

介绍



笔记简介:

• 面向对象:深度学习初学者

• 依赖课程:**线性代数,统计概率**,优化理论,图论,离散数学,微积分,信息论

知乎专栏:

https://zhuanlan.zhihu.com/p/693738275

Github & Gitee 地址:

https://github.com/mymagicpower/AIAS/tree/main/deep_learning

https://gitee.com/mymagicpower/AIAS/tree/main/deep_learning

* 版权声明:

- 仅限用于个人学习
- 禁止用于任何商业用途

马尔可夫假设



马尔可夫假设 (Markov assumption) 是马尔可夫过程 (Markov process) 和马尔可夫链 (Markov chain) 的基础。它的核心思想是,未来的状态只依赖于当前的状态,而与过去的状态无关。

定义:马尔可夫假设指出,给定当前状态,未来状态的条件概率分布不依赖于过去的状态。数学上,如果 X_t 表示在时间 t 的状态,那么马尔可夫假设可以表示为:

$$P(X_{t+1}|X_t) = P(X_{t+1}|X_t, X_{t-1}, \dots, X_0)$$

这意味着,状态 X_{t+1} 的概率只取决于当前的状态 X_t ,而与之前的所有状态 $X_{t-1},...,X_0$ 无关。

马尔可夫假设



马尔可夫过程:在**连续**时间马尔可夫过程中,马尔可夫假设也适用,尽管表示形式稍有不同。此时,状态的转移依赖于状态转移率,而非离散的转移概率。

马尔可夫链:马尔可夫链是马尔可夫过程的一种特例,其中时间参数是离散的。在**离散**时间马尔科夫链中,这一假设简化了状态转移的计算。马尔可夫链由状态空间、转移矩阵和初始状态组成:

• 状态空间: 所有可能状态的集合。

• **转移矩阵**:描述从一个状态转移到另一个状态的概率。转移矩阵的每一行表示从当前状态转移到所有其他状态的概率分布。

隐马尔科夫模型 (HMM) :在HMM中,马尔可夫假设被用于隐状态的转移,这些隐状态通过观测变量间接观察到。 在HMM中,有两个重要的假设:

• 马尔可夫假设: 当前隐状态仅依赖于前一个隐状态。

观测独立性假设: 当前观测仅依赖于当前马尔可夫链的状态,与其他隐状态和观测无关。



马尔可夫链 - 状态转移概率矩阵

对于一个马尔可夫状态 s 及其后续状态 s',状态转移概率 定义为:

$$P_{ss'} = P[X_{t+1} = s' | X_t = s]$$

状态转移概率矩阵 P 定义为从所有的状态 s 到所有的后续状态 s' 的转移概率:

$$\boldsymbol{P} = \begin{bmatrix} P_{11} & P_{12} & \dots & P_{1n} \\ P_{21} & P_{22} & \dots & P_{2n} \\ \dots & & & & \\ P_{n1} & P_{n2} & \dots & P_{nn} \end{bmatrix}$$

矩阵中行号表示当前状态 s, 列号表示到达的后续状态 s'。由概率分布的性质可得,转移矩阵是一个<u>正定矩阵</u>,且每行元素之和等于1。

$$\forall i, j: P_{i,j} > 0, \forall i: \sum_{i} P_{i,j} = 1$$

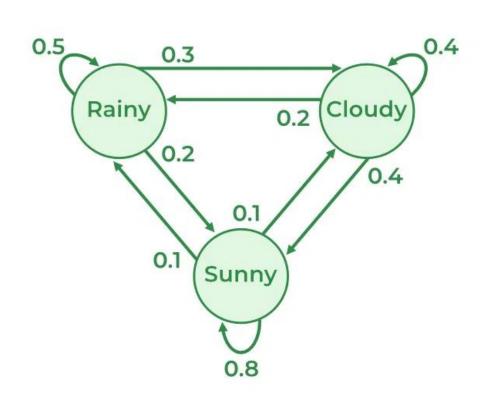
按相同的方式也可定义n-步转移矩阵: 由n-步转移概率的性质 (Chapman–Kolmogorov等式) 可知, n-步转移矩阵 是其之前所有转移矩阵的连续矩阵乘法:

$$\mathbf{P}^{(t)} = \mathbf{P}^{(t-1)} \cdots \mathbf{P}^{(1)} \mathbf{I}$$



马尔科夫链 - 状态转移概率矩阵

假设我们有三种状态: 晴天、多云和雨天。这个马尔可夫链的转移矩阵可能如下所示:



	sunny	cloudy	rainy
sunny	0.8	0.1	0.1
cloudy	0.4	0.4	0.2
rainy	0.2	0.3	0.5

$$P = \begin{bmatrix} 0.8 & 0.1 & 0.1 \\ 0.4 & 0.4 & 0.2 \\ 0.2 & 0.3 & 0.5 \end{bmatrix}$$

