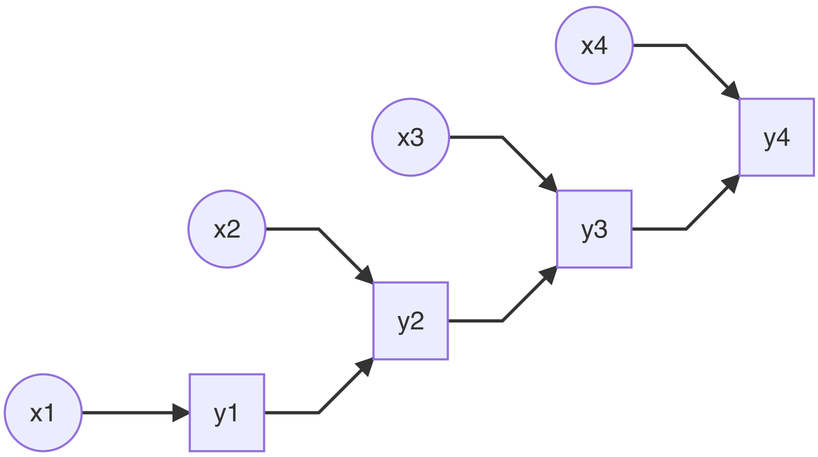
# 条件随机场

我们知道，分类问题可以分为硬分类和软分类两种，其中硬分类有 SVM，PLA，LDA 等。软分类问题大体上可以分为概率生成和概率判别模型，其中较为有名的概率判别模型有 Logistic 回归，生成模型有朴素贝叶斯模型。Logistic 回归模型的损失函数为交叉熵，这类模型也叫对数线性模型，一般地，又叫做最大熵模型，这类模型和指数族分布的概率假设是一致的。对朴素贝叶斯假设，如果将其中的单元素的条件独立性做推广到一系列的隐变量，那么，由此得到的模型又被称为动态模型，比较有代表性的如 HMM，从概率意义上，HMM也可以看成是 GMM 在时序上面的推广。

我们看到，一般地，如果将最大熵模型和 HMM相结合，那么这种模型叫做最大熵 Markov 模型（MEMM）：



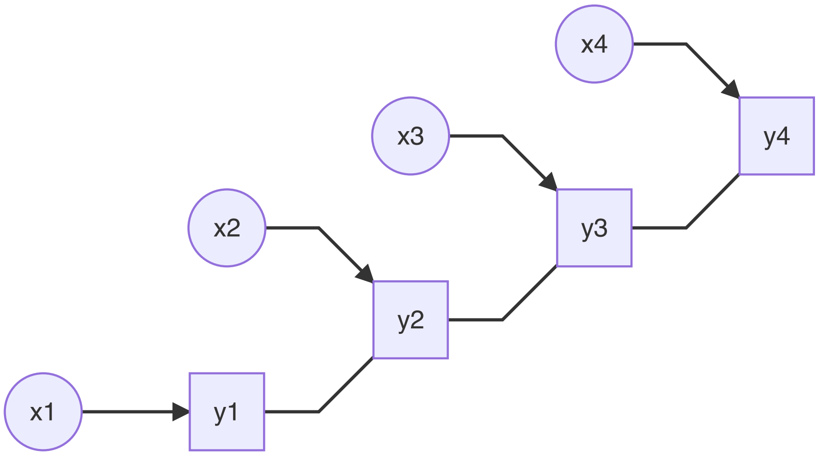

这个图就是将 HMM 的图中观测变量和隐变量的边方向反向，应用在分类中，隐变量就是输出的分类，这样 HMM 中的两个假设就不成立了，特别是观测之间不是完全独立的了。

HMM 是一种生成式模型，其建模对象为 $p(X,Y|\lambda)$，根据 HMM 的概率图，$p(X,Y|\lambda)=\prod\limits_{t=1}^T p(x_t,y_t|\lambda,y_{t-1})$。我们看到，观测独立性假设是一个很强的假设，如果我们有一个文本样本，那么观测独立性假设就假定了所有的单词之间没有关联。

在 MEMM 中，建模对象是 $p(Y|X,\lambda)$，我们看概率图，给定 $y_t$，$x_t,x_{t-1}$ 是不独立的，这样，观测独立假设就不成立了。根据概率图，$p(Y|X,\lambda)=\prod\limits_{t=1}^T p(y_t|y_{t-1},X,\lambda)$。

