Modèles de Markov Cachés

Modèles de Markov Cachés

- Dans les chaînes de Markov, les observations correspondent aux états du processus.
- Dans un modèle de Markov caché, on ne peux observer directement les états du processus, mais des symboles (appelés aussi *observables*) émis par les états selon une certaine loi de probabilité.
- Au vu d'une séquence d'observations on ne peux savoir par quelle séquence d'états (ou *chemin*) le processus est passé, d'où le nom de modèles de Markov cachés (HMM).
- On distingue le processus $X = X_1, X_2, \ldots, X_T$ qui représente l'évolution des états du HMM et le processus $O = O_1, O_2, \ldots, O_T$ qui représente la suite des symboles émis par le HMM.

Eléments d'un HMM

Un HMM est défini par un quintuplet $\langle S, A, \pi, T, E \rangle$ où :

- S est l'ensemble des états : $\{1, \ldots, N\}$
- A est l'alphabet des symboles émis par les états : $\{a_1, \ldots, a_M\}$
- π est la loi de probabilité de l'état initial $\pi(i) = P(X_1 = i)$. π étant une loi de probabilité, on a :

$$\sum_{i=1}^{N} \pi(i) = 1$$

Eléments d'un HMM - 2

Un HMM est défini par un quintuplet $\langle S, A, \pi, T, E \rangle$ où :

- T est la matrice des probabilités de transition d'un état vers un autre.
- La probabilité de transition d'un état i vers un état j ($P(X_t = j | X_{t-1} = i)$) est notée $T(i, j)$.
- La somme des probabilités des transitions émanant d'un état vaut 1 :

$$\sum_{j=1}^{N} T(i, j) = 1, \ \forall \ i \in S$$

Eléments d'un HMM - 3

Un HMM est défini par un quintuplet $\langle S, A, \pi, T, E \rangle$ où :

- E est la matrice des probabilités d'émission des symboles de A pour chaque état.
- La probabilité que l'état i émette le symbole j ($P(O_t = j | X_t = i)$) est notée $E(i, j)$.
- Les probabilités d'émission de symboles de A pour chaque état du HMM constituent une loi de probabilité :

$$\sum_{j=1}^{M} E(i, o_j) = 1, \ \forall \ i \in S$$

L'ensemble constitué des probabilités initiales, des probabilités de transition et d'émission d'un HMM λ est souvent appelé les *paramètres* λ.

Exemple

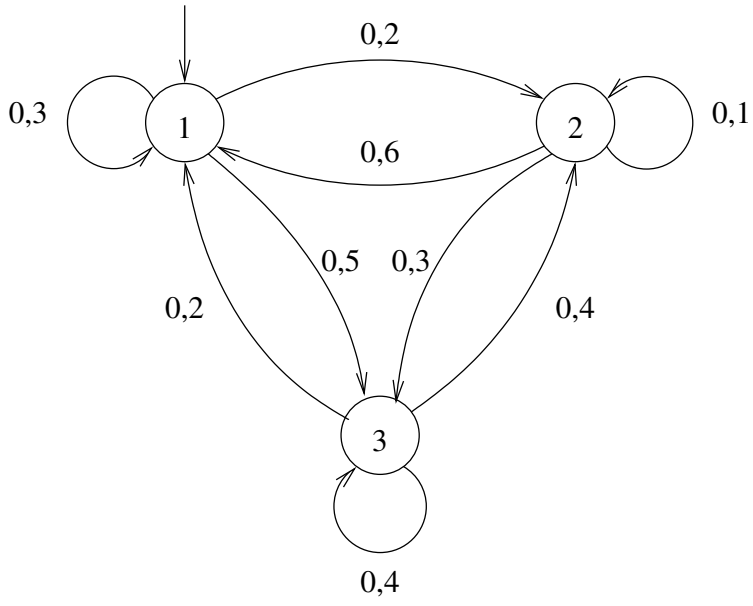
$\lambda_1 = \langle \{1,2,3\}, \{a,b,c\}, \pi, T, E \rangle$ avec :

$$\begin{array}{lll} E(1,a)=0,6 & E(2,a)=0 & E(3,a)=0,3 \\ E(1,b)=0,2 & E(2,b)=0,5 & E(3,b)=0 \\ E(1,c)=0,2 & E(2,c)=0,5 & E(3,c)=0,7 \end{array} \quad \text{et} \quad \begin{array}{lll} T(1,1)=0,3 & T(2,1)=0,6 & T(3,1)=0,2 \\ T(1,2)=0,2 & T(2,2)=0,1 & T(3,2)=0,4 \\ T(1,3)=0,5 & T(2,3)=0,3 & T(3,3)=0,4 \end{array}$$

et

$$\pi(1)=1 \qquad \pi(2)=0 \qquad \pi(3)=0$$

représentation graphique



Trois questions

- Calcul de la probabilité d'une séquence d'observations o :

$$P(o) = \sum_{x \in \mathcal{C}_T} P(o, x)$$

où $\mathcal{C}_T$ est l'ensemble des séquences de T états.

