Sequence Learning: HMM

介绍

1. Sequential Data 序列数据

基于时间序列的数据，包含顺序信息。

举例：手写字迹、DNA

性质：can't reverse 不能改变顺序

2. Advantage of HMM on Sequential Data

使用HMM处理时间序列的优势：

- 快，高效
- 有三个高效的算法：evaluation，decoding，training

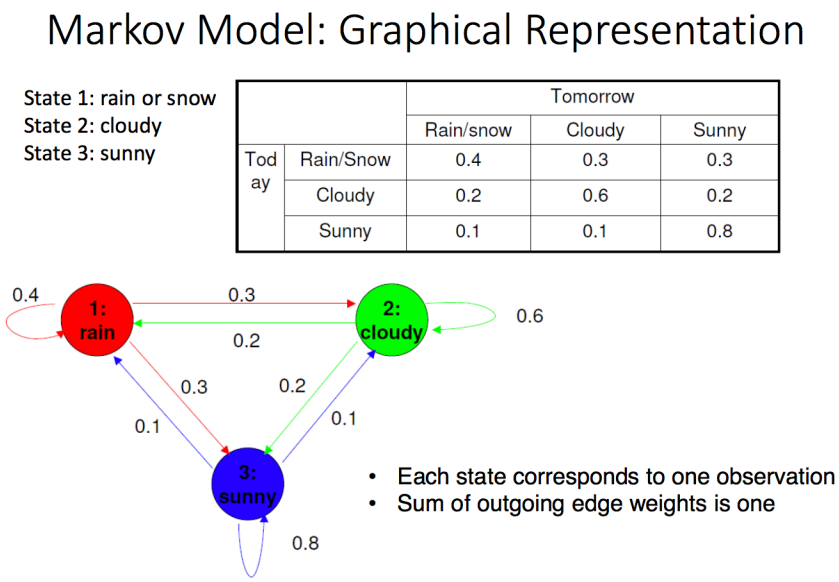
3. HMM的应用

- 线上手写识别
- 演讲翻译、识别
- 视频分析、追踪
- 基因序列
- 股票价格预测

Markov Model

1. 使用场景 Scenario

根据前一天的天气情况，预测下一天的天气。



> 注意：输出边的权重之和是1。

2. 定义

基本定义

- 观测状态：s_1, s_2, s_3

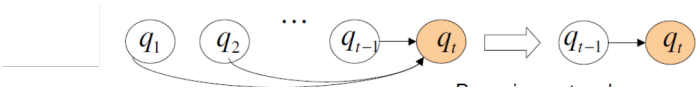
> 在这里即：雨雪，多云，晴天

- 观测序列：$q_1, q_2, ..., q_T$

> 某一时间点t的状态

性质说明

- 马尔可夫假设：当前时间点的状态，仅与上一个时间点的状态有关。



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

- 当前时间点的状态，与时间点没有关系。

> t 可为任意值。

$$P(q_t = j \mid q_{t-1} = i) = P(q_{t+l} = j \mid q_{t+l-1} = i)$$

状态转移矩阵

- 状态转移矩阵

• State transition matrix

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1N} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{N1} & a_{NN} & \cdots & a_{NN} \end{bmatrix}$$

– Where $a_{ij} = P(q_t = j \mid q_{t-1} = i), \qquad 1 \le i, j \le N$

– With constraints $a_{ij} \ge 0, \qquad \sum_{j=1}^{N} a_{ij} = 1$

其中，a_{ij}表示：上一个时间点状态为s_i，下一个时间点状态为s_j的概率。即，$a_{ij} = P(q_t = s_j | q_{t-1} = s_i)$

- 初始的状态概率

• Initial state probability

$$\pi_i = P(q_1 = i), \qquad 1 \le i \le N$$

3. 使用Markov Model，解决Sequence Problem

解决的问题

出现某一时间序列的概率 $P(q_1, q_2, ..., q_T)$

> 已知时间序列上的各个状态，以及状态转移矩阵。求解出现这种时间序列的概率。

利用Markov Model求解

$$P(q_1, q_2, \cdots, q_T)$$

Chain rule

$$= P(q_1)P(q_2 \mid q_1) \cdots P(q_{T-1} \mid q_1, \cdots, q_{T-2}) P(q_T \mid q_1, \cdots, q_{T-1})$$

$$= P(q_1)P(q_2 \mid q_1) \cdots P(q_{T-1} \mid q_{T-2}) P(q_T \mid q_{T-1})$$

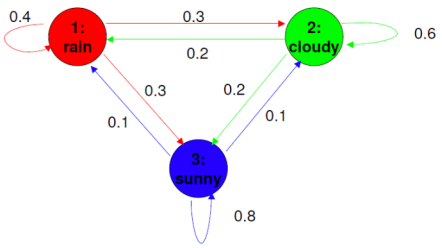
1st order Markov assumption

举例

问题

Question: What is the probability that the weather for the next 7 days will be "sun-sun-rain-rain-sun-cloudy-sun" when today is sunny?

