条件随机场 (Conditional Random Field)

1. 背景 (Background)

Conditional Random Field (CRF) 是一种鉴别式概率模型 (Discriminative Probability Model)，常用于序列标注任务 (Sequence Labeling)，如词性标注 (POS Tagging)、命名实体识别 (NER) 等。

为了理解 CRF 的位置，我们需要回顾一下分类模型 (Classification) 的体系。

1.1 硬分类 vs 软分类 (Hard vs Soft Classification)

分类模型可以从输出结果的性质分为两大类：

1. **硬分类 (Hard Classification)**: 直接输出类别 $y \in \{+1, -1\}$ 或 $y \in \{C_1, \dots, C_k\}$。
    - 代表模型：
        - **SVM (Support Vector Machine)**: 最大化几何间隔 (Geometric Margin)。
        - **PLA (Perceptron Learning Algorithm)**: 误分类驱动 (Error Driven)。
        - **LDA (Linear Discriminant Analysis)**: 类间大，类内小 (Fisher Criterion)。
2. **软分类 (Soft Classification)**: 输出属于某类的概率 $P(y|x)$，通常在 $[0, 1]$ 之间。
    - 软分类模型又可以进一步分为：
        - **概率生成模型 (Probability Generative Model)**: 对联合概率 $P(x, y)$ 建模，然后通过贝叶斯公式求 $P(y|x)$。
        - **概率判别模型 (Probability Discriminative Model)**: 直接对条件概率 $P(y|x)$ 建模。

1.2 模型演变图谱 (Model Evolution Map)

CRF 的发展可以看作是概率模型在序列数据上的延伸和改进。

概率生成模型路径 (Generative Path):

- **Naive Bayes (朴素贝叶斯)**: 假设特征之间相互独立 ($x_i \perp x_j | y$)。

$$P(y|x) \propto P(y) \prod_{i=1}^{d} P(x_i|y) \tag{1}$$

- **HMM (Hidden Markov Model, 隐马尔可夫模型)**: Naive Bayes 在时序上的扩展（加入马尔可夫假设）。

$$P(x, y) = \prod_{t=1}^{T} P(y_t|y_{t-1}) P(x_t|y_t) \tag{2}$$

    - HMM 同样做了很强的独立性假设：观测独立假设 (Output Independence) 和 齐次马尔可夫假设 (Homogeneous Markov Assumption)。

概率判别模型路径 (Discriminative Path):

- **Logistic Regression (逻辑回归)**: 最大熵原理 (Maximum Entropy) 的一种特例。直接建模 $P(y|x)$。

- **MEMM (Maximum Entropy Markov Model, 最大熵马尔可夫模型)**: 将 Logistic Regression / MaxEnt 扩展到序列数据。

