



ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská



Moderní metody robustního strojového učení

Modern methods of robust machine learning

Výzkumný úkol

Autor: **Bc. Pavel Jakš**
Vedoucí práce: **Mgr. Lukáš Adam, Ph.D.**
Konzultant: **Mgr. Vojtěch Čermák**
Akademický rok: 2022/2023

ZADÁNÍ VÝZKUMNÉHO ÚKOLU

Student: Bc. Pavel Jakš
Studijní program: Matematická informatika
Název práce (česky): Moderní metody robustního strojového učení
Název práce (anglicky): Modern methods of robust machine learning

Pokyny pro vypracování:

- 1) Nastudovat literaturu v oblasti metrik vizuální podobnosti.
- 2) Nastudovat literaturu v oblasti tvorby adversariálních vzorků.
- 3) Nastudovat dokumentaci k relevantním knihovnám robustního strojového učení (RobustBench, Foolbox).
- 4) Implementace vybraných metrik vizuální podobnosti.
- 5) Využití naimplementovaných metod vizuální podobnosti pro tvorbu adversariálních vzorku.

Doporučená literatura:

- 1) Naveed Akhtar, Ajmal Mian, Navid Kardan, Mubarak Shah, Advances in adversarial attacks and defenses in computer vision: A survey. IEEE Access 9, 2021, 155161-155196.
- 2) W., Eric, F. Schmidt, Z. Kolter, Wasserstein adversarial examples via projected sinkhorn iterations. International Conference on Machine Learning, PMLR, 2019.
- 3) J. Rauber, R. Zimmermann, M. Bethge, W. Brendel, Foolbox: A Python toolbox to benchmark the robustness of machine learning models. Reliable Machine Learning in the Wild Workshop, 34th International Conference on Machine Learning, 2017.

Jméno a pracoviště vedoucího výzkumného úkolu:

Mgr. Lukáš Adam, Ph.D.

Katedra počítačů, Fakulta elektrotechnická, České vysoké učení technické v Praze, Karlovo náměstí 13, 121 35 Praha 2

Jméno a pracoviště konzultanta:

Mgr. Vojtěch Čermák

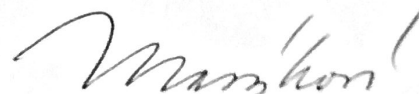
Katedra počítačů, Fakulta elektrotechnická, České vysoké učení technické v Praze, Karlovo náměstí 13, 121 35, Praha 2

Datum zadání výzkumného úkolu: 31.10.2022

Datum odevzdání výzkumného úkolu: 21.5.2023

Doba platnosti zadání je dva roky od data zadání.

V Praze dne 31. října 2022



vedoucí katedry

Poděkování:

Chtěl bych zde poděkovat především svému školiteli panu doktoru Adamovi za pečlivost, ochotu, vstřícnost a odborné i lidské zázemí při vedení mé diplomové práce. Dále děkuji svému konzultantovi panu magistru Čermákovi za jeho odborné rady.

Čestné prohlášení:

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

V Praze dne 21. srpna 2023

Bc. Pavel Jakš

Moderní metody robustního strojového učení

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.

Konzultant: Mgr. Vojtěch Čermák, 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

Modern methods of robust machine learning

Author: Bc. Pavel Jakš

[illegible]

Key words: keywords in alphabetical order separated by commas

Obsah

Úvod	7
1 Metriky vizuální podobnosti	8
1.1 Metriky indukované l_p normami	8
1.2 MSE a RMSE	9
1.3 Peak signal-to-noise ratio	9
1.4 Wassersteinova vzdálenost	9
1.5 Structural similarity index measure	11
2 Implementace metrik vizuální podobnosti	12
2.1 Metriky založené na l_p normách	12
2.2 Modifikace Wassersteinovy vzdálenosti	12
2.3 Structural dissimilarity	14
3 Adversariální vzorky a jejich tvorba	15
3.1 Klasifikace v kontextu strojového učení	15
3.2 Adversariální vzorky	16
3.3 Tvorba adversariálních vzorků	16
4 Výsledky tvorby adversariálních vzorků pomocí vybraných metrik vizuální podobnosti	18
5 Knihovny robustního strojového učení	20
Závěr	21
Literatura	22
Příloha	23

Úvod

Text úvodu....

Kapitola 1

Metriky vizuální podobnosti

Pod pojmem metrika na prostoru X si každý matematik představí zobrazení $\rho : X \times X \rightarrow [0, +\infty)$ splňující

1. $\rho(x, y) = 0 \iff x = y \quad \forall x, y \in X$,
2. $\rho(x, y) = \rho(y, x) \quad \forall x, y \in X$,
3. $\rho(x, z) \leq \rho(x, y) + \rho(y, z) \quad \forall x, y, z \in X$.

Taková metrika může být na lineárním prostoru V nad číselným tělesem (pro naše účely zůstaňme nad \mathbb{R}) snadno zadána pomocí normy, která je buď indukována skalárním součinem v případě pre-Hilbertových prostorů, nebo dána vlastnostmi, že se jedná o zobrazení $\|\cdot\| : V \rightarrow [0, +\infty)$ a splňuje:

1. $\|x\| = 0 \iff x = 0 \quad \forall x \in V$,
2. $\|\alpha x\| = |\alpha| \cdot \|x\| \quad \forall \alpha \in \mathbb{R}, \forall x \in V$,
3. $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\| \quad \forall x, y \in V$.

Metriku potom získáme z normy následující konstrukcí:

$$\rho(x, y) = \|x - y\|,$$

tedy vzdálenost dvou vektorů je dána normou rozdílu vektorů. Snadno lze nahlédnout, že takto zadané zobrazení je metrika. S metrikami, které jsou tzv. indukované normami dle předchozího se setkáme.

