# Скрытые марковские модели

Сергей Николенко


Центр Речевых Технологий, 2012

Центр Речевых Технологий

# Outline

# Марковские цепи

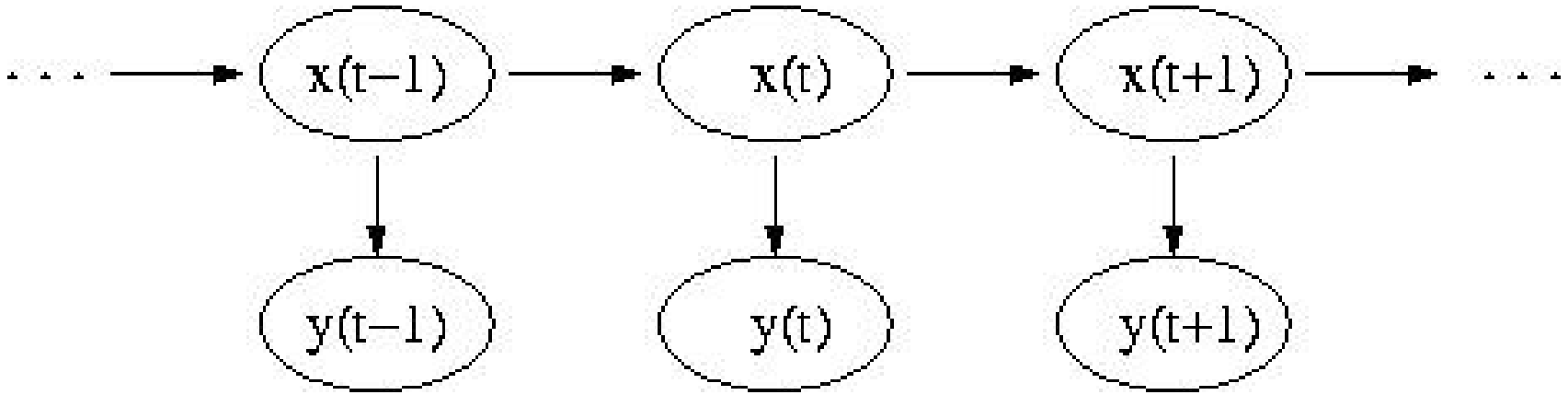
- Марковская цепь задаётся начальным распределением вероятностей $p^0(x)$ и вероятностями перехода $T(x';x)$.
- $T(x';x)$ — это распределение следующего элемента цепи в зависимости от следующего; распределение на $(t+1)$–м шаге равно

$$p^{t+1}(x') = \int T(x';x)p^t(x)\,dx.$$

- В дискретном случае $T(x';x)$ — это матрица вероятностей $p(x'=i|x=j)$.