$S_1 : rain, S_2 : cloudy, S_3 : sunny$



已知$P(q_1, q_2, \ldots, q_8) = P(s_3, s_3, s_3, s_1, s_1, s_3, s_2, s_3)$，且$P(q_1 = s_3) = 1$

求该概率值。

求解

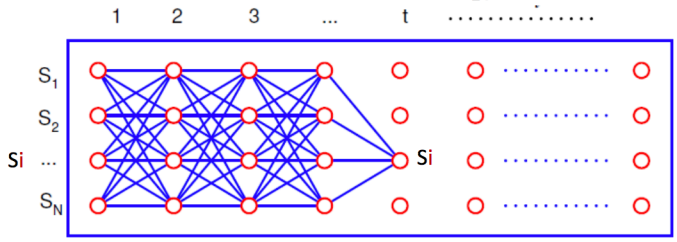
$$
\begin{aligned}
&= P(s_3) * P(s_3|s_3) * P(s_3|s_3) * P(s_1|s_3) * P(s_1|s_1) * P(s_3|s_1) * P(s_2|s_3) * P(s_3|s_2) \\
&= \pi_3 * a_{33} * a_{33} * a_{31} * a_{11} * a_{13} * a_{32} * a_{23}
\end{aligned}
$$

4. 使用Markov Model，解决State Probability

解决的问题

求解某一时间点的状态为s_i的概率 $P(q_t = s_i)$

- State probability at time t: $P(q_t = i)$



方法一：耗时

遍历所有路线，求和。

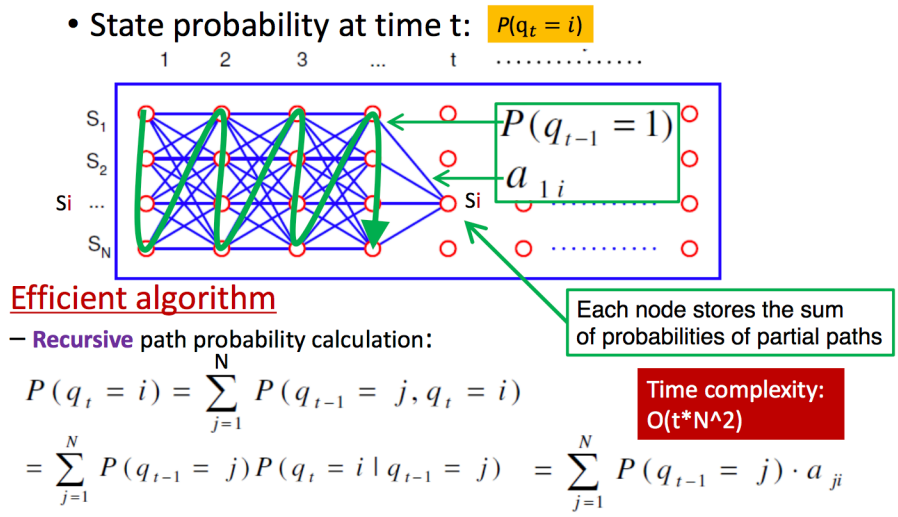
时间复杂度为$O(N^t)$

方法二：每个节点记录了自己的概率

> 例如，第一列节点分别记录$P(q_1 = s_1), P(q_1 = s_2) \ldots P(q_1 = s_N)$
>
> 第二列节点，可以根据第一列节点值进行计算。
>
> $P(q_2 = s_1) = P(q_1 = s_1) * a_{11} + P(q_1 = s_2) * a_{21} \ldots + P(q_N = s_1) * a_{N1}$
>
> 即，$P(q_2 = s_1) = \sum_{j=1}^{N} P(q_1 = s_j) * a_{j1}$
>
> 以此类推。

