

词的表达

1. 给定语料库 $\mathbb{D} = \{\mathcal{D}_1, \mathcal{D}_2, \dots, \mathcal{D}_N\}$ ，其中包含 N 篇文档。

- 每篇文档 \mathcal{D}_i 包含单词序列 $(\text{word}_{I_1^i}, \text{word}_{I_2^i}, \dots, \text{word}_{I_{n_i}^i})$ ，其中 $I_j^i \in \{1, 2, \dots, V\}$ 表示单词的编号：

- i 表示第 i 篇文档
- j 表示文档中的第 j 个单词
- n_i 表示第 i 篇文档包含 n_i 个单词
- $v = I_j^i$ 表示第 i 篇文档的第 j 个单词为 word_v

- 所有的单词来自于词汇表 $\mathbb{V} = \{\text{word}_1, \text{word}_2, \dots, \text{word}_V\}$ ，其中 V 表示词汇表的大小。

词的表达任务要解决的问题是：如何表示每个单词 word_v 。

2. 最简单的表示方式是 **one-hot** 编码。对于词汇表中第 v 个单词 word_v ，将其表示为：

$$\text{word}_v \rightarrow (0, 0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)^T$$

即第 v 位取值为 **1**，剩余位取值为 **0**。

这种表示方式有两个主要缺点：

- 无法表达单词之间的关系。对于任意一对单词 $(\text{word}_i, \text{word}_j)$ ，其向量距离均为 $\sqrt{2}$ 。
- 向量维度过高。对于中文词汇表，其大小可能达到数十万，因此 **one-hot** 向量的维度也在数十万维。这对于存储、计算都消耗过大。

3. **BOW: Bag of Words**：词在文档中不考虑顺序，这称作词袋模型。

一、向量空间模型 VSM

1. 向量空间模型主要用于文档的表达。

2. 向量空间模型假设单词和单词之间是相互独立的，每个单词代表一个独立的语义单元。实际上，该假设很难满足：

- 文档中的单词和单词之间存在一定关联性，向量空间模型忽略了上下文的作用。
- 文档中存在很多的一词多义和多词同义的现象，每个单词并不代表一个独立的语义单元。

1.1 文档-单词 矩阵

1. 给定语料库 \mathbb{D} 和词汇表 \mathbb{V} ，定义 **文档-单词** 矩阵为：

	word_1	word_2	word_3	\dots	word_V
\mathcal{D}_1	0	0	1	\dots	0
\mathcal{D}_2	1	0	1	\dots	0
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	\vdots
\mathcal{D}_N	0	1	1	\dots	0

令矩阵为 \mathbf{D} ，则：

- $D(i, j) = 1$ 表示文档 \mathcal{D}_i 中含有单词 word_j
- $D(i, j) = 0$ 表示文档 \mathcal{D}_i 中不含单词 word_j

于是文档 \mathcal{D}_i 表示为： $\mathcal{D}_i \rightarrow (0, 1, 0, 1, \dots, 0)^T$ ，其中文档 \mathcal{D}_i 中包含的单词对应的位置取值为1，其它位置取值为0。

1.2 权重

1. 事实上，文档的上述表达并未考虑单词的顺序，也未考虑单词出现的次数。

一种改进策略是考虑单词出现的次数，从而赋予 文档-单词 矩阵以不同的权重：

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} w_{1,1} & w_{1,2} & w_{1,3} & \cdots & w_{1,V} \\ w_{2,1} & w_{2,2} & w_{2,3} & \cdots & w_{2,V} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{N,1} & w_{N,2} & w_{N,3} & \cdots & w_{N,V} \end{bmatrix}$$

其中 $w_{i,j}$ 表示单词 word_j 在文档 \mathcal{D}_i 中的权重。

- 如果单词 word_j 在文档 \mathcal{D}_i 中未出现，则权重 $w_{i,j} = 0$
- 如果单词 word_j 在文档 \mathcal{D}_i 中出现，则权重 $w_{i,j} \neq 0$

2. 权重 $w_{i,j}$ 有两种常用的选取方法：

- 单词权重等于单词出现的频率 **TF**：

$$w_{i,j} = TF(\mathcal{D}_i, \text{word}_j)$$

函数 $TF(\mathcal{D}_i, \text{word}_j)$ 返回单词 word_j 在文档 \mathcal{D}_i 中出现的频数。

- 单词权重等于单词的 **TF-IDF**：

$$w_{i,j} = TF(\mathcal{D}_i, \text{word}_j) \times IDF(\text{word}_j)$$

函数 $IDF(\text{word}_j)$ 是单词的逆文档频率： $IDF(\text{word}_j) = \log \frac{N}{DF(\text{word}_j)}$ ，其中：

- N 为语料库的文档数量
- $DF(\text{word}_j)$ 为出现单词 word_j 的文档的数量
- $\frac{DF(\text{word}_j)}{N}$ 为单词 word_j 出现在一篇文档中的概率

3. **TF-IDF** 不仅考虑了单词的局部特征，也考虑了单词的全局特征。

- 词频 $TF(\mathcal{D}_i, \text{word}_j)$ 描述了单词 word_j 在文档 \mathcal{D}_i 中的局部统计特征
- 逆文档频率 $IDF(\text{word}_j)$ 描述了单词 word_j 在语料库 \mathbb{D} 中的全局统计特征

1.3 相似度

1. 给定 文档-单词 矩阵，则很容易得到文档的向量表达：

$$\mathcal{D}_i \rightarrow (w_{i,1}, w_{i,2}, \dots, w_{i,V})^T$$

2. 给定文档 $\mathcal{D}_i, \mathcal{D}_j$ ，文档的相似度为：

$$\text{similar}(\mathcal{D}_i, \mathcal{D}_j) = \cos(\vec{\mathbf{w}}_i, \vec{\mathbf{w}}_j) = \frac{\vec{\mathbf{w}}_i \cdot \vec{\mathbf{w}}_j}{\|\vec{\mathbf{w}}_i\| \cdot \|\vec{\mathbf{w}}_j\|}$$

其中 $\vec{\mathbf{w}}_i = (w_{i,1}, w_{i,2}, \dots, w_{i,V})^T$ ， $\vec{\mathbf{w}}_j = (w_{j,1}, w_{j,2}, \dots, w_{j,V})^T$

二、LSA

1. 潜在语义分析 `latent semantic analysis:LSA` 的基本假设是：如果两个词多次出现在同一篇文档中，则这两个词具有语义上的相似性。

2.1 原理

1. 给定 `文档-单词` 矩阵 \mathbf{D} ：

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} w_{1,1} & w_{1,2} & w_{1,3} & \cdots & w_{1,V} \\ w_{2,1} & w_{2,2} & w_{2,3} & \cdots & w_{2,V} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{N,1} & w_{N,2} & w_{N,3} & \cdots & w_{N,V} \end{bmatrix}$$

其中 $w_{i,j}$ 表示单词 word_j 在文档 \mathcal{D}_i 中的权重，可以为：

- 单词 word_j 在文档 \mathcal{D}_i 中是否出现的 `0/1` 值。
 - 单词 word_j 在文档 \mathcal{D}_i 中出现的频次。
 - 单词 word_j 在文档 \mathcal{D}_i 中的 `TF-IDF` 值。
2. 定义 $\vec{v}_v = (w_{1,v}, w_{2,v}, \dots, w_{N,v})^T$ ，它为矩阵 \mathbf{D} 的第 v 列，代表单词 word_v 的 `单词-文档向量`，描述了该单词和所有文档的关系。
 - 向量内积 $\vec{v}_p \cdot \vec{v}_q$ 描述了单词 word_p 和单词 word_q 在文档集中的相似性。
 - 矩阵乘积 $\mathbf{D}^T \mathbf{D} \in \mathbb{R}^{V \times V}$ 包含了所有词向量内积的结果。
 3. 定义 $\vec{w}_i = (w_{i,1}, w_{i,2}, \dots, w_{i,V})^T$ ，它为矩阵 \mathbf{D} 的第 i 行，代表文档 \mathcal{D}_i 的 `文档-单词` 向量，描述了该文档和所有单词的关系。
 - 向量内积 $\vec{w}_i \cdot \vec{w}_j$ 描述了文档 \mathcal{D}_i 和文档 \mathcal{D}_j 在文档集中的相似性。
 - 矩阵乘积 $\mathbf{D} \mathbf{D}^T \in \mathbb{R}^{N \times N}$ 包含了所有文档向量内积的结果。
 4. 对矩阵 \mathbf{D} 进行 `SVD` 分解。假设矩阵 \mathbf{D} 可以分解为：

$$\mathbf{D} = \mathbf{P} \mathbf{\Sigma} \mathbf{Q}^T$$

其中：

- $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{N \times N}$, $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{V \times V}$ 为单位正交矩阵。
- $\mathbf{\Sigma} \in \mathbb{R}^{N \times V}$ 为广义对角矩阵。

$$\mathbf{\Sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma_r & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}$$

其中 $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_r > 0$ 称作奇异值。

5. `SVD` 分解的物理意义为：主题。

- 所有的文档一共有 r 个主题，每个主题的主题强度分别为： $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_r$ 。

- 第 i 篇文档 \mathcal{D}_i 由这 r 个主题组成，文档的主题分布（称作 **文档-主题向量**）为：

$$\vec{\mathbf{u}}^{(i)} = (P(i, 1), P(i, 2), \dots, P(i, r))^T$$

- 第 j 个主题由 V 个单词组成，主题的单词分布（称作 **主题-单词向量**）为：

$$\vec{\mathbf{r}}^{(j)} = (Q(1, j), Q(2, j), \dots, Q(V, j))^T$$

- 第 v 个单词也可以由 r 个主题描述，单词的主题分布（称作 **单词-主题向量**）为：

$$\vec{\mathbf{z}}^{(v)} = (Q(v, 1), Q(v, 2), \dots, Q(v, r))^T$$

- 根据 $\mathbf{D} = \mathbf{P}\Sigma\mathbf{Q}^T$ 有：

$$\mathbf{D} = \mathbf{P} \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}_{N \times r} \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma_r \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma_r & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}_{r \times V} \mathbf{Q}^T$$

则该分解的物理意义为：**文档-单词** 矩阵 = **文档-主题** 矩阵 × **主题强度** × **主题-单词** 矩阵。

- 将奇异值从大到小进行排列，选择 **top k** 的奇异值来近似 \mathbf{D} ，即：

$$\mathbf{D}_k = \mathbf{P}_k \Sigma_k \mathbf{Q}_k^T$$

其中：

- $\mathbf{P}_k \in \mathbb{R}^{N \times k}$ ：由 \mathbf{P} 的前 k 列组成。
- $\Sigma_k \in \mathbb{R}^{k \times k}$ ：由从大到小排列的最大的 **k** 个奇异值组成的对角矩阵。
- $\mathbf{Q}_k \in \mathbb{R}^{V \times k}$ ：由 \mathbf{Q} 的前 k 列组成。

