情報意味論（12）
強化学習

櫻井彰人
慶應義塾大学理工学部

まずMDPについて

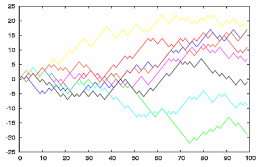
- 確率過程
- マルコフ性
- マルコフ鎖
- マルコフ決定過程
- 強化学習
- 強化学習の技法

確率過程

- 簡単に言えば: ランダムな時系列
- しばしば、インデックスのついた確率変数の集まりと考える
- 基本: 状態とその状態にいる確率（時刻でインデックスされている）の集合
- 離散確率過程を考える

確率過程の例

- 古典: ランダムウォーク
  - ある時刻 t_0 に状態 X_0 で開始する
  - 時刻 t_i にて、ステップ Z_i だけ動く。ただし
    $P(Z_i = -1) = p$ and $P(Z_i = 1) = 1 - p$
  - すなわち、時刻 t_i においては状態 $X_i = X_0 + Z_1 + \ldots + Z_i$



http://en.wikipedia.org/wiki/Image:Random_Walk_example.png

マルコフ性

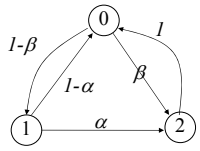
- "無記憶性" である
- 確率過程がマルコフ性を持つとは、状態が X_{n+1} となる（条件付）確率が現在の状態 X_n のみに依存して、過去の状態（系列）に依存しない場合である
  - Prob { Xn = k | Xn-1 = a, Xn-2 = b, … }
    = Prob { Xn = k | Xn-1 = a }

マルコフ性の例

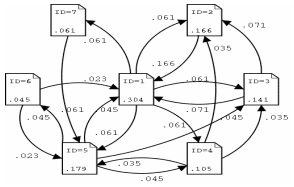
- 囲碁、将棋、チェス、オセロ、、、:
  - 現在状態: 盤面（持ち駒があるならそれを含め）の現在の状態
  - 遷移する次の状態に関するすべての情報を持っている
    - 盤面自体であることに注意
  - 従って、マルコフ性があると考えてよい

マルコフ鎖

- マルコフ性を持った離散時間確率過程
- 確率過程でなくてもマルコフ鎖とみなすことにより、有用な結果が得られることがある



$$PR(A) = \frac{1-d}{N} + d\left(\frac{PR(B)}{L(B)} + \frac{PR(C)}{L(C)} + \frac{PR(D)}{L(D)} + \cdots\right).$$



http://en.wikipedia.org/wiki/PageRank

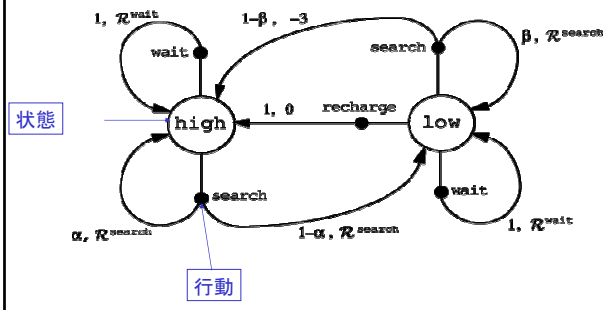
マルコフ決定過程 (MDP)

- 離散時間の決定過程
- マルコフ鎖の拡張
- 拡張部分:
  - 行動(action)の追加 (選択)
  - 報酬(rewards)の追加 (動機付け)
- (各状態に対して)行動が決まっていれば、MDPはマルコフ鎖と同じ

MDPs の記述

- 対 (S, A, P(.,.), R(.)))
  - S : 状態空間(state space)
  - A : 行動空間(action space)
  - $P_a(s, s') = Pr(s_{t+1} = s' \mid s_t = s, a_t = a)$
  - R(s) = 状態 s における即時報酬
- 目標は、累積報酬を最大化
- 有限 MDPs : 状態と行動が有限