则某一时间点的状态为s_i的概率，就是前一个节点出现的概率乘上状态转移值，遍历求和。

$P(q_t = s_i) = \sum_{j=1}^{N} P(q_{t-1} = s_j) * a_{ji}$

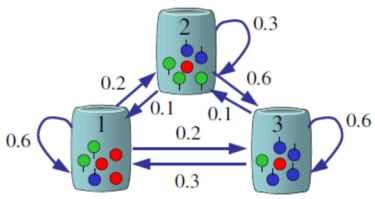


时间复杂度为$O(t * N^2)$

Hidden Markov Model （HMM）隐式马尔可夫

> 上一个问题，我们讨论的是在不同时间节点时不同状态的概率。
>
> 现在，我们在同一状态下，还会产生不同的符号。即在确定当前时间节点的状态后，还会有不同的概率产生不同的符号。

1. 举例



- N urns containing color balls (urn1, urn2, urn3)
- M distinct colors (red, green, blue)
- Each urn contains different number of color balls

图中有三个桶，表示三个状态。上图已有状态转移矩阵。

> 根据，之前的学习内容，我们可以计算得到：1. 某个序列的概率 2. 某个时间点是某一状态的概率，即$P(q_t = s_i)$。

如今，每一个桶分别有不同个数不同颜色的球。

用N表示状态种类数（桶的种类数），用M表示符号种类数（球的种类数）

2. 生成过程

步骤

1. 随机选一个初始的桶（初始状态的概率）
2. 随机选出这个桶中的一个颜色的球（不同颜色的球在这个桶中的概率）
3. 随机选下一个桶（状态转移矩阵）
4. 重复第2步、第3步。

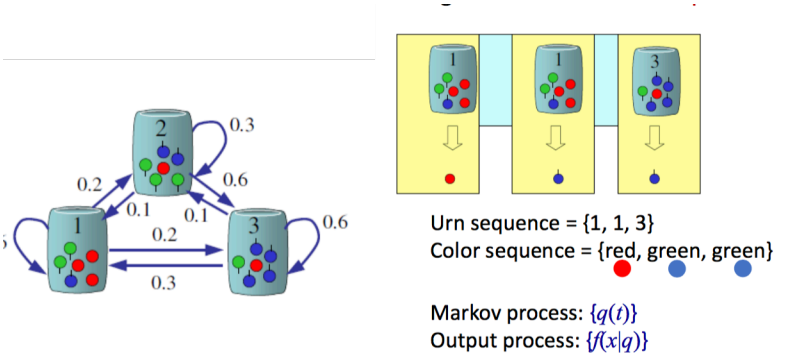
- Sequence generating algorithm
  - Step 1: Pick initial urn according to some random process
  - Step 2: Randomly pick a ball from the urn and then replace it
  - Step 3: Select another urn according to a random selection process
  - Step 4: Repeat steps 2 and 3

结果

最终，我们会得到两个序列。

一个是状态序列。（即桶的序列）【这是我们已经会求的概率】

一个是符号序列。（即球的颜色序列）【在确定状态序列后，我们也可以求得该概率】



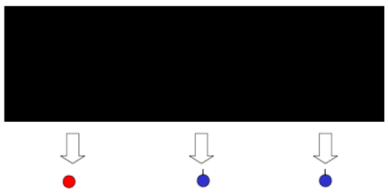
3. HMM的定义

对Hidden的理解

我们只看到符号序列，而不知道状态序列。

在上一个例子中，也就是我们只看到最终球的颜色序列，而不知道桶的选择序列。

- Now, what is hidden?



  - We can just see the chosen balls
  - We can't see which urn is selected at a time
  - So, urn selection (state transition) information is hidden

定义

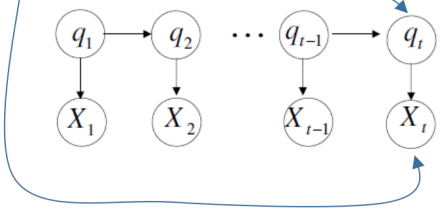
- Notation: λ = (A, B, π)
  ① N: Number of states
  ② M: Number of symbols observable in states
  $V = \{v_1, \dots, v_M\}$
  ③ A: State transition probability distribution
  $A = \{a_{i,j}\}, 1 \le i, j \le N$
  ④ B: Observation symbol probability distribution (emission)
  $B = \{b_i(v_k)\}, 1 \le i \le N, 1 \le j \le M$
  ④ π: Initial state distribution
  $\pi = \{P(q_1 = i), 1 \le i \le N$