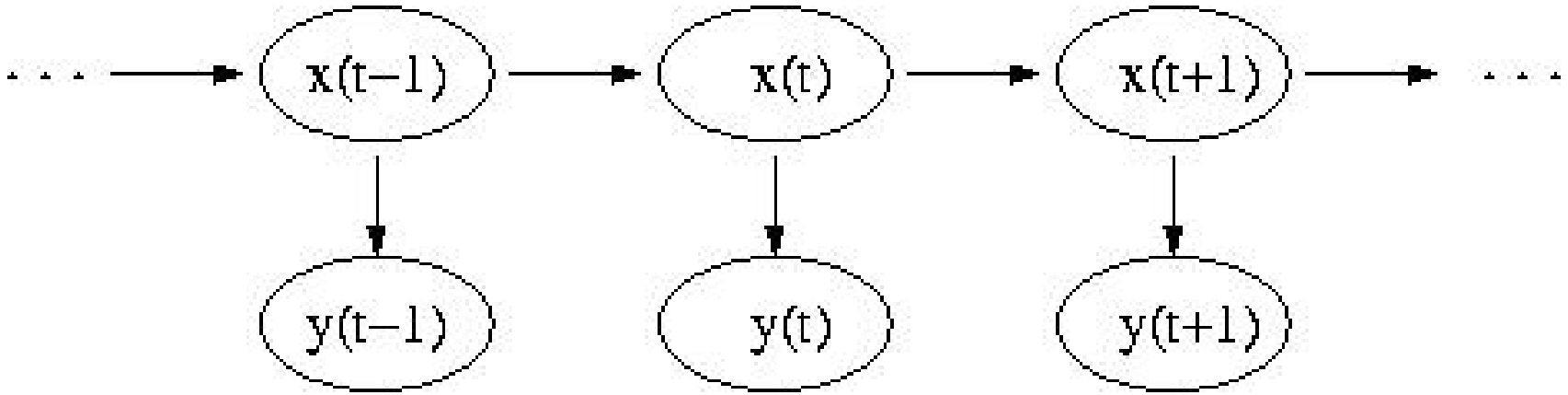
# Дискретные марковские цепи

- Мы будем находиться в дискретном случае.
- Марковская модель — это когда мы можем наблюдать какие-то функции от марковского процесса.



# Дискретные марковские цепи

- Здесь $x(t)$ — сам процесс (модель), а $y(t)$ — то, что мы наблюдаем.
- Задача — определить скрытые параметры процесса.



# Дискретные марковские цепи

- Главное свойство — следующее состояние не зависит от истории, только от предыдущего состояния.

$$p(x(t) = x_j | x(t-1) = x_{j_{t-1}}, \ldots, x(1) = x_{j_1}) = \\ = p(x(t) = x_j | x(t-1) = x_{j_{t-1}}).$$

- Более того, эти вероятности $a_{ij} = p(x(t) = x_j | x(t-1) = x_i)$ ещё и от времени $t$ не зависят.
- Эти вероятности и составляют матрицу перехода $A = (a_{ij})$.

# Вероятности перехода

- Естественные свойства:
- $a_{ij} \geq 0$.
- $\sum_j a_{ij} = 1$.

# Прямая задача

- Естественная задача: с какой вероятностью выпадет та или иная последовательность событий?
- Т.е. найти нужно для последовательности $Q = q_{i_1} \dots q_{i_k}$

$$p(Q|\text{модель}) = p(q_{i_1})p(q_{i_2}|q_{i_1}) \dots p(q_{i_k}|q_{i_{k-1}}).$$

- Казалось бы, это тривиально.
- Что же сложного в реальных задачах?

# Скрытые марковские модели

- А сложно то, что никто нам не скажет, что модель должна быть именно такой.
- И, кроме того, мы обычно наблюдаем не $x(t)$, т.е. реальные состояния модели, а $y(t)$, т.е. некоторую функцию от них (данные).
- Пример: распознавание речи.

# Задачи скрытых марковских моделей

- Первая: найти вероятность последовательности наблюдений в данной модели.
- Вторая: найти «оптимальную» последовательность состояний при условии данной модели и данной последовательности наблюдений.
- Третья: найти наиболее правдоподобную модель (параметры модели).

# Состояния и наблюдаемые

- $X = \{x_1, \ldots, x_n\}$ — множество состояний.
- $V = \{v_1, \ldots, v_m\}$ — алфавит, из которого мы выбираем наблюдаемые $y$ (множество значений $y$).
- $q_t$ — состояние во время $t$, $y_t$ — наблюдаемая во время $t$.

# Распределения

- $a_{ij} = p(q_{t+1} = x_j | q_t = x_i)$ — вероятность перехода из $i$ в $j$.
- $b_j(k) = p(v_k | x_j)$ — вероятность получить данные $v_k$ в состоянии $j$.
- Начальное распределение $\pi = \{\pi_j\}$, $\pi_j = p(q_1 = x_j)$.
- Данные будем обозначать через $D = d_1 \dots d_T$ (последовательность наблюдаемых, $d_i$ принимают значения из $V$).

