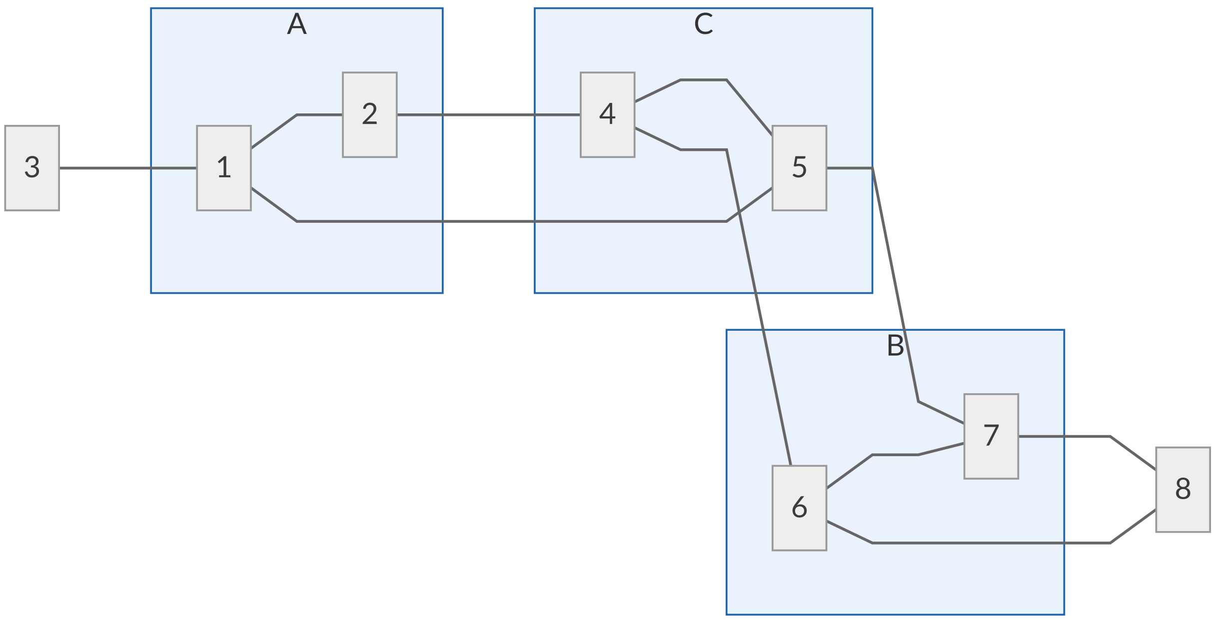
由MRF到CRF

- **MRF（马尔科夫随机场）**
- **CRF（条件随机场）**
- **softmax与 Log-linear**
- **CRF在NLP中的应用**

---

1. MRF

MRF是概率图模型的第二大类，是**概率无向图模型**，表示**联合概率分布**，它包含**一组结点**，每个结点都对应着**一个变量或一组变量。**连接节点的**边是无向的**，即不含有箭头，表示两个变量之间的**概率依赖关系。MRF**一个例子如图一所示：



图一

图一中，从集合A中的任意结点到集合B中的任意结点的每条路径都通过集合C中的至少一个结点。对于所有由这个图描述的任意概率分布，以C为条件，A与B都条件独立，即有

$$p(A,B|C) = p(A|C)p(B|C)$$

1.1 MRF的条件独立性

在有向图中可以通过**有向分离**(**D-separation**)来判断变量之间的条件独立性。在**MRF**中判断条件独立变得更加简单。

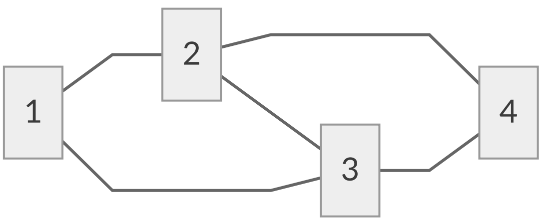
在**MRF**中，某个节点 X_i只条件依赖于**相邻节点**，所以节点 X_i的**马尔科夫毯**，由**相邻节点的集合**组成，以图中所有剩余变量为条件 ,X_i的条件概率分布，只依赖于马尔科夫毯中的变量。

