笔记: 从EM算法到隐马尔可夫模型

0.极大似然估计

EM算法作为一种参数估计的算法，某种程度上可以看成是极大似然估计的扩展（当然它们也有明显区别，比如极大似然估计可以给出解析解，而EM算法只有基于迭代的数值解。）因此，有必要先了解一下极大似然估计。

先来对极大似然有一个感性的认识。假设有一枚不均匀的硬币，抛10次，8次正面，估计抛硬币出现正面的概率。

凭感觉就可以知道这个概率是0.8，其实这就是极大似然的思想。下面我们来细化我们的思路。

假定抛出正面的概率为 θ ，那么抛出如题所述的这10次结果的概率为：

$$L(\theta) = P(8\text{正}|\theta) = \theta^8 \cdot (1-\theta)^2$$

这个L就是似然函数。为了方便求导，我们对L取对数，得到对数似然函数LL，然后令LL的导数等于0，解得最优化的 θ 。

$$LL(\theta) = logL(\theta) = 8log\theta + 2log(1-\theta)$$

$$\frac{dLL}{d\theta} = \frac{8}{\theta} - \frac{2}{1-\theta} = 0 \Longrightarrow \theta = 0.8$$

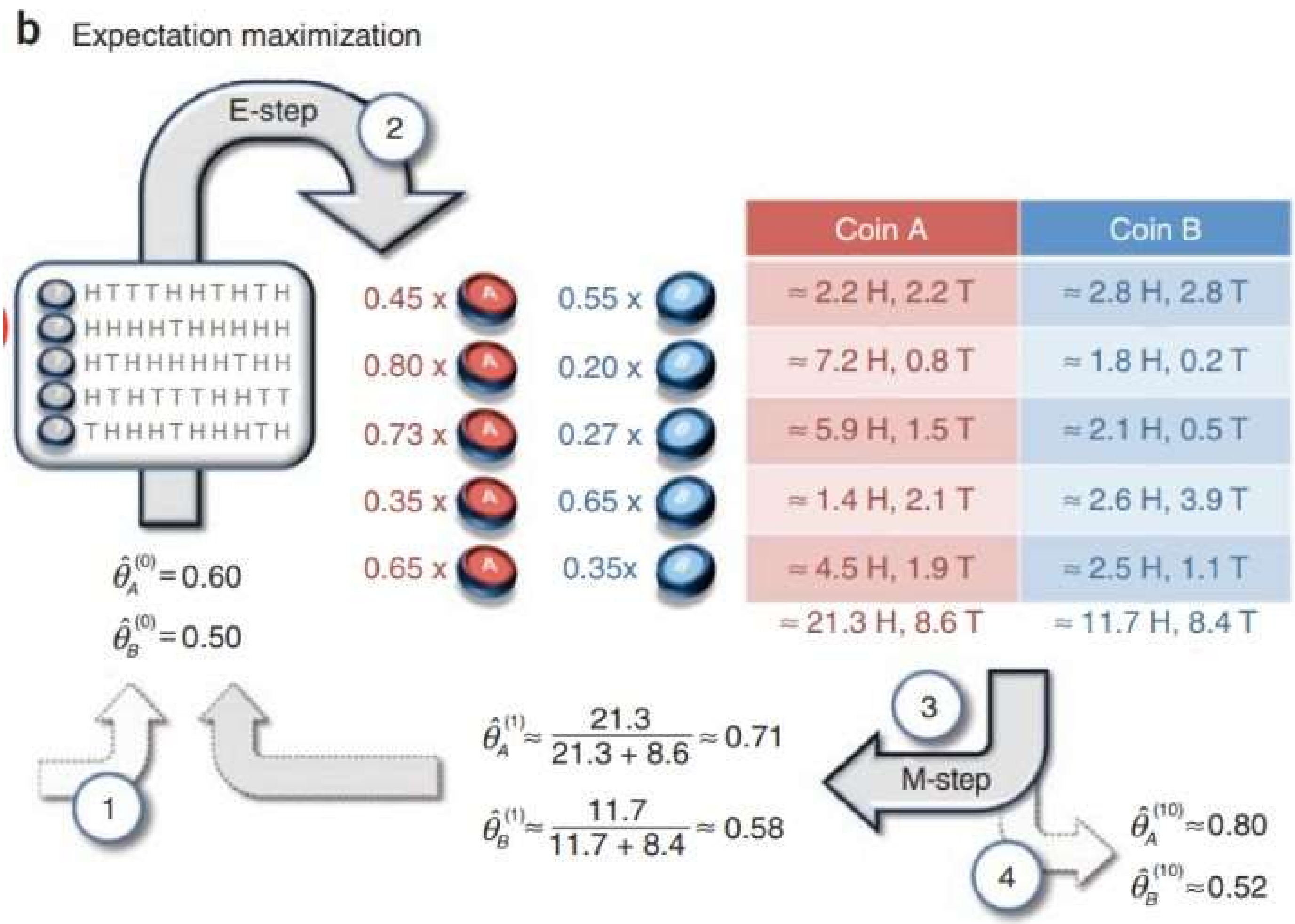
简单来说，每一组参数，都会对应一个观测结果出现的概率。极大似然估计，就是找出使得观测结果出现的概率最大的参数。