# Комментарий

- Проще говоря, вот как работает HMM (hidden Markov model).
- Выберем начальное состояние $x_1$ по распределению $\pi$.
- По $t$ от 1 до $T$:
  - Выберем наблюдаемую $d_t$ по распределению $p(v_k|x_j)$.
  - Выберем следующее состояние по распределению $p(q_{t+1} = x_j|q_t = x_i)$.
- Таким алгоритмом можно выбрать случайную последовательность наблюдаемых.

# Задачи

- Теперь можно формализовать постановку задач.
- Первая задача: по данной модели $\lambda = (A, B, \pi)$ и последовательности $D$ найти $p(D|\lambda)$. Фактически, это нужно для того, чтобы оценить, насколько хорошо модель подходит к данным.
- Вторая задача: по данной модели $\lambda$ и последовательности $D$ найти «оптимальную» последовательность состояний $Q = q_1 \dots q_T$. Как и раньше, будет два решения: «побитовое» и общее.
- Третья задача: оптимизировать параметры модели $\lambda = (A, B, \pi)$ так, чтобы максимизировать $p(D|\lambda)$ при данном $D$ (найти модель максимального правдоподобия). Эта задача — главная, в ней и заключается обучение скрытых марковских моделей.

# Постановка первой задачи

- Формально, первая задача выглядит так. Нужно найти

$$p(D|\lambda) = \sum_{Q} p(D|Q,\lambda)p(D|\lambda) =$$

$$= \sum_{q_1,\ldots,q_T} b_{q_1}(d_1)\ldots b_{q_T}(d_T)\pi_{q_1} a_{q_1 q_2}\ldots a_{q_{T-1} q_T}.$$

- Ничего не напоминает?

# Суть решения первой задачи

- Правильно, это такая же задача маргинализации, как мы решаем всё время.
- Мы воспользуемся так называемой forward–backward procedure, по сути — динамическим программированием на решётке.
- Будем последовательно вычислять промежуточные величины вида

$$\alpha_t(i) = p(d_1 \dots d_t, q_t = x_i|\lambda),$$

т.е. искомые вероятности, но ещё с учётом текущего состояния.

# Решение первой задачи

- Инициализируем $\alpha_1(i) = \pi_i b_i(d_1)$.
- Шаг индукции:

$$\alpha_{t+1}(j) = \left[\sum_{i=1}^{n} \alpha_t(i) a_{ij}\right] b_j(d_{t+1}).$$

- После того как дойдём до шага $T$, подсчитаем то, что нам нужно:

$$p(D|\lambda) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_T(i).$$

- Фактически, это только прямой проход, обратный нам здесь не понадобился.
- Что вычислял бы обратный проход?

# Обратный проход

- Он вычислял бы условные вероятности $\beta_t(i) = p(d_{t+1} \dots d_T | q_t = x_i, \lambda)$.
- Их можно вычислить, проинициализировав $\beta_T(i) = 1$, а затем по индукции:

$$\beta_t(i) = \sum_{j=1}^{n} a_{ij} b_j(d_{t+1}) \beta_{t+1}(j).$$

- Это нам пригодится чуть позже, при решении второй и третьей задачи.

# Два варианта второй задачи

- Как мы уже упоминали, возможны два варианта.
- Первый: решать «побитово», отвечая на вопрос «какое наиболее вероятное состояние во время $j$?».
- Второй: решать задачу «какая наиболее вероятная последовательность состояний?».

# Побитовое решение

- Рассмотрим вспомогательные переменные

$$\gamma_t(i) = p(q_t = x_i | D, \lambda).$$

- Наша задача – найти

$$q_t = \arg\max_{1 \le i \le n} \gamma_t(i), \quad 1 \le t \le T.$$

- Как это сделать?

# Побитовое решение

- Выражаем через $\alpha$ и $\beta$:

$$\gamma_t(i) = \frac{\alpha_t(i)\beta_t(i)}{p(D|\lambda)} = \frac{\alpha_t(i)\beta_t(i)}{\sum_{i=1}^{n} \alpha_t(i)\beta_t(i)}.$$

- На знаменатель можно не обращать внимания — нам нужен $\arg\max$.

