隐马尔科夫模型

常宝宝
北京大学计算语言学研究所
chbb@pku.edu.cn

隐马尔科夫模型

- 隐马尔科夫模型(Hidden Markov Model, HMM)是对马尔科夫模型的一种扩充。
- 隐马尔科夫模型的基本理论形成于上世纪60年代末期和70年代初期。(L.E.Baum)
- 70年代，CMU的J.K.Baker以及IBM 的F.Jelinek 等把隐马尔科夫模型应用于语音识别。
- 隐马尔科夫模型在计算语言学中有着广泛的应用。例如隐马尔科夫模型在词类自动标注中的应用。

马尔科夫模型

- 马尔科夫模型是由Andrei A. Markov于1913年提出的。
- 设S是一个由有限个状态组成的集合。

  $S=\{1, 2, 3, \ldots, n-1, n\}$

  随机序列 X 在 t 时刻所处的状态为q_t,其中 $q_t \in S$，若有：

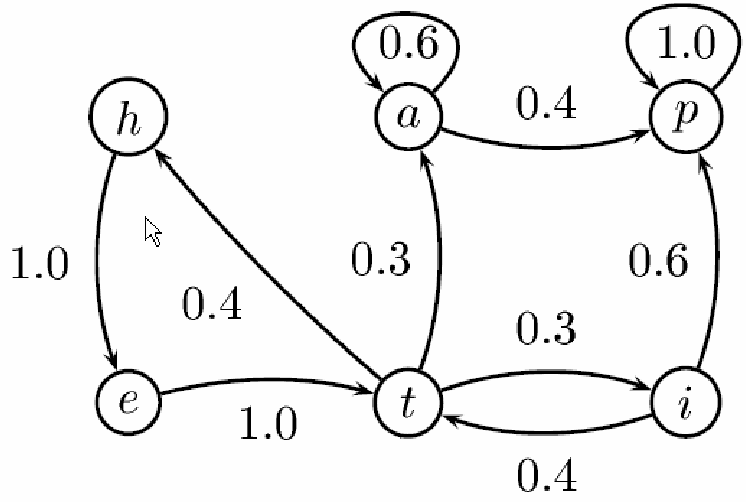
$$P(q_t = j \mid q_{t-1} = i, q_{t-2} = k, \ldots) = P(q_t = j \mid q_{t-1} = i)$$

  则随机序列 X 构成一个一阶马尔科夫链。(Markov Chain)
- 令$P(q_t = j \mid q_{t-1} = i) = P(q_s = j \mid q_{s-1} = i)$ 则对于所有的i,j有下面的关系成立：$a_{ij} = P(q_t = j \mid q_{t-1} = i) \quad 1 \le i, j \le n$

$$a_{ij} \ge 0 \qquad \sum_{j=1}^{n} a_{ij} = 1$$

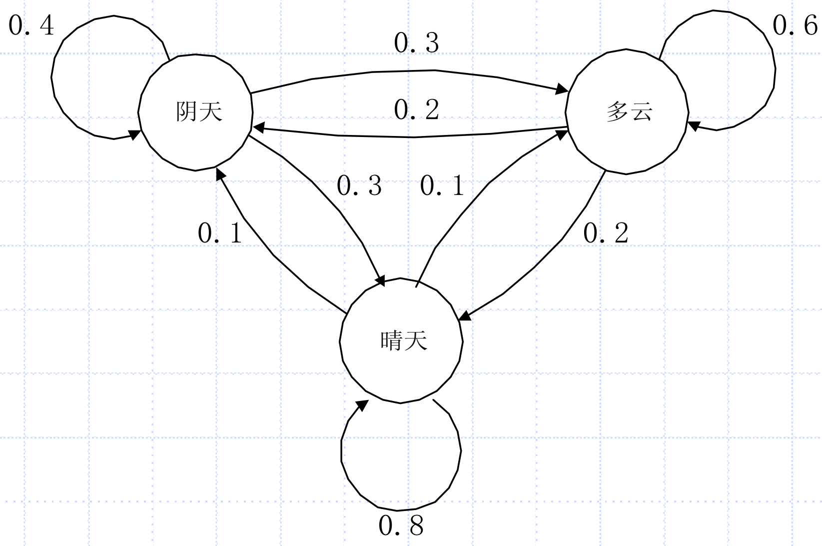
马尔科夫模型

- 一阶马尔科夫模型可以描述为一个二元组(S, A)，S是状态的集合，而A是所有状态转移概率组成的一个n行n列的矩阵，其中每一个元素a_{ij}为从状态i转移到状态j的概率 。
- 同有限状态自动机类似，状态转移关系也可以用状态转换图来表示。