> N：桶的个数，即状态数。$s_1, s_2 \dots$
>
> M：球颜色的个数，即符号数。$v_1, v_2 \dots$
>
> A：状态转移矩阵。a_{ij}表示i桶后取j桶的概率。
>
> B：符号在不同状态下的分布。$b_i(v_k)$表示第i个桶取第k个颜色的概率。
>
> π：初始状态分布。

性质说明

- Conditional independency of observation parameters

$$P(X_t|q_t, X_1, \dots, X_{t-1}, q_1, \dots, q_{t-1}) = P(X_t|q_t)$$



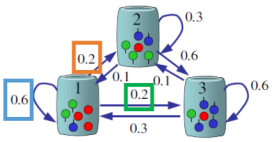
在已经确定状态序列时，当前时间节点取出符号的概率，只与状态有关。

也就是说，若确定了q_t，则$P(X_t|q_t)$只与q_t有关。比如，q_t是第3个桶，则t时刻红球的概率是$1/6$。

举例

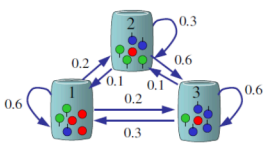
- # of states: N=3
- # of observation: M=3 $V = \{R, G, B\}$
- Initial state distribution $\pi = \{P(q_1 = i)\}$ = [1, 0, 0]
- State transition probability distribution

$$A = \{a_{ij}\} = \begin{bmatrix} 0.6 & 0.2 & 0.2 \\ 0.1 & 0.3 & 0.6 \\ 0.3 & 0.1 & 0.6 \end{bmatrix}$$



- Observation symbol probability distribution

$$B = \{b_i(v_k)\} = \begin{bmatrix} 3/6 & 2/6 & 1/6 \\ 1/6 & 3/6 & 2/6 \\ 1/6 & 1/6 & 4/6 \end{bmatrix}$$



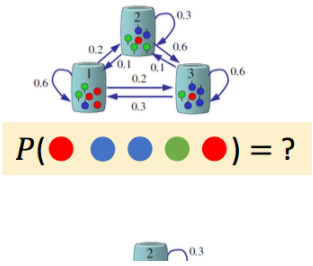
Three Algorithms of HMM

1. 三种问题概述

> 说明：下图中的λ指的是模型。

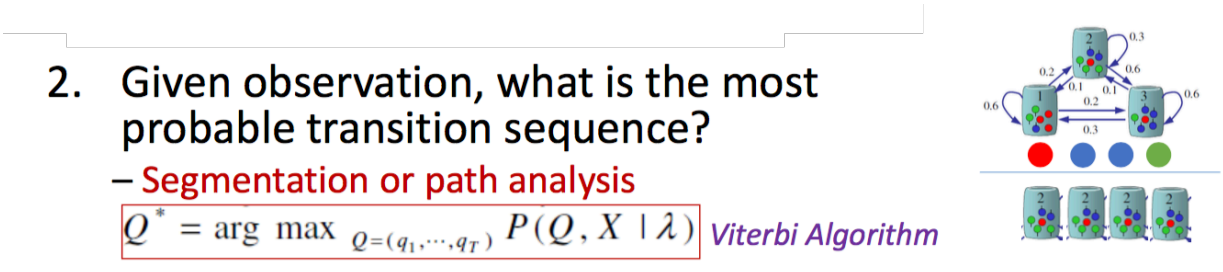
问题1: 产生某一个观察序列的概率

> 比如，得到P(红球，蓝球，蓝球，绿球，红球)的概率是多少?