$$P(y|x) = \prod_{t=1}^{T} P(y_t|y_{t-1}, x_t) \tag{3}$$

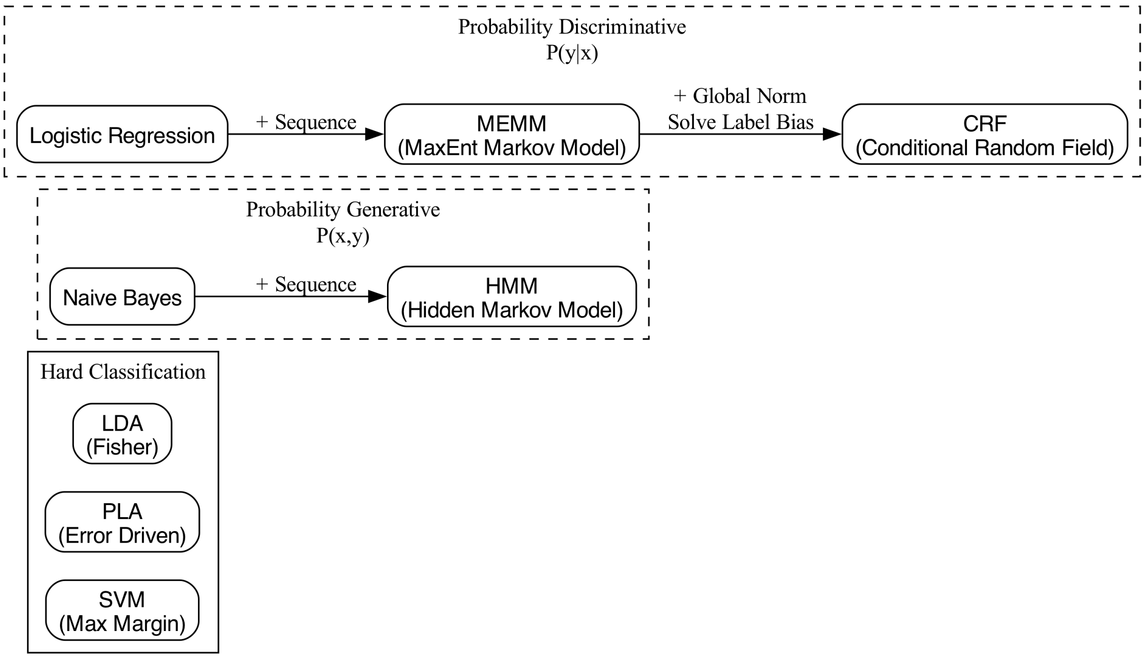
  - MEMM 打破了 HMM 的观测独立假设，允许当前状态依赖于观测序列的任意部分（通常是 Local Input）。
  - **缺点**: Label Bias Problem (标记偏置问题)。由于它是局部归一化 (Local Normalization)，即 $\sum_{y_t} P(y_t|y_{t-1}, x_t) = 1$，导致模型倾向于选择转移状态较少的状态。
- **CRF (Conditional Random Field)**: 为了解决 Label Bias Problem，CRF 引入了 **全局归一化 (Global Normalization)**。

$$P(Y|X) = \frac{1}{Z}\exp\left(\sum_{t=1}^{T}\sum_{k}\lambda_k f_k(y_{t-1}, y_t, X, t)\right) \tag{4}$$

  - 它不再是对每个时刻及其状态进行归一化，而是对整个序列的所有可能路径进行归一化。

演变总结 (Summary of Evolution)

1. **HMM**: Generative, $P(X,Y)$, 两个强假设。
2. **MEMM**: Discriminative, $P(Y|X)$, 打破观测独立假设，但引入 Label Bias。
3. **CRF**: Discriminative, $P(Y|X)$, 全局归一化，解决 Label Bias，更加合理。

