



ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská



Robustní strojové učení a adversariální vzorky

Robust machine learning and adversarial examples

Bakalářská práce

Autor: **Pavel Jakš**
Vedoucí práce: **Mgr. Lukáš Adam, Ph.D.**
Akademický rok: 2021/2022

- Zadání práce -

- Zadání práce (zadní strana) -

Poděkování:

Chtěl bych zde poděkovat především svému školiteli - panu doktoru Adamovi - za pečlivost, ochotu, vstřícnost a odborné i lidské zázemí při vedení mé bakalářské práce.

Čestné prohlášení:

Prohlašuji, že jsem tuto práci vypracoval samostatně a uvedl jsem všechnu použitou literaturu.

V Praze dne 7. července 2022

Pavel Jakš

Robustní strojové učení a adversariální vzorky

Obor: Matematická informatika

Vedoucí práce: Mgr. Lukáš Adam, Ph.D., Katedra počítačů, Fakulta elektrotechnická, České vysoké učení technické v Praze, Karlovo náměstí 13, 121 35, Praha 2

[illegible]

Klíčová slova: klíčová slova (nebo výrazy) seřazená podle abecedy a oddělená čárkou

Robust machine learning and adversarial examples

[illegible]

Key words: keywords in alphabetical order separated by commas

Obsah

Úvod	11
1 Neuronové sítě	13
1.1 Hluboká dopředná neuronová síť	13
1.2 Konvoluční sítě	14
2 Učení neuronové sítě	17
2.1 Účelové funkce	17
2.2 Algoritmus zpětného šíření chyby	18
2.3 Algoritmy učení	19
2.4 Stochastické algoritmy učení	21
3 Adversariální vzorky	23
3.1 Metody generování adversariálních vzorků	23
4 Robustní učení neuronové sítě	25
5 Srovnání algoritmů učení	27
5.1 Kritérium srovnávání	27
5.2 Inicializace parametrů sítě a stochasticita algoritmu učení	27
5.3 Datová sada MNIST	27
5.4 Výsledky	28
Závěr	33

Úvod

Pojem neuronové sítě představuje výpočetní jednotku, která svou univerzálností nachází uplatnění v mnoha disciplínách.

Kapitola 1

Neuronové sítě

Princip fungování neuronové sítě spočívá v poskládání celku z dílčích výpočetních jednotek - umělých neuronů. Takovýto neuron je standardně funkcí více proměnných, jehož výstup je proměnná jediná. Typickým modelem umělého neuronu je funkce $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ definovaná předpisem

$$f(a_1, \dots, a_n) = \sigma\left(\sum_{i=1}^n w_i a_i + b\right), \quad (1.1)$$

kde n je počet vstupujících proměnných, w_i jsou tzv. váhy (w z anglického slova weight), b je práh (b z anglického slova bias), σ označuje tzv. aktivační funkci.

Roli vstupujících proměnných mohou hrát např. hodnoty RGB pixelů barevných obrázků, je-li aplikací klasifikace obrázků, nebo výstupy jiných neuronů. Pod pojmem váha se skrývá míra ovlivnění výstupu neuronu daným vstupem. Je-li váha u nějakého vstupu vysoká, pak je výstup citlivější na daný vstup. Prah pro změnu určuje posunutí citlivosti neuronu na všechny vstupy jako celku.

Poslední, avšak velmi důležitou charakteristikou tohoto modelu neuronu je aktivační funkce. Za aktivační funkci lze vzít libovolnou funkci $\sigma : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, existuje však základní sada:

- Sigmoid: $\sigma(z) = \frac{1}{1+e^{-z}}$,
- ReLU: $\sigma(z) = \max(0, z)$,
- LeakyReLU: $\sigma(z) = \max(0, z) + \alpha * \min(z, 0)$, kde $\alpha \in \mathbb{R}^+$,
- Tanh: $\sigma(z) = \tanh(z) = \frac{e^z - e^{-z}}{e^z + e^{-z}}$.

Tyto funkce lze doplnit o jejich mírné modifikace. Moderní doporučenou praxí je užívat ReLU jako aktivační funkci a (1.1) jako model neuronu dle [1].

1.1 Hluboká dopředná neuronová síť

Je-li pojem umělého neuronu objasněn, lze se přesunout k jeho užití v neuronových sítích. Základní myšlenkou těchto sítí je vhodné poskládání umělých neuronů do vrstev, které dohromady tvoří síť neuronů. Taková vrstva je potom trojího druhu - vstupní, výstupní a skrytá. *Vstupní vrstva* je množina umělých neuronů, které mají za vstup výstupy problému, jehož je neuronová síť řešením. Za vstup si lze představit matici černobílých pixelů, které představují obrázek číslice, kterou je cíl klasifikovat. *Výstupní vrstva* sestává z neuronů, které mají za vstup výstupy neuronů předchozí vrstvy. Výstupem této vrstvy pak bude řešení daného problému - například klasifikace číslice. Posledním druhem vrstvy je *vrstva*

skrytá. Takováto vrstva má za vstupy výstupy vrstvy předcházející a její výstupy slouží jako vstupy pro vrstvu nadcházející. Má-li neuronová síť tuto architekturu, hovoří se o *dopředné neuronové síti*. Má-li navíc alespoň jednu skrytou vrstvu, lze mluvit o *hluboké dopředné neuronové síti*.

Se znalostí pojmu vrstvy neuronů lze přistoupit k poznámce o tzv. *softmax funkci*. Jedná se o vektorovou funkci $s : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$, kde

$$s(a_1, \dots, a_m)_i = \frac{e^{a_i}}{\sum_{j=1}^m e^{a_j}},$$

kde $i \in \hat{m}$. Její užití je nasnadě: Výstup této funkce lze totiž interpretovat jako diskrétní pravděpodobnostní distribuci, a proto ji lze užít jako aktivační funkci výstupní vrstvy, je-li cílem dané neuronové sítě klasifikace vstupu do kategorií.

Další poznámka se bude věnovat zjednodušení zápisu akce vrstvy na vstup. Podle modelu neuronu v (1.1) se akce jednoho neuronu na vstup sestává z násobení, následného sčítání, přičtení prahu a aplikací aktivační funkce. Tato procedura nastává pro každý neuron ve vrstvě. Tak lze sestavit z jednotlivých vah $w_i^{(j)}$ (i -tá váha j -tého neuronu ve vrstvě) matici \mathbb{A} , jejímiž prvky jsou právě ony váhy $(\mathbb{A})_{j,i} = w_i^{(j)}$, z prahů pak vektor b , jehož j -tá složka je rovna prahu j -tého neuronu. Dále zavedeme vektorovou funkci $s : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$ - at' už jako výše zmíněnou softmax funkci, nebo jako po složkách aplikovanou libovolnou aktivační funkci σ ve smyslu $s(a_1, \dots, a_m)_i = \sigma(a_i)$ pro $i \in \hat{m}$. Pak lze psát, že aplikace vrstvy neuronů je zobrazení $\phi : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ působící na vektor a následovně:

$$\phi(a) = s(\mathbb{A}a + b). \quad (1.2)$$

Tedy stěžejní operací se stává maticové násobení, respektive násobení vektoru maticí zleva.