- 选择 **top k** 的物理意义为：选择权重最大的前 **k** 个主题。

- 第 i 篇文档 \mathcal{D}_i 由这 k 个主题组成，文档的主题分布为：

$$\vec{\mathbf{u}}^{(i)} = (P(i, 1), P(i, 2), \dots, P(i, k))^T$$

- 第 j 个主题由 V 个单词组成，主题的单词分布为：

$$\vec{\mathbf{r}}^{(j)} = (Q(1, j), Q(2, j), \dots, Q(V, j))^T$$

- 第 v 个单词也可以由 k 个主题描述，单词的主题分布为：

$$\vec{\mathbf{z}}^{(v)} = (Q(v, 1), Q(v, 2), \dots, Q(v, k))^T$$

2.2 应用

- 得到了文档的主题分布、单词的主题分布之后，可以获取文档的相似度和单词的相似度。

- 文档 \mathcal{D}_i 和文档 \mathcal{D}_j 的相似度：

$$\text{sim}(\mathcal{D}_i, \mathcal{D}_j) = \frac{\vec{\mathbf{u}}^{(i)} \cdot \vec{\mathbf{u}}^{(j)}}{\|\vec{\mathbf{u}}^{(i)}\| \times \|\vec{\mathbf{u}}^{(j)}\|}$$

- 单词 word_i 和单词 word_j 的相似度：

$$\text{sim}(\text{word}_i, \text{word}_j) = \frac{\vec{\mathbf{z}}^{(i)} \cdot \vec{\mathbf{z}}^{(j)}}{\|\vec{\mathbf{z}}^{(i)}\| \times \|\vec{\mathbf{z}}^{(j)}\|}$$

- 虽然获得了文档的单词分布，但是并不能获得主题的相似度。

因为 \mathbf{Q} 是正交矩阵，因此有：

$$(Q(1, i), Q(2, i), \dots, Q(V, i))^T \cdot (Q(1, j), Q(2, j), \dots, Q(V, j))^T = 0, \quad i \neq j$$

则有：

$$\begin{aligned} \text{sim}(\text{theme}_i, \text{theme}_j) &= \frac{\vec{\mathbf{r}}^{(i)} \cdot \vec{\mathbf{r}}^{(j)}}{\|\vec{\mathbf{r}}^{(i)}\| \times \|\vec{\mathbf{r}}^{(j)}\|} \\ &= \frac{(Q(1, i), Q(2, i), \dots, Q(V, i))^T \cdot (Q(1, j), Q(2, j), \dots, Q(V, j))^T}{\|\vec{\mathbf{r}}^{(i)}\| \times \|\vec{\mathbf{r}}^{(j)}\|} = 0, \quad i \neq j \end{aligned}$$

因此，任意两个主题之间的相似度为 0。

- 因为 文档-主题向量 由 \mathbf{P} 决定，而

$$\mathbf{D} = \mathbf{P}\mathbf{\Sigma}\mathbf{Q}^T \rightarrow \mathbf{P} = \mathbf{D}\mathbf{Q}\mathbf{\Sigma}^{-1} \rightarrow \mathbf{P}^T = \mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{Q}^T\mathbf{D}^T$$

而 文档-主题向量 为 \mathbf{P} 的行向量，也就是 \mathbf{P}^T 的列向量。文档-单词向量 为 \mathbf{D} 的行向量，也就是 \mathbf{D}^T 的列向量。

因此，对于一篇新的文档 \mathcal{D}_s ，假设其 文档-单词向量 为 $\vec{\mathbf{w}}_s$ ，则其 文档-主题向量 为：

$$\vec{\mathbf{u}}^{(s)} = \mathbf{\Sigma}_k^{-1} \mathbf{Q}_k^T \vec{\mathbf{w}}_s$$

- 因为 单词-主题向量 由 \mathbf{Q} 决定，而：

$$\mathbf{D} = \mathbf{P}\mathbf{\Sigma}\mathbf{Q}^T \rightarrow \mathbf{Q}^T = \mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{P}^T\mathbf{D}$$

而 单词-主题向量 为 \mathbf{Q} 的行向量，也就是 \mathbf{Q}^T 的列向量。单词-文档向量 为 \mathbf{D} 的列向量。

因此，对于一个新的单词，假设其 单词-文档向量 为 $\vec{\mathbf{v}}_s$ ，则 单词-主题向量 为：

$$\vec{\mathbf{z}}^{(s)} = \mathbf{\Sigma}_k^{-1} \mathbf{P}_k^T \vec{\mathbf{v}}_s$$

- LSA 可以应用在以下几个方面：

- 通过对文档的 文档-主题向量 进行比较，从而进行基于主题的文档聚类或者分类。
- 通过对单词的 单词-主题向量 进行比较，从而用于同义词、多义词进行检测。
- 通过将 query 映射到主题空间，进而进行信息检索。

2.3 性质

- LSA 的本质是将矩阵 \mathbf{D} 通过 SVD 进行降维。降维主要是由于以下原因：

- 原始的 文档-单词 矩阵 \mathbf{D} 太大，计算机无法处理。通过降维，得到原始矩阵的一个近似。

- 原始的 文档-单词 矩阵 \mathbf{D} 含有噪音。通过降维，去掉原始矩阵的噪音。
- 原始的 文档-单词 矩阵 \mathbf{D} 过于稀疏。通过降维，得到一个稠密的矩阵。
- 2. LSA 的降维可以解决一部分同义词的问题，也可以解决一部分二义性的问题。
 - 经过降维，意义相同的同义词的维度会因降维被合并。
 - 经过降维，拥有多个意义的词，其不同的含义会叠加到对应的同义词所在的维度上。
- 3. LSA 的缺点包括：
 - 产生的主题维度可能存在某些主题可解释性差。即：它们并不代表一个自然语言上的主题。
 - 由于 Bag of words: BOW 模型的局限性，它无法捕捉单词的前后顺序关系。
一个解决方案是：采用二元词组或者多元词组。
 - LSA 假设单词和文档形成联合高斯分布。实际观察发现，它们是一个联合泊松分布。
这种情况下，用 pLSA 模型效果会更好。

三、Word2Vec

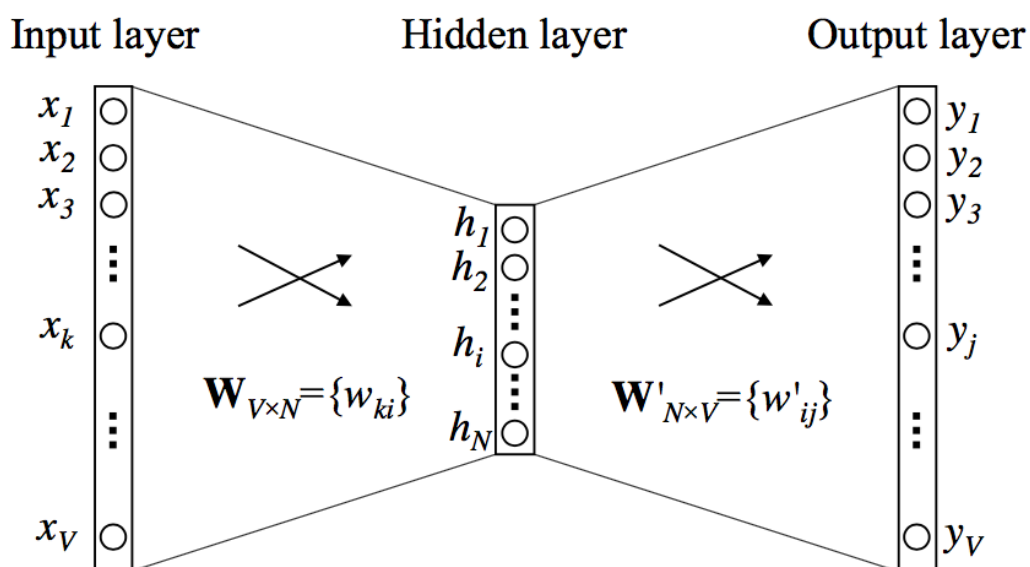
3.1 CBOW 模型

1. CBOW 模型 (continuous bag-of-word)：根据上下文来预测下一个单词。

3.1.1 一个单词上下文

a) 网络结构

1. 在一个单词上下文的 CBOW 模型中：
 - 输入是前一个单词，输出是后一个单词。
 - 输入为输出的上下文，由于只有一个单词作为输入，因此称作一个单词的上下文。
2. 一个单词上下文的 CBOW 模型如下：



其中：

- N 为隐层的大小，即隐向量 $\vec{\mathbf{h}} \in \mathbb{R}^N$ 。

- 网络输入 $\vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_V)^T \in \mathbb{R}^V$ ，它是输入单词（即上下文单词）的 `one-hot` 编码，其中只有一位为 1，其他位都为 0。
- 网络输出 $\vec{y} = (y_1, y_2, \dots, y_V)^T \in \mathbb{R}^V$ ，它是输出单词为词汇表各单词的概率。
- 相邻层之间为全连接：
 - 输入层和隐层之间的权重矩阵为 \mathbf{W} ，其尺寸为 $V \times N$ 。
 - 隐层和输出层之间的权重矩阵为 \mathbf{W}' ，其尺寸为 $N \times V$ 。

3. 假设没有激活函数，没有偏置项。给定输入 $\vec{x} \in \mathbb{R}^V$ ，则其对应的隐向量 $\vec{h} \in \mathbb{R}^N$ 为： $\vec{h} = \mathbf{W}^T \vec{x}$ 。

令：

$$\mathbf{W} = \begin{bmatrix} \vec{w}_1^T \\ \vec{w}_2^T \\ \vdots \\ \vec{w}_V^T \end{bmatrix}$$

由于 \vec{x} 是个 `one-hot` 编码，假设它为词表 \mathbb{V} 中第 k 个单词 word_k ，即：

$$x_1 = 0, x_2 = 0, \dots, x_{k-1} = 0, x_k = 1, x_{k+1} = 0, \dots, x_V = 0$$

则有： $\vec{h} = \vec{w}_k$ 。

即： \mathbf{W} 的第 k 行 \vec{w}_k 就是词表 \mathbb{V} 中第 k 个单词 word_k 的表达，称作单词 word_k 的输入向量。

4. 给定隐向量 \vec{h} ，其对应的输出向量 $\vec{u} \in \mathbb{R}^V$ 为： $\vec{u} = \mathbf{W}'^T \vec{h}$