# Решение относительно последовательности

- Чтобы ответить на вопрос о наиболее вероятной последовательности, мы будем использовать так называемый *алгоритм Витерби* (то есть, по сути, то же самое динамическое программирование).
- Наши вспомогательные переменные — это

$$\delta_t(i) = \max_{q_1,\ldots,q_{t-1}} p\left(q_1\, q_2 \ldots q_t = x_i, d_1\, d_2 \ldots d_t|\lambda\right).$$

# Решение относительно последовательности

- Т.е. $\delta_t(i)$ — максимальная вероятность достичь состояния $x_i$ на шаге $t$ среди всех путей с заданными наблюдаемыми.
- По индукции:

$$\delta_{t+1}(j) = \left[\max_i \delta_t(i)\, a_{ij}\right] b_j(d_{t+1}).$$

- И надо ещё запоминать аргументы, а не только значения; для этого будет массив $\psi_t(j)$.

# Решение относительно последовательности: алг

- Проинициализируем $\delta_1(i) = \pi_i b_i(d_1)$, $\psi_1(i) = []$.
- Индукция:

$$\delta_t(j) = \max_{1 \le i \le n} \left[\delta_{t-1}(i) a_{ij}\right] b_j(d_t),$$

$$\psi_t(j) = \arg\max_{1 \le i \le n} \left[\delta_{t-1}(i) a_{ij}\right].$$

- Когда дойдём до шага $T$, финальный шаг:

$$p^* = \max_{1 \le i \le n} \delta_T(i), \qquad q_T^* = \arg\max_{1 \le i \le n} \delta_T(i).$$

- И вычислим последовательность: $q_t^* = \psi_{t+1}(q_{t+1}^*)$.

# Общая суть третьей задачи

- Аналитически найти глобальный максимум $p(D|\lambda)$ у нас никак не получится.
- Зато мы рассмотрим итеративную процедуру (по сути — градиентный подъём), которая приведёт к локальному максимуму.
- Это называется алгоритм Баума–Велха (Baum–Welch algorithm). Он является на самом деле частным случаем алгоритма EM.

# Вспомогательные переменные

- Теперь нашими вспомогательными переменными будут вероятности того, что мы во время $t$ в состоянии $x_i$, а во время $t+1$ — в состоянии $x_j$:

$$\xi_t(i,j) = p(q_t = x_i, q_{t+1} = x_j | D, \lambda).$$

- Если переписать через уже знакомые переменные:

$$\xi_t(i,j) = \frac{\alpha_t(i)\, a_{ij}\, b_j(d_{t+1})\, \beta_{t+1}(j)}{p(D|\lambda)} = \frac{\alpha_t(i)\, a_{ij}\, b_j(d_{t+1})\, \beta_{t+1}(j)}{\sum_i \sum_j \alpha_t(i)\, a_{ij}\, b_j(d_{t+1})\, \beta_{t+1}(}$$

- Отметим также, что $\gamma_t(i) = \sum_j \xi_t(i,j)$.

# Идея

- $\sum_t \gamma_t(i)$ — это ожидаемое количество переходов из состояния $x_i$, а $\sum_t \xi_t(i,j)$ — из $x_i$ в $x_j$.
- Теперь на шаге M мы будем переоценивать вероятности:

$$\bar{\pi}_i = \text{ожидаемая частота в } x_i \text{ на шаге } 1 = \gamma_1(i),$$

$$\bar{a}_{ij} = \frac{\text{к-во переходов из } x_i \text{ в } x_j}{\text{к-во переходов из } x_i} = \frac{\sum_t \xi_t(i,j)}{\sum_t \gamma_t(i)}.$$

$$\bar{b}_j(k) = \frac{\text{к-во появлений в } x_i \text{ и наблюдений } v_k}{\text{к-во появлений в } x_i} = \frac{\sum_{t:d_t=v_k} \gamma_t(i)}{\sum_t \gamma_t(i)}.$$

- EM-алгоритм приведёт к цели: начать с $\lambda = (A, B, \pi)$, подсчитать $\bar{\lambda} = (\bar{A}, \bar{B}, \bar{\pi})$, снова пересчитать параметры и т.д.