如图一所示，我们有三个结点集合，记作A，B，C。判定上图中是否满足

$A \perp B|C$(A与B在给定C的条件下条件独立)。可以有两种判断方式。
1.考虑连接集合A与集合B中节点的所有可能路径，如果所有路径都通过了集合C中的一个或多个节点，则$A \perp B|C$
2.假设从图中把集合C中的节点以及节点相关的连接全部删除，观察是否存在一条A中任意节点到B中任意节点的路径，如果没有该路径则$A \perp B|C$
总结起来就是，**判断A是不是只能通过C到B**，若果是，则$A \perp B|C$

1.2 MRF的分解

MRF表示**联合概率分布**，对于给定的概率无向图模型，我们希望将**整体的联合概率分布**写成若干**子联合概率的乘积**的形式，也就是将联合概率进行因子分解，这样更便于模型的学习与计算。
首先给出无向图中**团与最大团**的定义:
无向图G中任何两个节点均有边连接的结点子集称为**团**(**clique**).如果C是无向图G的一个团，并且不能再加进任何一个G的结点使其成为一个更大的团，则称此C为**最大团**（**maximal clique**）。



图二

如图二所示，该图表示了一个由4个节点表示的无向图。图中由两个节点组成的团有5个：{1，2}，{1，3}，{2，3}，{2，4}，{3，4}。有2个最大团：{1，2，3}和{2，3，4}。1和4没有边连接，所以{1，2，3，4}不是一个团。

Hammersley-Clifford 定理

MRF的**联合概率分布**可以表示为其**最大团**上的**随机变量的函数的乘积**形式。给定无向图G，C为G上的最大团，Y_c表示C对应的随机变量。那么G的模型的联合概率分布可以写作G中所有最大团C上的函数$\Psi_C(Y_C)$的乘积形式，即

$$P(Y)=\frac{1}{Z}\prod_C \Psi_C(Y_C)$$

其中，Z是**规范化因子**，

$$Z=\sum_Y \prod_C \Psi_C(Y_C)$$

规范化因子保证$P(Y)$构成一个概率分布。函数$\Psi_C(Y_C)$称为**势函数**，势函数必须是正的，通常定义为指数函数：

$$\Psi_C(Y_C)=e^{-E(Y_C)}$$

$E(Y_C)$是一个定义在变量Y_C上的实值函数，常见形式为

$$E(Y_C)=\sum_{u,v\in C,u\neq v}\alpha_{uv}y_u y_v+\sum_{v\in C}\beta_v y_v$$

其中α_{uv}和β_v是参数，$E(Y_C)$中的第一项考虑每一对节点的关系，第二项仅考虑单个节点。
与有向图的联合分布的因子不同，无向图中的**势函数没有一个具体的概率意义。**

具体应用：**图像去噪**

MRF 与贝叶斯网络相比有几个优点：

- 它们可以应用于更广泛的问题，其中没有和变量依赖相关的天然方向性。
- 无向图可以简洁地表达某些依赖关系，贝叶斯网络不容易描述它们（尽管反过来也是如此）

MRF也有重要的缺点：

- 计算归一化常数Z需要对可能为指数数量的赋值进行求和。
  如果我们的模型中有M个离散结点，每个结点有K个状态，那么归一化项的计算涉及到对K^M个状态求和，因此（在最坏的情况下）计算量是模型大小的指数形式；因此许多**MRF**模型是棘手的并需要近似技术。

2. CRF

条件随机场（**CRF**）是给定随机变量X条件下，随机变量Y的马尔科夫随机场。生成式模型直接对联合分布进行建模，而判别式模型则是对条件分布进行建模。**MRF**是生成式模型，而**CRF**是判别式模型。