令：

$$\mathbf{W}' = [\vec{w}'_1, \vec{w}'_2, \dots, \vec{w}'_V]$$

则有： $u_j = \vec{w}'_j \cdot \vec{h}$ ，表示词表 \mathbb{V} 中，第 j 个单词 word_j 的得分。

\vec{w}'_j 为矩阵 \mathbf{W}' 的第 j 列，称作单词 word_j 的输出向量。

5. \vec{u} 之后接入一层 `softmax` 层，则有：

$$y_j = p(\text{word}_j | \vec{x}) = \frac{\exp(u_j)}{\sum_{j'=1}^V \exp(u_{j'})}, \quad j = 1, 2, \dots, V$$

即 y_j 表示词汇表 \mathbb{V} 中第 j 个单词 word_j 为真实输出单词的概率。

6. 假设给定一个单词 word_I （它称作上下文），观测到它的下一个单词为 word_O 。

假设 word_O 对应的网络输出编号为 j^* ，则网络的优化目标是：

$$\begin{aligned} \max_{\mathbf{W}, \mathbf{W}'} p(\text{word}_O | \text{word}_I) &= \max_{\mathbf{W}, \mathbf{W}'} y_{j^*} = \max_{\mathbf{W}, \mathbf{W}'} \log \frac{\exp(\vec{w}'_{j^*} \cdot \vec{w}_I)}{\sum_{i=1}^V \exp(\vec{w}'_i \cdot \vec{w}_I)} \\ &= \max_{\mathbf{W}, \mathbf{W}'} \left[\vec{w}'_{j^*} \cdot \vec{w}_I - \log \sum_{i=1}^V \exp(\vec{w}'_i \cdot \vec{w}_I) \right] \end{aligned}$$

其中 \vec{w}_I 为输入单词 word_I 的输入向量。

7. 考虑到 $u_j = \vec{w}'_j \cdot \vec{w}_I$ ，定义：

$$\begin{aligned}
 E &= -\log p(\text{word}_O \mid \text{word}_I) = -\left[\vec{\mathbf{w}}'_{j^*} \cdot \vec{\mathbf{w}}_I - \log \sum_{i=1}^V \exp(\vec{\mathbf{w}}'_i \cdot \vec{\mathbf{w}}_I) \right] \\
 &= -\left[u_{j^*} - \log \sum_{i=1}^V \exp(u_i) \right]
 \end{aligned}$$

则优化目标为： $\min E$ 。

b) 参数更新

1. 定义 $t_j = \mathbb{I}(j = j^*)$ ，即第 j 个输出单元对应于真实的输出单词 word_O 时，它为1；否则为0。

定义：

$$e_j = \frac{\partial E}{\partial u_j} = y_j - t_j$$

它刻画了每个输出单元的预测误差：

- 当 $j = j^*$ 时： $e_j = y_j - 1$ ，它刻画了输出概率 (y_j) 与真实概率 1 之间的差距。
- 当 $j \neq j^*$ 时： $e_j = y_j$ ，它刻画了输出概率 (y_j) 与真实概率 0 之间的差距。

2. 根据：

$$u_j = \vec{\mathbf{w}}'_j \cdot \vec{\mathbf{h}} \quad \rightarrow \quad \frac{\partial u_j}{\partial \vec{\mathbf{w}}'_j} = \vec{\mathbf{h}}$$

则有：

$$\frac{\partial E}{\partial \vec{\mathbf{w}}'_j} = \frac{\partial E}{\partial u_j} \times \frac{\partial u_j}{\partial \vec{\mathbf{w}}'_j} = e_j \vec{\mathbf{h}}$$

则 $\vec{\mathbf{w}}'_j$ 更新规则为：

$$\vec{\mathbf{w}}'_j{}^{(new)} = \vec{\mathbf{w}}'_j{}^{(old)} - \eta e_j \vec{\mathbf{h}}$$

其物理意义为：

- 当估计过量 ($e_j > 0 \rightarrow y_j > t_j$) 时， $\vec{\mathbf{w}}'_j$ 会减去一定比例的 $\vec{\mathbf{h}}$ 。
这发生在第 j 个输出单元不对应于真实的输出单词时。
- 当估计不足 ($e_j < 0 \rightarrow y_j < t_j$) 时， $\vec{\mathbf{w}}'_j$ 会加上一定比例的 $\vec{\mathbf{h}}$ 。
这发生在第 j 个输出单元刚好对应于真实的输出单词时。
- 当 $y_j \simeq t_j$ 时，更新的幅度将非常微小。

3. 定义：

$$\overrightarrow{\mathbf{EH}} = \frac{\partial E}{\partial \vec{\mathbf{h}}} = \left(\frac{\partial \vec{\mathbf{u}}}{\partial \vec{\mathbf{h}}} \right)^T \frac{\partial E}{\partial \vec{\mathbf{u}}}$$

根据：

$$\vec{\mathbf{u}} = \mathbf{W}'^T \vec{\mathbf{h}} \quad \rightarrow \quad \left(\frac{\partial \vec{\mathbf{u}}}{\partial \vec{\mathbf{h}}} \right)^T = \mathbf{W}'$$

则有：

$$\overrightarrow{\mathbf{EH}} = \mathbf{W}' \vec{\mathbf{e}} = \sum_{j=1}^V e_j \vec{\mathbf{w}}'_j$$

$\overrightarrow{\mathbf{EH}}$ 的物理意义为：词汇表 \mathbb{V} 中所有单词的输出向量的加权和，其权重为 e_j 。

4. 考虑到 $\vec{\mathbf{h}} = \mathbf{W}^T \vec{\mathbf{x}}$ ，则有：

$$\frac{\partial E}{\partial w_{k,i}} = \frac{\partial E}{\partial h_i} \times \frac{\partial h_i}{\partial w_{k,i}} = EH_i \times x_k$$

写成矩阵的形式为： $\frac{\partial E}{\partial \mathbf{W}} = \vec{\mathbf{x}} \otimes \overrightarrow{\mathbf{EH}}$ ，其中 \otimes 为克罗内克积。

由于 $\vec{\mathbf{x}}$ 是 one-hot 编码，所以它只有一个分量非零，因此 $\frac{\partial E}{\partial \mathbf{W}}$ 只有一行非零，且该非零行就等于 $\overrightarrow{\mathbf{EH}}$ 。因此得到更新方程：

$$\vec{\mathbf{w}}_I^{(new)} = \vec{\mathbf{w}}_I^{(old)} - \eta \overrightarrow{\mathbf{EH}}$$

其中 $\vec{\mathbf{w}}_I$ 为 $\vec{\mathbf{x}}$ 非零分量对应的 \mathbf{W} 中的行，而 \mathbf{W} 的其它行在本次更新中都保持不变。

5. 考虑更新行的第 k 列，则：

$$w_{I,k}^{(new)} = w_{I,k}^{(old)} - \eta \sum_{j=1}^V e_j w'_{j,k}$$

- 当 $y_j \simeq t_j$ 时，更新的幅度将非常微小。
- 当 y_j 与 t_j 差距越大，则更新的幅度越大。

6. 当给定许多训练样本（每个样本由两个单词组成），上述更新不断进行，更新的效果在不断积累。

- 根据单词的共现结果，输出向量与输入向量相互作用并达到平衡。

- 输出向量 $\vec{\mathbf{w}}'$ 的更新依赖于输入向量 $\vec{\mathbf{w}}_I$ ： $\vec{\mathbf{w}}_j'^{(new)} = \vec{\mathbf{w}}_j'^{(old)} - \eta e_j \vec{\mathbf{h}}$ 。

这里隐向量 $\vec{\mathbf{h}}$ 等于输入向量 $\vec{\mathbf{w}}_I$ 。

- 输入向量 $\vec{\mathbf{w}}_I$ 的更新依赖于输出向量 $\vec{\mathbf{w}}'$ ： $\vec{\mathbf{w}}_I^{(new)} = \vec{\mathbf{w}}_I^{(old)} - \eta \overrightarrow{\mathbf{EH}}$ 。

这里 $\overrightarrow{\mathbf{EH}} = \sum_{j=1}^V e_j \vec{\mathbf{w}}'_j$ 为词汇表 \mathbb{V} 中所有单词的输出向量的加权和，其权重为 e_j 。

- 平衡的速度与效果取决于单词的共现分布，以及学习率。

3.1.2 多个单词上下文

1. 考虑输入为多个单词（这些单词作为输出的上下文），输入为 C 个单词： $\vec{\mathbf{x}}_1, \vec{\mathbf{x}}_2, \dots, \vec{\mathbf{x}}_C$ 。

