一篇通俗易懂的word2vec

susht
Dare To Be Yourself
关注她

Part I：背景

Part II：训练模式（CBOW，Skip Gram）

Part III：优化方法（Negative Sampling，Hierarchical SoftMax）

Part IV：词向量衡量指标

参考论文：Word2vec Parameter Learning Explained

Part I：背景

最近在复习NLP基础，有空的话可能会写文章整理一下，力求通俗易懂。

特征表达是很基础也很重要的一步，我们通常需要用一个向量去表示一个东西，比如文本中的词向量，知识图谱中的知识向量，以及Network Embedding等。

在NLP中，传统算法通常使用one-hot形式表示一个词，存在以下问题：

1）维度爆炸，词表通常会非常大，导致词向量维度也会非常大。

2）损失语义信息，one hot随机给每个词语进行编号映射，无法表示词语之间的关系。

所以word embeding的优势如下：

1）将词语映射成一个固定维度的向量，节省空间。

2）词向量可能会具备一定的语义信息，将相似的词语放到相近的向量空间（比如香蕉和苹果都是属于水果，苹果又会涉及到歧义问题），可以学习到词语之间的关系（比如经典的 男人-女人=国王-王后）。

本文会介绍一下Word2vec原理，这是一种常见的可以用于训练词向量的模型工具。常见的做法是，我们先用word2vec在公开数据集上预训练词向量，加载到自己的模型中，对词向量进行调整，调整成适合自己数据集的词向量。

Part II：训练模式

我们通常是通过将词向量用于某些任务中，用这些任务的衡量指标去衡量模型结果。

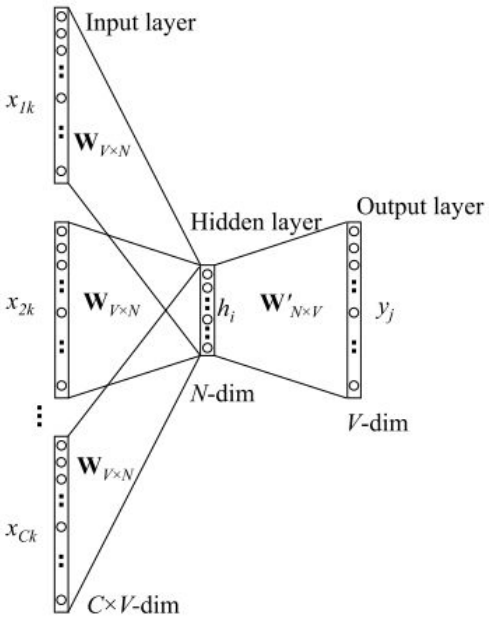
那么反过来，如果我们想要训练词向量，可以先去训练一个语言模型，然后将模型中对应的参数，作为词向量。从任务形式上看，我们是在训练语言模型，而实际上我们最终的目标是想得到词向量，我们更关心的是这个词向量合不合理。

Word2vec根据上下文之间的出现关系去训练词向量，有两种训练模式，Skip Gram和CBOW，其中Skip Gram根据目标单词预测上下文，CBOW根据上下文预测目标单词，最后使用模型的部分参数作为词向量。

AutoEncoder也可以用于训练词向量，先将one hot映射成一个hidden state，再映射回原来的维度，令输入等于输出，取中间的hidden vector作为词向量，在不损耗原表达能力的前提下压缩向量维度，得到一个压缩的向量表达形式。

一. CBOW

根据上下文预测目标单词，我们需要极大化这个目标单词的出现概率。



假设词表大小为V，词向量维度为N，上下文单词为x1，x2, ...，xc，定义上下文窗口大小为c，对应的目标单词为y，我们将x跟y都表示成one hot形式。这里涉及到两个矩阵参数，W是词向量矩阵，每一行都是某个词的词向量v，W'可以看做是一个辅助矩阵，每一列可以看做是某个词对应的相关向量v'。

