar que la respuesta que reporta el estado de OT posee una distribución con menores valores de $\overline{\gamma_{s,k,-8}}(MW)$ que las demás respuestas (ver Figura 6.3a).



(a) Distribuciones de $\overline{\gamma_{s,k,-8}}(MW)$ por cada tipo de reporte individual. El boxplot de *on-task* se refiere a la primera opción de la primera pregunta, cuyas opciones se encuentran enunciadas en la Sección 5.1.2.2, y es la única que reporta el estado OT (azul)



(b) Distribuciones agrupadas por tipo de reporte: MW vs. OT.

Fig. 6.3: Boxplots con las distribuciones de los estadísticos $\overline{\gamma_{s,k,-8}}(MW)$ según los distintos tipos de reporte subjetivo.

6.2. Efecto del metilfenidato sobre los estados

Bajo este modelo, se observó que el estado On Task fue menos volátil en la condición con metilfenidato (MTH), ya que la probabilidad promedio de transición desde OT hacia MW fue menor que en la condición placebo. Al mismo tiempo, el estado MW resultó más volátil bajo MTH, dado que la probabilidad de transición desde MW hacia OT fue mayor en comparación con la condición placebo. La figura 6.4

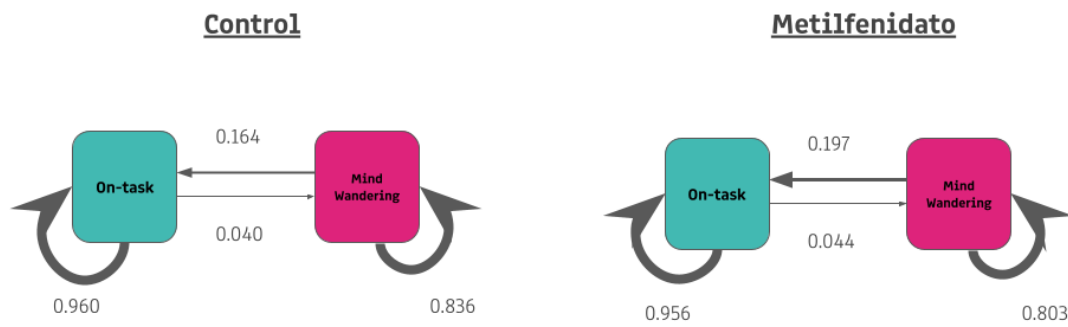


Fig. 6.4: Ilustración de la matriz de transición obtenida con el modelo inspirado en Bastian and Sackur [3]. Se muestran los promedios de las estimaciones a posteriori para todas las sesiones de cada condición

Estas diferencias en las probabilidades de transición se reflejaron también en los tiempos promedio de permanencia: el estado OT mostró una mayor duración bajo MTH, mientras que la duración del estado MW fue menor en esa misma condición. Los valores obtenidos para la duración se pueden ver en la Tabla 6.2.

Tab. 6.2: Probabilidades de transición y duración promedio de estados bajo ambas condiciones

Medida	Placebo	Metilfenidato (MTH)
Duración promedio OT (seg)	33.93 s	46.09 s
Duración promedio MW (seg)	12.53 s	10.41 s

6.3. Modelo jerárquico semisupervisado

Se obtuvo un porcentaje de divergencias del 72,6 %. Los valores del estadístico de Gelman-Rubin ($\hat{R}$) estuvieron entre 1.40 y 1.60. Los tamaños relativos efectivos de muestra (RESS) oscilaron entre el 5 % y el 10 %, como se puede observar en la tabla 6.3.

Parámetro	$\hat{R}$	RESS (%)
$\mu_{OT,G}$	1.42	6.3
$\sigma_{OT,G}$	1.55	7.8
$\tau_{OT,G}$	1.48	5.4
$\mu_{MW,G}$	1.60	5.1
$\sigma_{MW,G}$	1.50	6.7
$\tau_{MW,G}$	1.45	6.0
$P_{OT \rightarrow MW, MTH}$	1.47	8.3
$P_{MW \rightarrow OT, MTH}$	1.40	9.0
$P_{OT \rightarrow MW, placebo}$	1.58	5.7
$P_{MW \rightarrow OT, placebo}$	1.53	6.2

Tab. 6.3: Valores del estadístico $\hat{R}$ y RESS (%) para cada parámetro.

6.3.1. Análisis de coherencia de estados

En primer lugar, en lo que respecta al análisis correlacional de los parámetros de emisión con los errores de comisión y omisión, sólo se ha encontrado una correlación significativamente negativa entre los valores de $\tau_{MW,s}$ y los errores de comisión ($r=-0.39$, $p=0.04$). Los demás correlaciones tanto con respecto a tasas de errores de comisión como a tasas de errores de omisión han obtenido p-valores mayores a 0, 1. Todas las correlaciones se pueden observar en las Figuras B.3 y B.4 del Anexo B.2.

Luego, al comparar los parámetros de emisión globales, se obtuvo que la estimación a posteriori $P(\sigma_{MW,G} > \sigma_{OT,G}) = 0,35$ y $P(\tau_{MW,G} > \tau_{OT,G}) = 0,45$, que son valores lejanos a 1.

En cuanto al análisis de las estimaciones a posteriori de las responsabilidades $\gamma_{s,k,t}$, se pudieron identificar en general tres modas en su distribución, a diferencia de lo que ocurría en el enfoque no supervisado. Se ha visto que en los ensayos previos a los errores de comisión y omisión, la moda derecha es claramente más densa que en general (ver Figura 6.5).

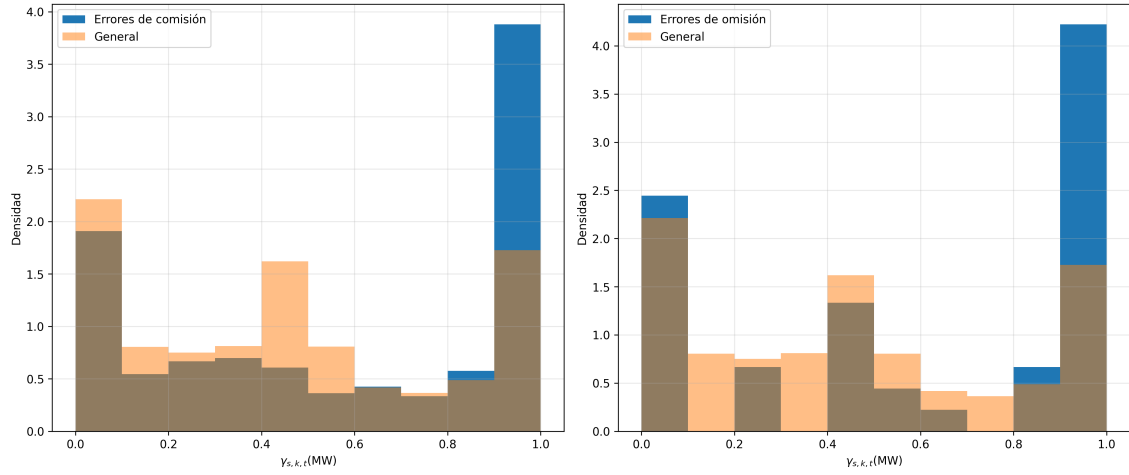


Fig. 6.5: Histograma de la distribución de las estimaciones a posteriori de las responsabilidades de *mind-wandering* $\gamma_{s,k,t}(MW)$, en ensayos previos a errores tanto de comisión (izquierda) como de omisión (derecha), comparados con la distribución de todas las responsabilidades (naranja).

También se ha encontrado una menor cantidad de responsabilidades de MW cercanas a 1 en ensayos pertenecientes a sesiones de metilfenidato, como se puede apreciar en la Figura 6.6

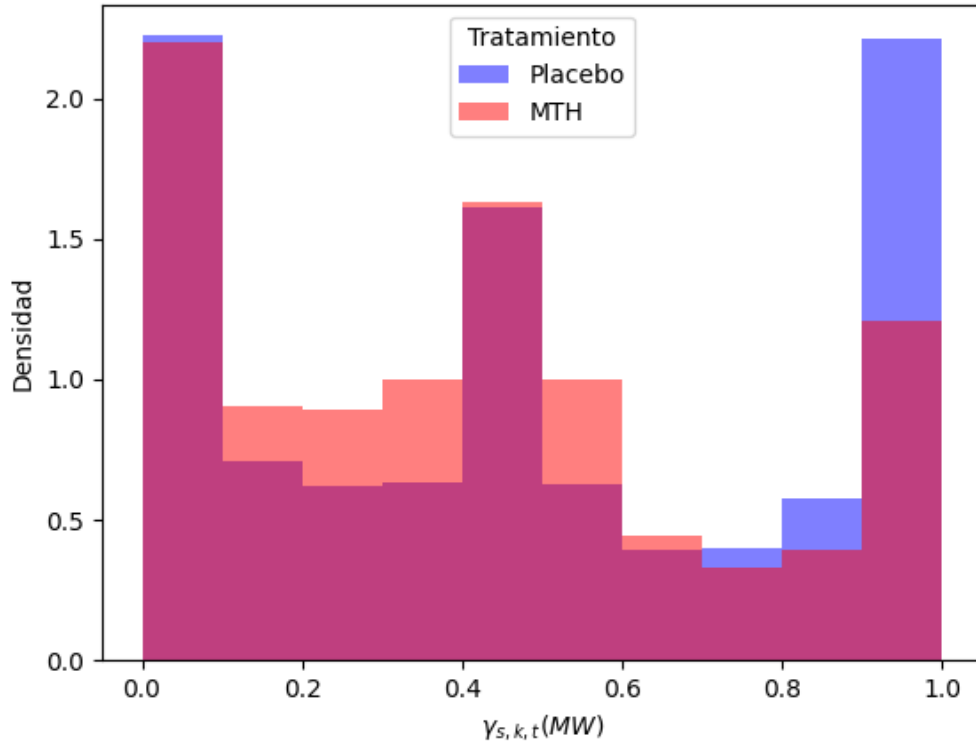


Fig. 6.6: Histograma de la distribución de todas las estimaciones a posteriori de las responsabilidades de *mind-wandering* $\gamma_{s,k,t}(MW)$, agrupadas por condición. Se puede observar una moda derecha menor en sesiones de metilfenidato que en sesiones control.