MDPの遷移グラフ例



MDP の解 = 方策 π

- (過去に履歴とは独立して)現在の状態に基づきとるべき行動を与える
- (離散MDPの場合)状態を添え字とする2配列で表現
  - V : 価値関数(value function), 現在の方策に従って行動した場合に得られる期待(割引き)累積報酬
  - π : 方策(policy), つぎにとるべき行動

$$\pi(s) := \arg\max_a \sum_{s'} P_a(s,s')V(s')$$

$$V(s) := R(s) + \gamma \sum P_{\pi(s)}(s,s')V(s')$$

いろいろ方法はある

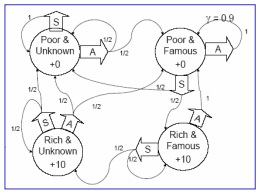
$$\pi(s) := \arg\max_a \sum_{s'} P_a(s,s')V(s') \quad 1$$

$$V(s) := R(s) + \gamma \sum P_{\pi(s)}(s,s')V(s') \quad 2$$

Value Function

- Value Iteration
- Policy Iteration
- Modified Policy Iteration
- Prioritized Sweeping

例: Value Iteration



$$V(s) := R(s) + \gamma \max_a \sum_{s'} P_a(s,s') V(s')$$

k	V^k(PU)	V^k(PF)	V^k(RU)	V^k(RF)
1	0	0	10	10
2	0	4.5	14.5	19
3	2.03	8.55	18.55	24.18
4	4.76	11.79	19.26	29.23
5	7.45	15.30	20.81	31.82
6	10.23	17.67	22.72	33.68

興味がつきないのは、、、

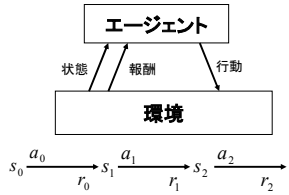
- もし遷移確率がわかっているなら、これは、単に計算の問題(とはいえ、それはそれで興味がある)、しかし、
- もし、遷移確率が未知だとしたら、どうしたらよいか？
- お手上げ？
- 強化学習が立ち向かう課題である

概要

- 強化学習とは
  - ある環境内で、状態を観測し行動する自律エージェントが、その目的を達するための最適方策を学習する方法
  - 学習は、行動の結果得られる報酬に基づく．報酬は、間接的で遅延を伴ってよい．受け取る報酬の累積を最大化する．
  - ***Q* learning** は、自分の行動が環境に与える影響に関する予備知識なしに、得られる遅延報酬から最適戦略を獲得する学習方法である．
    - 動的計画法に関連している

まずはイントロ

- ***エージェント***
  - 環境(environment)の状態(state)を観測するセンサーを持ち、環境を変えることになる一群の行動(action)をとることができる



目標：(割引)累積報酬を最大化する行動の選択　$r_0 + \gamma r_1 + \gamma^2 r_2 + \cdots$

ただし　$0 \le \gamma < 1$

なぜ割引くか？

- ***目標***
  - 各状態でとる行動に、その評価値(数値)を与える *reward function* を用いて定義することができる
- エージェントの ***task***
  - 累積報酬(行動開始から終了まで)を最大化する制御方策(policy)を学習すること
  - 制御方策　$\pi : S \to A$ (deterministic)
    - 関数近似の問題でもある　$a = \pi(s)$
- 問題設定
  - 行動の結果は、deterministic でも nondeterministic でもよい
  - 行動が環境へ与える影響についての予備知識は、エージェントが持っていても持っていなくてもよい

- 特徴的な特徴を少々
  - **遅延報酬 *Delayed reward***
    - 今貰う報酬は過去の行動の結果であるかもしれない．従って、訓練データは，一連の行動の結果である報酬列となる．($\langle s, \pi(s) \rangle$ではない)
      - 貢献度分配問題 credit assignment problem
  - **探索か利用か *Exploration/Exploitation***
    - エージェントがとる行動列に依存して、訓練データの分布がかわる
    - 探索 とは未知の状態や行動をとる行動列(新しい情報を得ようとする行動列)をとること
    - 利用 とは学習済みの知識のもと最大の報酬が得られる(累積報酬を最大化する)行動列を選ぶこと

- **部分観測状態 *Partially observed states***
  - 状態の観測値一組が(実質的に異なる)複数の状態に対応すること(部分観測可能 partially observable). それまでの状態観測値列を用いて状態が絞れればよい(どれだけ記憶する?). 確率的に行動して平均化することを祈るか.
- **生涯学習 *Life-long learning***
  - 複数個のタスクを学習する場合に、もし、同じ(類似)環境にあるなら、過去に学習した方策や経験した報酬が、新しいタスクの学習に有向かもしれない
  - 環境は(自分の行動による以外に)刻々と変わるかもしれない. そのような環境変化に対応する.