1.EM算法

之所以说EM算法是极大似然估计的扩展，是因为EM算法其实就是一种用迭代的方法求解极大似然的方法，而且在这个过程中，允许有部分未知数据。

比如说，现在有两枚硬币A和B，首先随机地决定使用哪个硬币（用A或B的概率为1/2），然后抛这个硬币10次。重复这个实验5次，估计A和B出现正面的概率。

EM算法的步骤大概是这样，先给出一个A和B抛出正面的概率的初始值 θ_A 和 θ_B ，然后在已有观测序列X的情况下，计算出选用了A还是B的后验概率P(A|X)和P(B|X)，然后用极大似然估计求新的 θ_A 和 θ_B 。如此重复，直到结果收敛。步骤如下图。



EM algo

首先是E步，我们以图中的第一次实验为例给出详细步骤。实验中抛出了5正5反，现在来计算P(A|X)。

$$
\begin{aligned}
P(A|X) &= \frac{P(A) \cdot P(X|A)}{P(X)} \\
&= \frac{P(A) \cdot P(X|A)}{P(A) \cdot P(X|A) + P(B) \cdot P(X|B)} \\
&= \frac{0.5 \times 0.6^5 \times 0.4^5}{0.5 \times 0.6^5 \times 0.4^5 + 0.5 \times 0.5^5 \times 0.5^5} \\
&= 0.45
\end{aligned}
$$

按照同样的方式计算其他的后验概率，之后就能简单地计算出A和B丢出正面和反面的数学期望了。

接着是M步，有了丢出正面和反面的数学期望，参考第0节求极大似然估计的内容，可以直接用正面期望除以总次数期望，得到更精确的抛出正面的概率的估计值，如上图。

如此反复，得到一个稳定的数值解，这就是EM算法的过程了。

形式化地来说，假定有可观测变量Y，隐变量Z，已知Y和θ的情况下的条件分布P(Z|Y,θ)，以及已知θ的联合分布P(Y,Z|θ)，则通过EM算法来估计参数θ的过程如下。

开始需要选择一个θ的初值，然后交替执行E步和M步。

E步：在拥有上一次迭代的参数θ的情况下，计算Q函数。（Q函数的由来就不讨论了）

$$\begin{aligned} Q(\theta, \theta^{(i)}) &= E_z[logP(Y, Z|\theta)|Y, \theta^{(i)}] \\ &= \sum_Z logP(Y, Z|\theta)P(Z|Y, \theta^{(i)}) \end{aligned}$$

