

Word2Vec

基于CBOW或者skip-gram来计算词向量矩阵，主要目的是为了得到词向量

中心词和上下文词用一个窗口来维护

词嵌入向量： $v = W \times onehot(v)$

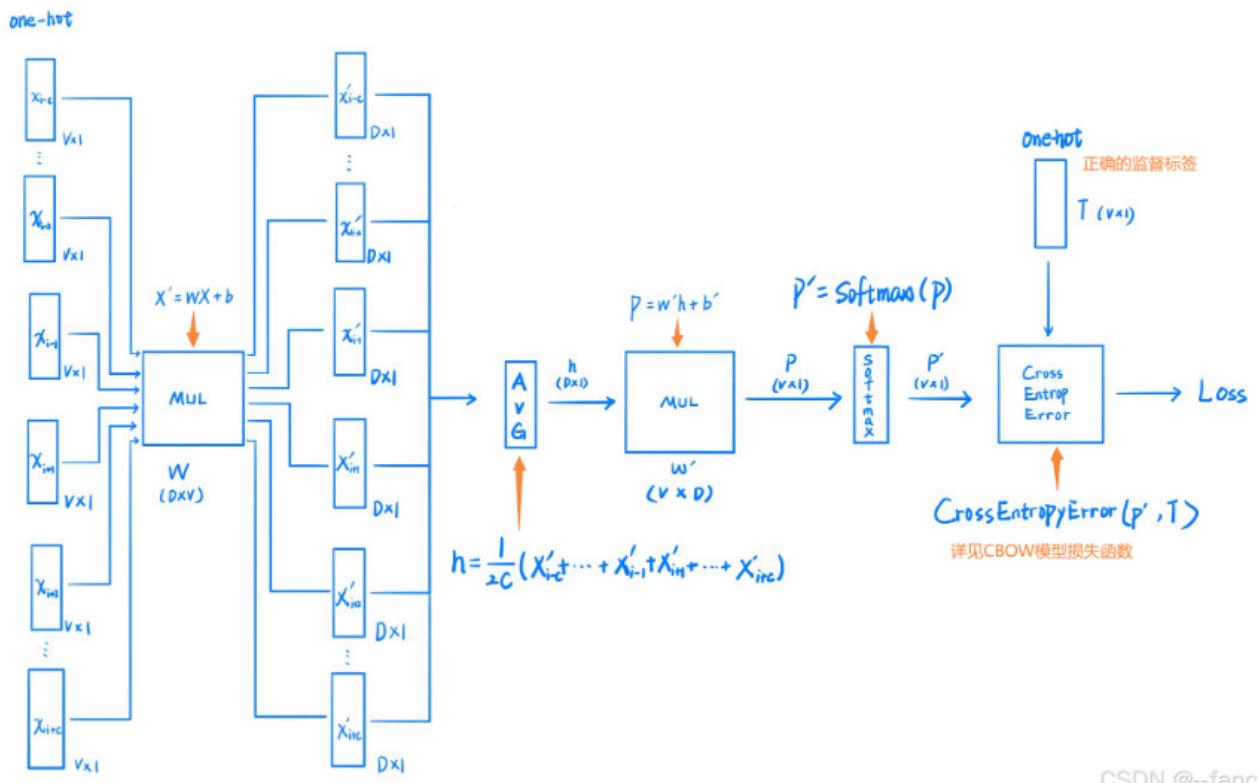
其中： W 是Word2Vec中的权重输入矩阵

CBOW

核心：用上下文词预测中心词

模型结构

输入是上下文文本单词的 one-hot 向量，通过线性变换压缩成一个单词向量，再通过一次线性变换得到一个单词得分表，最后经过多分类得到要预测的单词。



模型输入

上下文（输入）词的多少取决于窗口大小C，因此输入为 $X = (x_{i-C}, x_{i-C+1}, \dots, x_{i-1}, x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+C}) \in \mathbb{R}^{V \times 1}$ 其中， x_i 为目标单词， $x_i \in \mathbb{R}^{V \times 1}$