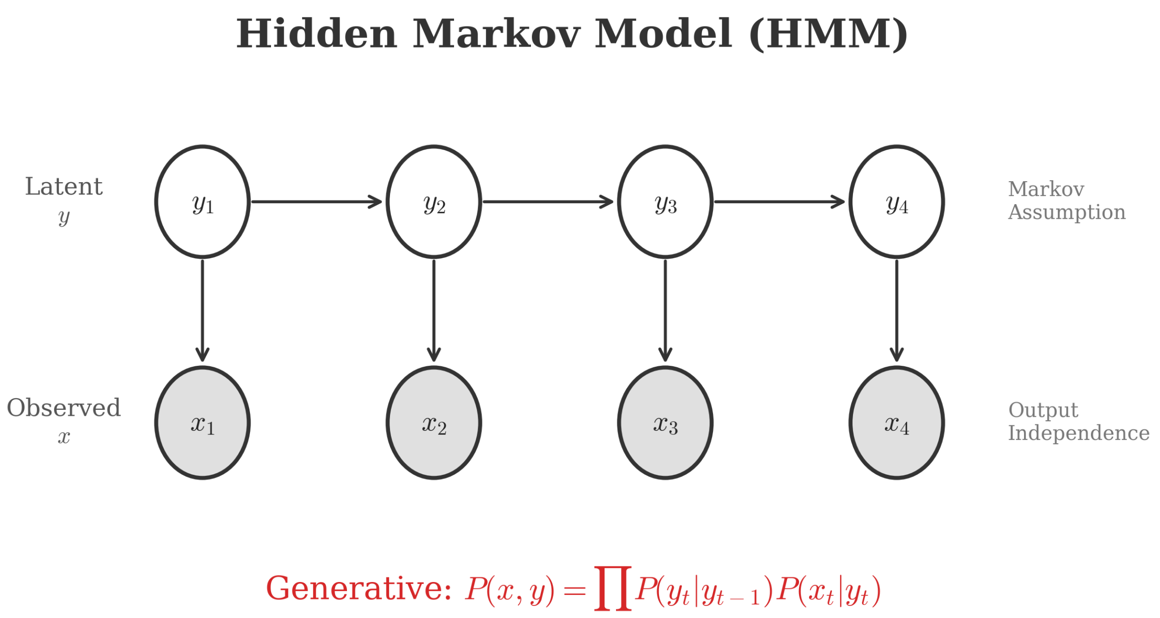


2. HMM vs MEMM vs CRF

为了更深入理解 CRF 的优势，我们详细对比这三个模型。

2.1 HMM (Hidden Markov Model)

HMM 是典型的生成模型，对联合概率 $P(X, Y)$ 建模。
图模型结构如下：



HMM 包含两个关键假设：

1. **齐次马尔可夫假设 (Homogeneous Markov Assumption)**: $P(y_t|y_{1:t-1}) = P(y_t|y_{t-1})$。即当前状态只依赖于前一个状态。
2. **观测独立假设 (Output Independence Assumption)**: $P(x_t|y_t, \ldots) = P(x_t|y_t)$。即当前观测只依赖于当前状态。

这两个假设简化了计算，但也限制了模型的表达能力。特别是观测独立假设，使得 HMM 难以利用上下文的特征（例如，词性标注中，当前词的词性可能依赖于前一个词本身，而不仅仅是前一个词的词性）。

2.2 MEMM (Maximum Entropy Markov Model)

MEMM 试图打破 HMM 的观测独立假设。它直接对后验概率 $P(Y|X)$ 建模（判别模型）。
图模型中，除了每个时刻的局部观测 x_t，通常还引入全局观测 X (Global Input) 来辅助判断。

