# Continues Bag-of-words Model

\* 姓名: 管仁阳 学号:519021911058 邮箱: guanrenyang@sjtu.edu.cn

#### CBOW 模型 1

本部分简要介绍连续词袋(CBOW: Continues Bag-of-words)模型的提出的直觉,并推导 CBOW 模型正向传播与参数更新公式。1.1节从传统的单热(one-hot)词向量出发介绍了CBOW 模型的优势; 1.2节推导了 CBOW 模型正向计算公式; 1.3节运用反向传播算法推导了 CBOW 模 型的参数更新公式。其中公式推导主要参考文献 [1]。

#### 词向量 1.1

首先从最原始的词向量——单热词向量 (one-hot) 出发。假设词  $\omega_i$  的单热词向量为 x, 它的 长度为词表长度 V, 其中  $x_i = 1$  当且仅当  $\omega_i$  在词表中的索引为 i。但是单热词向量有几个主要 问题:

- 1. 单热向量未考虑不同词之间的联系。
- 2. 当词表大小 V 过大时会导致输入向量维度爆炸。

CBOW 模型的目的时通过机器学习方法学习出词  $\omega_I$  的词向量, 其中词向量的维度 N 为一 个可调的超参数值。CBOW 模型假设词  $\omega_i$  出现的概率依赖于其上下文中的 2k 个词、即

$$p^{\omega_i} = \hat{P}(\omega_i | \omega_{i-k}, \cdots, \omega_{i-1}, \omega_{i+1}, \cdots, \omega_{i+k})$$

CBOW 模型的任务就是根据上下文中的 C 个词预测当前词  $\omega_i$  出现的概率。

### 1.2 正向计算

首先考虑 CBOW 模型的最简情况——上下文中只包含一个词,换言之,词 x 出现的条件概 率只与上下文中的一个词 y 相关,即

$$p(x) = p(x|y) \tag{1}$$

假设词表长度为V,隐藏层大小为N,相邻层之间是全连接网络。网络的输入为单热向量, 即对于长度为词表长度 V 的输入向量  $[x_1, \dots, x_V]$  来说,只有一个元素是 1,其他元素都是 0。

输入层和隐藏层之间的权重矩阵为 $V \times N$ 维矩阵 $W \cdot W$ 的每一行为一个N维向量,可以将 其看作输入词的表征向量。如果输入词为  $\omega_I$ ,其单热词向量满足  $x_k = 1$  且对于  $k' \neq k$  有  $x_{k'} = 0$ , 那么

$$\boldsymbol{h} = \boldsymbol{W}^T \boldsymbol{x} = \boldsymbol{W}_{(k,\cdot)}^T := \boldsymbol{v}_{\omega_I}^T \tag{2}$$

本质上就是将权重矩阵 W 的第 k 行赋值给隐层向量 h,  $v_{\omega_I}^T$  是词  $\omega_I$  的表征。

对于上下文中含有多个词的 CBOW 模型来说, 假设  $\{x_1, x_2, \cdots, x_C\}$  是与当前词相关的 C 个 词的单热词向量,为了减小输入向量的维度,CBOW模型的输入是这C个单热向量的均值,这 本质上是对上下文中 C 个词的表征向量求平均,即

$$h = \frac{1}{C} \mathbf{W}^{T} (\mathbf{x}_{1} + \mathbf{x}_{2} + \dots + \mathbf{x}_{C})$$

$$= \frac{1}{C} (\mathbf{v}_{\omega_{1}} + \mathbf{v}_{\omega_{2}} + \dots + \mathbf{v}_{\omega_{C}})^{T}$$
(4)

$$= \frac{1}{C} (\boldsymbol{v}_{\omega_1} + \boldsymbol{v}_{\omega_2} + \dots + \boldsymbol{v}_{\omega_C})^T$$
(4)

$$= \boldsymbol{W}^T \bar{\boldsymbol{x}} \tag{5}$$

其中  $\bar{x}=\frac{1}{C}(x_1+x_2+\cdots+x_C)$ ,是多个输入单热向量的均值。隐藏层与输出层之间的权重矩阵  $W'=\{\omega'_{ij}\}$  是一个与 W 不同的  $N\times V$  维矩阵,由此可以得出输出层向量为

$$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{W}^{'T} \boldsymbol{h} \tag{6}$$

