# Radiale-Basisfunktionen-Netze mit Mahalanobis-Abstand

Wird in den Neuronen der versteckten Schicht eines Radiale-Basisfunktionen-Netzes der Mahalanobis-Abstand verwendet (siehe Abschnitt 5.5), ist die Netzeingabe dieser Neuronen also

$$\mathrm{net}_v^{(l)} = d\left(\vec{w}_v, \vec{\mathrm{in}}_v^{(l)}\right) = \sqrt{\left(\vec{w}_v - \vec{\mathrm{in}}_v^{(l)}\right)^\top \mathbf{\Sigma}_v^{-1} \left(\vec{w}_v - \vec{\mathrm{in}}_v^{(l)}\right)}$$

mit einer Kovarianzmatrix $\mathbf{\Sigma}_v$, so erhält man für die Ableitung der Netzeingabe nach den Gewichten der Verbindungen von der Eingabeschicht zur versteckten Schicht

$$\begin{aligned}
\frac{\partial\, \mathrm{net}_v^{(l)}}{\partial \vec{w}_v} &= \frac{1}{2}\left(\left(\vec{w}_v - \vec{\mathrm{in}}_v^{(l)}\right)^\top \mathbf{\Sigma}_v^{-1} \left(\vec{w}_v - \vec{\mathrm{in}}_v^{(l)}\right)\right)^{-\frac{1}{2}} \\
&\quad \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{w}_v} \left(\vec{w}_v - \vec{\mathrm{in}}_v^{(l)}\right)^\top \mathbf{\Sigma}_v^{-1} \left(\vec{w}_v - \vec{\mathrm{in}}_v^{(l)}\right) \\
&= \frac{1}{2\,\mathrm{net}_v^{(l)}} \left(\mathbf{\Sigma}_v^{-1} + \mathbf{\Sigma}_v^{-1\,\top}\right) \left(\vec{w}_v - \vec{\mathrm{in}}_v^{(l)}\right) \\
&= \frac{1}{\mathrm{net}_v^{(l)}}\, \mathbf{\Sigma}_v^{-1} \left(\vec{w}_v - \vec{\mathrm{in}}_v^{(l)}\right).
\end{aligned}$$

(Einige Rechenregeln zur Differentation von Matrix-Vektor-Ausdrücken findet man im erweiterten Anhang zur Regression, und zwar bei der allgemeinen Ableitung zur multilinearen Regression. Man beachte außerdem, daß die Kovarianzmatrix $\mathbf{\Sigma}_v$ symmetrisch ist und daher mit ihrer Transponierten $\mathbf{\Sigma}_v^\top$ übereinstimmt, was sich auch auf ihre Inverse $\mathbf{\Sigma}_v^{-1}$ überträgt, d.h., es ist $\mathbf{\Sigma}_v^{-1\,\top} = \mathbf{\Sigma}_v^{-1}$.) Die Ableitung der Ausgabe nach der Netzeingabe bleibt i.w. unverändert, allerdings ist zu beachten, daß der Referenzradius der radialen Funktion als schon in der Kovarianzmatrix $\mathbf{\Sigma}_v$ enthalten gesehen werden kann.[1] Man erhält daher für eine Gaußsche Funktion

$$\frac{\partial\, \mathrm{out}_v^{(l)}}{\partial\, \mathrm{net}_v^{(l)}} = \frac{\partial f_{\mathrm{act}}\left(\mathrm{net}_v^{(l)}\right)}{\partial\, \mathrm{net}_v^{(l)}} = \frac{\partial}{\partial\, \mathrm{net}_v^{(l)}}\, e^{-\frac{\left(\mathrm{net}_v^{(l)}\right)^2}{2}} = -\,\mathrm{net}_v^{(l)}\, e^{-\frac{\left(\mathrm{net}_v^{(l)}\right)^2}{2}}.$$

[1] Alternativ kann man die Kovarianzmatrix auf Determinante 1 normieren und explizit einen Referenzradius angeben, doch führt dies zu technischen Schwierigkeiten bei der Ableitung der Änderungen der Kovarianzmatrix, da die Normierungsbedingung eine unangenehme Randbedingung ist, die man besser vermeidet.

