Прикладной статистический анализ данных
Марковские модели

Андрей Грабовой

Марковская цепь

Последовательность дискретных случайных величин $X_1, \ldots, X_T$, принимающих некоторый набор значений $\{O_1, \ldots, O_m\}$, называется простой однородной цепью Маркова, если

$$P(X_{t+1} = O_{t+1} | X_t = O_t, \ldots, X_1 = O_1) = P(X_{t+1} = O_{t+1} | X_t = O_t),$$

$$P(X_{t+1} = O_{t+1} | X_t = O_t) \text{ не зависит от номера шага } t.$$

Марковская цепь задается:

- множеством наблюдаемых состояний $\{O_1, \ldots, O_m\}$;
- начальными значениями вероятности состояний $P(X_1 = O_i) = P_i$;
- вероятностью перехода между состояниями $P(X_t = O_i | X_{t-1} = O_j) = P_{ij}$.

Пример: погода

Задан набор из трех состояний:

1. O_1 = дождливая погода;
2. O_2 = пасмурная погода;
3. O_3 = солнечная погода.

- Какова вероятность, что в следующие четыре дня погода будет меняться как “солнце-солнце-дождь-дождь”?

$$P(O_3, O_3, O_1, O_1) = P_3 P_{33} P_{31} P_{11}$$

- Какова вероятность, что ровно N дней будет пасмурная погода?

$$P(X_2 = O_2, \dots, X_t = O_2, X_N \neq O_2 | X_1 = O_2) = P_{22}^{N-1}(1 - P_{22}).$$

- Ожидаемая продолжительность постоянной пасмурной погоды:

$$\mathsf{E} = \sum_{t=1}^{\infty} t \cdot P(X_2 = O_2, \dots, X_t = O_2, X_{t+1} \neq O_2 | X_1 = O_2) = \frac{1}{1 - P_{22}}.$$

Языковая модель

Примером марковской цепи выступает языковая n-грамм модель.
Под n-граммой понимается последовательность из n подряд идущих слов.
Пример:
Шла Саша по шоссе содержит три 2-граммы:

1. Шла Саша;
2. Саша по;
3. По шоссе.

Языковая модель

Языковая модель позволяет оценить вероятность появления предложения на основе марковской модели языка.

Для удобства при построении языковой модели вводятся два специальных символа: *BOS (Begin Of Sentence)* и *EOS (End Of Sentence)*.

Пример для 3-граммной языковой модели:

$$p(w_1, \dots, w_n) = p(SOS) \times$$

$$\times\, p(w_1|SOS)p(w_2|w_1, SOS)p(w_3|w_2, w_1)\dots p(w_n|w_{n-1}, w_{n-2})$$

$$\times\, p(EOS|w_n, w_{n-1}).$$

Языковая модель: измерение качества

Как оценить качество модели?
Кросс-Энтропия.
Оценка на основе заданной выборки $w_1, \dots, w_n$:

$$H = -\frac{1}{n} \log p(w_1, \dots, w_n).$$

Перплексия:

$$PP = 2^H = p(w_1, \dots, w_n)^{-\frac{1}{n}}.$$

- $PP = \infty \to$ марковская цепь не описывает выборку;
- $PP = 1 \to$ марковская цепь идеально описывает выборку.

Языковая модель: незнакомые слова

В случае, если языковой модели встретится неизвестное слово, $p(w_1, \ldots, w_n) = 0$.

Варианты работы с незнакомыми словами:

- Сглаживание Лапласа:
$$p(w_i) = \frac{c_i + 1}{\sum_{j=1}^{v} c_j + v},$$
где c_i — встречаемость слова w_i в тексте, v — мощность словаря.
- Интерполяция моделей разных порядков:
$$\hat{p}(w_n | w_{n-1}, w_{n-2}) = \lambda_1 p(w_n | w_{n-1}, w_{n-2}) + \lambda_2 p(w_n | w_{n-1}) + \lambda_3 p(w_n),$$
$$\sum_i \lambda_i = 1.$$

Марковские модели, проверки гипотез

Проверка гипотезы о соответствии вектора вероятностей $p_{i1}, \dots, p_{im}$ *перехода из состояния* i *заданному:*

