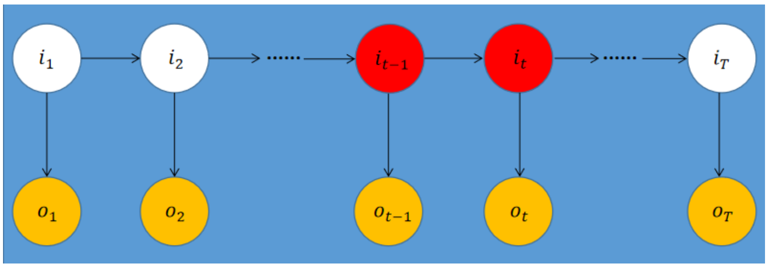
隐马尔可夫模型

2021-08-20

1. 隐马尔可夫模型

1.1. 模型简介

隐马尔可夫模型（Hidden Markov Model,HMM）是关于时序的概率模型，描述由一个**隐藏的马尔可夫链**随机生成不可观测的**状态随机序列**，再由各个**状态**生成一个**观测**而产生**观测随机序列**的过程。**隐藏的马尔可夫链**随机生成的状态的序列，称为**状态序列**；每个**状态**生成一个**观测**，由此产生的随机序列称为**观测序列**。序列的每一个位置又可以看作是一个时刻。



1.2. 模型定义

模型定义如下：

1. 状态集合Q，包含N种可能，$Q=\{q_1,q_2,\ldots,q_N\}$
2. 观测集合V，包含M种可能，$V=\{v_1,v_2,\ldots,v_N\}$
3. 状态序列I，长度为T，$I=\{i_1,i_2,\ldots,i_N\}$
4. 观测序列O，长度为T，$O=\{o_1,o_2,\ldots,o_N\}$
5. 状态转移概率矩阵A，$A=[a_{ij}]_{N\times N}$，其中，$a_{ij}=P\left(i_{t+1}=q_j \mid i_t=q_i\right), \quad i=1,2,\ldots,N; j=1,2,\ldots,N$
6. 观测概率矩阵B，$B=[b_{jk}]_{N\times M}$，其中，$b_{jk}=P\left(o_t=v_k \mid i_t=q_j\right), \quad j=1,2,\ldots,N; k=1,2,\ldots,M$
7. 初始状态概率向量π，$\pi=(\pi_i,\pi_2,\cdots,\pi_N)$，其中，$\pi_i=P(i_1=q_i), i=1,2,\cdots,N$

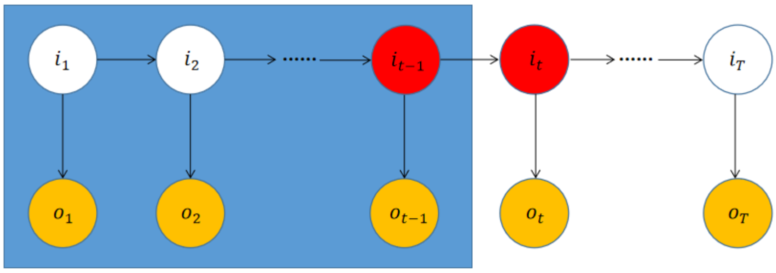
隐马尔可夫模型由初始状态向量π、状态转移概率矩阵A和观测概率矩阵B决定。π和A决定状态序列，B决定观测序列。因此，**隐马尔可夫模型**λ可以用三元符号表示，即：$\lambda=(A,B,\pi)$。

1.3. 两个基本假设

1. 齐次马尔可夫性假设

   假设隐藏的马尔可夫链在任意时刻t的状态只依赖于其前一时刻的状态，与其它时刻的状态及观测无关，也与时刻t无关：

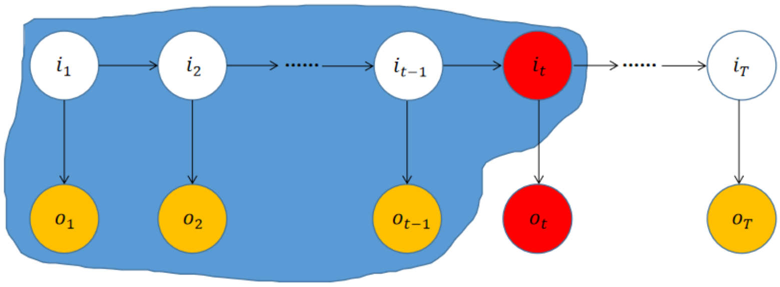
$$P\left(i_t \mid i_{t-1}, o_{t-1}, \ldots, i_1, o_1\right)=P\left(i_t \mid i_{t-1}\right) \tag{52}$$



2. 观测独立性假设

   假设任意时刻的观测只依赖于该时刻马尔可夫链的状态，与其它观测及状态无关：

$$P\left(o_t \mid i_T, o_T, i_{T-1}, o_{T-1}, \ldots, i_t, i_{t-1}, o_{t-1}, \ldots, i_1, o_1\right)=P\left(o_t \mid i_t\right) \tag{53}$$



1.4. 三个基本问题

1. 概率计算问题

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

2. 学习问题

   已知观测序列$O=\left(o_1, o_2, \cdots, o_T\right)$，**估计模型的$\lambda=(A, B, \pi)$参数**，使得在该模型下观测序列概率$P(O \mid \lambda)$最大。

3. 预测问题

   已知模型参数$\lambda=(A, B, \pi)$和观测序列$O=\left(o_1, o_2, \cdots, o_T\right)$，**求最有可能的状态序列** $I=\left(i_1, i_2, \cdots, i_T\right)$，即使得$P(I \mid O, \lambda)$最大。

2. 概率计算问题

2.1. 直接计算

$$\begin{aligned} P(O \mid \lambda) & =\sum_I P(O, I \mid \lambda) \\ & =\sum_I P(O \mid I, \lambda) P(I \mid \lambda)\end{aligned} \tag{54}$$

其中，$P(I \mid \lambda)$表示给定模型参数时，产生状态序列$I=\left(i_1, i_2, \cdots, i_T\right)$的概率：

$$P(I \mid \lambda)=\pi_{i_1} a_{i_1 i_2} a_{i_2 i_3} \cdots a_{i_{T-1} i_T} \tag{55}$$