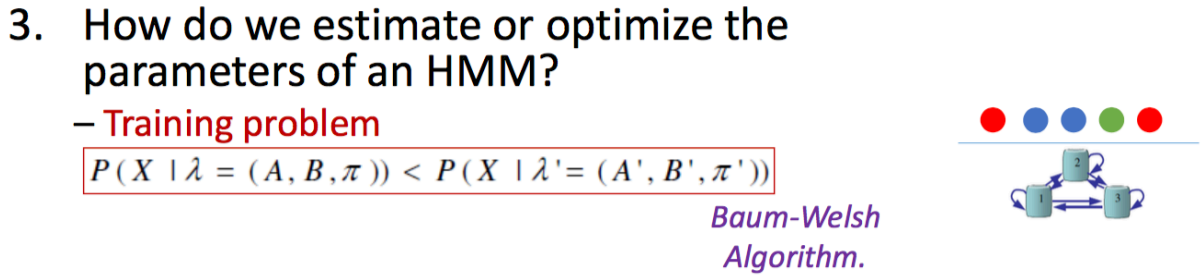
问题2: 根据已得到的观察序列，计算最有可能的状态序列

> 比如，已知最终得到了红球、蓝球、蓝球、绿球，计算可能的桶的序列



问题3: 如何估计或者优化HMM参数

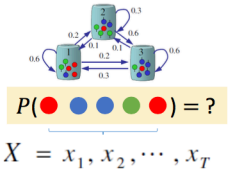
> 比如，已知最终得到了红球、蓝球、蓝球、绿球，但不知道状态转移矩阵、符号分布矩阵和初始值，如何去估计。



2. 问题1 —— Model Evaluation 模型评估

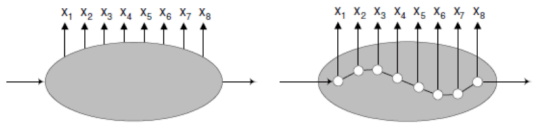
描述问题

- Definition
  - Given a model λ
  - Observation sequence: $X = x_1, x_2, \cdots, x_T$
  - P(X| λ) = ?



  - $P(X \mid \lambda) = \sum_Q P(X, Q \mid \lambda) = \sum_Q P(X \mid Q, \lambda) P(Q \mid \lambda)$

    (A path or state sequence: $Q = q_1, \cdots, q_T$)



- 问题定义：给定模型λ，给定观察序列$X = x_1, x_2, ..., x_T$，计算该观察序列的概率$P(X|\lambda)$。
- 问题举例：给定观察序列是**红球，蓝球，蓝球，绿球，红球**，求这种情况的概率。

解决方法一：耗时

遍历每一个状态线路，求这条线路上产生该观察序列的概率，求和。

时间复杂度$O(N^T)$

解决方法二：Forward Algotithm

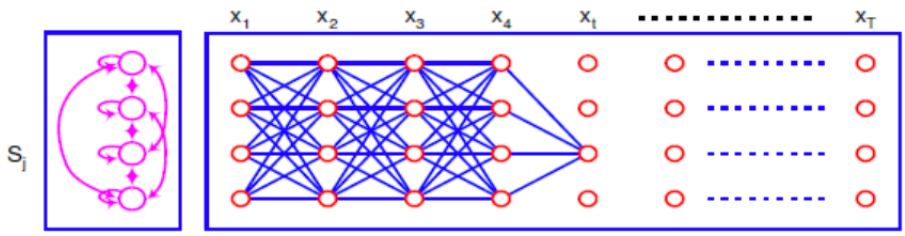
1. 每个节点的保存

每个节点保存的值表示：当前时间点t的状态是s_j，且观察结果是x_t的概率$\alpha_t(j)$。其中观察结果是已经确定的值。

$\alpha_t(j) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_{t-1}(i) * a_{ij} * b_j(x_t)$

> $\alpha_{t-1}(i)$：上一个时间点，由i桶产生x_{t-1}的概率。
>
> a_{ij}：i桶到j桶的概率。
>
> $b_j(x_t)$：j桶产生x_t的概率。

比如，第二个时间点是第3个桶产生蓝球的概率；第二个时间点是第4个桶产生蓝球的概率（说明：第二个时间点一定是产生蓝球）。



2. 完整算法

- Initialization

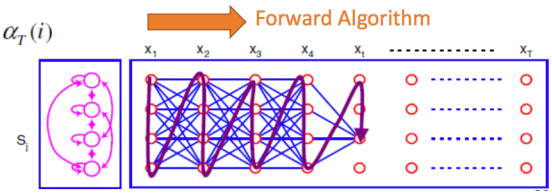
$$\alpha_1(i) = \pi_i b_i(\mathbf{x}_1) \qquad 1 \le i \le N$$

- Induction

$$\alpha_t(j) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_{t-1}(i) a_{ij} b_j(\mathbf{x}_t) \qquad 1 \le j \le N,\ t = 2, 3, \cdots, T$$