1.1 Metriky indukované l_p normami

Vzhledem k tomu, že obrázky, které jsou středem naší pozornosti, lze reprezentovat jako tenzory standardně o rozměrech $C \times W \times H$, kde C značí počet kanálů (nejčastěji kanály po řadě pro červenou, zelenou a modrou barvu), W označuje šířku a H výšku, tak lze na tyto tenzory vpustit L^p normy. Pro $p \in [1, +\infty)$ je L^p norma z $f \in L_p(X, \mu)$ definována vztahem:

$$\|f\|_p = \left(\int_X |f|^p d\mu \right)^{\frac{1}{p}}.$$

Pro naše obrázky lze za X vzít $\{1, \dots, C\} \times \{1, \dots, W\} \times \{1, \dots, H\}$ a za μ *počítací míru*. Potom naše L^p norma přejde v l_p normu, která má pro naše obrázky, tedy tenzory $x \in \mathbb{R}^{C \times W \times H}$, tvar:

$$\|x\|_p = \left(\sum_{i=1}^C \sum_{j=1}^W \sum_{k=1}^H |x_{i,j,k}|^p \right)^{\frac{1}{p}}. \quad (1.1)$$

Trochu mimo stojí l_∞ norma, která má tvar pro tenzor $x \in \mathbb{R}^{C \times W \times H}$:

$$\|x\|_\infty = \max_{i \in \{1, \dots, C\}} \max_{j \in \{1, \dots, W\}} \max_{k \in \{1, \dots, H\}} |x_{i,j,k}|. \quad (1.2)$$

A úplně mimo stojí L_0 norma, která svou povahou *není* norma ve smyslu výše uvedené definice, ale pro účely porovnávání obrázků se používá rozdíl obrázků v této pseudo-normě, proto ji zde zmiňuji:

$$\|x\|_0 = |\{x_{i,j,k} \neq 0\}|. \quad (1.3)$$

1.2 MSE a RMSE

Vzdálenosti, které mají blízko k metrikám indukovaným l_2 normou, jsou *MSE* (z anglického *Mean Squared Error*) a *RMSE* (z anglického *Root Mean Squared Error*). Pro tenzory $x, \tilde{x} \in \mathbb{R}^{C \times W \times H}$ mají definici:

$$\text{MSE}(x, \tilde{x}) = \frac{1}{CWH} \sum_{i=1}^C \sum_{j=1}^W \sum_{k=1}^H |x_{i,j,k} - \tilde{x}_{i,j,k}|^2 \quad (1.4)$$

$$\text{RMSE}(x, \tilde{x}) = \left(\frac{1}{CWH} \sum_{i=1}^C \sum_{j=1}^W \sum_{k=1}^H |x_{i,j,k} - \tilde{x}_{i,j,k}|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (1.5)$$

1.3 Peak signal-to-noise ratio

Vzdálenost označená zkratkou *PSNR* z anglického *peak signal-to-noise ratio* vyjadřuje vztah mezi obrázkem $x \in \mathbb{R}^{C \times W \times H}$ a jeho pokažením $\tilde{x} \in \mathbb{R}^{C \times W \times H}$ za přidání šumu. Definice je následující:

$$\text{PSNR}(x, \tilde{x}) = 10 \cdot \log_{10} \left(\frac{l^2}{\text{MSE}(x, \tilde{x})} \right), \quad (1.6)$$

$$= 20 \cdot \log_{10} \left(\frac{l}{\text{RMSE}(x, \tilde{x})} \right), \quad (1.7)$$

kde l je dynamický rozsah obrázků, tedy rozdíl mezi maximální možnou hodnotou pixelů a minimální možnou hodnotou pixelů. Jedná se tedy o transformaci metriky *MSE*. Samotná hodnota PSNR ovšem není metrická vzdálenost. Vždyť budou-li se obrázky x a \tilde{x} blížit k sobě, hodnota $\text{PSNR}(x, \tilde{x})$ poroste do nekonečna.

1.4 Wassersteinova vzdálenost

Bud' (M, d) metrický prostor, který je zároveň *Radonův*. Zvolme $p \in [1, +\infty)$. Potom máme *Wassersteinovu p -vzdálenost* mezi dvěma pravděpodobnostními mírami μ a ν na M , které mají konečné p -té

momenty, jako:

$$W_p(\mu, \nu) = \left(\inf_{\gamma \in \Gamma(\mu, \nu)} \mathbb{E}_{(x,y) \sim \gamma} d(x, y)^p \right)^{\frac{1}{p}}, \quad (1.8)$$

kde $\Gamma(\mu, \nu)$ je množina všech sdružených pravděpodobnostních měr na $M \times M$, které mají po řadě μ a ν za marginální pravděpodobnostní míry [5].

Jak to souvisí s obrázky? Přes dopravní problém. Pod pravděpodobnostní distribucí μ či ν na X si lze představit rozložení jakési hmoty o celkové hmotnosti 1. Sdružená rozdělení $\gamma \in \Gamma(\mu, \nu)$ potom odpovídají transportnímu plánu, kde $\gamma(x, y)$ d x d y vyjadřuje, kolik hmoty se přesune z x do y . Tomu lze přiřadit nějakou cenu c , totiž kolik stojí přesun jednotkové hmoty z x do y : $c(x, y)$. V případě *Wassersteinovy vzdálenosti* za cenu dosadíme $c(x, y) = d(x, y)^p$, tedy p -tou mocninu vzdálenosti mezi x a y . Potom cena celkového dopravního problému s transportním plánem γ bude:

$$c_\gamma = \int c(x, y) \gamma(x, y) \, d x \, d y \quad (1.9)$$

$$= \int c(x, y) \, d \gamma(x, y) \quad (1.10)$$

a optimální cena bude:

$$c = \inf_{\gamma \in \Gamma(\mu, \nu)} c_\gamma. \quad (1.11)$$

Po dosazení:

$$c = \inf_{\gamma \in \Gamma(\mu, \nu)} \int c(x, y) \, d \gamma(x, y) \quad (1.12)$$

$$= \inf_{\gamma \in \Gamma(\mu, \nu)} \int c(x, y) \gamma(x, y) \, d x \, d y \quad (1.13)$$

$$= \inf_{\gamma \in \Gamma(\mu, \nu)} \mathbb{E}_{(x,y) \sim \gamma} c(x, y) \quad (1.14)$$

$$= \inf_{\gamma \in \Gamma(\mu, \nu)} \mathbb{E}_{(x,y) \sim \gamma} d(x, y)^p \quad (1.15)$$

$$= W_p(\mu, \nu)^p \quad (1.16)$$

Dostáváme tedy interpretaci, že p -tá mocnina *Wassersteinovy vzdálenosti* odpovídá ceně dopravního problému.

Pro obrázky má tato konstrukce následující uplatnění: Obrázky je třeba chápat jako diskrétní pravděpodobnostní rozdělení, proto je třeba je normalizovat, aby součet prvků tenzoru obrázku byl roven 1. Pak střední hodnota v definici *Wassersteinovy vzdálenosti* přejde ve váženou sumu cen, tedy p -tých mocnin vzdáleností mezi jednotlivými pixely.

Jak je to barevnými obrázky, tedy s obrázku, které mají více než jeden kanál? Zde lze uplatnit následující dva přístupy:

1. Normovat celý obrázek na jedničku, tedy všechny kanály dohromady, a tím pádem i definovat vzdálenost mezi jednotlivými kanály,
2. Normovat každý kanál zvlášť na jedničku, počítat *Wassersteinovu metriku* pro každý kanál zvlášť a následně vybrat nějakou statistiku výsledných vzdáleností, např. průměr.