Při tomto si lze povšimnout, že takováto neuronová síť má řadu parametrů, o kterých není jasné jak je správně nastavit. Některé parametry (například váhy a prahy) se nastavují během učení neuronové sítě, čemuž je věnována samostatná kapitola. Potom tu jsou parametry, jejichž charakter je poněkud odlišný. Jedná se o ty parametry, které zůstávají během života neuronové sítě netknuté. Jako příklad lze uvést počet neuronů ve skryté vrstvě, který se promítne v rozměrech matice vah či dimenzionalitě výstupu vrstvy. Takovýmto parametrům je přisuzován název hyper-parametry.

1.2 Konvoluční síť

Konvoluční síť nebo též *konvoluční neuronové síť* přinášejí svou architekturou nové možnosti zpracování dat se specifickou strukturou, do které patří například časové řady, obrázky nebo videa. Středobodem konvolučních sítí je, jak již název napovídá, operace *konvoluce*. Ta nahrazuje maticové násobení, kterým lze reprezentovat operace ve výše popsaném modelu hluboké dopředné sítě.

Operace *konvoluce* je ve vší obecnosti operace mezi dvěma číselnými funkcemi g a h se stejným definičním oborem, jejíž výstupem je nová číselná funkce standardně označovaná jako $g * h$. Uvedme zde definici konvoluce pro reálné funkce definované na \mathbb{R}^d , tedy $g, h : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$:

$$(g * h)(t) = \int_{\mathbb{R}^d} g(\tau)h(t - \tau)d\tau.$$

Důležitým předpokladem pro možnost konvoluce je samozřejmě konvergence integrálu na pravé straně.

Ačkoliv je konvoluce komutativní operací, v kontextu strojového učení se mezi oběma funkcemi vstupujícími do konvoluce rozlišuje. Funkce vstupující jako první se nazývá vstup a druhá funkce se nazývá jádrem. Dále se v kontextu konvolučních sítí standardně objevují diskrétní funkce, které nabývají nenulových hodnot pouze v konečně mnoha bodech. Potom integrál přes \mathbb{R}^d přechází v konečnou sumu:

$$(g * h)(i_1, \dots, i_d) = \sum_{j_1} \dots \sum_{j_d} g(j_1, \dots, j_d)h(i_1 - j_1, \dots, i_d - j_d). \quad (1.3)$$

Díky komutativitě konvoluce lze též psát:

$$(g * h)(i_1, \dots, i_d) = \sum_{j_1} \dots \sum_{j_d} g(i_1 - j_1, \dots, i_d - j_d) h(j_1, \dots, j_d). \quad (1.4)$$

Při aplikaci komutativity došlo k tzv. *překlopení jádra* (termín pochází z anglického kernel flipping). Za vynechání překlopení jádra lze dojít ke *křížové korelaci*:

$$(g * h)(i_1, \dots, i_d) = \sum_{j_1} \dots \sum_{j_d} g(i_1 + j_1, \dots, i_d + j_d) h(j_1, \dots, j_d). \quad (1.5)$$

Mnoho knihoven zabývajících se neuronovými sítěmi dle [1] implementují křížovou korelaci namísto konvoluce, ačkoliv tuto svou implementaci nazývají konvolucí.

Další nedílnou součástí konvolučních sítí je tzv. *pooling*. Spolu s konvolucí tvoří mocný nástroj, který ve formě konvolučních a pooling vrstev hlubokých neuronových sítí přináší například invarianci sítě vůči malému posunutí vstupu (dle [1]).

Pooling je funkce, která nahrazuje hodnoty v bodech nějakou souhrnou statistikou určitého okolí daného bodu. Např. *max pooling* aplikovaný na matici se podívá na obdélníkové okolí předem definovaných rozměrů daného bodu a jako svůj výstup vybere maximální hodnotu nalezenou v onom okolí. Jiné oblíbené pooling funkce zahrnují funkce reportující průměr či L^2 normu daného obdelníkového okolí.

Standardní konvoluční vrstva neuronové sítě pak sestává ze tří fází. První fáze provádí paralelně několik konvolucí, které produkují sadu aktivací. Druhá fáze, někdy označovaná jako *detekční fáze*, aplikuje na výstupy první fáze aktivační funkci. Třetí fáze potom provádí *pooling*.

Kapitola 2

Učení neuronové sítě

Standardní přístup k *učení neuronové sítě*, což je termín, kterým se označuje vhodné nalezení parametrů neuronové sítě, je paradigma učení s učitelem. Tento pohled na učení neuronové sítě předpokládá existenci tzv. *trénovací sady dat* \mathbb{T} (angl. *training dataset*), což je uspořádaná dvojice obsahující množinu *vzorků* $\mathbb{X} = \{x^{(i)} | i \in \hat{N}\}$ a k nim příslušné *značky* $\mathbb{Y} = \{y^{(i)} | i \in \hat{N}\}$, kde pojem vzorek představuje vstup neuronové sítě jakožto zobrazení a pojem značka představuje správný výstup neuronové sítě; N je potom velikost trénovací sady \mathbb{T} . Trénovací sada pak hraje roli učitele.

2.1 Účelové funkce

Je-li pojem trénovací sady objasněn, lze přistoupit k termínu *účelové funkce* nebo též *ztrátové funkce*. Jedná se o reálnou funkci, která měří, jak moc se trénovaná neuronová síť mýlí ve svých predikcích na vzorcích trénovací sady. Úloha učení je potom převedena na úlohu optimalizace tohoto vhodně zvoleného kritéria.

Standardní účelová funkce je sestavena jako součet nebo průměr dílčích ztrát, které neuronová síť dosahuje na vzorcích trénovací sady:

$$J(\theta) = \sum_{i=1}^N L(F_{\theta}(x^{(i)}), y^{(i)}), \quad (2.1)$$

případně:

$$J(\theta) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N L(F_{\theta}(x^{(i)}), y^{(i)}), \quad (2.2)$$

kde $x^{(i)}$ je i -tý vektor trénovací sady, $y^{(i)}$ je i -tý vektor trénovacích značek, N je velikost trénovací sady, F_{θ} neuronová síť jakožto funkce $F_{\theta} : \text{Dom}_{F_{\theta}} \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ parametrizovaná parametry θ , L značí konkrétní ztrátu pro daný vzorek a J je celková účelová funkce. V tomto textu se držíme tvaru v (2.2).

