条件随机场

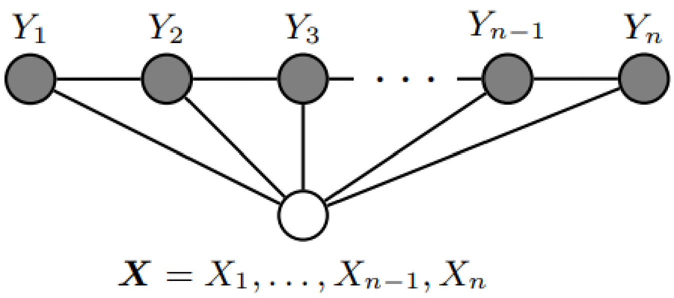
CRF是概率图模型中一个非常经典的概率无向图模型，常用在命名实体识别等序列标注任务上。

模型介绍

给定给一个序列 x ，计算标签序列 y 的概率 $P(y|x)$.

概率无向图模型又称为马尔可夫随机场，它要求 $P(Y)$ 必须满足**成对、局部、全局马尔可夫性**，然后根据Hammersley-Clifford定理，概率无向图模型的联合概率分布 $P(Y)$ 可以分解成规范化的**最大团**的势函数乘积（这个定理暂时不深究）。

条件随机场在此基础上加了一个随机变量X进来，于是 $P(Y)$ 变成 $P(Y_v|X, Y_w, w \neq v) = P(Y_v|X, Y_v, w \sim v)$ ，其中 $\sim$ 表示相邻。此时，Y仍旧满足马尔可夫随机场。线性链条件随机场在此基础上，要求 Y 具有链式结构，但是对 X 没有要求，可用下图来表示：



这里的定义是：

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

以上两张图都是线性链条件随机场，**线性链条件随机场的最大团就是相邻两个结点的集合**。而通过对这两张图进行内部比较，可以发现左边的图更为特殊，因为X和Y具有相同的结构。现实中，比如对于NER问题，对一个文本序列进行序列标注，都一般假设X和Y具有相同结构，满足左边的那张图。

于是我们就可以定义CRF中的**状态转移特征函数** $t_k(y_{i-1}, y_i, x, i)$ 和**状态特征函数** $s_l(y_i, x, i)$ ，它们分别描述了状态转移概率和发射概率。

特征函数的取值只有0或者1，比如一个具体的特征函数：

$$t1(y_{i-1} = 1, y_i = 2, x, i) = 1, \quad i = 2, 3$$

这个特征函数其实是可以拆开的，虽然只阐述了在2和3这两个位置上取值为1的条件，但是可以默认其余位置上都为0。

但是光有特征函数是不够的，每个特征函数还都对应一个权重。于是，整个参数化的线性链条件随机场就可以表示为：

$$P(y|x) = \frac{1}{Z(x)} exp(\sum_{i,k} \lambda_k t_k(y_{i-1}, y_i, x, i) + \sum_{i,l} \mu_l s_l(y_i, x, i))$$

$Z(x)$ 是归一化因子，它作用在全局上，实现全局归一化，这恰恰就是CRF相比于MEMM的改进之处。

这里有一个细节值得注意：i 和 k/l 分别是位置编号和特征函数编号，它们是分开的！换句话说，每个位置上都存在多种特征函数，而一个特征函数又是作用在整个序列 y 上的。