1.5 Structural similarity index measure

Zkratka *SSIM* pochází z anglického *structural similarity index measure*. Tato metrika se při výpočtu indexu dvou obrázků x a \tilde{x} dívá na podokna, ze kterých vybere jisté statistiky a z nich vytvoří index pro daná podokna obrázků. Potom se jako celkový index bere průměr přes tato okna. Uved' me vzorce pro výpočet indexu SSIM pro případ, že máme jediné okno, které splývá s obrázkem, které pro jednoduchost zvolme jednokanálové, tedy černobílé. Označme $N = W \times H$ počet pixelů v obrázku a indexujme prvky matice obrázku jediným číslem. Potom definujeme pro obrázky x a \tilde{x} následující:

$$\begin{aligned}\mu_x &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i, \\ \mu_{\tilde{x}} &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \tilde{x}_i, \\ \sigma_x^2 &= \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (x_i - \mu_x)^2, \\ \sigma_{\tilde{x}}^2 &= \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\tilde{x}_i - \mu_{\tilde{x}})^2, \\ \sigma_{x\tilde{x}} &= \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (x_i - \mu_x)(\tilde{x}_i - \mu_{\tilde{x}}).\end{aligned}$$

Potom:

$$\text{SSIM}(x, \tilde{x}) = \frac{(2\mu_x\mu_{\tilde{x}} + C_1)(2\sigma_{x\tilde{x}} + C_2)}{(\mu_x^2 + \mu_{\tilde{x}}^2 + C_1)(\sigma_x^2 + \sigma_{\tilde{x}}^2 + C_2)}, \quad (1.17)$$

kde C_1, C_2 jsou konstanty pro stabilitu dělení volené kvadraticky úměrně dynamickému rozsahu. Můžeme si povšimnout, že $\text{SSIM}(x, \tilde{x})$ není metrická vzdálenost. Budou-li obrázky stejné, nevyjde 0, nýbrž 1. Může se také stát, že SSIM vrátí zápornou hodnotu, která může vzniknout členem $\sigma_{x\tilde{x}}$. Jak volíme celkový SSIM pro barevné obrázky? Jako průměr přes kanály.

Kapitola 2

Implementace metrik vizuální podobnosti

V minulé kapitole jsme viděli přehled metod, jak přistoupit k porovnávání dvou různých obrázků. Předvedli jsme, jak vyčíslit rozdíl mezi dvěma obrázky. Ne vždy se ovšem jedná o metriku vesmýslu matematickém, což pro tvorbu adversariálních vzorků je záhodno, a ne vždy lze takovou vzdálenost přímočaře spočítat. Proto uvedme, je-li to nutné, příslušné úkroky stranou, které nám umožní hledat adversariální vzorky, a to pokud možno v krátkém čase. Samotnou výslednou implementaci v podobě kódu v jazyce python lze nalézt v příloze v části týkající se souboru *metrics.py*.

2.1 Metriky založené na l_p normách

Implementovat klasické l_p normy je snadné, a tedy i metriky jimi indukované. MSE a RMSE jsou též snadné na implementaci. Vlastně i PSNR. Metriku vizuální podobnosti PSNR je třeba ovšem ošetřit, neboť, jak již bylo poznamenáno, budou-li se obrázky x a \tilde{x} blížit k sobě, hodnota $\text{PSNR}(x, \tilde{x})$ poroste do nekonečna. Proto zkusme vzít konstrukci, kde prohodíme roli dynamického rozsahu l (peak signal) s rolí šumu (noise), dostaneme tedy, co lze nazvat noise to peak signal ratio (NPSR):

$$\text{NPSR}(x, \tilde{x}) = 20 \cdot \log_{10} \left(\frac{\text{RMSE}(x, \tilde{x})}{l} \right), \quad (2.1)$$

$$= -\text{PSNR}(x, \tilde{x}). \quad (2.2)$$

Při dvou obrázcích blížících se k sobě bude tedy NPSR klesat, a to neomezeně.

2.2 Modifikace Wassersteinovy vzdálenosti

Abychom mohli s Wassersteinovou metrikou nakládat například v počítači, je nutné tuto metriku spočítat. Podíváme-li se do definice, znamená to vyřešit optimalizační problém. Byť bychom se omezili hledání vzdáleností dvou vektorů o rozměru q , měli bychom problém s časovou složitostí nejlépe $O(q^3 \log q)$ [6]. A to je hodně. Proto se podívejme, jak Wassersteinovu vzdálenost spočítat rychleji, byť za ztráty přesnosti.

Omezme se na prostory konečné dimenze. Potom mějme za úkol spočítat Wassersteinovu (zvolme $p = 1$) vzdálenost vektorů $\mu, \nu \in \mathbb{R}^q, \mu^T \mathbf{1}_q = \nu^T \mathbf{1}_q = 1$, kde $\mathbf{1}_q$ je vektor rozměru q složený pouze z jedniček. Potom μ, ν lze chápat jako diskrétní pravděpodobnostní rozdělení. Označme jako $U(\mu, \nu)$ množinu všech matic $P \in \mathbb{R}^{q \times q}, P_{i,j} \geq 0$ takových, že $P \mathbf{1}_q = \mu$ a $P^T \mathbf{1}_q = \nu$. Jako matici C označme zadanou matici cen, která splňuje, že reprezentuje metriku. To znamená, že $C_{i,j} \geq 0, C_{i,j} = 0 \iff i = j$,

$C_{i,j} = C_{j,i}$ a $C_{i,k} \leq C_{i,j} + C_{j,k}$. Potom lze napsat:

$$W(\mu, \nu) \equiv W_1(\mu, \nu) = \min_{P \in U(\mu, \nu)} \langle P, C \rangle, \quad (2.3)$$

kde $\langle P, C \rangle = \sum_{i,j=1}^q P_{i,j} C_{i,j}$.

Přejdeme nyní od Wassersteinovy metriky k tzv. duální Sinkhornově metrice. Ta je pro pevně zvolené $\lambda > 0$ definována následovně:

$$W^\lambda(\mu, \nu) = \langle P^\lambda, C \rangle, \quad (2.4)$$

$$\text{kde } P^\lambda = \operatorname{argmin}_{P \in U(\mu, \nu)} \langle P, C \rangle - \frac{1}{\lambda} H(P), \quad (2.5)$$

kde $H(P)$ je entropie pravděpodobnostního rozdělení P , tedy

$$H(P) = - \sum_{i,j=1}^q P_{i,j} \log(P_{i,j}).$$

Jedná se tedy o regularizovaný dopravní problém. Tato úprava Wassersteinovy metriky je, jak se přesvědčíme, mnohem lépe vyčíslitelná. Nejdříve se ovšem podívejme na intuici za touto úpravou.