タスクの記述

- マルコフ決定過程 Markov Decision Process (MDP)
  - 状態の有限集合 S, 行動の有限集合 A
  - 離散的な時間ステップ t ごとに,
    - エージェントは現在の状態 s_t を観測し、とるべき行動 a_t を選択する
    - 環境は報酬 $r_t = r(s_t, a_t)$ を与え, 次の状態 $s_{t+1} = \delta(s_t, a_t)$ となる
    - マルコフ条件
      - $r(s_t, a_t)$ と $\delta(s_t, a_t)$ は現在の状態と行動にのみ依存
      - 関数 δ と r は non-deterministic であってよいし, エージェントにとって未知でよい
      - 今回は deterministic な場合のみ扱う.

- エージェントのタスク
  - 行動方策 $\pi : S \to A,\ \pi(s_t) = a_t$ を、累積報酬が最大化するように学習する
  - 任意の初期状態 s_t から開始し任意の行動方策 π に従った場合に得られる累積報酬は

$$V^{\pi}(s_t) \equiv r_t + \gamma r_{t+1} + \gamma^2 r_{t+2} + \cdots \equiv \sum_{i=0}^{\infty} \gamma^i r_{t+i}$$

    - $V^{\pi}(s)$: 割引付き(discounted)累積報酬(cumulative reward)
    - $0 \le \gamma < 1$: 将来の報酬に対する割引率.
    - 累積報酬には別の定義がある(別の結果が得られる)

有限時区間報酬 *finite horizon* reward　　平均報酬 *average* reward

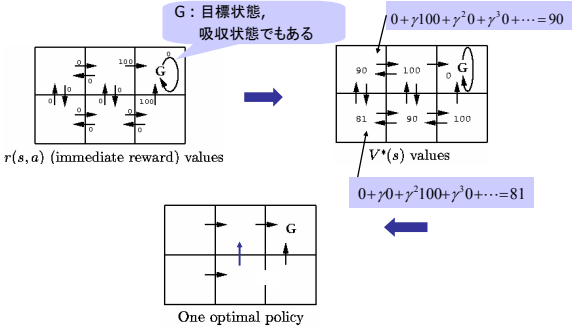
$$\sum_{i=0}^{h} r_{t+i} \qquad \lim_{h \to \infty} \frac{1}{h} \sum_{i=0}^{h} r_{t+i}$$

- 最適方策 optimal policy
  - 方策 π であって, 任意の状態 $V^{\pi}(s)$ に対して次を最大化するもの

$$\pi^* \equiv \operatorname*{argmax}_{\pi} V^{\pi}(s), (\forall s)$$

$V^{\pi^*}(s) \Rightarrow V^*(s)$

- 単純な grid-world 環境　$\gamma = 0.9$



Q learning

- 任意環境でエージェントが最適方策を学習できるようにするには、どうしたらよいだろうか?
  - 関数 $\pi^* : S \to A$ を直接学習するのは難しい
    - 訓練事例: 状態・行動対に対して得られた即時報酬の列
      - $i = 0, 1, 2, \ldots$ について $r(s_i, a_i)$　($\langle s, a \rangle$ ではない)
    - すなわち、状態・行動対上で定義される評価関数を学習する
- エージェントが学習を試みるべき評価関数とは?
  - 状態 s における最適行動,

$$\pi^*(s) \equiv \arg\max_a [r(s,a) + \gamma V^*(\delta(s,a))]$$

  - 最適方策が学習できる. ただし, 即時報酬関数 r と状態遷移関数 δ とに関する完全な知識がある場合には、という条件をつける
  - しかし実際のところ、エージェントが r と δ の完全な知識を持つことは不可能

