

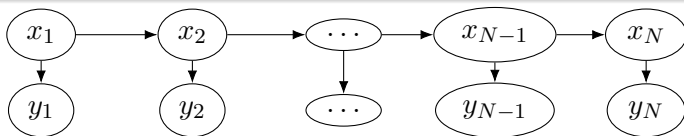
Скрытые марковские модели: Алгоритм Баума-Велча

Александр Адуенко

19е апреля 2025

- EM-алгоритм. Использование EM-алгоритма для отбора признаков в байесовской линейной регрессии.
- Вариационный EM-алгоритм и его использование для вывода в смеси моделей линейной регрессии.
- Ориентированные графические модели и их представление plate notation. Критерий условной независимости d-separation.
- Неориентированные графические модели и их связь с ориентированными.
- Факторные графы и алгоритм Sum-Product для вывода в ациклических графических моделях.
- Скрытые марковские модели и алгоритм Витерби. Алгоритм Max-Sum как обобщение алгоритма Витерби.

Скрытые марковские модели



$$p(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = p(x_1) \prod_{i=2}^N p(x_i | x_{i-1}) \prod_{i=1}^N p(y_i | x_i).$$

Пусть $x_i \in [K]$, $\mathbf{A} = \|a_{ij}\| = \|P(x_l = j | x_{l-1} = i)\|$, $\pi_k = P(x_1 = k)$.

$$p(\mathbf{x}, \mathbf{y} | \mathbf{A}, \pi, \mathbf{B}) = p(x_1 | \pi) \prod_{i=2}^N p(x_i | x_{i-1}, \mathbf{A}) \prod_{i=1}^N p(y_i | x_i, \mathbf{B}).$$

Задачи:

- $p(x_i | \mathbf{y}, \mathbf{A}, \mathbf{B}, \pi)$ – алгоритм Sum-Product;
- $p(x_i, x_{i+1} | \mathbf{y}, \mathbf{A}, \mathbf{B}, \pi)$ – алгоритм Sum-Product;
- $p(\mathbf{x} | \mathbf{y}, \mathbf{A}, \mathbf{B}, \pi) \rightarrow \max_{\mathbf{x}}$ – алгоритм Витерби / Max-Sum;
- $p(\mathbf{x} | \mathbf{y}, \mathbf{A}, \mathbf{B}, \pi)$ – последовательное сэмплирование;
- $p(\mathbf{y} | \mathbf{A}, \mathbf{B}, \pi) \rightarrow \max_{\mathbf{A}, \mathbf{B}, \pi}$.

ЕМ-алгоритм

Пусть $\mathbf{D} = (\mathbf{X}, \mathbf{y})$ – наблюдаемые переменные, $\mathbf{Z}$ – скрытые переменные.
 $p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}|\Theta) = p(\mathbf{D}|\mathbf{Z}, \Theta)p(\mathbf{Z}|\Theta)$.

Вопрос 1: как решить задачу $p(\mathbf{D}|\Theta) = \int p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}|\Theta)d\mathbf{Z} \rightarrow \max_{\Theta}$?

Пример 1. $\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{w} + \varepsilon$, $\mathbf{w} \sim \mathcal{N}(\mathbf{w}|\mathbf{0}, \mathbf{A}^{-1})$, $\varepsilon \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \beta^{-1}\mathbf{I})$

$p(\mathbf{y}, \mathbf{w}|\mathbf{X}, \mathbf{A}, \beta) = p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}, \beta)p(\mathbf{w}|\mathbf{A})$.

$\log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \underbrace{\mathbf{A}, \beta^{-1}}_{\Theta}) \propto -\frac{1}{2} \log \det(\beta^{-1}\mathbf{I} + \mathbf{X}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{X}^T) - \frac{1}{2}\mathbf{y}^T (\beta^{-1}\mathbf{I} + \mathbf{X}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{X}^T)^{-1}\mathbf{y}$.

