

隐马尔可夫模型

隐马尔可夫模型是一种概率图模型。我们知道，机器学习模型可以从频率派和贝叶斯派两个方向考虑，在频率派的方法中的核心是优化问题，而在贝叶斯派的方法中，核心是积分问题，也发展出来了一系列的积分方法如变分推断，MCMC 等。概率图模型最基本的模型可以分为有向图（贝叶斯网络）和无向图（马尔可夫随机场）两个方面，例如 GMM，在这些基本的模型上，如果样本之间存在关联，可以认为样本中附带了时序信息，从而样本之间不独立全同分布的，这种模型就叫做动态模型，隐变量随着时间发生变化，于是观测变量也发生变化：

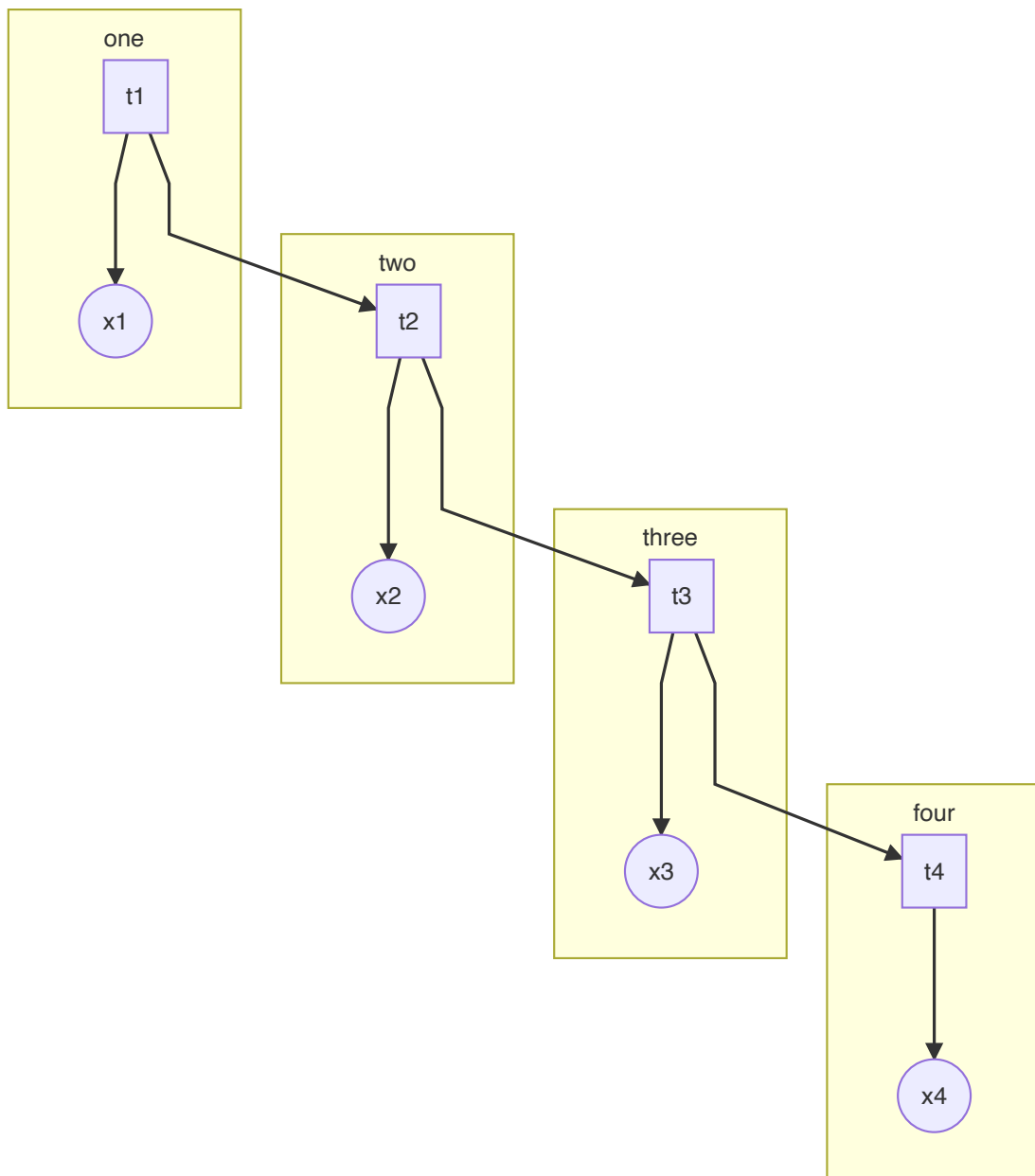


根据状态变量的特点，可以分为：

1. HMM，状态变量（隐变量）是离散的
2. Kalman 滤波，状态变量是连续的，线性的
3. 粒子滤波，状态变量是连续，非线性的

HMM

HMM 用概率图表示为：



上图表示了四个时刻的隐变量变化。用参数 $\lambda = (\pi, A, B)$ 来表示，其中 π 是开始的概率分布， A 为状态转移矩阵， B 为发射矩阵。

下面使用 o_t 来表示观测变量， O 为观测序列， $V = \{v_1, v_2, \dots, v_M\}$ 表示观测的值域， i_t 表示状态变量， I 为状态序列， $Q = \{q_1, q_2, \dots, q_N\}$ 表示状态变量的值域。定义

$A = (a_{ij} = p(i_{t+1} = q_j | i_t = q_i))$ 表示状态转移矩阵， $B = (b_j(k) = p(o_t = v_k | i_t = q_j))$ 表示发射矩阵。

在 HMM 中，有两个基本假设：

1. 齐次 Markov 假设（未来只依赖于当前）：

$$p(i_{t+1} | i_t, i_{t-1}, \dots, i_1, o_t, o_{t-1}, \dots, o_1) = p(i_{t+1} | i_t) \quad (1)$$

2. 观测独立假设：

$$p(o_t|i_t, i_{t-1}, \dots, i_1, o_{t-1}, \dots, o_1) = p(o_t|i_t) \quad (2)$$

HMM 要解决三个问题:

1. Evaluation: $p(O|\lambda)$, Forward-Backward 算法
2. Learning: $\lambda = \underset{\lambda}{argmax} p(O|\lambda)$, EM 算法 (Baum-Welch)
3. Decoding: $I = \underset{I}{argmax} p(I|O, \lambda)$, Viterbi 算法
 1. 预测问题: $p(i_{t+1}|o_1, o_2, \dots, o_t)$