Jedna z klasických účelových funkcí je funkce střední kvadratické chyby. Je dána přepisem:

$$J(\theta) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^m (F_{\theta}(x^{(i)})_j - y_j^{(i)})^2 \quad (2.3)$$

nebo

$$J(\theta) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \|F_{\theta}(x^{(i)}) - y^{(i)}\|_2^2, \quad (2.4)$$

kde $x^{(i)}$ je i -tý vektor trénovací sady, $y^{(i)}$ je i -tý vektor trénovacích značek, N je velikost trénovací sady, F_θ neuronová síť jakožto funkce $F_\theta : \text{Dom}_{F_\theta} \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ parametrizovaná parametry θ a $\|\cdot\|_2$ je L^2 norma.

Další účelová funkce, která nachází uplatnění v klasifikačních problémech, se vypočte pomocí křížové entropie:

$$J(\theta) = -\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N H(y^{(i)}, F_\theta(x^{(i)})), \quad (2.5)$$

kde H označuje právě onu křížovou entropii mezi pravděpodobnostními distribucemi. Připomeňme, že klasifikační neuronová síť produkuje diskrétní pravděpodobnostní distribuce, a proto lze na výstup takovéto neuronové sítě a její značky (také pravděpodobnostní distribuce) aplikovat křížovou entropii. Onen výraz v (2.5) lze spočítat následovně:

$$J(\theta) = -\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^m y_j^{(i)} \cdot \ln(F_\theta(x^{(i)})_j), \quad (2.6)$$

přičemž $x^{(i)}$ je i -tý vektor trénovací sady, $y^{(i)}$ je i -tý vektor trénovacích značek, N je velikost trénovací sady, F_θ neuronová síť jakožto funkce $F_\theta : \text{Dom}_{F_\theta} \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ parametrizovaná parametry θ .

2.2 Algoritmus zpětného šíření chyby

Nejčastější metody učení neuronové sítě ve svém chodu pracují s gradientem účelové funkce podle parametrů neuronové sítě $\nabla_\theta J(\theta)$, který lze spočítat pomocí *algoritmu zpětného šíření chyby* (angl. *backpropagation*). Tento algoritmus však lze použít nejen v takto úzce specializovaném prostředí strojového učení, nýbrž i pro výpočet Jacobiho matice libovolné funkce (dle [1]).

Pro celkový popis algoritmu zavedeme pojem *výpočetního grafu*. Necht' vrcholy grafu představují proměnné, a to libovolných rozměrů, hrany grafu necht' jsou barevné a orientované, kde barva značí jednu z prováděných operací a orientace značí, jaká proměnná vznikla ze které pomocí dané operace.

Pojem výpočetního grafu lze ilustrovat následujícím příkladem: Necht' proměnná u je číslo a proměnné v a w vektory stejných rozměrů a platí, že proměnnou u lze získat jako $u = v \cdot w$. Potom tomuto příkladu náleží výpočetní graf o třech vrcholech, a to vrcholech proměnných v , w a u , a dvou hranách - první z v do u o barvě odpovídající tomu býti prvním argumentem skalárního součinu a druhá z w do u o barvě odpovídající tomu býti druhým argumentem skalárního součinu.

Dále je zapotřebí uvést *řetězové pravidlo* pro výpočet derivace složené funkce, o které se algoritmus opírá. Necht' $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ a $h : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^p$, $a \in \mathbb{R}^n$, potom:

$$D(h \circ g)(a) = Dh(g(a)) \cdot Dg(a), \quad (2.7)$$

kde D značí totální diferenciál. Zúžíme-li se na $p = 1$, dostáváme:

$$\nabla(h \circ g)(a) = \nabla h(g(a)) \cdot Dg(a), \quad (2.8)$$

podíváme-li se na i -tou komponentu gradientu $h \circ g$:

$$\partial_i(h \circ g)(a) = \sum_{j=1}^m \partial_j h(g(a)) \cdot \partial_i g_j(a), \quad (2.9)$$

kde g_j značí j -tou komponentu vektorové funkce g .

Tedy jak lze vidět v (2.8), pro algoritmus bude stěžejní násobení vektoru gradientu s maticí totálního diferenciálu. Vrcholy výpočetního grafu jsou ovšem libovolných rozměrů. Potom lze dané proměnné urovnat do vektorů a spočítat gradient opět násobením vektoru gradientu s maticí totálního diferenciálu a následně převést vypočtený gradient zpět do příslušného tvaru.

Nyní lze nahlédnout na výpočet funkce jejíž gradient je žádoucí spočítat, například účelové funkce neuronové sítě, pomocí výpočetního grafu. Potom algoritmus zpětného šíření chyby postupuje po výpočetním grafu od výsledné proměnné k listovým vrcholům a aplikuje řetězové pravidlo.

V praxi je ovšem snadné natrefit na velmi složité výpočetní grafy, které vedou k vyhodnocování mnoha podvýrazů. Navíc mnoho takovýchto podvýrazů může být stejných. Při implementaci je tedy namísto otázka, zda již vyhodnocené výrazy uložit do paměti či je pokaždé vyhodnotit znovu. Je-li žádoucí co nejkratší doba běhu, pak je odpovědí vyhodnocené výrazy ukládat. Opačný přístup lze uplatnit při nedostatku paměti stroje.

2.3 Algoritmy učení

Základním algoritmem pro učení neuronové sítě je *gradientní sestup* (angl. *gradient descent*). Opírá se o fakt, že gradient reálné funkce určuje směr největšího spádu dané funkce v daném bodě. Proto, máme-li účelovou funkci $J(\theta)$, kde θ jsou parametry neuronové sítě, má smysl tyto parametry aktualizovat proti směru gradientu funkce J následujícím způsobem:

$$\theta \leftarrow \theta - \epsilon \cdot \nabla_{\theta} J(\theta), \quad (2.10)$$

kde ϵ je tzv. *řád učení* (angl. *learning rate*) - kladné číslo, které určuje velikost jednoho kroku; jedná se o další hyper-parametr neuronové sítě. Takovouto aktualizaci parametrů neuronové sítě lze provést několikrát, a to například tolikrát, dokud účelová funkce nedosáhne přijatelné hodnoty. Ideální by bylo, kdybychom gradientním sestupem dosáhli globálního minima účelové funkce, to ovšem není v žádném případě zaručeno, že se stane, gradientní sestup totiž dokáže nalézt pouze lokální minimum - ale to je pro reálné aplikace mnohdy dostačující.