权重输入层

将目标单词 x_i 的单热编码与隐藏层的输入权重 W 相乘再加上偏置 $b \in \mathbb{R}^{D \times 1}$ 得到 x'_j ，即 $X'_j = WX_j + b$ ，写成矩阵形式 $X' = WX + b$ 其中 $X = [x_{i-C}, x_{i-C+1}, \dots, x_{i-1}, x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+C}]$ $X' = [x_{i-C}', x_{i-C+1}', \dots, x_{i-1}', x_i', x_{i+1}', \dots, x_{i+C}']$

加权平均层

将输入层得到的所有 X'_j 进行加权平均得到 $h = \frac{1}{2C} (x_{i-C}' + x_{i-C+1}' + \dots + x_{i-1}' + x_i' + x_{i+1}' + \dots + x_{i+C}')$

权重输出层

将得到的 h 作线性变换得到每个单词得分的向量 P ， $P = (P_1, P_2, \dots, P_V)^T$ ， $P_i \in R$ 表示为位置索引为 i 处的单词得分 $P = W'h + b'$

Softmax 层

将输出层得到的得分用 Softmax 处理为概率 P' ， $P' = (p'_1, p'_2, \dots, p'_V)$ ， p'_i 表示位置索引为 i 处的单词概率 $p'_i = \text{softmax}(p_i) = \frac{\exp(p_i)}{\sum_{k=1}^V \exp(p_k)}$ 模型的输出是在 P' 中取出最大概率对应位置的值设为 1，其他位置设为 0，得到一个单热编码。这个单热编码对应的词就是模型作为预测结果的词。

损失函数

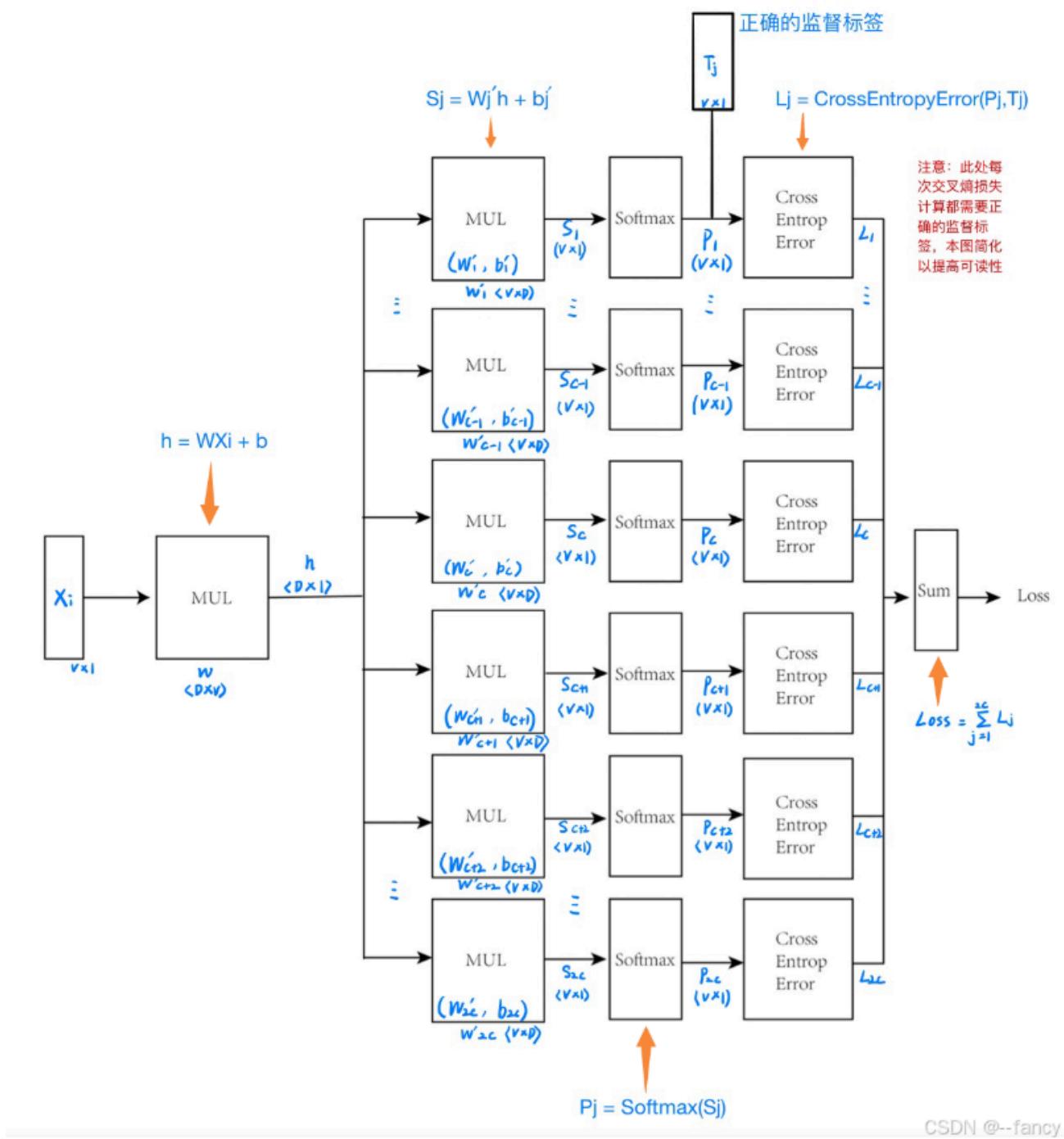
用的是交叉熵损失（Cross Entropy），交叉熵损失的输入是 Softmax 层计算得到的概率向量 P' 和正确的监督标签 T ，其中 $P' = (P'_1, P'_2, \dots, P'_V)^T$ ，正确的监督标签 $T = (t_1, t_2, \dots, t_V)$ 就是正确答案单词的单热编码。Loss = $-\sum_{i=1}^V t_i \log(P'_i)$