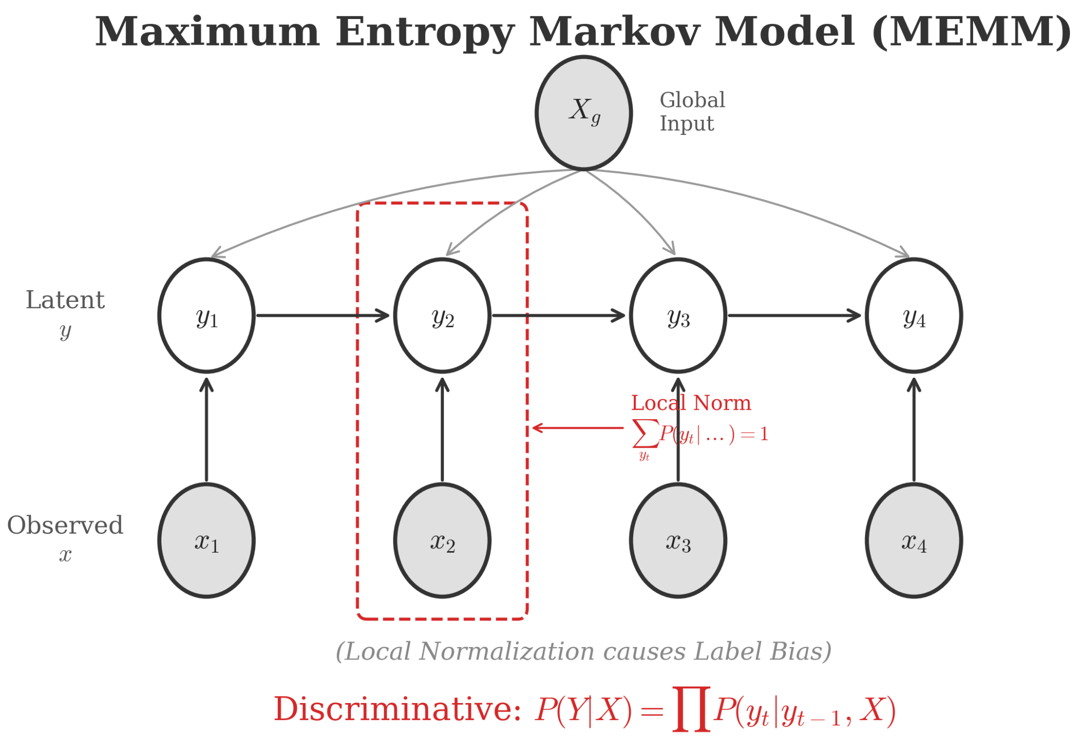
MEMM 在时刻 t 的概率是局部归一化的：

$$P(y_t|y_{t-1}, x_t) = \frac{1}{Z(y_{t-1}, x_t)} \exp\left(\sum_k \lambda_k f_k(y_t, y_{t-1}, X)\right) \tag{5}$$

- **优点**: 打破了 HMM 的观测独立假设。特征函数 f_k 可以依赖于整个观测序列 X (例如 $x_{1:T}$)，而不仅是当前时刻的 x_t。

标记偏置问题 (Label Bias Problem):
由于 MEMM 进行的是**局部归一化** (Local Normalization)，即对于每一个给定的 y_{t-1}，$\sum_{y_t} P(y_t|y_{t-1}, x_t) = 1$。
这会导致一种现象：如果某个状态 y_{t-1} 只有一个后续状态（或者很少），那么无论观测值 x_t (或 X) 是什么，转移到该后续状态的概率都会接近 1。模型会倾向于选择那些“出度”较小的路径，而忽略了观测数据 x 的实际影响。

> *形象理解*: 局部归一化就像是在每个路口都强迫流量守恒。如果一条路只有一个出口，所有流量必须走这里，完全不管路边的路牌（观测值）指引去哪里。



2.3 CRF (Conditional Random Field)

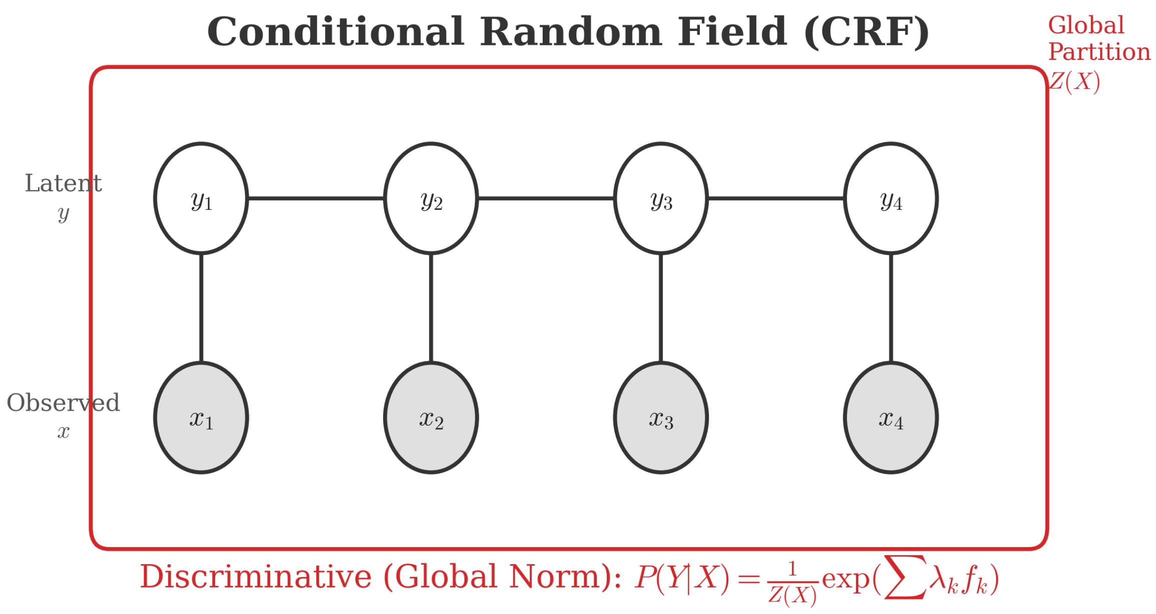
CRF 解决了 Label Bias 问题，方法是**全局归一化 (Global Normalization)**。