 $m{u}$  是一个长度为 V 的向量,其中任一个元素  $u_j$  表示词表中的词  $\omega_j$  的打分,可以通过下式计算  $u_j$ :

$$u_{j} = \mathbf{v}_{\omega_{i}}^{'T} \mathbf{h} \tag{7}$$

其中  $\mathbf{v}'_{\omega_j}$  为矩阵  $\mathbf{W}'$  的第 j 列。将  $\mathbf{u}$  输入一个对数线性分类器 softmax,得到给定输出词  $\omega_I$  的后验概率分布

$$p(\omega_j|\omega_I) = y_i = \frac{\exp(u_j)}{\sum_{j'=1}^V \exp(u_{j'})}$$
(8)

其中  $y_i$  是 V 维输出层向量 y 的第 j 个元素。最后我们使用矩阵形式总结正向计算过程

1. 输入层 → 隐藏层

$$\boldsymbol{h} = \frac{1}{C} \boldsymbol{W}^{T} (\boldsymbol{x}_{1} + \boldsymbol{x}_{2} + \dots + \boldsymbol{x}_{C})$$
(9)

2. 隐藏层 → 输出层

$$y = \operatorname{softmax}(\boldsymbol{u}) = \operatorname{softmax}(\boldsymbol{W}' T \boldsymbol{h})$$
(10)

### 1.3 参数更新

在上下文只包含一个词的最简 CBOW 模型中,对于一个训练样本来说,训练目标是最大化后验概率  $p(\omega_i|\omega_I)$ ,即给定输入上下文  $\omega_I$  的条件下观察到真实输出词  $\omega_O$  的条件概率( $\omega_O$  在词表中的索引为  $j^*$ )。

$$\max p(\omega_{O}|\omega_{I}) = \max y_{j^{*}}$$

$$= \max \log y_{j^{*}}$$

$$= u_{j^{*}} - \log \sum_{j'=1}^{V} \exp(u_{j'}) := -E$$
(11)

其中  $E = -\log p(\omega_O|\omega_I)$  是损失函数,训练的目标就是最小化 E;  $j^*$  是输出层的真实输出词的索引。

对于上下文中含有多个词的一般 CBOW 模型来说,假设上下文为  $\{\omega_{I,1},\omega_{I,2},\cdots,\omega_{I,C}\}$ ,则 损失函数变为

$$E = -\log p(\omega_O | \omega_{I,1}, \cdots, \omega_{I,C})$$

$$= -u_{j^*} + \log \sum_{j^*=1}^{V} \exp(u_{j'})$$

$$= -\mathbf{v}_{\omega_O}^{'T} \cdot \mathbf{h} + \log \sum_{j'=1}^{V} \exp(\mathbf{v}_{\omega_j}^{'} \cdot \mathbf{h})$$
(12)

一般 CBOW 模型的损失函数与公式 11一致,区别只在于 h 的计算方法不同。在具体推导前先给出 CBOW 模型的参数更新公式的矩阵形式

#### 1. 输入层 → 隐藏层

$$\mathbf{W}^{(new)} = \mathbf{W}^{(old)} - \frac{\eta}{C} (\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2 + \dots + \mathbf{x}_C) \mathbf{E} \mathbf{H}^T$$

$$= \mathbf{W}^{(old)} - \eta \ \bar{\mathbf{x}} \ \mathbf{E} \mathbf{H}^T$$
(13)

2. 隐藏层 → 输出层

$$\boldsymbol{W}'^{(new)} = \boldsymbol{W}'^{(old)} - \eta \, \boldsymbol{h} \boldsymbol{e}^{T} \tag{14}$$

### 1.3.1 隐藏层 → 输出层

在定义了损失函数以后,就可以利用反向传播算法推导出参数更新公式。首先计算 E 对输出层第 j 的元素  $u_i$  的偏导数

$$\frac{\partial E}{\partial u_j} = y_j - t_j := e_j \tag{15}$$

其中 t 也是一个长度为词表长度 V 的向量,满足  $t_j=\mathbf{1}(j=j^*)$ ,即  $t_j=1$  当且仅当词表中第 j 个词是要预测的真实标签,其余位置都有  $t_{j'}|_{j'\neq j}=0$ ;  $e_j=y_j-t_j$  是输出层的预测误差。