# Расстояние Кульбака–Лейблера

- Kullback–Leibler distance (divergence) — это информационно-теоретическая мера того, насколько далеки распределения друг от друга.

$$D_{KL}(p_1, p_2) = \sum_x p_1(x) \log \frac{p_1(x)}{p_2(x)}.$$

- Известно, что это расстояние всегда неотрицательно, равно нулю iff $p_1 \equiv p_2$.

# Применительно к HMM

- Мы определим

$$p_1(Q) = \frac{p(Q, D|\lambda)}{p(D|\lambda)}, \quad p_2(Q) = \frac{p(Q, D|\lambda')}{p(D|\lambda')}.$$

- Тогда $p_1$ и $p_2$ — распределения, и расстояние Kullback–Leibler:

$$0 \leq D_{LK}(\lambda, \lambda') = \sum_Q \frac{p(Q, D|\lambda)}{p(D|\lambda)} \log \frac{p(Q, D|\lambda)p(D|\lambda')}{p(Q, D|\lambda')p(D|\lambda)} =$$

$$= \log \frac{p(D|\lambda')}{p(D|\lambda)} + \sum_Q \frac{p(Q, D|\lambda)}{p(D|\lambda)} \log \frac{p(Q, D|\lambda)}{p(Q, D|\lambda')}.$$

# Вспомогательная функция

- Введём вспомогательную функцию

$$\boldsymbol{Q}(\lambda, \lambda') = \sum_{Q} p(Q|D, \lambda) \log p(Q|D, \lambda').$$

- Тогда из неравенства следует, что

$$\frac{\boldsymbol{Q}(\lambda, \lambda') - \boldsymbol{Q}(\lambda, \lambda)}{p(D|\lambda)} \leq \log \frac{p(D|\lambda')}{p(D|\lambda)}.$$

- Т.е., если $\boldsymbol{Q}(\lambda, \lambda') > \boldsymbol{Q}(\lambda, \lambda)$, то $p(D|\lambda') > p(D|\lambda)$.
- Т.е., если мы максимизируем $\boldsymbol{Q}(\lambda, \lambda')$ по $\lambda'$, мы тем самым будем двигаться в нужную сторону.

# Функция $Q$

- Нужно максимизировать $Q(\lambda, \lambda')$. Перепишем:

$$Q(\lambda, \lambda') = \sum_Q p(Q|D, \lambda) \log p(Q|D, \lambda') =$$

$$= \sum_Q p(Q|D, \lambda) \log \pi_{q_1} \prod_t a_{q_{t-1} q_t} b_{q_t}(d_t) =$$

$$= \sum_Q p(Q|D, \lambda) \log \pi_{q_1} + \sum_Q p(Q|D, \lambda) \sum_t \log a_{q_{t-1} q_t} b_{q_t}(d_t).$$

- Последнее выражение легко дифференцировать по $a_{ij}$, $b_i(k)$ и $\pi_i$, добавлять соответствующие множители Лагранжа и решать. Получится именно пересчёт по алгоритму Баума–Велха (проверьте!).

Центр Речевых Технологий

# Outline

# Непрерывные плотности наблюдаемых

- У нас были дискретные наблюдаемые с вероятностями $B = (b_j(k))$.
- Но в реальной жизни всё сложнее: зачастую мы наблюдаем непрерывные сигналы, а не дискретные величины, и дискретизовать их или плохо, или неудобно.
- При этом саму цепь можно оставить дискретной, т.е. перейти к непрерывным $b_j(D)$.

# Специальный вид плотности

- Не для всех плотностей найдены алгоритмы пересчёта (обобщения алгоритма Баума–Велха).
- Наиболее общий результат верен, когда $b_j(D)$ можно представить в виде

$$b_j(D) = \sum_{m=1}^{M} c_{jm} \mathcal{P}(D, \mu_{jm}, \sigma_{jm}),$$

где $c_{jm}$ — коэффициенты смеси ($\sum_m c_{jm} = 1$), а $\mathcal{P}$ — выпуклое распределение со средним $\mu$ и вариацией $\sigma$ (гауссиан подойдёт).

