

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： $v = W \times \text{one_hot}(v)$

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。

image-20250705224627824

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 $X = (x_{i-c}, x_{i-c+1}, \dots, x_{i-1}, x_{i+1}, \dots, x_{i+c}) \in \mathbb{R}^{V \times 2C}$ 其中， x_i 为目标单词， $x_i \in \mathbb{R}^V$

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 $X = [x_{i-c}, x_{i-c+1}, \dots, x_{i-1}, x_{i+1}, \dots, x_{i+c}]$ $X' = [x_{i-c}', x_{i-c+1}', \dots, x_{i-1}', x_{i+1}', \dots, x_{i+c}']$

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 $h = \sum_{j=i-C, j \neq i}^{i+C} \frac{1}{2C} (x_{i-c}' + x_{i-c+1}' + x_{i-1}' + x_{i+1}' + x_{i+c}')$

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 ， $P = (P_1, P_2, \dots, P_V)^T$ ， $P_i \in \mathbb{R}$ 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**。 $\text{Loss} = -\sum_{i=1}^V t_i \log(P_i')$

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**。

 image-20250705224657637

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

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_j ，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：



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 $P_1 = \sigma(S_1) = \sigma((\theta_1 h)^{T T_1}) = \frac{1}{1 + e^{-(\theta_1 h + b_1)^{T T_1}}}$ 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 $f(w) = \frac{[\text{count}(w)]^{\frac{3}{4}}}{\sum_{i=1}^V [\text{count}(i)]^{\frac{3}{4}}}$ 其中， $\text{count}(\text{index})$ 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 $S_{0,i} = -$

$(\theta_{0,i} h + b_0)^{T T_{0,i}}$ 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 $P_{0,i} = \sigma(S_{0,i})$ 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 $\text{Loss} = \text{Loss}_- + \text{Loss}_+$