CRF 也是判别模型，建模 $P(Y|X)$。但它不是在每个时刻 t 归一化，而是计算整个序列 $Y = (y_1, \dots, y_T)$ 的得分 (Score)，然后除以全局配分函数 $Z(X)$。

$$P(Y|X) = \frac{1}{Z(X)} \exp(\text{Score}(Y, X)) \tag{6}$$

$$\text{Score}(Y, X) = \sum_{t=1}^{T} \sum_{k} \lambda_k f_k(y_{t-1}, y_t, X, t) \tag{7}$$

- **打破观察独立性**: 特征函数 f_k 可以依赖于整个观测序列 X。
- **解决 Label Bias**: 归一化因子 $Z(X)$ 是对所有可能的路径 Y' 求和。路径的选择是在全局范围内竞争，而不是局部路口竞争。



3. Probability Density Function (PDF)

CRF 是基于 **无向图模型 (Undirected Graphical Model)** 也称为 **马尔可夫随机场 (Markov Random Field, MRF)** 构建的。

3.1 MRF 因子分解 (Factorization)

根据 Hammersley-Clifford 定理，无向图模型的联合概率分布可以表示为图中最大团 (Maximal Clique) 上的势函数 (Potential Function) 的乘积。

对于给定观测序列 X，状态序列 Y 的条件概率 $P(Y|X)$ 定义为：

$$P(Y|X) = \frac{1}{Z(X)} \prod_{C \in \mathcal{C}} \psi_C(Y_C, X) \tag{8}$$

- $\mathcal{C}$: 所有的最大团。
- Y_C: 团 C 对应的随机变量集合。
- $\psi_C(Y_C, X)$: 势函数，必须为正值，通常取指数形式 $\exp(-E(Y_C, X))$。
- $Z(X)$: 规范化因子 (Partition Function)，确保概率和为 1。

3.2 线性链 CRF (Linear Chain CRF)

在序列标注任务中，我们通常使用 **线性链 CRF**。

- 图结构: $y_1 - y_2 - \cdots - y_T$。
- 最大团: 相邻的两个状态节点 (y_{t-1}, y_t)。

因此，概率分布可以写成：

$$P(Y|X) = \frac{1}{Z(X)} \prod_{t=1}^{T} \psi_t(y_{t-1}, y_t, X) \tag{9}$$

引入指数模型 (Log-Linear Model)，我们将势函数定义为特征函数的线性组合：

$$\psi_t(y_{t-1}, y_t, X) = \exp\left(\sum_{k=1}^{K} \lambda_k f_k(y_{t-1}, y_t, X, t)\right) \tag{10}$$

- $f_k(y_{t-1}, y_t, X, t)$: **特征函数 (Feature Function)**。
- λ_k: 特征对应的权重参数。

3.3 参数化形式 (Parametric Form)

为了更清晰地表示，我们将特征函数分为两类：

1. **转移特征 (Transition Features)**: $f_k(y_{t-1}, y_t, x_{1:T})$，权重为 λ_k，共 K 个。
2. **状态特征 (State Features)**: $g_l(y_t, x_{1:T})$，权重为 η_l，共 L 个。