具体定义，设X与Y是随机变量，$P(Y|X)$是在给定X的条件下Y的条件概率分布，若随机变量Y构成一个由无向图$G=(V,E)$表示的**MRF**，即

$$P(Y_v|X,Y_w,w\neq v)=P(Y_v|X,Y_w,w—v)$$

对任意的节点v成立，则称条件概率分布$P(Y|X)$为条件随机场（**CRF**），w −v表示与v有边连接的所有节点w，w≠v表示节点v以外的所有节点。

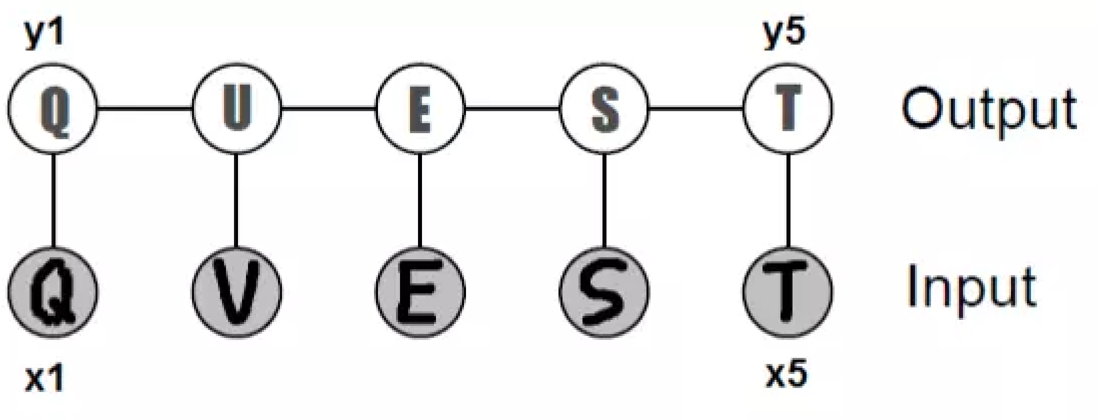
CRF对多个变量在给定观测值后的条件概率进行建模。具体来说，若令X = {$x_1,x_2,...,x_n$} 为观测序列，Y = {$y_1,y_2,...,y_n$} 为与之相应的标记序列，则**CRF**的目标是构建条件概率模型$P(Y|X)$。比较典型的应用有NLP中的词性标注，观测序列为语句（单词序列），标记序列为语句相应的词序序列。

理论上来说，图G可以有任意的结构，但在现实应用中，尤其是对标记序列建模时，最常用的是链式结构，即“链式条件随机场”。若在给定随机变量序列X的条件下，当随机变量序列Y的条件概率分布$P(X|Y)$满足

$$P(Y_i|X,Y_1,...,Y_{i-1},Y_{i+1},...,Y_n)=P(Y_i|X,Y_{i-1},Y_{i+1})$$

$$i=1,2,...,n$$

则称$P(X|Y)$为线性链条件随机场。
在线性链条件随机场中，最大团是相邻两个结点的集合。Y_i只与Y_{i-1}、Y_{i+1}以及X有关。
如下图所示是线性链条件随机场的例子，



在上图中，从字符图像序列X_i中识别单词，输出将是一系列字母Y_i。我们可以从它的X_i中分别预测每个Y_i。 然而，由于这些字母组合在一起形成一个词，所以Y_i的预测与Y_{i+1}和Y_{i-1}也有关系。

2.1条件随机场的参数化形式

由线性链条件随机场描述了X和Y的关系，以及相邻两个Y之间的关系可以初步猜想，线性链CRF的参数化形式应该包含两个部分，一部分描述X和Y的关系，另一部分描述相邻两个Y之间的关系。
势函数$\Phi(X, Y_i)$和$\Phi(Y_{i-1}, Y_i)$分别描述这两种关系，我们的目标是求
$\arg\max_y \phi_1(y_1, x_1) \prod_{i=2}^{n} \phi(y_{i-1}, y_i)\phi(y_i, x_i)$

规定条件分布
$P(y \mid x) = \frac{1}{Z(x)} \prod_{c \in C} \phi_c(x_c, y_c)$

$Z(x) = \sum_{y \in \mathcal{Y}} \prod_{c \in C} \phi_c(x_c, y_c)$

势函数$\Phi(X, Y_i)$和$\Phi(Y_{i-1}, Y_i)$通常定义为指数函数，由上一节提到的**Hammersley-Clifford 定理**可以得出，线性链CRF的参数化形式

$$P(y|x) = \frac{1}{Z(x)} exp\left(\sum_k \sum_{i=2}^{n} \lambda_k t_k(y_{i-1}, y_i, x, i) + \sum_l \sum_{i=1}^{n} \mu_l s_l(y_i, x, i)\right)$$