➡ **Q 関数を考えよう**

Q 関数

- **Q 関数とは**
  - 状態 s から開始し最初の行動が a であるときの、割引き付き累積報酬の最大値

$$Q(s,a) = r(s,a) + \gamma V^*(\delta(s,a))$$

  - 状態 s における最適行動 a , $\pi^*(s) = \arg\max_a Q(s,a)$
  - もしエージェントが Q 関数を学習すると,
    - エージェントが関数 r と δ に関する知識を持っていなくとも、最適行動を選ぶことができる.
    - 行動を先読みした探索をしなくとも、最適行動が選択できる
      - Q 値を最大化する行動を選べば、最適方策となるからである

Q 学習のアルゴリズム

- 逐次近似 $Q(s,a) = r(s,a) + \gamma V^*(\delta(s,a))$
  - Q と V^* の関係: $V^*(s) = \max_{a'} Q(s,a')$
  - Q の再帰的定義: $Q(s,a) = r(s,a) + \gamma \max_{a'} Q(\delta(s,a),a')$
  - $\hat{Q}$: Q に対する学習者の推定(仮説).
    - 仮説 $\hat{Q}$ は、普通、状態・行動対に関する大きな表(Q 値表)を用いて表現される
    - 状態・行動対 <s, a> に関する値は $\hat{Q}(s,a)$
- 更新規則

$$\hat{Q}(s,a) \leftarrow r + \gamma \max_{a'} \hat{Q}(s',a')$$

  - 結果として得られる新しい状態 s' と報酬 r とから学習する

Q 学習アルゴリズム (deterministic MDP に対して)

- 全 s,a について要素 $\hat{Q}(s,a)$ をゼロとする
- 現在の状態を観測する s
- 無限ループ
  - 行動 a を選び、それを実行する
  - 即時報酬を受領 r
  - 新しい状態を観測する s'
  - $\hat{Q}(s,a)$ に対して表を更新する

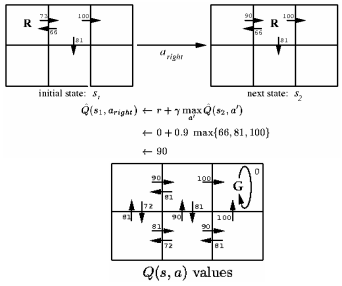
$$\hat{Q}(s,a) \leftarrow r + \gamma \max_{a'} \hat{Q}(s',a')$$

  - $s \leftarrow s'$

deterministic Markov 決定過程
r は上限あり
どの状態・行動対も、無限回数、訪問される

例図

- 学習は、複数のエピソード(ゴールに到達すると1エピソード)から構成されていると仮定



- 個々のエピソードでは, エージェントはランダムに選択された初期状態から開始し、ゴールにいたるまで行動実行を繰り返す
- ゴール状態に到達すると, 当該エピソードは終了し、エージェントは、次のエピソードに備え、新しい、ランダムに選ばれた初期状態に運ばれる.

- Q 学習アルゴリズムの一般的な性質
  - $\hat{Q}$ 値は、学習期間中、減少しない.

$$(\forall s,a,n) \quad \hat{Q}_{n+1}(s,a) \geq \hat{Q}_n(s,a)$$

  - どの $\hat{Q}$ 値も区間 [0, 真の Q] にある.

$$(\forall s,a,n) \quad 0 \leq \hat{Q}_n(s,a) \leq Q(s,a)$$

- Deterministic MDP.
- $\hat{Q}$ 値の初期値はゼロ.
- 報酬は非負.

収束

- $\hat{Q}$ は真の Q に収束する!
  - 仮定
    - 系は deterministic MDP.
    - 即時報酬は上限あり. $(\forall s,a) \quad |r(s,a)| \leq c$
    - エージェントは、全ての状態・行動対を無限回訪問することになるよう、行動選択を続ける.
  - キーとなるアイデア
    - 誤差最大の、表の要素 $\hat{Q}(s,a)$ の誤差は γ 因子 だけ、表の更新に伴い、減少する.

$\hat{Q}_n(s,a)$ **は** $Q(s,a)$ に $n \to \infty$ のとき収束する. for all s, a.