Q函数的定义是给定Y和 $\theta^{(i)}$ 的情况下， $logP(Y, Z|\theta)$ 的期望，这个概率中的Z是自变量。

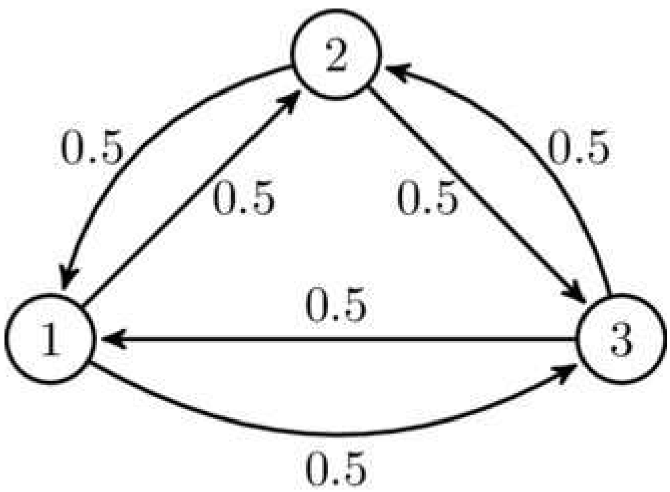
M步：类似于极大似然估计，求使Q函数极大化的θ作为新的参数估计值。

$$\theta^{(i+1)} = \arg\max_\theta Q(\theta, \theta^{(i)})$$

在下面的隐马尔可夫模型中也会用到EM算法。

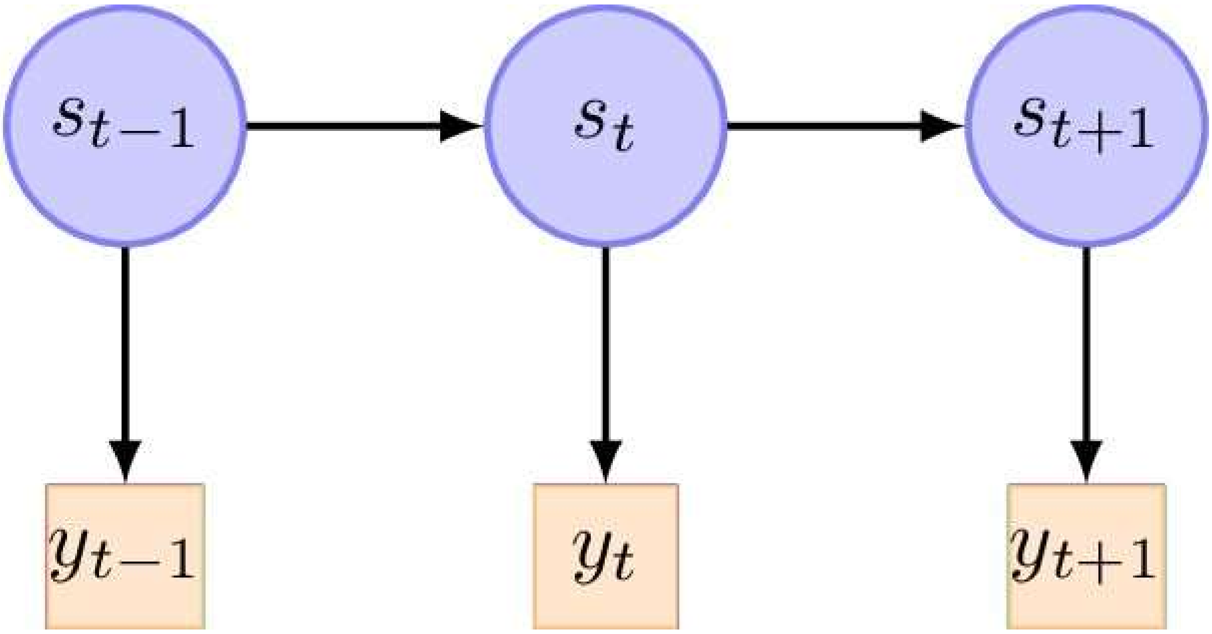
2.隐马尔科夫模型

假定有一个随机序列，序列中的每一个随机变量只与序列中的上一个变量有关，则将这个序列称为一阶马尔可夫链。变量在时刻n的取值称为在n时刻的状态。所有可能的取值构成状态集合。我们一般研究齐次马氏链，所谓齐次是指，状态的转移概率平稳，不随时刻的变化而变化。



Markov chain

隐马尔科夫模型（Hidden Markov Model, HMM）也是关于时序的概率模型。该模型有一个隐藏的马尔可夫链，用来产生隐藏的状态序列，然后经由每一个状态，生成观测序列。



Hidden Markov Model

具体来说,如果有状态序列I，观测序列O，运用隐马尔可夫模型，会有一个状态集合Q，观测集合V，状态转移矩阵A，观测概率矩阵B，以及初始状态概率向量 π 。

状态序列I由初始状态 π 和状态转移矩阵A生成，观测序列O由状态序列I和观测概率矩阵B生成。因此，可将隐马尔可夫模型表示为一个三元组。

$$\lambda = (A, B, \pi)$$

运用HMM时，有三个基本问题：

1. 评估问题（Evaluation）：给定一个HMM模型λ和观测序列O，计算条件概率P(O|λ)。
2. 解码问题（Decoding）：给定一个HMM模型λ和观测序列O，求最可能的状态序列I。
3. 学习问题（Learning）：给定观测序列O，学习模型λ的参数，使得P(O|λ)最大。

