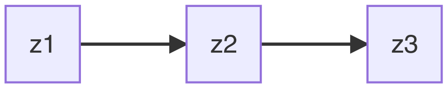
隐马尔可夫模型

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：

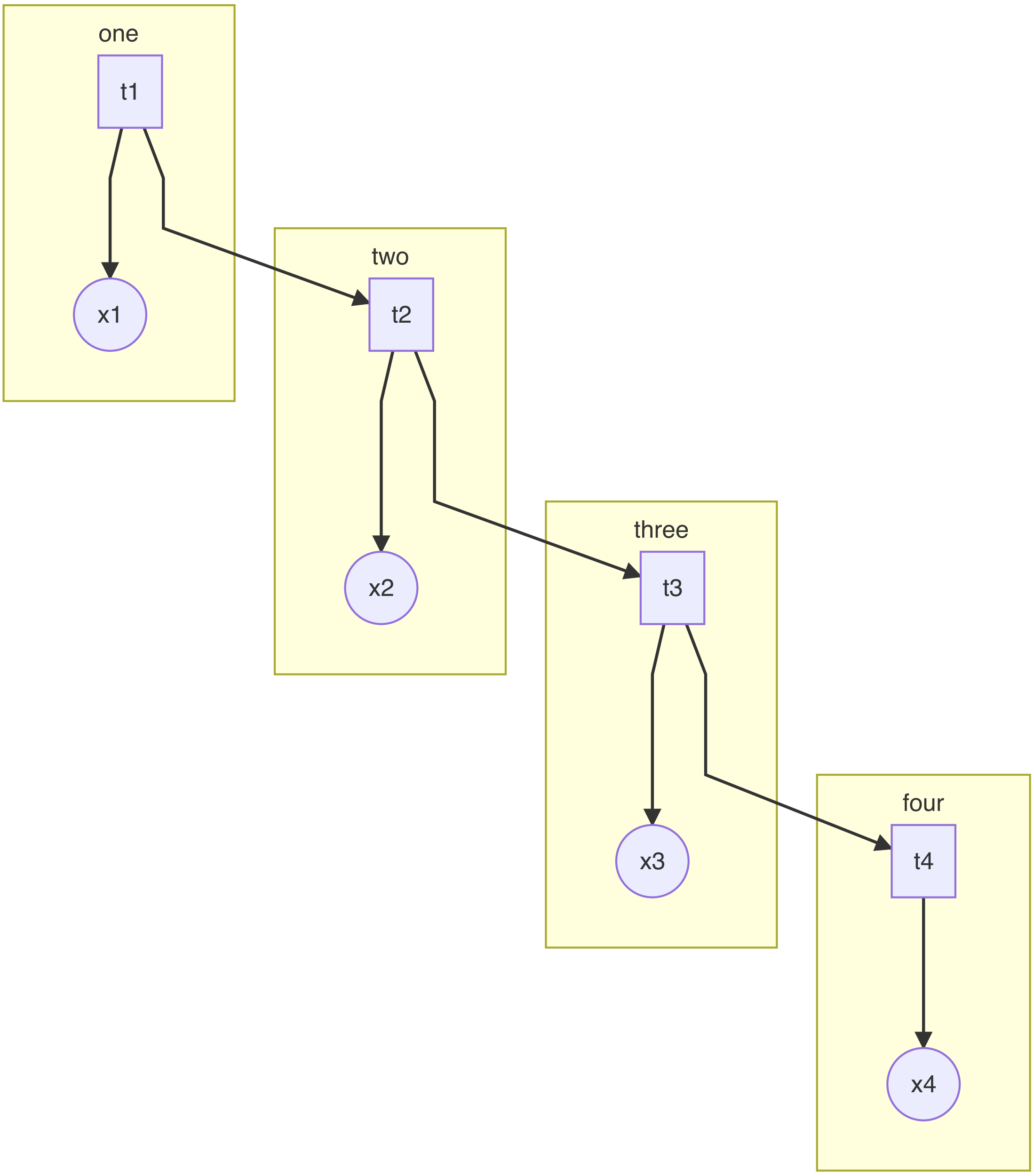


根据状态变量的特点，可以分为：

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，$V=\{v_1,v_2,\cdots,v_M\}$ 表示观测的值域，i_t 表示状态变量，I 为状态序列，$Q=\{q_1,q_2,\cdots,q_N\}$ 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）：

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

2. 观测独立假设：

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

HMM 要解决三个问题：

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

Evaluation

$$
p(O|\lambda)=\sum\limits_{I}p(I,O|\lambda)=\sum\limits_{I}p(O|I,\lambda)p(I|\lambda) \tag{3}
$$

$$
p(I|\lambda)=p(i_1,i_2,\cdots,i_t|\lambda)=p(i_t|i_1,i_2,\cdots,i_{t-1},\lambda)p(i_1,i_2,\cdots,i_{t-1}|\lambda) \tag{4}
$$

根据齐次 Markov 假设：

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

所以：

$$
p(I|\lambda)=\pi_1\prod\limits_{t=2}^Ta_{i_{t-1},i_t} \tag{6}
$$

又由于：

$$
p(O|I,\lambda)=\prod\limits_{t=1}^Tb_{i_t}(o_t) \tag{7}
$$

于是：

$$
p(O|\lambda)=\sum\limits_{I}\pi_{i_1}\prod\limits_{t=2}^Ta_{i_{t-1},i_t}\prod\limits_{t=1}^Tb_{i_t}(o_t) \tag{8}
$$

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

$$
p(O|\lambda)=\sum\limits_{i=1}^Np(O,i_T=q_i|\lambda)=\sum\limits_{i=1}^N\alpha_T(i) \tag{9}
$$

对 $\alpha_{t+1}(j)$：

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

利用观测独立假设：

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

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 $\beta_t(i)=p(o_{t+1},o_{t+1},\cdots,o_T|i_t=i,\lambda)$：

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

对于这个 $\beta_1(i)$：

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

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：

$$\lambda_{MLE}=\mathop{argmax}_{\lambda}\,p(O|\lambda) \tag{14}$$

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

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

其中，X 是观测变量，Z 是隐变量序列。于是：

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

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

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

对 π^{t+1}：

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

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

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

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

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

于是：

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

对上式求和：

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

所以：

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

Decoding

Decoding 问题表述为：

$$I=\mathop{argmax}\limits_{I}p(I|O,\lambda) \tag{24}$$

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：

$$\delta_t(j)=\max\limits_{i_1,\cdots,i_{t-1}}p(o_1,\cdots,o_t,i_1,\cdots,i_{t-1},i_t=q_i) \tag{25}$$

于是：

$$\delta_{t+1}(j)=\max\limits_{1\le i\le N}\delta_t(i)a_{ij}b_j(o_{t+1}) \tag{26}$$

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：

$$\psi_{t+1}(j)=\mathop{argmax}\limits_{1\le i\le N}\delta_t(i)a_{ij} \tag{27}$$

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

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

4. 平滑：$p(z_t|x_1,\cdots,x_T)$，Offline

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

根据概率图的条件独立性，有：

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

这个算法叫做前向后向算法。

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

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

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