skip-gram

核心：用中心词预测上下文词

模型结构

模型输入时目标单词的单热编码，通过线性变换形成预测上下文单词的向量，再通过一次线性变换得到每一个上下文单词的得分表，最后经过多分类得到要预测的上下文单词。



模型输入

将目标词表示为单热编码，作为模型输入 $x_i \in \mathbb{R}^{V \times 1}$ ， i 表示目标单词所在位置

权重输入层

将目标词的单热编码 $x_i \in \mathbb{R}^{V \times 1}$ 作线性变换得到隐藏层向量 h $h = Wx_i + b$

权重输出层

将得到的 h 与隐藏层的权重输出矩阵 W'_j 相乘再加上偏置项 b'_j 得到多个上下文单词得分的向量 $S_j \in \mathbb{R}^{V \times 1}$, $S = (S_1, S_2, \dots, S_{2C})^T$ 。 $S_j = W_j h + b_j$

Softmax层

将输出层得到的得分 S_j 用softmax处理为概率 P_j ,

$$P_j = (P_j(0), P_j(1), \dots, P_j(V-1))^T \quad P_j(k) = \text{Softmax}(S_j) = \frac{\exp(S_j(k))}{\sum_{l=0}^{V-1} \exp(S_j(l))}$$

模型输出

模型输出是在 P 中取出最大概率对应位置的值设为1, 其他设为0, 得到一个单热编码, 这个单热编码对应的词就是预测上下文单词的结果。

损失函数

使用交叉熵损失 (Cross Entropy) 进行计算, 其输入是概率向量 $P_j(k)$, 和正确的监督标签 T , 其中 $P_j = (P_1, P_2, \dots, P_{2C})$, 正确的监督标签 $T_j = [t_j(1), t_j(2), \dots, t_j(V)]$ 是正确答案单词的单热编码。 $L_j = -\sum_{k=1}^V t_k \log(P_j(k))$ $\text{Loss} = \sum_{j=1}^{2C} L_j$