 2. 滤波问题: $p(i_t|o_1, o_2, \dots, o_t)$

Evaluation

$$p(O|\lambda) = \sum_I p(I, O|\lambda) = \sum_I p(O|I, \lambda)p(I|\lambda) \quad (3)$$

$$p(I|\lambda) = p(i_1, i_2, \dots, i_T|\lambda) = p(i_T|i_1, i_2, \dots, i_{T-1}, \lambda)p(i_1, i_2, \dots, i_{T-1}|\lambda) \quad (4)$$

根据齐次 Markov 假设:

$$p(i_t|i_1, i_2, \dots, i_{t-1}, \lambda) = p(i_t|i_{t-1}) = a_{i_{t-1}i_t} \quad (5)$$

所以:

$$p(I|\lambda) = \pi_1 \prod_{t=2}^T a_{i_{t-1}, i_t} \quad (6)$$

又由于:

$$p(O|I, \lambda) = \prod_{t=1}^T b_{i_t}(o_t) \quad (7)$$

于是:

$$p(O|\lambda) = \sum_I \pi_{i_1} \prod_{t=2}^T a_{i_{t-1}, i_t} \prod_{t=1}^T b_{i_t}(o_t) \quad (8)$$

我们看到, 上面的式子中的求和符号是对所有的观测变量求和, 于是复杂度为 $O(N^T)$ 。

下面, 记 $\alpha_t(i) = p(o_1, o_2, \dots, o_t, i_t = q_i|\lambda)$, 所以, $\alpha_T(i) = p(O, i_T = q_i|\lambda)$ 。我们看到:

$$p(O|\lambda) = \sum_{i=1}^N p(O, i_T = q_i|\lambda) = \sum_{i=1}^N \alpha_T(i) \quad (9)$$

对 $\alpha_{t+1}(j)$:

$$\begin{aligned}
\alpha_{t+1}(j) &= p(o_1, o_2, \dots, o_{t+1}, i_{t+1} = q_j | \lambda) \\
&= \sum_{i=1}^N p(o_1, o_2, \dots, o_{t+1}, i_{t+1} = q_j, i_t = q_i | \lambda) \\
&= \sum_{i=1}^N p(o_{t+1} | o_1, o_2, \dots, i_{t+1} = q_j, i_t = q_i | \lambda) p(o_1, \dots, o_t, i_t = q_i, i_{t+1} = q_j | \lambda) \quad (10)
\end{aligned}$$