前向过程：

x->hidden：对于每个xi，取出对应的词向量vi，再对这些词向量取平均作为hidden vector，相当于通过简单粗暴的叠加，得到这些词语的语义向量。

h->y：将h乘以W'得到一个维度为V的向量u，进行softmax归一化得到概率向量，取概率最大的作为预测单词。

后向过程：

我们需要极大化目标单词的出现概率p(y | x1, x2, ... , xc)，也就是极小化负对数似然函数，Loss函数定义为：

$$
\begin{aligned}
E &= -\log p(w_O|w_{I,1},\cdots,w_{I,C}) \\
&= -u_{j^*} + \log \sum_{j'=1}^{V} \exp(u_{j'}) \\
&= -\mathbf{v}'_{w_O}{}^T \cdot \mathbf{h} + \log \sum_{j'=1}^{V} \exp(\mathbf{v}'_{w_j}{}^T \cdot \mathbf{h})
\end{aligned}
$$

我们需要更新两个矩阵参数，W和W'，先根据loss对参数求梯度，再使用梯度下降法更新参数。具体的求导过程这里略过，请移步原论文。

对于W'，经过求导，v'更新公式为：

$$\mathbf{v}'^{(new)}_{w_j} = \mathbf{v}'^{(old)}_{w_j} - \eta(y_j - t_j)\mathbf{h},\ j \in \{1,2,3,\ldots,V\}$$

也就是说，需要更新整个W'矩阵，所有v'向量。（这里造成了巨大的计算量）

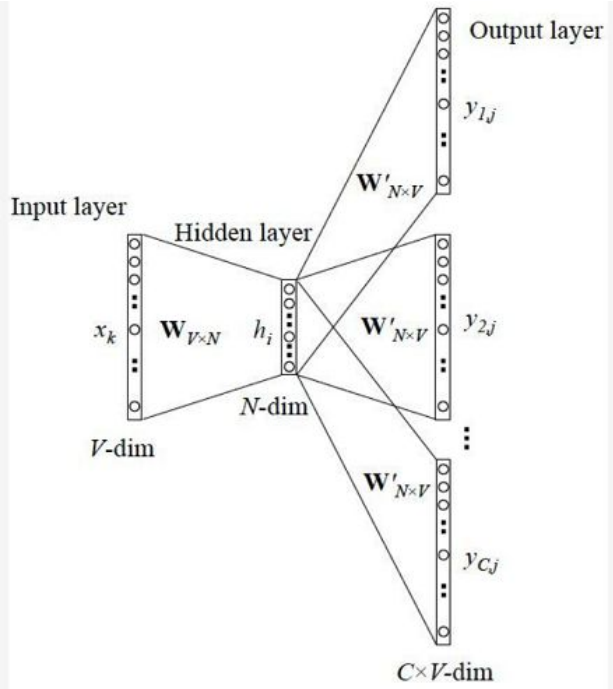
对于W，经过求导，v更新公式为：

$$v^T_{w_{I,c}} = v^T_{w_{I,c}} - \frac{1}{C}\eta W' \cdot P,\ c = 1,2,\ldots,C$$

也就是说，这里只需要更新c个上下文单词所对应的词向量。

二. Skip Gram

根据目标单词预测其上下文，假设输入的目标单词为x，定义上下文窗口大小为c，对应的上下文为y1, y2, ... , yc，这些y是相互独立的。



前向过程：

x->hidden：将输入单词x乘以词向量矩阵W，相当于取出该词的词向量v。

h->y：对于每个输出单词y_i，将h乘以矩阵W'得到向量u，再经过softmax归一化得到概率向量，取概率最大的预测为上下文单词，极大化y_i的预测概率。

这些上下文单词是相互独立的，虽然他们共享W'，但是loss是不一样的，我们需要极大化这些词出现的概率。作为一个语言模型这种做法是略显粗糙，但是这里我们的目的只是为了训练词向量，并不是需要训练一个多么好的语言模型。

后向过程：

直观上的样本格式是（x，y1, y2, ... , yc），然后极大化p(y|x)，因为这些y是相互独立的，又变成极大化p(y1|x)*p(y2|x)*...*p(yc|x)，取log将连乘变成连加，取负将极大化变成极小化，使用交叉熵作为loss函数：

$$\begin{aligned} E &= -\log p(w_{O,1}, w_{O,2}, \cdots, w_{O,C}|w_I) \\ &= -\log \prod_{c=1}^{C} \frac{\exp(u_{c,j_c^*})}{\sum_{j'=1}^{V} \exp(u_{j'})} \\ &= -\sum_{c=1}^{C} u_{j_c^*} + C \cdot \log \sum_{j'=1}^{V} \exp(u_{j'}) \end{aligned}$$