前两个问题可以用动态规划来接，第三个问题就会用到之前讨论的EM算法。我们一个一个地来看。

1. 概率计算

直接用分情况计算概率然后求和的方法，需要枚举状态序列，可能性是指数增长的，计算效率无法接受。因此，换用动态规划的前向-后向算法。

先梳理一下过程中用到符号。

状态集合的大小为N， $Q=\{q_1,q_2,...,q_N\}$ 。

观测集合的大小为M， $V=\{v_1,v_2,...,v_N\}$ 。

状态转移矩阵为A， $A(q_i,q_j)$ 表示从状态 q_i 转移到状态 q_j 的概率。

观测概率矩阵为B， $B(q_i,v_j)$ 表示在状态为 q_i 时，产生观测值 v_j 的概率。

状态序列为I，长度为T， $I=(i_1,i_2,...,i_T),i_t\in Q$

观测序列为O，长度与状态序列相同， $O=(o_1,o_2,...,o_T),o_t\in V$

我们定义前向概率，给定一个HMM模型λ，到时刻t为止的观测序列为 $O_t=(o_1,o_2,...,o_t)$ ，且当前状态为 $i_t=q_i$ 的概率即为前向概率。

$$\alpha_t(i)=P(o_1,o_2,...,o_t,i_t=q_i|\lambda)$$

首先，当t=1时，是平凡的，我们可以直接确定。

$$\alpha_1(i)=\pi_i B(q_i,o_1),\ \ i=1,2,...,N$$

接下来是递推的过程，在时刻t，前向概率的递推公式为：

$$\alpha_{t+1}(i)=\left[\sum_j \alpha_t(j)A(q_j,q_i)\right]B(q_i,o_{t+1}),\ \ i=1,2,...,N$$

对时刻T时的所有可能的状态的前向概率进行加总，得到P(O|λ).

$$P(O|\lambda)=\sum_i \alpha_T(i)$$

可以明显的可以感觉到有一个动态规划的过程，假定有动态规划的数组dp，dp[t][i]即为 $\alpha_t(i)$ ，通过递推从左至右，从上到下的填满整个dp数组。

代码如下：

```python
def forward(pi, A, B, O):
    """forward algorithm for HMM

    Args:
        pi: initial probability
        A: state transition matrix
        B: observation emission matrix
        O: observation sequence
    Returns:
        forward probability matrix alpha
    """
    N, M = B.shape
    T = O.shape[0]

    alpha = np.zeros((T, N))
    alpha[0,:] = pi * B[:, O[0]]

    for t in range(1, T):
        alpha[t, :] = alpha[t-1, :].dot(A) * B[:, O[t]]

 return alpha

def oseqProb(alpha):
    """ calc P(O|lambda)

    Returns:
        the probability that the observation sequences
        occur given parameters lambda
    """
    return np.sum(alpha[-1])
```

后向算法的过程类似，可以求出后向概率 $\beta_t(i)$ 。利用α和β，可以求一些有用的概率。比如：

1.给定模型λ和观测序列O，时刻t的状态为 q_i 的概率

$$
\begin{aligned}
\gamma_t(i) &= P(i_t = q_i|\lambda, O) \\
&= \frac{P(i_t = q_i, O|\lambda)}{P(O|\lambda)} \\
&= \frac{\alpha_t(i)\beta_t(i)}{P(O|\lambda)}
\end{aligned}
$$

2.给定模型λ和观测序列O，时刻t的状态为 q_i 且时刻t+1的状态为 q_j 的概率

$$
\begin{aligned}
\xi_t(i,j) &= P(i_t = q_i, i_{t+1} = q_j|\lambda, O) \\
&= \frac{P(i_t = q_i, i_{t+1} = q_j, O|\lambda)}{P(O|\lambda)} \\
&= \frac{\alpha_t(i)A(q_i, q_j)B(q_j, o_{t+1})\beta_{t+1}(j)}{P(O|\lambda)}
\end{aligned}
$$