- К счастью, такой конструкцией можно приблизить любое непрерывное распределение, поэтому это можно широко применять.

# Вспомогательные переменные

- $\gamma_t(j, m)$ — вероятность быть в состоянии $j$ во время $t$, причём за $D$ отвечает $m$–й компонент смеси.
- Формально говоря,

$$\gamma_t(j, m) = \left[ \frac{\alpha_t(j)\beta_t(j)}{\sum_{j=1}^{N} \alpha_t(j)\beta_t(j)} \right] \left[ \frac{c_{jm}\mathcal{P}(d_t, \mu_{jm}, \sigma_{jm})}{\sum_{m=1}^{M} c_{jm}\mathcal{P}(d_t, \mu_{jm}, \sigma_{jm})} \right].$$

- Если $M = 1$, то это уже известные нам $\gamma_t(j)$.

# Алгоритм для этого случая

- Нужно научиться пересчитывать $b_j(D)$, т.е. пересчитывать $c_{jm}$, $\mu_{jm}$ и $\sigma_{jm}$.
- Это делается так:

$$\bar{c}_{jm} = \frac{\sum_{t=1}^{T} \gamma_t(j,m)}{\sum_{t=1}^{T} \sum_{m=1}^{M} \gamma_t(j,m)},$$

$$\bar{\mu}_{jm} = \frac{\sum_{t=1}^{T} \gamma_t(j,m) \cdot d_t}{\sum_{t=1}^{T} \gamma_t(j,m)},$$

$$\bar{\sigma}_{jm} = \frac{\sum_{t=1}^{T} \gamma_t(j,m) \cdot (d_t - \mu_{jm})(d_t - \mu_{jm})^t}{\sum_{t=1}^{T} \gamma_t(j,m)}.$$

# Проблема

- Как моделировать продолжительность нахождения в том или ином состоянии?
- В дискретном случае вероятность пробыть в состоянии $i$ $d$ шагов:

$$p_i(d) = a_{ii}^{d-1}(1 - a_{ii}).$$

- Однако для большинства физических сигналов такое экспоненциальное распределение не соответствует действительности. Мы бы хотели явно задавать плотность пребывания в данном состоянии.
- Т.е. вместо коэффициентов перехода в себя $a_{ii}$ — явное задание распределения $p_i(d)$.

# Вспомогательные переменные

- Введём переменные

$$\alpha_t(i) = p(d_1 \dots d_t, x_i \text{ заканчивается во время } t|\lambda).$$

- Всего за первые $t$ шагов посещено $r$ состояний $q_1 \dots q_r$, и мы там оставались $d_1, \dots, d_r$. Т.е. ограничения:

$$q_r = x_i, \qquad \sum_{s=1}^{r} d_s = t.$$

Центр Речевых Технологий

# Вычисление $\alpha_t(i)$

- Тогда получается

$$\alpha_t(i) = \sum_q \sum_d \pi_{q_1} p_{q_1}(d_1) p(d_1 d_2 \dots d_{d_1} | q_1)$$
$$a_{q_1 q_2} p_{q_2}(d_2) p(d_{d_1+1} \dots d_{d_1+d_2} | q_2) \dots$$
$$\dots a_{q_{r-1} q_r} p_{q_r}(d_r) p(d_{d_1+\dots+d_{r-1}+1} \dots d_t | q_r).$$

# Вычисление $\alpha_t(i)$

- По индукции

$$\alpha_t(j) = \sum_{i=1}^{n} \sum_{d=1}^{D} \alpha_{t-d}(j)\, a_{ij}\, p_j(d) \prod_{s=t-d+1}^{t} b_j(d_s),$$

  где $D$ — максимальная остановка в любом из состояний.

