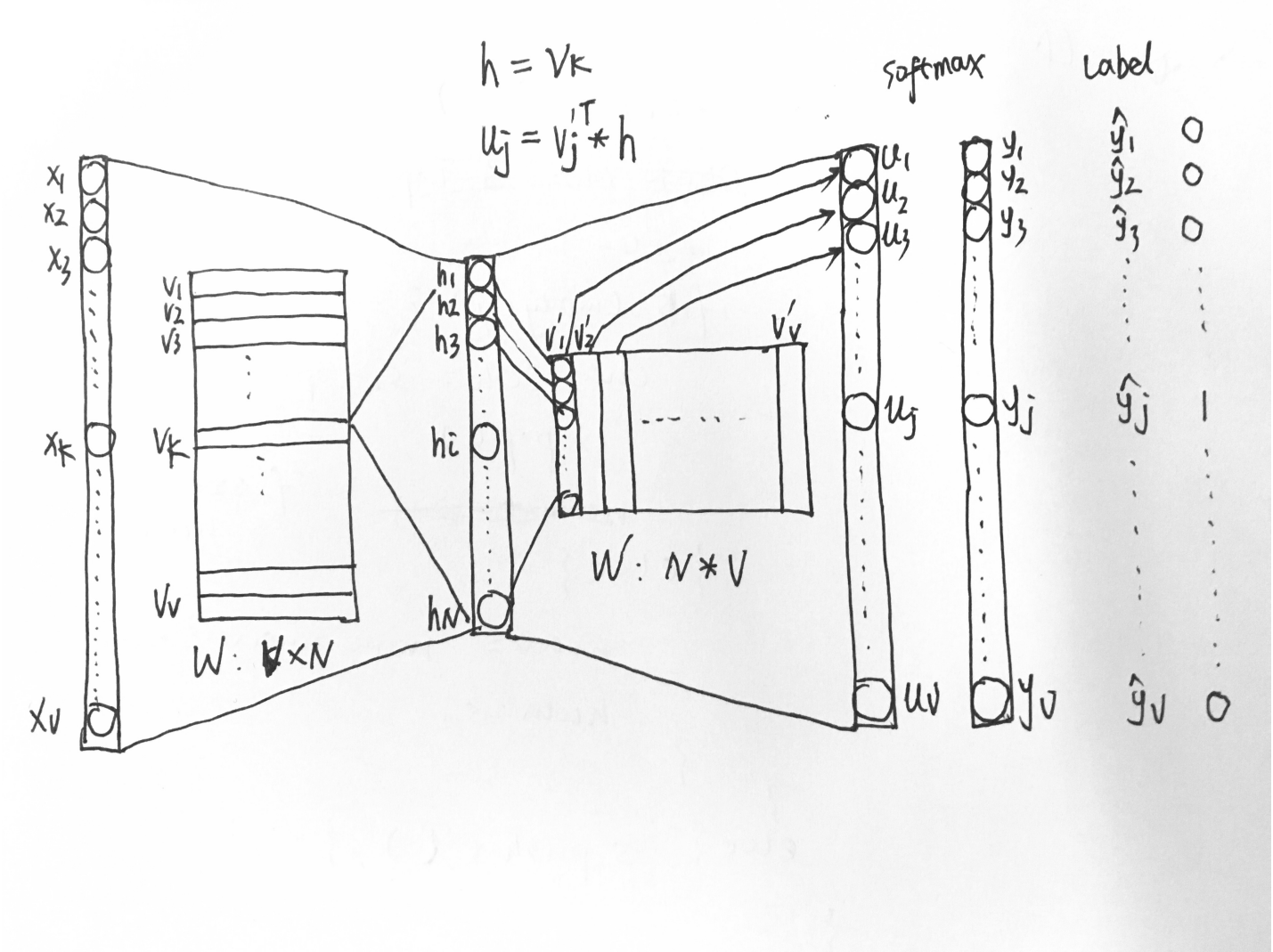
word2vec 数学推导

word2vec 是一种训练词向量的工具，可以将词库中的所有词语映射到 k 维的向量中。主要有两种训练方式，CBOW 和 skip-gram，CBOW 根据上下文来预测目标单词，skip-gram 根据目标单词来预测上下文。下面进行两种方式的数学推导。

CBOW

1. one-word context



假设词表大小为 V，隐藏层大小为 N，input-hidden 权重矩阵为 W_{V*N}，其中第 k 行的转置为 v_k，hidden-output 的权重矩阵为 W'_{N*V}，其中第 j 列为 v'_j。计算过程如下：

$$h = v_I$$

$$u_j = v_j'^T * h \qquad j = 1, 2, \ldots, V$$

后验概率为：$p(w_j|w_I) = y_j = \frac{exp(u_j)}{\sum_{j'=1}^{V} exp(u_{j'})}$，也就是 softmax 计算，使用交叉墒损失函数：

$$E = -\sum_{j=1}^{V} \widehat{y}_j log y_j = -\sum_{j=1}^{V} \widehat{y}_j (u_j - log(\sum_{j'=1}^{V} exp(u_{j'})))$$

E 对 u_j 求导：

$$\frac{\partial E}{\partial u_j} = y_j - \widehat{y}_j = e_j$$

即预测概率值与真实概率值的差。E 对 v_j' 求导，得到：

$$\frac{\partial E}{\partial v_j'} = \frac{\partial E}{\partial u_j} \cdot \frac{\partial u_j}{\partial v_j'} = e_j \cdot h$$