代码如下：

```
def getGamma(alpha, beta):
    """ calc gamma values

    Returns:
        A probability matrix that gamma[t,i] is the
        probability that the state at time t is
        definitely i given observation sequences and
        Model parameters lambda.
    """
    return (alpha * beta) / oseqProb(alpha)


def getKsi(A, B, alpha, beta, O):
    """calc ksi values
    Returns:
        ksi probability tensor
    """
    N, M = B.shape
    T = alpha.shape[0]

    xi = np.zeros((T-1, N, N))
    for t in range(T-1):
        xi[t,:,:] = np.outer(alpha[t], beta[t+1]*B[:, O[t+1]]) * A
        xi[t,:,:] /= np.sum(xi[t,:,:])

    return xi
```

2. 解码

解码问题也可以用动态规划来解决，这里叫做维特比算法（Viterbi）。解码问题实际上是根据观测序列，求出一条最有可能的状态序列的路径（最优路径）。

其思想是这样，求得时刻t之前的最优路径后，递推地求时刻t+1之前的最有路径，递推到时刻T时，则求得整体的最优路径。

仍用上一小节的符号，先定义两个变量δ和ψ：

1. 时刻1到时刻t的所有路径中，在时刻t的状态为 q_i 的路径中概率的最大值为

$$\delta_t(i)=\max_{i_1,i_2,\ldots,i_{t-1}} P(i_t=q_i,i_{t-1},\ldots,i_1,O_t|\lambda),\ \ i=1,2,\ldots,N$$

2. 时刻1到时刻t的所有路径中，在时刻t状态为 q_i 的路径中概率最大的路径的t-1个结点为

$$\Psi_t(i)=\arg\max_{1\leqslant j\leqslant N}\left[\delta_{t-1}(j)A(q_j,q_i)\right],\ \ i=1,2,\ldots,N$$

δ用于选择路径，ψ用于找出具体的路径节点。

维特比算法的过程如下。

与前向算法一样，先初始化δ和ψ，在时刻t=1的情况。

$$\delta_1(i)=\pi_i B(q_i,o_1),\ \ i=1,2,\ldots,N$$

$$\Psi_1(i)=0,\ \ i=1,2,\ldots,N$$

然后进行递推，递推公式如下：

$$\delta_t(i)=\max_{1\leqslant j\leqslant N}\left[\delta_{t-1}(j)A(q_j,q_i)\right]B(q_i,o_t),\ \ i=1,2,\ldots,N$$

$$\Psi_t(i)=\arg\max_{1\leqslant j\leqslant N}\left[\delta_{t-1}(j)A(q_j,q_i)\right],\ \ i=1,2,\ldots,N$$

设最后求出的最优路径为 $I^*=(i_1^*,i_2^*,\ldots,i_T^*)$ ，则最优路径的概率 P^* *和最优路径的最后一个节点* i_T^* 为

$$P^*=\max_{1\leqslant i\leqslant N}\delta_T(i)$$

$$i_T^*=\arg\max_{1\leqslant i\leqslant N}\delta_T(i)$$

利用ψ，可以逐步回溯，求出完整最优路径。

$$i_t^* = \Psi_{t+1}(i_{t+1}^*), \quad t = T-1, T-2, \ldots, 1$$

代码如下：

```
def decode(pi, A, B, O):
    """ decode
    Returns:
        the most likely state sequence given observation
        sequence O and HMM parameters lambda
    """
    N, M = B.shape
    T = O.shape[0]

    delta = np.zeros((T,N))
    psi = np.zeros((T,N))

    delta[0, :] = pi * B[:, O[0]]
    for t in range(1, T):
        for i in range(N):
            delta[t, i] = np.max(delta[t-1] * A[:, i]) * B[i, O[t]]
            psi[t, i] = np.argmax(delta[t-1] * A[:, i])

    I = [0] * T
    I[T-1] = np.argmax(delta[T-1])

    for t in range(T-2, -1, -1):
        I[t] = psi[t+1, I[t+1]]

    return I
```

3. 参数估计

参数估计问题，也就是学习问题，可以分为有监督和无监督两种情况讨论。有监督的情况下需要训练数据，比如一系列的状态序列和观测序列的二元组。这种情况下，可以通过统计频率来估计概率，只需要简单的进行统计即可估计出参数。因此，我们主要讨论无监督的情况。