马尔科夫模型举例

- 天气的变化，三种状态{1(阴天), 2(多云), 3(晴天)}。
- 今天的天气情况仅和昨天的天气状况有关。
- 根据对历史数据的观察得到下列状态转移关系。



$$A=\begin{bmatrix}0.4 & 0.3 & 0.3\\ 0.2 & 0.6 & 0.2\\ 0.1 & 0.1 & 0.8\end{bmatrix}$$

马尔科夫模型

- 对于马尔科夫模型，给定了观察序列，同时也就确定了状态转换序列。例如有关天气状况的观察序列。

  (晴 晴 晴 阴 阴 晴 云 晴)

  则状态转换序列为

  (3, 3, 3, 1, 1, 3, 2, 3)
- 如果把晴天称为状态3的输出，阴天称为状态1的输出，多云称为状态2的输出。根据观察到的输出序列就可以决定模型中的状态转换序列。(每个状态只有唯一的输出值)

坛子与小球

在一个房间中，假定有 N 个坛子，每个坛子中都装有不同颜色的小球，并且假定总共有 M 种不同颜色的小球。

一个精灵在房间中首先随机地选择一个坛子，再从这个坛子中随机选择一个小球，并把小球的颜色报告给房间外面的人员记录下来作为观察值。

精灵然后把球放回到坛子中，以当前的坛子为条件再随机选择一个坛子，从中随机选择一个小球，并报告小球的颜色，然后放回小球，如此继续…，随着时间的推移，房间外的人会得到由这个过程产生的一个小球颜色的序列。

坛子与小球

- 如果令每一个坛子对应与一个状态，可以用一个一阶马尔科夫过程来描述坛子的选择过程。
- 在马尔科夫过程中，每个状态只有一个输出，但在坛子和小球的问题中。可以从每个坛子中拿出不同颜色的小球。也就是每个状态能按照特定的概率分布产生多个输出。
- 在坛子与小球问题中，如果给定一个观察序列(不同颜色的小球序列)，不能直接确定状态转换序列(坛子的序列)，因为状态转移过程被隐藏起来了。所以这类随机过程被称为隐马尔科夫过程。

隐马尔科夫模型

- 隐马尔可夫模型 λ 可以表示为一个五元组(S, V, A, B, π)
  - S 是一组状态的集合。
    $S = \{1, 2, 3, \ldots, N\}$ (状态n对应坛子n)
  - V 是一组输出符号组成的集合。
    $V = \{v_1, v_2, v_3, \ldots, v_M\}$ (v_1对应红色小球)
  - A 是状态转移矩阵，N 行 N 列。
    $A = [a_{ij}]$
    $a_{ij} = P(q_{t+1} = j \mid q_t = i), 1 \le i, j \le N$

隐马尔科夫模型

- B 是输出符号的概率分布。
  $B = \{ b_j(k) \}$ $b_j(k)$ 表示在状态j时输出符号v_k的概率
  $b_j(k) = P(v_k \mid j), 1 \leqslant k \leqslant M , 1 \leqslant j \leqslant N$
- π 是初始状态概率分布 $\pi = \{ \pi_i \}$
  $\pi_i = P(q_1 = i)$ 表示时刻1选择某个状态的概率。

◆ 隐马尔可夫过程是一个双重随机过程，其中一重随机过程不能直接观察到，通过状态转移概率矩阵描述。另一重随机过程输出可以观察的观察符号，这由输出概率来定义。

利用隐马尔科夫模型生成观察序列

- 可以把隐马尔可夫模型看做符号序列的生成装置，按照一定的步骤，隐马尔可夫模型可以生成下面的符号序列：

$$O = (o_1\ o_2\ o_3\ \ldots\ o_T)$$

1. 令 $t = 1$，按照初始状态概率分布 π 选择一个初始状态 $q_1 = i$。
2. 按照状态 i 输出符号的概率分布 $b_i(k)$ 选择一个输出值 $o_t = v_k$。
3. 按照状态转移概率分布 a_{ij} 选择一个后继状态 $q_{t+1} = j$。
4. 若 $t < T$，令 $t = t + 1$，并且转移到算法第2步继续执行，否则结束。