- 对于每个输入单词，其权重矩阵都相同，为 \mathbf{W} ，这称作权重共享。

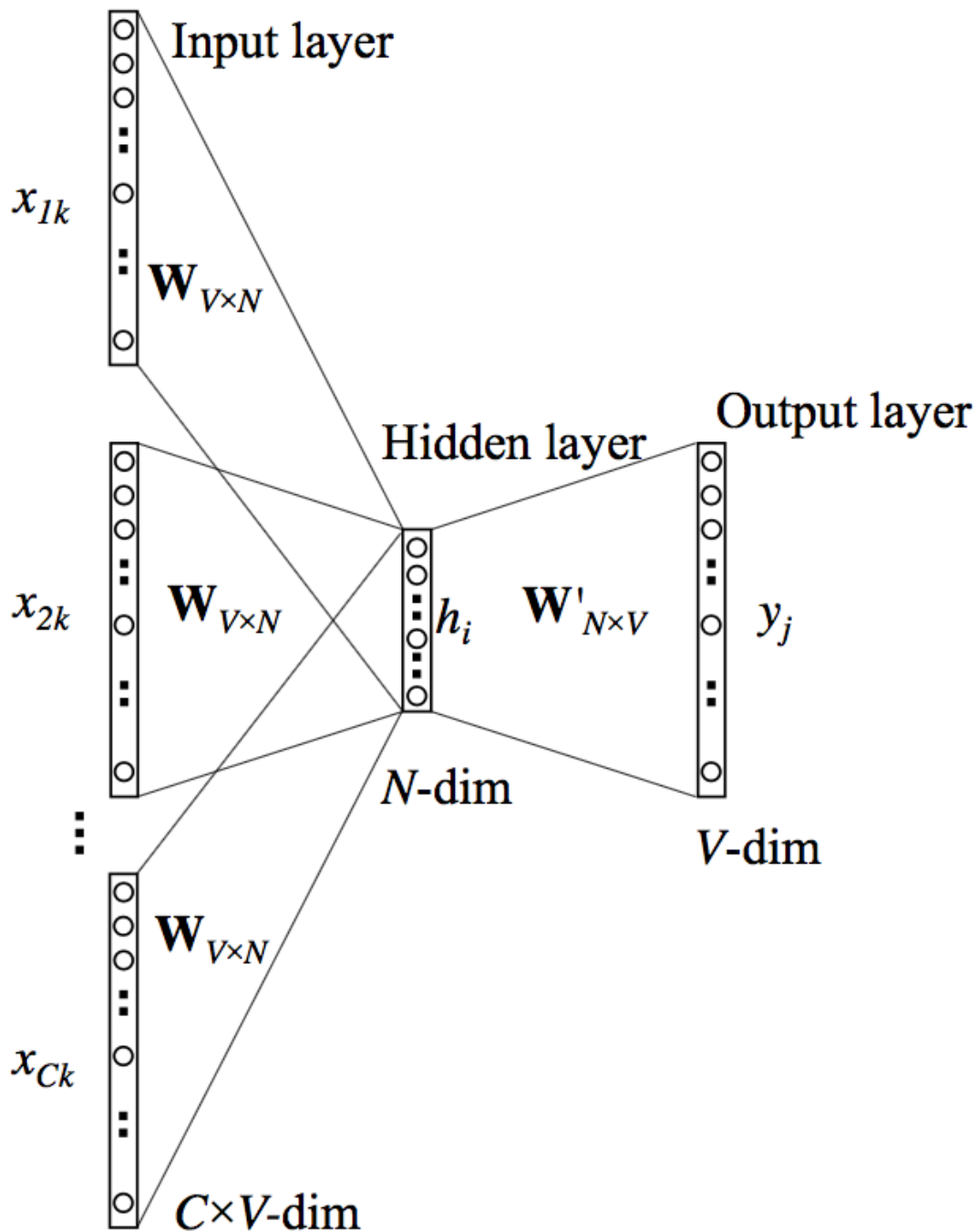
这里的权重共享隐含着：每个单词的表达是固定的、唯一的，与它的上下文无关。

- 隐向量为所有输入单词映射结果的均值：

$$\vec{\mathbf{h}} = \frac{1}{C} \mathbf{W}^T (\vec{\mathbf{x}}_1 + \vec{\mathbf{x}}_2 + \dots + \vec{\mathbf{x}}_C) = \frac{1}{C} (\vec{\mathbf{w}}_{I_1} + \vec{\mathbf{w}}_{I_2} + \dots + \vec{\mathbf{w}}_{I_C})$$

其中：

- I_i 表示第 i 个输入单词在词汇表 \mathbb{V} 中的编号。
- $\vec{\mathbf{w}}_j$ 为矩阵 \mathbf{W} 的第 j 行，它是对应输入单词的输入向量。



2. 假设给定一个单词序列 $\text{word}_{I_1}, \text{word}_{I_2}, \dots, \text{word}_{I_C}$ （它称作上下文），观测到它的下一个单词为 word_O 。 word_O 对应的网络输出编号为 j^* 。

定义损失函数为：

$$\begin{aligned}
 E &= -\log p(\text{word}_O \mid \text{word}_{I_1}, \text{word}_{I_2}, \dots, \text{word}_{I_C}) \\
 &= -u_{j^*} + \log \sum_{i=1}^V \exp(u_i) \\
 &= -\vec{\mathbf{w}}'_{j^*} \cdot \vec{\mathbf{h}} + \log \sum_{i=1}^V \exp(\vec{\mathbf{w}}'_i \cdot \vec{\mathbf{h}})
 \end{aligned}$$

它的形式与 一个单词上下文 中推导的完全相同，除了这里的 \vec{h} 不同。

3. 与 一个单词上下文 中推导的结果相同，这里给出参数更新规则：

◦ 更新 \mathbf{W}' ：

$$\vec{w}_j^{(new)} = \vec{w}_j^{(old)} - \eta e_j \vec{h}, \quad j = 1, 2, \dots, V$$

◦ 更新 \mathbf{W} ：

$$\vec{w}_{I_i}^{(new)} = \vec{w}_{I_i}^{(old)} - \frac{1}{C} \eta \overrightarrow{\mathbf{E}\mathbf{H}}, \quad i = 1, 2, \dots, C$$

其中：

- $\overrightarrow{\mathbf{E}\mathbf{H}} = \mathbf{W}' \vec{e} = \sum_{j=1}^V e_j \vec{w}_j'$ ，它是词汇表 \mathbb{V} 中所有单词的输出向量的加权和，其权重为 e_j 。
- I_i 为第 i 个输入单词在词表 \mathbb{V} 中的编号。

4. 在更新 \mathbf{W} 时，如果有相同的输入单词（如： $\vec{x}_1 = \vec{x}_2 \rightarrow \text{word}_{100}$ ），则在参数更新时认为它们是不同的。

最终的效果就是在 \vec{w}_{I_i} 中多次减去同一个增量 $\frac{1}{C} \eta \overrightarrow{\mathbf{E}\mathbf{H}}$ 。

你也可以直接减去 $\frac{n_i}{C} \eta \overrightarrow{\mathbf{E}\mathbf{H}}$ ，其中 n_i 为词汇表中单词 word_{I_i} 在输入中出现的次数。

3.2 Skip-Gram

1. CBOW 模型是根据前几个单词（即：上下文）来预测下一个单词，而 Skip-Gram 模型是根据一个单词来预测其前几个单词（即：上下文）。

2. 在 CBOW 模型中：

- 同一个单词的表达（即输入向量 \vec{w}_I ）是相同的，因为参数 \mathbf{W} 是共享的。
- 同一个单词的输出向量 \vec{w}_O' 是不同的，因为输出向量随着上下文不同而不同。

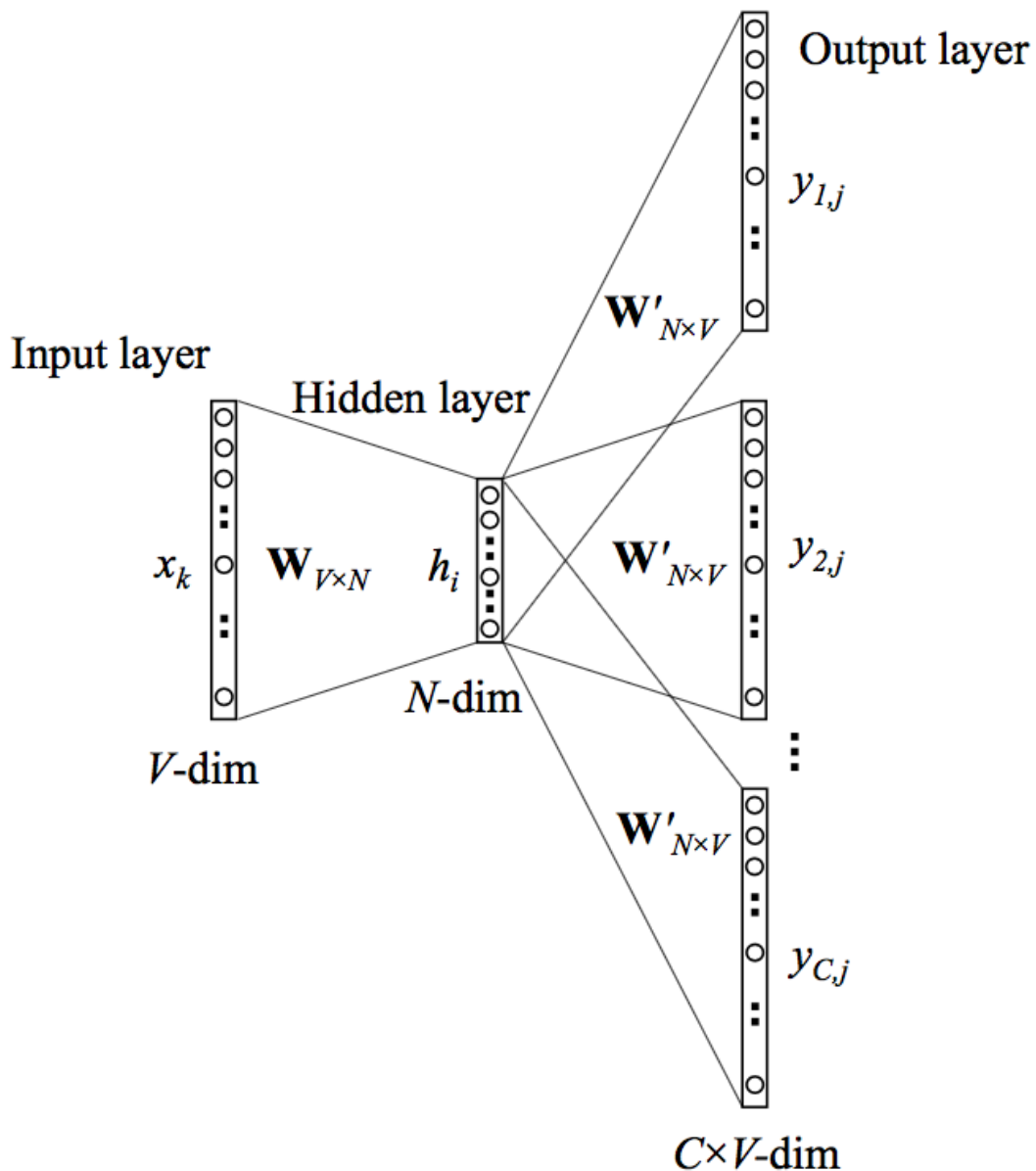
3. 在 Skip-Gram 模型中：

- 同一个单词的表达（即输出向量 \vec{w}_O' ）是相同的，因为参数 \mathbf{W}' 是共享的。
- 同一个单词的输入向量 \vec{w}_I 是不同的，因为输入向量随着上下文不同而不同。

3.2.1 网络结构

1. Skip-Gram 网络模型如下。其中：

- 网络输入 $\vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_V)^T \in \mathbb{R}^V$ ，它是输入单词的 one-hot 编码，其中只有一位为 1，其他位都为 0。
 - 网络输出 $\vec{y}_1, \vec{y}_2, \dots, \vec{y}_C$ ，其中 $\vec{y}_c = (y_1^c, y_2^c, \dots, y_V^c)^T \in \mathbb{R}^V$ 是第 c 个输出单词为词汇表各单词的概率。
 - 对于网络的每个输出 \vec{y}_c ，其权重矩阵都相同，为 \mathbf{W}' 。这称作权重共享。
- 这里的权重共享隐含着：每个单词的输出向量是固定的、唯一的，与其他单词的输出无关。



2. Skip-Gram 网络模型中，设网络第 c 个输出的第 j 个分量为 $u_j^c = \vec{w}'_j \cdot \vec{h}$ ，则有：

$$y_j^c = p(\text{word}_j^c | \vec{x}) = \frac{\exp(u_j^c)}{\sum_{k=1}^V \exp(u_k^c)}; \quad c = 1, 2, \dots, C; \quad j = 1, 2, \dots, V$$

y_j^c 表示第 c 个输出中，词汇表 \mathbb{V} 中第 j 个单词 word_j 为真实输出单词的概率。

3. 因为 \mathbf{W}' 在多个单元之间共享，所以对于网络每个输出，其得分分布 $\vec{u}_c = (u_1^c, u_2^c, \dots, u_V^c)^T$ 是相同的。但是这并不意味着网络的每个输出都是同一个单词。
- 并不是网络每个输出中，得分最高的单词为预测单词。因为每个输出中，概率分布都相同，即：
 $\vec{y}_1 = \vec{y}_2 = \dots = \vec{y}_C$ 。
 - Skip-Gram 网络的目标是：网络的多个输出之间的联合概率最大。