其中

$$Z(x) = \sum_y exp\left(\sum_k \sum_{i=2}^{n} \lambda_k t_k(y_{i-1}, y_i, x, i) + \sum_l \sum_{i=1}^{n} \mu_l s_l(y_i, x, i)\right)$$

上式中t_k和s_l是特征函数，λ_k和μ_l是对应的权值。$Z(x)$是规范化因子，求和是在所有可能的输出序列上进行的。
t_k称为转移特征，用于刻画相邻的标记变量（Y）之间的相关关系以及观测序列（X）对他们的影响。下标k表示第k个特征函数，并且每个特征函数都附属一个权重 λ_k，每个特征执行一定的限定作用，然后建模再为每个特征函数加权求和。
s_l称为状态特征，用于刻画观测序列（X）对标记变量（Y）的影响
通常特征函数t_k和s_l取值为1或0；当满足特征条件时为1，不满足为0。

2.2条件随机场的简化形式

注意到线性链**CRF**上述的参数化形式中，同一特征函数（例：t_k），在各个位置(i)都有定义，可以对同一个特征在各个位置求和，将局部特征函数转化为一个全局特征函数，这样就可以把**CRF**写成权值向量和特征向量的内积形式。
为了简便，将转移特征函数（t_k）与状态特征函数s_l做一个拼接，设有K_1个转移特征，K_2个状态特征，$K = K_1 + K_2$，记

$$f_k(y_{i-1}, y_i, x, i) = \begin{cases} t_k(y_{i-1}, y_i, x, i) & k = 1, 2, ..., K_1 \\ s_l(y_i, x, i) & k = K_1 + l; l = 1, 2, ..., K_2 \end{cases}$$

然后，对转移特征与状态特征在各个位置求和，记做

$$f_k(y, x) = \sum_{i=1}^{n} f_k(y_{i-1}, y_i, x, i),\ \ k = 1, 2, ..., K$$

用w_k表示特征$f_k(y, x)$的权值，即

$$w_k = \begin{cases} \lambda_k & k = 1, 2, ..., K_1 \\ \mu_k & k = K_1 + l; l = 1, 2, ..., K_2 \end{cases}$$

所以条件随机场又可以简化为

$$P(y|x) = \frac{1}{Z(x)} exp\left(\sum_{k=1}^{K} w_k f_k(y, x)\right)$$

其中

$$Z(x)=\sum_y exp\left(\sum_{k=1}^K w_k f_k(y,x)\right)$$

用w表示权值向量，即

$$w=(w_1,w_2,...,w_k)^T$$

以$F(y,x)$,表示全局的特征向量，即

$$F(y,x)=(f_1(y,x),f_2(y,x),...,f_K(y,x))^T$$

那么CRF又可以写成w和$F(y,x)$的内积形式：

$$P_w(y|x)=\frac{1}{Z(x)}exp\left(w\cdot F(y,x)\right)$$

其中

$$Z(x)=\sum_y exp\left(w\cdot F(y,x)\right)$$

通过**CRF**的简化形式，可以看到**CRF**满足**log-linear model**的形式（具体见第3节），实际也可以归入**log-linear model**

一套**CRF**由一套参数w唯一确定（先定义好各种特征函数）。CRF用极大似然估计方法、梯度下降、牛顿迭代、拟牛顿下降、IIS、BFGS、L-BFGS等等都可以求解，能用在**log-linear models**上的求参方法都可以用过来。

模型的工作流程：

- step1. 先预定义特征函数
- step2. 在给定的数据上，训练模型，确定参数
- step3. 用确定的模型做序列标注问题或者序列求概率问题。

---

3. softmax与 Log-linear

总体来说，softmax与 Log-linear比较相似，都是对$p(y|x)$进行建模，个人感觉最大的差异在于**特征向量**与**参数向量**的个数。

假设x固定，当计算 $p(y|x)$ 时，**softmax**模型对于每一个不同的y, 使用不同的参数向量w_k，即当$y=k$时，参数向量为w_k；对于每一个不同的y, 特征向量却总是同一个，即特征向量只与x有关，与y无关。参数向量有多个，特征向量只有一个。