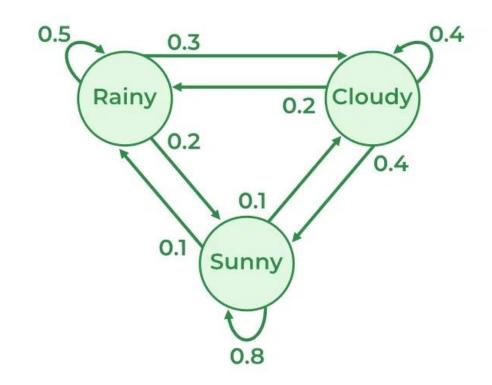
马尔科夫链 - 状态转移概率矩阵



$$\pi(0) = \begin{bmatrix} 0.2\\0.4\\0.4 \end{bmatrix}$$

$$\pi(1) = P\pi(0) = \begin{bmatrix} 0.8 & 0.1 & 0.1 \\ 0.4 & 0.4 & 0.2 \\ 0.2 & 0.3 & 0.5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.2 \\ 0.4 \\ 0.4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.24 \\ 0.32 \\ 0.36 \end{bmatrix}$$

$$\pi(2) = P^{2}\pi(0) = \begin{bmatrix} 0.8 & 0.1 & 0.1 \\ 0.4 & 0.4 & 0.2 \\ 0.2 & 0.3 & 0.5 \end{bmatrix}^{2} \begin{bmatrix} 0.2 \\ 0.4 \\ 0.4 \end{bmatrix}$$



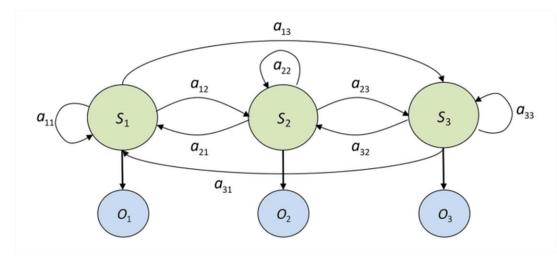


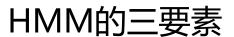
隐马尔可夫模型 (Hidden Markov Model, HMM)

隐马尔可夫模型 (Hidden Markov Model, HMM) 是一种用于处理时间序列数据的统计模型,特别适用于存在潜在 (隐藏) 状态的情况。它假设系统是一个马尔可夫过程,且观测值是从该过程的隐藏状态生成的。HMM主要用于序列数据分析,如语音识别、生物信息学、金融时间序列分析等。

基本概念

- **1.隐藏状态 (Hidden States)** : 系统的实际状态,无法直接观察。假设有N个隐藏状态。
- **2.观测值 (Observations)** : 可以直接观察到的输出。假设有M种可能的观测值。
- 3.状态转移概率 (State Transition Probabilities) : 从一个隐藏状态转移到另一个隐藏状态的概率。
- **4.观测概率 (Emission Probabilities)** : 在某一隐藏状态下生成某一观测值的概率。
- **5.初始状态概率 (Initial State Probabilities)** : 系统在时刻t=1处于某一隐藏状态的概率。







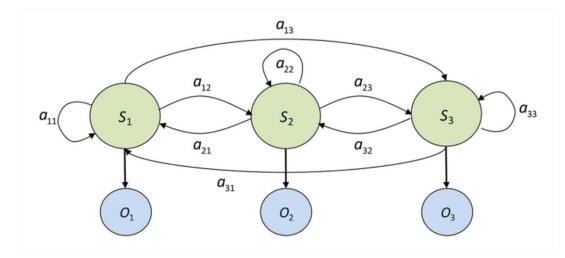
HMM由**三组参数定义:** $\lambda = (A, B, \pi)$ 。隐马尔可夫模型由初始状态向量 π 、状态转移矩阵A和观测概率矩阵B决定。 π 和A决定状态序列,B决定观测序列。

模型表示

- S 是所有可能状态的集合: $S = \{s_1, s_2, \dots, s_N\}$
- V 是所有可能观测的集合: $V = \{v_1, v_2, \dots, v_M\}$
- | 是长度为T的状态序列: $I = (i_1, i_2, \dots i_T)$
- O 是对应的观测序列: $O = (o_1, o_2, \cdots o_T)$