4. 假设输入为单词 word_I ，输出单词序列为 $\text{word}_{O_1}, \text{word}_{O_2}, \dots, \text{word}_{O_C}$ 。定义损失函数为：

$$E = -\log p(\text{word}_{O_1}, \text{word}_{O_2}, \dots, \text{word}_{O_C} | \text{word}_I) = -\log \prod_{c=1}^C \frac{\exp(u_{j_c^*}^c)}{\sum_{k=1}^V \exp(u_k^c)}$$

其中 $j_1^*, j_2^*, \dots, j_C^*$ 为输出单词序列对应于词典 \mathbb{V} 中的下标序列。

由于网络每个输出的得分分布都相同，令 $u_k = u_k^c = \vec{w}'_k \cdot \vec{h}$ ，则上式化简为：

$$E = - \sum_{c=1}^C u_{j_c}^c + C \log \sum_{k=1}^V \exp(u_k)$$

3.1.2 参数更新

1. 定义 $t_j^c = \mathbb{I}(j_c = j_c^*)$ ，即网络第 c 个输出的第 j 个分量对应于第 c 个真实的输出单词 $\text{word}_{j_c^*}$ 时，它为 1；否则为 0。

定义：

$$e_j^c = \frac{\partial E}{\partial u_j^c} = y_j^c - t_j^c$$

它刻画了网络第 c 个输出的第 j 个分量的误差：

- 当 $j_c = j_c^*$ 时： $e_j^c = y_j^c - 1$ ，它刻画了输出概率 y_j^c 与真实概率 1 之间的差距
- 当 $j_c \neq j_c^*$ 时： $e_j^c = y_j^c$ ，它刻画了输出概率 y_j^c 与真实概率 0 之间的差距

2. 根据：

$$u_j = \vec{w}'_j \cdot \vec{h} \quad \rightarrow \quad \frac{\partial u_j}{\partial \vec{w}'_j} = \vec{h}$$

则有：

$$\frac{\partial E}{\partial \vec{w}'_j} = \sum_{c=1}^C \frac{\partial E}{\partial u_j^c} \times \frac{\partial u_j^c}{\partial \vec{w}'_j} = \sum_{c=1}^C e_j^c \vec{h}$$

定义 $EI_j = \sum_{c=1}^C e_j^c$ ，它为网络每个输出的第 j 个分量的误差之和。于是有：

$$\frac{\partial E}{\partial \vec{w}'_j} = EI_j \times \vec{h}$$

则有更新方程：

$$\vec{w}_j^{(new)} = \vec{w}_j^{(old)} - \eta \times EI_j \times \vec{h}, \quad j = 1, 2, \dots, V$$

3. 定义：

$$\overrightarrow{\mathbf{EH}} = \frac{\partial E}{\partial \vec{\mathbf{h}}} = \sum_{c=1}^C \left(\frac{\partial \vec{\mathbf{u}}^c}{\partial \vec{\mathbf{h}}} \right)^T \frac{\partial E}{\partial \vec{\mathbf{u}}^c}$$

根据：

$$\vec{\mathbf{u}}^c = \mathbf{W}^{iT} \vec{\mathbf{h}} \rightarrow \left(\frac{\partial \vec{\mathbf{u}}^c}{\partial \vec{\mathbf{h}}} \right)^T = \mathbf{W}'$$

则有：

$$\overrightarrow{\mathbf{EH}} = \sum_{c=1}^C \mathbf{W}' \vec{\mathbf{e}}^c = \sum_{j=1}^V EI_j \vec{\mathbf{w}}'_j$$

$\overrightarrow{\mathbf{EH}}$ 的物理意义为：词汇表 \mathcal{V} 中所有单词的输出向量的加权和，其权重为 EI_j 。

4. 考虑到 $\vec{\mathbf{h}} = \mathbf{W}^T \vec{\mathbf{x}}$ ，则有：

$$\frac{\partial E}{\partial w_{k,i}} = \frac{\partial E}{\partial h_i} \times \frac{\partial h_i}{\partial w_{k,i}} = EH_i \times x_k$$

写成矩阵的形式为： $\frac{\partial E}{\partial \mathbf{W}} = \vec{\mathbf{x}} \otimes \overrightarrow{\mathbf{EH}}$ ，其中 \otimes 为克罗内克积。

由于 $\vec{\mathbf{x}}$ 是 one-hot 编码，所以它只有一个分量非零，因此 $\frac{\partial E}{\partial \mathbf{W}}$ 只有一行非零，且该非零行就等于 $\overrightarrow{\mathbf{EH}}$ 。因此得到更新方程：

$$\vec{\mathbf{w}}_I^{(new)} = \vec{\mathbf{w}}_I^{(old)} - \eta \overrightarrow{\mathbf{EH}}$$

其中 $\vec{\mathbf{w}}_I$ 为 $\vec{\mathbf{x}}$ 非零分量对应的 \mathbf{W} 中的行，而 \mathbf{W} 的其它行在本次更新中都保持不变。

3.3 优化

1. 原始的 CBOW 模型和 Skip-Gram 模型的计算量太大，非常难以计算。

- 模型在计算网络输出的时候，需要计算误差。
 - 需要计算 V 个误差（词汇表的大小），或者 $C \times V$ 个误差（Skip-Gram 模型）。
 - 误差的计算需要用到 softmax 函数。
- 每次迭代都需要计算网络输出。

如果词汇表有 100 万 单词，模型迭代 10000 次，则计算量超过 100 亿次。

2. 虽然输入向量的维度也很高，但是由于输入向量只有一位为 1，其它位均为 0，因此输入的总计算复杂度较小。

3. word2vec 优化的主要思想是：限制输出单元的数量。

事实上在上百万的输出单元中，仅有少量的输出单元对于参数更新比较重要，大部分的输出单元对于参数更新没有贡献。

4. 有两种优化策略：

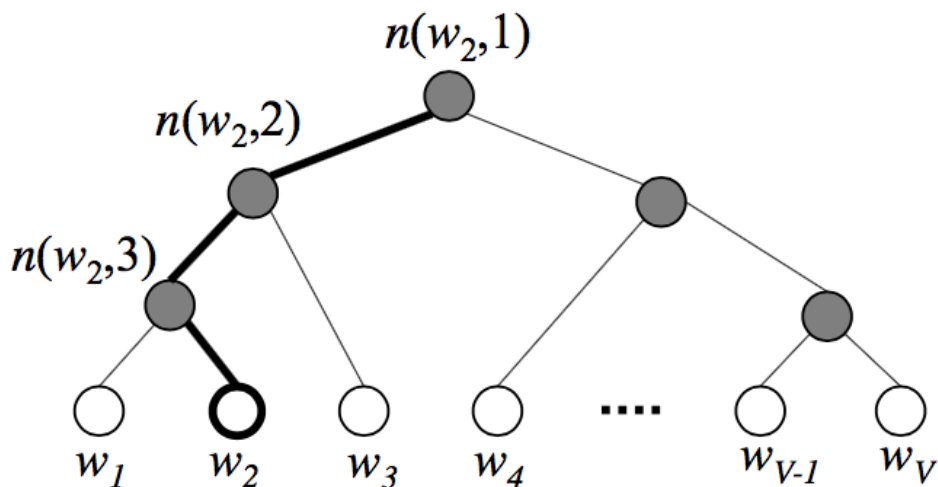
- 通过分层 softmax 来高效计算 softmax 函数。
- 通过负采样来缩减输出单元的数量。

3.3.1 分层 softmax

1. 分层 softmax 是一种高效计算 softmax 函数的算法。
2. 经过分层 softmax 之后：计算 softmax 函数的算法复杂度从 $O(V)$ 降低到 $O(\log V)$ 。
但是仍然要计算 $V - 1$ 个内部节点的向量表达。

a) 网络结构

1. 在分层 softmax 中，字典 \mathbb{V} 中的 V 个单词被组织成二叉树。
 - 叶子结点值为某个具体单词的概率（如下图中的百色结点）
 - 中间节点值也代表一个概率（如下图中的灰色结点）
 - 它的值等于：直系子节点的值之和。
 - 它的值也等于：后继的叶子结点值之和。
 - 它的值也等于：从根节点到当前节点的路径的权重的乘积。
- 之所以有这些性质，是由于结点值、权重都是概率，满足和为1的性质
- 根据定义，根节点的值等于所有叶子结点的值之和，即为 1.0。



2. 二叉树的每条边代表分裂：
 - 向左的边：表示选择左子节点，边的权重为选择左子节点的概率
 - 向右的边：表示选择右子节点，边的权重为选择右子节点的概率
3. 对于任意一个中间节点 t ，假设其向量表达为 \vec{v}'_t ，它是待求的参数。
 - 选择左子节点的概率为：

$$p(t, left) = \sigma(\vec{v}'_t \cdot \vec{h})$$

- 选择右子节点的概率为：

$$p(t, right) = 1 - \sigma(\vec{v}'_t \cdot \vec{h}) = \sigma(-\vec{v}'_t \cdot \vec{h})$$

- 如果求得所有中间节点的向量表达，则根据每个中间节点的分裂概率，可以很容易的求得每个叶节点的值。
4. 在分层 softmax 中，算法并不直接求解输出向量 $\{\vec{w}'_1, \vec{w}'_2, \dots, \vec{w}'_V\}$ ，而是求解二叉树的 $V - 1$ 个中间节点的向量表达。

5. 当需要计算某个单词的概率时，只需要记录从根节点到该单词叶子结点的路径。给定单词 w ：

- 定义 $n(w, j)$ 为从根节点到单词 w 的路径的第 j 个节点（从 1 计数）。
- 定义 $L(w)$ 为从根节点到单词 w 的路径的长度。
- 定义 $ch(t)$ 表示节点 t 的左子节点。

输出为单词 w 的概率为：

$$p(w) = \prod_{j=1}^{L(w)-1} \sigma(g(n(w, j+1) = ch(n(w, j))) \times \vec{v}'_{n(w, j)} \cdot \vec{h})$$

其中：

- $n(w, j+1) = ch(n(w, j))$ 表示：从根节点到单词 w 的路径上，第 $j+1$ 个节点是第 j 个节点的左子节点。
- $g(x)$ 是一个函数。当 x 是个事实时，其值为 1；当 x 不成立时，其值为 -1。

$$g(x) = \begin{cases} 1, & \text{if } x \text{ is true} \\ -1, & \text{if } x \text{ is false} \end{cases}$$