而**Log-linear**模型与之不同，对于每一个不同的y, Log-linear 模型使用相同的参数向量v，但是特征向量是不同的，特征向量与x与y都相关。参数向量只有一个，特征向量有多个。

下面具体介绍这两种模型，假设$\{(x^{(i)},y^{(i)});i=1,...,m\}$ 是包含m个训练样本的训练集。$(x^{(i)},y^{(i)})$ 是训练集中的第 i个训练样本。在每一个训练样本$(x^{(i)},y^{(i)})$中，$x^{(i)}$是对应的输入，$y^{(i)}$是对应的输出。

3.1 Softmax Model

我们可以从每个 $x^{(i)}$ 中提取n个特征,生成一个n维向量：

$$g(x^{(i)})=\begin{bmatrix} g_1(x^{(i)}) \\ g_2(x^{(i)}) \\ \vdots \\ g_j(x^{(i)}) \\ \vdots \\ g_n(x^{(i)}) \end{bmatrix}$$

通常来说, $y^{(i)}$是离散的，并且 $y^{(i)}$取含有K个元素的集合 $\{1,2,...,k,...,K\}$ 中的某个值。

注意:特征向量$g(x^{(i)})$只与x取值有关，而与y无关

举例：
在使用softmax做文本分类的任务中，$x^{(i)}$ 是文本文档，$y^{(i)}$ 是该文档对应的分类。如果 n 是词表的大小，从文本中抽取特征的常用方式之一是“词袋（bag of words）”，在该方式下，$g_j(x^{(i)})$表示词表中的第 j个词在当前文档中出现的次数 。 K 是所有训练文档的总类别数。显然，在这个例子中， $g_j(x^{(i)})$只取决于$x^{(i)}$, 而与$y^{(i)}$无关。

给定输入$x^{(i)}$, 我们可以计算 $y^{(i)}$ 被标记为k的概率：

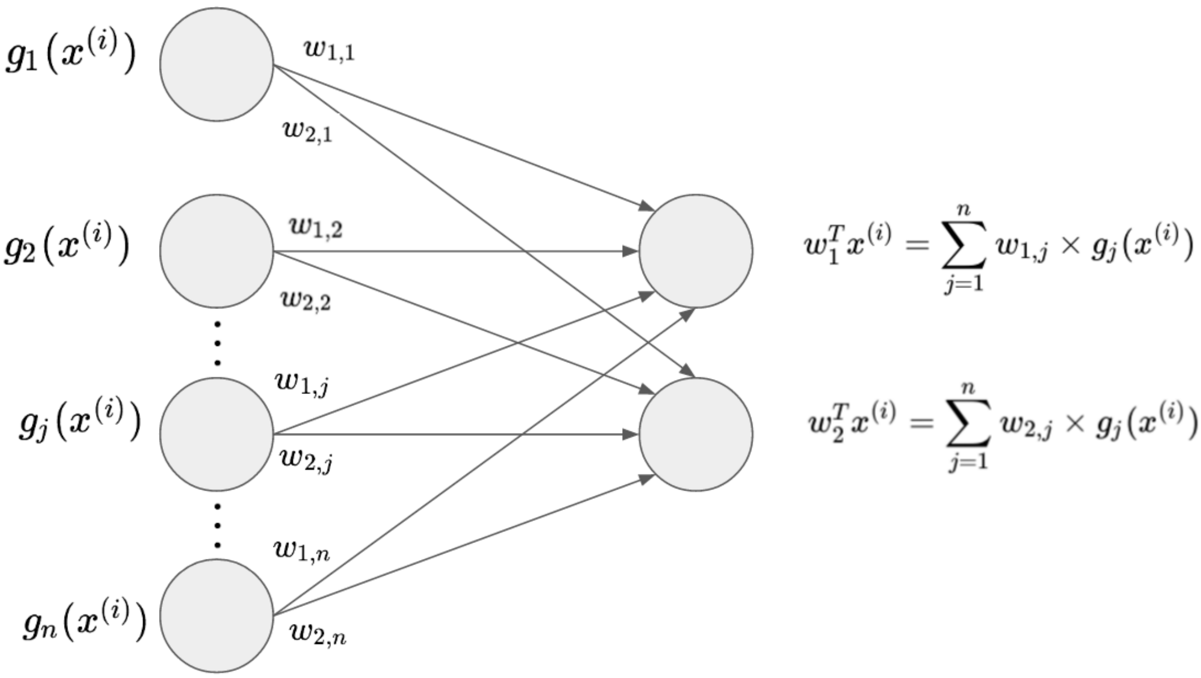
$$
\begin{aligned}
p(y^{(i)} = k|x^{(i)}) &= \frac{e^{w_k^T \cdot g(x^{(i)})}}{\sum_{l=1}^{K} e^{w_l^T \cdot g(x^{(i)})}} \\
&= \frac{exp(\sum_{j=1}^{n} w_{k,j} \times g_j(x^{(i)}))}{\sum_{l=1}^{K} exp(\sum_{j=1}^{n} w_{l,j} \times g_j(x^{(i)}))}
\end{aligned}
$$

