Vorlesung Wissensentdeckung

Strukturelle Modelle – Conditional Random Fields

Katharina Morik

LS 8 Informatik
Technische Universität Dortmund

16.7. 2013

Gliederung

Graphische Modelle

Lernen mit einer Struktur:

- Structural SVM
- Hidden Markov Models (HMM)
- Conditional Random Fields (CRF)
- Bayes Networks

Raum-zeitliche Verhältnisse

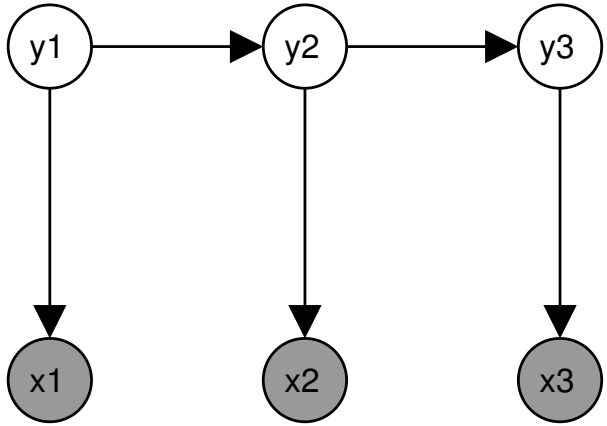
- Sprache
- Handlungen
- Bilder
- Geodaten

Hidden Markov Models

$\lambda = (Y, A, B, \pi, X)$

- Struktur gegeben durch einen Graph möglicher Zustände $y_1, ..., y_i, ...$(versteckte Knoten) Y
- Matrix A der Übergangswahrscheinlichkeit von einem Zustand zum nächsten (Transition Features): $a_{ij} = p(y_i|y_j)$
- Wahrscheinlichkeit B, im Zustand y_i die Beobachtung x_j zu machen (State Features) $b_{ij} = p(y_i|x_j)$
- Anfangswahrscheinlichkeit, dass y_i der Startzustand ist: $\pi(i) = p(y_1 = y_i)$
- Menge der möglichen Beobachtungen (beobachtete Knoten) X

HMM Modell



- Eine Beobachtung x_t hängt nur vom Zustand y_t ab: $p(x_t|y_t)$
- Ein Zustand y_t hängt nur vom Vorgängerzustand ab: $p(y_t|y_{t-1})$
- Die Anfangswahrscheinlichkeit schreiben wir als $p(y_1|y_0)$, so dass es von $p(y_t|y_{t-1})$ mit abgedeckt ist.
- Die Wahrscheinlichkeit für die Zustandssequenz $\vec{y}$ und die Beobachtungssequenz $\vec{x}$ ist

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

Aufgaben für Algorithmen

- Lernen der Wahrscheinlichkeiten $a_{ij}, b_{ij}, \pi(i)$ (Training Problem)
- Annotieren einer Beobachtungssequenz durch das (gelernte) Modell (Decoding problem)

In der Literatur gibt es noch die Evaluierungsaufgabe, die die Wahrscheinlichkeit dafür angibt, dass eine bestimmte Beobachtungssequenz durch eine gegebene Sequenz versteckter Zustände zustande kommt [3]. Wir besprechen hier zwei Algorithmen, die immer wieder vorkommen:

- Forward Backward
- Viterbi

Einführung in den Forward Backward Algorithmus

Es gibt eine Illustration des Algorithmus mit Excel-Berechnungen [1], die in den Algorithmus einführen soll.

Eiscreme und Klima (Eisner)

Im Jahr 2799 will eine Forschergruppe den Klimawandel untersuchen. Es werden keine Aufzeichnungen des Wetters in Baltimore gefunden, aber das Tagebuch von Jason Eisner über 33 aufeinander folgende Tage im Jahr 2001, in dem er notiert hat, wie viele Kugeln Eis er aß: $X = \{1, 2, 3\}$.
Gesucht ist für diese Sequenz von Tagen jeweils die verborgene Temperatur, hier nur kalt oder heiß: $Y = \{C, H\}$.

Wahrscheinlichkeiten

State

- Wahrscheinlichkeit an einem kalten Tag für eine Kugel $p(1|C) = 0,7$ und zwei $p(2|C) = 0,2$ und drei $p(3|C) = 0,1$.
- Wahrscheinlichkeit an einem heißen Tag $p(1|H) = 0,1$ und $p(2|H) = 0,2$ und $p(3|H) = 0,7$.