- Calcul du chemin le plus probable :

$$\hat{x} = \arg\max_{x \in \mathcal{C}_T} P(x|o)$$

- Estimation des paramètres du HMM :

$$\hat{\lambda} = \arg\max_{\lambda} P(o|\lambda)$$

Calcul de $P(o)$

- Etant donné un HMM $\lambda = \langle S, A, \pi, T, E \rangle$, la suite d'observation $o = o_1 o_2, \ldots, o_T$ peut généralement être générée en suivant différents chemins dans le HMM
- La probabilité que λ émette la séquence o est égale à la somme des probabilités que la séquence o soit émise en empruntant les différents chemins pouvant émettre o.
- Ce raisonnement correspond en fait à l'application de la formule des probabilités totales à la probabilité $P(o)$

$$P(o) = \sum_{x \in \mathcal{C}_T} P(o|x)P(x)$$

où $\mathcal{C}_T$ est l'ensemble des séquences de T états de λ et $x = x_1, \ldots, x_T$ ($x_i \in S$, $1 \leq i \leq T$) une de ces séquences

Calcul de $P(o)$

- la probabilité conditionnelle que o soit générée lorsque λ passe successivement par la séquence d'états $x = x_1, \ldots, x_T$ est le produit des probabilités que l'état atteint à l'instant t (x_t) émette le symbole observé à cet instant (o_t) :

$$P(o|x) = \prod_{t=1}^{T} E(x_t, o_t)$$

Calcul de $P(o)$

- et la probabilité que le HMM suive une séquence particulière d'états x est le produit des probabilités que λ passe de l'état x_t à l'état x_{t+1} entre les instants t et $t+1$, comme dans un modèle de Markov *visible* :

$$P(x) = \pi(x_1) \prod_{t=1}^{T-1} T(x_t, x_{t+1})$$

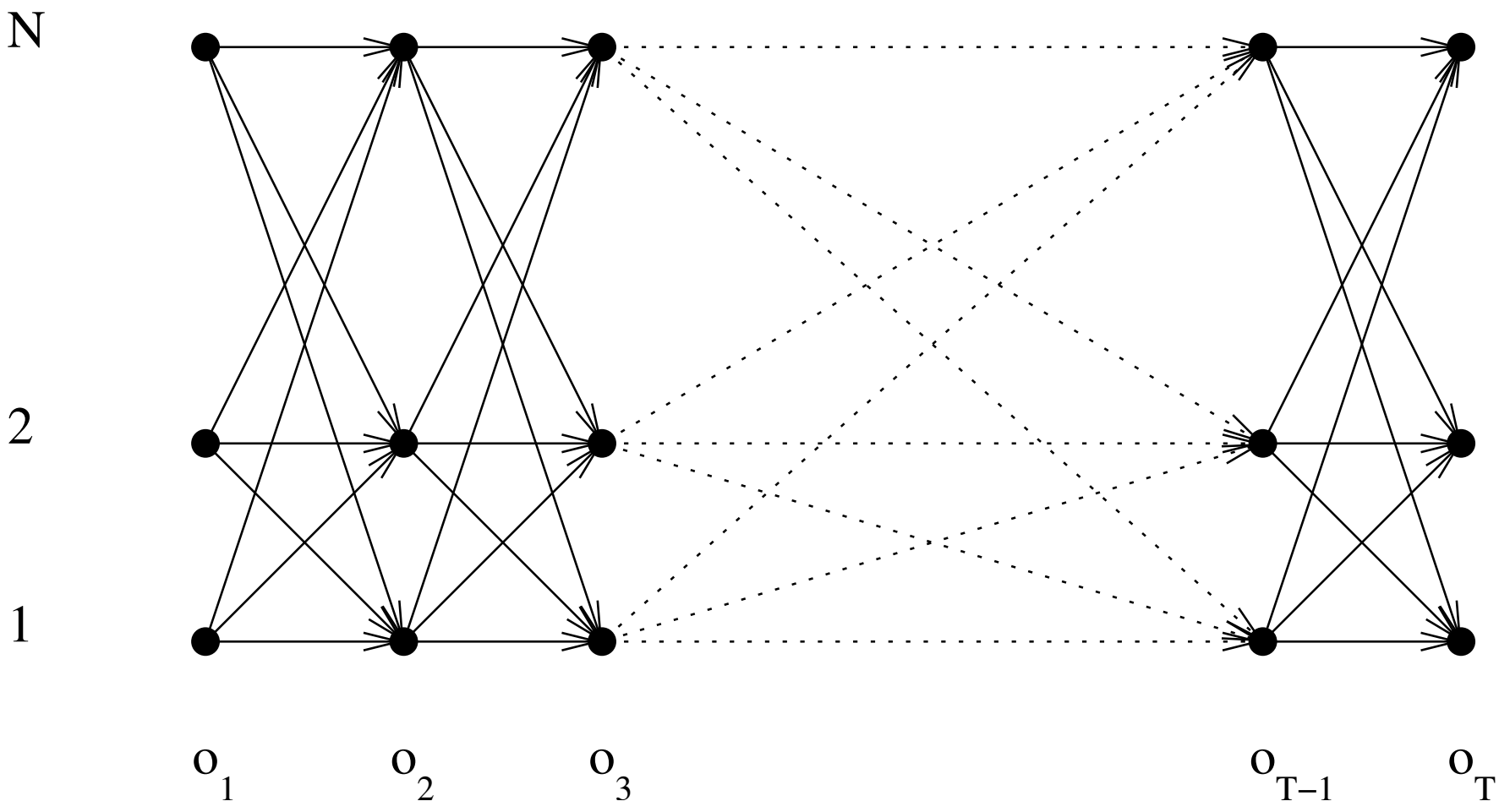
- En remplaçant $P(o|x)$ et $P(x)$ dans l'équation initiale, on obtient :