$P(O \mid I, \lambda)$表示给定模型参数λ且状态序列为$I=\left(i_1, i_2, \cdots, i_T\right)$，产生观测序列$O=\left(o_1, o_2, \cdots, o_T\right)$的概率：

$$P(O \mid I, \lambda)=b_{i_1 o_1} b_{i_2 o_2} \cdots b_{i_T o_T} \tag{56}$$

因此：

$$\begin{aligned} P(O \mid \lambda) & =\sum_I P(O, I \mid \lambda) \\ & =\sum_I P(O \mid I, \lambda) P(I \mid \lambda) \\ & =\sum_{i_1, i_2, \ldots, i_T} \pi_{i_1} b_{i_1 o_1} a_{i_1 i_2} b_{i_2 o_2} \cdots a_{i_{T-1} i_T} b_{i_T o_T}\end{aligned} \tag{57}$$

接下来，对该式进行算法复杂度分析：

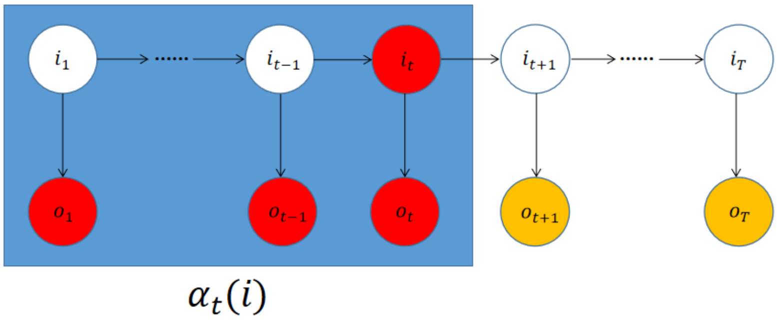
1. $\sum_{i_1, i_2, \ldots, i_T}$共有$N^T$种可能，故时间复杂度为$O(N^T)$
2. $\pi_{i_1} b_{i_1 o_1} a_{i_1 i_2} b_{i_2 o_2} \cdots a_{i_{T-1} i_T} b_{i_T o_T}$时间复杂度为$O(T)$

由上述分析，该式总的时间复杂度为$O(TN^T)$，指数级复杂度，实际中不可行。

2.2. 前向计算

首先定义前向概率：给定隐马尔可夫模型λ，定义到时刻t时部分观测序列为$(o_1, o_2, \cdots, o_t)$且状态为q_i的概率为**前向概率**，记作：

$$\alpha_t(i) = P\left(o_1, o_2, \ldots, o_t, i_t = q_i \mid \lambda\right) \tag{58}$$



对前向概率推导得：

$$\begin{aligned}
\alpha_t(i) &= P\left(o_1, o_2, \ldots, o_t, i_t = q_i \mid \lambda\right) \\
&= P\left(i_t = q_i, o_1^t\right) \\
&= \sum_{j=1}^{N} P\left(i_{t-1} = q_j, i_t = q_i, o_1^{t-1}, o_t\right) \\
&= \sum_{j=1}^{N} P\left(i_t = q_i, o_t \mid i_{t-1} = q_j, o_1^{t-1}\right) \cdot P\left(i_{t-1} = q_j, o_1^{t-1}\right) \\
&= \sum_{j=1}^{N} P\left(i_t = q_i, o_t \mid i_{t-1} = q_j\right) \cdot \alpha_{t-1}(j) \\
&= \sum_{j=1}^{N} P\left(o_t \mid i_t = q_i, i_{t-1} = q_j\right) \cdot P\left(i_t = q_i \mid i_{t-1} = q_j\right) \cdot \alpha_{t-1}(j) \\
&= \sum_{j=1}^{N} P\left(o_t \mid i_t = q_i\right) \cdot P\left(i_t = q_i \mid i_{t-1} = q_j\right) \cdot \alpha_{t-1}(j) \\
&= \sum_{j=1}^{N} b_{io_t} \cdot a_{ji} \cdot \alpha_{t-1}(j) \\
&= \sum_{j=1}^{N} \left[a_{ji} \cdot \alpha_{t-1}(j)\right] \cdot b_{io_t} \\
&\text{其中，} i = (1, 2, \cdots, N), t = (2, 3, \cdots, T)
\end{aligned} \tag{59}$$

公式说明：因所有概率均在参数λ下计算，故从第二步开始，省略条件中的λ

因此，

$$\alpha_T(i) = \left[\sum_{j=1}^{N} \alpha_{T-1}(j) a_{ji}\right] \times b_{io_T} \tag{60}$$

基于前向概率，可得**观测序列的概率**为：

$$P(O \mid \lambda) = P\left(o_1, o_2, \ldots, o_T \mid \lambda\right) = \sum_{i=1}^{N} P\left(o_1, o_2, \ldots, o_T, i_T = q_i \mid \lambda\right) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_T(i) \tag{61}$$

根据上述推导，可得通过前向算法计算观测概率的算法如下：

算法 **1.0** (观测序列概率的前向算法）

输入：隐马尔可夫模型 λ, 观测序列O

输出：观测序列概率 $P(O \mid \lambda)$

- 初值：$\alpha_1(i) = P(o_1, i_1 = q_i \mid \lambda) = P(o_1 \mid i_1 = q_i, \lambda) \cdot P(i_1 = q_i \mid \lambda) = \pi_i \cdot b_{io_1}, i = 1, 2, \cdots, N$
- 递推：$\alpha_t(i) = \sum_{j=1}^{N} \left[a_{ji} \cdot \alpha_{t-1}(j)\right] \cdot b_{io_t}, i = 1, 2, \cdots, N, t = 2, 3, \cdots, T$
- 终止：$P(O \mid \lambda) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_T(i)$

时间复杂度分析：

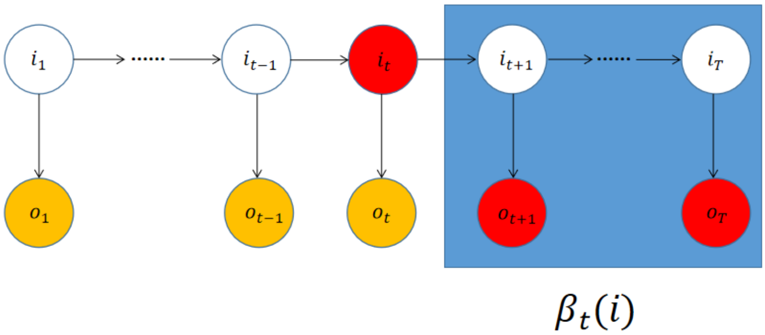
1. 根据递推公式，需要遍历$\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}$，所以时间复杂度为$O(N^2)$
2. 时间维度的计算，时间复杂度是$O(T)$