所以这里我们可以将样本格式定义成（x, y），将所有样本的Loss加起来。

对于W'，经过求导，v'更新公式为：

$$v'^{(new)}_{wj} = v'^{(old)}_{wj} - \eta Q_j \mathbf{h},\ j = 1, 2, 3, \ldots, V$$

也就是说，这里依然需要更新所有v'向量。（无法避免的巨大的计算量）

对于W，经过求导，v更新公式为：

$$v^{(new)}_{wI} = v^{(old)}_{wI} - \eta W' \cdot Q$$

这里只需要更新目标词语所对应的那个词向量。

Part III：优化方法

原始的方法所存在的问题是计算量太大，体现在以下两方面：

1）前向过程，h->y这部分在对向量进行softmax的时候，需要计算V次。

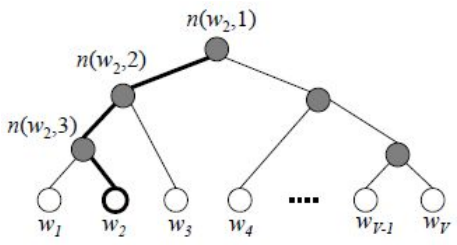
2）后向过程，softmax涉及到了V列向量，所以也需要更新V个向量。

问题就出在V太大，而softmax需要进行V次操作，用整个W进行计算。

因此word2vec使用了两种优化方法，Hierarchical SoftMax和Negative Sampling，对softmax进行优化，不去计算整个W，大大提高了训练速度。

一. Hierarchical SoftMax

HS用哈夫曼树，把预测one-hot编码改成预测一组01编码，进行层次分类。



在哈夫曼树中，每个叶节点是词表中的一个词，每个非叶子节点对应一个v'向量，树的深度为L(w)，整颗树有V-1个非叶子节点和V个叶节点。假设输入单词是w_i，目标单词是w_o，那么n(w, i)表示从根节点到叶节点w路径中的第i个节点，v'(w, i)表示n(w, i)所对应的v'向量。

注意：v'不是针对词语w而言，而是针对节点n，每个节点n都有自己的一个向量v'，而不是每个词在每个节点上有一个向量，或者说，这些词在同一个节点上共享向量。

假设h是w_i前面所计算出来的hidden vector，我们在非叶子节点中使用该节点处的v'向量和h点乘，再用sigmoid去判断向左还是向右：（取代softmax）

$$p(n, \text{left}) = \sigma\left({\mathbf{v}'_n}^T \cdot \mathbf{h}\right)$$

$$p(n, \text{right}) = 1 - \sigma\left({\mathbf{v}'_n}^T \cdot \mathbf{h}\right) = \sigma\left(-{\mathbf{v}'_n}^T \cdot \mathbf{h}\right)$$

那么每个叶节点会有一个概率p(wi=wo)，最终我们需要极大化从根节点到预测单词w_o这条路径的概率，比如对于目标单词w2，我们需要极大化p(w2=w_o)：

$$\begin{aligned} p(w_2 = w_O) &= p\left(n(w_2, 1), \text{left}\right) \cdot p\left(n(w_2, 2), \text{left}\right) \cdot p\left(n(w_2, 3), \text{right}\right) \\ &= \sigma\left({\mathbf{v}'_{n(w_2,1)}}^T \mathbf{h}\right) \cdot \sigma\left({\mathbf{v}'_{n(w_2,2)}}^T \mathbf{h}\right) \cdot \sigma\left(-{\mathbf{v}'_{n(w_2,3)}}^T \mathbf{h}\right) \end{aligned}$$

在根节点处左右概率之和是1，然后在接下来的每个节点，对应两个子节点的概率值之和等于父节点本身的概率值，那么走到最后，所有叶子节点的概率值之和必定还是等于1：

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

这也就保证了原始softmax概率和为1的前提，因此可以用层次sigmoid去代替softmax函数。

Loss函数定义为：

$$E = -\log p(w = w_O | w_I) = -\sum_{j=1}^{L(w)-1} \log \sigma([\![\cdot]\!] {\mathbf{v}'_j}^T \mathbf{h})$$