Statt der Änderung des Referenzradius $\sigma_v$ ist nun die Änderung der Kovarianzmatrix $\mathbf{\Sigma}_v$ zu bestimmen, die sowohl Größe als auch Form der radialen Basisfunktion beschreibt. Angenehmer ist es jedoch, direkt die Änderung ihrer Inversen $\mathbf{\Sigma}_v^{-1}$ zu bestimmen, d.h., wir berechnen

$$\Delta \mathbf{\Sigma}_v^{-1(l)} = -\frac{\eta_2}{2} \frac{\partial e^{(l)}}{\partial \mathbf{\Sigma}_v^{-1}} = \eta_2 \sum_{s \in \mathrm{succ}(v)} \left( o_s^{(l)} - \mathrm{out}_s^{(l)} \right) w_{sv} \frac{\partial\, \mathrm{out}_v^{(l)}}{\partial \mathbf{\Sigma}_v^{-1}},$$

wobei die Ableitung einer Größe nach einer $n \times n$-Matrix $\mathbf{A}$, d.h.

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{A}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial a_{11}} & \cdots & \frac{\partial}{\partial a_{1n}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial}{\partial a_{n1}} & \cdots & \frac{\partial}{\partial a_{nn}} \end{pmatrix} \qquad \text{mit} \qquad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix},$$

analog zur Ableitung nach einem Vektor definiert ist.

Da die inverse Kovarianzmatrix $\mathbf{\Sigma}_v^{-1}$ nur über die Netzeingabe Einfluß auf die Ausgabe hat, können wir die Kettenregel anwenden und erhalten

$$\frac{\partial e^{(l)}}{\partial \mathbf{\Sigma}_v^{-1}} = -2 \sum_{s \in \mathrm{succ}(v)} \left( o_s^{(l)} - \mathrm{out}_s^{(l)} \right) w_{su} \frac{\partial\, \mathrm{out}_v^{(l)}}{\partial\, \mathrm{net}_v^{(l)}} \frac{\partial\, \mathrm{net}_v^{(l)}}{\partial \mathbf{\Sigma}_v^{-1}}.$$

Die Ableitung der Ausgabe nach der Netzeingabe haben wir bereits oben für eine Gaußsche Funktion angegeben. Für die Ableitung der Netzeingabe nach der inversen Kovarianzmatrix $\mathbf{\Sigma}_v^{-1}$ ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{\partial\, \mathrm{net}_v^{(l)}}{\partial \mathbf{\Sigma}_v^{-1}} &= \frac{1}{2} \left( \left( \vec{w}_v - \vec{\mathrm{in}}_v^{(l)} \right)^\top \mathbf{\Sigma}_v^{-1} \left( \vec{w}_v - \vec{\mathrm{in}}_v^{(l)} \right) \right)^{-\frac{1}{2}} \\ &\quad \cdot 2 \frac{\partial}{\partial \mathbf{\Sigma}_v^{-1}} \left( \vec{w}_v - \vec{\mathrm{in}}_v^{(l)} \right)^\top \mathbf{\Sigma}_v^{-1} \left( \vec{w}_v - \vec{\mathrm{in}}_v^{(l)} \right) \\ &= \frac{1}{\mathrm{net}_v^{(l)}} \left( \vec{w}_v - \vec{\mathrm{in}}_v^{(l)} \right) \left( \vec{w}_v - \vec{\mathrm{in}}_v^{(l)} \right)^\top. \end{aligned}$$

Die in dieser Ableitung verwendete Beziehung

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{A}} \vec{x}^\top \mathbf{A} \vec{x} = \vec{x} \vec{x}^\top$$

erhält man leicht, indem man die Einzelableitungen nach den Matrizenelementen bildet, also

$$\frac{\partial}{\partial m_{ij}} \vec{x}^\top \mathbf{A} \vec{x} = \frac{\partial}{\partial a_{ij}} \sum_{\mu=1}^{n} \sum_{\nu=1}^{n} x_\mu a_{\mu\nu} x_\nu = \frac{\partial}{\partial m_{ij}} x_i a_{ij} x_j = x_i x_j.$$