Začneme s mírnou úpravou původního optimalizačního problému definujícího Wassersteinovu vzdálenost: Pro $\alpha > 0$ definujme jakési α okolí rozdělení $\mu\nu^T$ (sdružené pravděpodobnostní rozdělení s marginálními μ a ν , kde μ a ν jsou nezávislá rozdělení) ve smyslu *Kullback-Leiblerovy divergence*

$$U_\alpha(\mu, \nu) = \{P \in U(\mu, \nu) | KL(P || \mu\nu^T) \leq \alpha\}. \quad (2.6)$$

Připomeňme definici Kullback-Leiblerovy divergence:

$$KL(\tilde{P} || \hat{P}) = \sum_{i,j=1}^q P_{i,j} \log \frac{P_{i,j}}{Q_{i,j}}.$$

Pro dané $P \in U(\mu, \nu)$ lze na kvantitu $KL(P || \mu\nu^T)$ nahlédnout jako na informaci mezi veličinami s rozděleními μ a ν . Tedy $U_\alpha(\mu, \nu)$ vybírá ta rozdělení, která nesou malou vzájemnou informaci mezi μ a ν (ve smyslu menší než α). Dle [6] lze tuto úpravu ospravedlnit pomocí *principu maximální entropie*.

Potom lze definovat následující Sinkhornovu metriku:

$$W^\alpha(\mu, \nu) = \min_{P \in U_\alpha(\mu, \nu)} \langle P, M \rangle. \quad (2.7)$$

Jaký je vztah mezi Sinkhornovou metrikou W^α a duální Sinkhornovou metrikou W^λ ? Přes téma duality matematického programování. Zatímco ve W^α figuruje parametr α v omezení definičního oboru, kde optimalizujeme, tak ve W^λ figuruje parametr λ jako Lagrangeův multiplikátor příslušné vazby.

Článek [6] poskytuje též nahlédnutí na fakt, že W^λ a W^α jsou skutečně metriky.

Tento úrok stranou pomocí entropické regularizace původního problému lineárního programování, jehož vyřešení je nutné pro výpočet Wassersteinovy vzdálenosti, poskytuje úlevu v oblasti časové složitosti pro výpočet.

Konečný numerický algoritmus pro výpočet duální Sinkhornovy metriky potom vypadá následovně: Na vstupu algoritmus dostává pravděpodobnostní rozdělení μ a ν , jejichž vzdálenost je hledaná, dále matici C a regularizační parametr λ .

1. $I = \mu > 0$ - tj. do proměnné I uložíme indexy, kde rozdělení μ je nenulové.

2. $\tilde{\mu} = \mu[I]$ - do proměnné $\tilde{\mu}$ uložíme právě nenulové prvky μ .
3. $\tilde{C} = C[I, :]$ - do proměnné \tilde{C} uložíme příslušné řádky matice C .
4. $K = \exp(-\lambda * \tilde{C})$ - jako matici K vezmeme matici, která vznikne po prvcích jako exponenciála matice $-\lambda M$.
5. $u = \text{ones}(\text{len}(\tilde{\mu})) / \text{len}(\tilde{\mu})$ - do proměnné u uložíme rovnoměrné rozdělení délky $\tilde{\mu}$.
6. $\hat{K} = \text{diag}(1/\tilde{\mu}) @ K$
7. Opakujme: $u = 1/(\hat{K} @ (v/(K^T @ u)))$ - dokud není dosaženo vhodné zastavovací kritérium.
8. $v = v/(K^T @ u)$.
9. $W^\lambda(\mu, v) = \text{sum}(u * ((K * \tilde{C}) @ v))$.

Algoritmus byl napsán, aby syntakticky odpovídal programovacímu jazyku *python*, který využívá knihoven jako je *numpy* či *pytorch*.

2.3 Structural dissimilarity

Nyní potřebujeme z indexu SSIM vykřesat metiku, resp. alespoň aby byla splněna podmínka, že když se dva obrázky blíží k sobě, tak jejich vzdálenost klesá. K tomu může dobře posloužit konstrukce *DSSIM* (structural dissimilarity):

$$\text{DSSIM}(x, \tilde{x}) = \frac{1 - \text{SSIM}(x, \tilde{x})}{2}. \quad (2.8)$$

Bohužel nezískáváme ryzí metriku, neboť není splněna trojúhelníková nerovnost. Máme ale vlastnost, že

$$\text{DSSIM}(x, \tilde{x}) = 0 \iff x = \tilde{x}, \quad (2.9)$$

která plyne z vlastnosti

$$\text{SSIM}(x, \tilde{x}) = 1 \iff x = \tilde{x}. \quad (2.10)$$

Kapitola 3

Adversariální vzorky a jejich tvorba

3.1 Klasifikace v kontextu strojového učení

Mějme za úkol klasifikovat jakési vzorky do m tříd. Např. mějme za úkol na základě černobílého obrázku s číslicí říci, jaká že číslice je na daném obrázku vyobrazená. Máme-li dostatečný počet vzorků, o kterých víme, do jaké třídy náleží, můžeme využít různých metod strojového učení. Pro konkrétnost zvolme metodu neuronových sítí. To znamená, že vytvoříme zobrazení $F_\theta : X \rightarrow Y$, kde za X bereme množinu všech možných vzorků, v případě klasifikace číslic na obrázku právě všechny možné obrázky příslušného rozměru. Dále za Y bereme množinu všech diskretních pravděpodobnostních rozdělení na třídách, tedy v případě klasifikace číslic může být:

$$Y = \left\{ y \in \mathbb{R}^{10} \mid \forall i = 1, \dots, 10 : y_i \geq 0 \wedge \sum_{i=1}^{10} y_i = 1 \right\}.$$

F_θ je potom daná neuronová síť parametrizovaná pomocí parametrů θ . Vhodné parametry θ se potom volí pomocí procesu *učení*, což je řešení následujícího optimalizačního problému:

$$\hat{\theta} = \underset{\theta}{\operatorname{argmin}} J(\theta), \quad (3.1)$$

kde J je funkce na parametrech určující, jak moc je neuronová síť špatná má-li dané parametry θ . Za funkci J se standardně volí agregace typu průměr či součet dílčí ztrátové funkce L , která určuje, jak moc se neuronová síť mýlí na konkrétním vzorku. K tomu je tedy potřeba mít trénovací datovou sadu sestávající z dostatečného počtu vzorků se správnými odpověďmi, tedy značkami. Budiž trénovací datová sada označena $\mathbb{T} = (\mathbb{X}, \mathbb{Y})$, kde $\mathbb{X} = (x^{(i)} \in X)_{i=1}^N$ a $\mathbb{Y} = (y^{(i)} \in Y)_{i=1}^N$. Potom:

$$\hat{\theta} = \underset{\theta}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N L(y^{(i)}, F_\theta(x^{(i)})). \quad (3.2)$$

Jelikož prvky Y jsou diskretní pravděpodobnostní distribuce, za dílčí ztrátovou funkci lze vzít *křížovou entropii*:

$$L(y, \hat{y}) = - \sum_{i=1}^m y_i \log(\hat{y}_i). \quad (3.3)$$

Procesu učení se zde nemusíme věnovat. Jedná se o řešení optimalizačního problému (3.1).