6.3.2. Estimaciones de transición y efectos del fármaco

Se estimaron las probabilidades de transición para cada condición, junto con sus intervalos de credibilidad. Además, se calcularon las probabilidades a posteriori de que OT sea más estable bajo metilfenidato y que MW sea más volátil.

Se obtuvo que la estimación de la probabilidad de transicionar de On Task a MW ha sido de 0,154 (IC 95 %: [0,105; 0,215]) en sesiones control, y de 0,136 (IC 95 %: [0,096; 0,197]) en sesiones de metilfenidato, y la probabilidad de que el estado de On Task sea más estable en sesiones de metilfenidato ha sido de 0,898. Por otra parte, se obtuvo que la probabilidad de transicionar de *mind-wandering* a On Task ha sido de 0,111 (IC 95 %: [0,086; 0,143]) en sesiones control, y de 0,131 (IC 95 %: [0,086; 0,186]) en sesiones de metilfenidato, con una probabilidad de 0,773 de que el estado de MW sea más volátil bajo metilfenidato. La Figura 6.7 ilustra la magnitud de las estimaciones a posteriori de las probabilidades de transición.

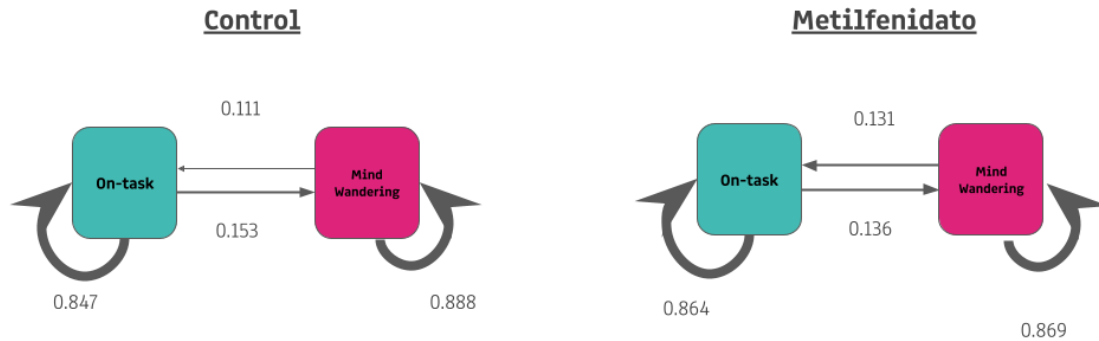


Fig. 6.7: Ilustración de la matriz de transición obtenida con el modelo inspirado en Mittner et al. (en prensa). Se muestran las estimaciones a posteriori los parámetros de la matriz de transición

Los tiempos promedio estimados en cada estado fueron los siguientes:

- Tiempo promedio en On Task bajo placebo: 13.35 s
- Tiempo promedio en On Task bajo MTH: 15.11 s
- Tiempo promedio en MW bajo placebo: 18.50 s
- Tiempo promedio en MW bajo MTH: 15.64 s

Es importante notar también que bajo este modelo, el estado de On Task es más volátil que el estado de MW, a diferencia del modelo no supervisado.

7. DISCUSIÓN

En este capítulo se interpretarán y discutirán los resultados obtenidos tanto para el enfoque no supervisado como para el semisupervisado, finalizando con una discusión general del trabajo.

7.1. Efecto del metilfenidato sobre los estados

Los análisis realizados sugieren que el metilfenidato podría modular la dinámica atencional. En ambos modelos se observó una menor probabilidad estimada de estar en estado MW durante las sesiones con metilfenidato, junto con un aumento del tiempo promedio en estado OT. Además, bajo el modelo jerárquico, la probabilidad de que OT sea más estable y MW más volátil en presencia de metilfenidato fue alta ($\approx 0,9$ y $\approx 0,77$ respectivamente).

Estos hallazgos son consistentes con la hipótesis de que el metilfenidato podría mejorar la estabilidad atencional, como se ha planteado en estudios previos [55, 51, 30].

Sin embargo, ambos modelos identificaron estados con diferentes características. El modelo no supervisado, por ejemplo, identificó que el estado de OT es más estable que el estado de MW, replicando lo observado en Bastian and Sackur [3]. En dicho trabajo, se reportó una duración promedio estimada de los episodios de MW de 11,1 s, comparable con las obtenidas en este trabajo (12,53 s en sesiones control, y 10,41 s en sesiones de MTH), aunque con un estado de OT con duración promedio estimada de 18,2 s, comparado con 33,93 s en sesiones control y 46,06 s en sesiones MTH para el presente trabajo. Por otra parte, el modelo semisupervisado obtuvo un estado de MW más estable que el estado de OT, al obtener un mayor tiempo promedio estimado de los episodios para ambas condiciones que el estado de OT. Esto contrasta con los resultados de Bastian and Sackur [3].

7.2. Análisis de coherencia de los estados

7.2.1. Modelo no supervisado

En primer lugar, el modelo dicotómico no supervisado mostró cierta asociación entre los estados identificados y los estados reportados, al observar que en bloques donde se reportaba el estado OT, las probabilidades promedio de estar en MW ($\overline{\gamma_{s,k,-8}}(MW)$) eran menores que para otros reportes.

Sin embargo, el análisis de las responsabilidades no mostró una diferencia clara en la probabilidad estimada de estar en estado MW en los ensayos previos a errores, en comparación con la distribución general. Tampoco se ha observado una diferencia clara entre las responsabilidades de las sesiones control con respecto a las de MTH.

Por otra parte, mostró correlaciones positivas entre los parámetros $\tau_{MW,s}$ y tanto los errores de comisión como de omisión. Sin embargo, encontró correlaciones negativas estadísticamente significativas entre los parámetros σ_s y τ_s y las tasas de error de comisión, lo cual es un resultado contrario al esperado a la literatura previa [58, 26].

7.2.2. Modelo jerárquico semisupervisado

A nivel de parámetros globales, las estimaciones a posteriori no arrojaron evidencia suficiente para afirmar que el estado de MW presentaba mayor valor de desvío estándar de la componente normal (σ) o del parámetro de la componente exponencial (τ) que el estado OT. A nivel de parámetros de emisión por sesión, no se encontraron correlaciones positivas significativas de dichos parámetros con los errores. Esto contrasta con hipótesis previas basadas en trabajos como los de Yamashita et al. [58] o Leth-Steensen et al. [26]. Esto es coherente con el hecho de que se ha obtenido que es más probable los parámetros de variabilidad globales en los tiempos de respuesta en OT ($\sigma_{G,OT}$ y $\tau_{G,OT}$) sean mayores que los respectivos parámetros en MW ($\sigma_{G,MW}$ y $\tau_{G,MW}$), contrastando también con el trabajo de Bastian and Sackur [3].

En cuanto a las responsabilidades, se observó una distribución trimodal, más compleja que la bimodal del modelo no supervisado, y una mayor densidad de la moda derecha (asociada a MW) en ensayos previos a errores con respecto a la distribución general, y una mayor densidad en la moda derecha en las sesiones control con respecto a las de metilfenidato. Esto podría indicar que, bajo esta formulación informada por los reportes, el modelo logra capturar parcialmente la relación entre el estado cognitivo y tanto los errores de comisión y omisión, como también de la sesión.

7.3. Limitaciones

7.3.1. Métricas de diagnóstico

El principal problema visible que ha tenido el análisis del presente estudio ha sido probablemente el ajuste del muestreador de MCMC, algo que podría ser la causa de los resultados heterogéneos discutidos en la sección previa. Se han obtenido valores elevados en los porcentajes de divergencias (aproximadamente un 47 % para el modelo no supervisado *exponencial*, y del 72 % para el modelo semisupervisado). Además, a pesar de que las demás métricas de diagnóstico han resultado aceptables para los modelos no supervisados, para el modelo semisupervisado se podrían considerar pobres. Esto puede indicar resultados no confiables [7, 6].