抛掷硬币

- 三枚硬币，随机选择一枚，进行抛掷，记录抛掷结果。可以描述为一个三个状态的隐马尔科夫模型λ。

  $\lambda = (S, V, A, B, \pi)$，其中

  $S = \{1, 2, 3\}$

  $V = \{H, T\}$

  A 如下表所示

	1	2	3
1	0.9	0.05	0.05
2	0.45	0.1	0.45
3	0.45	0.45	0.1

  B 如下表所示

	1	2	3
H	0.5	0.75	0.25
T	0.5	0.25	0.75

  $\pi = \{1/3, 1/3, 1/3\}$

抛掷硬币

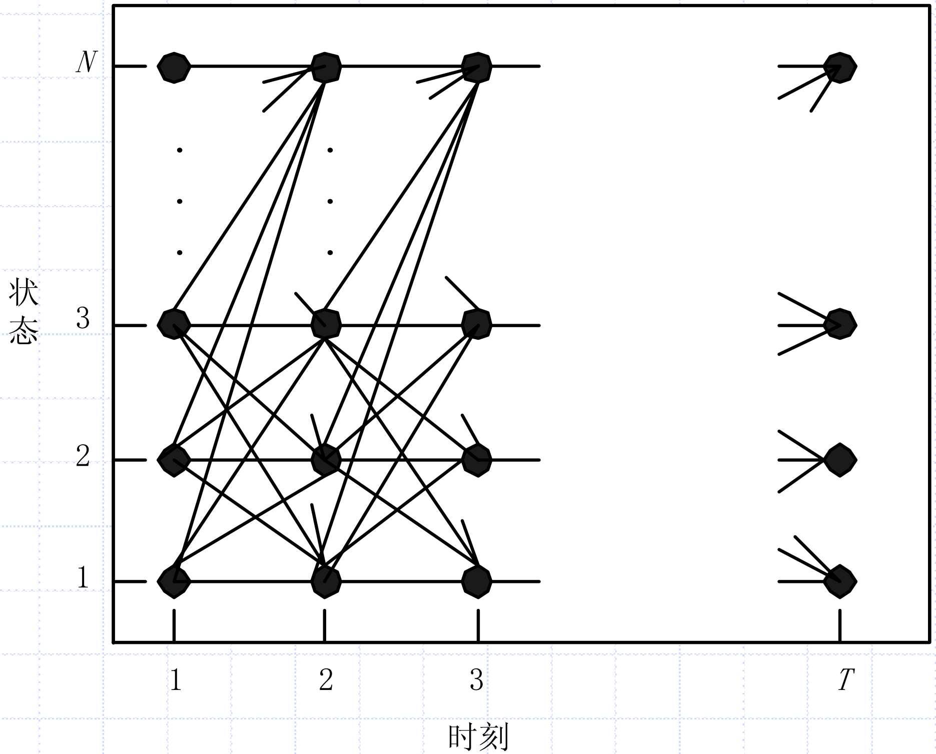
- 问题一：
  给定上述模型，观察到下列抛掷结果的概率是多少？
  $O = (H\ H\ H\ H\ T\ H\ T\ T\ T\ T)$
- 问题二：
  给定上述模型，若观察到上述抛掷结果，最可能的硬币选择序列(状态转换序列)是什么？
- 问题三：
  若上述模型中的状态转移矩阵 A、状态输出概率 B 和初始状态分布 π 均未知，如何根据观察序列得到它们？

隐马尔科夫模型的三个问题

- 给定HMM $\lambda = (A, B, \pi)$
  给定观察序列 $O = (o_1\ o_2\ o_3\ \ldots\ o_T)$
  如何有效地计算出观察序列的概率，即$P(O|\lambda)$?
  (估算问题) (另一种语言模型)
- 给定HMM $\lambda = (A, B, \pi)$
  给定观察序列$O = (o_1\ o_2\ o_3\ \ldots\ o_T)$
  如何寻找一个状态转换序列 $q = (q_1\ q_2\ q_3\ \ldots\ q_T)$，使得该状态转换序列最有可能产生上述观察序列？
  (解码问题)
- 在模型参数未知或不准确的情况下，如何根据观察序列$O = (o_1\ o_2\ o_3\ \ldots\ o_T)$求得模型参数或调整模型参数，即如何确定一组模型参数，使得
  $P(O|\lambda)$最大？
  (学习问题 或 训练问题)