Poslední objekt, který si zde v úvodní sekci kapitoly zadefinujeme, je samotná klasifikace. Jedná se o funkci $C : Y \rightarrow \{1, 2, \dots, m\}$ definovanou přepisem:

$$C(y) = \underset{i \in \{1, \dots, m\}}{\operatorname{argmax}} y_i. \quad (3.4)$$

3.2 Adversariální vzorky

Jsme-li vybaveni metrikou ρ na prostoru vzorků X , lze přistoupit k uvedení konceptu adversariálních vzorků. Nejprve však definujeme vzorek *benigní*. Jedná se o takový vzorek $x \in X$, že $C(F_\theta(x)) = C(y)$, kde y je pravdivá třída vzorku x . Máme-li takový benigní vzorek x , pak *adversariální vzorek* k němu, je takový vzorek \tilde{x} , že vzorek \tilde{x} je podobný benignímu vzorku x , ale je špatně klasifikovaný. Podobnost lze matematicky vyjádřit způsobem, že vzdálenost \tilde{x} od x je malá ve smyslu: $\rho(x, \tilde{x}) < \kappa$, kde κ je pevně zvolený číselný práh, neboli poloměr kulového okolí, ve kterém adversariální vzorek hledáme. Špatnou klasifikaci lze pak vyjádřit: $C(F_\theta(\tilde{x})) \neq C(F_\theta(x))$. Je-li sám vzorek x špatně klasifikovaný, pak je sám vlastně adversariálním vzorkem.

Problematika adversariálních vzorků představuje v oboru strojového učení úskalí, neboť vhodně zvolený adversariální vzorek dokáže v praxi, kde algoritmy strojového učení mohou sehrávat roli při automatizaci bezpečnostně kritických úkolů, daný algoritmus, rozbít.

Zatím jsme adversariální vzorky představili pouze jako teoretický koncept. V následujících sekcích textu se podíváme na jejich konkrétní tvorbu a v jedné z následujících kapitol i na praktickou ukázkou takových adversariálních vzorků.

3.3 Tvorba adversariálních vzorků

Dostaneme-li benigní vzorek x s pravdivou značkou y a máme-li za úkol k němu pro daný klasifikátor najít adversariální vzorek \tilde{x} , mějme v první řadě na mysli, že chceme, zachovat podobnost x a \tilde{x} , tak aby oba vzorky měly stejnou třídu reprezentovanou značkou y . Tedy jedna část úkolu bude minimalizovat $\rho(x, \tilde{x})$. V další části úkolu máme na výběr ze dvou možností.

Lze k tomuto úkolu přistoupit tak, že si vybereme falešnou značku \tilde{y} , která reprezentuje jinou třídu než y . Dále se budeme snažit pohybovat s \tilde{x} tak, abychom $F_\theta(\tilde{x})$ přiblížili k \tilde{y} , budeme tedy minimalizovat $L(\tilde{y}, F_\theta(\tilde{x}))$, kde L je dílčí ztrátová funkce na množině značek. Máme tedy dvě hodnoty, které chceme minimalizovat. Jak je ale dát dohromady? Tradice hovoří o zavedení nezáporného parametru λ , který nám dá:

$$\tilde{x} = \underset{\tilde{x}}{\operatorname{argmin}} \rho(x, \tilde{x}) + \lambda \cdot L(\tilde{y}, F_\theta(\tilde{x})). \quad (3.5)$$

Zavedený parametr λ pak hraje roli v určování toho, zda požadujeme, aby výsledek (3.5) byl velmi blízký x , nebo aby tento výsledek byl jistě nesprávně klasifikovaný. Tento způsob je představen v původním článku, který osvětluje problematiku adversariálních vzorků [7].

Druhý přístup spočívá v tom, že se snažíme namísto minimalizace ztráty k falešné značce maximalizovat ztrátu od původní značky y . Tedy:

$$\tilde{x} = \underset{\tilde{x}}{\operatorname{argmin}} \rho(x, \tilde{x}) - \lambda \cdot L(y, F_\theta(\tilde{x})). \quad (3.6)$$

Tento přístup se nazývá metoda CW (*Carlini-Wagner*, [8]).

Jak nastavit parametr λ ? Bud' můžeme parametr λ chápat jako hyper-parametr, tedy jako něco, co musíme ručně ladit, nebo lze hledat optimální hodnotu parametru λ vhodně vybraným kritériem. Myšlenka je potom následující: Chtějme najít adversariální vzorek co nejbližší původnímu benignímu vzorku. Potom v optimalizačním problému (3.5) nebo (3.6) potřebujeme, aby byl kladen větší důraz na první člen $\rho(x, \tilde{x})$, tedy aby λ bylo co nejmenší. Zároveň ale potřebujeme, aby výsledek byl nesprávně klasifikován. Proto optimální hodnota parametru λ , označme ji jako λ^* , můžeme v případě CW útoku získat řešením

$$\lambda^* = \underset{\lambda}{\operatorname{argmin}} \rho(x, \tilde{x}^\lambda), \quad (3.7)$$

$$C(F_\theta(\tilde{x}^\lambda)) \neq C(y), \quad (3.8)$$

kde

$$\tilde{x}^\lambda = \operatorname{argmin}_{\hat{x}} \rho(x, \hat{x}) - \lambda \cdot L(y, F_\theta(\hat{x})). \quad (3.9)$$

Z intuice lze na $\rho(x, \tilde{x}^\lambda)$ nahlédnout jako na monotónní funkci v proměnné λ . Proto na hledání λ lze užít metodu půlení intervalů.