выборка: $X_1, \dots, X_T$

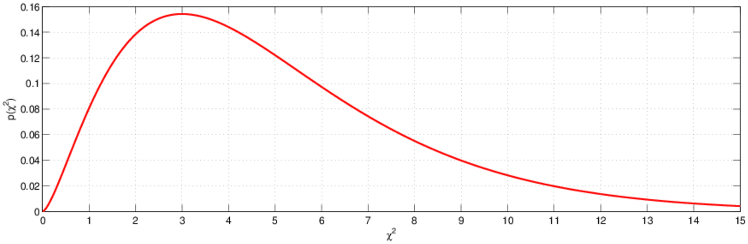
нулевая гипотеза: $H_0 \colon p_{i1}, \dots, p_{im} = \mathbf{p}^0$

альтернатива: $H_1 \colon p_{i1}, \dots, p_{im} \neq \mathbf{p}^0$

статистика: $n_i \sum_j \frac{(p_{ij} - p_{ij}^0)^2}{p_{ij}^0}$,

где n_i — встречаемость наблюдения O_i в последовательности $X_1, \dots, X_{T-1}$

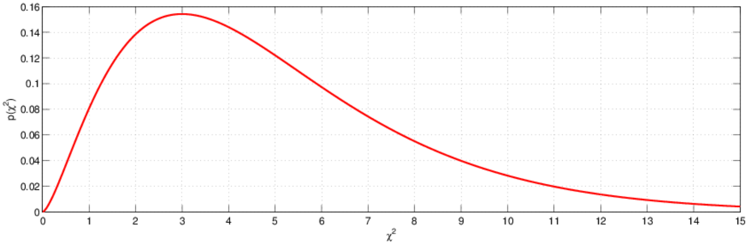
нулевое распределение: χ^2_{m-1}



Марковские модели, проверки гипотез

Проверка гипотезы о том, что марковскую цепь второго порядка можно “свернуть” в цепь первого порядка:

выборка:	$X_1, \dots, X_T$, задана марковская модель порядка 2: $P(X_t = O_k \mid X_{t-1} = O_j, X_{t-2} = O_i, \dots) = p_{ijk}$
нулевая гипотеза:	$H_0\colon p_{1jk} = p_{2jk} = \dots = p_{mjk}$.
альтернатива:	$H_1\colon H_0$ неверна.
статистика:	$-2\log\left(\prod_{i,j,k=1}^{m} (\hat{p}_{ij}/p_{ijk})^{n_{ijk}}\right)$, $\hat{p}_{ij}$ — оценка МП, $n_{ijk} = \lvert\{X_t : X_t = O_i, X_{t+1} = O_j, X_{t+2} = O_k\}\rvert$.
нулевое распределение:	$\chi^2_{m(m-1)^2}$



Проверка гипотез, комментарии

- Вероятностное распределение p_{ij} представимо как мультиномиальное распределение события j при условии события i, поэтому для проверки гипотез применимы критерии для мультиномиальных величин (в случае $m = 2$ — критерии для распределения Бернулли).
- Предполагается, что все вероятности переходов при проверке гипотез строго больше нуля.
- Критерии можно обобщить на случай моделей более высокого порядка (например, полагать p_{ijk} моделью первого порядка с событием $X_t = O_k$ при условии *единого* события $< X_{t-1} = O_j, X_{t-2} = O_i >$.
- Возможна проверка критериев по нескольким последовательностям, а не по одной. Статистики и нулевая гипотеза от этого не меняются.
- Подробнее — см. Anderson et al. (в списке литературы).

Марковские модели как порождающие модели

Примеры порождающих моделей:

- Генераторы поведения ветра (используются для изучения климата).
- Генераторы текста (см. https://hackernoon.com/automated-text-generator-using-markov-chain-de999a41e047)
- SciGen: генератор псевдонаучных текстов
  - В России известен, благодаря сгенерированной статьей "Rooter" ("Корчеватель"). Подробнее см. на вики: https://en.wikipedia.org/wiki/SCIgen

Скрытая марковская модель

Скрытая марковская модель — обобщение марковской цепи, в котором разделяются наблюдаемые и ненаблюдаемые (скрытые) переменные.