接下来计算 E 对  $\omega'_{ij}$  的偏导数,就可以得到隐藏层到输出层的权重的梯度

$$\frac{\partial E}{\partial \omega'_{ij}} = \frac{\partial E}{\partial u_j} \cdot \frac{\partial u_j}{\partial \omega'_{ij}} = e_j \cdot h_i \tag{16}$$

使用梯度下降法(SGD)可以得到隐藏层到输出层之间的参数更新公式

$$\omega_{i,j}^{'(new)} = \omega_{ij}^{'(old)} - \eta \cdot e_j \cdot h_i. \tag{17}$$

其中  $\eta$  是学习率,满足  $\eta > 0$ ;  $e_j = y_j - t_j$ ;  $h_i$  是隐藏层向量 h 的第 i 个元素。

### 1.3.2 输入层 → 隐藏层

再得到权重矩阵 W' 的更新公式以后就要可以推导 W 的更新方程。首先求 E 对隐层向量  $\boldsymbol{h}$  的偏导数

$$\frac{\partial E}{\partial h_i} = \sum_{j=1}^{V} \frac{\partial E}{\partial u_j} \cdot \frac{\partial u_j}{\partial h_i} = \sum_{j=1}^{V} e_j \cdot \omega'_{ij} := EH_i$$
(18)

其中  $h_i$  为隐藏层的第 i 个元素; $u_j$  是输出层的第 j 个元素; $e_j = y_j - t_j$  是输出层第 j 个词的预测误差;N 维向量 EH 是词表中所有词的输出向量对预测误差的加权和。

下面计算 E 对输入层到隐藏层的参数  $oldsymbol{W}$ 。首先将公式 3展开为

$$h_i = \sum_{k=1}^{V} \bar{x}_k \cdot \omega_{ki} \tag{19}$$

那么 E 对 W 的偏导数为

$$\frac{\partial E}{\partial \omega_{ki}} = \frac{\partial E}{\partial h_i} \cdot \frac{\partial h_i}{\partial \omega_{ki}} = EH_i \cdot \bar{x}_k$$
 (20)

将上式用矩阵表示即为

$$\frac{\partial E}{\partial \mathbf{W}} = \bar{\mathbf{x}} \mathbf{E} \mathbf{H}^T \tag{21}$$

由此可以得到一个维度为  $V \times N$  的权重矩阵。由于 x 中只有 C 个元素非零, $\frac{\partial E}{\partial w}$  中只有 C 行非零,我们也就可以得到更新权重更新公式

$$\boldsymbol{v}_{\omega_I}^{(new)} = \boldsymbol{v}_{\omega_I}^{(old)} - \eta \mathbf{E} \mathbf{H}^T \tag{22}$$

或写成矩阵形式

$$\boldsymbol{W}^{(new)} = \boldsymbol{W}^{(old)} - \eta \bar{\boldsymbol{x}} EH^{T}$$
(23)

## 2 代码实现

这部分首先给出一次迭代的所有代码,如图 1所示。接下来逐个行解释 train\_one\_epoch 函数的实现方式

#### Line

- 69 根据上下文词列表 vocab 为每个词创建对应的单热向量,并求这些单热向量的和值 x bar)。
- 71 将真实标签转化为单热向量,亦即计算在公式 15中首次提出的向量 t。
- 74 输入层 → 隐藏层正向计算,根据公式 9。
- 75 隐藏层 → 输出层正向计算,根据公式 10,得到词表中每个词的分数值 u, u 在公式 6 中定义。
- 79 softmax 分类器,根据公式 8。
- 80 计算损失函数,根据公式12。
- 83 计算预测误差 e, e 在公式 15中定义。
- 84 计算输出向量对预测误差的加权和 EH, 根据公式 18。
- 86 隐藏层 → 输出层参数更新,根据公式 14。
- 87 输入层 → 隐藏层参数更新,根据公式 13。

```
58
                        def train_one_step(self, context_tokens: List[str], target_token: str, learning_rate: float) -> float:
59
60
                                   Predict the probability of the target token given context tokens.
61
                                   :param context_tokens: List of tokens around the target token
62
63
                                   :param target_token:
                                                                                                Target (center) token
                                   :param learning_rate: Learning rate of each step
65
                                                               loss of the target token
66
67
                                  # ==== TODO: Construct one-hot vectors ====
68
                                  # average of one hot vectors of `context tokens`
                                   x\_bar = (sum([one\_hot(len(self.vocab), self.vocab.token\_to\_idx(item)) \ for \ item \ in \ context\_tokens])).reshape(-1, 1) \# (V,1) + (V,1) +
69
 70
71
                                  t = one_hot(len(self.vocab), self.vocab.token_to_idx(target_token)).reshape(-1, 1) # (V,1)
72
                                  # ==== TODO: Forward step ====
73
                                  h = (self.W1.transpose() @ x_bar)/len(context_tokens) # (N,1)
74
75
                                   u = self.W2.transpose() @ h # (V,1)
76
77
                                   # ==== TODO: Calculate loss ====
                                   # prediction
78
79
                                   y = softmax(u) # (V,1)
80
                                   loss = -np.log(softmax(u))[t==1].squeeze() #(V,1)
81
                                   # ==== TODO: Update parameters ====
82
                                  e = y - t
83
                                   eh = self.W2 @ e # (N,1)
84
85
                                   #update
                                   self.W2 = self.W2 - learning_rate * (h @ e.transpose())
87
                                   self.W1 = self.W1 - learning_rate / len(context_tokens) * (x_bar @ eh.transpose())
88
                                   return loss
89
```