Esto podría deberse a diversos motivos. Hawkins et al. [16] en su revisión literaria advierte que las observaciones conductuales, como lo son los tiempos de respuesta, podrían tener una diversidad limitada para identificar estados en un HMM. En este caso, el efecto del *mind-wandering* sobre los tiempos de respuesta podría no haber sido lo suficientemente apreciable para que el modelo identifique correctamente los estados de OT y MW.

Para comprobar esta conjetura, en el caso del modelo semisupervisado, primero se han graficado las distribuciones de los tiempos de respuesta observados en cada estado. Es decir, la distribución de los tiempos de respuesta en ensayos previos a reportes de MW, y la distribución de tiempos de respuesta en ensayos previos a reportes de On Task junto con tiempos de respuesta iniciales, observados como On Task según el modelo (ver Figura 7.1).

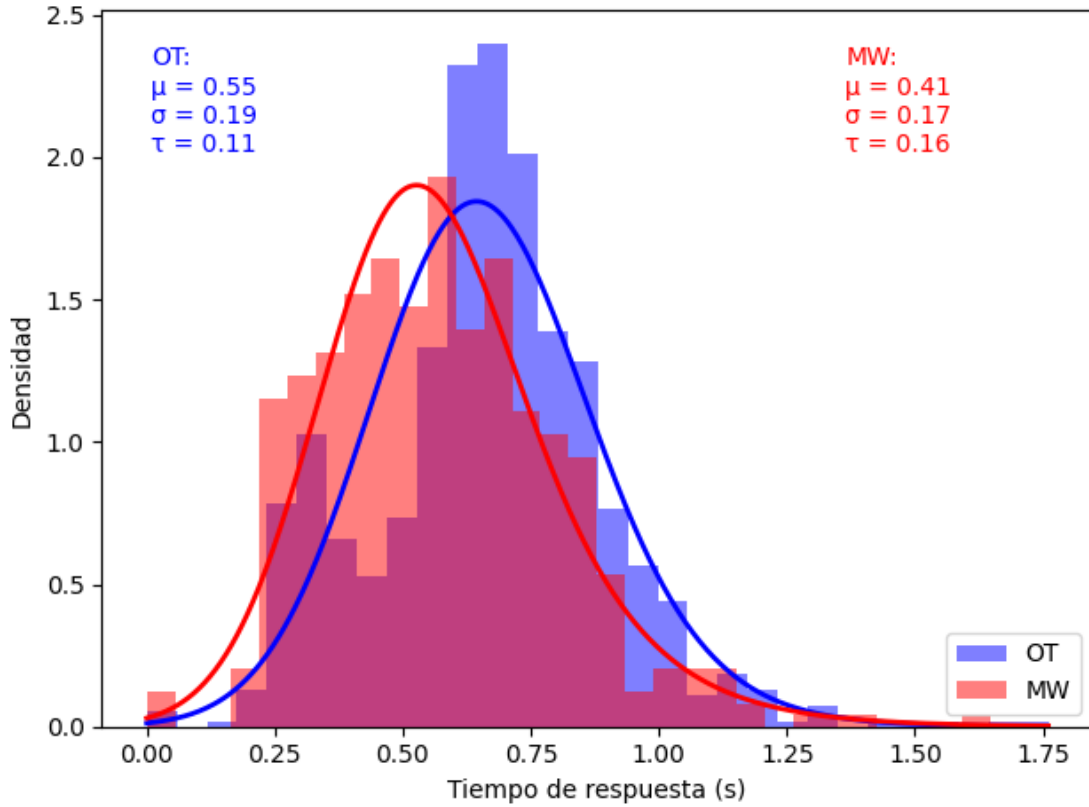


Fig. 7.1: Histogramas de tiempos de respuesta observados como en estado de On Task (azul), y MW (rojo), con sus respectivas estimaciones de los parámetros de la distribución ex-gaussiana de máxima verosimilitud y curvas de densidad generadas con los parámetros estimados por máxima verosimilitud.

Es interesante observar que el efecto del estado de MW obtenido es el efecto contrario al esperado. Se puede observar que el parámetro con mayor efecto es μ , cuando se esperaba que fuera el que menos efecto tuviera. También, al analizar las medias, calculadas como $\mu + \tau$, se puede ver un claro decrecimiento, algo que podría contraponerse con estudios previos que afirman que en verdad la media crece [12].

Es por eso que se han creado datos sintéticos donde los tiempos de respuesta del estado de *mind-wandering* diferían considerablemente con respecto a los del estado de OT, en los parámetros μ y τ , simulando dos condiciones con 25 participantes cada una, con parámetros de variabilidad inter-sesión cercanos a 0. La Figura 7.2 muestra los tiempos de respuesta generados sintéticamente para las sesiones de control, junto con los parámetros de emisión globales inferidos.

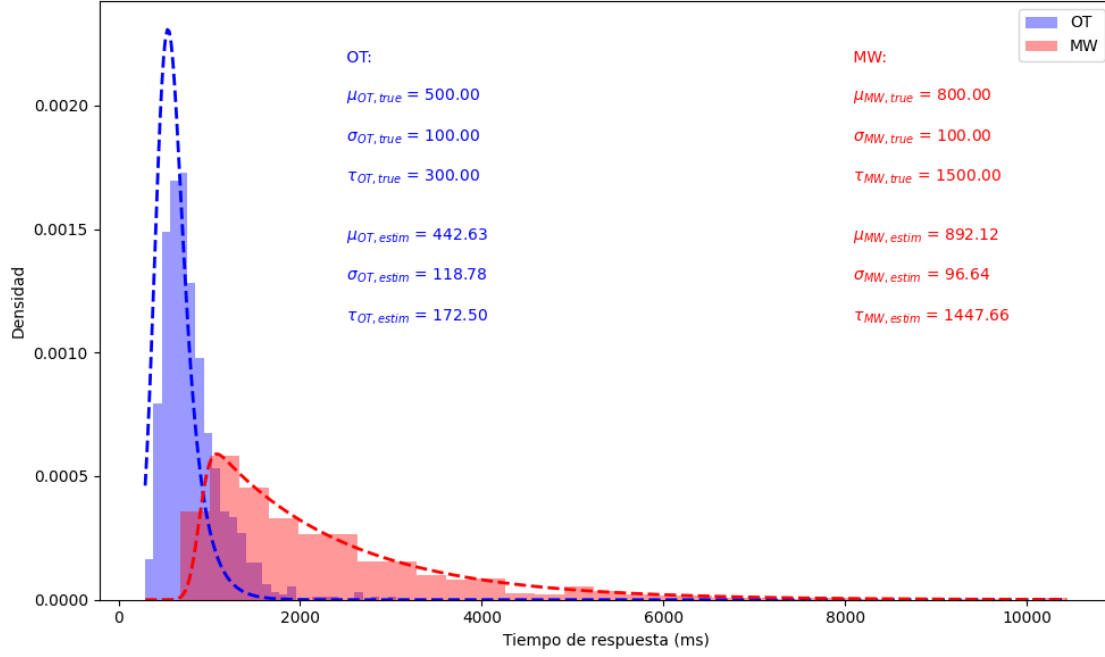


Fig. 7.2: Histogramas de tiempos de respuesta sintéticos generados para las sesiones control a partir de un HMM con la estructura de Mittner (en prensa), con altos valores de efecto en τ y μ . También se pueden observar tanto los parámetros globales de emisión verdaderos junto con las estimaciones *a posteriori*, donde por ejemplo $\mu_{OT,true}$ es el parámetro de emisión real mientras que $\mu_{OT,estim}$ es su estimación *a posteriori*. Además, se grafican las curvas de densidad de las distribuciones con los parámetros inferidos.

Dicho experimento consiguió reducir la cantidad de divergencias a un 1,3 %, tomando un período de *burn-in* de 2000 iteraciones, y 7000 iteraciones definitivas, con los mismos priors que los que se utilizaron para ajustar los datos reales (ver Anexo B.1). Además, todos los valores de $\hat{R}$ para los parámetros principales reportados en la tabla 6.3, resultaron estar entre 1 y 1,1, y los valores de RESS mayores a 80 % para todos los casos. Además, los parámetros de emisión globales inferidos recuperan satisfactoriamente a los parámetros reales, como también se puede observar en la Figura 7.2.

El hecho de que el modelo no tenga suficiente evidencia para asignar claramente observaciones a un estado u otro podría crear múltiples configuraciones que sean modas en la distribución posterior, algo que se conoce como *identificabilidad práctica*, que difiere del problema de *identificabilidad teórica* explicado en la Sección 2.2.4, por el hecho de que esta última no depende de los datos. Esto es algo que complica a los muestreadores de MCMC, ya que estas modas están separadas por zonas de muy baja densidad [7].