$$P(o) = \sum_{x \in \mathcal{C}_T} \pi(x_1) \times \prod_{t=1}^{T-1} E(o_t, x_t) T(x_t, x_{t+1}) \times E(o_T, x_T)$$

Treillis - 1

- Le calcul précédent est particulièrement inefficace, il nécessite dans le cas général (où tous les états sont reliés entre eux par une transition et chaque état peut émettre chacun des N symboles) $2 \times T \times N^T$ multiplications (N^T chemins et $2T$ multiplications à effectuer par chemin.).
- On a recours à une méthode de programmation dynamique pour effectuer ce calcul.
- Cette méthode repose sur la représentation, sous forme d'un *treillis*, de l'évolution du HMM ayant donné lieu à une suite d'observables $o_1 \ldots o_k$.

Treillis - 2



Treillis - 3

- On associe à chaque sommet (i, t) du treillis la variable $\alpha(i, t)$ qui correspond à la probabilité de se trouver dans l'état i du HMM λ à un instant t, ayant observé la suite $o_1 \dots o_{t-1}$:

$$\alpha(i, t) = P(o_1 \dots o_{t-1}, X_t = i)$$

Treillis - 4

- Le treillis permet de *résumer* au niveau d'un sommet (i, t) des informations portant sur l'ensemble des chemins menant à l'état i à l'instant t tout en ayant observé la séquence $o_1 \dots o_{t-1}$.
- Dans notre cas, cette information est la somme des probabilités de ces chemins.
- Cette particularité permet de calculer la probabilité de se trouver dans un état quelconque à un instant t en fonction de la probabilité de se trouver dans les différents états à l'instant $t-1$
- c'est l'étape récursive de l'algorithme suivant.

Algorithme de calcul de $P(o)$

1. Initialisation :

$$\alpha(i,1) = \pi(i),\ 1 \leq i \leq N$$

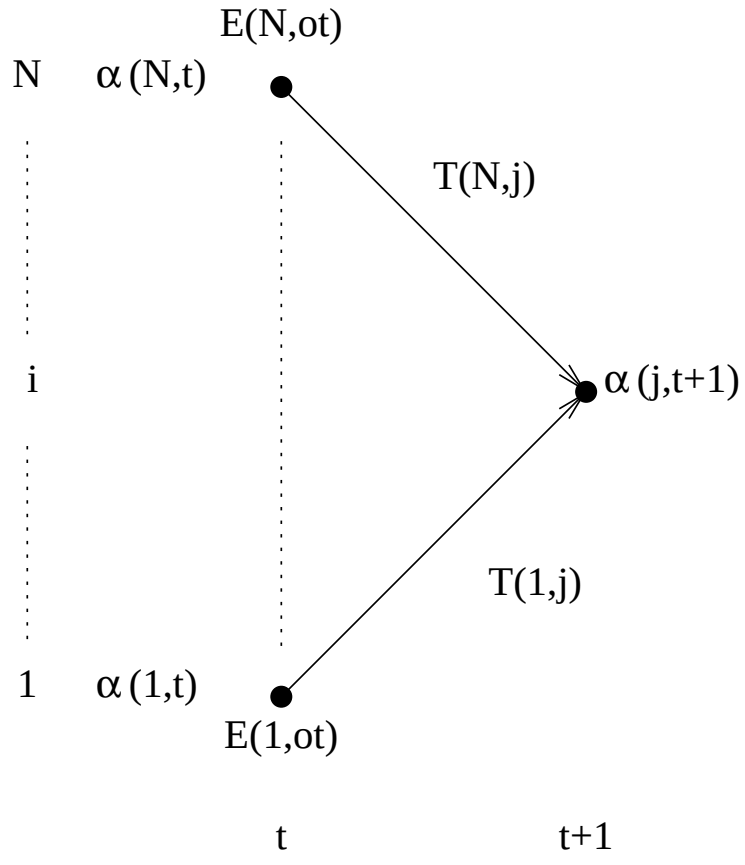
2. Etape récursive :

$$\alpha(j,t+1) = \sum_{i=1}^{N} \alpha(i,t) E(i,o_t) T(i,j),\ 1 \leq t < T-1,\ 1 \leq j \leq N$$