- Termination

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

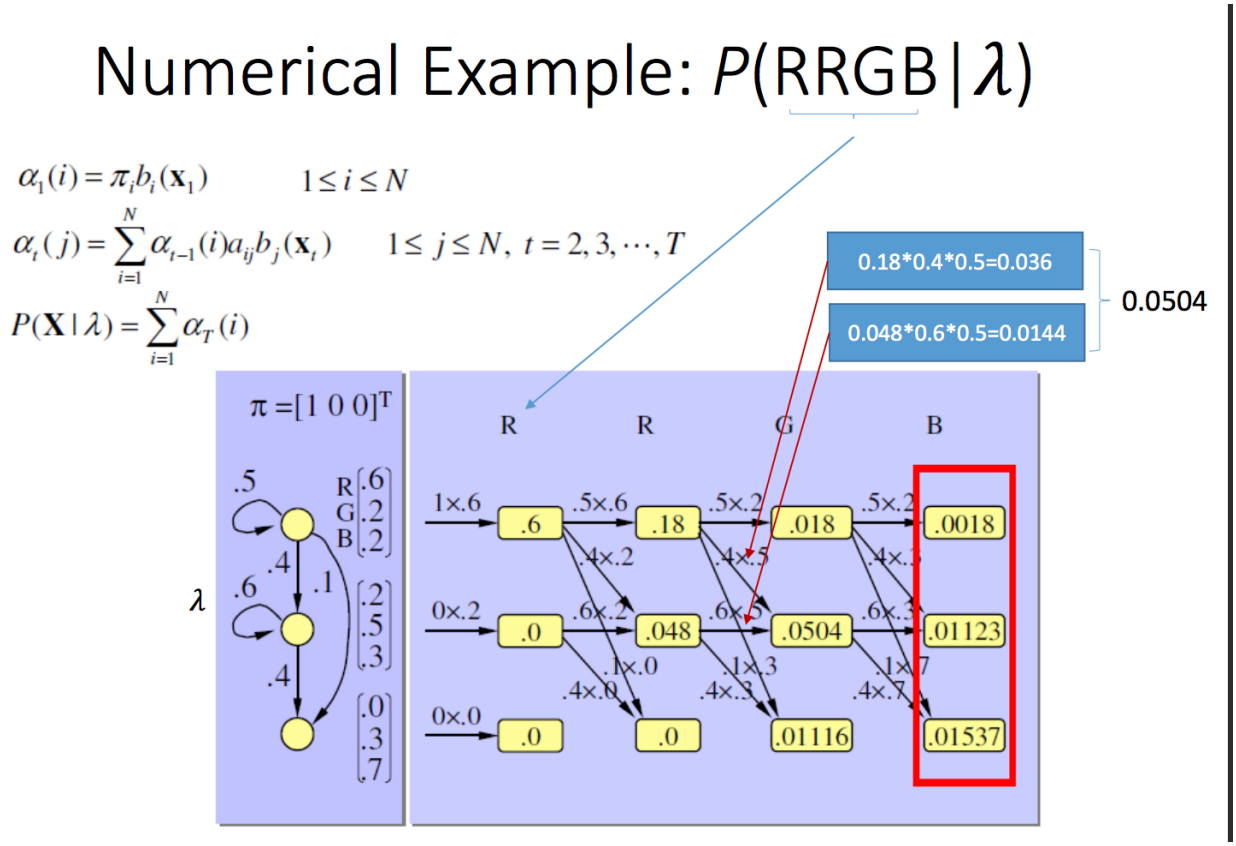


初始值：每个桶的初始概率乘上能产生x_1结果的概率。

每个节点的计算

最终值：t时刻，各节点求和。

3. 计算举例



解决方法三：Backward Algotithm

1. 每个节点的保存

> 第三列的含义：
>
> 当前时间点是3，状态为桶1。此时，时间点是4得到蓝球的概率p_1。
>
> 当前时间点是3，状态为桶2。此时，时间点是4得到蓝球的概率p_2。
>
> 当前时间点是3，状态为桶3。此时，时间点是4得到蓝球的概率p_3。

> 第二列求值：
>
> - 当前时间点是2，状态为桶1。此时，时间点是$3,4$得到绿球、蓝球的概率：
>
> $a_{11} * b_{1绿球} * p_1 + a_{12} * b_{2绿球} * p_2 + a_{13} * b_{3绿球} * p_3$

每个节点保存的值表示：当前时间点t的状态是s_i，从$t+1$到T的观察结果是$x_{t+1},...x_T$的概率$\beta_t(i)$。其中观察结果是已经确定的值。