7.3.2. Diseño experimental y tamaño de la muestra

Es importante señalar que, si bien el conjunto de datos fue diseñado para permitir diversos tipos de análisis orientados a estudiar la relación entre el *mind-wandering* y el metilfenidato, los reportes subjetivos utilizados podrían no haber sido los más adecuados para este estudio en particular. En especial, la elección de considerar únicamente la primera opción —“en la tarea”— de la primera pregunta de los *probes* (ver 5.1.2.2) como indicadora exclusiva del estado *On Task* podría no reflejar con precisión el contenido real

del pensamiento del participante durante la tarea. A diferencia de estudios previos, que utilizaban una escala de tipo Likert para estimar el grado de atención del sujeto, en este caso no existía un umbral claro para dicotomizar los estados cognitivos. En este sentido, podría ser razonable incluir también la segunda opción de esa pregunta —“pensamientos relacionados con la tarea”— como parte del estado *On Task*. De hecho, como muestra la Figura 6.3a, que representa las probabilidades promedio de *mind-wandering* estimadas por el modelo no supervisado (independiente de los reportes), esta segunda opción es la que presenta el segundo valor más bajo de probabilidad, justo detrás de la categoría explícitamente *On Task*.

Por otro lado, al momento de realizar los análisis, el conjunto de datos aún no se encontraba completo, ya que se espera alcanzar un total de $N = 45$ participantes. Esta limitación resulta especialmente relevante para el modelo semisupervisado, donde podría ser necesaria una mayor cantidad de datos para capturar patrones generales de los estados mentales, sin depender excesivamente de características introspectivas particulares de cada sujeto.

7.3.3. Interpretabilidad de los parámetros

De acuerdo con lo que afirma Matzke [28], a pesar de que los parámetros de la distribución ex-gaussiana permiten en numerosas ocasiones ajustar a tiempos de respuesta, y que existe una literatura rica sobre dichos parámetros en tiempos de respuesta, no representan parámetros interpretables en términos de procesos cognitivos.

7.4. Futuras líneas de investigación

Una dirección inmediata consiste en lograr modelos cuya inferencia del estado identificado como *mind-wandering* sea coherente con hallazgos previos sobre su asociación con medidas objetivas, y que posean menos problemas a la hora de realizar el ajuste. Dado que las medidas conductuales podrían tener una capacidad limitada para identificar estados cognitivos, tal como señala Hawkins et al. [16], una posible extensión del presente trabajo sería complementar los modelos actuales con observaciones neurofisiológicas. Este tipo de medidas podría no sólo mejorar la identificación de los estados por parte de los modelos, sino también aportar información relevante sobre cómo se relacionan entre sí distintos tipos de marcadores. En esta línea, el modelo teórico propuesto por Mittner et al. [33], resumido brevemente en el Anexo A.2, podría ofrecer un marco útil para integrar datos conductuales y neurofisiológicos, especialmente en para analizar el impacto del metilfenidato como el que aquí se estudia.

Una vez validados estos modelos, las secuencias de ensayos decodificados podrían utilizarse como etiquetas para entrenar modelos de clasificación interpretables, o incluso para entrenar modelos de detección de *mind-wandering* en tiempo real.

Finalmente, es importante considerar que el *mind-wandering* es un constructo multifacético [32], y que los estudios más recientes han adoptado enfoques más granulares que la clásica dicotomía *On Task* vs *Off Task*. Una dimensión particularmente relevante es la intencionalidad, motivo por el cual las opciones de respuesta en los *probes* incluyeron ítems orientados a capturar este aspecto. En consecuencia, futuras investigaciones podrían extender el modelo semisupervisado actual a un esquema multinivel con una mayor cantidad de estados latentes, lo que permitiría capturar con mayor precisión la complejidad del fenómeno.

7.5. Conclusión

Este trabajo se propuso modelar la dinámica del *mind-wandering* en el contexto de una tarea de atención sostenida, e investigar el posible efecto modulador del metilfenidato sobre dicha dinámica. Para ello, se implementaron dos enfoques basados en Modelos Ocultos de Markov: uno dicotómico no supervisado y otro jerárquico semisupervisado, siguiendo la literatura previa, con métodos bayesianos.

Si bien ambos modelos aportaron evidencia del efecto esperado del metilfenidato sobre las probabilidades de transición entre estados y lograron identificar estructuras latentes con cierta coherencia interna, sus resultados difieren en varios aspectos tanto entre sí como en relación con la literatura previa. Además, dado que se encontraron métricas de diagnóstico de la exploración de la distribución posterior poco positivas, sus conclusiones deben ser interpretadas con cautela.

A pesar de estas limitaciones, el trabajo pone de manifiesto la viabilidad de aplicar modelos gráficos probabilísticos en el estudio del MW y aporta algunas herramientas metodológicas que podrían ser útiles para futuros estudios en contextos similares. El enfoque bayesiano adoptado, si bien costoso computacionalmente, permitió incorporar estructuras jerárquicas y estimar incertidumbre de manera explícita, aspectos relevantes cuando se trabaja con datos cognitivos.

En conjunto, los resultados de este trabajo no pretenden ofrecer conclusiones definitivas sobre el MW ni sobre el efecto del metilfenidato, sino explorar críticamente las posibilidades y dificultades de modelar su dinámica oculta a partir de datos conductuales.

Apéndice

A. MARCO TEÓRICO

A.1. Demostración de la Propiedad de Markov en estructura causal gráfica de Cadena de Markov

Antes de realizar la demostración, se debe definir la independencia condicional entre variables.

Definición A.1.1 (Independencia condicional). Sean A , B y C tres conjuntos disjuntos de variables aleatorias. Se dice que A es **condicionalmente independiente** de B dado C , y lo denotamos por

$$A \perp\!\!\!\perp B \mid C,$$

siempre que

$$P(A, B \mid C) = P(A \mid C)P(B \mid C) \quad (\text{A.1})$$

Lo que se quiere demostrar es que la estructura gráfica de la figura 2.3 cumple la Propiedad de Markov 2.3

Demostración de la Propiedad de Markov (Ecuación 2.3). Caso $t = 1$:

Este caso es trivial, puesto que

$$P(X_2 \mid X_1) = P(X_2 \mid X_1)$$

Caso general ($2 \leq t \leq T - 1$): Notar que si $P(X_{1:t-1} \mid X_t) \neq 0$, el caso general es equivalente a pedir que

$$X_{t+1} \perp\!\!\!\perp X_{1:t-1} \mid X_t,$$

Partiendo de la definición de independencia condicional (Ecuación A.1)

$$P(X_{t+1} \mid X_t)P(X_{1:t-1} \mid X_t) = P(X_{1:t-1}, X_{t+1} \mid X_t)$$

Dividiendo de ambos lados por $P(X_{1:t-1} \mid X_t)$, y aplicando definición de probabilidad condicional se llega a la propiedad de Markov

$$\begin{aligned} P(X_{t+1} \mid X_t) &= \frac{P(X_{1:t-1}, X_{t+1} \mid X_t)}{P(X_{1:t-1} \mid X_t)} \\ &= \frac{P(X_{1:t-1}, X_t, X_{t+1})}{P(X_t)} \frac{P(X_t)}{P(X_{1:t-1}, X_t)} \\ &= \frac{P(X_{1:t-1}, X_t, X_{t+1})}{P(X_{1:t-1}, X_t)} \\ &= P(X_{t+1} \mid X_{1:t}) \end{aligned}$$

Ahora bien, para demostrar la independencia condicional, se parte desde el lado derecho de la definición de independencia condicional:

$$P(X_{1:t-1}, X_{t+1} \mid X_t) = \frac{P(X_{1:t+1})}{P(X_t)}$$

Utilizando la propiedad de factorización en redes bayesianas (Ecuación 2.2), se tiene que

$$\begin{aligned} \frac{P(X_{1:t+1})}{X_t} &= \frac{P(X_{1:t-1})P(X_t | X_{1:t-1})P(X_{t+1} | X_t)}{P(X_t)} \\ &= \frac{P(X_{1:t})}{P(X_t)}P(X_{t+1} | X_t) \\ &= P(X_{1:t-1} | X_t)P(X_{t+1} | X_t) \end{aligned}$$

que demuestra el caso general.

Si $P(X_{1:t-1} | X_t) = 0$, entonces $P(X_{1:t}) = 0$, y $P(X_{t+1} | X_{1:t})$ no está definido. $\square$

Vale aclarar que existen criterios gráficos para demostrar independencia condicional en forma más general, como el criterio de d-separación [8], pero se ha decidido incluir dicha demostración para mostrar cómo se pueden deducir propiedades de las variables a partir de la estructura gráfica.