HMM 三组参数: $\lambda = (A, B, \pi)$ 。

- A 是状态转移矩阵, 大小为 *N* × *N*。
- B 是观测概率矩阵, 大小为 *N* × *M*。
- π 是初始状态概率向量,大小为 N 。



- N是可能的状态数
- · M是可能的观测数



HMM的三要素 - 状态转移概率矩阵 A

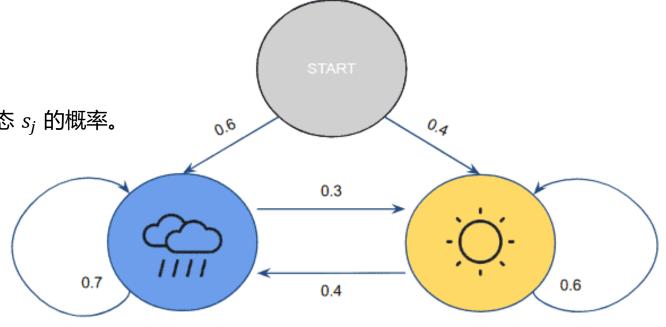
状态转移概率:从一个状态到另一个状态的概率被称为转移概率。通常,这些概率使用转移矩阵来定义。

A 是状态转移矩阵,大小为 $N \times N$ 。

• 通常记为矩阵 $A = [a_{ij}]_{N \times N}$

• 其中 $a_{ij} = P(y_t = s_j \mid y_{t-1} = s_i), 1 \le i, j \le N$ 。 表示在时刻 (t - 1) 处于状态为 s_i ,则在下一时刻t状态 s_j 的概率。

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.7 & 0.3 \\ 0.4 & 0.6 \end{bmatrix}$$



- N是可能的状态数
- M是可能的观测数



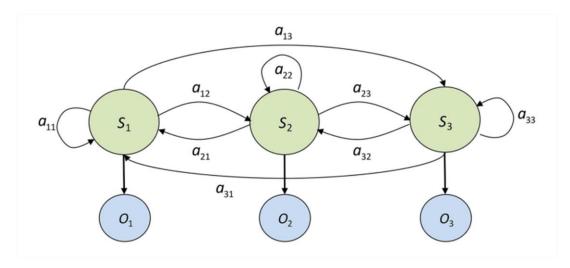


观测概率:即根据当前状态获得各个观测值的概率。

B 是观测概率矩阵, 大小为 $N \times M$:

- 通常记为矩阵 $\mathbf{B} = \begin{bmatrix} b_{ij} \end{bmatrix}_{N \times M}$

表示在时刻 t 处于状态为 s_i ,生成观测值 o_i 的概率 (也叫生成概率和发射概率).



- N是可能的状态数
- M是可能的观测数





 π 是初始状态概率向量,大小为 N 。

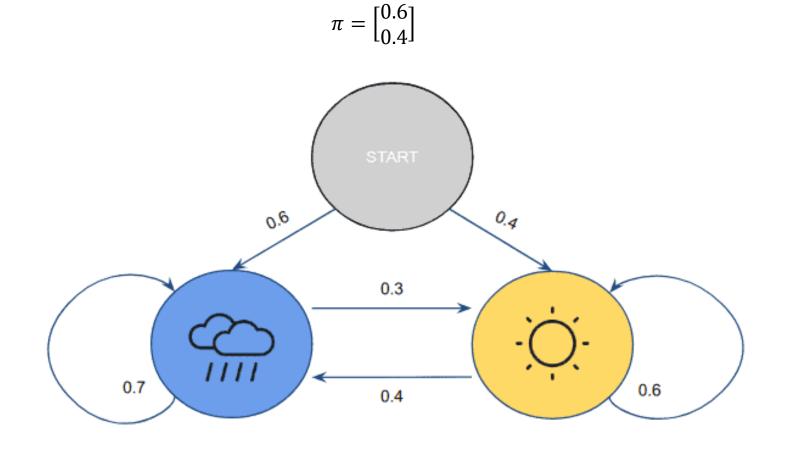
$$\pi = (\pi_1, \cdots, \pi_N)^{\mathrm{T}}$$

$$\pi_i = P(y_1 = s_i), 1 \le i \le N$$

$$0 \le \pi_i \le 1$$

$$\sum_{i=1}^{N} \pi_i = 1$$

 π_i 是初始状态 s_i 的概率。







马尔可夫假设: 当前隐状态仅依赖于前一个隐状态。

· 观测独立性假设:当前观测仅依赖于当前马尔可夫链的状态,与其他隐状态和观测无关。

我们并不知道给我们观测结果的确切序列。但是,首先让我们回答特定隐藏状态序列发生的概率。由于马尔可夫性质,每个状态转换是独立的,我们可以简单地相乘:

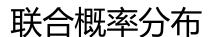
$$p(S \mid \theta) = \prod_{t=1}^{T} p(s_t \mid s_{t-1})$$

因此,得到特定隐藏序列 S 和特定观测序列 O 的联合概率为:

$$p(O,S) = \prod_{t=1}^{T} p(O_t \mid s_t, \theta) \prod_{t=1}^{T} p(s_t \mid s_{t-1})$$

所有变量的联合概率分布更详细的写法:

$$P(o_1, s_1, \dots, o_T, s_T) = P(s_1)P(o_1|s_1) \prod_{t=2}^{T} P(o_t|s_t)P(s_t|s_{t-1})$$