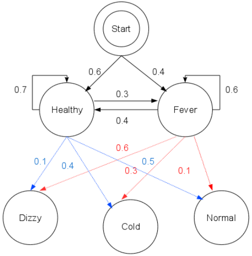
Элементы скрытой марковской модели

- $X_1, \ldots, X_T$ — наблюдаемая последовательность;
- $H_1, \ldots, H_T$ — скрытая последовательность;
- $S_1, \ldots, S_n$ — множество скрытых состояний;
- $O_1, \ldots, O_m$ — алфавит наблюдений;
- Вероятности перехода из одного состояния в другое:
$$a_{ij} = P(H_{t+1} = S_j | H_t = S_i);$$
- Вероятность наблюдений:
$$b_j(k) = P(X_t = O_k | H_t = S_j).$$
- Распределение вероятностей начальных состояний:
$$\pi_i = P(H_1 = S_i).$$

HMM: пример

Пример: wikipedia

Доктор опрашивает потенциально больных людей о своем самочувствии и фиксирует ответы. Люди могут ответить, что они чувствуют себя нормально (normal), что у них кружится голова (dizzy), что у них озноб (cold).
Наблюдаемые величины $\{O_1, O_2, O_3\} = \{\text{normal, dizzy, cold}\}$.
Скрытые величины — наличие простуды $\{H_1, H_2\} = \{\text{healthy, fever}\}$.



HMM: основные задачи

1. Как посчитать вероятность последовательности $X_1, \ldots, X_T$?
2. Как выбрать наиболее подходящую скрытую последовательность $H_1, \ldots, H_T$ по последовательности $X_1, \ldots, X_T$?
3. Как настроить параметры HMM-модели по входной последовательности $X_1, \ldots, X_T$?

HMM: основные задачи

1. Как посчитать вероятность последовательности $X_1, \ldots, X_T$?
2. Как выбрать наиболее подходящую скрытую последовательность $H_1, \ldots, H_T$ по последовательности $X_1, \ldots, X_T$?
3. Как настроить параметры HMM-модели по входной последовательности $X_1, \ldots, X_T$?

Что интересует нас:

1. Как определить адекватность модели?
2. Как выбрать наилучшую модель?

HMM, основные задачи, наивное решение

Вычисление вероятности последовательности

Вычисление полной вероятности с полным перебор скрытых состояний:

$$P(X_1, \dots, X_N) = \sum_{i_1=1}^{n} \cdots \sum_{i_T=1}^{n} \pi_{i_1} b_{i_1}(X_1) a_{i_1 i_2} b_{i_2}(X_2) \dots a_{i_{T-1} i_T} b_{i_T}(X_T).$$

Проблема: высокая сложность: $O(T \cdot n^T)$.

Вычисление оптимальной последовательности скрытых состояний

Будем максимизировать вероятность каждого скрытого состояния по отдельности:

$$S_i = \arg\max_{i'} P(H_t = S_{i'} | X_1, \dots, X_T), \forall t.$$

Проблема: не учитываются вероятности перехода между скрытыми состояниями a_{ij}.

HMM, основные задачи

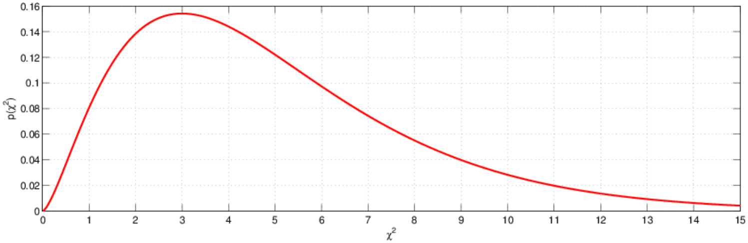
Общепринятые решения основных задач:

- Вычисление вероятности последовательности: Forward-Backward алгоритм
  - Основан на динамическом программировании
  - Сложность: $O(n^2T)$
- Вычисление оптимальной последовательности скрытых состояний: алгоритм Витерби
  - Основан на динамическом программировании, схож с Forward-Backward алгоритмом
- Оптимизация параметров HMM-модели
  - EM-алгоритм Баума — Велша

Подробнее см. Rabiner (в списке литературы).