A.2. Modelo teórico mecanístico de Mittner del Mind Wandering

El modelo de Mittner et al. [33] sugiere que el Locus Coeruleus (LC), una región en el cerebro perteneciente al Sistema Nervioso Central, es un modulador importante del MW. Esta región es la principal productora de un neurotransmisor llamado norepinefrina (NE), también conocido como noradrenalina. Según este modelo, la actividad tónica (es decir, actividad continua y sostenida) de dicho neurotransmisor, regula la transición entre diferentes estados atencionales. La Figura A.1 esquematiza este modelo. Al comienzo de una tarea, los niveles de NE son intermedios y se mantiene un estado de enfoque óptimo, favoreciendo la atención sostenida y un procesamiento eficiente. Si la actividad tónica de NE aumenta por encima de este nivel óptimo, se genera un estado exploratorio (off-focus), en el que la atención se vuelve más errática y la mente está más propensa a divagar. Cuando los niveles de NE disminuyen con respecto a dicho estado exploratorio, se facilita la entrada en un estado de Mind Wandering activo, donde los pensamientos internos predominan sobre la tarea en curso. Este modelo está basado en estudios anteriores que han asociado la NE con el control ejecutivo y la regulación de la atención [49, 50].

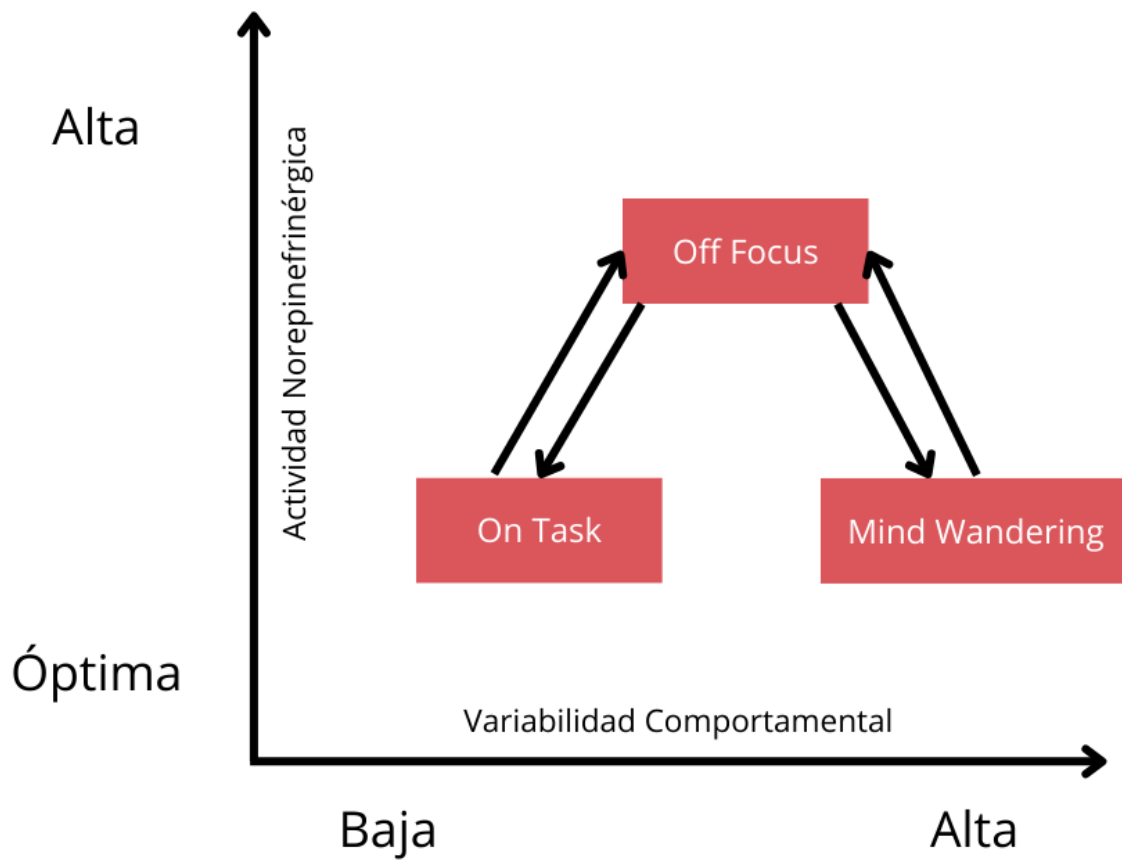


Fig. A.1: Esquema del modelo planteado en el trabajo de Mittner et al. [33]. El eje vertical denota los niveles de actividad norepinefrínica, mientras que el eje horizontal denota la variabilidad en el rendimiento dentro de la tarea. Las flechas denotan las posibles transiciones entre estados. Notar que no hay una transición directa entre On-task y Mind Wandering, sino que para llegar al estado de Mind Wandering se debe pasar por el estado de alta actividad norepinefrínica Off-focus.

B. ANÁLISIS

B.1. Priors y reparametrizaciones del modelo jerárquico semisupervisado

En este apéndice se explicitan los parámetros originales del modelo jerárquico semisupervisado implementado en **Stan**, junto con sus distribuciones a priori y las transformaciones utilizadas para obtener los parámetros efectivamente usados en las distribuciones de emisión. Vale aclarar que estos priors se asignaron teniendo en cuenta tiempos de respuesta medidos en milisegundos.

Parámetros de transición

Cada sesión (Placebo o MTH) posee su propia matriz de transición $\mathbf{P}_c$ sobre dos estados ocultos: **OT** (On Task) y **MW** (Mind Wandering). Se parametrizan mediante probabilidades de permanencia en el mismo estado (**pstay_p**), siendo las probabilidades de cambio simplemente $1 - \text{pstay_p}$. Para modelar el efecto del metilfenidato, se introduce un término aditivo por condición (**delta_pstay**) que ajusta la probabilidad de permanencia en MTH respecto de las sesiones control.

Los priors utilizados son:

$$\begin{aligned}\text{pstay_p}[\text{OT}] &\sim \mathcal{N}(0, 1, 8) \\ \text{pstay_p}[\text{MW}] &\sim \mathcal{N}(0, 1, 8) \\ \text{delta_pstay}[\text{OT}] &\sim \mathcal{N}(0, 2) \\ \text{delta_pstay}[\text{MW}] &\sim \mathcal{N}(0, 2)\end{aligned}$$

Las probabilidades reales de transición se obtienen mediante la función logit inversa:

$$\begin{aligned}P_{\text{OT} \rightarrow \text{OT}, \text{placebo}} &= \text{logit}^{-1}(\text{pstay_p}[\text{OT}]) \\ P_{\text{MW} \rightarrow \text{MW}, \text{placebo}} &= \text{logit}^{-1}(\text{pstay_p}[\text{MW}]) \\ P_{\text{OT} \rightarrow \text{OT}, \text{MTH}} &= \text{logit}^{-1}(\text{pstay_p}[\text{OT}] + \text{delta_pstay}[\text{OT}]) \\ P_{\text{MW} \rightarrow \text{MW}, \text{MTH}} &= \text{logit}^{-1}(\text{pstay_p}[\text{MW}] + \text{delta_pstay}[\text{MW}])\end{aligned}$$

Parámetros de emisión: nivel grupal

Los parámetros de emisión corresponden a los tres componentes de la distribución gaussiana: media μ , desviación estándar σ y parámetro de decaimiento τ . Se define un parámetro global por estado (OT y MW), compartido entre condiciones, para cada uno de estos tres componentes:

- $\text{g_mu_p}[\text{OT}], \text{g_mu_p}[\text{MW}]$: logaritmo de las medias grupales
- $\text{g_sigma_p}[\text{OT}], \text{g_sigma_p}[\text{MW}]$: logaritmo de las desviaciones estándar
- $\text{g_tau_p}[\text{OT}], \text{g_tau_p}[\text{MW}]$: logaritmo de los parámetros de decaimiento

Los priors asumidos para estos parámetros son:

$$\begin{aligned} g_mu_p[OT], g_mu_p[MW] &\sim \mathcal{N}(\log(500), 10) \\ g_sigma_p[OT], g_sigma_p[MW] &\sim \mathcal{N}(\log(150), 1) \\ g_tau_p[OT], g_tau_p[MW] &\sim \mathcal{N}(\log(150), 1) \end{aligned}$$

Los parámetros de emisión globales son, por lo tanto:

$$\begin{aligned} \mu_{G,OT} &= \exp(g_mu_p[OT]) \\ \mu_{G,MW} &= \exp(g_mu_p[MW]) \\ \sigma_{G,OT} &= \exp(g_sigma_p[OT]) \\ \sigma_{G,MW} &= \exp(g_sigma_p[MW]) \\ \tau_{G,OT} &= \exp(g_tau_p[OT]) \\ \tau_{G,MW} &= \exp(g_tau_p[MW]) \end{aligned}$$

Los hiperparámetros que controlan la variabilidad inter-sujeto son:

$$\begin{aligned} g_mu_sig &\sim \mathcal{N}(0, 0.5) \\ g_sigma_sig &\sim \mathcal{N}(0, 0.5) \\ g_tau_sig &\sim \mathcal{N}(0, 0.5) \end{aligned}$$

Parámetros de emisión: nivel sesión

Para cada sesión, se generan parámetros de emisión particulares. La generación se realiza mediante el “Matt-trick” (ver https://mc-stan.org/docs/2_23/stan-users-guide/reparameterization-section.html). Se introducen variables latentes auxiliares centradas en cero, con prior normal estándar:

$$\begin{aligned} mu_pr[s,OT], \quad mu_pr[s,MW] &\sim \mathcal{N}(0, 1) \\ sigma_pr[s,OT], \quad sigma_pr[s,MW] &\sim \mathcal{N}(0, 1) \\ tau_pr[s,OT], \quad tau_pr[s,MW] &\sim \mathcal{N}(0, 1) \end{aligned}$$