由上述分析可以，总的时间复杂度为$O(TN^2)$，相比直接计算，有很大提升。

2.3. 后向计算

首先定义后向概率：给定隐马尔可夫模型λ，定义在时刻t状态为q_i的条件下，从$t+1$到T时刻的观测序列为$(o_{t+1},o_{t+2},\cdots,o_T)$的概率为**后向概率**，记作：

$$\beta_t(i)=P\left(o_{t+1},o_{t+2},\ldots,o_T \mid i_t=q_i,\lambda\right) \tag{62}$$



对后向概率推导得：

$$\begin{aligned}
\beta_t(i) &= P\left(o_{t+1},o_{t+2},\ldots,o_T \mid i_t=q_i,\lambda\right) \\
&=\sum_{j=1}^{N} P\left(o_{t+1},o_{t+2},\ldots,o_T, i_{t+1}=q_j \mid i_t=q_i,\lambda\right) \\
&=\sum_{j=1}^{N} P\left(o_{t+2}^{T}, o_{t+1}, i_{t+1}=q_j \mid i_t=q_i,\lambda\right) \\
&=\sum_{j=1}^{N} P\left(o_{t+2}^{T} \mid i_t=q_i,\lambda, o_{t+1}, i_{t+1}=q_j\right)\cdot P\left(o_{t+1}, i_{t+1}=q_j \mid i_t=q_i,\lambda\right) \\
&=\sum_{j=1}^{N} P\left(o_{t+2}^{T} \mid \lambda, i_{t+1}=q_j\right)\cdot P\left(o_{t+1} \mid i_{t+1}=q_j, i_t=q_i,\lambda\right)\cdot P\left(i_{t+1}=q_j \mid i_t=q_i,\lambda\right) \\
&=\sum_{j=1}^{N} \beta_{t+1}(j)\cdot b_{jo_{t+1}}\cdot a_{ij}
\end{aligned} \tag{63}$$

$$\text{其中，} i=(1,2,\cdots,N), t=(1,2,\cdots,T-1)$$

为了确保递推公式的连贯性，令$\beta_T(i)=P\left(\varnothing \mid i_T=q_i,\lambda\right)=1$。

基于后向概率，可得**观测序列的概率**为：

$$P(O\mid\lambda)=P\left(o_1,o_2,\ldots,o_T \mid \lambda\right)=\sum_{i=1}^{N} P\left(o_1, i_1=q_i \mid \lambda\right) P\left(o_2,o_3,\ldots,o_T \mid i_1=q_i,\lambda\right)=\sum_{i=1}^{N}\pi_i b_{io_1}\beta_1(i) \tag{64}$$

根据上述推导，可得通过后向算法计算观测概率的算法如下：

算法 **1.1** (观测序列概率的后向算法)

输入：隐马尔可夫模型 λ, 观测序列O

输出：观测序列概率 $P(O\mid\lambda)$

- 初值：$\beta_T(i)=1, i=1,2,\cdots,N$
- 递推：$\beta_t(i)=\sum_{j=1}^{N}\beta_{t+1}(j)\cdot b_{jo_{t+1}}\cdot a_{ij}$其中，$i=(1,2,\cdots,N), t=(T-1,T-2,\cdots,1)$
- 终止：$P(O\mid\lambda)=\sum_{i=1}^{N}\pi_i b_{io_1}\beta_1(i)$

2.4. 若干公式

1. 前向概率 × 后向概率

$$\begin{aligned}
\alpha_t(i)\beta_t(i) &= P\left(o_1,o_2,\ldots,o_t,i_t=q_i \mid \lambda\right) P\left(o_{t+1},o_{t+2},\ldots,o_T \mid i_t=q_i,\lambda\right) \\
&= P(o_1^t, i_t=q_i \mid \lambda)\cdot P(o_{t+1}^T \mid i_t=q_i,\lambda) \\
&= P(o_1^t \mid i_t=q_i,\lambda)\cdot P(i_t=q_i \mid \lambda)\cdot P(o_{t+1}^T \mid i_t=q_i,\lambda) \\
&= P(o_1^T \mid i_t=q_i,\lambda)\cdot P(i_t=q_i \mid \lambda) \\
&= P(i_t=q_i, O \mid \lambda)
\end{aligned} \tag{65}$$

$$= P(i_t = q_i, O \mid \lambda)$$

2. 给定λ和O，在时刻t处于状态q_i的概率

$$\begin{aligned}\gamma_t(i) &= P(i_t = q_i \mid O, \lambda) \\ &= \frac{P(i_t = q_i, O \mid \lambda)}{P(O \mid \lambda)} \\ &= \frac{P(i_t = q_i, O \mid \lambda)}{\sum_{j=1}^{N} P(i_t = q_j, O \mid \lambda)} \\ &= \frac{\alpha_t(i)\beta_t(i)}{\sum_{j=1}^{N} \alpha_t(j)\beta_t(j)}\end{aligned} \tag{66}$$

3. 给定λ和O，在时刻t处于状态q_i且在时刻$t+1$处于状态q_j的概率

$$\begin{aligned}\xi_t(i,j) &= P(i_t = q_i, i_{t+1} = q_j \mid O, \lambda) \\ &= \frac{P(i_t = q_i, i_{t+1} = q_j, O \mid \lambda)}{P(O \mid \lambda)} \\ &= \frac{P(i_t = q_i, i_{t+1} = q_j, O \mid \lambda)}{\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} P(i_t = q_i, i_{t+1} = q_j, O \mid \lambda)}\end{aligned} \tag{67}$$