然而,我们需要考虑所有可能生成观测序列的状态序列组合。为此,我们可以对所有可能的隐藏状态序列的联合概率进行边缘化处理,并通过求和得到它们的发生概率:

$$p(0 \mid \theta) = \sum_{q=1}^{Q} p(0, S_q \mid \theta)$$

$$= \sum_{q=1}^{Q} \prod_{t=1}^{T} p(0_t \mid s_t, \theta) \prod_{t=1}^{T} p(s_t \mid s_{t-1})$$

其中Q是所有可能的隐藏状态序列的数量。

计算这个结果并不困难,但计算复杂度在实际情况下非常高。如果隐藏状态的数量是 N ,则有 N^T 个可能的状态序列。对于每个序列,我们需要进行 2T-1 次相乘。最后,我们需要对 N^T-1 个操作求和: $(2T-1)N^T+N^T-1$,或 $O(TN^T)$ 。

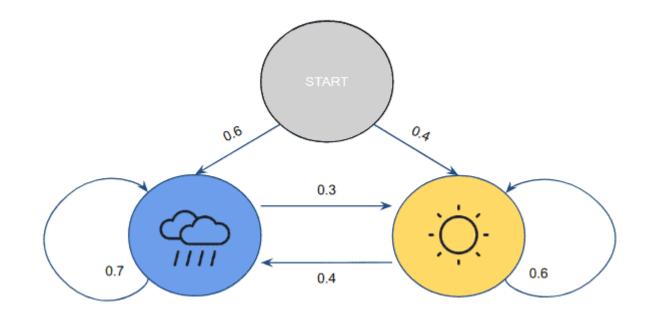




由于Alice对Bob所在地区的天气有一个概念,我们可以将她的知识转化为概率:

如果昨天是晴天,那么今天再次晴天的概率是 0.6 ,下雨的概率是 0.4 。如果昨天下雨,那么再次下雨的概率为 0.7 ,晴天的概率为 0.3 。

由于序列必须从某个地方开始,假定从雨天开始的概率是 0.6 , 从晴天开始的概率是 0.4 。则模型看起来如图:

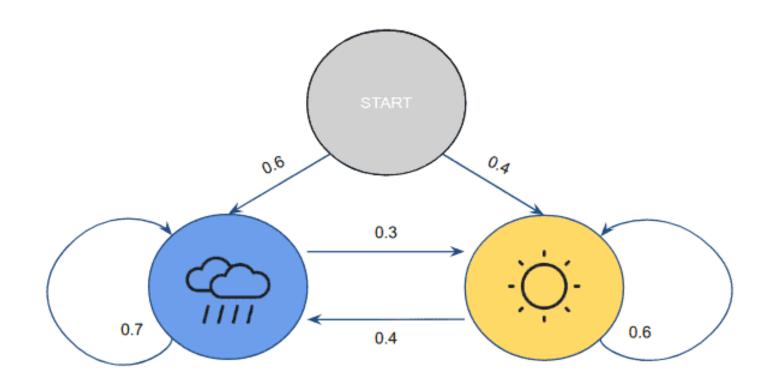




天气例子 – 初始状态概率

由于我们必须从某个地方开始,我们定义另一个包含初始概率的一维向量 π :

$$\pi = \begin{bmatrix} 0.6 \\ 0.4 \end{bmatrix}$$

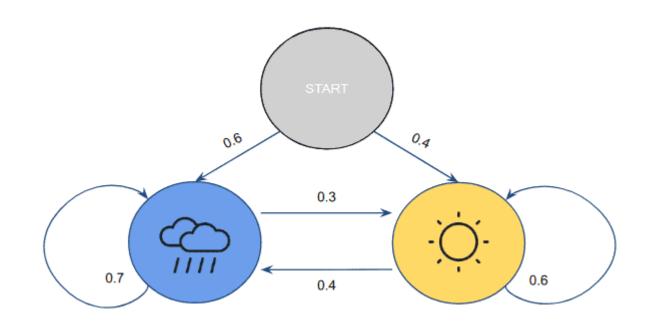




天气例子 – 状态转移矩阵

在我们的例子中, 转换矩阵是:

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.7 & 0.3 \\ 0.4 & 0.6 \end{bmatrix}$$



	rainy	Sunny
rainy	0.7	0.3
sunny	0.4	0.6

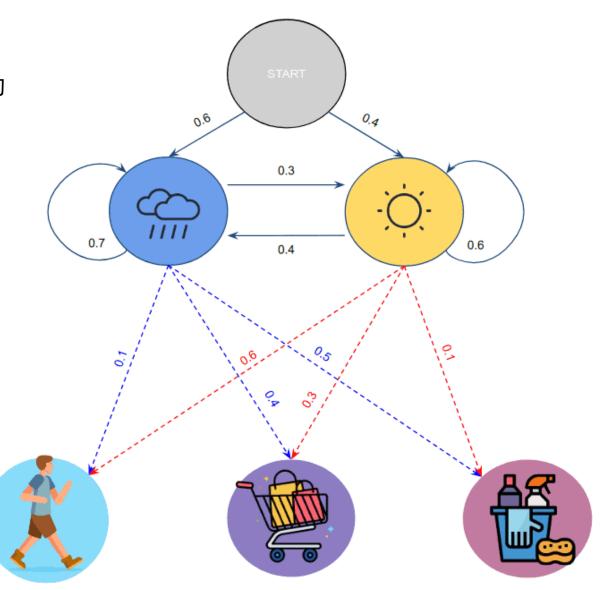


天气例子 - 发射 (观测) 概率矩阵

由于 Alice 每天都和 Bob 交谈,她已经收集了一系列对他行为的观察,并且知道得更清楚。根据她的观察,一组概率组合是:

$$B = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.1 & 0.4 & 0.5 \\ 0.6 & 0.3 & 0.1 \end{bmatrix}$$

	Walk	Shopping	Cleaning
rainy	0.1	0.4	0.5
sunny	0.6	0.3	0.1







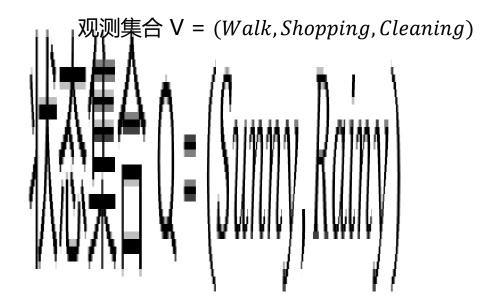
天气行为模型 $\lambda = (A, B, \pi)$

状态集合 Q = (Sunny, Rainy)

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.7 & 0.3 \\ 0.4 & 0.6 \end{bmatrix}$$

$$B = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.1 & 0.4 & 0.5 \\ 0.6 & 0.3 & 0.1 \end{bmatrix}$$

$$\pi = \begin{bmatrix} 0.6 \\ 0.4 \end{bmatrix}$$





HMM 的三个基本问题

问题1:评估[Evaluation] (评估观测序列概率)

如何评估模型与观测序列之间的匹配程度?

给定模型 $\lambda = (A, B, \pi)$ 和观测序列 $O = (o_1, o_2, \cdots o_T)$,计算在模型 λ 下观测序列 O 出现的概率 $P(O|\lambda)$

解决方法:

- 暴力算法(穷举法)
- 前向算法
- 后向算法

问题2: 学习[learning] (参数估计)

如何训练模型使其能最好地描述观测数据?

给定观测序列 $O=(o_1,o_2,\cdots o_T)$,估计模型 $\lambda=(A,B,\pi)$ 的参数,使得模型 λ 下观测序列的条件概率 $P(O|\lambda)$ 最大

解决方法:

- 监督学习(极大似然直接估计)
- 非监督学习 (Baum-Welch算法迭代估计)

问题3:解码[Decoding] (序列可能性问题)

如何根据观测序列推断出隐藏的模型状态?

给定模型 $\lambda = (A, B, \pi)$ 及观测序列 $O = (o_1, o_2, \dots o_T)$, 求最有可能的状态序列。

解决方法:

- 贪心近似算法
- 维特比算法 (Viterbi algorithm)



1. 评估[Evaluation] - 暴力算法 (穷举法)

给定模型 $\lambda = (A, B, \pi)$ 和观测序列 O 的情况下,求在模型 $\lambda = (A, B, \pi)$ 下观测序列O出现的概率 $P(O|\lambda)$ 。

暴力算法 (穷举法): 对所有可能的状态序列和观测序列的联合概率求和。 列举所有可能的状态序列,则状态序列的概率为:

$$P(I|\lambda) = \pi_{i_1} a_{i_1 i_2} a_{i_2 i_3} \cdots a_{i_{T-1} i_T}$$

对于固定的状态序列,观测序列O的概率为:

$$P(O|I,\lambda) = b_{i_1}(o_1)b_{i_2}(o_2)\cdots b_{i_T}(o_T)$$

则在模型 λ 下观测序列O出现的概率 $P(O|\lambda)$ 为:

$$P(O|\lambda) = \sum_{I} P(O|I,\lambda)P(I|\lambda) = \sum_{i_1,i_2,\cdots,i_T} \pi_{i_1}b_{i_1}(o_1)a_{i_1i_2}b_{i_2}(o_2)\cdots a_{i_{T-1}i_T}b_{i_T}(o_T)$$