Modifikací gradientního sestupu je tzv. *metoda hybnosti* [2]. Ta uvádí na scénu novou proměnnou - *rychlost* v (z angl. *velocity*), která je stejných rozměrů jako gradient účelové funkce a nese v sobě informaci o předchozích odhadech gradientu účelové funkce. Její role v algoritmu učení je následující:

$$v \leftarrow \alpha \cdot v - \epsilon \cdot \nabla_{\theta} J(\theta), \quad (2.11)$$

$$\theta \leftarrow \theta + v. \quad (2.12)$$

Užití hybnosti vede tedy k představení dalšího hyper-parametru, a to parametru $\alpha \in [0, 1)$, který určuje míru ovlivnění dalšího kroku předchozími odhady gradientu. Dle [1] jsou za hodnoty tohoto parametru nejčastěji volena čísla 0.5, 0.9 a 0.99.

Jinou modifikací gradientního sestupu, která je obdobou hybnosti, je *metoda Něstěrovovy hybnosti*. Ta má následující předpis iterace [3]:

$$v \leftarrow \alpha \cdot v - \epsilon \cdot \nabla_{\theta} J(\theta + \alpha \cdot v), \quad (2.13)$$

$$\theta \leftarrow \theta + v. \quad (2.14)$$

Existují další algoritmy, které pracují s proměnným řádem učení. Jedná se o *algoritmy s přizpůsobivým řádem učení*: *AdaGrad*, *RMSPProp* a *Adam*. Tyto algoritmy přizpůsobují řád učení jednotlivým parametrům zvlášť.

Algoritmus *AdaGrad* dle [4] přizpůsobuje řád učení každému parametru jednotlivě, a to jeho škálováním nepřímo úměrně druhé odmocnině součtu všech hodnot gradientu, jež danému parametru v průběhu

učení příslušel. To vede k tomu, že parametry, kterým přísluší velké hodnoty parciálních derivací účelové funkce, mají úměrně tomu rychlý úbytek v řádu učení, zatímco parametry, kterým přísluší malé hodnoty parciálních derivací účelové funkce, mají úměrně tomu pomalý úbytek v řádu učení. Celkový efekt tedy je, že se síť pohybuje rychleji ve směrech menšího spádu. Jedna iterace by potom mohla vypadat následovně:

$$g \leftarrow \nabla_{\theta} J(\theta), \quad (2.15)$$

$$r \leftarrow r + g \odot g, \quad (2.16)$$

$$\theta \leftarrow \theta - \frac{\epsilon}{\delta + \sqrt{r}} \odot g, \quad (2.17)$$

kde δ je malé číslo (např. 10^{-7}) pro numerickou stabilitu, \odot značí Hadamardův součin a výraz zlomku a odmocniny na třetím řádku je myšlen po složkách. Poznamenejme, že dle [6] algoritmus AdaGrad funguje dobře s řídkými gradienty.

Nevýhoda tohoto algoritmu ovšem je jeho paměť - v proměnné r si pamatuje velmi vzdálené hodnoty gradientu, což dle [1] mnohdy vede k předčasnému poklesu řádu učení. Proto je namístě uvést další algoritmus - *RMSPprop*. Tento algoritmus nahrazuje součet přes všechny hodnoty gradientu exponenciálně tlumeným váženým průměrem, a to způsobem, kde jedna iterace vypadá následovně [5]:

$$g \leftarrow \nabla_{\theta} J(\theta), \quad (2.18)$$

$$r \leftarrow \rho \cdot r + (1 - \rho) \cdot g \odot g, \quad (2.19)$$

$$\theta \leftarrow \theta - \frac{\epsilon}{\delta + \sqrt{r}} \odot g, \quad (2.20)$$

kde δ je malé číslo (např. 10^{-7}) pro numerickou stabilitu, \odot značí Hadamardův součin a výraz zlomku a odmocniny na třetím řádku je myšlen po složkách. Objevil se tu však nový hyper-parametr $\rho \in [0, 1)$ - *decay rate* (bez překladu).

Posledním představeným algoritmem je algoritmus *Adam*, který nese název z anglického *adaptive moments*, což přeloženo do češtiny zní jako přizpůsobivé momenty. V prvním přiblížení se jedná o kombinaci algoritmu RMSProp a metody hybnosti. Ve skutečnosti však je hybnost zakomponována již v následujícím, a to sice v odhadu prvního obecného momentu gradientu. Druhým aspektem, ve kterém se algoritmus liší od prostého RMSProp s hybností, jsou korekce pomocí prahu prováděné na odhadech prvního a druhého obecného momentu gradientu. Jedna iterace algoritmu vypadá [6]:

$$g \leftarrow \nabla_{\theta} J(\theta), \quad (2.21)$$

$$s \leftarrow \rho_1 \cdot s + (1 - \rho_1) \cdot g, \quad (2.22)$$

$$r \leftarrow \rho_2 \cdot r + (1 - \rho_2) \cdot g \odot g, \quad (2.23)$$

$$\hat{s} \leftarrow \frac{s}{1 - \rho_1^t}, \quad (2.24)$$

$$\hat{r} \leftarrow \frac{r}{1 - \rho_2^t}, \quad (2.25)$$

$$\theta \leftarrow \theta - \frac{\epsilon}{\delta + \sqrt{\hat{r}}} \odot \hat{s}, \quad (2.26)$$

kde δ je malé číslo (např. 10^{-7}) pro numerickou stabilitu, \odot značí Hadamardův součin, výraz zlomku a odmocniny na šestém řádku je myšlen po složkách, t je pořadí iterace a $\rho_1, \rho_2 \in [0, 1)$ jsou hyper-parametry nazvané *decay rate*.

2.4 Stochastické algoritmy učení

Výše zmíněné metody, jak je patrné z jejich předpisů, počítají gradient účelové funkce $\nabla_{\theta}J(\theta)$. Tento krok je ovšem velmi časově náročný, protože standardní trénovací sady mívají velmi mnoho vzorků. Při připomenutí (2.2) se výpočet sestává z N výpočtů dílčích gradientů:

$$\nabla_{\theta}J(\theta) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \nabla_{\theta}L(F_{\theta}(x^{(i)}), y^{(i)}), \quad (2.27)$$

kde $x^{(i)}$ je i -tý vektor trénovací sady, $y^{(i)}$ je i -tý vektor trénovacích značek, N je velikost trénovací sady, F_{θ} neuronová síť jakožto funkce $F_{\theta} : \text{Dom}_{F_{\theta}} \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ parametrizovaná parametry θ , L značí konkrétní ztrátu pro daný vzorek a J je celková účelová funkce.