Transition

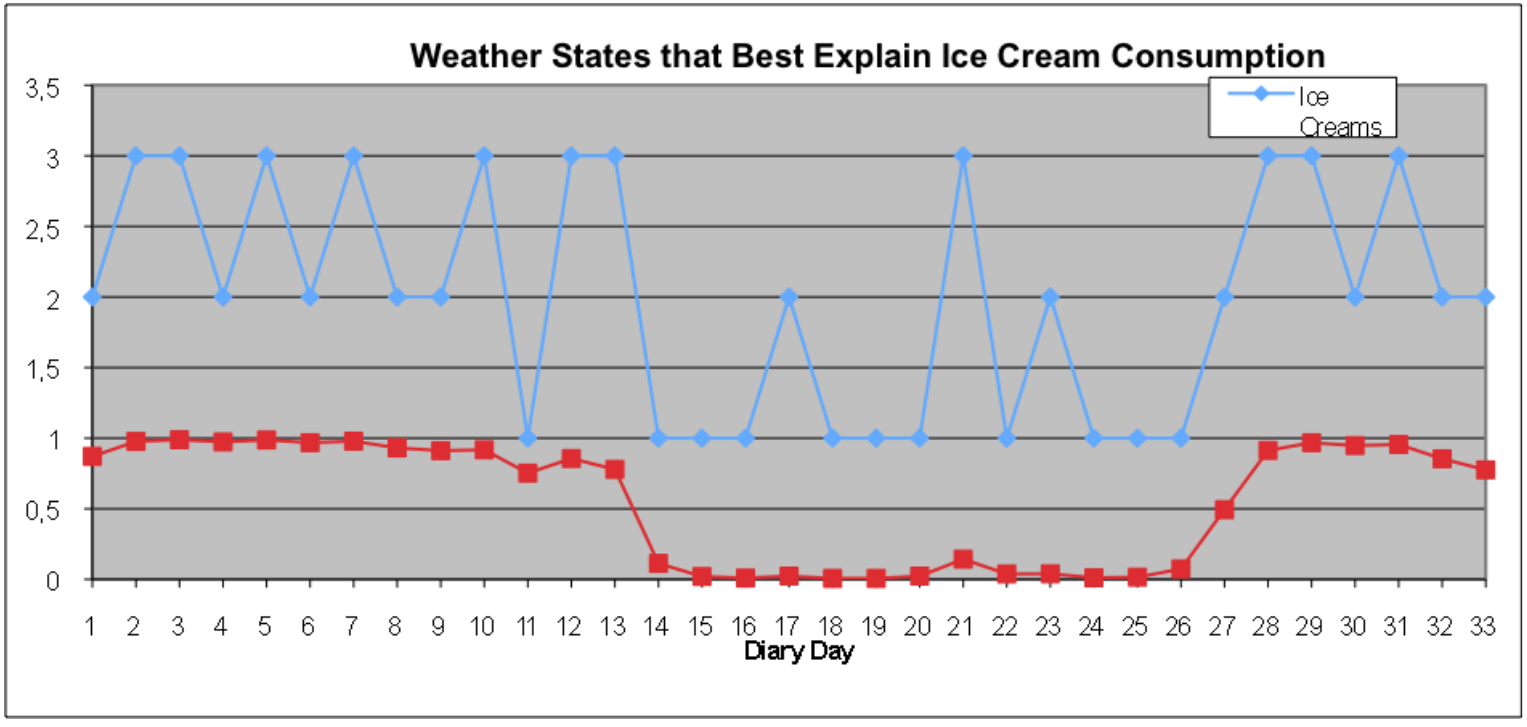
- Wahrscheinlichkeit von heiß nach kalt $p(C_{i+1}|H_i) = 0,1$ und von kalt nach kalt $p(C_{i+1}|C_i) = 0,8$
- Wahrscheinlichkeit von kalt nach heiß $p(H_{i+1}|C_i) = 0,1$ und von heiß nach heiß $p(H_{i+1}|H_i) = 0,8$