又因为：

$$\begin{aligned}P(i_t = q_i, i_{t+1} = q_j, O \mid \lambda) &= P(i_t = q_i, i_{t+1} = q_j, o_1, o_2, \ldots, o_T \mid \lambda) \\ &= P(i_t = q_i, i_{t+1} = q_j, o_1^t, o_{t+1}^N \mid \lambda) \\ &= P(i_t = q_i, o_1^t \mid \lambda) P(i_{t+1} = q_j, o_{t+1}^N \mid \lambda, i_t = q_i, o_1^t) \\ &= P(i_t = q_i, o_1^t \mid \lambda) P(i_{t+1} = q_j, o_{t+1}^N \mid \lambda, i_t = q_i) \\ &= P(i_t = q_i, o_1^t \mid \lambda) P(i_{t+1} = q_j, o_{t+1}, o_{t+2}^N \mid \lambda, i_t = q_i) \\ &= P(i_t = q_i, o_1^t \mid \lambda) P(o_{t+2}^N \mid i_{t+1} = q_j, o_{t+1}, \lambda, i_t = q_i) P(i_{t+1} = q_j, o_{t+1} \mid \lambda, i_t = q_i) \\ &= P(i_t = q_i, o_1^t \mid \lambda) P(i_{t+1} = q_j, o_{t+1} \mid \lambda, i_t = q_i) P(o_{t+2}^N \mid i_{t+1} = q_j, \lambda) \\ &= \alpha_t(i) a_{ij} b_{j o_{t+1}} \beta_{t+1}(j)\end{aligned} \tag{68}$$

所以：

$$\xi_t(i,j) = \frac{\alpha_t(i) a_{ij} b_{j o_{t+1}} \beta_{t+1}(j)}{\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} \alpha_t(i) a_{ij} b_{j o_{t+1}} \beta_{t+1}(j)} \tag{69}$$

3. 学习问题

3.1. 状态已知，观测已知

假设已给出训练数据包含S个长度相同的观测序列和对应的状态序列$\{(O_1, I_1), (O_2, I_2) \cdots (O_S, I_S)\}$，那么可以利用极大似然估计法来估计隐马尔可夫模型的参数，具体方法如下：

1. 转移概率a_{ij}的估计

$$a_{ij} = \frac{A_{ij}}{\sum_{j=1}^{N} A_{ij}} \tag{94}$$

其中，A_{ij} 为样本中时刻 t 处于状态 q_i 而到时刻 $t+1$ 转移到状态 q_j 的 的频数。

2. 观测概率b_{jk}的估计

$$b_{jk} = \frac{B_{jk}}{\sum_{k=1}^{M} B_{jk}} \tag{95}$$

其中，B_{jk} 为样本中状态为 q_j， 对应观测为 v_k 的 的频数。

3. 初始状态概率π_i的估计

S个样本中初始状态为 q_i 的频率。

3.2. 状态未知，观测已知

3.2.1. 问题定义

仅知道观测序列为$O = (o_1, o_2, \cdots, o_T)$，而不知道状态序列数据$I = (i_1, i_2, \cdots, i_T)$，那么隐马尔可夫模型就是一个含有隐变量的概率模型：

$$P(O \mid \lambda) = \sum_I P(O \mid I, \lambda) P(I \mid \lambda) \tag{70}$$

可使用EM算法对该问题进行参数求解，该算法亦称为Baum-Welch算法。

3.2.2. 完全数据的对数似然

需要确定完全数据的对数似然函数。

观测数据为$O=(o_1,o_2,\cdots,o_T)$，未观测数据为$I=(i_1,i_2,\cdots,i_T)$，则完全数据为$(O,I)=(o_1,i_1,o_2,i_2,\cdots,o_T,i_T)$，完全数据的对数似然函数为：

$$\ln P(O,I\mid\lambda) \tag{71}$$

其中，$P(O,I\mid\lambda)=\pi_{i_1}b_{i_1o_1}a_{i_1i_2}b_{i_2o_2}\cdots a_{i_{T-1}i_T}b_{i_To_T}$，所以可进一步得到：

$$\begin{aligned}\ln P(O,I\mid\lambda)&=\ln\left(\pi_{i_1}b_{i_1o_1}a_{i_1i_2}b_{i_2O_2}\cdots a_{i_{T-1}i_T}b_{i_To_T}\right)\\&=\ln\pi_{i_1}+\sum_{t=1}^{T-1}\ln a_{i_ti_{t+1}}+\sum_{t=1}^{T}\ln b_{i_to_t}\end{aligned} \tag{72}$$

3.2.3. E步：求Q函数

定义Q函数如下：

$$Q(\lambda,\bar{\lambda})=\sum_I P(I\mid O,\bar{\lambda})\ln P(O,I\mid\lambda) \tag{73}$$

其中，$\bar{\lambda}$是隐马尔可夫模型参数的当前估计值，λ是要极大化的隐

为了后续计算方便，对Q函数做如下恒等变形：

$$\begin{aligned}Q(\lambda,\bar{\lambda})&=\sum_I P(I\mid O,\bar{\lambda})\ln P(O,I\mid\lambda)\\&=\sum_I\frac{P(O,I\mid\bar{\lambda})}{P(O\mid\bar{\lambda})}\ln P(O,I\mid\lambda)\end{aligned} \tag{74}$$

由于接下来仅极大化λ，$P(O\mid\bar{\lambda})$作为常数项可以省略，所以Q函数可以进一步简化为：

$$\begin{aligned}Q(\lambda,\bar{\lambda})&=\sum_I P(O,I\mid\bar{\lambda})\ln P(O,I\mid\lambda)\\&=\sum_I P(O,I\mid\bar{\lambda})\left(\ln\pi_{i_1}+\sum_{t=1}^{T-1}\ln a_{i_ti_{t+1}}+\sum_{t=1}^{T}\ln b_{i_to_t}\right)\\&=\sum_I P(O,I\mid\bar{\lambda})\ln\pi_{i_1}+\sum_I P(O,I\mid\bar{\lambda})\left(\sum_{t=1}^{T-1}\ln a_{i_ti_{t+1}}\right)+\sum_I P(O,I\mid\bar{\lambda})\left(\sum_{t=1}^{T}\ln b_{i_to_t}\right)\end{aligned} \tag{75}$$

3.2.4. M步：极大化Q函数

由于要极大化的参数在上式中单独地出现在3个项中，所以只需对各项分别极大化。

1. 求π_i

Q函数中的第1项可以写成：

$$\begin{aligned}\sum_I P(O,I\mid\bar{\lambda})\ln\pi_{i_1}&=\sum_{i_1,i_2,\ldots,i_T}P\left(O,i_1,i_2,\ldots,i_T\mid\bar{\lambda}\right)\ln\pi_{i_1}\\&=\sum_{i=1}^{N}\left(\sum_{i_2,i_3,\ldots,i_T}P\left(O,i_1=q_i,i_2,i_3,\ldots,i_T\mid\bar{\lambda}\right)\ln\pi_i\right)\\&=\sum_{i=1}^{N}\left\{\ln\pi_i\cdot\left(\sum_{i_2,i_3,\ldots,i_T}P\left(O,i_1=q_i,i_2,i_3,\ldots,i_T\mid\bar{\lambda}\right)\right)\right\}\\&=\sum_{i=1}^{N}\ln\pi_iP\left(O,i_1=q_i\mid\bar{\lambda}\right)\end{aligned} \tag{76}$$