Las transformaciones utilizadas para obtener los parámetros de emisión son:

$$\begin{aligned} \mu_{s,OT} &= \exp(g_mu_p[OT] + g_mu_sig \cdot mu_pr[s,OT]) \\ \mu_{s,MW} &= \exp(g_mu_p[MW] + g_mu_sig \cdot mu_pr[s,MW]) \\ \sigma_{s,OT} &= \exp(g_sigma_p[OT] + g_sigma_sig \cdot sigma_pr[s,OT]) \\ \sigma_{s,MW} &= \exp(g_sigma_p[MW] + g_sigma_sig \cdot sigma_pr[s,MW]) \\ \tau_{s,OT} &= \exp(g_tau_p[OT] + g_tau_sig \cdot tau_pr[s,OT]) \\ \tau_{s,MW} &= \exp(g_tau_p[MW] + g_tau_sig \cdot tau_pr[s,MW]) \end{aligned}$$

B.2. Correlaciones entre parámetros de emisión y errores

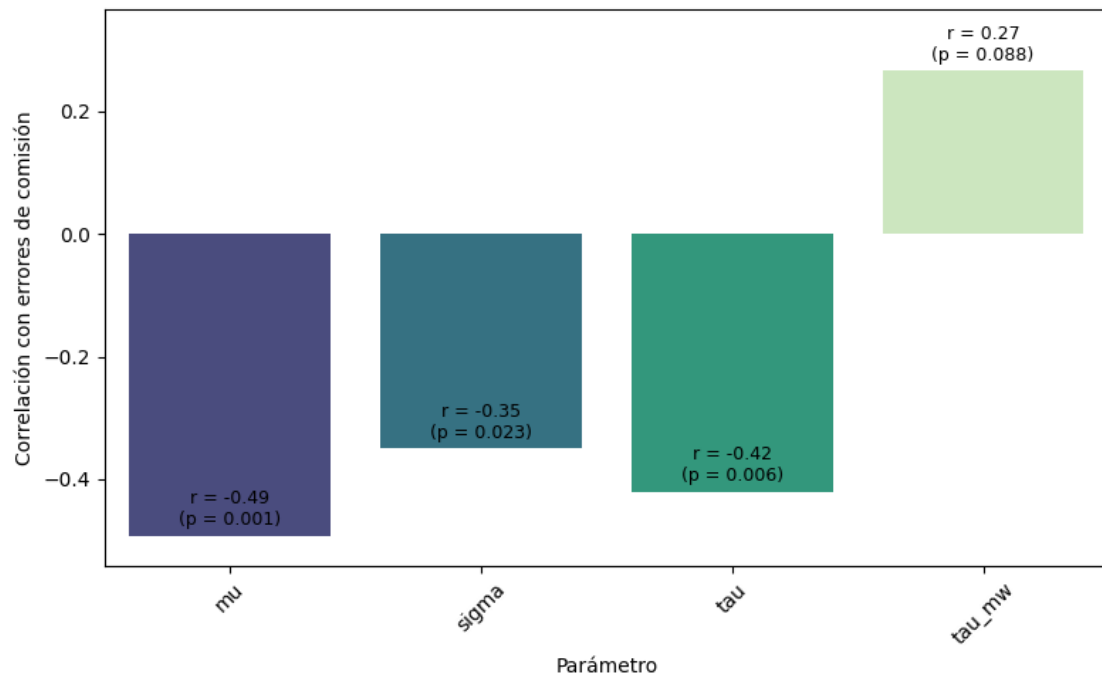


Fig. B.1: Correlaciones de los parámetros de emisión del modelo no supervisado *exponencial* con respecto a las tasas de errores de comisión

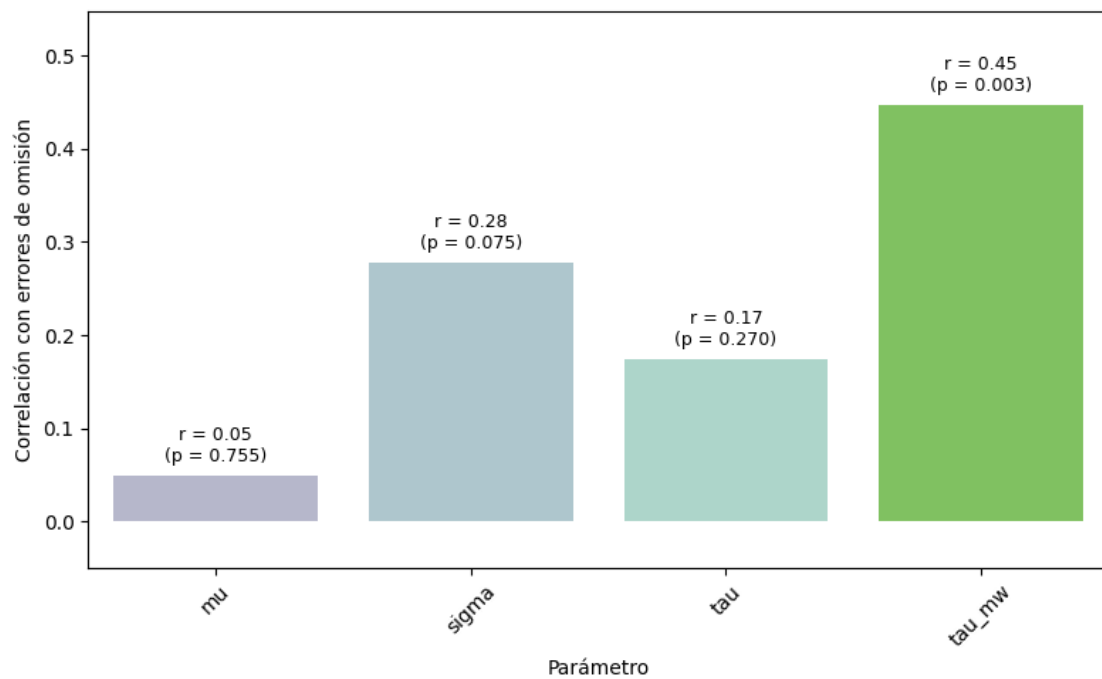


Fig. B.2: Correlaciones de los parámetros de emisión del modelo no supervisado *exponencial* con respecto a las tasas de errores de comisión

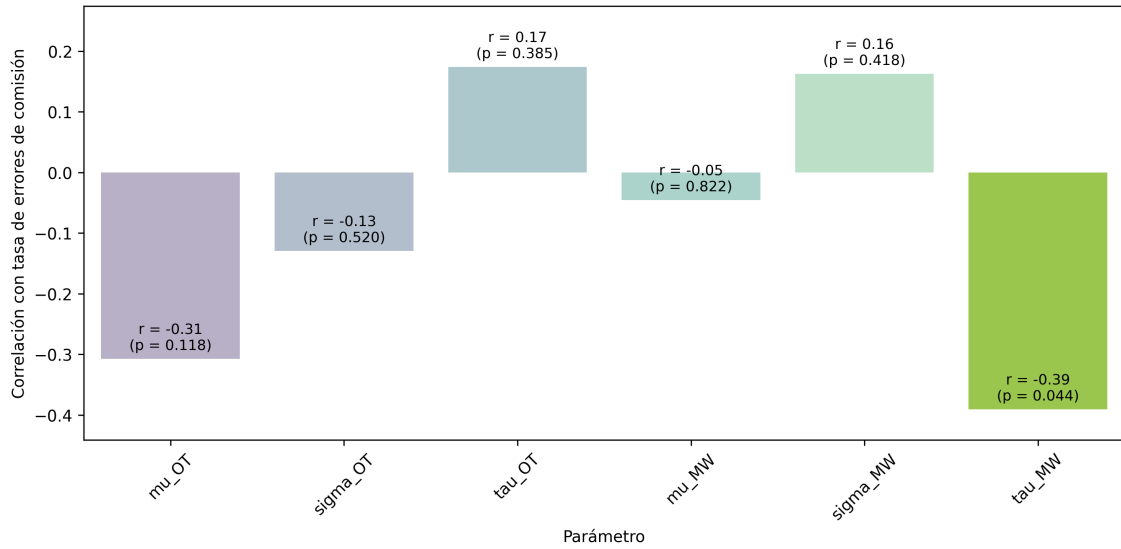


Fig. B.3: Correlaciones de los parámetros de emisión del modelo semisupervisado con respecto a las tasas de errores de comisión