Boundary

- Wahrscheinlichkeit, das Tagebuch anzufangen/zu beenden an einem kalten/heißen Tag $p(C|start) = p(H|start) = 0,5$ und $p(stop|C) = p(stop|H) = 0,5$

Wetterrekonstruktion

Wahrscheinlichkeit $p(H_i)$ angesichts des Eiskonsums [1]:



Rechnen der Wahrscheinlichkeit von Pfaden

- Wahrscheinlichkeit für $start, H, H, C$ und $2, 3, 3$
  Produkt von Übergangswahrscheinlichkeit und Zustandswahrscheinlichkeit für jeden Übergang
  $(0,5 \cdot 0,2) \cdot (0,8 \cdot 0,7) \cdot (0,1 \cdot 0,1) = 0,1 \cdot 0,56 \cdot 0,01 = 0,00056$
- Welche der 8 Zustandsfolgen ist die wahrscheinlichste bei der Beobachtung $2, 3, 3$?
  $P(start, H, H, H) = 0,1 \cdot 0,56 \cdot 0,56 = 0,0314$ – diese!
  $P(start, H, C, H) = 0,1 \cdot 0,01 \cdot 0,07 = 0,00007$
  $P(start, C, H, H) = 0,1 \cdot 0,07 \cdot 0,56 = 0,0039$
  $P(start, C, C, H) = 0,1 \cdot 0,08 \cdot 0,007 = 0,000056$
- α: Summe der Wahrscheinlichkeiten aller Pfade von $start$ bis t, z.B. $y_t = H$

Forward Variable α

Pfad vom Anfang bis Position T, wo der Zustand irgendein festes y_i ist:

$$\alpha_t(i) = P(x_1, ..., x_T, Y_t = y_i|\lambda)$$

- Anfang: π mal Wahrscheinlichkeit für erste Beobachtung

$$\alpha_1(i) = P(x_1, y_i|\lambda) = \pi_i b_i(x_1)$$

- Rekursion für $1 < t \leq T$:

$$\alpha_t(j) = P(x_1, ..., x_t, y_j|\lambda) = \sum_{i=1}^{|Y|} \alpha_{t-1}(i) a_{ij} b_j(x_t)$$

- Ende:

$$P(x_1, ..., x_t, y_i|\lambda) = \sum_{i=1}^{|Y|} \alpha_n(i)$$

Rechnen des Beispiels

Eisners Excel-Tabelle hat die Wahrscheinlichkeiten in den Matritzen A (Übergang) und B (Zustand) sowie Randverteilung bereits gegeben.
Schauen Sie sich die Propagierung einmal an.
Spielen Sie mit der Excel-Implementierung!
$http://cs.jhu.edu/\sim jason/papers/\sharp eisner-2002-tnlp$

Danach betrachten wir CRFs und den Forward Backward Algorithmus für CRFs.

Was wissen Sie jetzt?

- Sie haben eine Formulierung für Sequenzen kennengelernt: HMM.
- Wir sind ein Beispiel durchgegangen, bei dem alle Wahrscheinlichkeiten schon gegeben waren.
- Sie wissen noch nicht, wie man diese Wahrscheinlichkeiten aus Daten heraus schätzt!

Conditional Random Fields

CRF=(X,Y,A,B)

- Die Struktur ist (wie bei HMMs) durch die multivariaten Zufallsvariablen X und Y gegeben, aber ungerichtet.
- Zustandsübergänge $a_{i,j,k}$ in A als *transition features* gewichtet: $\lambda_k f_k(y_{t-1}, y_t, x_t)$ wobei $\lambda \in [0, 1]$, $y_{t-1} = y_i, y_t = y_j, x_t = x_k$.
- Zustandsmerkmale $b_{i,k}$ in B als *state features* gewichtet: $\lambda_k f_k(y_t, x_t)$ wobei $y_t = y_i, x_t = x_k$.
- Gewichtung von Start- und Endzuständen für $y_0 = start$ bzw. $y_{T+1} = stop$ sind ebenfalls in A und B enthalten.
- Wir vereinigen die Merkmale und erhalten den Gewichtungsvektor Θ für die $k = 1, ..., K$ Merkmale.

Die Beobachtungen müssen NICHT voneinander unabhängig sein!