3. Calcul de la probabilité totale :

$$P(o) = \sum_{i=1}^{N} \alpha(i,T) E(i,o_T)$$

Calcul de $\alpha(j, t+1)$



Cette façon de calculer $P(o)$ est bien plus économique puisqu'elle n'exige (dans le cas général) que $2N^2T$ multiplications : $N \times T$ sommets et $2N$ multiplications par sommet.

Calcul backward

- La procédure de calcul de $P(o)$ présentée ci-dessus est appelée quelquefois procédure *forward* (en avant) car le calcul de la probabilité à un instant t est effectué à partir de la probabilité à un instant $t-1$, en parcourant le treillis de la gauche vers la droite.
- Il est aussi possible d'effectuer le calcul dans l'ordre inverse, où la probabilité à un instant t est calculée à partir de la probabilité à l'instant $t+1$.
- On définit la variable $\beta(i,t)$ de la façon suivante :

$$\beta(i,t) = P(o_t \dots o_T | X_t = i)$$

Attention : $\alpha(i,t) = P(o_1 \dots o_{t-1}, X_t = i)$

Algorithme de calcul de $P(o)$ grâce aux probabilités *backward*

1. Initialisation :

$$\beta(i,T) = E(i,o_T),\ 1 \leq i \leq N$$

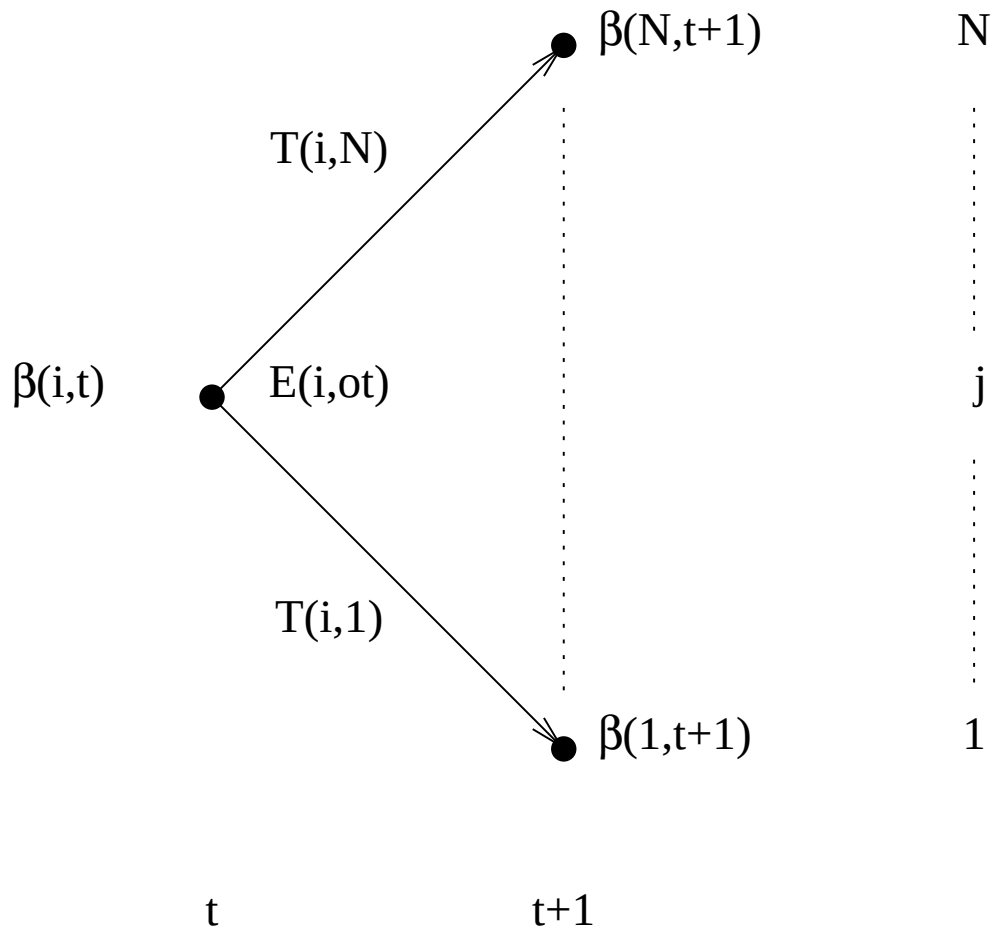
2. Etape récursive :

$$\beta(i,t) = \sum_{j=1}^{N} \beta(j,t+1)T(i,j)E(i,o_t),\ 1 \leq t \leq T-1,\ 1 \leq i \leq N$$