- $g(n(w, j+1) = ch(n(w, j)))$ 表示：从根节点到单词 w 的路径上：
 - 当第 $j+1$ 个节点是第 j 个节点的左子节点时，函数值为 1
 - 当第 $j+1$ 个节点是第 j 个节点的右子节点时，函数值为 -1
- $\vec{v}'_{n(w, j)}$ 表示：从根节点到单词 w 的路径上，第 j 个节点的向量表达
- 对于从根节点到单词 w 的路径上，从第 j 个节点到第 $j+1$ 个节点的概率为：

$$p(j, j+1) = \begin{cases} \sigma(\vec{v}'_{n(w, j)} \cdot \vec{h}), & \text{if } j+1 \text{ is left child of } j \\ \sigma(-\vec{v}'_{n(w, j)} \cdot \vec{h}), & \text{if } j+1 \text{ is right child of } j \end{cases}$$

因此 $p(w)$ 刻画了：从根节点到单词 w 的路径上，每条边的权重（也就是分裂概率）的乘积。

6. 对于所有的叶子节点，有：

$$\sum_{i=1}^V p(w_i) = 1$$

利用数学归纳法，可以证明：左子节点的值+右子节点的值=父节点的值。上式最终证明等于根节点的值，也就是 1.0

b) 内部节点更新

1. 为了便于讨论，这里使用 CBOW 的一个单词上下文模型。

CBOW 的多单词上下文、Skip-Gram 模型也类似推导

2. 记 $g(n(w, j+1) = ch(n(w, j)))$ 为 $g_{n(w, j)}$ 。

定义损失函数对数似然：

$$E = -\log p(w | \vec{x}) = - \sum_{j=1}^{L(w)-1} \log \sigma(g_{n(w, j)} \vec{v}'_{n(w, j)} \cdot \vec{h})$$

则有：

$$\begin{aligned}\frac{\partial E}{\partial(\vec{\mathbf{v}}'_{n(w,j)} \cdot \vec{\mathbf{h}})} &= \left(\sigma(g_{n(w,j)} \vec{\mathbf{v}}'_{n(w,j)} \cdot \vec{\mathbf{h}}) - 1 \right) g_{n(w,j)} = \begin{cases} \sigma(\vec{\mathbf{v}}'_{n(w,j)} \cdot \vec{\mathbf{h}}) - 1 & \text{if } g_{n(w,j)} = 1 \\ \sigma(\vec{\mathbf{v}}'_{n(w,j)} \cdot \vec{\mathbf{h}}) & \text{if } g_{n(w,j)} = -1 \end{cases} \\ &= \sigma(\vec{\mathbf{v}}'_{n(w,j)} \cdot \vec{\mathbf{h}}) - t_{n(w,j)}\end{aligned}$$

其中：

$$t_{n(w,j)} = \begin{cases} 1, & \text{if node } j+1 \text{ at path, root} \rightarrow w, \text{ is left child of node } j \\ 0, & \text{if node } j+1 \text{ at path, root} \rightarrow w, \text{ is right child of node } j \end{cases}$$

3. 定义：

$$e_{n(w,j)} = \frac{\partial E}{\partial(\vec{\mathbf{v}}'_{n(w,j)} \cdot \vec{\mathbf{h}})} = \sigma(\vec{\mathbf{v}}'_{n(w,j)} \cdot \vec{\mathbf{h}}) - t_{n(w,j)}$$

- $\sigma(\vec{\mathbf{v}}'_{n(w,j)} \cdot \vec{\mathbf{h}})$ 为预测选择 j 的左子节点的概率。
- $e_{n(w,j)}$ 的物理意义为：从根节点到单词 w 的路径上，第 j 个节点的选择误差：
 - 如果下一个节点选择第 j 个节点的左子节点，则 $t_{n(w,j)} = 1$ 。此时 $e_{n(w,j)}$ 表示预测的不足
 - 如果下一个节点选择第 j 个节点的右子节点，则 $t_{n(w,j)} = 0$ 。此时 $e_{n(w,j)}$ 表示预测的过量

4. 考虑内部节点 $n(w, j)$ ，其向量表达为 $\vec{\mathbf{v}}'_{n(w,j)}$ 。则有：

$$\frac{\partial E}{\partial \vec{\mathbf{v}}'_{n(w,j)}} = \frac{\partial E}{\partial(\vec{\mathbf{v}}'_{n(w,j)} \cdot \vec{\mathbf{h}})} \times \frac{\partial(\vec{\mathbf{v}}'_{n(w,j)} \cdot \vec{\mathbf{h}})}{\partial \vec{\mathbf{v}}'_{n(w,j)}} = e_{n(w,j)} \times \vec{\mathbf{h}}$$

得到向量表达为 $\vec{\mathbf{v}}'_{n(w,j)}$ 的更新方程：

$$\vec{\mathbf{v}}'_{n(w,j)}^{(new)} = \vec{\mathbf{v}}'_{n(w,j)}^{(old)} - \eta \times e_{n(w,j)} \times \vec{\mathbf{h}}; \quad j = 1, 2, \dots, L(w) - 1$$

- 对于每个单词 w ，由于它是叶节点，因此可以更新 $L(w) - 1$ 个内部节点的向量表达。
- 当模型的预测概率较准确，即 $\sigma(\vec{\mathbf{v}}'_{n(w,j)} \cdot \vec{\mathbf{h}}) \simeq t_{n(w,j)}$ 时，则 $e_{n(w,j)}$ 接近 0。此时梯度非常小， $\vec{\mathbf{v}}'_{n(w,j)}$ 的更新幅度也会非常小。

当模型的预测概率较不准，则 $e_{n(w,j)}$ 较大。此时梯度会较大， $\vec{\mathbf{v}}'_{n(w,j)}$ 的更新幅度也会较大。

5. 对于内部结点的向量表达 $\vec{\mathbf{v}}'_{n(w,j)}$ 的更新方程适用于 CBOW 模型和 Skip-Gram 模型。但是在 Skip-Gram 模型中，需要对 C 个输出的每一个单词进行更新。

c) CBOW 输入向量参数更新

1. 对于 CBOW 模型，定义：

$$\overrightarrow{\mathbf{EH}} = \frac{\partial E}{\partial \vec{\mathbf{h}}} = \sum_{j=1}^{L(w)-1} \frac{\partial E}{\partial(\vec{\mathbf{v}}'_{n(w,j)} \cdot \vec{\mathbf{h}})} \times \frac{\partial(\vec{\mathbf{v}}'_{n(w,j)} \cdot \vec{\mathbf{h}})}{\partial \vec{\mathbf{h}}} = \sum_{j=1}^{L(w)-1} e_{n(w,j)} \vec{\mathbf{v}}'_{n(w,j)}$$

$\overrightarrow{\mathbf{EH}}$ 的物理意义为：二叉树中所有内部节点向量表达的加权和，其权重为 $e_{n(w,j)}$ 。

2. 考虑到 $\vec{\mathbf{h}} = \frac{1}{C} \mathbf{W}^T (\vec{\mathbf{x}}_1 + \vec{\mathbf{x}}_2 + \dots + \vec{\mathbf{x}}_C)$ ，则有：

$$\frac{\partial E}{\partial w_{k,i}} = \frac{\partial E}{\partial h_i} \times \frac{\partial h_i}{\partial w_{k,i}} = \frac{1}{C} \overrightarrow{\mathbf{EH}}_i \times (x_{(1,k)} + x_{(2,k)} + \dots + x_{(C,k)})$$

写成矩阵的形式为： $\frac{\partial E}{\partial \mathbf{W}} = \frac{1}{C} \sum_{c=1}^C \vec{\mathbf{x}}_c \otimes \overrightarrow{\mathbf{E}\mathbf{H}}$ ，其中 \otimes 为克罗内克积。

将 \mathbf{W} 的更新分解为 C 次，每次对应于一个输入 $\vec{\mathbf{x}}_c$ 。因此得到 \mathbf{W} 的更新方程：

$$\vec{\mathbf{w}}_{I_i}^{(new)} = \vec{\mathbf{w}}_{I_i}^{(old)} - \frac{1}{C} \eta \overrightarrow{\mathbf{E}\mathbf{H}}, \quad i = 1, 2, \dots, C$$

其中 I_i 为第 i 个输入单词在词表 \mathbb{V} 中的编号。

d) Skip-Gram 输入向量参数更新

1. 对于 Skip-Gram 模型，定义：

$$\begin{aligned} \overrightarrow{\mathbf{E}\mathbf{H}} &= \frac{\partial E}{\partial \vec{\mathbf{h}}} = \sum_{c=1}^C \sum_{j=1}^{L(w_c)-1} \frac{\partial E}{\partial (\vec{\mathbf{v}}_{n(w_c,j)} \cdot \vec{\mathbf{h}})} \times \frac{\partial (\vec{\mathbf{v}}_{n(w_c,j)} \cdot \vec{\mathbf{h}})}{\partial \vec{\mathbf{h}}} \\ &= \sum_{c=1}^C \sum_{j=1}^{L(w_c)-1} e_{n(w_c,j)} \times \vec{\mathbf{v}}_{n(w_c,j)} \end{aligned}$$

其中： w_c 表示网络第 c 个输出的输出单词。

2. 注意：由于引入分层 softmax，导致更新路径因为输出单词的不同而不同。

因此 $\sum_{j=1}^{L(w_c)-1}$ 会因为 c 的不同而不同。

因此 $\sum_{c=1}^C$ 和 $\sum_{j=1}^{L(w_c)-1}$ 无法互换。

3. 与 Skip-Gram 中推导相同， \mathbf{W} 的更新方程为：

$$\vec{\mathbf{w}}_I^{(new)} = \vec{\mathbf{w}}_I^{(old)} - \eta \overrightarrow{\mathbf{E}\mathbf{H}}$$

其中 $\vec{\mathbf{w}}_I$ 为 $\vec{\mathbf{x}}$ 非零分量对应的 \mathbf{W} 中的行，而 \mathbf{W} 的其它行在本次更新中都保持不变。