Beispiel

Lexikon $X = \{Udo, goes, comes, to, from, Unna\}$
Zustände (Kategorien) $Y = \{Pos, Per, \emptyset\}$
Beobachtung: $x_1 = Udo$, $x_2 = goes$, $x_3 = to$, $x_4 = Unna$
$|X|$ Matritzen der Form $|Y| \times |Y|$ Hier nur Feld 2 angegeben.

M_{Udo}	Pos	Per	$\emptyset$
Pos	1	2	3
Per	4	5	6
$\emptyset$	7	8	9

2:
$exp[\lambda_1 f_1(Pos, Per, Udo) +$
$\lambda_2 f_2(Per, Udo) +$
$\lambda_3 f_3(Per, capitalletter)]$

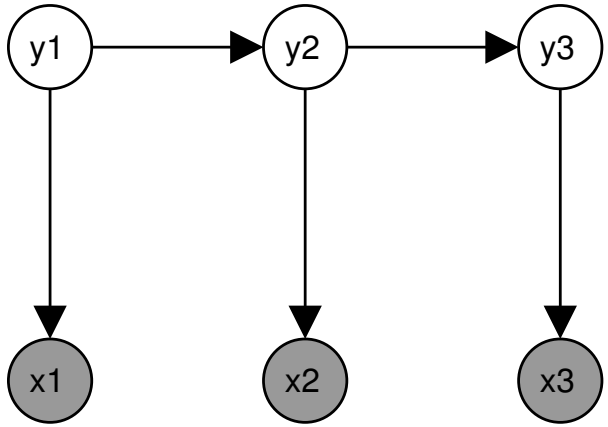
$$M_x = exp[\sum_k^K \lambda_k f_k(y_{t-1}, y_t, x_t) + \sum_k^K \lambda_k f_k(y_t, x_t)]$$

Potenzialfunktion rechnen: Für jedes x_t der beobachteten Sequenz die gesamte Matrix M_x ausrechnen!

CRF vs. HMM

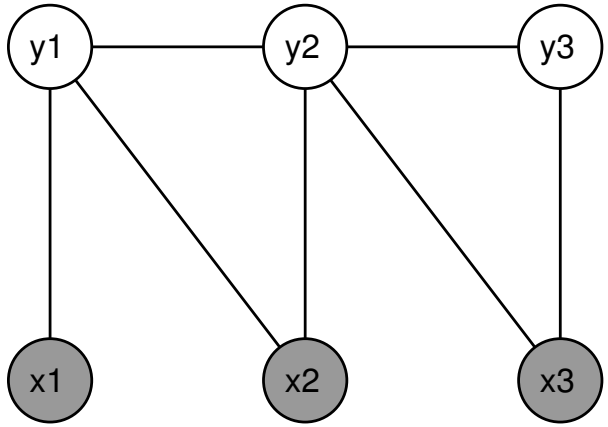
HMM:

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



CRF:

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{x}) = Z(\mathbf{x})^{-1} \prod_{t=1}^{3} \exp\left[a_{y_{t-1},y_t,x_t} + b_{y_t,x_t}\right]$$



Bemerkung: $y_0 = start$, $p(y|start) = \pi(y)$

CRF Modell

Normalisieren, wenn wir Wahrscheinlichkeit wollen, etwa:
$Z(x) = M_1(x) \cdot ... \cdot M_T(x)$

$$Z(x) = \sum_{y}^{|Y|} exp[\sum_{k}^{K} \lambda_k f_k(y_{t-1}, y_t, x_t)]$$

$$\frac{1}{Z(x)} \prod_{t=1}^{T} exp[\sum_{k}^{K} \lambda_k f_k(y_{t-1}, y_t, x_t) + \sum_{k}^{K} \lambda_k f_k(y_t, x_t)]$$

Warum Exponenzialfunktion?

Exponenzialfunktionen

Hammersley Clifford 1990

Eine lokale Verteilung mit Markov-Eigenschaft hat auch global die Markov Eigenschaft.
Eine Wahrscheinlichkeitsverteilung hat die Markov-Eigenschaft, gdw.

$$P(X) \propto exp(\sum Q(C, X))$$

wobei C die Menge aller Cliquen im Graph ist und Q irgendeine reellwertige Funktion, die die Likelihood für bestimmte Ausprägungen der Zufallsvariablen im Graph ausdrückt.

Die Exponenzialfunktion liefert immer einen Wert > 0.