3. Calcul de la probabilité totale :

$$P(o) = \sum_{i=1}^{N} \pi(i)\beta(i,1)$$

Calcul de $\beta(i,t)$



$$\beta(i,t) = \sum_{j=1}^{N} \beta(j,t+1)T(i,j)E(i,o_t),\ 1 \leq t \leq T-1,\ 1 \leq i \leq N$$

Combinaison des probabilités *backward* et *forward*

- Les probabilités forward et backward peuvent être combinées pour calculer $P(o)$ de la façon suivante :

$$P(o) = \sum_{i=1}^{N} \alpha(i,t)\beta(i,t) \; \forall t \; 1 \leq t \leq T$$

- Ce résultat est établi en utilisant d'une part la formule des probabilités totales :

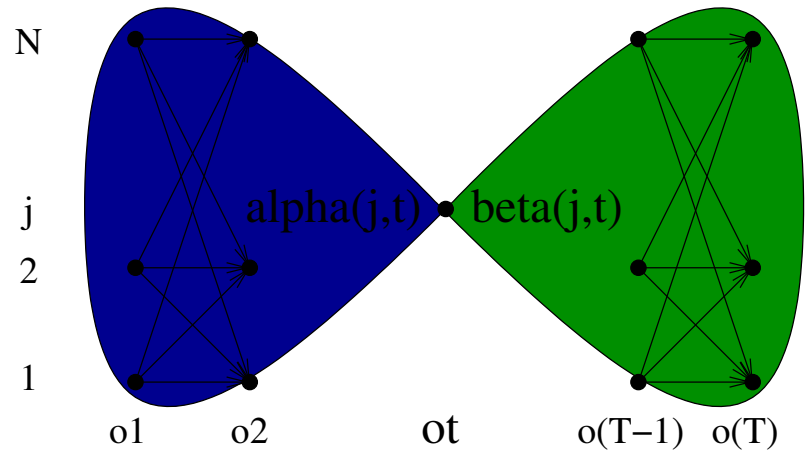
$$P(o) = \sum_{i=1}^{N} P(o, X_t = i)$$

Combinaison des probabilités *backward* et *forward*

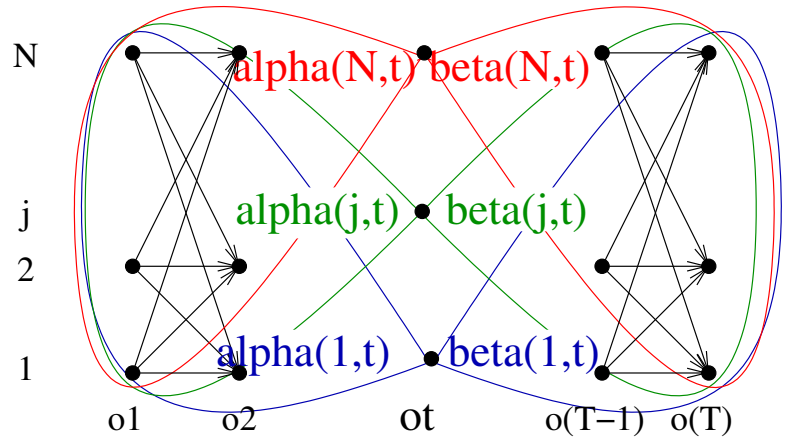
- puis en remarquant que chacun des termes de la somme peut être exprimée en fonction des probabilités forward et backward de la façon suivante :

$$
\begin{aligned}
P(o, X_t = i) &= P(o_1, \ldots, o_T, X_t = i) \\
&= P(o_1, \ldots, o_{t-1}, X_t = i, o_t, \ldots, o_T) \\
&= P(o_1, \ldots, o_{t-1}, X_t = i) \times P(o_t, \ldots, o_T | o_1, \ldots, o_{t-1}, X_t = i) \\
&= P(o_1, \ldots, o_{t-1}, X_t = i) \times P(o_t, \ldots, o_T | X_t = i) \\
&= \alpha(i,t)\beta(i,t)
\end{aligned}
$$

Combinaison des probabilités *backward* et *forward*



Probabilité de *o*



$$P(o) = \sum_{i=1}^{N} \alpha(i,t)\beta(i,t) \; \forall t \; 1 \leq t \leq T$$

Recherche du chemin le plus probable

- Il est souvent intéressant, étant donné un HMM λ et une séquence d'observations $o = o_1 \dots o_T$ de déterminer la séquence d'états $\hat{x} = \hat{x}_1, \hat{x}_2, \dots \hat{x}_T$ la plus probable ayant pu générer o.
- Première solution : déterminer toutes les séquences d'états ayant pu générer o, puis calculer leur probabilités afin de déterminer la plus probable.
- Méthode particulièrement coûteuse car, dans le cas général, il existe N^T chemins possibles.
- Solution : utiliser le treillis (algorithme de Viterbi)