Proto je doporučenou praxí dle [1] aproximovat gradient účelové funkce $\nabla_{\theta}J(\theta)$ pomocí výpočtu na tzv. *mini-dávce* (z angl. *mini-batch*). Jedná se v každém kroku gradientního sestupu nebo jeho modifikací o to, že se z trénovací sady rovnoměrně vybere $M \ll N$ vzorků gradient se odhadne pomocí výpočtu na těchto M vzorcích:

$$\nabla_{\theta}J(\theta) \approx \sum_{j=1}^M \nabla_{\theta}L(F_{\theta}(x^{(i_j)}), y^{(i_j)}), \quad (2.28)$$

kde $x^{(i)}$ je i -tý vektor trénovací sady, $y^{(i)}$ je i -tý vektor trénovacích značek, M je velikost mini-dávky, $i_j \sim U\{1, N\}$ jsou indexy vzorků vybraných do mini-dávky, F_{θ} je neuronová síť jakožto funkce $F_{\theta} : \text{Dom}_{F_{\theta}} \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ parametrizovaná parametry θ , L značí konkrétní ztrátu pro daný vzorek a J je celková účelová funkce.

Číslo M lze vybírat dle [1] v řádu jednotek až stovek. Při aplikaci této apřximace během standardního gradientního sestupu se algoritmu říká *stochastický gradientní sestup* (angl. *stochastic gradient descent*), ovšem tento úkrok stranou lze provést i v případě ostatních představených algoritmech, ty však pro svou stochastickou variantu nemají speciální název.

Kapitola 3

Adversariální vzorky

Szegedy a spol. [7] objevili zvláštní chování klasifikační neuronové sítě, které spočívá v nesprávné klasifikaci mírně pozmeněných vzorků trénovací sady neuronové sítě, kde ono mírné pozmenění nemění správnost příslušné značky. Zjištění lze formálně zapsat následovně:

$$(\exists x, y \in \mathbb{T})(\exists \Delta x \in \mathbb{R}^n, \|\Delta x\| < \kappa)(F_\theta(x) = y \wedge F_\theta(x + \Delta x) \neq y), \quad (3.1)$$

kde κ je malé číslo a $\|\cdot\|$ je L_p norma. Takovým vzorkům $\tilde{x} = x + \Delta x$ se říká *adversariální vzorky*.

Pro konkrétní vzorek x a příslušnou značku y definujeme množinu adversariálních vzorků jako

$$\tilde{\mathbb{X}}_x = \{\tilde{x} \in \mathbb{R}^n | F_\theta(\tilde{x}) \neq y \wedge \|\tilde{x} - x\| < \kappa\}. \quad (3.2)$$

Takto obecná definice adversariálních vzorků ovšem neposkytuje návod na jejich nalezení. Proto uveďme metody generování těchto adversariálních vzorků. Předtím ovšem pojmenujme neuronovou síť, která je terčem adversariálního útoku, jako *oběť* (angl. *victim*), dále pojmenujme strůjce takového adversariálního útoku jako *útočníka* (angl. *adversary*).

3.1 Metody generování adversariálních vzorků

Metody generování adversariálních vzorků se dělí na dvě kategorie dle míry znalosti útočníka o oběti. Nemá-li útočník znalost o oběti, hovoří se o tzv. *black-box metodě*. V opačném případě - má-li útočník kompletní znalost o oběti - se hovoří o tzv. *white-box metodě*. Tento text se zabývá pouze white-box metodami, neboť v black-box nastavení si může útočník natrénovat svou vlastní neuronovou síť a generovat adversariální vzorky proti ní - díky jevu *přenositelnosti* (angl. *transferability*) jsou tyto vzorky použitelné i proti původní síti [15].

Dále se metody generování adversariálních vzorků dělí na *cílené* (angl. *targeted*) a *necílené* (angl. *untargeted*). Cílené útoky generují vzorky $\tilde{x} = x + \Delta x$ tak, aby $F_\theta(\tilde{x}) = \tilde{y}$ pro pevně zvolenou značku \tilde{y} různou od původní značky $y = F_\theta(x)$. Necílené útoky předem nevybírají značku za cíl, nýbrž požadavkem je jen, aby $F_\theta(\tilde{x}) \neq F_\theta(x)$. Necílené útoky nebývají tolik účinné jako cílené [14].

První metoda představená v [8] je známá pod zkratkou *FGSM* (z angl. *fast gradient sign method*). Jedná se o necílenou metodu, která využívá mnoho-dimenzionální lineární vztahy neuronové sítě [10] a má předpis:

$$\tilde{x} = x + \gamma \cdot \text{sign}(\nabla_x L(F_\theta(x), y)) \quad (3.3)$$

při zachování značení z minulých kapitol textu, označení *sign* pro znaménkovou funkci a γ pro velikost složek perturbace Δx .

Druhá metoda jde o krok dál, vzorec (3.3) aplikuje iterativně několikrát a generuje posloupnost $(x_n)_{n=0}^K$, kde K je počet iterací metody. Jedná se o metodu *I-FGSM* (z angl. *iterative fast gradient sign method*) představenou v [12] s předpisem:

$$\tilde{x}_0 = x \quad (3.4)$$

$$\tilde{x}_{n+1} = \text{Clip}_x^k\{\tilde{x}_n + \gamma \cdot \text{sign}(\nabla_x L(F_\theta(x), y))\}, \quad (3.5)$$

kde funkce *Clip* omezuje výsledný součet, aby byl v κ -okolí původního vzorku x a zároveň v definičním oboru neuronové sítě F_θ - například jsou-li vzorky obrázky, funkce *Clip* zajišťuje, aby hodnoty pixelů nebyly záporné či vyšší než 255. Počet iterací je ovšem dalším hyper-parametrem, který je nutno nastavit. Jedná se tedy o necílenou metodu.

Třetí metoda (cílená) nahlíží na generování adversariálních vzorků jako na optimalizační úlohu [7], [14]:

$$\tilde{x} = \arg \min_{\hat{x} \in \text{Dom}_{F_\theta}} \lambda \cdot \|\hat{x} - x\| + L(F_\theta(\hat{x}), \tilde{y}), \quad (3.6)$$

kde $\lambda > 0$, Dom_{F_θ} je definičním oborem F_θ , \tilde{y} značí cílenou nesprávnou značku. Tento optimalizační problém lze řešit algoritmem *L-BFGS* [9], resp. jeho variantou s vazbami (angl. *box-constrained L-BFGS*).

Další metoda (necílená) nese název *PGD* (zkratka angl. *projected gradient descent*). Tato metoda je silnější variantou *I-FGSM* [10] a spočívá v náhodné inicializaci vzorku \tilde{x}_0 uvnitř κ -okolí původního vzorku a následných iteracích jako v *I-FGSM* [13].

Následující metoda (necílená) má opět optimalizační charakter. Jmenuje se *CW* (*Carlini-Wagner*) a má předpis [14], [10]:

$$\tilde{x} = \arg \min_{\hat{x} \in \text{Dom}_{F_\theta}} \|\hat{x} - x\| - c \cdot L(F_\theta(\hat{x}), y), \quad (3.7)$$

kde $c > 0$.