HMM, проверка гипотезы

выборка:	$X_1, \dots, X_T$
нулевая гипотеза:	$H_0: \mathbf{a} = \mathbf{a}^0, \mathbf{b} = \mathbf{b}^0, \boldsymbol{\pi} = \boldsymbol{\pi}^0.$
альтернатива:	$H_1: H_0$ неверна.
статистика:	$2\log\big(\hat{p}(X_1, \dots, X_T) - p^0(X_1, \dots, X_T)\big).$
нулевое распределение:	$\chi^2_{n+mn+m^2}$



HMM: сравнение моделей

Как определить понятие эквивалентности на моделях?
Дивергенция Кульбака-Лейблера:

$$D_{KL}(p_1, p_2) = \mathsf{E}_{X \sim p_2}\big(\log p_1(X) - \log p_2(X)\big).$$

- $D_{KL}(p_1, p_2) > 0.$
- $D_{KL}(p_1, p_2) \neq D_{KL}(p_2, p_1).$
- $D_{KL}(p_1, p_2) = 0 <=> p_1 = p_2.$

Модификация для HMM:

$$D'_{KL}(p_1, p_2) = \frac{1}{N}\mathsf{E}_{X_1, \dots, X_T \sim p_2}\big(\log p_1(X_1, \dots, X_T) - \log p_2(X_1, \dots, X_T)\big).$$

Симметричная версия:

$$D''_{KL}(p_1, p_2) = \frac{D'_{KL}(p_1, p_2) + D'_{KL}(p_2, p_1)}{2}.$$

HMM: разновидности

- left-right-модели
  - Вводится порядок на множестве скрытых наблюдений
  - Переход между наблюдениями “от большего к меньшему” запрещен
  - Используется в распознавании речи
- С непрерывным распределением на наблюдениях
- Авторегрессионные HMM-модели.

HMM: эксперимент Cave and Neuwirth

HMM обучена на большом наборе английских текстов. Размерность множества скрытых состояний — 2.
Наблюдаемые величины — символы в тексте. На выходе получается распределение переходов, при котором скрытую переменную можно интерпретировать как гласную или согласную букву.

	Initial		Final	
a	0.03735	0.03909	0.13845	0.00075
b	0.03408	0.03537	0.00000	0.02311
c	0.03455	0.03537	0.00062	0.05614
d	0.03828	0.03909	0.00000	0.06937
e	0.03782	0.03583	0.21404	0.00000
f	0.03922	0.03630	0.00000	0.03559
g	0.03688	0.04048	0.00081	0.02724
h	0.03408	0.03537	0.00066	0.07278
i	0.03875	0.03816	0.12275	0.00000
j	0.04062	0.03909	0.00000	0.00365
k	0.03735	0.03490	0.00182	0.00703
l	0.03968	0.03723	0.00049	0.07231
m	0.03548	0.03537	0.00000	0.03889
n	0.03735	0.03909	0.00000	0.11461
o	0.04062	0.03397	0.13156	0.00000
p	0.03595	0.03397	0.00040	0.03674
q	0.03641	0.03816	0.00000	0.00153
r	0.03408	0.03676	0.00000	0.10225
s	0.04062	0.04048	0.00000	0.11042
t	0.03548	0.03443	0.01102	0.14392
u	0.03922	0.03537	0.04508	0.00000
v	0.04062	0.03955	0.00000	0.01621
w	0.03455	0.03816	0.00000	0.02303
x	0.03595	0.03723	0.00000	0.00447
y	0.03408	0.03769	0.00019	0.02587
z	0.03408	0.03955	0.00000	0.00110
space	0.03688	0.03397	0.33211	0.01298

HMM: примеры применения

- Назначение соответствий между словами в исходном и переведенном предложении (наблюдения — множество слов в переведенном предложении, скрытые состояния — исходные слова).
- Анализ частей речи (наблюдения — слова, скрытые состояния — части речи).
- Распознавание речи (наблюдения — представления звуковых сегментов, скрытые состояния — слова или буквы).
- Выравнивание биологических последовательностей (наблюдения — элементы последовательности, скрытые состояния — экзоны).

Сэмплирующие методы

Типовая задача

Моделируется распределение ходов в стратегическойи игре.
Программист хочет просчитать несколько наиболее типичных ходов компьютера-противника.
Программист также хочет выяснить сколько в среднем юнитов будет у компбютера через несколько ходов.

Марковские модели являются генеративными моделями. Они позволяют “сэмплировать” (порождать) объекты из распределения, описываемого марковской моделью.
Что делать с более сложными распределениями?

- Как сэмплировать?
- Как вычислять интегралы по этим распределениям?