Algorithme de Viterbi

- Idée générale : on détermine, pour chaque sommet du treillis, le meilleur chemin (le chemin de probabilité maximale) menant à ce sommet, tout en ayant généré la suite $o_1 \dots o_t$.
- On définit pour chaque sommet (j, t) du treillis la variable $\delta(j, t)$:

$$\delta(j,t) = \max_{x \in \mathcal{C}_{t-1}} P(x, o_1 \dots o_t, X_t = j)$$

où $\mathcal{C}_{t-1}$ est l'ensemble des séquences de $t-1$ états de λ et x une de ces séquences.

Algorithme de Viterbi

- On définit de plus, pour chaque sommet (j, t) la variable $\psi(j, t)$ dans laquelle est stocké l'état du HMM au temps $t - 1$ qui a permis de réaliser le meilleur score, qui n'est donc autre que l'état précédent dans le meilleur chemin menant à (j, t).

Algorithme de Viterbi

1. Initialisation du treillis :

$$\delta(j,1) = \pi(j)E(j,o_1),\ 1 \leq j \leq N$$

2. Etape récursive :

$$\delta(j,t+1) = \max_{1 \leq i \leq N} \delta(i,t)T(i,j)E(j,o_{t+1}),\ 1 \leq t < T,\ 1 \leq j \leq N$$

stockage du meilleur état précédent :

$$\psi(j,t+1) = \arg \max_{1 \leq i \leq N} \delta(i,t)T(i,j)E(j,o_{t+1}),\ 1 \leq t < T,\ 1 \leq j \leq N$$

Algorithme de Viterbi

1. Détermination du meilleur chemin :

$$\begin{aligned} \hat{x}_T &= \arg \max_{1 \leq i \leq N} \delta(i, T) \\ \hat{x}_t &= \psi(\hat{x}_{t+1}, t+1) \\ P(\hat{x}) &= \max_{1 \leq i \leq M} \delta(i, T) \end{aligned}$$

Application à la tâche d'étiquetage

- Rappel :
  - On dispose d'une séquence de symboles (par exemple une séquence de mots)
  - On souhaite associer à chaque symbole une étiquette (par exemple une catégorie grammaticale)

la	diane	chantait	dans	la	cour	des	casernes
DET	NOM	VERBE	PREP	DET	NOM	PREP	NOM

- Utilisation d'un HMM
  - Les mots correspondent aux observables
  - La séquence d'observables à la phrase $o = o_1 \dots o_n$
  - Les états correspondent aux catégories
  - L'algorithme de Viterbi nous fournit la séquence de catégorie $x = x_1 \dots x_n$ qui maximise la probabilité $P(x|o)$

Estimation des paramètres d'un HMM

- Les paramètres d'un HMM ne sont généralement pas données par avance, ils doivent être estimés à partir de données.
- On suppose que l'on dispose d'une longue suite d'observations $o = o_1 \dots o_T$, appelée *données d'apprentissage* qui est sensée être représentative du type de données que le HMM peut produire.
- On suppose de plus que la structure du HMM (le nombre d'états et les transitions possibles entre états) est fixée.

Estimation des paramètres d'un HMM

- L'objectif est de déterminer les paramètres qui rendent le mieux compte de o, ou, en d'autres termes, de déterminer les paramètres qui, parmi l'ensemble des paramètres possibles, attribuent à o la meilleure probabilité.
- Si l'on note $P_\lambda(o)$ la probabilité qu'attribue le HMM λ à la suite o, le but de l'estimation est de déterminer le HMM $\hat{\lambda}$ qui maximise $P_\lambda(o)$:

$$\hat{\lambda} = \arg\max_{\lambda} P_\lambda(o)$$

Estimation des paramètres d'un HMM

- Nous allons supposer que la séquence o a été générée par un HMM. Ceci n'est qu'une vision de l'esprit et l'on ne connaît pas le processus qui est à l'origine de o.
- Deux cas peuvent alors se présenter :

  données complètes : on dispose des données d'apprentissage o et de la séquence d'états $x = x_1 \dots x_T$ ayant permis la génération de o.

  données incomplètes : on ne dispose que de la suite d'observation o.