其中

$$
w_k = \begin{bmatrix} w_{k,1} \\ w_{k,2} \\ \vdots \\ w_{k,j} \\ \vdots \\ w_{k,n} \end{bmatrix}
$$

并且

$$
w_k^T \cdot g(x^{(i)}) = \sum_{j=1}^{n} w_{k,j} \times g_j(x^{(i)})
$$



从上图中我们可以看到,当我们使用softmax 模型计算 $p(y^{(i)} = k|x^{(i)})$ 时, 对于每一个 $y^{(i)} = k$, 我们使用不同的参数向量 w_k,总共需要 K个参数向量。 但是对于每一个不同的值 $y^{(i)} = k$, 特征向量总是相同的。

3.2 Log-linear Model

在 Log-linear 模型中， $y^{(i)}$ 的取值也是离散的，取值范围也是$\{1,2,...,k,...,K\}$。给定输入$x^{(i)}$, 计算 $y^{(i)}$ 被标记为k的概率时，抽取特征向量的方式与softmax是不同的，
在 Log-linear 模型中，我们从每个样本$(x^{(i)},y^{(i)})$中抽取 n个特征，生成n维的向量。令抽取的特征为：

$$f(x^{(i)},y^{(i)}=k)=\begin{bmatrix} f_1(x^{(i)},y^{(i)}=k) \\ f_2(x^{(i)},y^{(i)}=k) \\ \vdots \\ f_j(x^{(i)},y^{(i)}=k) \\ \vdots \\ f_n(x^{(i)},y^{(i)}=k) \end{bmatrix}$$

注意：抽取的特征，同时取决于$x^{(i)}$ 和$y^{(i)}$。
举例：
在使用Log-linear做情感分析的任务中，$x^{(i)}$ 是文本文档, and $y^{(i)}$ 表示文档的分类. 在这里，K 为 3。 $y^{(i)}=1$表示文档$x^{(i)}$ 是积极的； $y^{(i)}=2$ 表示文档$x^{(i)}$ 是中性的；$y^{(i)}=3$ 表示文档 $x^{(i)}$ is 是消极的。下面给出一些特征抽取函数的示例：

$$f_1(x^{(i)},y^{(i)})=\begin{cases} 1 & \text{if } y^{(i)}=1 \text{ and "awesome" in } x^{(i)}, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases}$$

$$f_2(x^{(i)},y^{(i)})=\begin{cases} \text{count("awesome" in } x^{(i)}) & \text{if } y^{(i)}=1, \\ 0 & \text{if } y^{(i)}\neq 1. \end{cases}$$

显然, 在上面的示例中每一个特征 $f_j(x^{(i)},y^{(i)})$ 都与 $x^{(i)}$ 和 $y^{(i)}$有关。
给定输入$x^{(i)}$, 我们可以计算 $y^{(i)}$ 被标记为k的概率：