MEMM 的缺陷是其必须满足局域的概率归一化（Label Bias Problem），我们看到，在上面的概率图中，$p(y_t|y_{t-1},x_t)$，这个概率，如果 $p(y_t|y_{t-1})$ 非常接近1，那么事实上，观测变量是什么就不会影响这个概率了。

对于这个问题，我们将 $y$ 之间的箭头转为直线转为无向图（线性链条件随机场），这样就只要满足全局归一化了（破坏齐次 Markov 假设）。




## CRF 的 PDF

线性链的 CRF 的 PDF 为 $p(Y|X)=\frac{1}{Z}\exp\sum\limits_{t=1}^{T}(F_t(y_{t-1},y_t,x_{1:T}))$，两两形成了最大团，其中 $y_0$ 是随意外加的一个元素。作为第一个简化，我们假设每个团的势函数相同 $F_t=F$。

对于这个 $F$，我们进一步，可以将其写为 $F(y_{t-1},y_t,X)=\Delta_{y_{t-1},X}+\Delta_{y_t,X}+\Delta_{y_t,y_{t-1},X}$这三个部分，分别表示状态函数已经转移函数，由于整体的求和，可以简化为 $F(y_{t-1},y_t,X)=\Delta_{y_t,X}+\Delta_{y_t,y_{t-1},X}$。

我们可以设计一个表达式将其参数化：

$$\Delta_{y_t,y_{t-1},X}=\sum_{k=1}^{K}\lambda_k f_k(y_{t-1},y_t,X) \tag{1}$$

$$\Delta_{y_t,X}=\sum_{l=1}^{L}\eta_l g_l(y_t,X) \tag{2}$$

其中 $g,f$ 叫做特征函数，对于 $y$ 有 $S$ 种元素，那么 $K\le S^2,L\le S$。

代入概率密度函数中：

$$p(Y|X)=\frac{1}{Z}\exp\sum_{t=1}^{T}[\sum_{k=1}^{K}\lambda_k f_k(y_{t-1},y_t,X)+\sum_{l=1}^{L}\eta_l g_l(y_t,X)] \tag{3}$$

对于单个样本，将其写成向量的形式。定义 $y=(y_1,y_2,\cdots,y_T)^T,x=(x_1,x_2,\cdots,x_T)^T,\lambda=(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_K)^T,\eta=(\eta_1,\eta_2,\cdots,\eta_L)^T$。并且有 $f=(f_1,f_2,\cdots,f_K)^T,g=(g_1,g_2,\cdots,g_L)^T$。于是：

$$p(Y=y|X=x)=\frac{1}{Z}\exp\sum_{t=1}^{T}[\lambda^T f(y_{t-1},y_t,x)+\eta^T g(y_t,x)] \tag{4}$$

不妨记：$\theta=(\lambda,\eta)^T,H=(\sum\limits_{t=1}^{T}f,\sum\limits_{t=1}^{T}g)^T$：

$$p(Y=y|X=x)=\frac{1}{Z(x,\theta)}\exp[\theta^T H(y_t,y_{t-1},x)] \tag{5}$$

上面这个式子是一个指数族分布，于是 $Z$ 是配分函数。

CRF 需要解决下面几个问题：

1. Learning：参数估计问题，对 $N$ 个 $T$ 维样本，$\hat{\theta}=\mathop{argmax}\limits_{\theta}\prod\limits_{i=1}^N p(y^i|x^i)$，这里用上标表示样本的编号。
2. Inference：
    1. 边缘概率：
    $$p(y_t|x) \tag{6}$$
    2. 条件概率：一般在生成模型中较为关注，CRF 中不关注
    3. MAP 推断：
    $$\hat{y}=argmax\,p(y|x) \tag{7}$$

# 边缘概率

边缘概率这个问题描述为，根据学习任务得到的参数，给定了 $p(Y=y|X=x)$，求解 $p(y_t=i|x)$。根据无向图可以给出：

$$p(y_t=i|x)=\sum\limits_{y_{1:t-1},y_{t+1:T}}p(y|x)=\sum\limits_{y_{1:t-1}}\sum\limits_{y_{t+1:T}}\frac{1}{Z}\prod\limits_{t'=1}^T\phi_{t'}(y_{t'-1},y_{t'},x) \tag{8}$$

我们看到上面的式子，直接计算的复杂度很高，这是由于求和的复杂度在 $O(S^T)$，求积的复杂度在 $O(T)$，所以整体复杂度为 $O(TS^T)$。我们需要调整求和符号的顺序，从而降低复杂度。