Aufgaben für Algorithmen

- Training:
  Wie oft kam to in den Trainingsdaten mit $y = \emptyset$ vor?
  Forward Backward Algorithmus für *linear chain* CRF (i.e. y_t sind linear verbunden)
  Gewichte lernen (parameter estimate) $\Theta = (\lambda_1, ..., \lambda_K)$
  Maximum Likelihood
- Annotierung einer Beobachtungssequenz durch das gelernte Modell
  Viterbi Algorithmus für die wahrscheinlichste Annotation

Forward Backward Algorithmus

Sequenz $1, ..., t, ..., T$ und festes $y_t = y_i$

forward Wahrscheinlichkeit $\alpha_t(i)$ für Sequenz $1, ..., t$

backward Wahrscheinlichkeit $\beta_t(i)$ für Sequenz $t, ..., T$

- Anfang:
  $\alpha_1(i) = P(y_0 = start, y_1 = y_i, x_1)$
  $\beta_T(i) = P(y_{T+1} = stop, y_T = y_i, x_T)$
- Rekursion für 1 < t < T:
  $\alpha_t(x) = \alpha_{t-1} \cdot M_t(x) =$
  $\alpha_{t-1}(x) \cdot exp[\sum_k^K \lambda_k f_k(y_{t-1}, y_t, x_t) + \sum_k^K \lambda_k f_k(y_t, x_t)]$
  $\beta_t(x) = \beta_{t+1}(x) \cdot M_{t+1}(x) =$
  $\beta_{t+1}(x) \cdot exp[\sum_k^K \lambda_k f_k(y_t, y_{t+1}t, x_t) + \sum_k^K \lambda_k f_k(y_{t+1}, x_t)]$

Algorithmus

Für alle Beobachtungen t=1 bis T
    für alle Label i=1 bis $|Y|$
        berechne Forward $\alpha_t(y_i|x)$
berechne $Z(x)$
Für alle Beobachtungen t=T bis 1
    für alle Label i=1 bis $|Y|$
        berechne Backward $\beta_t(y_i|x)$

$$O(T|Y|^2)$$

Für jeden Schritt (Beobachtung) $|Y|$ Nachrichten (α, β) rechnen und jede Nachricht summiert über $|Y|$ Terme.

Annotation einer Sequenz

Wir wollen die Sequenz der Label als Vektor erhalten, $\vec{y}_t$. Forward α wurde eben als Summe von Übergangs- und Zustandswahrscheinlichkeiten gerechnet.

- Jetzt wird das maximale Label y vorwärts propagiert!
  $\alpha^*(y|x) =$
  $\alpha_{t-1} \cdot max_y exp[\sum_k^K \lambda_k f_k(y_{t-1}, y_t, x_t) + \sum_k^K \lambda_k f_k(y_t, x_t)]$
- dabei der wahrscheinlichste Vorgänger bestimmt:
  $\delta_t(y|x) =$
  $\alpha_{t-1} \cdot max_y exp[\sum_k^K \lambda_k f_k(y_{t-1}, y_t, x_t) + \sum_k^K \lambda_k f_k(y_t, x_t)]$
- Vom maximal wahrscheinlichen Label für den letzten Knoten $\delta_T(y|x)$ rechnet man rekursiv zurück und erhält die Sequenz.

Viterbi Algorithmus

Für alle Beobachtungen t=1 bis T
    für alle Label i=1 bis $|Y|$
        berechne MaxForward $\alpha_t^*(y_i|x)$
        berechne wahrscheinlichsten Vorgänger: $\delta_t(y|x)$
$\vec{y}_T = max_y \alpha_t^*(y_i|x)$
Für alle Beobachtungen t=T-1 bis 1
        $\vec{y}_t = \delta_t(y|x, \vec{y}_{t+1})$

Bestimmen der Gewichte Θ

Gegeben: Trainingsmenge $\mathcal{T}$

$$\max_{A,B} \mathcal{L}(A, B|\mathcal{T}) \approx \max_{A,B} \prod_{(\mathbf{x},\mathbf{y})\in\mathcal{T}} p(\mathbf{y}, \mathbf{x}), \text{ HMM}$$

$$\max_{A,B} \mathcal{L}(A, B|\mathcal{T}) \approx \max_{A,B} \prod_{(\mathbf{x},\mathbf{y})\in\mathcal{T}} p(\mathbf{y}|\mathbf{x}), \text{ CRF}$$