估算观察序列概率

- 对隐马尔可夫模型而言，状态转换序列是隐藏的，一个观察序列可能由任何一种状态转换序列产生。因此要计算一个观察序列的概率值，就必须考虑所有可能的状态转换序列。



- 上图表示了产生观察序列$O = (o_1\ o_2\ o_3 \ldots o_T)$的所有可能的状态转换序列。

估算观察序列概率

- 给定λ, 以及状态转换序列$q = (q_1\ q_2\ q_3 \ldots q_T)$产生观察序列$O = (o_1\ o_2\ o_3 \ldots o_T)$的概率可以通过下面的公式计算：

  $$P(O|q, \lambda) = b_{q1}(o_1)\, b_{q2}(o_2)\, b_{q3}(o_3) \ldots b_{qT}(o_T)$$

  给定λ, 状态转换序列$q = (q_1\ q_2\ q_3 \ldots q_T)$的概率可以通过下面的公式计算：

  $$P(q | \lambda) = \pi_{q1}\, a_{q1q2}\, a_{q2q3} \ldots a_{qT\text{-}1qT}$$

  则O和q 的联合概率为：

  $$P(O, q | \lambda) = P(O|q, \lambda)\, P(q | \lambda)$$

- 考虑所有的状态转换序列，则

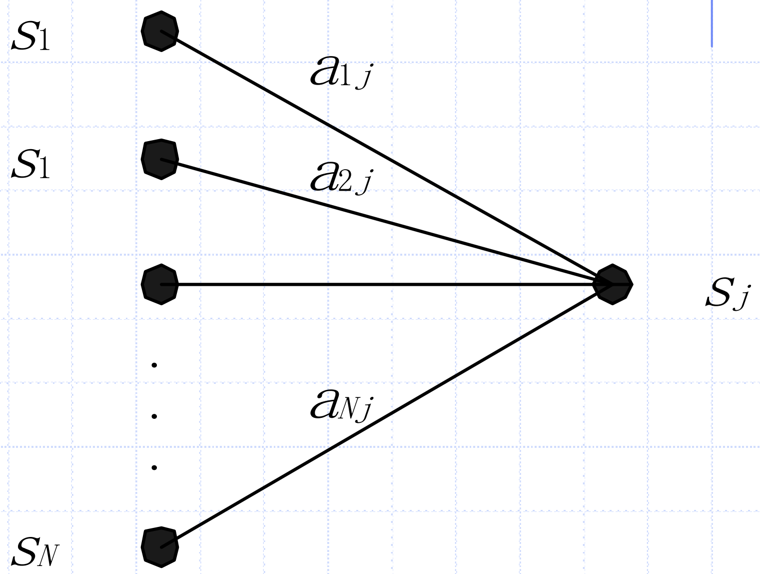
$$P(O|\lambda) = \sum_{q} P(O, q|\lambda) = \sum_{q1,q2,\ldots qT} \pi_{q1} b_{q1}(o_1) a_{q1q2} b_{q2}(o_2) \ldots a_{qT-1qT} b_{qT}(o_T)$$

估算观察序列概率

- 理论上，可以通过穷举所有可能的状态转换序列的办法计算观察序列O的概率。
- 实际上，这样做并不现实。
  - 可能的状态转换序列共有N^T个。
  - 需要做$(2T-1)N^T$次乘法运算，N^T-1 次加法运算。
  - 若$N = 5$，$T=100$，则 $(2\times 100-1)\times 5^{100}\approx 10^{72}$
- 需要寻找更为有效的计算方法。

向前算法(Forward Algorithm)

- 向前变量 $\alpha_t(i)$
  $\alpha_t(i) = P(o_1\ o_2\ o_3\ \ldots\ o_t, q_t = i \mid \lambda)$
- $\alpha_t(i)$的含义是，给定模型λ，时刻t，处在状态i，并且部分观察序列为$o_1\ o_2\ o_3\ \ldots\ o_t$ 的概率。
- 显然有$\alpha_1(i) = \pi_i b_i(o_1)\ (1\leqslant i\leqslant N)$
- 若$\alpha_t(i)\ (1\leqslant i\leqslant N)$已知，如何计算$\alpha_{t+1}(i)$?