利用观测独立假设：

$$\begin{aligned}
\alpha_{t+1}(j) &= \sum_{i=1}^N p(o_{t+1} | i_{t+1} = q_j) p(o_1, \dots, o_t, i_t = q_i, i_{t+1} = q_j | \lambda) \\
&= \sum_{i=1}^N p(o_{t+1} | i_{t+1} = q_j) p(i_{t+1} = q_j | o_1, \dots, o_t, i_t = q_i, \lambda) p(o_1, \dots, o_t, i_t = q_i | \lambda) \\
&= \sum_{i=1}^N b_j(o_t) a_{ij} \alpha_t(i) \quad (11)
\end{aligned}$$

上面利用了齐次 Markov 假设得到了一个递推公式，这个算法叫做前向算法。

还有一种算法叫做后向算法，定义 $\beta_t(i) = p(o_{t+1}, o_{t+2}, \dots, o_T | i_t = i, \lambda)$ ：

$$\begin{aligned}
p(O | \lambda) &= p(o_1, \dots, o_T | \lambda) \\
&= \sum_{i=1}^N p(o_1, o_2, \dots, o_T, i_1 = q_i | \lambda) \\
&= \sum_{i=1}^N p(o_1, o_2, \dots, o_T | i_1 = q_i, \lambda) \pi_i \\
&= \sum_{i=1}^N p(o_1 | o_2, \dots, o_T, i_1 = q_i, \lambda) p(o_2, \dots, o_T | i_1 = q_i, \lambda) \pi_i \\
&= \sum_{i=1}^N b_i(o_1) \pi_i \beta_1(i) \quad (12)
\end{aligned}$$

对于这个 $\beta_1(i)$ ：

$$\begin{aligned}
\beta_t(i) &= p(o_{t+1}, \dots, o_T | i_t = q_i) \\
&= \sum_{j=1}^N p(o_{t+1}, o_{t+2}, \dots, o_T, i_{t+1} = q_j | i_t = q_i) \\
&= \sum_{j=1}^N p(o_{t+1}, \dots, o_T | i_{t+1} = q_j, i_t = q_i) p(i_{t+1} = q_j | i_t = q_i) \\
&= \sum_{j=1}^N p(o_{t+1}, \dots, o_T | i_{t+1} = q_j) a_{ij} \\
&= \sum_{j=1}^N p(o_{t+1} | o_{t+2}, \dots, o_T, i_{t+1} = q_j) p(o_{t+2}, \dots, o_T | i_{t+1} = q_j) a_{ij} \\
&= \sum_{j=1}^N b_j(o_{t+1}) a_{ij} \beta_{t+1}(j) \quad (13)
\end{aligned}$$

于是后向地得到了第一项。

Learning

为了学习得到参数的最优值，在 MLE 中：

$$\lambda_{MLE} = \underset{\lambda}{argmax} p(O|\lambda) \quad (14)$$

我们采用 EM 算法（在这里也叫 Baum Welch 算法），用上标表示迭代：

$$\theta^{t+1} = \underset{\theta}{argmax} \int_z \log p(X, Z|\theta) p(Z|X, \theta^t) dz \quad (15)$$

其中， X 是观测变量， Z 是隐变量序列。于是：

$$\begin{aligned} \lambda^{t+1} &= \underset{\lambda}{argmax} \sum_I \log p(O, I|\lambda) p(I|O, \lambda^t) \\ &= \underset{\lambda}{argmax} \sum_I \log p(O, I|\lambda) p(O, I|\lambda^t) \end{aligned} \quad (16)$$

这里利用了 $p(O|\lambda^t)$ 和 λ 无关。将 Evaluation 中的式子代入：

$$\sum_I \log p(O, I|\lambda) p(O, I|\lambda^t) = \sum_I [\log \pi_{i_1} + \sum_{t=2}^T \log a_{i_{t-1}, i_t} + \sum_{t=1}^T \log b_{i_t}(o_t)] p(O, I|\lambda^t) \quad (17)$$