3.3.2 负采样

a) 原理

1. 在网络的输出层，真实的输出单词对应的输出单元毋庸置疑必须输出（它作为正向单元）。其它所有单词对应的输出单元为负向单元。

- 如果计算所有负向单元的输出概率，则计算量非常庞大。
- 可以从所有负向单元中随机采样一批负向单元，仅仅利用这批负向单元来更新。这称作负采样。

2. 负采样的核心思想是：在参数的每一轮更新中，实际上只需要用到一部分单词的输出概率；大部分单词的输出概率为 0。

3. 负向单元采样的概率分布称作 noise 分布，记做 $P_n(w)$

- 它可以为任意的概率分布（通常需要根据经验来选择）
- 谷歌给出的建议是挑选 5~10 个负向单元，根据下面公式来采样：

$$P_n(w) = \frac{freq(w)^{3/4}}{\sum_{w \neq w_o} freq(w)^{3/4}}$$

其中：

- $freq(w)$ 为单词在语料库中出现的概率。
- 分母对所有的负样本单词累加。

- 其背后的物理意义为：单词在语料库中出现的概率越大，则越可能被挑中。

b) 输出向量参数更新

1. 假设输出的单词分类两类：

- 正类：只有一个，即真实的输出单词 w_O
- 负类：从 $P_n(w)$ 采样得到的 K 个单词 $\mathcal{W}_{neg} = \{w_1, w_2, \dots, w_K\}$

论文作者指出：下面的训练目标能够得到更好的结果：

$$E = -\log \sigma(\vec{w}'_{w_O} \cdot \vec{h}) - \sum_{w_j \in \mathcal{W}_{neg}} \log \sigma(-\vec{w}'_{w_j} \cdot \vec{h})$$

其中：

- \vec{w}'_{w_O} 为真实的输出单词对应的输出向量
- \vec{w}'_{w_j} 为负采样的单词得到的输出向量。

2. 负采样的目标函数是一个经验公式，而不是理论上的后验概率 $P(w_O | w_I)$ 的负对数似然：

$$-\log \sigma(\vec{w}'_{w_O} \cdot \vec{h})。$$

- $\sigma(\vec{w}'_{w_O} \cdot \vec{h})$ ：在单词 w_O 上输出为正类的概率
- $\sigma(-\vec{w}'_{w_j} \cdot \vec{h})$ ：在单词 w_j 上输出为负类的概率

其物理意义为：在正类单词上取正类、负类单词上取负类的负对数似然。

3. 根据 E 的定义，有：

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial(\vec{w}'_{w_j} \cdot \vec{h})} &= \begin{cases} \sigma(\vec{w}'_{w_j} \cdot \vec{h}) - 1, & \text{if } w_j = w_O \\ \sigma(\vec{w}'_{w_j} \cdot \vec{h}), & \text{if } w_j \in \mathcal{W}_{neg} \end{cases} \\ &= \sigma(\vec{w}'_{w_j} \cdot \vec{h}) - t_j \end{aligned}$$

其中 t_j 标记了单词 w_j 的标签：

$$t_j = \begin{cases} 1, & \text{if } w_j = w_O \\ 0, & \text{esle} \end{cases}$$

4. 令 $e_{w_j} = \sigma(\vec{w}'_{w_j} \cdot \vec{h}) - t_j$ ，它刻画了网络在正类单词和负类单词上的预测误差。

- 当 $w_j = w_O$ 时， e_{w_j} 表示对正类单词预测概率的不足。
- 当 $w_j \in \mathcal{W}_{neg}$ 时， e_{w_j} 表示对负类单词预测概率的过量。

5. 根据：

$$\frac{\partial E}{\partial \vec{w}'_{w_j}} = \frac{\partial E}{\partial(\vec{w}'_{w_j} \cdot \vec{h})} \times \frac{\partial(\vec{w}'_{w_j} \cdot \vec{h})}{\partial \vec{w}'_{w_j}} = e_{w_j} \times \vec{h}$$

则有输出向量的更新方程：

$$\vec{w}'_{w_j}^{(new)} = \vec{w}'_{w_j}^{(old)} - \eta \times e_{w_j} \times \vec{h}$$

6. 给定一个样本，在更新输出向量时，只有 $K + 1$ 个输出向量（1 个输出单词 w_O 、 K 个负采样单词对应的输出向量）得到更新，其中 K 通常数量很小。其它所有单词对应的输出向量未能得到更新。

相比较而言：

- 原始算法中，给定一个样本，在更新输出向量时，所有输出向量（一共 V 个）都得到更新

- 分层 softmax 算法中，给定一个样本，在更新输出向量时， $L(w) - 1$ 个内部节点的向量表达得到更新。

7. 输出向量的更新方程可以用于 CBOW 模型和 Skip-Gram 模型。

若用于 Skip-Gram 模型，则对每个输出依次执行输出向量的更新。

c) CBOW 输入向量参数更新

1. 对于 CBOW 模型，定义：

$$\overrightarrow{\mathbf{E}\mathbf{H}} = \frac{\partial E}{\partial \vec{\mathbf{h}}} = \sum_{w_j \in \{w_O\} \cup \mathcal{W}_{neg}} \frac{\partial E}{\partial (\vec{\mathbf{w}}'_{w_j} \cdot \vec{\mathbf{h}})} \times \frac{\partial (\vec{\mathbf{w}}'_{w_j} \cdot \vec{\mathbf{h}})}{\partial \vec{\mathbf{h}}} = \sum_{w_j \in \{w_O\} \cup \mathcal{W}_{neg}} e_{w_j} \times \vec{\mathbf{w}}'_{w_j}$$

$\overrightarrow{\mathbf{E}\mathbf{H}}$ 的物理意义为：负采样单词、输出单词对应输出向量的加权和，其权重为 e_{w_j} 。

2. 与 分层softmax: CBOW 输入向量参数更新 中的推导相同， \mathbf{W} 的更新方程为：

$$\vec{\mathbf{w}}_{I_i}^{(new)} = \vec{\mathbf{w}}_{I_i}^{(old)} - \frac{1}{C} \eta \overrightarrow{\mathbf{E}\mathbf{H}}, \quad i = 1, 2, \dots, C$$

其中 I_i 为第 i 个输入单词在词表 \mathcal{V} 中的编号。

d) Skip-Gram 输入向量参数更新

1. 对于 CBOW 模型，定义：

$$\begin{aligned} \overrightarrow{\mathbf{E}\mathbf{H}} &= \frac{\partial E}{\partial \vec{\mathbf{h}}} = \sum_{c=1}^C \sum_{w_j \in \{w_O^c\} \cup \mathcal{W}_{neg}^c} \frac{\partial E}{\partial (\vec{\mathbf{w}}'_{w_j} \cdot \vec{\mathbf{h}})} \times \frac{\partial (\vec{\mathbf{w}}'_{w_j} \cdot \vec{\mathbf{h}})}{\partial \vec{\mathbf{h}}} \\ &= \sum_{c=1}^C \sum_{w_j \in \{w_O^c\} \cup \mathcal{W}_{neg}^c} e_{w_j} \times \vec{\mathbf{w}}'_{w_j} \end{aligned}$$

其中：

- w_O^c 表示网络第 c 个输出的输出单词。
 - \mathcal{W}_{neg}^c 表示网络第 c 个输出的负采样单词集。
2. 注意：由于引入负采样，导致网络每个输出中，对应的输出单词有所不同，负采样单词也有所不同。

因此 $\{w_O^c\} \cup \mathcal{W}_{neg}^c$ 会因为 c 的不同而不同。

因此 $\sum_{c=1}^C$ 和 $\sum_{w_j \in \{w_O^c\} \cup \mathcal{W}_{neg}^c}$ 无法互换。

3. 与 Skip-Gram 中推导相同， \mathbf{W} 的更新方程为：

$$\vec{\mathbf{w}}_I^{(new)} = \vec{\mathbf{w}}_I^{(old)} - \eta \overrightarrow{\mathbf{E}\mathbf{H}}$$

其中 $\vec{\mathbf{w}}_I$ 为 $\vec{\mathbf{x}}$ 非零分量对应的 \mathbf{W} 中的行，而 \mathbf{W} 的其它行在本次更新中都保持不变。

3.4 使用

1. 模型、语料库、超参数这三个方面都会影响词向量的训练，其中语料库对训练结果的好坏影响最大。

3.4.1 模型选择

1. 模型方面，所有的词向量都是基于分布式分布假说：拥有相似上下文的单词，其词义相似。

2. 根据目标词和上下文的关系，模型可以分为两类：

- 通过上下文来预测目标词。
这类模型更能够捕获单词之间的可替代关系。
- 通过目标词来预测上下文。

3. 通过实验发现：简单的模型（Skip-Gram）在小语料库下表现较好。复杂的模型在大语料库下略有优势。

3.4.2 语料库

1. 实际上语料库并不是越大越好，语料库的领域更重要。

- 选择了合适的领域，可能只需要 1/10 甚至 1/100 的语料就能够得到一个大的、泛领域语料库的效果。
- 如果选择不合适的领域，甚至会导致负面效果，比随机词向量效果还差。

3.4.3 超参数

1. 词向量的维度：

- 做词向量语义分析任务时，一般维度越大，效果越好
- 做具体 NLP 任务时（用作输入特征、或者网络初始化），50 维之后效果提升就比较少了。

2. 迭代次数：由于训练词向量的目标是尽可能精确地预测目标词，这个优化目标和实际任务并不一致。

因此最好的做法是：直接用实际任务的验证集来做终止条件。

如果实际任务非常耗时，则可以随机挑选某个任务（如：情感分类）及其验证集来做终止条件。

四、GloVe

1. 学习词向量的所有无监督方法最终都是基于语料库的单词共现统计，因此这些模型之间存在共性。

2. 词向量学习算法有两个主要的模型族：

- 基于全局矩阵分解的方法，如：latent semantic analysis:LSA。
 - 优点：能够有效的利用全局的统计信息。
 - 缺点：在单词类比任务（如：国王 vs 王后 类比于 男人 vs 女人）中表现相对较差。
- 基于局部上下文窗口的方法，如：word2vec。
 - 优点：在单词类比任务中表现较好。
 - 缺点：因为 word2vec 在独立的局部上下文窗口上训练，因此难以利用单词的全局统计信息。

3. Global Vectors for Word Representation:GloVe 结合了 LSA 算法和 Word2Vec 算法的优点，既考虑了全局统计信息，又利用了局部上下文。

4.1 原理

1. 设单词-单词共现矩阵为 \mathbf{X} 。其中 $X_{i,j}$ 表示在整个语料库中，单词 word_j 在单词 word_i 上下文中出现的次数。令：

- $X_i = \sum_{k=1}^V X_{i,k}$ ，它表示：单词 word_i 上下文中出现的所有单词的总数。
- $P_{i,j} = P(\text{word}_j \mid \text{word}_i) = \frac{X_{i,j}}{X_i}$ ，它表示：单词 word_j 出现在单词 word_i 的上下文中的概率。
- $\text{Ratio}_{i,j}^k = \frac{P_{i,k}}{P_{j,k}}$ ，它表示：单词 word_k 出现在单词 word_i 的上下文中的概率，相对于单词 word_k 出现在单词 word_j 的上下文中的概率的比值。