于是，更新 hidden-output 的权重矩阵：

$$v_j'^{(new)} = v_j'^{(old)} - \eta \cdot e_j \cdot h \qquad for\, j = 1, 2, \ldots, V$$

其中，η 是学习率，e_j 是预测值与真实值的差，这意味着，当 $y_j > \widehat{y}_j$ 时（overestimating），要从 v_j' 中减去一定比例的隐藏向量 h，让 v_j' 离 v_I 更远；当 $y_j < \widehat{y}_j$ （underestimating, $\widehat{y}_j = 1$）时，要对 v_j' 加上一些 h，让两者更近。

E 对 h_i 求导：

$$\frac{\partial E}{\partial h_i} = \sum_{j=1}^{V} \frac{\partial E}{\partial u_j} \cdot \frac{\partial u_j}{\partial h_i} = \sum_{j=1}^{V} e_j \cdot w_{ij}'$$

$$h_i = \sum_{k=1}^{V} x_k \cdot w_{ki}$$

E 对 w_{ki} 求导，得到：

$$\frac{\partial E}{\partial w_{ki}} = \frac{\partial E}{\partial h_i} \cdot \frac{\partial h_i}{\partial w_{ki}} = \sum_{j=1}^{V} e_j \cdot w_{ij}' \cdot x_k$$

由于 x 只有一个值非零（that is 1），$\frac{\partial E}{\partial W}$ 中只有一行非零，上式写成向量形式：

$$\frac{\partial E}{\partial v_k} = \sum_{j=1}^{V} e_j \cdot v_j'$$

所以，更新 input-hidden 权重矩阵：

$$v_I^{(new)} = v_I^{(old)} - \eta \cdot \sum_{j=1}^{V} e_j \cdot v'_j$$

这时候，v_I 会加上一点预测值 v'_j 向量，减去一点点其它词向量。

2. multi-word context

对于多单词上下文的情况，计算隐藏层输出时，不再像单词语上下文那样，直接复制上下文单词的输入向量，而是取所有上下文单词的平均值：

$$h = \frac{1}{C} W^T (x_1 + x_2 + \ldots + x_C) = \frac{1}{C} (v_{w_1} + v_{w_2} + \ldots + v_{w_C})^T$$

其中，C 是输入上下文单词的总数，$w_1, w_2, \ldots w_c$ 是上下文单词，v_w 是单词 w 的输入向量，损失函数同样是交叉墒函数。hidden-output 的权重更新和单词语上下文一致：

$$v'^{(new)}_j = v'^{(old)}_j - \eta \cdot e_j \cdot h \qquad for\, j = 1, 2, \ldots, V$$

input-hidden 权重更新公式和单词语类似，将下面等式应用到每一个输入的上下文单词 $w_{I,c}$：

$$v^{(new)}_{I,c} = v^{(old)}_{I,c} - \frac{1}{C} \eta \sum_{j=1}^{V} e_j \cdot v'_j \qquad c = 1, 2, \ldots, C$$

skip-gram

skip-gram 模型中，目标单词出现在输入层，上下文单词出现在输出层。输出层是 C 个后验概率：

$$p(w_{c,j} | w_I) = y_{c,j} = \frac{exp(u_{c,j})}{\sum_{j'=1}^{V} exp(u_{j'})}$$

由于输出层共享权重，因此有：

$$u_{c,j} = u_j = v'_j h \qquad c = 1, 2, \ldots, C$$

交叉墒函数：$E_c = -\sum_{j=1}^{V} \hat{y}_{c,j} log y_{c,j}$

损失函数为 C 个交叉墒函数相加：

$$E = \sum_{c=1}^{C} E_c = -\sum_{c=1}^{C} \sum_{j=1}^{V} \hat{y}_{c,j} log \frac{exp(u_{c,j})}{\sum_{j'=1}^{V} exp(u_{j'})}$$

E 对 $u_{c,j}$ 求导：

$$\frac{\partial E}{\partial u_{c,j}} = y_{c,j} - \hat{y}_{c,j} := e_{c,j}$$

E 对 v'_j 求导，得到：

$$\frac{\partial E}{\partial v'_j} = \sum_{c=1}^{C} \frac{\partial E}{\partial u_{c,j}} \cdot \frac{\partial u_{c,j}}{\partial v'_j} = \sum_{c=1}^{C} e_{c,j} \cdot h$$

更新 hidden-output 权重矩阵：

$$v'^{(new)}_j = v'^{(old)}_j - \eta \sum_{c=1}^{C} e_{c,j} \cdot h \qquad for\, j = 1, 2, \ldots, V$$

input-hidden 的权重更新函数和 one-word 的 cbow 类似，e_j 改为 $\sum_{c=1}^{C} e_{c,j}$，因此：

$$v_I^{(new)} = v_I^{(old)} - \eta \cdot \sum_{j=1}^{V} \sum_{c=1}^{C} e_{c,j} \cdot v'_j$$

模型优化

对于这两种模型，词汇表中每个单词都有两个向量表示：输入向量 v_w 和 v'_w，学习 v_w 很容易，但学习输出向量很费时间，为了更新 v'_j，对每一个训练实例，需要迭代词汇表中每个单词 w_j，计算它的输出 u_j 和后验概率 y_j（对 skip-gram，是 $y_{c,j}$），然后计算预测误差，最后更新 v'_j。为了解决这个问题，对每个样本，要限制被更新的输出向量的数量，一般有两种方法：一个是 hierarchical softmax，一个是 negative sampling。