基于此，对CRF进行简化表示：

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

其中 $f_k(y, x) = \sum_{i=1}^{n} f_k(y_{i-1}, y_i, x, i)$ 是两种特征函数的统一形式。

可以看到，$f_k(y, x)$ 是单个特征函数在整个序列上的取值，$P(y|x)$ 是所有特征函数与权重的加权和。

这里的特征函数有K个，是两种特征函数的数量和，位置则是从1到n。

接下来，尝试将其转化成向量形式：

$$P_w(y|x) = \frac{exp(w \cdot F(y, x))}{Z_w(x)}$$

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

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

这里的 . 表示内积。

简化到这一步还没完，我们还可以将其继续简化到矩阵表示形式。

假设标签的数量为m，定义一个 m 阶矩阵随机变量：

$M_i(x) = [M_i(y_{i-1}, y_i, x)]$

$M_i(x)$ 对应在位置 i 处的矩阵，矩阵元素为 $M_i(y_{i-1}, y_i, x)$，可展开如下：

$$\begin{aligned} M_i(x) &= [M_i(y_{i-1}, y_i, x)] \\ &= \begin{bmatrix} M_i(y_{i-1} = c_1, y_i = c_1|x) & M_i(y_{i-1} = c_1, y_i = c_2|x) & \cdots & M_i(y_{i-1} = c_1, y_i = c_m|x) \\ M_i(y_{i-1} = c_2, y_i = c_1|x) & M_i(y_{i-1} = c_2, y_i = c_2|x) & \cdots & M_i(y_{i-1} = c_2, y_i = c_m|x) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ M_i(y_{i-1} = c_m, y_i = c_1|x) & M_i(y_{i-1} = c_m, y_i = c_2|x) & \cdots & M_i(y_{i-1} = c_m, y_i = c_m|x) \end{bmatrix} \end{aligned}$$

也就是在位置 i 处定义了一个 $m * m$ 的矩阵。

其中

$$M_i(y_{i-1}, y_i, x) = exp(W_i(y_{i-1}, y_i|x))$$

$$W_i(y_{i-1}, y_i|x) = \sum_{k=1}^{K} w_k f_k(y_{i-1}, y_i, x, i)$$

可以看到 $M_i(y_{i-1}, y_i, x)$ 是一个位置上所有的特征函数的取值的加权和。这里给每个概率加上了一个 exp，是为了方便计算，加上 exp 之后路径上每个概率连乘，不仅在指数上可以得到累加和，还方便计算softmax概率，后面还会提到。

有了这个 $M_i(x)$ 基本得到了 i 位置上所有可能的状态转移和发射。

那么对于整个序列Y的概率：

$$P_w(y|x) = \frac{1}{Z_w(x)} \prod_{i=1}^{n+1} M_i(y_{i-1}, y_i|x)$$

假设标签序列 $y = \{y_1, y_2, ..., y_n\}$，那么整个序列的概率的分子就是：

$$exp(W_1(y_0, y_1|x)) \cdot exp(W_2(y_1, y_2|x)) \cdots exp(W_n(y_n, y_{n+1}|x))$$

把 $W_i(y_{i-1}, y_i|x)$ 简记为 $a(i)$，得到：

$$exp(a(1) + a(2) + ... + a(n+1))$$

> 🎉 因为序列是以start开始以stop结束的，所以完整的序列是 $\{start, y_1, ..., y_n, stop\}$，所以 $W_i(y_{i-1}, y_i|x)$ 从 1 开始，直到 $n+1$

把整个路径概率和记为 l_1，就是

$$exp(l_1)$$

分子已经是 exp 的形式了，那么接下来就只需要计算分母这个归一化因子了。

所有可能路径的概率和，那总共就有 n^m 种了，n 是序列长度，m表示每个位置上的取值种数

$$exp(l_1) + exp(l_2) + \cdots + exp(l_{n^m})$$

二者相除，自然就可以得到路径 l_1 全局归一化的概率了：

$$\frac{exp(l_1)}{\sum_{i=1}^{n^m} exp(l_i)}$$

所以回头看看，$M_i(y_{i-1}, y_i, x)$ 带有一个 exp 就能自圆其说了。

到这里，基本上，整个CRF的参数就能确定了，特征函数以及他们的权重用 $n+1$ 个 $m*m$ 的矩阵表示了出来。

> 🎉 深度学习模型中的CRF层没有显式地去定义特征函数，容易让初学者疑惑，其实参数转移矩阵就暗含了每个位置上的特征函数，这就像电影《超体》的女主一样，它虽然看不见摸不着，但是它却无处不在。

所以，整个CRF就学习 $(n+1)*m*m$ 的参数就好了，最后计算的时候做一个全局归一化，就能得到任意一个路径的概率。

最后来总结下CRF模型的表示形式：

$$P_w(y|x) = \frac{1}{Z_w(x)} \prod_{i=1}^{n+1} M_i(y_{i-1}, y_i|x)$$

$$M_i(y_{i-1}, y_i|x) = exp(\sum_{k=1}^{K} w_k f_k(y_{i-1}, y_i|x))$$

$Z_w(x)$ 是以start为起点，以stop为终点通过状态的所有路径的非规范化概率 $\prod_{i=1}^{n+1} M_i(y_{i-1}, y_i|x)$ 之和。

参考文献

1. 《统计学习方法》
2. Conditional Random Fields: An Introduction