由于π需要满足约束$\sum_{i=1}^{N}\pi_i=1$，利用拉格朗日乘子法，写出拉格朗日函数：

$$\sum_{i=1}^{N}\ln\pi_iP\left(O,i_1=q_i\mid\bar{\lambda}\right)+\eta\left(\sum_{i=1}^{N}\pi_i-1\right) \tag{77}$$

对拉格朗日函数关于π求偏导并令结果为0：

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial\pi_i}\left[\sum_{i=1}^{N}\ln\pi_iP\left(O,i_1=q_i\mid\bar{\lambda}\right)+\eta\left(\sum_{i=1}^{N}\pi_i-1\right)\right]=0\\\frac{1}{\pi_i}\cdot P\left(O,i_1=q_i\mid\bar{\lambda}\right)+\eta=0\\P\left(O,i_1=q_i\mid\bar{\lambda}\right)+\eta\pi_i=0\end{aligned} \tag{78}$$

利用$\sum_{i=1}^{N}\pi_i=1$，对上式两边关于i求和可得：

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^{N}\left[P\left(O,i_1=q_i\mid\bar{\lambda}\right)+\eta\pi_i\right]=0\\\sum_{i=1}^{N}P\left(O,i_1=q_i\mid\bar{\lambda}\right)+\sum_{i=1}^{N}\eta\pi_i=0\end{aligned} \tag{79}$$

$$
\begin{aligned}
P(O \mid \bar{\lambda})+\eta \cdot 1=0 \\
\eta=-P(O \mid \bar{\lambda})
\end{aligned}
$$

将其带回$P\left(O, i_1=q_i \mid \bar{\lambda}\right)+\eta \pi_i=0$可得:

$$
P\left(O, i_1=q_i \mid \bar{\lambda}\right)-P(O \mid \bar{\lambda}) \cdot \pi_i=0 \tag{80}
$$

$$
\begin{aligned}
\pi_i & =\frac{P\left(O, i_1=q_i \mid \bar{\lambda}\right)}{P(O \mid \bar{\lambda})} \\
& =P\left(i_1=q_i \mid O, \bar{\lambda}\right) \\
& =\gamma_1(i) \\
& =\frac{\alpha_1(i) \beta_1(i)}{\sum_{j=1}^N \alpha_1(j) \beta_1(j)}
\end{aligned} \tag{81}
$$

其中，$\gamma_1(i)=\frac{\alpha_1(i) \beta_1(i)}{\sum_{j=1}^N \alpha_1(j) \beta_1(j)}$表示给定模型参数$\bar{\lambda}$和观测$O$，在时刻$t$处于状态$q_i$的概率。

2. 求a_{ij}

Q函数中的第2项可以写成:

$$
\begin{aligned}
\sum_I P(O, I \mid \bar{\lambda})\left(\sum_{t=1}^{T-1} \ln a_{i_t i_{t+1}}\right) & =\sum_{t=1}^{T-1}\left(\sum_{i_i, i_2, \ldots, i_T} P\left(O, i_1, i_2, \ldots, i_T \mid \bar{\lambda}\right) \ln a_{i_t i_{t+1}}\right) \\
& =\sum_{t=1}^{T-1}\left\{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N\left(\sum_{i_1, i_2, \ldots, i_{t-1}, i_{t+2}, \ldots, i_T} P\left(O, i_1, i_2, \ldots, i_t=q_i, i_{t+1}=q_j, \ldots, i_T \mid \bar{\lambda}\right) \ln a_{ij}\right)\right\} \\
& =\sum_{t=1}^{T-1}\left\{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N\left[\ln a_{ij} \cdot\left(\sum_{i_1, i_2, \ldots, i_{t-1}, i_{t+2}, \ldots, i_T} P\left(O, i_1, i_2, \ldots, i_t=q_i, i_{t+1}=q_j, \ldots, i_T \mid \bar{\lambda}\right)\right)\right]\right\} \\
& =\sum_{t=1}^{T-1} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \ln a_{ij} P\left(O, i_t=q_i, i_{t+1}=q_j \mid \bar{\lambda}\right)
\end{aligned}
$$

由于a_{ij}需要满足$\sum_{j=1}^N a_{ij}=1$的约束条件，同样需要利用拉格朗日乘子法，写出拉格朗日函数:

$$
\sum_{t=1}^{T-1} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \ln a_{ij} P\left(O, i_t=q_i, i_{t+1}=q_j \mid \bar{\lambda}\right)+\eta\left(\sum_{j=1}^N a_{ij}-1\right) \tag{83}
$$

对拉格朗日函数关于a_{ij}求偏导并令结果为0:

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial a_{ij}}\left[\sum_{t=1}^{T-1} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \ln a_{ij} P\left(O, i_t=q_i, i_{t+1}=q_j \mid \bar{\lambda}\right)+\eta\left(\sum_{j=1}^N a_{ij}-1\right)\right]=0 \\
\frac{1}{a_{ij}} \cdot \sum_{t=1}^{T-1} P\left(O, i_t=q_i, i_{t+1}=q_j \mid \bar{\lambda}\right)+\eta=0 \\
\sum_{t=1}^{T-1} P\left(O, i_t=q_i, i_{t+1}=q_j \mid \bar{\lambda}\right)+\eta a_{ij}=0
\end{aligned} \tag{84}
$$

利用$\sum_{j=1}^N a_{ij}=1$，对上式两边求和可得:

$$
\begin{aligned}
\sum_{j=1}^N \sum_{t=1}^{T-1} P\left(O, i_t=q_i, i_{t+1}=q_j \mid \bar{\lambda}\right)+\sum_{j=1}^N \eta a_{ij}=0 \\
\sum_{t=1}^{T-1} P\left(O, i_t=q_i \mid \bar{\lambda}\right)+\eta \cdot 1=0 \\
\eta=-\sum_{t=1}^{T-1} P\left(O, i_t=q_i \mid \bar{\lambda}\right)
\end{aligned} \tag{85}
$$