首先，将两个求和分为：

$$\begin{aligned}
p(y_t=i|x)&=\frac{1}{Z}\Delta_l\Delta_r \qquad (9)\\
\Delta_l&=\sum\limits_{y_{1:t-1}}\phi_1(y_0,y_1,x)\phi_2(y_1,y_2,x)\cdots\phi_{t-1}(y_{t-2},y_{t-1},x)\phi_t(y_{t-1},y_t=i,x) \qquad (10)\\
\Delta_r&=\sum\limits_{y_{t+1:T}}\phi_{t+1}(y_t=i,y_{t+1},x)\phi_{t+2}(y_{t+1},y_{t+2},x)\cdots\phi_T(y_{T-1},y_T,x) \qquad (11)
\end{aligned}$$

对于 $\Delta_l$，从左向右，一步一步将 $y_t$ 消掉：

$$\Delta_l=\sum\limits_{y_{t-1}}\phi_t(y_{t-1},y_t=i,x)\sum\limits_{y_{t-2}}\phi_{t-1}(y_{t-2},y_{t-1},x)\cdots\sum\limits_{y_0}\phi_1(y_0,y_1,x) \tag{12}$$

引入：

$$\alpha_t(i) = \Delta_l \tag{13}$$

于是：

$$\alpha_t(i) = \sum_{j \in S} \phi_t(y_{t-1} = j, y_t = i, x)\alpha_{t-1}(j) \tag{14}$$

这样我们得到了一个递推式。

类似地，$\Delta_r = \beta_t(i) = \sum_{j \in S} \phi_{t+1}(y_t = i, y_{t+1} = j, x)\beta_{t+1}(j)$。这个方法和 HMM 中的前向后向算法类似，就是概率图模型中精确推断的变量消除算法（信念传播）。

# 参数估计

在进行各种类型的推断之前，还需要对参数进行学习：

$$\begin{aligned}\hat{\theta} &= \underset{\theta}{argmax} \prod_{i=1}^{N} p(y^i|x^i) & (15)\\ &= \underset{\theta}{argmax} \sum_{i=1}^{N} \log p(y^i|x^i) & (16)\\ &= \underset{\theta}{argmax} \sum_{i=1}^{N} [-\log Z(x^i, \lambda, \eta) + \sum_{t=1}^{T} [\lambda^T f(y_{t-1}, y_t, x) + \eta^T g(y_t, x)]] & (17)\end{aligned}$$

上面的式子中，第一项是对数配分函数，根据指数族分布的结论：

$$\nabla_\lambda(\log Z(x^i, \lambda, \eta)) = \mathbb{E}_{p(y^i|x^i)}[\sum_{t=1}^{T} f(y_{t-1}, y_t, x^i)] \tag{18}$$

其中，和 $\eta$ 相关的项相当于一个常数。求解这个期望值：

$$\mathbb{E}_{p(y^i|x^i)}[\sum_{t=1}^{T} f(y_{t-1}, y_t, x^i)] = \sum_{y} p(y|x^i) \sum_{t=1}^{T} f(y_{t-1}, y_t, x^i) \tag{19}$$

第一个求和号的复杂度为 $O(S^T)$，重新排列求和符号：

$$\begin{aligned}\mathbb{E}_{p(y^i|x^i)}[\sum_{t=1}^{T} f(y_{t-1}, y_t, x^i)] &= \sum_{t=1}^{T} \sum_{y_{1:t-2}} \sum_{y_{t-1}} \sum_{y_t} \sum_{y_{t+1:T}} p(y|x^i) f(y_{t-1}, y_t, x^i)\\ &= \sum_{t=1}^{T} \sum_{y_{t-1}} \sum_{y_t} p(y_{t-1}, y_t|x^i) f(y_{t-1}, y_t, x^i) & (20)\end{aligned}$$

和上面的边缘概率类似，也可以通过前向后向算法得到上面式子中的边缘概率。

于是：

$$\nabla_\lambda L = \sum_{i=1}^{N} \sum_{t=1}^{T} [f(y_{t-1}, y_t, x^i) - \sum_{y_{t-1}} \sum_{y_t} p(y_{t-1}, y_t|x^i) f(y_{t-1}, y_t, x^i)] \tag{21}$$

利用梯度上升算法可以求解。对于 $\eta$ 也是类似的过程。

## 译码

译码问题和 HMM 中的 Viterbi 算法类似，同样采样动态规划的思想一层一层求解最大值。