穷举法的时间复杂度过高,可以采用动态规划算法——前向后向算法进行优化。



前向算法 (Forward Algorithm): 计算从初始状态到观测序列中每个时刻的部分观测概率。

输入: 隐马尔可夫模型入, 观测序列 0;

输出:观测序列概率 $P(O|\lambda)$ 。

1. 初值计算: t=1的观测联合概率

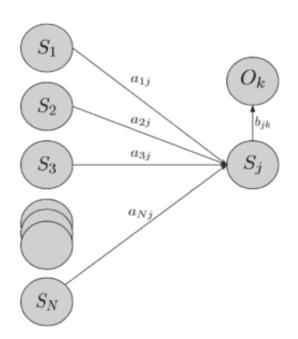
$$\delta_1(i) = \pi_i b_i(o_1)$$
 $i = 1, 2, \dots, N$

2. 递推计算: t=2, 3, ..., T 的观测联合概率

$$\delta_t(i) = \left[\sum_{j=1}^N \delta_{t-1}(j)a_{ji}\right]b_i(o_t)i = 1, 2, \dots, N$$

3. 终止计算: 累加 t=T 的观测联合概率

$$P(O|\lambda) = \sum_{i=1}^{N} \delta_{T}(i)$$



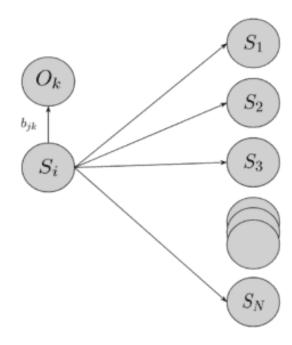


1. 评估[Evaluation] - 后向算法 (Backward Algorithm)

后向算法 (Backward Algorithm): 计算从观测序列某个时刻到结束的部分观测概率,递归公式如下:

$$\beta_t(i) = \sum a_{ij} \, b_j(O_{t+1}) \beta_{t+1}(j)$$

终止条件为: $\beta_T(i) = 1$





天气行为模型 $\lambda = (A, B, \pi)$ 状态集合 Q = (Sunny, Rainy) N = 2

观测集合 V = (Walk, Shopping, Cleaning)

设 T=3, O=(Walk, Shopping, Cleaning), 计算 $P(O|\lambda)$:

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.7 & 0.3 \\ 0.4 & 0.6 \end{bmatrix}$$

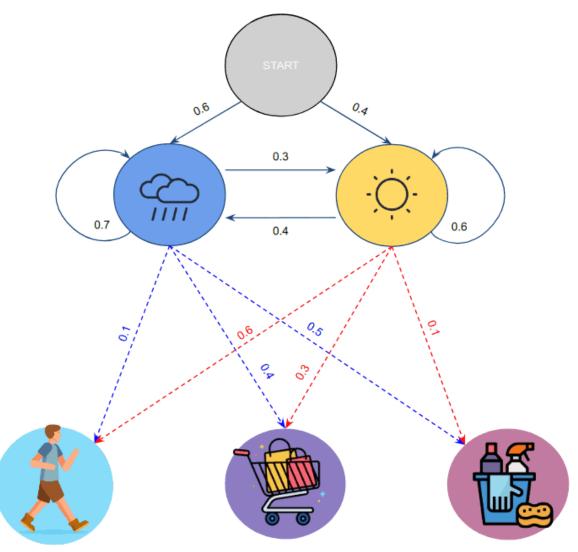
$$B = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.1 & 0.4 & 0.5 \\ 0.6 & 0.3 & 0.1 \end{bmatrix}$$

$$\pi = \begin{bmatrix} 0.6 \\ 0.4 \end{bmatrix}$$

1. 初值计算:

$$\delta_1(1) = \pi_1 b_1(o_1) = 0.6 * 0.1 = 0.06$$

 $\delta_1(2) = \pi_2 b_2(o_1) = 0.4 * 0.6 = 0.24$





$$B = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.1 & 0.4 & 0.5 \\ 0.6 & 0.3 & 0.1 \end{bmatrix}$$

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.7 & 0.3 \\ 0.4 & 0.6 \end{bmatrix}$$