将其带回$\sum_{t=1}^{T-1} P\left(O, i_t=q_i, i_{t+1}=q_j \mid \bar{\lambda}\right)+\eta a_{ij}=0$可得:

$$
\begin{aligned}
\sum_{t=1}^{T-1} P\left(O, i_t=q_i, i_{t+1}=q_j \mid \bar{\lambda}\right)-\sum_{t=1}^{T-1} P\left(O, i_t=q_i \mid \bar{\lambda}\right) \cdot a_{ij}=0 \\
a_{ij}=\frac{\sum_{t=1}^{T-1} P\left(O, i_t=q_i, i_{t+1}=q_j \bar{\lambda}\right)}{\sum_{t=1}^{T-1} P\left(O, i_t=q_i \mid \bar{\lambda}\right)}
\end{aligned} \tag{86}
$$

分子分母同时除以$P(O \mid \bar{\lambda})$得:

$$
a_{ij}=\frac{\frac{\sum_{t=1}^{T-1} P\left(O, i_t=q_i, i_{t+1}=q_j \mid \bar{\lambda}\right)}{P(O \mid \lambda)}}{\frac{\sum_{t=1}^{T-1} P\left(O, i_t=q_i \mid \bar{\lambda}\right)}{P(O \mid \lambda)}}=\frac{\sum_{t=1}^{T-1} P\left(i_t=q_i, i_{t+1}=q_j \mid O, \bar{\lambda}\right)}{\sum_{t=1}^{T-1} P\left(i_t=q_i \mid O, \bar{\lambda}\right)}=\frac{\sum_{t=1}^{T-1} \xi_t(i, j)}{\sum_{t=1}^{T-1} \gamma_t(i)} \tag{87}
$$

其中，$\xi_t(i,j)=\dfrac{P\left(i_t=q_i,i_{t+1}=q_j,O\mid\lambda\right)}{\sum_{i=1}^N\sum_{j=1}^N P\left(i_t=q_i,i_{t+1}=q_j,O\mid\lambda\right)}$表示给定$\bar{\lambda}$和$O$，在时刻$t$处于状态$q_i$且在时刻$t+1$处于$q_j$的概率。

$$\gamma_t(i)=\frac{\alpha_t(i)\beta_t(i)}{\sum_{j=1}^N\alpha_t(j)\beta_t(j)}\text{表示给定}\bar{\lambda}\text{和}O\text{，在时刻}t\text{处于状态}q_i\text{的概率。}$$

3. 求b_{jk}

Q函数中的第3项可以写成：

$$\begin{aligned}\sum_I P(O,I\mid\bar{\lambda})\left(\sum_{t=1}^T\ln b_{i_1o_t}\right)&=\sum_{t=1}^T\left(\sum_{i_1,i_2,\ldots,i_T}P\left(O,i_1,i_2,\ldots,i_T\mid\bar{\lambda}\right)\ln b_{i_tot}\right)\\&=\sum_{t=1}^T\left\{\sum_{j=1}^N\left(\sum_{i_1,i_2,\ldots,i_{t-1},i_{t+1},\ldots,i_T}P\left(O,i_1,i_2,\ldots,i_t=q_j,\ldots,i_T\mid\bar{\lambda}\right)\ln b_{jot}\right)\right\}\\&=\sum_{t=1}^T\left\{\sum_{j=1}^N\left[\ln b_{jo_t}\cdot\left(\sum_{i_1,i_2,\ldots,i_{t-1},i_{t+1},\ldots,i_T}P\left(O,i_1,i_2,\ldots,i_t=q_j,\ldots,i_T\mid\bar{\lambda}\right)\right)\right]\right\}\\&=\sum_{t=1}^T\sum_{j=1}^N\ln b_{jo_t}P\left(O,i_t=q_j\mid\bar{\lambda}\right)\end{aligned}\tag{88}$$

由于b_{jk}需要满足约束$\sum_{k=1}^M b_{jk}=1$，同样利用拉格朗日乘子法，写出拉格朗日函数：

$$\sum_{t=1}^T\sum_{j=1}^N\ln b_{jo_t}P\left(O,i_t=q_j\mid\bar{\lambda}\right)+\eta\left(\sum_{k=1}^M b_{jk}-1\right)\tag{89}$$

对拉格朗日函数关于b_{jk}求偏导并令结果为0：

$$\begin{aligned}&\frac{\partial}{\partial b_{jk}}\left[\sum_{t=1}^T\sum_{j=1}^N\ln b_{jo_t}P\left(O,i_t=q_j\mid\bar{\lambda}\right)+\eta\left(\sum_{k=1}^M b_{jk}-1\right)\right]=0\\&\frac{1}{b_{jk}}\cdot\sum_{t=1}^T P\left(O,i_t=q_j\mid\bar{\lambda}\right)\mathbb{I}\left(o_t=v_k\right)+\eta=0\quad(\text{其中,}\ \mathbb{I}\left(o_t=v_k\right)\text{ 为指示函数 })\\&\sum_{t=1}^T P\left(O,i_t=q_j\mid\bar{\lambda}\right)\mathbb{I}\left(o_t=v_k\right)+\eta b_{jk}=0\end{aligned}\tag{90}$$

利用$\sum_{k=1}^M b_{jk}=1$，对上式两边关于k求和可得：

$$\begin{aligned}&\sum_{k=1}^M\sum_{t=1}^T P\left(O,i_t=q_j\mid\bar{\lambda}\right)\mathbb{I}\left(o_t=v_k\right)+\sum_{k=1}^M\eta b_{jk}=0\\&\sum_{t=1}^T P\left(O,i_t=q_j\mid\bar{\lambda}\right)+\eta\cdot 1=0\\&\eta=-\sum_{t=1}^T P\left(O,i_t=q_j\mid\bar{\lambda}\right)\end{aligned}\tag{91}$$

公式说明：$\sum_{k=1}^M\sum_{t=1}^T P\left(O,i_t=q_j\mid\bar{\lambda}\right)\mathbb{I}\left(o_t=v_k\right)=\sum_{t=1}^T P\left(O,i_t=q_j\mid\bar{\lambda}\right)$的原因：每一时刻的$o_t$必然属于且仅属于$v_k(k=1,\cdots,M)$中的一个，将$v_k$遍历一遍，所有时刻的$o_t$必然且仅能满足一次$o_t=v_k$。