ЕМ-алгоритм

Введем $F(q, \Theta) = - \int q(\mathbf{Z}) \log q(\mathbf{Z})d\mathbf{Z} + \int q(\mathbf{Z}) \log p(\mathbf{D}, \mathbf{Z}|\Theta)d\mathbf{Z} =$
 $- \int q(\mathbf{Z}) \log q(\mathbf{Z})d\mathbf{Z} + \int q(\mathbf{Z}) \log p(\mathbf{Z}|\mathbf{D}, \Theta)d\mathbf{Z} + \int \log p(\mathbf{D}|\Theta)q(\mathbf{Z})d\mathbf{Z} =$
 $\log p(\mathbf{D}|\Theta) - \int q(\mathbf{Z}) \log \frac{q(\mathbf{Z})}{p(\mathbf{Z}|\mathbf{D}, \Theta)}d\mathbf{Z} = \log p(\mathbf{D}|\Theta) - D_{\text{KL}}(q||p(\mathbf{Z}|\mathbf{D}, \Theta))$.

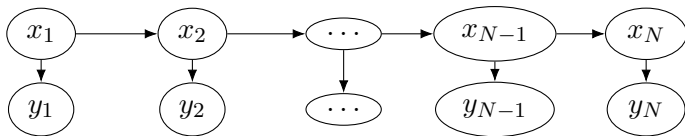
Идея 1: $p(\mathbf{D}|\Theta) \rightarrow \max_{\Theta}$ заменим на $F(q, \Theta) \rightarrow \max_{q, \Theta}$.

Идея 2: Пошагово оптимизируем по Θ и q , то есть

1 Е-шаг: $q^s = F(q, \Theta^{s-1}) \rightarrow \max_q$;

2 М-шаг: $\Theta^s = F(q^s, \Theta) \rightarrow \max_{\Theta}$.

Вывод параметров скрытой марковской модели



Задача: $p(\mathbf{y}|\mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi}) \rightarrow \max_{\mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi}} .$

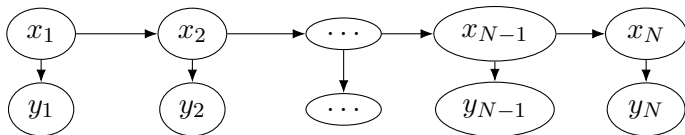
$$p(\mathbf{x}, \mathbf{y}|\mathbf{A}, \boldsymbol{\pi}, \mathbf{B}) = p(x_1|\boldsymbol{\pi}) \prod_{i=2}^N p(x_i|x_{i-1}, \mathbf{A}) \prod_{i=1}^N p(y_i|x_i, \mathbf{B}).$$

Введем $\mathbf{Z} = \|z_{ik}\|$, $z_{ik} \in \{0, 1\}$ и пусть $y_i|x_i = k = \mathcal{N}(y_i|m_k, \sigma_k^2)$.

$$p(\mathbf{y}, \mathbf{z}|\mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi}) = \prod_{k=1}^K \pi_k^{z_{1k}} \prod_{i=2}^N \prod_{k=1}^K \prod_{l=1}^K a_{kl}^{z_{i-1,k} z_{il}} \prod_{i=1}^N \prod_{k=1}^K \mathcal{N}(y_i|m_k, \sigma_k^2)^{z_{ik}}.$$

Вопрос: Как решить $p(\mathbf{y}|\mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi}) \rightarrow \max_{\mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi}}$, где $\mathbf{B} = (\mathbf{m}, \boldsymbol{\sigma}^2)$?