Простые случаи

Интегрирование
Метод Монте-Карло: проклятье размерности: нужно уметь сэмплировать из нашего распределения
Сэмплирование
Пусть существует обратимая функция T из $x \in \mathcal{U}(0,1)$ в некоторое распределение z. Тогда

$$F_z(t) = p(z \leqslant t) = p(T(t') \leqslant t) = p(t' \leqslant T^{-1}(t)) = T^{-1}(t).$$

Отсюда $F_z^{-1} = T$.
Пример

$$z = \lambda \mathsf{exp}(-\lambda t).$$

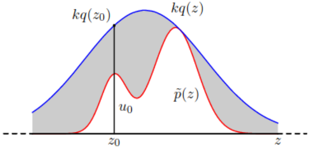
$$F_z(t) = 1 - \mathsf{exp}(-\lambda t).$$

$$F_z^{-1}(t') = -1\frac{1}{\lambda}\mathsf{log}(1 - t').$$

Сэмплирование с отклонением

- Задана плотность $p(z)$ (может быть задана с точностью до нормировочной константы)
- Введем распределение q
- Подберем множитель k таким образом, чтобы $kq(z) \geqslant p(z)$ для всех z
- В цикле
  - Просэмплируем $z_0 \sim kq$
  - Просэмплируем $u \sim \mathcal{U}(0, z_0)$
  - Если $u \leqslant p(z_0)$ — считать его сэмплом из $p(z)$

Идея метода: сэмплы u равномерно распределены в регионе, ограниченном кривой $p(z)$.



Bishop, 2006

Сэмлирование по значимости

Пусть мы не можем сэмплировать из $p(z)$, но можем оценивать правдоподобие в каждой точке, и хотим получить интерал

$$\mathsf{E}f = \int f(z)p(z)dz.$$

Тогда введем распределение q:

$$\mathsf{E}f = \int f(z)p(z)dz = \int f(z)\frac{p(z)}{q(z)}dz \approx \frac{1}{L}\sum_{l=1}^{L}\frac{p(z^l)}{q(z^l)}f(z^l).$$

MCMC

Основная идея: Сэмплируем аналогично сэмплированию с отклонениями, но q — марковское распределение, обусловленное на предлыдущий успешный шаг
Хотим, чтобы предельное (стационарное) распределение соответствовало нашему распределению $p(z)$.
Достаточное условие
$$p(z)T(z|z') = p(z)T(z'|z).$$

Алгоритм Метрополиса — Гастингса

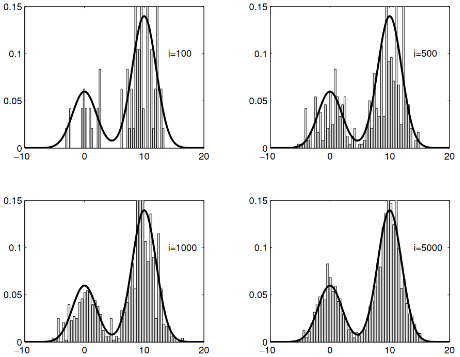
- Сэмплируем новое значение $z' \sim q(z|z^t)$.
- Принимаем его с вероятностью $A(z'|z^t) = \min\left(1, \frac{p(z')q(z^t|z')}{p(z^t)q(z'|z^t)}\right)$.
- Если приняли: $z^{t+1} = z'$,
- иначе: $z^{t+1} = z^t$.

Условие предельного распределения выполняется:

$$p(z)T(z|z') = p(z)T(z'|z) = p(z')T(z'|z^t) = p(z')q(z'|z^t)A(z'|z^t) = p(z^t)q(z^t|z')A(z^t|z').$$

- Сэмплы скоррелированы. Если требуется декоррелировать сэмплы, можно брать каждый k-й сэмпл.
- Работает в пространствах высокой размерности значительно лучше, чем сэмплирование с отклонением.

Пример работы, Andrieu et al.



Литература

- Tutorial: L. R. Rabiner, A Tutorial on Hidden Markov Models and Selected Applications in Speech Recognition
- Tutorial: M. Stamp, A Revealing Introduction to Hidden Markov Models
- Проверка гипотез: T. W. Anderson, Leo A. Goodman, Statistical Inference about Markov Chains
- Языковые модели: D. Jurafsky, J. H. Martin, Speech and Language Processing
- Машинный перевод: P. Koehn, Statistical Machine Translation
- IBM M1 & HMM: http://www.cs-114.org/wp-content/uploads/2016/04/CS114_L25PMachineTranslation-IBM.pdf
- Bishop C. M. Pattern recognition and machine learning. – springer, 2006.
- Andrieu C. et al. An introduction to MCMC for machine learning //Machine learning. – 2003. – Т. 50. – №. 1. – С. 5-43.