Données complètes

états	$x =$	x_1	x_2	x_3	$\ldots$	x_T
observations	$o =$	o_1	o_2	o_3	$\ldots$	o_T

On définit les variables :

- $\mathcal{C}_e(i) = \sum_{t=1}^{T} \delta_{x_t,i}$
- $\mathcal{C}_{o,e}(a,i) = \sum_{t=1}^{T} \delta_{o_t,a} \times \delta_{x_t,i}$
- $\mathcal{C}_{e,e}(i,j) = \sum_{t=2}^{T} \delta_{x_{t-1},i} \times \delta_{x_t,j}$

Une façon naturelle d'estimer les probabilités d'émission et de transition est :

$$E_{\hat{\lambda}}(i,a) = \frac{\mathcal{C}_{o,e}(a,i)}{\mathcal{C}_e(i)} \qquad T_{\hat{\lambda}}(i,j) = \frac{\mathcal{C}_{e,e}(i,j)}{\mathcal{C}_e(i)}$$

Cette méthode d'estimation des probabilités est appelée estimation par maximum de vraisemblance.

Données incomplètes

états	$x =$	?	?	?	...	?
observations	$o =$	o_1	o_2	o_2	...	o_T

- On ne dispose que des données d'apprentissage o et de la structure du HMM $\hat{\lambda}$.
- On ne connaît pas de méthode permettant de calculer directement $\hat{\lambda}$.
- Il existe une procédure, appelée algorithme de Baum-Welsh ou algorithme forward-backward qui permet de s'en approcher.
- Procédure itérative : on calcule une suite de HMM $\lambda_0, \lambda_1, \ldots, \lambda_n$ où λ_{i+1} est construit à partir de λ_i et tel que :

$$P_{\lambda_{i+1}}(o) \geq P_{\lambda_i}(o)$$

Algorithme de Baum-Welsh

- On donne aux paramètres de λ_0 des valeurs arbitraires, qui peuvent être aléatoires, comme elles peuvent être guidées par la connaissance a priori que nous avons du problème.
- On considère que o a été généré par λ_0. Cette hypothèse permet de calculer la probabilité, notée $\gamma(i,t)$, que λ_0 soit dans l'état i à l'instant t :

$$\begin{aligned}
\gamma(i,t) &= P(X_t = i|o) \\
&= \frac{P(X_t = i, o)}{p(o)} \\
&= \frac{\alpha(i,t)\beta(i,t)}{\sum_{j=1}^{N} \alpha(j,t)\beta(j,t)}
\end{aligned}$$

Algorithme de Baum-Welsh - 2

- On effectue la somme $\sum_{t=1}^{T} \gamma(i,t)$
- Somme des probabilités que λ_0 soit passé par l'état i aux différents instants t de la génération de o.
- Il ne s'agit pas d'une probabilité :
  - elle peut être supérieure à 1
  - on ne voit à quel évenement elle correspond.
- On l'interprète comme une approximation du nombre de fois que λ_0 est passé par l'état i lors de la génération de o.
- On se retrouve dans une situation proche de l'estimation avec des données complètes.

Réestimation des probabilités d'émission

On peut calculer (on dit aussi réestimer) de nouvelles probabilités d'émission, notées E_1, par maximum de vraisemblance :

$$
\begin{aligned}
E_1(i, a_j) &= \frac{\text{nombre de fois que } \lambda_0 \text{ s'est trouvé dans l'état i et que } a \text{ a été émis}}{\text{nombre de fois que } \lambda_0 \text{ s'est trouvé dans l'état i}} \\
&= \frac{\sum_{t:o_t=a} \gamma(i,t)}{\sum_{t=1}^{T} \gamma(i,t)}
\end{aligned}
$$

Réestimation des probabilités initiales

les probabilités intiales peuvent, elles, être réestimées de la façon suivante :