优化

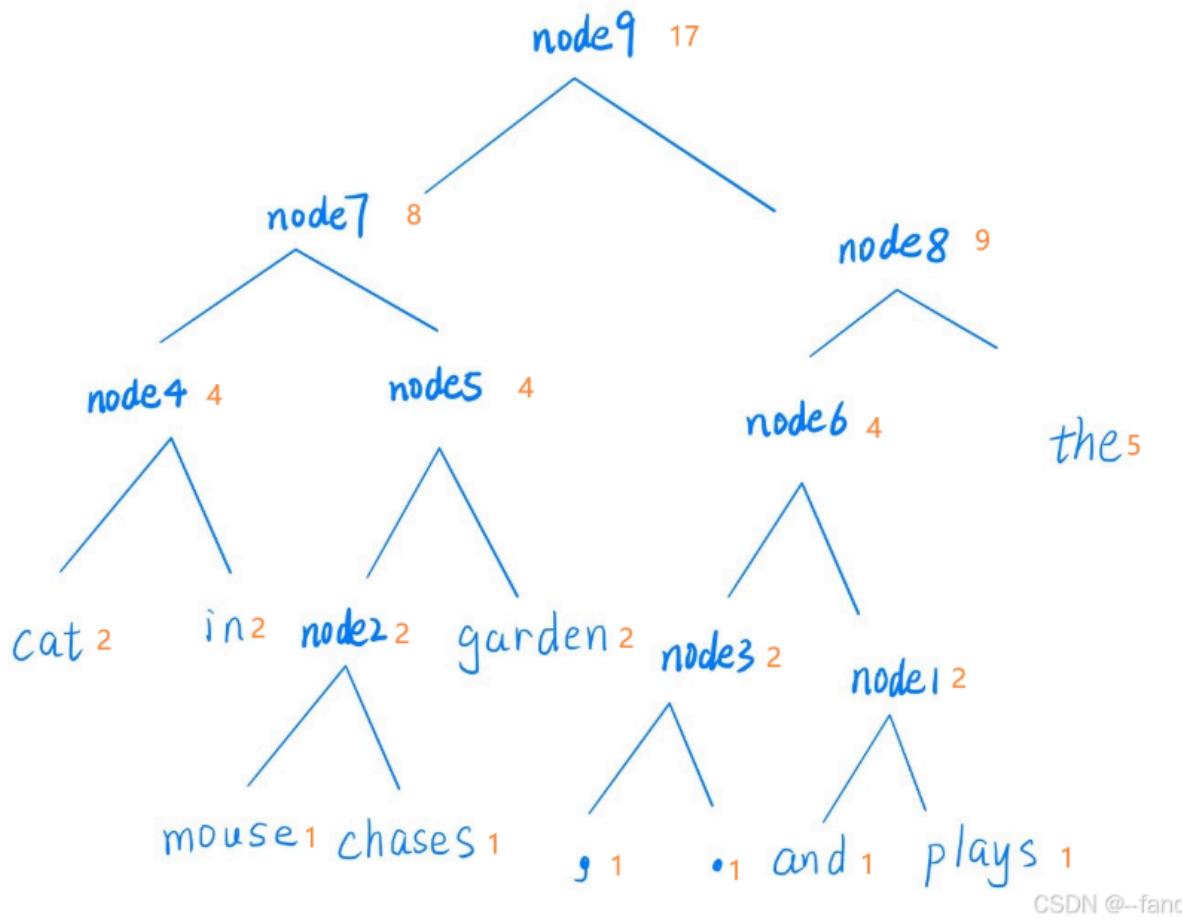
正常使用word2vec模型, 我们是要预测 V 个单词出现的概率, 但是语料库十分巨大, 这么做肯定不现实, 因此我们可以使用Huffman树来加速, 把运算次数压缩到 $\log V$ 。