ЕМ-алгоритм для вывода параметров СММ



Задача: $p(\mathbf{y}|\mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi}) \rightarrow \max_{\mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi}}$, где $\mathbf{B} = (\mathbf{m}, \boldsymbol{\sigma}^2)$.

$$p(\mathbf{y}, \mathbf{z}|\mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi}) = \prod_{k=1}^K \pi_k^{z_{1k}} \prod_{i=2}^N \prod_{k=1}^K \prod_{l=1}^K a_{kl}^{z_{i-1,k} z_{il}} \prod_{i=1}^N \prod_{k=1}^K \mathcal{N}(y_i | m_k, \sigma_k^2)^{z_{ik}}.$$

$$\log p(\mathbf{y}, \mathbf{z}|\mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi}) = \sum_{k=1}^K z_{1k} \log \pi_k + \sum_{i=2}^N \sum_{k=1}^K \sum_{l=1}^K z_{i-1,k} z_{il} \log a_{kl} +$$

$$\sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^K z_{ik} \left(-\frac{1}{2} \log \sigma_k^2 - \frac{1}{2\sigma_k^2} (y_i - m_k)^2 \right).$$

Е-шаг: $q(\mathbf{Z}) = p(\mathbf{Z}|\mathbf{y}, \mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi})$.

М-шаг: $E_q \log p(\mathbf{y}, \mathbf{z}|\mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi}) \rightarrow \max_{\mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi}}.$

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_q \log p(\mathbf{y}, \mathbf{z} | \mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi}) &= \sum_{k=1}^K \mathbb{E} z_{1k} \log \pi_k + \sum_{i=2}^N \sum_{k=1}^K \sum_{l=1}^K \mathbb{E} z_{i-1,k} z_{il} \log a_{kl} + \\ &\sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^K \mathbb{E} z_{ik} \left(-\frac{1}{2} \log \sigma_k^2 - \frac{1}{2\sigma_k^2} (y_i - m_k)^2 \right). \end{aligned}$$

$$\mathbb{E}_q \log p(\mathbf{y}, \mathbf{z} | \mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi}) \rightarrow \max_{\mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi}}.$$

$$\pi_k = \mathbb{E} z_{1k}, \quad a_{kl} \propto \sum_{i=2}^N \mathbb{E} z_{i-1,k} z_{il};$$

$$m_k = \frac{\sum_{i=1}^N \mathbb{E} z_{ik} y_i}{\sum_{i=1}^N \mathbb{E} z_{ik}}, \quad \sigma_k^2 = \frac{\sum_{i=1}^N \mathbb{E} z_{ik} (y_i - m_k)^2}{\sum_{i=1}^N \mathbb{E} z_{ik}}.$$

Вопрос: Что требуется знать про $q(\mathbf{Z})$, чтобы осуществить М-шаг?

Общий шаг: $q(\mathbf{Z}) = p(\mathbf{Z}|\mathbf{y}, \mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi})$.

Достаточно: $Ez_{ik}, Ez_{i-1,k}z_{il}$.

Вопрос: Можно ли воспользоваться алгоритмом Sum-Product для получения $Ez_{ik}, Ez_{i-1,k}z_{il}$?

Введем $\alpha_k(t) = p(y_1, \dots, y_t, x_t = k | \mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi})$ и

$\beta_k(t) = p(y_{t+1}, \dots, y_N | x_t = k, \mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi})$.

$$Ez_{tk} = P(x_t = k | \mathbf{y}, \mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi}) \propto P(x_t = k, \mathbf{y} | \mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi}) =$$

$$\underbrace{p(y_1, \dots, y_t, x_t = k | \mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi})}_{\alpha_k(t)} \underbrace{p(y_{t+1}, \dots, y_N | x_t = k, \mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi})}_{\beta_k(t)}.$$

Вопрос 1: Какое свойство CMM было использовано при выводе выше?

$$Ez_{t-1,k}z_{tl} = P(x_{t-1} = k, x_t = l | \mathbf{y}, \mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi}) \propto p(x_{t-1} = k, x_t =$$

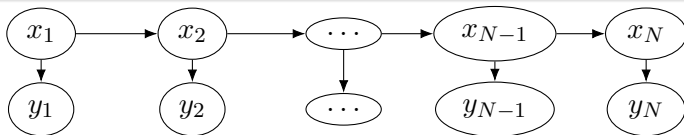
$$l, \mathbf{y} | \mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi}) = p(y_1, \dots, y_{t-1}, x_{t-1} = k | \mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi}) p(x_t = l | x_{t-1} =$$

$$k) p(y_t | x_t = l) p(y_{t+1}, \dots, y_N | x_t = l, \mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi}) \implies$$

$$Ez_{t-1,k}z_{tl} \propto \alpha_k(t-1) a_{kl} p(y_t | x_t = l, \mathbf{B}) \beta_l(t).$$

Вопрос 2: Какие свойства CMM были использованы при выводе выше?