$\beta_t(i) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_{t-1}(i) * a_{ij} * b_j(x_t)$

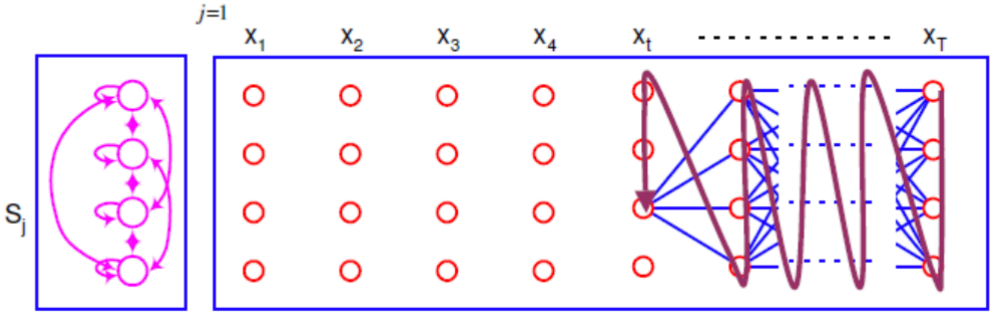
2. 完整算法

- Initialization

$$\beta_T(i) = 1 \qquad 1 \le i \le N$$

- Induction

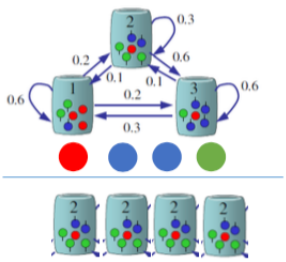
$$\beta_t(i) = \sum_{j=1}^{N} a_{ij} b_j(\mathbf{x}_{t+1}) \beta_{t+1}(j) \qquad 1 \le i \le N, \quad t = T-1, T-2, \cdots, 1$$



3. 问题2 —— Most Probable Path 寻找最可能的时间序列

> Viterbi Algorithm

说明

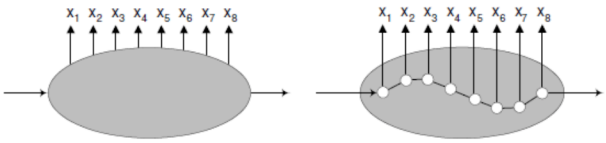


已知状态转移概率、观察符号的概率，以及最终的观察序列。求最可能的状态序列

描述问题

The Most Probable Path

- Given a model λ
- Observation sequence: $X = \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_T$
- $P(X, Q \mid \lambda) = ?$
- $Q^* = \arg\max_Q P(X, Q \mid \lambda) = \arg\max_Q P(X \mid Q, \lambda) P(Q \mid \lambda)$
  - (A path or state sequence: $Q = q_1, \cdots, q_T$)



- 问题定义：给定模型λ，给定观察序列$X = x_1, x_2, ..., x_T$，计算最有可能的状态序列。
  $Q^* = \arg\max_Q P(X, Q|\lambda) = \arg\max_Q P(X|Q, \lambda) * P(Q|\lambda)$

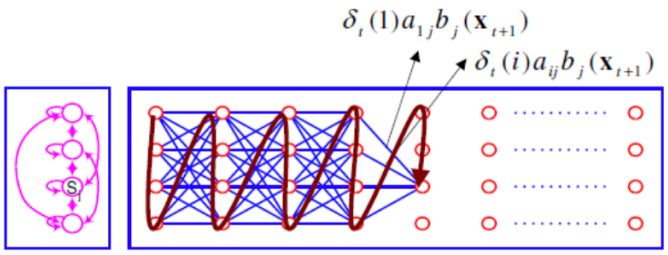
问题解决：Viterbi Algorithm

> 动态规划

1. 节点保存

保存时间t时，到达每个状态i的最可能路径的概率和前一个节点。

每个节点都会计算：



- Path Probability
  - 含义：

    $\delta_t(i)$，时间t时到达状态i的最可能路径的概率。（满足前t个状态序列）
  - 计算

$$\delta_{t+1}(j) = \max_{1 \le i \le N} \delta_t(i) a_{ij} b_j(\mathbf{x}_{t+1})$$