Zielfunktion ist Konvex
$\Rightarrow$ Maximierung mit Gradientenabstieg oder Newton-Verfahren

Maximierung der Likelihood

Sei $\mathcal{T}(X_t = x)$ die Menge aller Trainingsbeispiele die an der t-ten Stelle der Sequenz die Beobachtung x enthalten.
Sei $1_{Y_{t-1}=y',Y_t=y}$ eine Indikatorfunktion die den Wert 1 annimmt gdw. die Sequenz an Position t im Zustand y und an Position $t-1$ im Zustand y' ist.

$$a^{(t+1)}_{y',y,x} = a^{(t)}_{y',y,x} + \eta^{(t)} \sum_{(\mathbf{x},\mathbf{y})\in\mathcal{T}(X_t=x)} \left[1_{Y_{t-1}=y',Y_t=y} - p\left(y', y \mid x\right)\right]$$

$\eta^{(t)}$ ist eine Schrittweite.
Die Optimierung konvergiert für $\eta^{(t)} = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{t}}\right)$
Update für $b_{i,k}$ analog.

Was wissen Sie jetzt?

- CRFs können beliebige Graphen sein. Die Beobachtungen werden unabhängig von der Reihenfolge genutzt. Gesucht ist $p(y|x)$.
- Wir haben die Übergangswahrscheinlichkeiten in der Matrix A und die Zustandswahrscheinlichkeiten in der Matrix B gesehen. Übergänge und Zustände werden als Merkmale aufgefasst.
- Die Merkmale sind jeweils gewichtet. Der Vektor aller Gewichte ist Θ und wird nach Maximum Likelihood bestimmt.
- Sie kennen die Matritzen Mx für jede Beobachtung x mit allen Zustandsübergängen.
- Der Forward Backward-Algorithmus berechnet die Wahrscheinlichkeiten. Sie wissen auch, wie!
- Der Viterbi-Algorithmus maximiert, um für eine Beobachtungssequenz die Label-Sequenz zu finden.

Merkmalstransformation

Wir haben bei der strukturellen SVM schon die Kodierung von Bäumen in einen Vektor gesehen.

Nehmen wir jetzt einen ganz einfachen Graphen mit zwei Knoten, $\{1, 1\}$, und drei möglichen Zuständen $\{A, B, C\}$ an. Die Transformation $\phi(x)$ stellt die Belegung $x = (A, B)$ als Vektor dar.

$$\phi(x) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \begin{matrix} \text{Knoten 1:}A \\ \text{Knoten 1:}B \\ \text{Knoten 1:}C \\ \text{Knoten 2:}A \\ \text{Knoten 2:}B \\ \text{Knoten 2:}C \\ \text{Kante A,A} \\ \text{Kante A,B} \\ \vdots \end{matrix}$$

Das nutzen wir genau so für graphische Modelle.

Maximum Likelihood

Gegeben eine Verteilung $Pr_\theta(x)$ und eine Stichprobe dieser Verteilung $x_1, ..., x_N$, ist die logarithmierte Wahrscheinlichkeit:

$$L(\theta) = \sum_{i=1}^{N} \log Pr_\theta(x_i) \tag{1}$$

Genau das θ, das x_i am wahrscheinlichsten macht, ist gut – $L(\theta)$ maximieren!

- Wir können dafür eine Verteilung annehmen, da wir die wahre Verteilung nicht kennen.
- Meist ist die Normalverteilung eine gute Annahme:

$$Pr(X|Y, \theta) = \mathcal{N}(f_\theta(X), \sigma^2)$$

- Bei linearen Modellen ist die Maximum Likelihood gleich der Minimierung von RSS.