分层Softmax

基本思想: 将词典中的每个词按照词频大小构建出一颗Huffman树, 词频大的词处于浅层, 词频小的词处于深层。

- 叶子节点都是词
- 非叶子节点具有要学习的参数, 是一个二分类器, 全部都接受相同的输入 (上下文向量)

如图所示:



CSDN @--fancy

计算概率的步骤：

1. 已知每个非叶子节点具有网络参数，可以用网络参数算出并使用softmax算出来一个概率值 P ，称为正向概率
2. 因为哈夫曼树是二叉树，知道一个分支的概率 P ，我们就可以算出另外一个分支的概率为 $1 - P$
3. 按上述步骤不断进行，我们就可以算出每个非叶子节点每个分支的概率
4. 根据上述算出来的值，可以通过概率连乘算出每个词的概率

负采样

正样本：真实有效的上下文本对，（中心词，上下文词）

负样本：从词汇表中随机选择一些不相关的词作为负样本。通过负样本来训练模型，使模型学习到区分正样本和负样本的能力

基本思想：通过从词汇表中随机选择一些“负样本”来代替计算所有可能的上下文词，从而大幅度降低计算复杂度。将多分类问题转化为二分类问题，让模型对正样本预测的概率逼近1，对负样本预测的概率逼近0。

损失函数

这里重点讲一下损失函数，因为前面的流程基本都差不多

正样本损失

我们可以知道 T_1 是正确的标签， $T_1 = (t_1, t_2, \dots, t_V)^T$, P 是每个单词对应的概率， $P = (P_1, P_2, \dots, P_V)$ ，在这里进行优化。在 T 中，只有正确索引位置为1，进行损失函数计算时，只保留正确索引位置单词的得分概率，因此我们将得分向量中正确的得分直接取出，即 $S_1 = (\theta_1 h)^T T_1$

随后直接将得分转换为概率，此处是二分类问题，用sigmoid函数，最后应用于Cross

Entropy $P_{-1} = \sigma(S_{-1}) = \sigma((\theta_{-1} h)^T T_{-1}) = \frac{1}{1+e^{-((\theta_{-1} h + b_{-1})^T T_{-1})}}$ $\text{Loss}_{+} = -\log(P_{-1}) = -\log(\frac{1}{1+e^{-((\theta_{-1} h + b_{-1})^T T_{-1})}})$ **负样本损失**

首先要进行**负采样**，按照词频给出每个单词的概率分布 $f(w) = \frac{[\text{count}(w)]^{1/\frac{3}{4}}}{\sum_{i=1}^V [\text{count}(i)]^{1/\frac{3}{4}}}$ 其中，**count(index)**计算索引位置为index位置单词的词频， w 表示目标单词的索引， V 为词汇表的大小。

接着按照**概率分布进行采样**，若抽取到正例则重新采样。数据量大，负样本个数 k 通常为5，数据量小，负样本个数通常为5~20个。

对于采样出的负样本，我们计算对应的得分之后将其取负号再使用**Sigmoid**函数，然后使用原来计算正样本的方式进行计算。

我们将负样本权重输出矩阵 θ_0 与隐藏层的向量 h 相乘得到单词得分向量，随后依次去除每个负样本对于索引位置单词的得分然后取负号 $S_{\{0,i\}} = -(\theta_{0h} + b_{0i})^T T_{\{0,i\}}$ 其中， $T_{0,i}$ 为负样本对应的标签，然后使用Sigmoid函数转换为概率 $P_{-1} = \sigma(S_{\{0,i\}})$ 使用交叉熵计算损失 $\text{Loss}_{-} = \sum_{i=1}^k \log(P_{\{0,i\}})$ 最后将 Loss_{+} 与 Loss_{-} 相加得到总的损失 Loss $\text{Loss} = \text{Loss}_{-} + \text{Loss}_{+}$