Е-шаг 2: Получение $\alpha_k(t)$ и $\beta_k(t)$



Сосчитаем $\alpha_k(t) = p(y_1, \dots, y_t, x_t = k | \mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi})$ пошагово:

- $\alpha_k(1) = \pi_k p(y_1 | x_1 = k, \mathbf{B});$

- $\alpha_k(t+1) = \sum_{j=1}^K \alpha_j(t) a_{jk} p(y_{t+1} | x_{t+1} = k, \mathbf{B}).$

Сосчитаем $\beta_k(t) = p(y_{t+1}, \dots, y_N | x_t = k, \mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi})$ пошагово:

- $\beta_k(N) = 1;$

- $\beta_k(t) = \sum_{j=1}^K \beta_j(t+1) a_{kj} p(y_{t+1} | x_{t+1} = j, \mathbf{B}).$

Вопрос 1: Какие численные проблемы стоит ожидать при вычислениях по описанной схеме?

Вопрос 2: Как разрешить численные проблемы при угасании значений $\alpha_k(t)$, $\beta_k(N-t)$, $t \gg 1$?

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi}) \rightarrow \max_{\mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi}}, \text{ где } \mathbf{B} = (\mathbf{m}, \boldsymbol{\sigma}^2).$$

Е-шаг:

- Вычисляем $\alpha_k(t)$, $\beta_k(t)$, $t \in [N]$, $k \in [K]$ при фиксированных $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$, $\boldsymbol{\pi}$;
- $Ez_{tk} \propto \alpha_k(t)\beta_k(t)$ и нормируем;
- $Ez_{t-1,k}z_{tl} \propto \alpha_k(t-1)a_{kl}p(y_t|x_t=l, \mathbf{B})\beta_l(t)$ и нормируем.

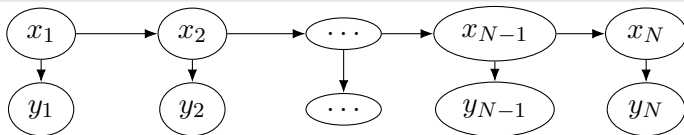
М-шаг:

- $\pi_k = Ez_{1k}$, $a_{kl} \propto \sum_{i=2}^N Ez_{i-1,k}z_{il}$;
- $m_k = \frac{\sum_{i=1}^N Ez_{ik}y_i}{\sum_{i=1}^N Ez_{ik}}$, $\sigma_k^2 = \frac{\sum_{i=1}^N Ez_{ik}(y_i - m_k)^2}{\sum_{i=1}^N Ez_{ik}}$.

Вопрос 1: Как учесть ненаблюдаемость части $\mathbf{y}$?

Вопрос 2: Как предсказать $y_{N+\Delta}$?

Сэмплирование состояний СММ (НММ)



Задача: Найти $p(\mathbf{x}|\mathbf{y}, \mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi})$.

$$p(\mathbf{x}, \mathbf{y}|\mathbf{A}, \boldsymbol{\pi}, \mathbf{B}) = p(x_1|\boldsymbol{\pi}) \prod_{i=2}^N p(x_i|x_{i-1}, \mathbf{A}) \prod_{i=1}^N p(y_i|x_i, \mathbf{B}).$$