> 遍历前面的节点，分别计算，保存最大值。
>
> 注意：$b_j(x_{t+1})$对于不同的i，值是一样的。

- Path node
  - 含义：

    $\psi_t(i)$，时间t时到达状态i的最可能路径的前一个节点。

> 遍历前面的节点，记录得到最大$\delta_t(i)$的前一个节点。

- 计算：

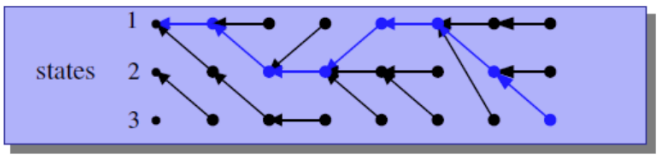
$$\psi_{t+1}(j) = \arg\max_{1 \le i \le N} \delta_t(i) a_{ij}$$

> 即，找到使得$\delta_{t+1}(j)$最大的i值。
>
> 由于$b_j(x_{t+1})$对于不同的i，值是一样的。因此这里可以去掉。

2. 整体算法

Viterbi Algorithm

- Introduction: $\delta_1(i) = \pi_i b_i(\mathbf{x}_1)$, $\psi_1(i) = 0$
- Recursion: $\delta_{t+1}(j) = \max_{1 \le i \le N} \delta_t(i) a_{ij} b_j(\mathbf{x}_{t+1})$, $\psi_{t+1}(j) = \arg\max_{1 \le i \le N} \delta_t(i) a_{ij}$
- Termination: $P^* = \max_{1 \le i \le N} \delta_T(i)$, $q_T^* = \arg\max_{1 \le i \le N} \delta_T(i)$
- Path backtracking: $q_t^* = \psi_{t+1}(q_{t+1}^*), \quad t = T-1, \ldots, 1$



关于Termination说明：

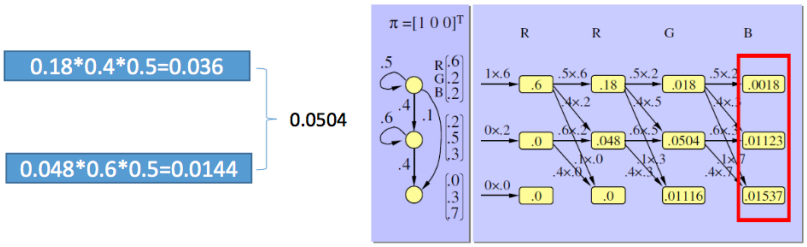
最终在时间T时，遍历所有节点，找到最大的$\delta_T(i)$作为最终的概率P^*。取得最终P^*的节点，记为q_T^*，是最可能路径的最后一个节点。

关于Path backtracking说明：

由于每个节点都记录了前一个节点。因此可以找到路径。

3. 计算举例

Numerical Example: P(RRGB,Q*|λ)

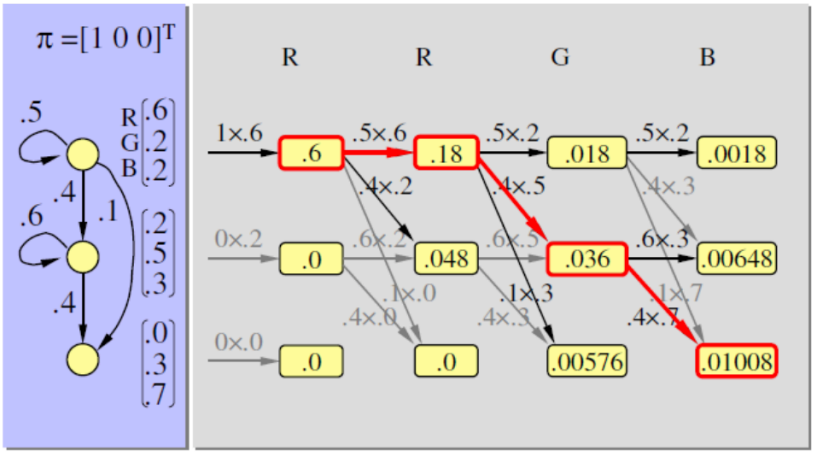


$$\delta_1(i) = \pi_i b_i(\mathbf{x}_1)$$
$$\psi_1(i) = 0$$

$$\delta_{t+1}(j) = \max_{1 \le i \le N} \delta_t(i) a_{ij} b_j(\mathbf{x}_{t+1})$$
$$\psi_{t+1}(j) = \arg\max_{1 \le i \le N} \delta_t(i) a_{ij}$$

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

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



Pattern classification by HMM

Applications of HMM