Kapitola 4

Robustní učení neuronové sítě

Kapitola 5

Srovnání algoritmů učení

5.1 Kritérium srovnávání

Pro účely srovnávání algoritmů učení neuronové sítě lze zvolit mnoho kritérií. Jedním z nich by mohl být samotný průběh účelové funkce v závislosti na počtu provedených iterací vybraného algoritmu, když všechny představené algoritmy mají iterativní charakter.

Jiným přístupem je užití tzv. *testovací sady* \mathbb{S} (angl. *test dataset*). Svou strukturou testovací sada kopíruje sadu trénovací, jedná se tedy o uspořádanou dvojici množin vzorků $\mathbb{X} = \{x^{(i)} | i \in \hat{S}\}$ a značek $\mathbb{Y} = \{y^{(i)} | i \in \hat{S}\}$, kde S je velikost testovací sady.

Je-li neuronová síť svým charakterem síť klasifikační, pak lze sledovat podíl správných predikcí na testovacím datasetu vůči celkovému počtu vzorků. Výhodou tohoto přístupu je fakt, že při svém učení neuronová síť na vzorky testovacího datasetu nenarazila, což má za důsledek to, že lze očekávat stejnou úspěšnost sítě při její aplikaci. Tento přístup je využit v tomto textu.

5.2 Inicializace parametrů sítě a stochasticita algoritmu učení

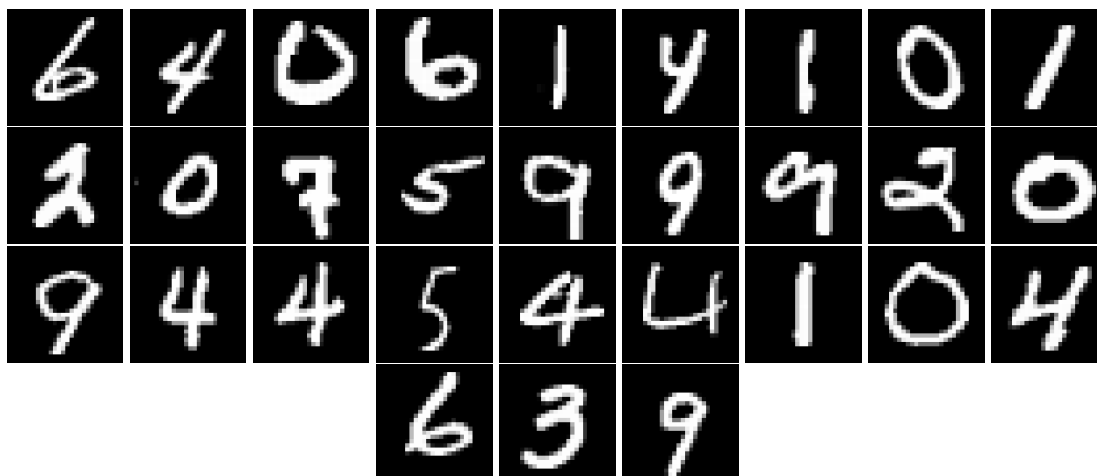
Nyní je namístě vyslovit poznámku o inicializaci parametrů neuronové sítě před samotným učením. Dle [1] je standardním postupem pro inicializaci vybírat hodnoty parametrů náhodně, a to z rovnoměrného rozdělení na rozumném intervalu. Konkrétní experimenty v tomto textu pracují s následujícím rozdělením vah a prahů:

$$(\mathbb{A})_{i,j}, b_i \sim U\left(-\frac{1}{\sqrt{n}}, +\frac{1}{\sqrt{n}}\right), \quad (5.1)$$

kde n je v případě vah počet sloupečků matice vah, v případě prahů velikost vektoru prahů. Závěrem této poznámky tedy je, že inicializace parametrů neuronové sítě je náhodný proces. To má za důsledek fakt, že na proces učení neuronové sítě lze nahlížet očima statistika. Tento text konkrétně nahlíží na úspěšnost neuronové sítě na testovací sadě jako na náhodnou veličinu. Potom lze totiž porovnávat jednotlivé algoritmy na základě distribuční funkce této specifické náhodné veličiny.

5.3 Datová sada MNIST

Nedílnou ingrediencí pro srovnání algoritmů učení je samotná sada dat a k nim příslušný úkol, zda se jedná o klasifikaci či o regresi. Tato část textu se věnuje úkolu klasifikace ručně psaných číslic z černobílého obrázku. Sada dat, která je zde použita je nazvána MNIST [16]. Její trénovací sada \mathbb{T} obsahuje



Obrázek 5.1: Datová sada MNIST

60 000 vzorků (a k nim odpovídajících značek) a testovací sada \mathcal{S} obsahuje 10 000 vzorků (a k nim odpovídajících značek). Vzorky jsou ve své podstatě matice o rozměrech 28 řádků a 28 sloupečků, jejichž prvky jsou nezáporná celá čísla o hodnotě nejvýše 255. Tyto matice lze interpretovat jako obrázky.