$$\alpha_{t+1}(j) = \left[\sum_{i=1}^{N} \alpha_t(i) a_{ij}\right] b_j(o_{t+1}) \qquad 1 \le t \le T-1, 1 \le j \le N$$

向前算法

1. 初始化

$$\alpha_1(i) = \pi_i b_i(o_1) \ (1 \leqslant i \leqslant N)$$

2. 迭代计算

$$\alpha_{t+1}(j) = \left[\sum_{i=1}^{N} \alpha_t(i) a_{ij}\right] b_j(o_{t+1}) \qquad 1 \le t \le T-1, 1 \le j \le N$$

3. 终止

$$P(O \mid \lambda) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_T(i)$$

- 计算量
  - $N(N+1)(T-1)+N$次乘法
  - $N(N-1)(T-1)$次加法
  - 若$N = 5$，T=100，则大约需要5000次运算

计算实例

◆ 抛掷硬币问题，计算观察到$(H\ H\ T)$的概率。

$\alpha_t(i)$	H	H	T	$P(H\ H\ T \mid \lambda)$
1	0.16667	0.15000	0.08672	
2	0.25000	0.05312	0.00684	0.11953
3	0.08333	0.03229	0.02597	

向后算法(Backward Algorithm)

- 向后变量 $\beta_t(i)$
  $\beta_t(i) = P(o_{t+1}o_{t+2}\ldots o_T \mid q_t = i, \lambda)$
- $\beta_t(i)$的含义是，在给定模型λ，时刻t，处在状态i，并且部分观察序列为$o_{t+1}o_{t+2}\ldots o_T$的概率。
- $\beta_T(i) = 1\ (1 \leqslant i \leqslant N)$
- 若$\beta_{t+1}(i)\ (1 \leqslant i \leqslant N)$已知，如何计算$\beta_t(i)$

$$\beta_t(i) = \sum_{j=1}^{N} a_{ij} b_j(o_{t+1}) \beta_{t+1}(j) \quad 1 \le t \le T-1, 1 \le j \le N$$

向后算法

1. 初始化

$$\beta_T(i) = 1 \ (1 \leqslant i \leqslant N)$$

2. 迭代计算

$$\beta_t(i) = \sum_{j=1}^{N} a_{ij} b_j(o_{t+1}) \beta_{t+1}(j) \quad 1 \le t \le T-1, 1 \le j \le N$$

3. 终止

$$P(O \mid \lambda) = \sum_{i=1}^{N} \pi_i b_i(o_1) \beta_1(i)$$

计算实例

- 抛掷硬币问题，计算观察到$(H\ H\ T)$的概率。

	H	H	T		$P(H\ H\ T\mid\lambda)$
$\beta_t(i)$	$\pi_i b_i(H)\beta_1(i)$	$\beta_1(i)$	$\beta_2(i)$	$\beta_3(i)$	
1	0.04203	0.25219	0.50000	1.00000	
2	0.05074	0.20297	0.58750	1.00000	0.11953
3	0.02676	0.32109	0.41250	1.00000	

求解最佳状态转换序列

- 隐马尔可夫模型的第二个问题是计算出一个能最好解释观察序列的状态转换序列 。
- 理论上，可以通过枚举所有的状态转换序列，并对每一个状态转换序列q计算$P(O, \mathrm{q}\,|\lambda)$，能使$P(O, \mathrm{q}\,|\lambda)$取最大值的状态转换序列q*就是能最好解释观察序列的状态转换序列，即：

$$\mathrm{q}^* = \arg\max_{\mathrm{q}} P(O,\mathrm{q}\,|\,\lambda)$$

- 同样，这不是一个有效的计算方法，需要寻找更好的计算方法。

韦特比算法(Viterbi Algorithm)

- 韦特比变量 $\delta_t(i)$

$$\delta_t(i) = \max_{q1,q2,\dots qt-1} P(q_1 q_2 \dots q_{t-1}, q_t = i, o_1 o_2 \dots o_t \mid \lambda)$$

- $\delta_t(i)$的含义是，给定模型λ，在时刻t处于状态i，观察到$o_1\ o_2\ o_3\ \dots\ o_t$的最佳状态转换序列为$q_1q_2\dots q_t$的概率。
- $\delta_1(i) = \pi_i b_i(o_1)$，$1 \leqslant i \leqslant N$
- 若$\delta_t(i)(1 \leqslant i \leqslant N)$已知，如何计算$\delta_{t+1}(i)$?