Kapitola 4

Výsledky tvorby adversariálních vzorků pomocí vybraných metrik vizuální podobnosti

Tabulka 4.1: Výsledky CW útoku na konvoluční neuronovou síť

Začátek tabulky				
metric_name	lambda	is_adversarial	metric_distance	l2_distance
DSSIM_ws13	1e-03	0.00	0.0032	0.5658
	1e-02	0.55	0.0091	1.2746
	1e-01	0.80	0.0218	2.0332
	1e+00	0.90	0.0325	2.6771
	1e+01	1.00	0.0387	3.0795
	1e+02	1.00	0.0439	3.3408
	1e+03	1.00	0.0514	3.6996
DSSIM_ws21	1e-03	0.00	0.0002	0.2379
	1e-02	0.65	0.0068	1.1227
	1e-01	0.85	0.0179	1.9304
	1e+00	0.90	0.0245	2.3356
	1e+01	1.00	0.0319	2.8478
	1e+02	1.00	0.0351	3.0299
	1e+03	1.00	0.0402	3.2757
DSSIM_ws28	1e-03	0.00	0.0010	0.3576
	1e-02	0.75	0.0088	1.4044
	1e-01	0.90	0.0157	1.9415
	1e+00	1.00	0.0229	2.4947
	1e+01	1.00	0.0272	2.7499
	1e+02	1.00	0.0314	2.9653
	1e+03	1.00	0.0351	3.1641
DSSIM_ws5	1e-03	0.35	0.1700	3.5686
	1e-02	0.80	0.2061	8.7937
	1e-01	1.00	0.2243	10.8962
	1e+00	0.95	0.2282	11.2006

	1e+01	1.00	0.2359	12.1091
	1e+02	1.00	0.2397	11.8446
	1e+03	1.00	0.2443	11.3087
L1	1e-03	0.00	3.9127	0.1612
	1e-02	0.00	3.9545	0.1625
	1e-01	0.00	3.9264	0.1619
	1e+00	0.00	3.9351	0.1623
	1e+01	0.75	15.6376	1.9642
	1e+02	0.85	20.6205	2.3534
	1e+03	1.00	27.6782	3.1174
L2	1e-03	0.00	0.1615	0.1615
	1e-02	0.00	0.1613	0.1613
	1e-01	0.00	0.1611	0.1611
	1e+00	0.75	1.5334	1.5334
	1e+01	0.95	2.1603	2.1603
	1e+02	1.00	2.4959	2.4959
	1e+03	1.00	2.6871	2.6871
Linf	1e-03	1.00	1.1404	15.6282
	1e-02	1.00	1.1585	15.6439
	1e-01	1.00	1.1527	15.6620
	1e+00	1.00	1.1629	15.5520
	1e+01	1.00	1.1511	15.7462
	1e+02	1.00	1.1573	15.6811
	1e+03	1.00	1.1606	15.5801
Linf_special	1e-03	1.00	0.7640	9.3911
	1e-02	1.00	0.7600	9.3717
	1e-01	1.00	0.7650	9.4483
	1e+00	1.00	0.7680	9.3663
	1e+01	1.00	0.7620	9.3416
	1e+02	1.00	0.7690	9.4340
	1e+03	1.00	0.7590	9.4688
NPSR	1e-03	0.00	-inf	0.0000
	1e-02	0.00	-inf	0.0000
	1e-01	0.00	-inf	0.0000
	1e+00	0.00	-inf	0.0000
	1e+01	0.00	-inf	0.0052
	1e+02	0.05	-inf	0.0437
	1e+03	0.15	-inf	0.1282
	1e+04	0.15	-inf	0.1666
	1e+05	0.20	-inf	0.2699
Konec tabulky				

Kapitola 5

Knihovny robustního strojového učení

Závěr

Text závěru....

Literatura

- [1] N. Akhtar, A. Mian, N. Kardan, M. Shah: *Advances in adversarial attacks and defenses in computer vision: A survey*. IEEE Access 9, 2021, 155161-155196.
- [2] W. Eric, F. Schmidt, Z. Kolter: *Wasserstein adversarial examples via projected sinkhorn iterations*. International Conference on Machine Learning, PMLR, 2019.
- [3] J. Rauber, R. Zimmermann, M. Bethge, W. Brendel: *Foolbox: A Python toolbox to benchmark the robustness of machine learning models*. Reliable Machine Learning in the Wild Workshop, 34th International Conference on Machine Learning, 2017.
- [4] F. Croce, M. Andriushchenko, V. Schwag, E. Debenedetti, N. Flammarion, M. Chiang, P. Mittal, M. Hein: *RobustBench: a standardized adversarial robustness benchmark*. Thirty-fifth Conference on Neural Information Processing Systems Datasets and Benchmarks Track (Round 2), 2021
- [5] L. Vaserstein, *Markov processes over denumerable products of spaces, describing large systems of automata*. Problemy Peredači Informacii 5, 1969.
- [6] M. Cuturi, *Sinkhorn Distances: Lightspeed Computation of Optimal Transport*. Advances in Neural Information Processing Systems 26, 2013.
- [7] C. Szegedy, W. Zaremba, I. Sutskever, J. Bruna, D. Erhan, I. Goodfellow, R. Fergus, *Intriguing properties of neural networks*. arXiv, 2014.
- [8] N. Carlini, D. Wagner, *Towards evaluating the robustness of neural networks*. IEEE Symposium on Security and Privacy (SP), IEEE, 2017.

Příloha

metrics.py

```
1 from typing import Union
2 from abc import abstractmethod
3 import itertools
4
5 import torch
6 import torch.nn as nn
7
8 class Transform(nn.Module):
9     """
10     Class to encapsulate transformation of data
11     """
12
13     pass
14
15 class Identity(Transform):
16     """
17     Identity transformation
18     """
19
20     def forward(self, x: torch.Tensor) -> torch.Tensor:
21         return x
22
23 class Metric(nn.Module):
24     """
25     Module that encapsulates implementation of a mathematical concept of metric
26     With possibility of a transformation applied
27     """
28
29     def __init__(self, transform: Union[Transform, None] = None):
30         """
31         Constructor
32         :param transform: Transformation to be applied
33         """
34         super().__init__()
35         if transform is None:
36             self.transform = Identity()
37         else:
38             self.transform = transform
39
40     def forward(self, x: torch.Tensor, y: torch.Tensor) -> torch.Tensor:
41         transformed_x, transformed_y = self.transform(x), self.transform(y)
42         return self.compute(transformed_x, transformed_y)
43
44     @abstractmethod
45     def compute(self, x: torch.Tensor, y: torch.Tensor) -> torch.Tensor:
46         """
47         Actual computation of the metric distance
48         :param x: input No. 1
49         """
```

```

52         :param y: input No. II
53         :return: Tensor of batch of metrics
54         """
55         pass
56
57 class Norm(nn.Module):
58     """
59     Encapsulation of a norm
60     """
61
62     @abstractmethod
63     def forward(self, x: torch.Tensor) -> torch.Tensor:
64         """
65         :param x: Tensor of which norm shall be computed (shape: Batch x the_rest)
66
67         :return: Tensor of batch of norms
68         """
69         pass
70
71 class LpNorm(Norm):
72     """
73     Implementation of a L_p norm for a given positive integer p
74     """
75
76     def __init__(self, p: int):
77         """
78         :param p: positive integer
79         """
80         super().__init__()
81         if p < 1:
82             raise ValueError("p must be greater than 1")
83         self.p = p
84
85     def forward(self, x: torch.Tensor) -> torch.Tensor:
86         """
87         :param x: Tensor of which norm shall be computed (shape: Batch x the_rest)
88
89         :return: Tensor of batch of norms
90         """
91         return (x.abs() ** self.p).sum(dim=tuple(range(1, x.ndim))) ** (1 / self.p)
92
93 class L2Norm(LpNorm):
94     """
95     Special case of a LpNorm - L_2
96     """
97
98     def __init__(self):
99         super().__init__(2)
100
101 class L1Norm(LpNorm):
102     """
103     Special case of a LpNorm - L_1
104     """
105
106     def __init__(self):
107         super().__init__(1)
108
109 class LinfNorm(Norm):
110     """
111     Implementation of a L_infty norm
112     """
113
114     def forward(self, x: torch.Tensor) -> torch.Tensor:

```



```

120     """
121     :param x: Tensor of which norm shall be computed (shape: Batch x the_rest)
122
123     :return: Tensor of batch of norms
124     """
125     out = x.abs()
126     for _ in range(1, out.ndim):
127         out = out.max(dim=1)[0]
128     return out
129
130 class L0Norm(Norm):
131     """
132     Implementation of a L_0 norm
133     """
134
135     def forward(self, x: torch.Tensor) -> torch.Tensor:
136         """
137         :param x: Tensor of which norm shall be computed (shape: Batch x the_rest)
138
139         :return: Tensor of batch of norms
140         """
141
142         return ((x != torch.zeros(x.shape)) * 1).sum(dim=tuple(range(1, x.ndim)))
143
144 class MetricFromNorm(Metric):
145     """
146     Encapsulation of metric distance which is derived as a norm of a difference
147     """
148
149     def __init__(self, norm: Norm, transform: Union[Transform, None] = None):
150         """
151         Implementation of a constructor
152         :param norm: Norm
153         :param transform: Transformation to be applied
154         """
155         super().__init__(transform)
156         self.norm = norm
157
158     def compute(self, x: torch.Tensor, y: torch.Tensor) -> torch.Tensor:
159         """
160         Implementation of the actual computation using the given norm
161         :param x: Tensor x
162         :param y: Tensor y
163         :return: Tensor of batch of metrics
164         """
165         out = self.norm(x - y)
166         return out
167
168
169 class LpMetric(MetricFromNorm):
170     """
171     Metric devived from a L_p norm
172     """
173
174     def __init__(self, p, transform: Union[Transform, None] = None):
175         """
176         Implementation of a constructor
177         :param p: Positive integer p
178         :param transform: Transformation to be applied
179         """
180         super().__init__(LpNorm(p), transform)
181
182
183 class L2Metric(LpMetric):
184     """

```

```

186     Implementation of a L_2 metric derived from L_2 norm
187     """
188
189     def __init__(self, transform: Union[Transform, None] = None):
190         super().__init__(2, transform)
191
192
193     class L0Metric(MetricFromNorm):
194         """
195         Implementation of a L_0 metric derived from L_0 norm
196         """
197
198         def __init__(self, transform: Union[Transform, None] = None):
199             super().__init__(L0Norm(), transform)
200
201
202     class LinfMetric(MetricFromNorm):
203         """
204         Implementation of a L_infty metric derived from L_infty norm
205         """
206
207         def __init__(self, transform: Union[Transform, None] = None):
208             super().__init__(LinfNorm(), transform)
209
210
211     class MeanSquaredError(Metric):
212         """
213         Implementation of MSE as a metric
214         """
215
216         def __init__(self, transform: Union[Transform, None] = None):
217             super().__init__(transform)
218
219         def compute(self, x: torch.Tensor, y: torch.Tensor) -> torch.Tensor:
220             return ((x - y) ** 2).mean(dim=tuple(range(1, x.ndim)))
221
222
223     class RootMeanSquaredError(Metric):
224         """
225         Implementation of RMSE as a metric
226         """
227
228         def __init__(self, transform: Union[Transform, None] = None):
229             super().__init__(transform)
230
231         def compute(self, x: torch.Tensor, y: torch.Tensor) -> torch.Tensor:
232             return ((x - y) ** 2).mean(dim=tuple(range(1, x.ndim))) ** (1 / 2)
233
234
235     class PeakSignalToNoiseRatio(Metric):
236         """
237         Implementation of PSNR
238         """
239
240         def __init__(self, transform: Union[Transform, None] = None, l: float = 1):
241             """
242             Constructor
243
244             :param l: peak signal of the image
245             """
246             super().__init__(transform)
247             self.l = l
248             self.rmse = RootMeanSquaredError()
249
250         def compute(self, x: torch.Tensor, y: torch.Tensor) -> torch.Tensor:
251             out = 20 * torch.log10(self.l / self.rmse(x, y))
252             return out

```

```

254 class NoiseToPeakSignalRatio(Metric):
255     """
256     Implementation of NPSR
257     """
258
259     def __init__(self, transform: Union[Transform, None] = None, l=1):
260         """
261         Constructor
262
263         :param l: peak signal of the image
264         """
265         super().__init__(transform)
266         self.l = l
267         self.rmse = RootMeanSquaredError()
268
269     def compute(self, x: torch.Tensor, y: torch.Tensor) -> torch.Tensor:
270         out = 20 * torch.log10(self.rmse(x, y) / self.l)
271         return out
272
273
274 class StructuralDissimilarity(Metric):
275     """
276     Implementation of Structural Dissimilarity.
277     Computed as (1 - SSIM) / 2
278     """
279
280     def __init__(self, transform: Union[Transform, None] = None, window_size=100, k_1=1e
281 -2, k_2=3e-2, l=1):
282         """
283         Constructor
284
285         :param window_size: number, size of the sliding window in which SSIMs are
286         computed
287         :param k_1: component of the first constant (for safe division)
288         :param k_2: component of the second constant (for safe division)
289         :param l: peak signal, component of the safe division constants
290         """
291         super().__init__(transform)
292         self.window_size = window_size
293         self.c_1 = (k_1 * l) ** 2
294         self.c_2 = (k_2 * l) ** 2
295
296     def compute(self, x: torch.Tensor, y: torch.Tensor) -> torch.Tensor:
297         if x.ndim != 4 or y.ndim != 4:
298             raise ValueError("Not an image")
299         if x.shape != y.shape:
300             raise ValueError("Given images of different shapes")
301
302         batch = x.shape[0]
303         channels = x.shape[1]
304         width = x.shape[2]
305         height = x.shape[3]
306
307         num_width_windows = width - self.window_size + 1 if width > self.window_size else
308         1
309         num_height_windows = height - self.window_size + 1 if height > self.window_size
310         else 1
311
312         windows_indexes = [
313             [
314                 range(i_w_start, min(i_w_start + width, i_w_start + self.window_size)),
315                 range(i_h_start, min(i_h_start + height, i_h_start + self.window_size))
316             ]
317             for i_w_start, i_h_start in itertools.product(range(num_width_windows), range
318 (num_height_windows))
319         ]