将其带回$\sum_{t=1}^T P\left(O,i_t=q_j\mid\bar{\lambda}\right)\mathbb{I}\left(o_t=v_k\right)+\eta b_{jk}=0$可得：

$$\begin{aligned}&\sum_{t=1}^T P\left(O,i_t=q_j\mid\bar{\lambda}\right)\mathbb{I}\left(o_t=v_k\right)-\sum_{t=1}^T P\left(O,i_t=q_j\mid\bar{\lambda}\right)\cdot b_{jk}=0\\&b_{jk}=\frac{\sum_{t=1}^T P\left(O,i_t=q_j\mid\bar{\lambda}\right)\mathbb{I}\left(o_t=v_k\right)}{\sum_{t=1}^T P\left(O,i_t=q_j\mid\bar{\lambda}\right)}\end{aligned}\tag{92}$$

分子分母同时除以$P(O\mid\bar{\lambda})$：

$$\begin{aligned}b_{jk}&=\frac{\frac{\sum_{t=1}^T P\left(O,i_t=q_j\mid\bar{\lambda}\right)\mathbb{I}(o_t=v_k)}{P(O\mid\bar{\lambda})}}{\frac{\sum_{t=1}^T P\left(O,i_t=q_j\bar{\lambda}\right)}{P(O\mid\bar{\lambda})}}\\&=\frac{\sum_{t=1}^T P\left(i_t=q_j\mid O,\bar{\lambda}\right)\mathbb{I}\left(o_t=v_k\right)}{\sum_{t=1}^T P\left(i_t=q_j\mid O,\bar{\lambda}\right)}\\&=\frac{\sum_{t=1,o_t=v_k}^T\gamma_t(j)}{}\end{aligned}\tag{93}$$

$$= \frac{}{\sum_{t=1}^{T} \gamma_t(j)}$$

其中，$\gamma_t(i) = \frac{\alpha_t(i)\beta_t(i)}{\sum_{j=1}^{N} \alpha_t(j)\beta_t(j)}$表示给定$\bar{\lambda}$和$O$，在时刻$t$处于状态$q_i$的概率。

4. 预测问题

4.1. 贪心算法

在每个时刻t选择在该时刻最有可能出现的状态i_t^*，从而得到一个状态序列$I^* = (i_1^*, i_2^*, \cdots, i_T^*)$，将它作为预测的结果。具体算法那如下：

算法 **1.2** (贪心算法预测状态序列）

输入：隐马尔可夫模型 λ, 观测序列O

输出：状态序列 $I^* = (i_1^*, i_2^*, \cdots, i_T^*)$

- 对时刻$t = 1, 2, \cdots, T$
  - 计算在时刻t处于状态q_i的概率：$\gamma_t(i) = \frac{\alpha_t(i)\beta_t(i)}{\sum_{j=1}^{N} \alpha_t(j)\beta_t(j)}$
  - 在时刻t最有可能的状态：$i_t^* = \arg\max_{1 \le i \le N} [\gamma_t(i)], \quad t = 1, 2, \ldots, T$
- 得到状态序列$I^* = (i_1^*, i_2^*, \cdots, i_T^*)$

4.2. 维特比算法

维特比算法：使用动态规划求解概率最大路径，每一条路径对应一个状态序列。具体算法如下：

算法 **1.3** (维特比算法预测状态序列）

输入：隐马尔可夫模型 λ, 观测序列O

输出：状态序列 $I^* = (i_1^*, i_2^*, \cdots, i_T^*)$

- 定义在时刻t状态为q_i的所有单个路径中概率最大值为：
  $$\delta_t(i) = \max_{i_1, i_2, \ldots, i_{t-1}} P(o_1, \ldots, o_t, i_1, \ldots, i_{t-1}, i_t = q_i), \quad i = 1, 2, \ldots, N$$
  - 在$t = 1$时刻，可知：$\delta_1(i) = \pi_i b_{io_1}$
  - 对时刻$t = 1, 2, \cdots, T$
    $$\delta_t(i) = \max_{1 \le j \le N} [\delta_{t-1}(j) a_{ji}] b_{io_t}, i = 1, 2, \cdots, N$$
- 定义在时刻t状态为q_i的所有单个路径中，概率最大的路径中的第$t-1$个节点为：
  $$\psi_t(i) = \arg\max_{1 \le j \le N} [\delta_{t-1}(j) a_{ji}]$$
  - 在T时刻，可知：$i_T^* = \arg\max_{1 \le i \le N} [\delta_T(i)]$
  - 在时刻$t = T-1, T-2, \cdots, 1$
    $$i_t^* = \psi_{t+1}(i_{t+1}^*)$$
- 得到状态序列$I^* = (i_1^*, i_2^*, \cdots, i_T^*)$

5. 例题：盒子和球模型

假设有3个盒子，每个盒子里面都装有**红白**两种颜色的球，盒子里的红白球数如下表所示：

盒子	1	2	3
红球数	5	4	7
白球数	5	6	3

(96)

按照如下规则抽球，从而产生一个**球的颜色**的观测序列：首先以0.2、0.4、0.4的概率从1、2、3号盒子中选取一个盒子，从这个盒子里随机抽出1个球，记录其颜色后放回，然后按以下概率**选取下一个盒子**：

盒子	1	2	3
1	0.5	0.2	0.3
2	0.3	0.5	0.2
3	0.2	0.3	0.5

(97)

确定了转移的盒子后，再从盒子里随机抽出1个球，记录其颜色后放回。

重复3次，最终得到的观测序列为O={红，白，红}。

记选取的**盒子序列**为**状态序列**，试求最优状态序列，即最优路径$I^* = (i_1^*, i_2^*, \cdots, i_T^*)$

解：

该问题为典型的隐马尔可夫模型，由题意可得知模型的参数为：

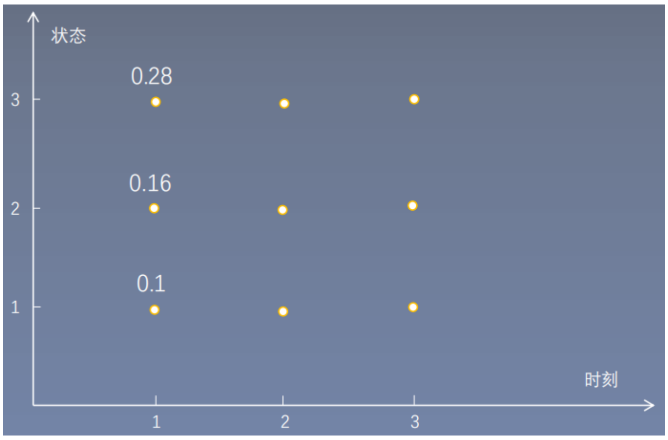
$$A=\begin{bmatrix}0.5 & 0.2 & 0.3\\0.3 & 0.5 & 0.2\\0.2 & 0.3 & 0.5\end{bmatrix}\quad B=\begin{bmatrix}0.5 & 0.5\\0.4 & 0.6\\0.7 & 0.3\end{bmatrix}\quad \pi=(0.2,0.4,0.4)^{\mathrm{T}} \tag{98}$$