2. 从经验中可以发现以下规律：

	单词 word_k 和单词 word_i 相关	单词 word_k 和单词 word_i 不相关
单词 word_k 和单词 word_j 相关	$\text{Ratio}_{i,j}^k$ 趋近于 1	$\text{Ratio}_{i,j}^k$ 比较小
单词 word_k 和单词 word_j 不相关	$\text{Ratio}_{i,j}^k$ 比较大	$\text{Ratio}_{i,j}^k$ 趋近于 1

因此 $\text{Ratio}_{i,j}^k$ 能够反映单词之间的相关性。

3. 假设单词 word_i , word_j , word_k 的词向量分别为 $\vec{\mathbf{w}}_i$, $\vec{\mathbf{w}}_j$, $\vec{\mathbf{w}}_k$ 。

GloVe 认为：这三个单词的词向量经过某个函数的映射之后等于 $\text{Ratio}_{i,j}^k$ 。即：词向量中包含了共现矩阵的信息。

假设这个映射函数为 F ，则有：

$$F(\vec{\mathbf{w}}_i, \vec{\mathbf{w}}_j, \vec{\mathbf{w}}_k) = \text{Ratio}_{i,j}^k = \frac{P_{i,k}}{P_{j,k}}$$

现在的问题是 $F(\cdot)$ 未知，词向量 $\vec{\mathbf{w}}_i$, $\vec{\mathbf{w}}_j$, $\vec{\mathbf{w}}_k$ 也是未知。如果能够确定 $F(\cdot)$ ，则可以求解词向量。

4. 由于 $F(\cdot)$ 映射的是向量空间，而向量空间是一个线性空间。因此从右侧的除法 $\frac{P_{i,k}}{P_{j,k}}$ 可以联想到对 $\vec{\mathbf{w}}_i$ 和 $\vec{\mathbf{w}}_j$ 做减法。即 $F(\cdot)$ 的形式为：

$$F(\vec{\mathbf{w}}_i - \vec{\mathbf{w}}_j, \vec{\mathbf{w}}_k) = \frac{P_{i,k}}{P_{j,k}}$$

由于 $\vec{\mathbf{w}}_i - \vec{\mathbf{w}}_j$ 和 $\vec{\mathbf{w}}_k$ 均为向量，而 $\frac{P_{i,k}}{P_{j,k}}$ 为标量。因此可以联想到向量的内积。即 $F(\cdot)$ 的形式为：

$$F((\vec{\mathbf{w}}_i - \vec{\mathbf{w}}_j)^T \vec{\mathbf{w}}_k) = F(\vec{\mathbf{w}}_i^T \vec{\mathbf{w}}_k - \vec{\mathbf{w}}_j^T \vec{\mathbf{w}}_k) = \frac{P_{i,k}}{P_{j,k}}$$

上式左边为差的形式，右边为商的形式。因此联想到函数 $\exp(\cdot)$ 。即 $F(\cdot)$ 的形式为：

$$F(\cdot) = \exp(\cdot) \\ \vec{\mathbf{w}}_i^T \vec{\mathbf{w}}_k - \vec{\mathbf{w}}_j^T \vec{\mathbf{w}}_k = \log P_{i,k} - \log P_{j,k}$$

要想使得上式成立，只需要令 $\vec{\mathbf{w}}_i^T \vec{\mathbf{w}}_k = \log P_{i,k}$, $\vec{\mathbf{w}}_j^T \vec{\mathbf{w}}_k = \log P_{j,k}$ 即可。

5. 向量的内积具有对称性，即 $\vec{\mathbf{w}}_i^T \vec{\mathbf{w}}_k = \vec{\mathbf{w}}_k^T \vec{\mathbf{w}}_i$ 。而 $\log X_{i,k} - \log X_i \neq \log X_{k,i} - \log X_k$ ，即：
 $\log P_{i,k} \neq \log P_{k,i}$ 。

为了解决这个问题，模型引入两个偏置项：

$$\log X_{i,k} = \vec{\mathbf{w}}_i^T \vec{\mathbf{w}}_k + b_i + b_k$$

6. 上面的公式仅仅是理想状态，实际上只能要求左右两边尽可能相等。于是设计代价函数为：

$$J = \sum_{i,k} \left(\vec{\mathbf{w}}_i^T \vec{\mathbf{w}}_k + b_i + b_k - \log X_{i,k} \right)^2$$

4.2 权重函数

1. 根据经验，如果两个词共现的次数越多，则这两个词在代价函数中的影响就应该越大。因此可以设计一个权重来对代价函数中的每一项进行加权，权重为共现次数的函数：

$$J = \sum_{i,k} f(X_{i,k}) \left(\vec{w}_i^T \vec{w}_k + b_i + b_k - \log X_{i,k} \right)^2$$

其中权重函数应该符合三个条件：

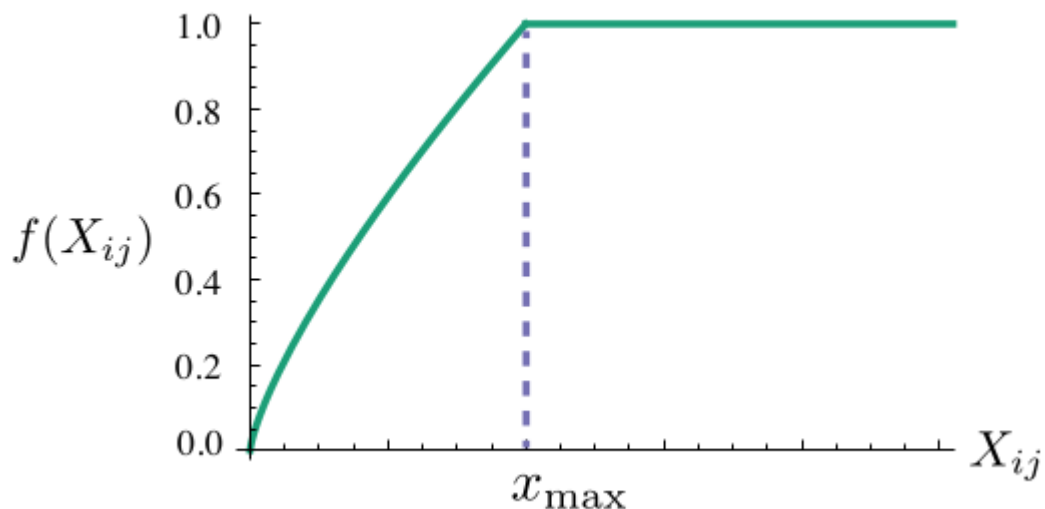
- $f(0) = 0$ 。即：如果两个词没有共现过，则权重为 0。
- 这是为了确保 $\lim_{x \rightarrow 0} f(x) \log^2 x$ 是有限值。
- $f(\cdot)$ 是非递减的。即：两个词共现次数越大，则权重越大。
- $f(\cdot)$ 对于较大的 $X_{i,k}$ 不能取太大的值。即：有些单词共现次数非常大（如单词 的 与其它词的组合），但是它们的重要性并不是很大。

2. GloVe 论文给出的权重函数 $f(\cdot)$ 为：

$$f(x) = \begin{cases} \left(\frac{x}{x_{\max}} \right)^\alpha & \text{if } x < x_{\max} \\ 1, & \text{otherwise} \end{cases}$$

其中：

- GloVe 论文给出参数 α 和 x_{\max} 的经验值为： $\alpha = \frac{3}{4}, x_{\max} = 100$ 。
- GloVe 论文指出： x_{\max} 对模型的性能影响较小。



4.3 性能

1. **GloVe** 模型的算法复杂度取决于共现矩阵 \mathbf{X} 中的非零元素的个数，最坏的情况下为 $O(V^2)$ 。由于词汇表的数量通常很庞大，因此 V^2 会非常大。

实际上单词共现的次数满足齐普夫定律(Zipf's Law)，因此算法复杂度较低，约为 $O(|C|)$ ，其中 C 为语料库的大小。

Zipf's Law：如果有一个包含 n 个词的文章，将这些词按其出现的频次递减地排序，那么序号 r 和其出现频次 f 之积 $f \times r$ ，将近似地为一个常数，即 $f \times r = \text{const}$

2. **GloVe** 模型评估任务：

- **semantic** 任务：语义任务。如：'雅典'之于'希腊' = '柏林'之于'_'？
- **syntactic** 任务：语法任务。如：'dance'之于'dancing' = 'fly'之于'_'？

3. **GloVe** 模型性能与语料库大小的关系：

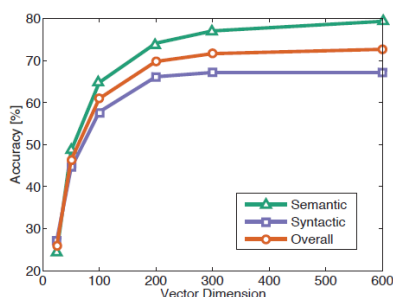
- 在语法任务中，模型性能随着语料库大小的增长而单调增长。
这是因为语料库越大，则语法的统计结果越可靠。
- 在语义任务中，模型性能与语料库绝对大小无关，而与语料库的有效大小有关。
有效大小指的是语料库中，与目标语义相关的内容的大小。

4. **GloVe** 模型超参数选择：

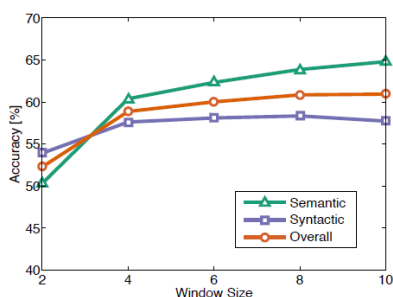
- 词向量大小：词向量大小越大，则模型性能越好。但是词向量超过 **200** 维时，维度增加的收益是递减的。
- 窗口对称性：计算一个单词的上下文时，上下文窗口可以是对称的，也可以是非对称的。
 - 对称窗口：既考虑单词左侧的上下文，又考虑单词右侧的上下文
 - 非对称窗口：只考虑单词左侧的上下文。

因为语言的阅读习惯是从左到右，所以只考虑左侧的上下文，不考虑右侧的上下文。

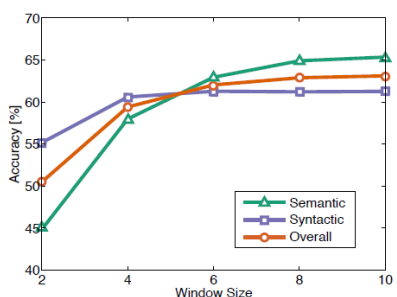
- 窗口大小：
 - 在语法任务中，选择小的、非对称的窗口时，模型性能更好。
因为语法是局部的，所以小窗口即可。
因为语法是依赖于单词顺序的，所以需要非对称窗口。
 - 对于语义任务，则需要选择更大的窗口。
因为语义是非局部的。



(a) Symmetric context



(b) Symmetric context



(c) Asymmetric context