无监督学习的情况，只给出一系列的观测序列，需要通过参数估计的方式确定参数λ。如同我们在第1节提到的那样，针对HMM这种有隐变量的情况，需要使用基于迭代的EM算法，来学习出模型的参数。下面我们来看如何将EM算法运用于HMM模型。

假定观测数据为 $O=(o_1,o_2,...,o_T)$ ，隐藏的状态数据为 $I=(i_1,i_2,...,i_T)$ ，隐马尔可夫模型的参数为 $\lambda=(\pi,A,B)$ ，迭代过程中估计的参数为 $\overline{\lambda}$ 。

就像前面描述的一样，我们需要先计算Q函数。

$$
\begin{aligned}
Q(\lambda,\overline{\lambda}) &= \sum_I logP(O,I|\lambda)P(I|O,\overline{\lambda}) \\
&= \sum_I logP(O,I|\lambda)\frac{P(O,I|\overline{\lambda})}{P(O|\overline{\lambda})} \\
&\Rightarrow \sum_I logP(O,I|\lambda)P(O,I|\overline{\lambda})
\end{aligned}
$$

注意公式第3行，由于Q是关于λ的函数，第2行中的 $P(O|\overline{\lambda})$ 与λ无关，所以可以略去常数因子 $\frac{1}{P(O|\overline{\lambda})}$ ，而不影响M步对参数的优化。

P(O,I|λ)可以用π，A，B计算。

$$P(O,I|\lambda)=\pi_{i_1}B(i_1,o_1)A(i_1,i_2)B(i_2,o_2)...A(i_{T-1},i_T)B(i_T,o_T)$$

于是将Q函数进一步展开。

$$
\begin{aligned}
Q(\lambda,\overline{\lambda}) = & \sum_I log\pi_{i_1}P(O,I|\overline{\lambda}) \\
& + \sum_I\left(\sum_{t=1}^{T-1} logA(i_t,i_{t+1})\right)P(O,I|\overline{\lambda}) \\
& + \sum_I\left(\sum_{t=1}^{T} logB(i_t,o_t)\right)P(O,I|\overline{\lambda})
\end{aligned}
$$

上面的过程将Q函数分成三个部分，每个部分只含有单独的π，A，B。因此，可以分别优化π，A，B，对三个部分单独进行极大化。

对于第一部分，求和实际上是对路径的枚举，因此可以进行转化。

$$\sum_I log\pi_{i_1} P(O, I|\overline{\lambda}) = \sum_{j=1}^{N} log\pi_j P(O, i_1 = q_j|\overline{\lambda})$$

利用约束条件 $\sum_{j=1}^{N} \pi_j = 1$ 和拉格朗日乘子法，可以解得

$\pi_i = \gamma_1(i)$

同样，对于A和B，可以解得

$$A(q_i, q_j) = \frac{\sum_{t=1}^{T-1} \xi_t(i, j)}{\sum_{t=1}^{T-1} \gamma_t(i)}$$

$$B(q_i, o_j) = \frac{\sum_{t=1, o_t=v_j}^{T} \gamma_t(i)}{\sum_{t=1}^{T} \gamma_t(i)}$$

运用上面的公式进行递推直到收敛，就可以得到HMM的参数估计。这个隐马尔可夫模型上的EM算法的具体实现又被称为Baum-Welch算法。

代码如下：

```
def maximization(pi, A, B, O):
 """ get new parameters
    Returns:
        new parameters that maximize function Q
    """
    alpha = forward(pi, A, B, O)
    beta = backward(pi, A, B, O)

    N, M = B.shape
    T = O.shape[0]

    gamma = getGamma(alpha, beta)
    ksi = getKsi(A, B, alpha, beta, O)

    new_pi = gamma[0, :]
    new_A = np.sum(ksi, axis=0) / \
            np.sum(gamma[0:T-1, :], axis=0).reshape([N, 1])

    new_B = np.zeros((N, M))
 for j in range(M):
        new_B[:, j] = np.sum((O == j).reshape([T, 1]) * gamma, axis=0)
```

```
        new_B[:, j] /= np.sum(gamma, axis=0)

    return new_pi, new_A, new_B
```

参考文献：

1. What is the expectation maximization algorithm?
2. 【深度剖析HMM（附Python代码）】 --CSDN
3. 李航. 统计学习方法[M]. 清华大学出版社, 2012
4. Markov chain - Wikipedia
5. The Basic of Hidden Markov Model