```

```

316     x_windows = torch.zeros(len(windows_indexes), batch, channels, min(self.
window_size, width), min(self.window_size, height))
    y_windows = torch.zeros(len(windows_indexes), batch, channels, min(self.
window_size, width), min(self.window_size, height))
318     for i, indexes in enumerate(windows_indexes):
        x_windows[i, :, :, :] += torch.index_select(torch.index_select(x, 2, torch
.tensor(indexes[0], dtype=torch.int)), 3, torch.tensor(indexes[1], dtype=torch.int))
320        y_windows[i, :, :, :] += torch.index_select(torch.index_select(y, 2, torch
.tensor(indexes[0], dtype=torch.int)), 3, torch.tensor(indexes[1], dtype=torch.int))

322        x_means = x_windows.mean(dim=(3, 4))
        y_means = y_windows.mean(dim=(3, 4))
324        x_variances = x_windows.var(dim=(3, 4), unbiased=True)
        y_variances = y_windows.var(dim=(3, 4), unbiased=True)
326        x_means_expanded = x_means \
            .reshape(num_width_windows * num_height_windows, batch, channels, 1, 1) # \
328            # .expand(num_width_windows * num_height_windows, batch, channels, min(self.
window_size, width), min(self.window_size, height))
        y_means_expanded = y_means \
330            .reshape(num_width_windows * num_height_windows, batch, channels, 1, 1) # \
            # .expand(num_width_windows * num_height_windows, batch, channels, min(self.
window_size, width), min(self.window_size, height))
332        bessel = (min(self.window_size, width) * min(self.window_size, height))
        bessel = bessel / (bessel - 1)
334        # bessel = 1
        cov = bessel * ((x_windows - x_means_expanded) * (y_windows - y_means_expanded)).
mean(dim=(3, 4))

336        out = (2 * x_means * y_means + self.c_1) * (2 * cov + self.c_2) \
338            / ((x_means ** 2 + y_means ** 2 + self.c_1) * (x_variances + y_variances +
self.c_2))
        return (1 - out.mean(dim=(0, 2))) / 2
340

342 class WassersteinApproximation(Metric):
    """
344     Implementantation of dual-Sinkhorn divergence
    """
346

    def __init__(self, transform:Union[Transform, None] = None, regularization: float =
5, iterations: int = 250, verbose: bool = False):
348         """
        Constructor
350
        :param regularization: regularization coefficient of the entropy term in the
optimization problem
352        :param iterations: fixed number of iterations
        :param verbose: whether to be noisy or not - for debugging reasons
354        """
        super().__init__(transform)
356        self.regularization = regularization
        self.iterations = iterations
358        self.verbose = verbose

360    def compute(self, x:torch.Tensor, y:torch.Tensor) -> torch.Tensor:
    if self.verbose:
362        print('ENTERING WASSERSTEIN')

364        if x.ndim != 4 or y.ndim != 4:
            raise ValueError("Not a batch of images")
366        if x.shape != y.shape:
            raise ValueError("Given images of different shapes")
368        if any(x.flatten() < 0) or any(y.flatten() < 0):
            raise ValueError("Given images are with negative values")

370        batch = x.shape[0]

```

```

372     channels = x.shape[1]
373     width = x.shape[2]
374     height = x.shape[3]

375     if channels > 1:
376         raise NotImplementedError("Wasserstein not implemented for multi-channel
377 images")

378     if (x < 0).sum() > 0 or (y < 0).sum() > 0:
379         raise ValueError("Images must be given with non-negative entries.")

380     # Normalization -> into probability distribution
381     x_norm, y_norm = (x / x.sum(dim=(2, 3), keepdim=True)).reshape(batch, width *
382 height), \
383 (y / y.sum(dim=(2, 3), keepdim=True)).reshape(batch, width * height)

384     cost_matrix = torch.tensor(
385         [
386             [
387                 abs(i // width - j // width) + abs(i % width - j % width)
388                 for j in range(width * height)
389             ]
390             for i in range(width * height)
391         ]
392     )
393     # cost_matrix = cost_matrix / cost_matrix.sum()

394     dists = torch.zeros(batch)

395     for i in range(batch):
396         dists[i] += self.compute_vectors_distance(x_norm[i].flatten(), y_norm[i].
397 flatten(), cost_matrix)
398         if self.verbose:
399             print(f'-COMPUTED DISTANCE {i + 1 } out of {batch}'))
400         if self.verbose:
401             print('LEAVING WASSERSTEIN')
402         return torch.Tensor(dists)

403 def compute_vectors_distance(self, x, y, cost_matrix, retain_all_iterations: bool =
404 False):
405     indices = (x != 0)
406     x_non_zero = x[indices]
407     x_non_zero_dim = x_non_zero.shape[0]

408     # Algorithm from paper https://proceedings.neurips.cc/paper/2013/file/af21d0c97db2e27e13572cbf59eb343d-Paper.pdf

409     # u_vector_prev = torch.ones(x_non_zero_dim) / x_non_zero_dim
410     u_vector = torch.ones(x_non_zero_dim) / x_non_zero_dim
411     K_matrix = (- self.regularization * cost_matrix[indices, :]).exp()
412     K_tilde_matrices = torch.diag(1 / x_non_zero) @ K_matrix

413     if self.verbose:
414         print('-STARTING ITERATIONS')

415     if not retain_all_iterations:
416         for _ in range(self.iterations):
417             u_vector = 1 / (K_tilde_matrices @ (y / (K_matrix.transpose(0, 1) @
418 u_vector)))
419             v_vector = y / (K_matrix.transpose(0, 1) @ u_vector)
420             dist = (u_vector * ((K_matrix * cost_matrix[indices, :]) @ v_vector))
421             return dist.sum()
422     else:
423         dists = []
424         for _ in range(self.iterations):
425             u_vector = 1 / (K_tilde_matrices @ (y / (K_matrix.transpose(0, 1) @
426 u_vector)))

```

```
432         v_vector = y / (K_matrix.transpose(0, 1) @ u_vector)
433         dist = (u_vector * ((K_matrix * cost_matrix[indices, :]) @ v_vector))
434         dists.append(dist.sum())
    return dists
```