极大化目标单词的路径概率。

现在我们重新定义v'为：

$$\mathbf{v}'_j := \mathbf{v}'_{n_{w,j}}$$

那么对于W'，经过求导，v'更新公式为：

$$\mathbf{v}'^{(\text{new})}_j = \mathbf{v}'^{(\text{old})}_j - \eta\left(\sigma({\mathbf{v}'_j}^T \mathbf{h}) - t_j\right) \cdot \mathbf{h}$$

也就是说，这里只需要更新L(w)-1个v'向量，时间复杂度直接从O(V)降到了O(logV)。

关于空间复杂度，原始方法中每个单词需要一个v'向量，总共需要V个向量，而HS中每个节点也会有一个v'向量，总共需要V-1个向量，这些向量维度是一样的，并不会增加空间复杂度。

二. Negative Sampling

NS仅仅选择一小部分列向量进行更新，和HS相比，显得相对简单一点。

对于每条数据，首先我们将原始的V个词划分成正样本w_o和负样本w_neg，正样本也就是要预测的单词，剩下的就是负样本。负样本非常多，我们需要采样出K

我们需要对所有V个词进行softmax计算，现在对于我们只使用到了正样本和负样本，只针对这几个词进行计算，计算量可以大大减小。

负样本选取方式：

NS是一种概率采样的方式，可以根据词频进行随机抽样，我们倾向于选择词频比较大的负样本，比如"的"，这种词语其实是对我们的目标单词没有很大贡献的。

Word2vec则在词频基础上取了0.75次幂，减小词频之间差异过大所带来的影响，使得词频比较小的负样本也有机会被采到。

$$weight(w) = \frac{coun(w)^{0.75}}{\sum_u count(w)^{0.75}}$$

Loss函数定义为：

$$E = -\log \sigma(v'_{wO}\mathbf{h}) - \sum_{w_j \in \mathcal{W}_{neg}} \log \sigma(-v'_{w_j}\mathbf{h})$$

极大化正样本出现的概率，同时极小化负样本出现的概率，以sigmoid来代替softmax，相当于进行二分类，判断这个样本到底是不是正样本。

那么对于W'，经过求导，v'更新公式为：

$$\mathbf{v}'^{(\text{new})}_{w_j} = \mathbf{v}'^{(\text{old})}_{w_j} - \eta \left(\sigma(\mathbf{v}'^{T}_{w_j}\mathbf{h}) - t_j\right)\mathbf{h}$$

也就是说，这里不需要更新所有v'向量，只需要更新部分v'向量，这里的wj是正样本w_o和负样本w_neg的集合，只更新这些样本所对应的v'向量。

Part IV：衡量指标

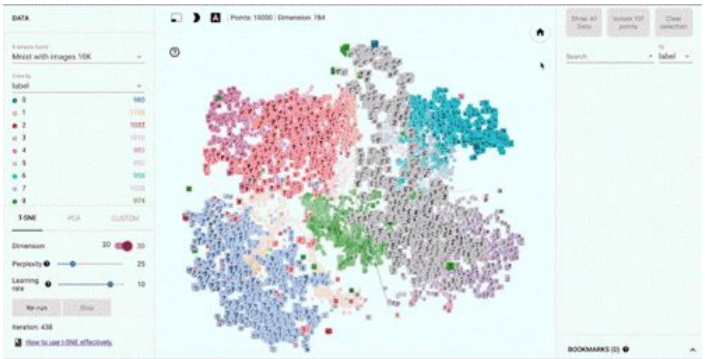
词向量的衡量指标通常有以下几种：

1）词汇相似度任务，比如wordsim353，但是这种方式比较依赖于数据集。

2）类比任务，比如男人-女人=国王-王后

3）应用于实际任务上的效果，比如文本分类，情感分析，句法分析，序列标注，阅读理解等等。这种方法我觉得是比较靠谱的，因为我们训练词向量是希望得到一个好的词向量，然后能在别的任务上work，

4）可视化，可以用谷歌的Embedding Projector工具，用 PCA、t-SNE对高维词向量进行可视化，把数据降到三维，以3D方式查看数据，感觉还挺好玩的。



发布于 2018-04-11