- 略証.
  - $\hat{Q}_n$ を n 回更新後の表とする. また, Δ_n を $\hat{Q}_n$ 中の最大誤差とする; すなわち

$$\Delta_n \equiv \max_{s,a} |\hat{Q}_n(s,a) - Q(s,a)|$$

  - $n+1$ 回目に更新される、表中のどの要素 $\hat{Q}_n(s,a)$ に対しても, 更新後の推定値 $\hat{Q}_{n+1}(s,a)$ の誤差は

$$\begin{aligned} |\hat{Q}_{n+1}(s,a) - Q(s,a)| &= |(r + \gamma \max_{a'} \hat{Q}_n(s',a')) - (r + \gamma \max_{a'} \hat{Q}(s',a'))| \\ &\le \gamma \max_{s'',a'} |\hat{Q}_n(s'',a') - \hat{Q}(s'',a')| \\ |\hat{Q}_{n+1}(s,a) - Q(s,a)| &\le \gamma \Delta_n \end{aligned}$$

$$|\hat{Q}_{n+1}(s,a) - Q(s,a)| \le \gamma^n \Delta_0, \quad \Delta_n \to 0 \text{ as } n \to \infty$$

実験方法

- エージェントはどうやって行動を選択すべきか?
  - 行動 a は $\hat{Q}(s,a)$ を最大化するように選ぶ(知識の利用)
    - リスク: 学習の初期段階で発見した高 $\hat{Q}$ 値の行動にコミットしすぎる可能性がある
    - より高い値を持つ他の行動への探索が行われない可能性あり.
  - 確率的アプローチをとろう

$$P(a_i \mid s) = \frac{k^{\hat{Q}(s,a_i)}}{\sum_j k^{\hat{Q}(s,a_j)}} \qquad k > 0$$

    - より高い Q 値をもつ行動は、より高い確率をもつ
    - 大 k → (経験の)利用, 小 k → 探索
    - k は繰り返し回数に応じて変更する (探索 → 利用)

更新列

- 収束速度の改善方法(学習の効率化)
  - 同一のエピソードを、時間的に逆順に、学習する
    - 繰り返し回数は少なくてすむ, しかし必要メモリ量は大きい
  - 過去の状態・行動対を、即時報酬とともに記憶する
    - もし $\hat{Q}(s,a)$ が次の状態 $s' = \delta(s,a)$ の $\hat{Q}(s',a)$ によって決まり、かつ、それ以降の学習が $\hat{Q}(s',a)$ を変えるら, 当該遷移 <s, a> を選び続けると $\hat{Q}(s,a)$ の値が変わりうる
- もし $r(s,a)$ と $\delta(s,a)$ が既知なら, もっと効率的な方法が可能である

報酬と行動が nondeterministic な時

- Nondeterministic な場合
  - 報酬関数 $r(s,a)$ と遷移関数 $\delta(s,a)$: 確率的
- Nondeterministic な Markov 決定過程
  - $r(s,a)$ と $\delta(s,a)$ の確率分布は現在の状態と行動にのみ依存する
  - 割引き付き累積報酬の*期待値*

$$V^{\pi}(s_t) \equiv E\left[\sum_{i=0}^{\infty} \gamma^i r_{i+1}\right]$$

  - deterministic な場合も含む

- Q-値を再定義: Q の期待値をとる

$$\begin{aligned} Q(s,a) &\equiv E[r(s,a) + \gamma V^*(\delta(s,a))] \\ &= E[r(s,a)] + \gamma E[V^*(\delta(s,a))] \\ &= E[r(s,a)] + \gamma \sum_{s'} P(s' \mid s,a) V^*(s') \qquad V^*(s) = \max_{a'} Q(s,a') \end{aligned}$$

$$Q(s,a) = E[r(s,a)] + \gamma \sum_{s'} P(s' \mid s,a) \max_{a'} Q(s',a')$$

- 更新規則

$$\hat{Q}_n(s,a) \leftarrow (1-\alpha_n)\hat{Q}_{n-1}(s,a) + \alpha_n \left[r + \max_{a'} \hat{Q}_{n-1}(s',a')\right]$$

ただし $\alpha_n = \dfrac{1}{1 + visits_n(s,a)}$

  - $visits_n(s,a)$: (この第 n 回目の更新を含め)これまでにこの状態・行動対を訪問した回数

- 現在の $\hat{Q}$ 値の重みが時間とともに減少
- $\hat{Q}$ 値の更新が、deterministic な場合に比べ、よりゆっくりとなる
- 学習時に、ある速度で α を小さくしていくと, 正しい Q 関数に収束する
  - nondeterministic MDP に対する Q 学習の収束
    - 報酬は有界, 初期値は任意の有限値,

もし $0 \le \alpha_n < 1$ かつ $\sum_{i=1}^{\infty} \alpha_{n(i,s,a)} = \infty, \ \sum_{i=1}^{\infty} [\alpha_{n(i,s,a)}]^2 < \infty$ ならば $\hat{Q}(s,a)$ は $Q(s,a)$ に $n \to \infty$ のとき確率1で収束, for all s, a.