$O=\{$红，白，红$\}$

按照维特比算法我们可以进行如下计算：

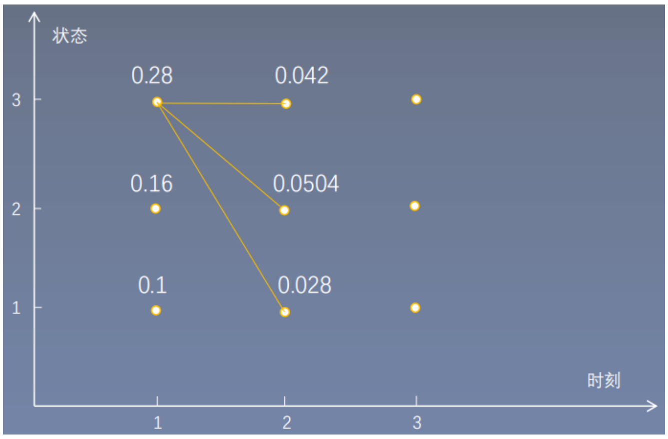
1. $t=1$

$$\begin{aligned}\delta_1(1)&=\pi_1 b_{1o_1}=0.2\times0.5=0.1, &\psi_1(1)=0\\\delta_1(2)&=\pi_2 b_{2o_1}=0.4\times0.4=0.16, &\psi_1(2)=0\\\delta_1(3)&=\pi_3 b_{3o_1}=0.4\times0.7=0.28, &\psi_1(3)=0\end{aligned} \tag{99}$$



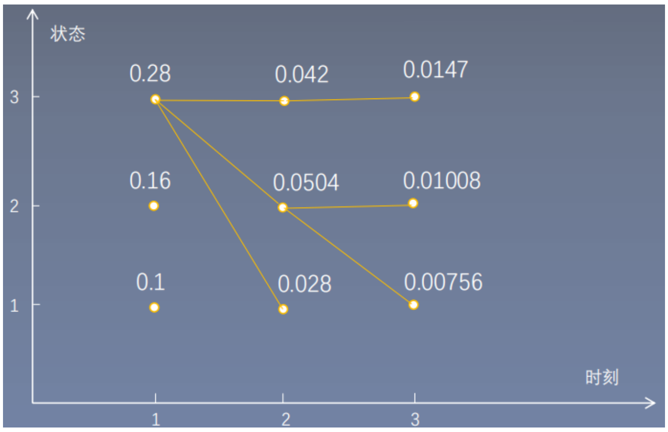
2. $t=2$

$$\begin{aligned}\delta_2(1)&=\max_{1\le j\le3}[\delta_1(j)a_{j1}]b_{1o_2}=\max\left\{\begin{array}{c}0.1\times0.5=0.05\\0.16\times0.3=0.048\\0.28\times0.2=0.056\end{array}\right\}\times0.5=0.028, &\psi_2(1)=\arg\max_{1\le j\le3}[\delta_1(j)a_{j1}]=3\\\delta_2(2)&=\max_{1\le j\le3}[\delta_1(j)a_{j2}]b_{2o_2}=\max\left\{\begin{array}{c}0.1\times0.2=0.02\\0.16\times0.5=0.08\\0.28\times0.3=0.084\end{array}\right\}\times0.6=0.0504, &\psi_2(2)=\arg\max_{1\le j\le3}[\delta_1(j)a_{j2}]=3\\\delta_2(3)&=\max_{1\le j\le3}[\delta_1(j)a_{j3}]b_{3o_2}=\max\left\{\begin{array}{c}0.1\times0.3=0.03\\0.16\times0.2=0.032\\0.28\times0.5=0.14\end{array}\right\}\times0.3=0.042, &\psi_2(3)=\arg\max_{1\le j\le3}[\delta_1(j)a_{j3}]=3\end{aligned} \tag{100}$$



3. $t=3$

$$\begin{aligned}\delta_3(1)&=\max_{1\le j\le3}[\delta_2(j)a_{j1}]b_{1o_3}=\max\left\{\begin{array}{c}0.028\times0.5=0.014\\0.0504\times0.3=0.01512\\0.042\times0.2=0.0084\end{array}\right\}\times0.5=0.00756, &\psi_3(1)=\arg\max_{1\le j\le3}[\delta_2(j)a_{j1}]=2\\\delta_3(2)&=\max_{1\le j\le3}[\delta_2(j)a_{j2}]b_{2o_3}=\max\left\{\begin{array}{c}0.028\times0.2=0.0056\\0.0504\times0.5=0.0252\\0.042\times0.3=0.0126\end{array}\right\}\times0.4=0.01008, &\psi_3(2)=\arg\max_{1\le j\le3}[\delta_2(j)a_{j2}]=2\\\delta_3(3)&=\max_{1\le j\le3}[\delta_2(j)a_{j3}]b_{3o_3}=\max\left\{\begin{array}{c}0.028\times0.3=0.0084\\0.0504\times0.2=0.01008\\0.042\times0.5=0.021\end{array}\right\}\times0.7=0.0147, &\psi_3(3)=\arg\max_{1\le j\le3}[\delta_2(j)a_{j3}]=3\end{aligned} \tag{101}$$



所以，最优状态序列为：

$$\begin{aligned} i_3^* &= \arg\max_i [\delta_3(i)] = 3 \\ i_2^* &= \psi_3(i_3^*) = \psi_3(3) = 3 \\ i_1^* &= \psi_2(i_2^*) = \psi_2(3) = 3 \end{aligned} \tag{102}$$

6. 参考文档

1. 如何理解隐马尔科夫模型(HMM)后向算法初始值为1? - 知乎 (zhihu.com)