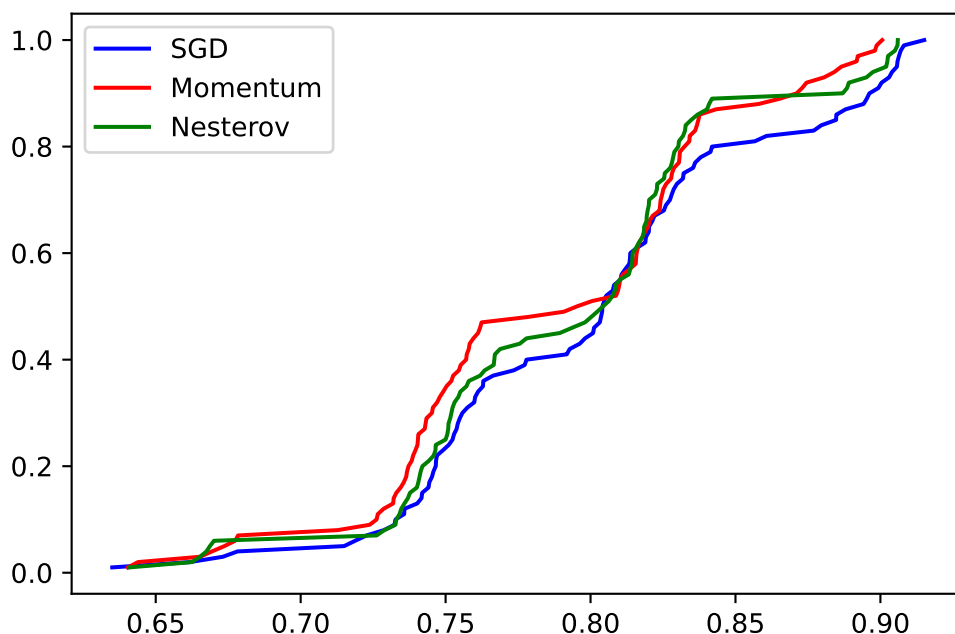
5.4 Výsledky

Přistupme nyní k samotnému srovnání algoritmů *stochastický gradientní sestup*, *metoda hybnosti* a *metoda Něstěrovovy hybnosti* (obě ve stochastické verzi). Pro srovnání těchto algoritmů byly provedeny následující dva experimenty: První se týká trénování jedné hluboké dopředné neuronové sítě těmito algoritmy pro úkol datové sady MNIST, jež je uvedena výše v textu, a to konkrétně aplikací 5 000 iterací algoritmu na nově inicializovanou síť. Pro stochastický gradientní sestup byl použit řád učení o hodnotě 10^{-2} , pro obě metody hybnosti byl použit řád učení 10^{-3} a koeficient $\alpha = 0.9$. Dále uveďme velikost mini-dávky $M = 30$ pro všechny tři algoritmy. V takovémto nastavení byly všechny tři algoritmy spuštěny stokrát. Na výsledné distribuční funkce lze nahlédnout v obrázku (5.2). Z grafu lze vyčíst takřka zanedbatelný rozdíl mezi metodou hybnosti a metodou Něstěrovovy hybnosti. Dále graf vyjadřuje nemalou větší úspěšnost obyčejného stochastického gradientního sestupu.

Druhý experiment je téměř totožný, jen je použit jiný model neuronové sítě, a to konkrétně se zakomponovanou konvolucí. Jinak je experiment totožný. Proto lze z Obr. (5.3) odečíst výsledky, a to konkrétně, že stochastický gradientní sestup má v tomto nastavení lepší výkonnost.

Pro srovnání algoritmů *stochastický gradientní sestup*, *AdaGrad*, *RMSProp* a *Adam* lze využít podkladů na obrázku (5.4), který zachycuje výsledky obdobných experimentů jako popsaných výše. Nastavení tohoto pokusu bylo následující: Pro stochastický gradientní sestup a algoritmus AdaGrad byl použit řád učení o hodnotě 10^{-2} , pro algoritmy RMSProp a Adam 10^{-3} . Pro AdaGrad bylo dále použito $\delta = 10^{-10}$, pro RMSProp $\delta = 10^{-8}$ a $\rho = 0.99$, pro Adam $\delta = 10^{-8}$, $\rho_1 = 0.9$ a $\rho_2 = 0.999$. Úkol byl stejný - natrénovat tentýž model dopředné neuronové sítě pro klasifikaci čísl datové sady MNIST za použití 5 000 iterací daného algoritmu. Učení sítě vždy proběhlo stokrát. Ze zmíněného obrázku vyplývá, že algoritmus AdaGrad je v tomto nastavení srovnatelný se stochastickým gradientním sestupem a že algoritmy RMSProp a Adam jsou minimálně pro toto specifické nastavení lepší.

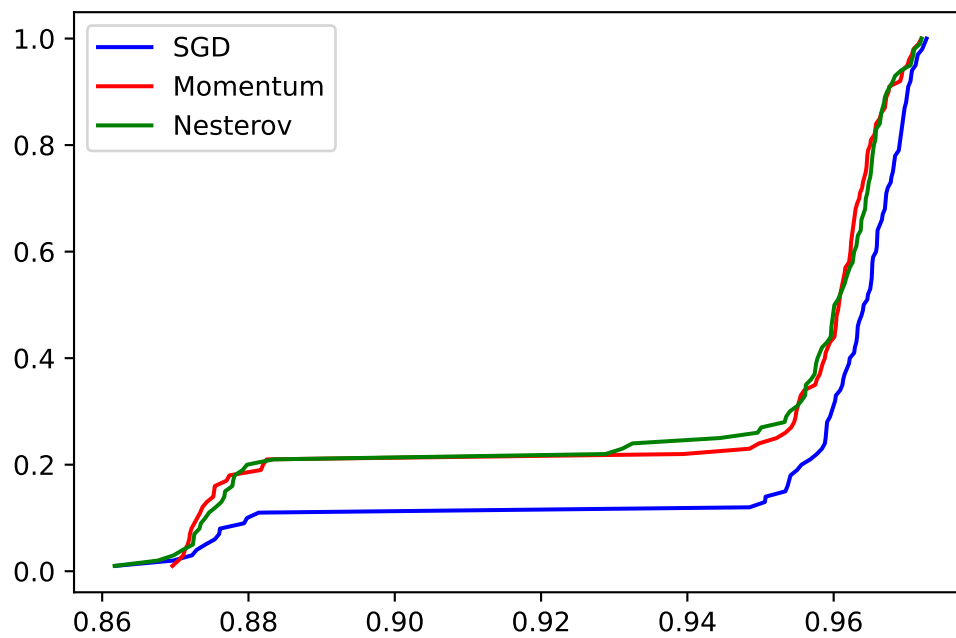
Dále se pro srovnání algoritmů *stochastický gradientní sestup*, *AdaGrad*, *RMSProp* a *Adam* lze opřít o výsledky vyobrazené na obrázku (5.5). Ten zachycuje výsledky totožného nastavení jako obrázek (5.4) jen s rozdílem použitého modelu. V tomto případě byl použit model konvoluční neuronové sítě. Jak



Obrázek 5.2: Srovnání algoritmů učení I

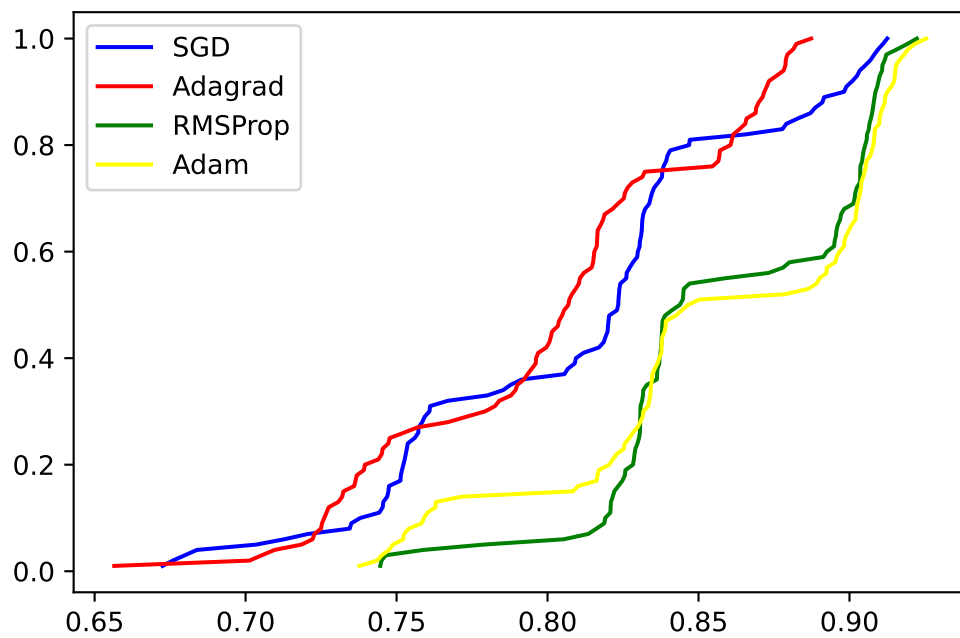
Simple - stochastický gradientní sestup; *Momentum* - metoda hybnosti; *Nesterov* - metoda Něstěrovovy hybnosti.