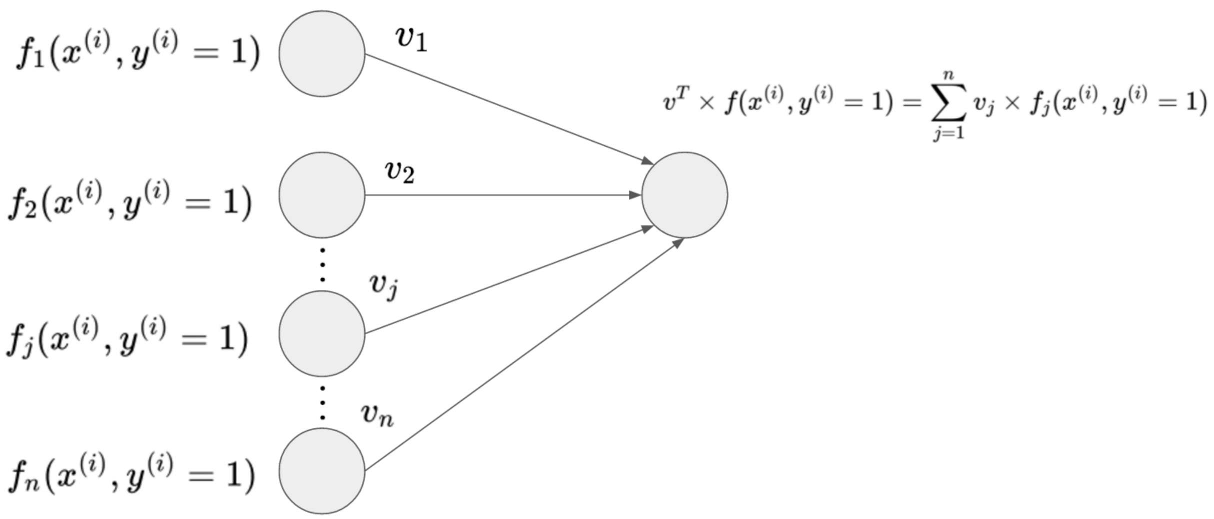
$$\begin{aligned} p(y^{(i)}=k|x^{(i)}) &= \frac{e^{v^T\cdot f(x^{(i)},y^{(i)}=k)}}{\sum_{l=1}^{K} e^{v^T\cdot f(x^{(i)},y^{(i)}=l)}} \\ &= \frac{exp(\sum_{j=1}^{n} v_j\times f_j(x^{(i)},y^{(i)}=k))}{\sum_{l=1}^{K} exp(\sum_{j=1}^{n} v_j\times f_j(x^{(i)},y^{(i)}=l))} \end{aligned}$$

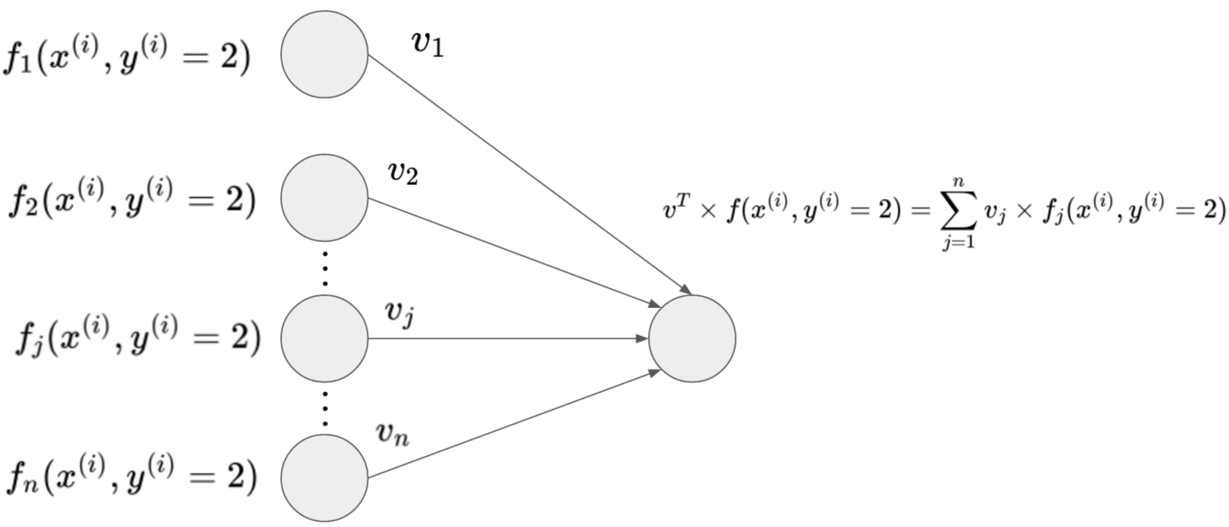
其中

$$v = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_j \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix}$$