图 1: train\_one\_epoch 函数

# 3 输出结果

图 4: 全输出-2

如上代码可以通过全部三个测试点,如图 2、图 3和图 4所示。程序所有的输出截图见图 5和 6。

# 参考文献

[1] Rong X. word2vec parameter learning explained[J]. arXiv preprint arXiv:1411.2738, 2014.

```
Token number: 50
Vocab size: 21
Epoch 1, loss: 2.96. Cost 0.0 min
Epoch 2, loss: 1.99. Cost 0.0 min
Epoch 3, loss: 1.46. Cost 0.0 min
Epoch 4, loss: 1.16. Cost 0.0 min
Epoch 5, loss: 0.94. Cost 0.0 min
Epoch 6, loss: 0.82. Cost 0.0 min
Epoch 7, loss: 0.74. Cost 0.0 min
Epoch 8, loss: 0.70. Cost 0.0 min
Epoch 8, loss: 0.70. Cost 0.0 min
Epoch 9, loss: 0.70. Cost 0.0 min
Epoch 9, loss: 0.90. Cost 0.0 min
Epoch 10, loss: 1.90. Cost 0.0 min
          Epoch 10, 105s: 1.09. Cost 0.0 min [('i', 1.0), ('he', 0.9871080376153758), ('she', 0.7916710150878791), ('read', 0.5932057410388837), ('to', 0.5617052163933 728)] [('he', 1.0), ('i', 0.9871080376153758), ('she', 0.7600563117313509), ('to', 0.623695923064896), ('read', 0.56640937331277 29)] [('she', 1.00000000000000002), ('now', 0.9166363811901018), ('i', 0.7916710150878791), ('he', 0.7600563117313509), ('will', 0.721775418093175)]
          Test-1 pass :)
Token number: 205068
Vocab Size: 17832
Step: 19000. Avg. loss: 9.85
Step: 20000. Avg. loss: 9.80
Step: 30000. Avg. loss: 9.69
Step: 30000. Avg. loss: 9.53
Step: 50000. Avg. loss: 9.53
Step: 50000. Avg. loss: 9.42
Step: 6000. Avg. loss: 9.20
Step: 80000. Avg. loss: 9.20
Step: 80000. Avg. loss: 9.12
Step: 90000. Avg. loss: 9.12
Step: 90000. Avg. loss: 9.12
Step: 100000. Avg. loss: 9.12
Step: 100000. Avg. loss: 8.97
Step: 110000. Avg. loss: 8.97
Step: 120000. Avg. loss: 8.86
Step: 120000. Avg. loss: 8.87
Step: 120000. Avg. loss: 8.73
Step: 140000. Avg. loss: 8.73
Step: 150000. Avg. loss: 8.73
Step: 190000. Avg. loss: 8.73
Step: 190000. Avg. loss: 8.65
Step: 130000. Avg. loss: 8.65
Step: 130000. Avg. loss: 8.65
Step: 130000. Avg. loss: 8.55
Epoch 1, loss: 8.54. Cost 24.7 min Save model to ckpt
Step: 20000. Avg. loss: 7.83
Step: 20000. Avg. loss: 7.83
Step: 50000. Avg. loss: 7.85
Step: 40000. Avg. loss: 7.85
Step: 40000. Avg. loss: 7.85
Step: 90000. Avg. loss: 7.85
Step: 90000. Avg. loss: 7.80
Step: 90000. Avg. loss: 7.80
Step: 90000. Avg. loss: 7.75
Step: 110000. Avg. loss: 7.75
Step: 120000. Avg. loss: 7.75
Step: 120000. Avg. loss: 7.75
Step: 110000. Avg. loss: 7.77
Step: 120000. Avg. loss: 7.77
Step: 120000. Avg. loss: 7.75
Step: 130000. Avg. loss: 7.75
Step: 140000. Avg. loss: 7.75
Step: 140000. Avg. loss: 7.75
Step: 150000. Avg. loss:
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         英世
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   сн 🧐
     Step: 40000. Avg. loss: 7.51
step: 50000. Avg. loss: 7.53
step: 60000. Avg. loss: 7.53
step: 60000. Avg. loss: 7.51
step: 80000. Avg. loss: 7.51
step: 90000. Avg. loss: 7.51
step: 90000. Avg. loss: 7.51
step: 90000. Avg. loss: 7.50
step: 100000. Avg. loss: 7.49
step: 110000. Avg. loss: 7.49
step: 110000. Avg. loss: 7.48
step: 130000. Avg. loss: 7.48
step: 130000. Avg. loss: 7.48
step: 150000. Avg. loss: 7.48
step: 150000. Avg. loss: 7.48
step: 160000. Avg. loss: 7.48
step: 160000. Avg. loss: 7.47
step: 180000. Avg. loss: 7.36
step: 100000. Avg. loss: 7.36
step: 10000. Avg. loss: 7.36
step: 60000. Avg. loss: 7.36
step: 60000. Avg. loss: 7.34
step: 10000. Avg. loss: 7.35
step: 10000. Avg. loss: 7.34
step: 10000. Avg. loss: 7.35
step: 10000. Avg. loss: 7.34
step: 10000. Avg. loss: 7.33
step: 120000. Avg. loss: 7.33
step: 120000. Avg. loss: 7.33
step: 190000. Avg. loss: 7.32
step: 190000. Avg. loss: 7.33
step: 190000. Avg. loss: 7.32
step: 190000. Avg. loss: 7.32
step: 190000. Avg. loss: 7.33
step: 190000. Avg. loss: 7.33
step: 190000. Avg. loss: 7.33
```

```
Epoch 4, loss: 7.32. Cost 19.7 min Save model to ckpt
Step: 10000. Avg. loss: 7.20
Step: 20000. Avg. loss: 7.26
Step: 30000. Avg. loss: 7.25
Step: 40000. Avg. loss: 7.25
Step: 50000. Avg. loss: 7.24
Step: 60000. Avg. loss: 7.24
Step: 60000. Avg. loss: 7.24
Step: 7000. Avg. loss: 7.23
Step: 80000. Avg. loss: 7.23
Step: 90000. Avg. loss: 7.23
Step: 90000. Avg. loss: 7.23
Step: 100000. Avg. loss: 7.23
Step: 100000. Avg. loss: 7.23
Step: 100000. Avg. loss: 7.23
               Step: 80000. AVg. 10SS: 7.23
Step: 100000. AVg. 10SS: 7.23
Step: 100000. AVg. 10SS: 7.22
Step: 1100000. AVg. 10SS: 7.22
Step: 120000. AVg. 10SS: 7.22
Step: 120000. AVg. 10SS: 7.22
Step: 130000. AVg. 10SS: 7.22
Step: 130000. AVg. 10SS: 7.22
Step: 150000. AVg. 10SS: 7.22
Step: 150000. AVg. 10SS: 7.22
Step: 190000. AVg. 10SS: 7.13
Step: 10000. AVg. 10SS: 7.11
Step: 20000. AVg. 10SS: 7.16
Step: 30000. AVg. 10SS: 7.16
Step: 60000. AVg. 10SS: 7.16
Step: 10000. AVg. 10SS: 7.14
Step: 10000. AVg. 10SS: 7.14
Step: 30000. Apr. Joss: 7.16
Step: 30000. Apr. Joss: 7.14
Step: 300000. Apr. Joss: 7.16
Step: 300000. Apr. Joss: 7.17
S
                          Test-2 pass :)
                          Load model from ckpt
                          Test-3 pass :)
```

图 6: 全输出-2