于是，条件概率可以写为：

$$P(Y|X) = \frac{1}{Z(X)} \exp \sum_{t=1}^{T} \left[\sum_{k=1}^{K} \lambda_k f_k(y_{t-1}, y_t, x_{1:T}) + \sum_{l=1}^{L} \eta_l g_l(y_t, x_{1:T})\right] \tag{11}$$

我们将参数和特征进行向量化 (Vectorization)：

- **参数向量** θ:

$$\lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \vdots \\ \lambda_K \end{pmatrix}, \quad \eta = \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \vdots \\ \eta_L \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \theta = \begin{pmatrix} \lambda \\ \eta \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{K+L} \tag{12}$$

- **特征向量** H:
  首先定义时刻 t 的局部特征向量：

$$f = \begin{pmatrix} f_1 \\ \vdots \\ f_K \end{pmatrix}, \quad g = \begin{pmatrix} g_1 \\ \vdots \\ g_L \end{pmatrix} \tag{13}$$

  然后定义全局特征向量 (Global Feature Vector) $H(y, x)$，这是所有时刻局部特征的累加和：

$$H(Y, X) = \begin{pmatrix} \sum_{t=1}^{T} f(y_{t-1}, y_t, x) \\ \sum_{t=1}^{T} g(y_t, x) \end{pmatrix} \tag{14}$$

最终，CRF 的概率密度函数可以写成简洁的内积形式：

$$P(Y = y|X = x) = \frac{1}{Z(x, \theta)} \exp\langle\theta, H(y, x)\rangle \tag{15}$$

其中 $Z(x, \theta) = \sum_y \exp\langle\theta, H(y, x)\rangle$。

4. 模型需要解决的问题 (Problems to Solve)

给定训练数据集 $\{(x^{(i)}, y^{(i)})\}_{i=1}^{N}$，CRF 模型主要涉及以下三个关键问题：

4.1 学习 (Learning / Parameter Estimation)

目标: 估计参数 $\hat{\theta}$，使得训练数据的对数似然函数最大化。

$$\hat{\theta} = \arg\max_{\theta} \prod_{i=1}^{N} P(y^{(i)}|x^{(i)}) \tag{16}$$

CRF 的对数似然函数 $L(\theta)$ 为：

$$\begin{aligned} L(\theta) &= \sum_{i=1}^{N} \log P(y^{(i)}|x^{(i)}) \\ &= \sum_{i=1}^{N} \left(\langle \theta, H(y^{(i)}, x^{(i)}) \rangle - \log Z(x^{(i)}, \theta) \right) \end{aligned} \tag{17}$$

通常会加入正则化项 (Regularization) 来防止过拟合：

$$\hat{\theta} = \arg\max_{\theta} \left(L(\theta) - \frac{\lambda}{2} \|\theta\|^2 \right) \tag{18}$$

由于 $L(\theta)$ 是关于 θ 的凹函数 (Concave Function)，可以通过由梯度上升法 (Gradient Ascent) 或 拟牛顿法 (L-BFGS) 进行求解。

具体梯度推导:

CRF 的对数似然函数关于参数 λ_k 的梯度为：

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial \lambda_k} &= \sum_{i=1}^{N} \sum_{t=1}^{T} f_k(y_{t-1}^{(i)}, y_t^{(i)}, x^{(i)}) - \sum_{i=1}^{N} E_{P(y|x^{(i)})} \left[\sum_{t=1}^{T} f_k(y_{t-1}, y_t, x^{(i)}) \right] \\ &= \sum_{i=1}^{N} \sum_{t=1}^{T} f_k(y_{t-1}^{(i)}, y_t^{(i)}, x^{(i)}) - \sum_{i=1}^{N} \sum_{t=1}^{T} \sum_{y_{t-1}, y_t} P(y_{t-1}, y_t|x^{(i)}) f_k(y_{t-1}, y_t, x^{(i)}) \end{aligned} \tag{19}$$