$$\delta_{t+1}(j) = [\max_i \delta_t(i) a_{ij}] b_j(o_{t+1})$$

- 如何记录路径? 设定T个数组$\psi_1(N)$, $\psi_2(N)$, $\dots$ $\psi_T(N)$

  $\psi_t(i)$ 记录在时刻t到达状态i的最佳状态转换序列t-1时刻的最佳状态。

韦特比算法

1. 初始化

$$\delta_1(i) = \pi_i b_i(o_1), \quad 1 \leqslant i \leqslant N$$

$$\psi_1(i) = 0$$

2. 迭代计算

$$\delta_t(j) = \max_{1\le i\le N}[\delta_{t-1}(i)a_{ij}]b_j(o_t) \qquad \psi_t(j) = \arg\max_{1\le i\le N}[\delta_{t-1}(i)a_{ij}]$$

3. 终止

$$P^* = \max_{1\le i\le N}[\delta_T(i)] \qquad q_T^* = \arg\max_{1\le i\le N}[\delta_T(i)]$$

4. 求解最佳路径

$$q_t^* = \psi_{t+1}(q_{t+1}^*), \quad t = T-1, T-2, \ldots, 1$$

计算实例

- 抛掷硬币问题，观察到$(H\ H\ T)$，寻找产生该观察序列的最佳路径以及组佳路径的概率。

$\delta_t(i)$	H	H	T	P^*
1	0.16667	0.07500	0.03375	
2	0.25000	0.02812	0.00316	0.03375
3	0.08333	0.02812	0.00949	

$\psi_t(i)$	$\psi_1(i)$	$\psi_2(i)$	$\psi_3(i)$	q^*
1	0	1	1	
2	0	3	3	1
3	0	2	2	

- 最佳状态转换序列为1 1 1

参数学习

- 隐马尔科夫模型的第三个问题是如何根据观察序列$O = (o_1\ o_2\ o_3\ \ldots\ o_T)$求得模型参数或调整模型参数，即如何确定一组模型参数使得$P(O|\lambda)$最大？
- 隐马尔科夫模型的前两个问题均假设模型参数已知，第三个问题是模型参数未知，求最佳模型的问题，是三个问题中最为困难的问题。

有指导的的学习(supervised learning)

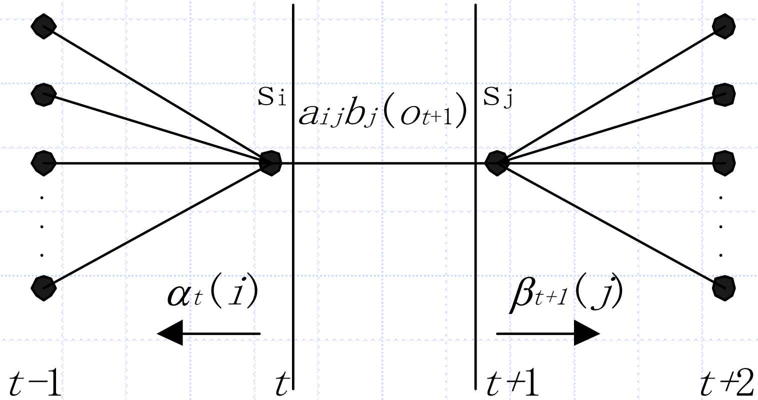
- 在模型(λ)未知的情况下，如果给定观察序列的同时，也给定了状态转换序列，此时可以通过有指导的学习方法学习模型参数。例如给定下面的训练数据，可以通过最大似然估计法估计模型参数：
  $H/1 \quad H/1 \quad T/1 \quad T/2 \quad H/3 \quad T/5 \quad \ldots$
  $T/2 \quad H/1 \quad T/2 \quad H/3 \quad H/3 \quad H/1 \quad \ldots$
- 参数学习非常简单，在训练数据足够大的前提下，效果不错。
- 缺点，状态信息未知时无法使用。或者要由人工标注状态信息，代价高。
- 在NLP中，在无指导学习效果不佳时，需要采用有指导学习。

无指导的学习(unsupervised learning)