Temporal difference learning

- Q-学習
  - 学習は、隣接状態の Q 値推定値の差を、繰り返し減少させることにより、行われる
  - より一般的な *temporal difference algorithms* クラスの特別な形
    - エージェントが異なった時刻に得た Q 値推定値の差を、減少させることにより、学習が進行する
  - Q 学習の学習規則：

$$Q^{(1)}(s_t,a_t) \equiv r_t + \gamma \max_a \hat{Q}(s_{t+1},a)$$

$$Q^{(n)}(s_t,a_t) \equiv r_t + \gamma r_{t+1} + \cdots + \gamma^{(n-1)} r_{t+n-1} + \gamma^n \max_a \hat{Q}(s_{t+n},a)$$

$$\vdots$$

- TD(λ) by Sutton(1988)

$$Q^{\lambda}(s_t,a_t) = r_t + \gamma[(1-\lambda)\max_a \hat{Q}(s_t,a_t) + \lambda Q^{\lambda}(s_{t+1},a_{t+1})] \quad 0 \le \lambda \le 1$$

- もし $\lambda = 0$,
  - $\hat{Q}$ 値の推測値の1-ステップ分の違いしか考えないことに相当

λ が増大するにつれ, アルゴリズムは、より離れた先読みとの差をより強めるするようになる

- もし $\lambda = 1$,
  - ただ観測された r_{t+1} 値のみを考えることになる. 現在の $\hat{Q}$ の推測値からの貢献は考えない

TD(λ) を考えた動機

- ある状況では, より離れた先読みを考えた方が、学習が進む

例からの一般化

- Q 学習もっともきつい制約は
  - 目標関数は、明示的に、表で表現され、個々の入力値（状態・行動対）に対して、それぞれに記述しないといけないこと
  - 一種の丸暗記であり、未知の状態・行動対に対する Q 値の推定を、過去見た値から一般化しようということは、一切、試みられていない

- 実用的なシステム
  - 関数近似（例えば、ニューラルネット+BP）を Q 学習規則とを結合する. すなわち、状態・行動対の表をニューラルネットに置き換えて学習する. それぞれ $\hat{Q}(s,a)$ の更新を訓練事例とする:
    - 状態と行動を何らかの方法でコード化し、ネットワークの入力とし、出力の目的値として、Q学習の更新規則で得られる $\hat{Q}$ を用いる

動的計画法との関係

- 強化学習（Q 学習）は MDP をとく 動的計画法 dynamic programming に深く関係している.
  - DP: $r(s,a)$ と $\delta(s,a)$ に関する完全な知識が必要
    - 計算の手間がより少ない方法で求解できる
- ベルマン方程式 Bellman's equation
  - 多くの動的計画法の基礎

$$(\forall s \in S)\ V^*(s) = E\left[r(s,\pi(s)) + \gamma V^*(\delta(s,\pi(s)))\right]$$

  - 最適方策 π^* はこのベルマン方程式を満たし、ベルマン方程式を満たす任意の方策 π は最適方策である.

レポート課題3.3

- （問題文は長いのですが、回答は短いはずです）
- 格子世界の例での報酬は、目標達成に対して正、存在空間の端との衝突に対しては負、それ以外ではゼロとしている。これらの報酬の符号は重要であろうか、それとも単に相対的な値の差の問題だろうか。式

$$V^{\pi}(s_t) \equiv r_t + \gamma r_{t+1} + \gamma^2 r_{t+2} + \cdots \equiv \sum_{i=0}^{\infty} \gamma^i r_{t+i}$$

を用いて、全ての報酬に定数 C を加えることが、全ての状態の価値に定数 K を加えることになり、いかなる方策のもとでのいかなる状態の相対的価値にも影響を与えないことを示せ。なお、K を C と γ で表せ。