- 第一部分: **Empirical Count** (数据中实际出现的特征次数)。
- 第二部分: **Expected Count** (当前模型预测的特征期望次数)。
  - 其中 $P(y_{t-1}, y_t|x^{(i)})$ 是边缘概率，可以通过 **Forward-Backward 算法** 计算得到 (即 Section 4.2 中的内容)。

同理，关于状态特征参数 η_l 的梯度为：

$$\frac{\partial L}{\partial \eta_l} = \sum_{i=1}^{N} \sum_{t=1}^{T} g_l(y_t^{(i)}, x^{(i)}) - \sum_{i=1}^{N} \sum_{t=1}^{T} \sum_{y_t} P(y_t|x^{(i)}) g_l(y_t, x^{(i)}) \tag{20}$$

参数更新 (Gradient Ascent):

重复以下步骤直至收敛：

1. 计算梯度 $\nabla_\lambda L$ 和 $\nabla_\eta L$。
2. 更新参数：

$$\lambda^{(t+1)} = \lambda^{(t)} + \eta_{step} \cdot \nabla_\lambda L \tag{21}$$

$$\eta^{(t+1)} = \eta^{(t)} + \eta_{step} \cdot \nabla_\eta L \tag{22}$$

(其中 η_{step} 为学习率)。

4.2 推断 (Inference)

推断问题主要包含两个方面：

1. 边缘概率计算 (Marginal Probability)

目标是计算给定观测 x 下，时刻 t 处于状态 $y_t = i$ 的概率：

$$P(y_t = i|x) = \sum_{y_{<t}, y_{>t}} P(y|x) = \frac{1}{Z(x)} \sum_{y_{<t}, y_{>t}} \prod_{t'=1}^{T} \psi_{t'}(y_{t'-1}, y_{t'}, x) \tag{23}$$

直接求和计算量巨大 ($O(m^T)$)，我们可以利用 **前向-后向算法 (Forward-Backward Algorithm)** 高效计算。

定义 **前向变量** $\alpha_t(i)$:
表示从序列开始到时刻 t，状态为 i 的所有路径的非规范化概率之和。

$$\alpha_t(i) = \sum_{y_{<t}} \psi_t(y_{t-1}, y_t = i, x) \prod_{t'=1}^{t-1} \psi_{t'}(y_{t'-1}, y_{t'}, x) \tag{24}$$

递推公式:

$$\alpha_t(i) = \sum_{j \in S} \psi_t(y_{t-1} = j, y_t = i, x) \alpha_{t-1}(j) \tag{24}$$

定义 **后向变量** $\beta_t(i)$:
表示从时刻 t 状态 i 出发，到序列结束的所有路径的非规范化概率之和。
递推公式:

$$\beta_t(i) = \sum_{j \in S} \psi_{t+1}(y_t = i, y_{t+1} = j, x) \beta_{t+1}(j) \tag{25}$$

于是，边缘概率可以表示为：

$$P(y_t = i|x) = \frac{1}{Z(x)} \alpha_t(i) \beta_t(i) \tag{26}$$

其中配分函数 $Z(x) = \sum_{i \in S} \alpha_T(i)$。

2. MAP 推断 / 解码 (MAP Inference / Decoding)

也就是我们要找到最可能的标签序列 $\hat{y}$:

$$\hat{y} = \arg\max_y P(y|x) = \arg\max_y \frac{1}{Z(x, \theta)} \exp\langle \theta, H(y, x) \rangle \tag{27}$$

等价于找到得分最高的路径：

$$\hat{y} = \arg\max_y \langle \theta, H(y, x) \rangle \tag{28}$$

- 这可以通过 **Viterbi 算法** 高效求解。
- Viterbi 算法是一种动态规划算法，用于寻找图中的最短/长路径。