并且

$$v^T \cdot f(x^{(i)}, y^{(i)} = k) = \sum_{j=1}^{n} v_j \times f_j(x^{(i)}, y^{(i)} = k)$$





如上图所示, 在 log-linear model中计算 $p(y^{(i)} = k|x^{(i)})$时，对于每一个$y^{(i)} = k$, 我们使用同一个参数向量 v, 而与之对应的特征向量$f(x^{(i)}, y^{(i)} = k)$是不同的。

与log-linear model类似，下面这些术语基本上是等同的:

- log-linear model
- maximum entropy model (maxent)
- exponential family model
- energy-based model
- Boltzmann distribution
- conditional random field
  他们基本上都是在给定x下，对$p(y|x)$进行建模，其中参数向量跨类别共享，即对于$y^{(i)} = k$, 使用同一个参数向量 v；而特征向量是不同的。当类别很多（K很大）或者某些类别的训练数据过少时，使用同一个参数向量v会更好一些，这样可以减少参数的数目，提高效率。

4. CRF在NLP中的应用

CRF可以用来做命名实体识别（NER）
CRF可以用在如下的场景：
考虑一个由单词序列$w_1, w_2, ..., w_n$组成的文本，这个单词序列对应着一个标签序列$t_1, t_2, ..., t_{i-1}$(这里$i < n$),我们的任务是预测下一个单词的标签t_i，即构建模型

$$P(T_i = t_i | T_1 = t_1, ..., T_{i-1} = t_{i-1}, W_1 = w_1, ..., W_n = w_n)$$

举例：
文本如下：
Hispaniola/NNP quickly/RB became/VB an/DT important/JJ base from which Spain expanded its empire into the rest of the Western Hemisphere
这里$w_1, w_2, ..., w_n$表示句子Hispaniola quickly…Hemisphere， 前五个词的标签是$t_1, t_2, ..., t_5$=NNP RB VB DT JJ,我们要预测$t_{i=6}$的值，即预测单词**base**的标签。

具体应用到**NER**中。具体过程如下：
1.定义实体标注集，可以使用**BMEWO**标注集，各个标注的意义如下：

- **B**: 实体的开头
- **M**:实体的中间部分
- **E**:实体的结束
- **W**:单独成实体
- **O**:句子的其它成分
  比如下面这个句子（经过分词处理）：
  山西 相立 山泉 饮品 开发 有限公司 生产 的桶装 饮用水 检出 铜绿 假 单胞菌
  可以标注为：

山西/B 相立/M 山泉/M 饮品/M 开发/M 有限公司/E 生产/O 的/O 桶装/O 饮用水/O 检出/O 铜绿/O 假/O 单胞菌/O

2.对训练文本进行中文分词、去除停用词的处理，并根据上述的标注集进行标注。在该过程中，还可以引入其他的特征，比如词性特征、是否是特征词(实体通常的结尾词,比如“有限公司”)、是否是地点、是否是句子结束等。

3.定义特征模板（特征模板的说明见参考文献7），自动的在训练文本中提取特征函数，**特征模板的定义直接决定了最后的识别效果**，训练得到CRF模型

4.使用训练得到的CRF模型，进行文本的实体标注集的标签预测，用正则表达式 `B+M*E+` 或者 `W` 匹配文本，然后将其背后的文字提取出来，就是识别出来的实体。

reference：

1. PRML-8.3
2. https://juejin.im/entry/5a9ea04b51882555712bdcd6
3. 统计学习方法（李航）第11章 条件随机场
4. 机器学习（周志华）第14章概率图模型
5. https://www.zhihu.com/question/35866596
6. Log-Linear Models by Michael Collins
7. https://www.lookfor404.com/用crf做命名实体识别-ner系列（三）/