$$\delta_1(1) = \pi_1 b_1(o_1) = 0.6 * 0.1 = 0.06$$

 $\delta_1(2) = \pi_2 b_2(o_1) = 0.4 * 0.6 = 0.24$

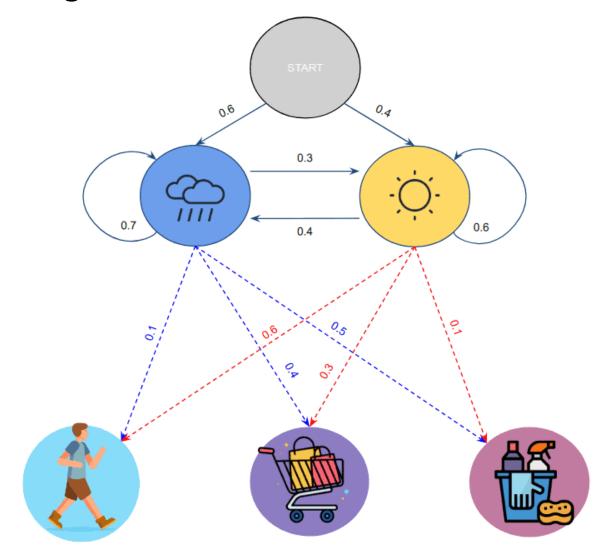
2. 递推计算: t=2, 3, ..., T 的观测联合概率

$$\delta_2(1) = \left[\sum_{i=1}^2 \delta_1(i)a_{i1}\right] b_1(o_2) = 0.138 * 0.4 = 0.0552$$

$$0.06 * 0.7 + 0.24 * 0.4 = 0.138$$

$$\delta_2(2) = \left[\sum_{i=1}^2 \delta_1(i)a_{i2}\right] b_2(o_2) = 0.192 * 0.3 = 0.0576$$

0.06 * 0.3 + 0.24 * 0.6 = 0.162





$$B = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.1 & 0.4 & 0.5 \\ 0.6 & 0.3 & 0.1 \end{bmatrix}$$

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.7 & 0.3 \\ 0.4 & 0.6 \end{bmatrix}$$

$$\delta_2(1) = 0.138 * 0.4 = 0.0552$$

 $\delta_2(2) = 0.192 * 0.3 = 0.0576$

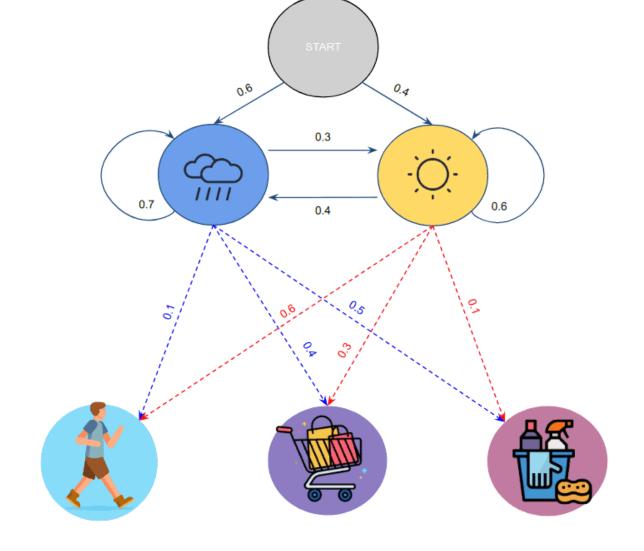
2. 递推计算: t=2, 3, ..., T 的观测联合概率

$$\delta_3(1) = \left[\sum_{i=1}^2 \delta_2(i)a_{i1}\right] b_1(o_3) = 0.06168 * 0.5 = 0.03084$$

$$0.0552 * 0.7 + 0.0576 * 0.4 = 0.06168$$

$$\delta_3(2) = \left[\sum_{i=1}^2 \delta_2(i)a_{i2}\right] b_2(o_3) = 0.05112 * 0.1 = 0.005112$$

0.0552 * 0.3 + 0.0576 * 0.6 = 0.05112





$$\delta_3(1) = \left[\sum_{i=1}^2 \delta_2(i)a_{i1}\right] b_1(o_3) = 0.06168 * 0.5 = 0.03084$$

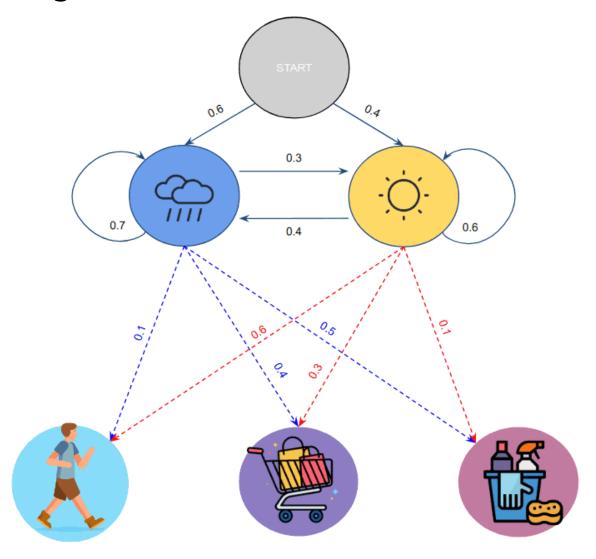
$$0.0552 * 0.7 + 0.0576 * 0.4 = 0.06168$$

$$\delta_3(2) = \left[\sum_{i=1}^2 \delta_2(i)a_{i2}\right] b_2(o_3) = 0.05112 * 0.1 = 0.005112$$