- 在模型(λ)未知的情况下，如果仅仅给定了观察序列，此时学习模型的方法被称做无指导的学习方法。
- 对于隐马尔科夫模型而言，采用无指导学习方法，没有解析方法。通常要首先给定一组不准确的参数，再通过反复迭代逐步求精的方式调整模型参数，最终使参数稳定在一个可以接受的精度。
- 利用无指导的学习方法估计隐马尔科夫模型参数时，并不能一定保证求得最优模型，一般能得到一个局部最优模型。

Baum-Welch Algorithm

- 定义变量$\xi_t(i,j)$
  $\xi_t(i,j) = P(q_t = i, q_{t+1} = j \mid O, \lambda)$
- $\xi_t(i,j)$含义是，给定模型λ和观察序列O，在时刻t处在状态i，时刻t+1处在状态j的概率。



- $\xi_t(i,j)$可以进一步写成：

$$\xi_t(i,j) = \frac{P(q_t = i, q_{t+1} = j, O \mid \lambda)}{P(O \mid \lambda)} = \frac{\alpha_t(i) a_{ij} b_j(o_{t+1}) \beta_{t+1}(j)}{P(O \mid \lambda)}$$

$$= \frac{\alpha_t(i) a_{ij} b_j(o_{t+1}) \beta_{t+1}(j)}{\sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \alpha_t(i) a_{ij} b_j(o_{t+1}) \beta_{t+1}(j)}$$

Baum-Welch Algorithm

- 定义变量$\gamma_t(i)$，令其表示在给定模型以及观察序列的情况下，t时刻处在状态i的概率，则有：

$$\gamma_t(i) = \sum_{j=1}^{N} \xi_t(i, j)$$

$\sum_{t=1}^{T-1} \gamma_t(i)$ 观察序列O中从状态i出发的转换的期望次数

$\sum_{t=1}^{T-1} \xi_t(i, j)$ 观察序列O中从状态i到状态j的转换的期望次数

Baum-Welch Algorithm

- 关于π, A, B，一种合理的估计方法如下

$$\bar{\pi}_i = \gamma_1(i)$$

在$t=1$时处在状态i的期望次数

$$\bar{a}_{ij} = \frac{\sum_{t=1}^{T-1} \xi_t(i,j)}{\sum_{t=1}^{T-1} \gamma_t(i)}$$

从状态i到状态j的转换的期望次数除以从状态i出发的转换的期望次数

当$o_t = v_k$时，$\delta(o_t, v_k)=1$
当$o_t \neq v_k$时，$\delta(o_t, v_k)=0$

$$\bar{b}_j(k) = \frac{\sum_{t=1}^{T} \gamma_t(j) \times \delta(o_t, v_k)}{\sum_{t=1}^{T} \gamma_t(j)}$$

在状态j观察到v_k的期望次数

处在状态j的期望次数

Baum-Welch Algorithm

- 利用上述结论，即可进行模型估算
- 选择模型参数初始值，初始值应满足隐马尔科夫模型的要求，即：

$$\sum_{i=1}^{N}\pi_i = 1 \qquad \sum_{j=1}^{N}a_{ij} = 1,\ \ 1 \le i \le N \qquad \sum_{k=1}^{M}b_j(k) = 1,\ 1 \le j \le N$$

- 将初始值代入前面的公式中，计算一组新的参数 $\overline{\pi},\overline{A},\overline{B}$
- 再将新的参数代入，再次计算更新的参数。
- 如此反复，直到参数收敛。

Baum-Welch Algorithm

- Baum-Welch算法是一种EM算法。
- E-step:
  - 计算$\xi_t(i, j)$和$\gamma_t(i)$
- M-step:
  - 估计模型$\overline{\lambda}$
- 终止条件

$$|log(P(O|\lambda_{i+1})) - log(P(O|\lambda_i))| < \varepsilon$$

Baum-Welch Algorithm

- Baum等人证明要么估算值$\bar{\lambda}$和估算前的参数值λ相等，要么估算值$\bar{\lambda}$比估算前的参数值λ更好的解释了观察序列O。
- 参数最终的收敛点并不一定是一个全局最优值，但一定是一个局部最优值。

L.R.Rabiner, A Tutorial on Hidden Markov Models and Selected Applications in Speech recognition, Proc. IEEE, 77(2): 257-286, 1989

隐马尔科夫模型的实现

- 浮点溢出问题
  - 对于韦特比算法，采用取对数的方式
  - 对于Baum-Welch算法，采用放大因子
  - 对于向前算法采用放大因子以及取对数的方式。