对 π^{t+1} ：

$$\begin{aligned} \pi^{t+1} &= \underset{\pi}{argmax} \sum_I [\log \pi_{i_1} p(O, I|\lambda^t)] \\ &= \underset{\pi}{argmax} \sum_I [\log \pi_{i_1} \cdot p(O, i_1, i_2, \dots, i_T|\lambda^t)] \end{aligned} \quad (18)$$

上面的式子中，对 i_2, i_2, \dots, i_T 求和可以将这些参数消掉：

$$\pi^{t+1} = \underset{\pi}{argmax} \sum_{i_1} [\log \pi_{i_1} \cdot p(O, i_1|\lambda^t)] \quad (19)$$

上面的式子还有对 π 的约束 $\sum_i \pi_i = 1$ 。定义 Lagrange 函数：

$$L(\pi, \eta) = \sum_{i=1}^N \log \pi_i \cdot p(O, i_1 = q_i|\lambda^t) + \eta (\sum_{i=1}^N \pi_i - 1) \quad (20)$$

于是：

$$\frac{\partial L}{\partial \pi_i} = \frac{1}{\pi_i} p(O, i_1 = q_i|\lambda^t) + \eta = 0 \quad (21)$$

对上式求和：

$$\sum_{i=1}^N p(O, i_1 = q_i|\lambda^t) + \pi_i \eta = 0 \Rightarrow \eta = -p(O|\lambda^t) \quad (22)$$

所以：

$$\pi_i^{t+1} = \frac{p(O, i_1 = q_i | \lambda^t)}{p(O | \lambda^t)} \quad (23)$$

Decoding

Decoding 问题表述为：

$$I = \underset{I}{\operatorname{argmax}} p(I | O, \lambda) \quad (24)$$

我们需要找到一个序列，其概率最大，这个序列就是在参数空间中的一个路径，可以采用动态规划的思想。

定义：

$$\delta_t(j) = \max_{i_1, \dots, i_{t-1}} p(o_1, \dots, o_t, i_1, \dots, i_{t-1}, i_t = q_i) \quad (25)$$

于是：

$$\delta_{t+1}(j) = \max_{1 \leq i \leq N} \delta_t(i) a_{ij} b_j(o_{t+1}) \quad (26)$$

这个式子就是从上一步到下一步的概率再求最大值。记这个路径为：

$$\psi_{t+1}(j) = \underset{1 \leq i \leq N}{\operatorname{argmax}} \delta_t(i) a_{ij} \quad (27)$$

小结

HMM 是一种动态模型，是由混合树形模型和时序结合起来的一种模型（类似 GMM + Time）。对于类似 HMM 的这种状态空间模型，普遍的除了学习任务（采用 EM）外，还有推断任务，推断任务包括：

1. 译码 Decoding: $p(z_1, z_2, \dots, z_t | x_1, x_2, \dots, x_t)$
2. 似然概率: $p(X | \theta)$
3. 滤波: $p(z_t | x_1, \dots, x_t)$, Online

$$p(z_t | x_{1:t}) = \frac{p(x_{1:t}, z_t)}{p(x_{1:t})} = C \alpha_t(z_t) \quad (28)$$

4. 平滑: $p(z_t | x_1, \dots, x_T)$, Offline

$$p(z_t | x_{1:T}) = \frac{p(x_{1:T}, z_t)}{p(x_{1:T})} = \frac{\alpha_t(z_t) p(x_{t+1:T} | x_{1:t}, z_t)}{p(x_{1:T})} \quad (29)$$

根据概率图的条件独立性，有：

$$p(z_t|x_{1:T}) = \frac{\alpha_t(z_t)p(x_{t+1:T}|z_t)}{p(x_{1:T})} = C\alpha_t(z_t)\beta_t(z_t) \quad (30)$$

这个算法叫做前向后向算法。

5. 预测： $p(z_{t+1}, z_{t+2}|x_1, \dots, x_t), p(x_{t+1}, x_{t+2}|x_1, \dots, x_t)$

$$p(z_{t+1}|x_{1:t}) = \sum_{z_t} p(z_{t+1}, z_t|x_{1:t}) = \sum_{z_t} p(z_{t+1}|z_t)p(z_t|x_{1:t}) \quad (31)$$

$$p(x_{t+1}|x_{1:t}) = \sum_{z_{t+1}} p(x_{t+1}, z_{t+1}|x_{1:t}) = \sum_{z_{t+1}} p(x_{t+1}|z_{t+1})p(z_{t+1}|x_{1:t}) \quad (32)$$