- Тогда, как и раньше,

$$p(d|\lambda) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_T(i).$$

# Вспомогательные переменные

- Для пересчёта потребуются ещё три переменные:

$$\alpha_t^*(i) = p(d_1 \dots d_t, x_i \text{ начинается во время } t+1|\lambda),$$

$$\beta_t(i) = p(d_{t+1} \dots d_T|x_i \text{ заканчивается во время } t, \lambda),$$

$$\beta_t^*(i) = p(d_{t+1} \dots d_T|x_i \text{ начинается во время } t+1, \lambda).$$

# Вспомогательные переменные

- Соотношения между ними:

$$\alpha_t^*(j) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_t(i)\, a_{ij},$$

$$\alpha_t(i) = \sum_{d=1}^{D} \alpha_{t-d}^*(i) p_i(d) \prod_{s=t-d+1}^{t} b_i(d_s),$$

$$\beta_t(i) = \sum_{j=1}^{n} a_{ij}\, \beta_t^*(j),$$

$$\beta_t^*(i) = \sum_{d=1}^{D} \beta_{t+d}(i) p_i(d) \prod_{s=t+1}^{t+d} b_i(d_s).$$

# Формулы пересчёта

- Приведём формулы пересчёта.
- $\pi_i$ — просто вероятность того, что $x_i$ был первым состоянием:

$$\hat{\pi}_i = \frac{\pi_i \beta_0^*(i)}{p(d|\lambda)}.$$

- $a_{ij}$ — та же формула, что обычно, только вместе с $\alpha$ есть ещё и $\beta$, которая говорит, что новое состояние начинается на следующем шаге:

$$\hat{a}_{ij} = \frac{\sum_{t=1}^{T} \alpha_t(i)\, a_{ij}\, \beta_t^*(j)}{\sum_{k=1}^{n} \sum_{t=1}^{T} \alpha_t(i)\, a_{ik}\, \beta_t^*(k)}.$$

# Формулы пересчёта

- $b_i(k)$ — отношение ожидания количества событий $d_t = v_k$ в состоянии $x_i$ к ожиданию количества любого $v_j$ в состоянии $x_i$:

$$\hat{b}_i(k) = \frac{\sum_{t=1, d_t=v_k}^{T} \left( \sum_{\tau<t} \alpha_\tau^*(i)\beta_\tau^*(i) - \sum_{\tau<t} \alpha_\tau(i)\beta_\tau(i) \right)}{\sum_{k=1}^{m} \sum_{t=1, d_t=v_k}^{T} \left( \sum_{\tau<t} \alpha_\tau^*(i)\beta_\tau^*(i) - \sum_{\tau<t} \alpha_\tau(i)\beta_\tau(i) \right)}.$$

- $p_i(d)$ — отношение ожидания количества раз, которые $x_i$ случилось с продолжительностью $d$, к количеству раз, которые $x_i$ вообще случалось:

$$\hat{p}_i(d) = \frac{\sum_{t=1}^{T} \alpha_t^*(i) p_i(d) \beta_{t+d}(i) \prod_{s=t+1}^{t+d} b_i(d_s)}{\sum_{d=1}^{D} \sum_{t=1}^{T} \alpha_t^*(i) p_i(d) \beta_{t+d}(i) \prod_{s=t+1}^{t+d} b_i(d_s)}.$$

# За и против

- Такой подход очень полезен, когда $p_i(d)$ далеко от экспоненциального.
- Однако он сильно увеличивает вычислительную сложность (в $D^2$ раз).
- И, кроме того, становится гораздо больше параметров, т.е. нужно, вообще говоря, больше данных, чтобы эти параметры надёжно оценить.

# Параметрическая продолжительность состояния

- Чтобы уменьшить количество параметров, можно иногда считать, что $p_i(d)$ — классическое распределение с не слишком большим количеством параметров.
- Например, $p_i(d)$ может быть равномерным, или нормальным $(p_i(d) = \mathcal{N}(d, \mu_i, \sigma_i^2))$, или гамма–распределением:

$$p_i(d) = \frac{\eta_i^{\nu_i} d^{\nu_i - 1} e^{-\eta_i d}}{\Gamma(\nu_i)}.$$

# Thank you!

**Спасибо за внимание!**