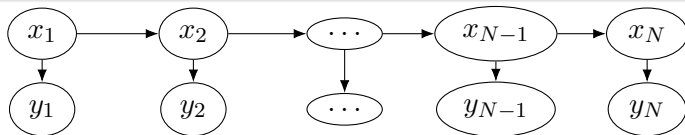
$$\begin{aligned} p(\mathbf{x}|\mathbf{y}, \mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi}) &\propto p(x_1|\mathbf{y}, \mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi}) p(x_2|x_1, \mathbf{y}, \mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi}) \\ &p(x_3|x_2, x_1, \mathbf{y}, \mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi}) \cdot \dots \cdot p(x_N|x_{N-1}, \dots, x_1, \mathbf{y}, \mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi}) = \\ &p(x_1|\mathbf{y}, \mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi}) p(x_2|x_1, \mathbf{y}, \mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi}) \\ &p(x_3|x_2, \mathbf{y}, \mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi}) \cdot \dots \cdot p(x_N|x_{N-1}, \mathbf{y}, \mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi}). \end{aligned}$$

Идея (Последовательное сэмплирование):

- $P(x_1 = k|\mathbf{y}, \mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi}) = \mathbb{E} z_{1k};$

- $$\begin{aligned} P(x_t = l|x_{t-1} = k, \mathbf{y}, \mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi}) &= \frac{P(x_t = l, x_{t-1} = k|\mathbf{y}, \mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi})}{P(x_{t-1} = k|\mathbf{y}, \mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi})} = \\ &= \frac{\mathbb{E} z_{t-1, k} z_{tl}}{\sum_j \mathbb{E} z_{t-1, k} z_{tj}} \propto \alpha_k(t-1) a_{kl} p(y_t|x_t = l, \mathbf{B}) \beta_l(t). \end{aligned}$$

Appendix: Вывод формулы пересчета $\alpha_k(t+1)$



$$\alpha_k(t+1) = p(y_1, \dots, y_{t+1}, x_{t+1} = k | \mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi}) =$$

$$\sum_{j=1}^K p(y_1, \dots, y_{t+1}, x_{t+1} = k, x_t = j | \mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi}) =$$

$$\sum_{j=1}^K p(y_{1:t}, x_t = j | \mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi}) p(y_{t+1}, x_{t+1} = k | \mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi}, y_{1:t}, x_t = j) =$$

$$\sum_{j=1}^K p(y_1, \dots, x_t = j | \mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi}) p(y_{t+1}, x_{t+1} = k | \mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi}, x_t = j) =$$

$$\sum_{j=1}^K \alpha_j(t) p(x_{t+1} = k | \mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi}, x_t = j) p(y_{t+1} | x_{t+1} = k, \mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi}, x_t = j) =$$

$$\sum_{j=1}^K \alpha_j(t) a_{jk} p(y_{t+1} | x_{t+1} = k, \mathbf{A}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\pi}).$$

- 1 Bishop, Christopher M. "Pattern recognition and machine learning". Springer, New York (2006). Pp. 394-418.
- 2 Material on HMMs: <https://web.stanford.edu/~jura/sky/slp3/A.pdf>
- 3 Koller, Daphne, and Nir Friedman. Probabilistic graphical models: principles and techniques. MIT press, 2009.
- 4 McCallum, Andrew. "Hidden Markov models Baum-Welch algorithm." Introduction to Natural Language Processing CS 585 (2004).
- 5 Mor, Bhavya, Sunita Garhwal, and Ajay Kumar. "A systematic review of hidden markov models and their applications." Archives of computational methods in engineering 28.3 (2021): 1429-1448.
- 6 Old Sklearn Class Gaussian HMMs:
<https://ogrisel.github.io/scikit-learn.org/sklearn-tutorial/modules/generated/sklearn.hmm.GaussianHMM.html>
- 7 New HMM Learn package: <https://github.com/hmmlearn/hmmlearn>
- 8 Python library on HMMs: <https://pypi.org/project/hmms/#files>
- 9 Python Library on Graphical Models: <https://github.com/pgmpy/pgmpy>