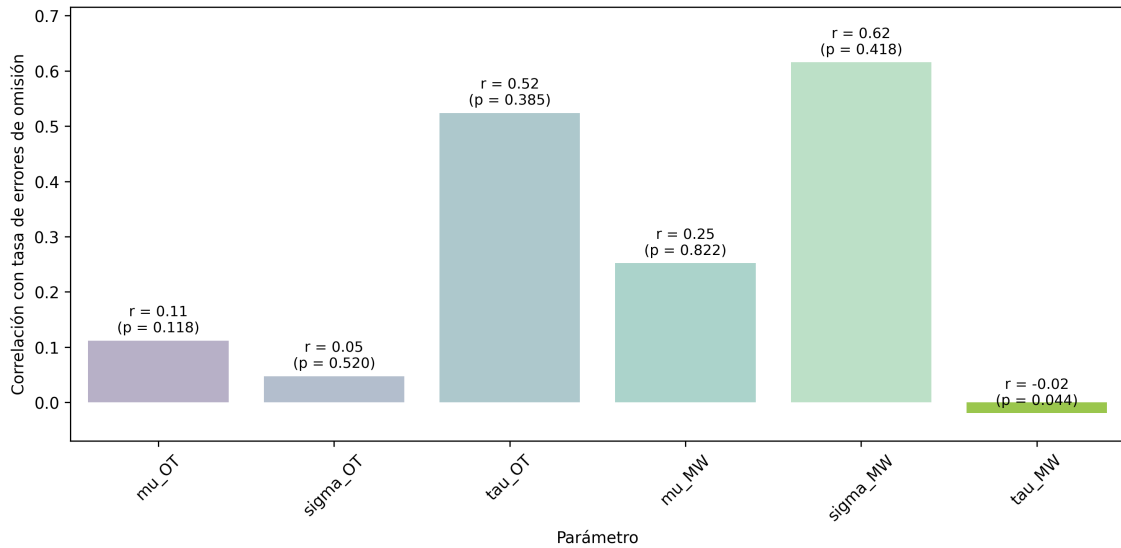


Fig. B.4: Correlaciones de los parámetros de emisión del modelo semisupervisado con respecto a las tasas de errores de omisión

Bibliografía

- [1] J. Allan Cheyne, G. J. F. Solman, J. S. A. Carriere, and D. Smilek. Anatomy of an error: a bidirectional state model of task engagement/disengagement and attention-related errors. *Cognition*, 111(1):98–113, Apr. 2009.
- [2] D. Barber. *Bayesian Reasoning and Machine Learning*. Cambridge University Press, 1 edition, June 2012. ISBN 978-0-521-51814-7 978-0-511-80477-9. doi: 10.1017/CBO9780511804779. URL <https://www.cambridge.org/core/product/identifier/9780511804779/type/book>.
- [3] M. Bastian and J. Sackur. Mind wandering at the fingertips: automatic parsing of subjective states based on response time variability. *Frontiers in Psychology*, 4, 2013. ISSN 1664-1078. doi: 10.3389/fpsyg.2013.00573. URL <http://journal.frontiersin.org/article/10.3389/fpsyg.2013.00573/abstract>.
- [4] R. F. Baumeister and E. J. Masicampo. Conscious thought is for facilitating social and cultural interactions: how mental simulations serve the animal-culture interface. *Psychol. Rev.*, 117(3):945–971, July 2010.
- [5] M. Bella-Fernández, M. Martin-Moratinos, C. Li, P. Wang, and H. Blasco-Fontecilla. Differences in ex-gaussian parameters from response time distributions between individuals with and without attention deficit/hyperactivity disorder: A meta-analysis. *Neuropsychol. Rev.*, 34(1):320–337, Mar. 2024.
- [6] M. Betancourt. A Conceptual Introduction to Hamiltonian Monte Carlo, July 2018. URL <http://arxiv.org/abs/1701.02434>. arXiv:1701.02434 [stat].
- [7] M. J. Betancourt and M. Girolami. Hamiltonian monte carlo for hierarchical models. *arXiv [stat.ME]*, Dec. 2013.
- [8] C. M. Bishop. *Pattern Recognition and Machine Learning (Information Science and Statistics)*. Springer, 1 edition, 2006. ISBN 0387310738. URL <http://www.amazon.com/Pattern-Recognition-Learning-Information-Statistics/dp/0387310738%3FSubscriptionId%3D13CT5CVB80YFWJEPWS02%26tag%3Dws%26linkCode%3Dxm2%26camp%3D2025%26creative%3D165953%26creativeASIN%3D0387310738>.
- [9] C. Braboszcz and A. Delorme. Lost in thoughts: neural markers of low alertness during mind wandering. *Neuroimage*, 54(4):3040–3047, Feb. 2011.
- [10] K. Christoff, Z. C. Irving, K. C. R. Fox, R. N. Spreng, and J. R. Andrews-Hanna. Mind-wandering as spontaneous thought: a dynamic framework. *Nat. Rev. Neurosci.*, 17(11):718–731, Nov. 2016.
- [11] K. Christoff, C. Mills, J. R. Andrews-Hanna, Z. C. Irving, E. Thompson, K. C. R. Fox, and J. W. Y. Kam. Mind-wandering as a scientific concept: Cutting through the definitional haze. *Trends Cogn. Sci.*, 22(11):957–959, Nov. 2018.

- [12] H. W. Dong, C. Mills, R. T. Knight, and J. W. Y. Kam. Detection of mind wandering using EEG: Within and across individuals. *PLoS One*, 16(5):e0251490, May 2021.
- [13] B. U. Forstmann and E.-J. Wagenmakers, editors. *An introduction to model-based cognitive neuroscience*, volume 354. Springer, New York, NY, Apr. 2015.
- [14] L. M. Giambra. Task-unrelated thought frequency as a function of age: A laboratory study. *Psychol. Aging*, 4(2):136–143, June 1989.
- [15] T. Griffiths. *Bayesian Models of Cognition*, July 2024.
- [16] G. E. Hawkins, M. Mittner, W. Boekel, A. Heathcote, and B. U. Forstmann. Toward a model-based cognitive neuroscience of mind wandering. *Neuroscience*, 310:290–305, Dec. 2015. ISSN 1873-7544. doi: 10.1016/j.neuroscience.2015.09.053.
- [17] M. D. Hoffman, A. Gelman, et al. The no-u-turn sampler: adaptively setting path lengths in hamiltonian monte carlo. *J. Mach. Learn. Res.*, 15(1):1593–1623, 2014.
- [18] A. A. Johnson, M. Q. Ott, and M. Dogucu. *Bayes Rules!: An Introduction to Applied Bayesian Modeling*. Chapman and Hall/CRC, New York, Mar. 2022. ISBN 978-0-429-28834-0. doi: 10.1201/9780429288340.
- [19] E. Klinger. Dimensions of thought and imagery in normal waking states. *Journal of Altered States of Consciousness*, 4(2):1978–1979, 1979.
- [20] E. Klinger and W. M. Cox. Dimensions of thought flow in everyday life. *Imagin. Cogn. Pers.*, 7(2):105–128, Oct. 1987.
- [21] H.-H. Lee, Z.-L. Chen, S.-L. Yeh, J. H. Hsiao, and A.-Y. A. Wu. When Eyes Wander Around: Mind-Wandering as Revealed by Eye Movement Analysis with Hidden Markov Models. *Sensors*, 21(22):7569, Nov. 2021. ISSN 1424-8220. doi: 10.3390/s21227569. URL <https://www.mdpi.com/1424-8220/21/22/7569>.
- [22] M. D. Lee. *Bayesian methods in cognitive modeling*, pages 1–48. John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, NJ, USA, Mar. 2018.
- [23] M. D. Lee and E.-J. Wagenmakers. *Bayesian Cognitive Modeling: A Practical Course*. Cambridge University Press, 1 edition, Apr. 2014. ISBN 978-1-107-60357-8 978-1-139-08775-9 978-1-107-01845-7. doi: 10.1017/CBO9781139087759. URL <https://www.cambridge.org/core/product/identifier/9781139087759/type/book>.
- [24] B. Leimkuhler and S. Reich. *Simulating Hamiltonian Dynamics*. Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics. Cambridge University Press, Cambridge, 2005. ISBN 978-0-521-77290-7. doi: 10.1017/CBO9780511614118. URL <https://www.cambridge.org/core/books/simulating-hamiltonian-dynamics/01FD55D833A92D68F0E5245CB44420>.
- [25] M. Leszczynski, L. Chaieb, T. P. Reber, M. Derner, N. Axmacher, and J. Fell. Mind wandering simultaneously prolongs reactions and promotes creative incubation. *Sci. Rep.*, 7(1):10197, Aug. 2017.