Lze nahlédnout, algoritmus AdaGrad byl pro tuto úlohu nevhodný. Algoritmus Adam dosáhl přijatelné úrovně neuronové sítě (tedy úspěšnost na testovací datové sadě vyšší než 95 %) zhruba v 60 % případů, algoritmus RMSProp zhruba v 90 % případů a stochastický gradientní sestup v 95 % případů. Ovšem kvalita přijatelně natrénovaných neuronových sítí byla v případě RMSProp vyšší než u stochastického gradientního sestupu.



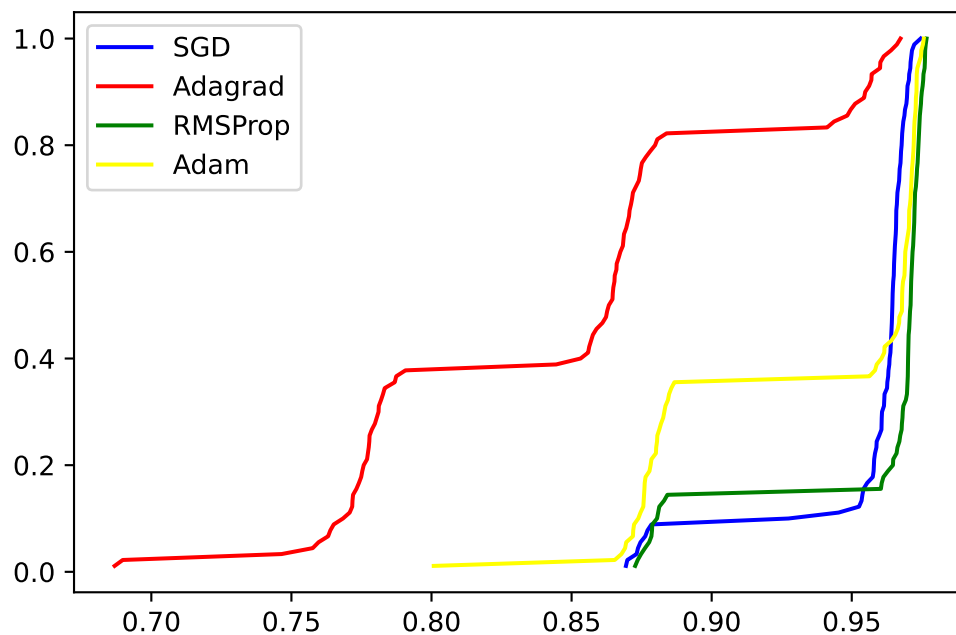
Obrázek 5.3: Srovnání algoritmů učení II

Simple - stochastický gradientní sestup; *Momentum* - metoda hybnosti; *Nesterov* - metoda Něstěrovovy hybnosti.



Obrázek 5.4: Srovnání algoritmů učení III

SGD - stochastický gradientní sestup; *AdaGrad* - algoritmus AdaGrad; *RMSProp* - algoritmus RMSProp; *Adam* - algoritmus Adam



Obrázek 5.5: Srovnání algoritmů učení IV

SGD - stochastický gradientní sestup; *AdaGrad* - algoritmus AdaGrad; *RMSProp* - algoritmus RMSProp; *Adam* - algoritmus Adam

Závěr

Text závěru....

Literatura

- [1] I. Goodfellow, Y. Bengio, A. Courville, *Deep Learning*. MIT Press, 2016.
- [2] B. T. Polyak, *Some methods of speeding up the convergence of iteration methods*. USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics, 1964.
- [3] I. Sutskever, J. Martens, G. Dahl, G. Hinton, *On the importance of initialization and momentum in deep learning*. In ICML, 2013.
- [4] J. Duchi, E. Hazan, Y. Singer, *Adaptive subgradient methods for online learning and stochastic optimization*. Journal of Machine Learning Research, 2011.
- [5] G. Hinton, *Neural networks for machine learning*. Coursera, video lectures, 2012.
- [6] D. Kingma, J. Ba, *Adam: A method for stochastic optimization*. In 'International Conference on Learning Representations', ICLR 2015.
- [7] C. Szegedy, W. Zaremba, I. Sutskever, J. Bruna, D. Erhan, I. Goodfellow, R. Fergus, *Intriguing properties of neural networks*. arXiv, 2014.
- [8] I. Goodfellow, J. Shlens, C. Szegedy, *Explaining and Harnessing Adversarial Examples*. In 'International Conference on Learning Representations', ICLR 2015.
- [9] J. Nocedal, S. Wright, *Numerical optimization*. Springer Science & Business Media, 2006.
- [10] J. Liu, Q. Zhang, K. Mo, X. Xiang, J. Li, D. Cheng, R. Gao, B. Liu, K. Chen, G. Wei, *An efficient adversarial example generation algorithm based on an accelerated gradient iterative fast gradient*. Computer Standards & Interfaces, Volume 82, 2022.
- [11] Y. Li, B. Wu, Y. Feng, Y. Fan, Y. Jiang, Z. Li, S. Xia, *Semi-supervised robust training with generalized perturbed neighborhood*. Pattern Recognition, Volume 124, 2022.
- [12] A. Kurakin, I. Goodfellow, S. Bengio, *Adversarial examples in the physical world*. arXiv 2016.
- [13] A. Mańdry, A. Makelov, L. Schmidt, D. Tsipras, A. Vladu, *Towards deep learning models resistant to adversarial attacks*. Stat 1050 9, 2017.
- [14] N. Carlini, D. Wagner, *Towards evaluating the robustness of neural networks*. IEEE Symposium on Security and Privacy (SP), IEEE, 2017.
- [15] N. Papernot, P. McDaniel, I. Goodfellow, *Transferability in machine learning: from phenomena to black-box attacks using adversarial samples*. arXiv 2016
- [16] Y. Lecun, C. Cortes, C. J. Burges, *The mnist database of handwritten digits*. 1998.

- [17] T. Weng, H. Zhang, P. Chen, J. Yi, D. Su, Y. Gao, C. Hsieh, L. Daniel, *Evaluating the Robustness of Neural Networks: An Extreme Value Theory Approach*. In 'International Conference on Learning Representations', ICLR 2018.