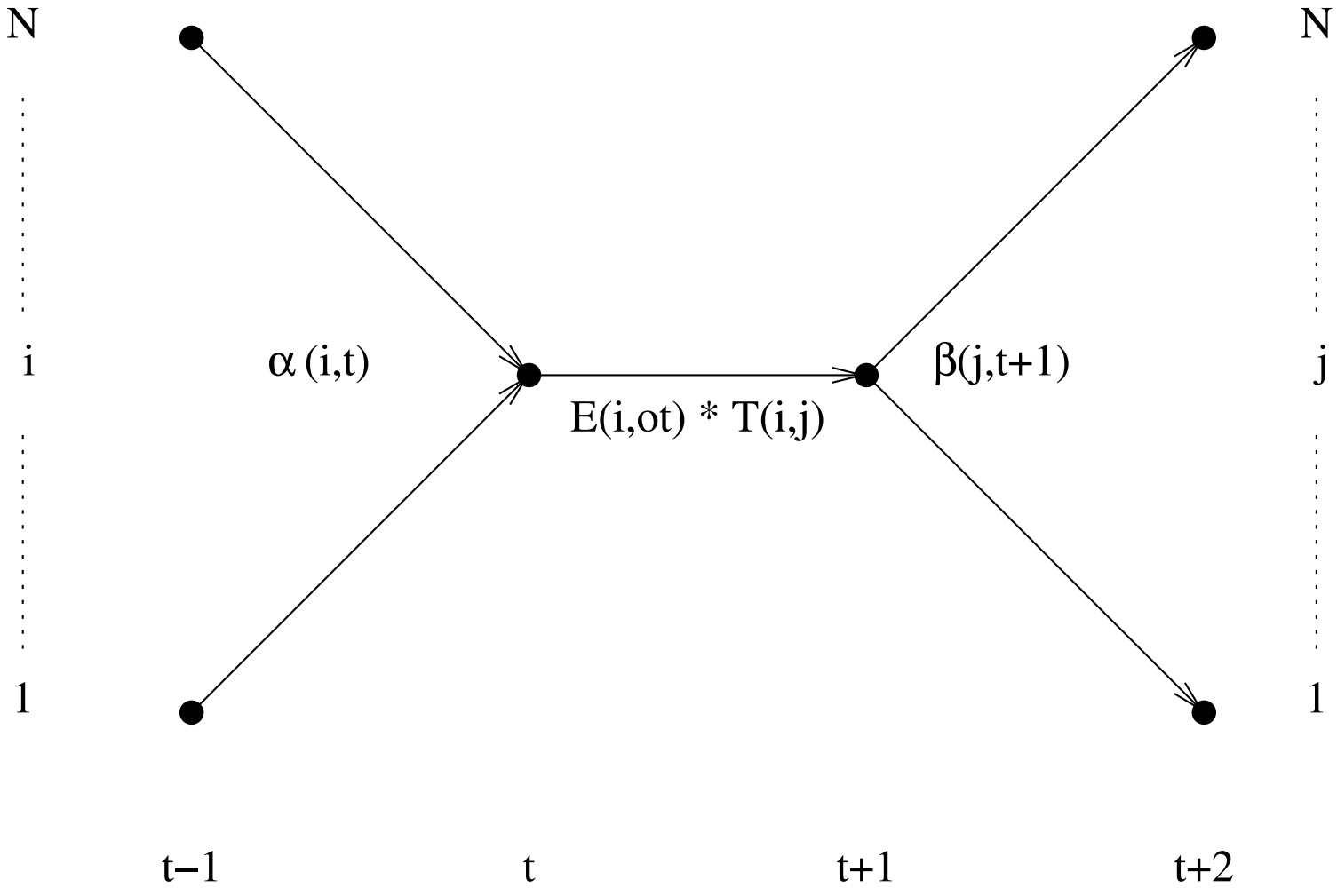
$$\begin{aligned} \pi_1(i) &= \text{probabilité d'être en } i \text{ à l'instant } t = 1 \\ &= \gamma(i, 1) \end{aligned}$$

Réestimation des probabilités de transition

- On note $p_t(i,j)$ la probabilité que λ_0 soit passé de l'état i à l'état j entre les instants t et $t+1$:

$$\begin{aligned} p_t(i,j) &= P(X_t = i, X_{t+1} = j | o) \\ &= \frac{P(X_t = i, X_{t+1} = j, o)}{P(o)} \\ &= \frac{\alpha(i,t) \times E(i,o_t) \times T(i,j) \times \beta(j,t+1)}{\sum_{k=1}^{N} \alpha(k,t)\beta(k,t)} \end{aligned}$$

Réestimation des probabilités de transition - 2



Réestimation des probabilités de transition - 2

- On effectue la somme $\sum_{t=1}^{T} p_t(i,j)$
- Estimation du nombre de fois qu'une transition de i vers j a été empruntée lors de la génération de o
- on recalcule à partir de cette quantité des nouvelles probabilités de transition T_1 par maximum de vraisemblance :

$$T_1(i,j) = \frac{\text{nombre de fois qu'une transition de i vers j a été empruntée}}{\text{nombre de fois qu'un transition émanant de i a été empruntée}}$$

$$= \frac{\sum_{t=1}^{T} p_t(i,j)}{\sum_{t=1}^{T} \gamma(i,t)}$$

Réestimation des probabilités de transition - 2

- λ_1 possède la propriété remarquable d'attribuer à la séquence o une probabilité meilleure ou égale à celle que lui attribuait λ_0 :

$$P_{\lambda_1}(o) \geq P_{\lambda_0}(o)$$

- Cette propriété s'explique par le fait que lors du calcul des paramètres de λ_1, nous avons augmenté la probabilité des transitions et des émissions qui étaient à l'origine de la génération de o, et ce faisant, diminué les autres probabilités.

Réestimation des probabilités de transition - 2

- En réitérant le pocessus de réestimation des probabilités, nous obtiendrons des paramètres attribuant une probabilité de plus en plus élevée à la séquence o, jusqu'à ce qu'une valeur limite soit atteinte, pour un HMM λ_n.
- λ_n n'est cependant pas le meilleur possible, il peut s'agir d'un maximum local, qui dépend de λ_0 :