-
- [26] C. Leth-Steensen, Z. K. Elbaz, and V. I. Douglas. Mean response times, variability, and skew in the responding of ADHD children: a response time distributional approach. *Acta Psychol. (Amst.)*, 104(2):167–190, May 2000.
- [27] R. D. Luce. *Response Times: Their Role in Inferring Elementary Mental Organization*. Oxford University Press, 10 1991. ISBN 9780195070019. doi: 10.1093/acprof:oso/9780195070019.001.0001. URL <https://doi.org/10.1093/acprof:oso/9780195070019.001.0001>.
- [28] E.-J. Matzke, Dora Wagenmakers. Psychological interpretation of the ex-gaussian and shifted wald parameters: a diffusion model analysis. *Psychon. Bull. Rev.*, 16(5): 798–817, Oct. 2009.
- [29] J. C. McVay and M. J. Kane. Drifting from slow to “D’oh!”: working memory capacity and mind wandering predict extreme reaction times and executive control errors. *J. Exp. Psychol. Learn. Mem. Cogn.*, 38(3):525–549, May 2012.
- [30] B. M. Merrill, J. S. Raiker, A. T. Mattfeld, F. L. Macphee, M. C. Ramos, X. Zhao, A. R. Altszuler, J. W. Schooler, S. Coxe, E. M. Gnagy, A. R. Greiner, E. K. Coles, and W. E. Pelham, Jr. Mind-wandering and childhood ADHD: Experimental manipulations across laboratory and naturalistic settings. *Res. Child Adolesc. Psychopathol.*, 50(9):1139–1149, Sept. 2022.
- [31] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller. Equation of State Calculations by Fast Computing Machines. *The Journal of Chemical Physics*, 21(6):1087–1092, June 1953. ISSN 0021-9606. doi: 10.1063/1.1699114. URL <https://doi.org/10.1063/1.1699114>.
- [32] C. Mills, Q. Raffaelli, Z. C. Irving, D. Stan, and K. Christoff. Is an off-task mind a freely-moving mind? examining the relationship between different dimensions of thought. *Conscious. Cogn.*, 58:20–33, Feb. 2018.
- [33] M. Mittner, G. E. Hawkins, W. Boekel, and B. U. Forstmann. A Neural Model of Mind Wandering. *Trends in Cognitive Sciences*, 20(8):570–578, Aug. 2016. ISSN 13646613. doi: 10.1016/j.tics.2016.06.004. URL <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1364661316300754>.
- [34] B. W. Mooneyham and J. W. Schooler. The costs and benefits of mind-wandering: A review. *Canadian Journal of Experimental Psychology / Revue canadienne de psychologie expérimentale*, 67(1):11–18, 2013. ISSN 1878-7290. doi: 10.1037/a0031569. Place: US Publisher: Educational Publishing Foundation.
- [35] J. Pearl. *Probabilistic Reasoning in Intelligent Systems: Networks of Plausible Inference*. Morgan Kaufmann Publishers Inc., San Francisco, CA, USA, 1988. ISBN 1558604790.
- [36] J. Pearl and D. Mackenzie. *The Book of Why: The New Science of Cause and Effect*. Basic Books, Inc., USA, 1st edition, 2018. ISBN 046509760X.
- [37] J. W. Peirce. Psychopy—psychophysics software in python. *Journal of Neuroscience Methods*, 162(1):8–13, 2007. ISSN 0165-0270. doi: <https://doi.org/10.1016/j>

- jneumeth.2006.11.017. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0165027006005772>.
- [38] G. Polanczyk and L. A. Rohde. Epidemiology of attention-deficit/hyperactivity disorder across the lifespan. *Curr. Opin. Psychiatry*, 20(4):386–392, July 2007.
- [39] L. Rabiner. A tutorial on hidden markov models and selected applications in speech recognition. *Proceedings of the IEEE*, 77(2):257–286, 1989. doi: 10.1109/5.18626.
- [40] I. H. Robertson, T. Manly, J. Andrade, B. T. Baddeley, and J. Yiend. 'Oops!': performance correlates of everyday attentional failures in traumatic brain injured and normal subjects. *Neuropsychologia*, 35(6):747–758, June 1997. ISSN 0028-3932. doi: 10.1016/s0028-3932(97)00015-8.
- [41] J. W. Schooler, J. Smallwood, K. Christoff, T. C. Handy, E. D. Reichle, and M. A. Sayette. Meta-awareness, perceptual decoupling and the wandering mind. *Trends Cogn. Sci.*, 15(7):319–326, July 2011.
- [42] P. Seli, J. A. Cheyne, and D. Smilek. Wandering minds and wavering rhythms: linking mind wandering and behavioral variability. *J. Exp. Psychol. Hum. Percept. Perform.*, 39(1):1–5, Feb. 2013.
- [43] P. Seli, J. Smallwood, J. A. Cheyne, and D. Smilek. On the relation of mind wandering and ADHD symptomatology. *Psychon. Bull. Rev.*, 22(3):629–636, June 2015.
- [44] P. Seli, M. J. Kane, J. Smallwood, D. L. Schacter, D. Maillet, J. W. Schooler, and D. Smilek. Mind-wandering as a natural kind: A family-resemblances view. *Trends Cogn. Sci.*, 22(6):479–490, June 2018.
- [45] G. Shaw and L. Giambra. Task-unrelated thoughts of college students diagnosed as hyperactive in childhood. *Developmental neuropsychology*, 9(1):17–30, 1993.
- [46] J. Smallwood. Distinguishing how from why the mind wanders: a process-occurrence framework for self-generated mental activity. *Psychol. Bull.*, 139(3):519–535, May 2013.
- [47] J. Smallwood and J. W. Schooler. The restless mind. *Psychological Bulletin*, 132(6):946–958, Nov. 2006. ISSN 1939-1455, 0033-2909. doi: 10.1037/0033-2909.132.6.946. URL <https://doi.apa.org/doi/10.1037/0033-2909.132.6.946>.
- [48] J. Smallwood and J. W. Schooler. The Science of Mind Wandering: Empirically Navigating the Stream of Consciousness. *Annual Review of Psychology*, 66(1):487–518, Jan. 2015. ISSN 0066-4308, 1545-2085. doi: 10.1146/annurev-psych-010814-015331. URL <https://www.annualreviews.org/doi/10.1146/annurev-psych-010814-015331>.
- [49] J. Smallwood, K. S. Brown, C. Tipper, B. Giesbrecht, M. S. Franklin, M. D. Mrazek, J. M. Carlson, and J. W. Schooler. Pupillometric Evidence for the Decoupling of Attention from Perceptual Input during Offline Thought. *PLoS ONE*, 6(3):e18298, Mar. 2011. ISSN 1932-6203. doi: 10.1371/journal.pone.0018298. URL <https://dx.plos.org/10.1371/journal.pone.0018298>.

-
- [50] J. Smallwood, K. S. Brown, B. Baird, M. D. Mrazek, M. S. Franklin, and J. W. Schooler. Insulation for Daydreams: A Role for Tonic Norepinephrine in the Facilitation of Internally Guided Thought. *PLoS ONE*, 7(4):e33706, Apr. 2012. ISSN 1932-6203. doi: 10.1371/journal.pone.0033706. URL <https://dx.plos.org/10.1371/journal.pone.0033706>.
- [51] C. Sripada, D. Kessler, and J. Jonides. Methylphenidate Blocks Effort-Induced Depletion of Regulatory Control in Healthy Volunteers. *Psychological Science*, 25(6): 1227–1234, June 2014. ISSN 0956-7976. doi: 10.1177/0956797614526415. URL <https://doi.org/10.1177/0956797614526415>. Publisher: SAGE Publications Inc.
- [52] Stan Development Team. RStan: the R interface to Stan, 2025. URL <https://mc-stan.org/>. R package version 2.32.7.
- [53] J. Vandekerckhove, F. Tuerlinckx, and M. D. Lee. A Bayesian Approach to Diffusion Process Models of Decision-Making. 2008.
- [54] N. D. Volkow, J. S. Fowler, G. Wang, Y. Ding, and S. J. Gatley. Mechanism of action of methylphenidate: insights from PET imaging studies. *Journal of Attention Disorders*, 6 Suppl 1:S31–43, 2002. ISSN 1087-0547. doi: 10.1177/070674370200601s05.
- [55] N. D. Volkow, J. S. Fowler, G.-J. Wang, F. Telang, J. Logan, C. Wong, J. Ma, K. Pradhan, H. Benveniste, and J. M. Swanson. Methylphenidate decreased the amount of glucose needed by the brain to perform a cognitive task. *PLoS One*, 3(4): e2017, Apr. 2008.
- [56] S. Watanabe and M. Opper. Asymptotic equivalence of bayes cross validation and widely applicable information criterion in singular learning theory. *Journal of machine learning research*, 11(12), 2010.
- [57] Z. Xu, S. Tang, Z. Di, and Z. Li. Dynamic multilayer networks reveal mind wandering. *Frontiers in Neuroscience*, 18:1421498, Nov. 2024. ISSN 1662-453X. doi: 10.3389/fnins.2024.1421498. URL <https://www.frontiersin.org/articles/10.3389/fnins.2024.1421498/full>.
- [58] A. Yamashita, D. Rothlein, A. Kucyi, E. M. Valera, L. Germine, J. Wilmer, J. DeGutis, and M. Esterman. Variable rather than extreme slow reaction times distinguish brain states during sustained attention. *Sci. Rep.*, 11(1):14883, July 2021.
- [59] M. R. Yanko and T. M. Spalek. Driving with the wandering mind: the effect that mind-wandering has on driving performance: The effect that mind-wandering has on driving performance. *Hum. Factors*, 56(2):260–269, Mar. 2014.