$$0.0552 * 0.3 + 0.0576 * 0.6 = 0.05112$$

3. 终止计算: 累加 t=T 的观测联合概率

$$P(O|\lambda) = \sum_{i=1}^{2} \delta_3(i) = 0.03084 + 0.005112 = 0.035952$$



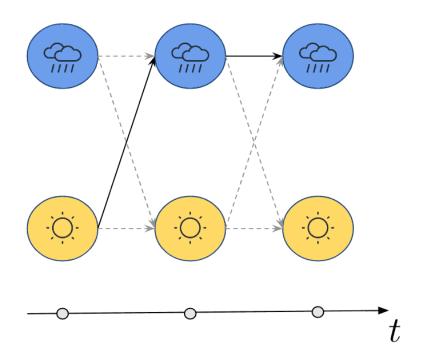


2. 学习[learning] (参数估计) - Baum-Welch算法

Baum-Welch算法: 迭代算法,用于估计模型参数。基于EM算法,通过不断调整模型参数,使观测序列的概率最大化。包括E步(计算期望值)和M步(最大化参数)。

输入: 观测序列 $O = (o_1, o_2, \cdots o_T)$;

输出: 隐马尔可夫模型参数。





3. 解码[Decoding] (序列可能性问题) - 维特比算法 (Viterbi Algorithm)

维特比算法 (Viterbi Algorithm): 动态规划算法,用于找到最可能的隐藏状态序列。

输入: 模型 $\lambda = (A, B, \pi)$, 观测序列 $O = (o_1, o_2, \dots o_T)$;

输出: 最优路径。

递归公式如下:

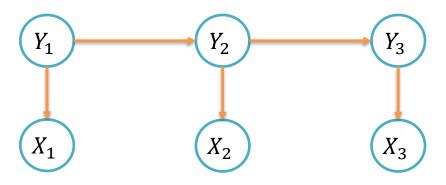
$$\delta_t(j) = \max_{1 \le i \le N} [\delta_{t-1}(i)a_{ij}]b_j(O_t)$$

初始条件为: $\delta_1(j) = \pi_j b_j(O_1)$



HMM的三要素及两个假设





联合概率可以分解为:

$$p(x, y; \theta) = \prod_{t=1}^{T} p(y_t | y_{t-1}, \theta_s) p(x_t | y_t, \theta_t)$$

转移概率 输出概率



天气例子 - 推断天气

但爱丽丝如何利用它来推断天气呢?她需要回答以下问题:给定我们的模型,哪一系列隐藏状态最能解释给定的观测序列?

为了更好地理解上述问题,我们先尝试回答它的逆问题:这个特定模型生成给定观测序列的概率是多少?

我们加入一些数学符号。我们有一个观测序列 $O = \{O_1, O_2, \dots, O_T\}$,表示 T 个时间步骤,或者在我们的例子中与鲍勃交谈的天数。我们也有以参数 A, B, π 表示的模型,可以简写为 θ 。因此,"这个特定模型生成给定观测序列的概率是多少?"这个问题可以表示为:

$$p(O_T \mid \theta) = ?$$

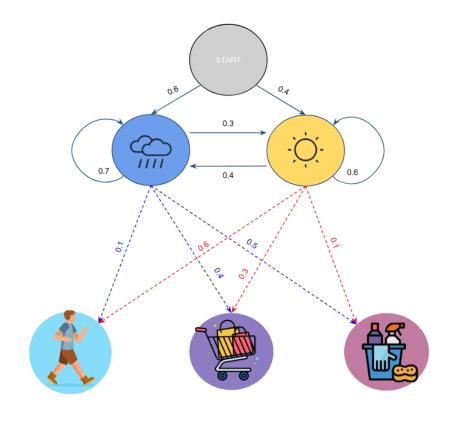


天气例子 - 推断天气

要回答这个问题,首先想象一个生成观测序列的特定隐藏状态序列 S。例如:如果我们有 T=3 天的观测 O=(Walk, Shopping, Cleaning),一个可能的隐藏状态序列是 S=(Sunny, Sunny, Rainy)。在给定 S 的情况下,看到这个观测序列的概率是多少?

我们只需要将给定时间 s_t 的隐藏状态下看到特定观测 O 的概率相乘:

$$p(O_T \mid S_T, \theta) = \prod_{t=1}^T p(O_t \mid s_t, \theta)$$



这可以很容易地通过查找序列中每个隐藏状态的 B 中的特定发射概率来计算。对于示例 $S_3 = (Sunny, Sunny, Rainy)$:

 $p(Walk, Shopping, Cleaning \mid Sunny, Sunny, Rainy) = p(Walk \mid Sunny) * p(Shopping \mid Sunny) * p(Cleaning \mid Rainy) = 0.$