Likelihood zu einem Datensatz D maximieren

$$maxL(\theta, D) = \prod_{i=1}^{N} p(x_i) \tag{2}$$

Als Wahrscheinlichkeit setzen wir die Exponenzialfamilie ein:

$$L(\theta, D) = \prod_{i=1}^{N} \frac{1}{Z(\theta)} exp(< \theta, \phi(x) >)$$

Logarithmieren und durch Z normalisieren:

$$logL(\theta, D) = \sum_{i=1}^{N} (< \theta, \phi(x) > -logZ(\theta))$$

$$l(\theta, D) =< \theta, \sum_{i=1}^{N} \phi(x) > -NlogZ(\theta)$$

Das Loglikelihood Problem

Multiplizieren mit $\frac{1}{N}$ ergibt das Loglikelihood-Problem:

$$< \phi, \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \phi(x) > -logZ(\theta) \tag{3}$$

Wir müssen die empirische Erwartung berechnen

$$\tilde{E}\phi(x) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \phi(x)$$

und uns um Z kümmern.

$$Z(\theta) = \sum_{x \in X} exp(< \theta, \phi(x) >$$

Optimierung von θ

Parameter θ durch Gradientenabstieg optimieren. Für ein bestimmtes θ_j:

$$\frac{\partial l(\theta, D)}{\partial \theta_j} = \tilde{E}\phi_j(x) - \frac{\partial log Z}{\partial \theta_j} \tag{4}$$

Regel $\frac{\partial log f(x)}{\partial x} = \frac{1}{f(x)} \frac{\partial f(x)}{\partial x}$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial log Z}{\partial \theta_j} &= \frac{1}{Z(\theta)} \frac{\partial Z}{\partial \theta_j} \\
&= \frac{1}{Z(\theta)} \sum_{x \in X} \frac{1}{\partial \theta_j} exp(< \theta, \phi(x) >) \\
&= \frac{1}{Z(\theta)} \sum_{x \in X} exp(< \theta, \phi(x) >) \phi_j(x) \\
&= \sum_{x \in X} \frac{1}{Z(\theta)} exp(< \theta, \phi(x) >) \phi_j(x) \\
&= \sum_{x \in X} p(x) \phi_j(x) = \hat{E}(\phi_j(x))
\end{aligned}$$

Was wir berechnen müssen

- Die empirische Wahrscheinlichkeit $\tilde{p_j} = \tilde{E}\phi(x)$ kann einmal für alle Variablen $j = 1, ..., N$ ausgerechnet werden.
- Die Wahrscheinlichkeit unter der Modellannahme $\hat{p_j} = \hat{E}(\phi_j(x))$ wird beispielsweise durch den Forward Backward Algorithmus berechnet.
- Wir erhalten die Differenz der empirischen Wahrscheinlichkeit $\tilde{p_j}$ für die Parameterwahl θ_j und die gemäß θ berechnete Wahrscheinlichkeit $\hat{p_j}$ für θ_j.
- Je kleiner die Differenz $\tilde{p_j} - \hat{p_j}$ für alle j, desto genauer das Modell, desto kleiner der Fehler.

Was wissen Sie jetzt?

Sie haben eine Herleitung von dem Originalproblem, die Likelihood zu maximieren,

- über die LogLikelihood
- zu dem Optimierungsproblem, die Parameter θ anzupassen gesehen, das
- gelöst wird durch
  - die empirische Wahrscheinlichkeit, den Erwartungswert der Variablen und
  - die Wahrscheinlichkeit gemäß der Parameter θ, den Erwartungswert bezüglich einem θ_j.


Jason Eisner.
An Interactive Spreadsheet for Teaching the Forward Backward Algorithm.
In: Proceedings of the ACL Workshop on Effective Tools and Methodologies for Teaching NLP and CL
Dragomir Radev and Chris Brew (Eds.)
2002.
$http://cs.jhu.edu/\sim jason/papers/\#eisner-2002-tnlp$


John Lafferty, Andrew McCallum, Fernando Pereira.
Conditional Random Fields:Probabilistic models for segmenting and labeling sequence data.
In: Proceedings 18th Int. Conf. Machine Learning, 2001.


Lawrence R. Rabiner.
A Tutorial on Hidden Markov Models and Selected Applications in Speech Recognition.
In: Proceedings of the IEEE

Vol. 77 No. 2
1989.

Charles Sutton, Andrew McCallum.
An Introduction to Conditional Random Fields for Relational Learning.
In: Introduction to Statistical Relational Learning.
Lise Getoor, Ben Taskar (eds). MIT Press, 2007.

Martin Wainwright, Michael Jordan
Graphical Models, Exponential Families, and Variational Inference
Series Foundations and Trends in Macine Learning
Vol. 1, No. 1-2, now publishers, 2008