

Provably Efficient Reinforcement Learning with Linear Function Approximation

Chi Jin

University of California, Berkeley
chijin@cs.berkeley.edu

Zhuoran Yang

Princeton University
zy6@princeton.edu

Zhaoran Wang

Northwestern University
zhaoranwang@gmail.com

Michael I. Jordan

University of California, Berkeley
jordan@cs.berkeley.edu

【强化学习 97】Linear MDP



张楚琦

清华大学 交叉信息院博士在读

19 人赞同了该文章

对于线性 MDP 模型，可以做线性函数拟合。

原文传送门

Jin, Chi, et al. "Provably efficient reinforcement learning with linear function approximation." arXiv preprint arXiv:1907.05388 (2019).

特色

考虑对价值函数做函数拟合（function approximation）。当函数拟合使用的函数 capacity 大的时候，容易遇到 sparsity 的问题，即所遇到的大多数状态的附近都没有其他样本，则很难估计出一个准确的价值函数（variance 大）；当函数拟合使用的函数 capacity 小的时候，容易遇到 misspecification 的问题，即所使用的函数族不足以表示真实的价值函数（bias 大）。为此，文章提出了线性 MDP 模型，在线性 MDP 模型下，线性的函数拟合不会产生 bias，同时也定量分析了如果稍微偏离线性 MDP 模型，线性函数拟合会产生的 bias 大小。值得注意的是，文章提出的线性 MDP 模型能够概括 tabular case。

同时，要设计一个有效的（probably efficient）算法，还需要做探索（或称作 exploration-exploitation tradeoff）。探索问题可以想象成如何有效地估计到 transition function / matrix。

- 有些算法假设能有一个 simulator，这样能够设置成任意的状态（比如，最简单的那种 tabular Q-learning），这等于是能够直接把你带到 transition matrix 的任意行中。
- 有些算法假设稍微不那么强，它们假设有一个 restart distribution（比如专栏里面讲到的 Kakade 02 和 19 年的两篇工作），这样能够从一个在状态空间中分布比较均匀的初始分布出发来采样，这等于是从一定程度上保证了能比较均匀地访问到 transition matrix 的所有行。
- 还有些算法假设了比较简单的 transition function，比如 transition function 是（比较）确定性的或者自由度较低的（本文引用的若干文献），这等于是对 transition function 加了一些先验，从而用更少的样本能够估计到 transition function。
- 本文使用 UCB 方法来解决探索问题，在初始状态甚至可以是对手故意选取的情况下，能够达到 $\tilde{O}(\sqrt{dH^2T})$ 。其中 d 是线性化特征的维度（后面会详讲）

- 为什么在这种情形下，**regret**会有一个上界呢？可以这么理解，如果对手挑选了一个从来没有见过的状态，我没什么信息都没有，容易产生一个较大的 regret，但通过遭受这个 regret 我们获取了更多的信息；最多在所有的状态上都通过遭受 regret 来学习，因此总是有一个 regret 的上限的。
- 为什么 **regret** 上界和状态空间的大小没关系，而只和 **d** 有关呢？因为这里不是直接对 transition matrix 估计，而是估计它朝 **d** 维的『基底』上的投影；只要对每一维度上的投影估计准确即能得到最优策略。

过程

一、Linear MDP Model

Assumption A (Linear MDP [12, 29]). MDP($\mathcal{S}, \mathcal{A}, H, \mathbb{P}, r$) is a *linear MDP* with a feature map $\phi: \mathcal{S} \times \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{R}^d$, if for any $h \in [H]$, there exist d unknown (signed) measures $\mu_h = (\mu_h^{(1)}, \dots, \mu_h^{(d)})$ over \mathcal{S} and an unknown vector $\theta_h \in \mathbb{R}^d$, such that for any $(x, a) \in \mathcal{S} \times \mathcal{A}$, we have

$$\mathbb{P}_h(\cdot | x, a) = \langle \phi(x, a), \mu_h(\cdot) \rangle, \quad r_h(x, a) = \langle \phi(x, a), \theta_h \rangle. \quad (3)$$

Without loss of generality, we assume $\|\phi(x, a)\| \leq 1$ for all $(x, a) \in \mathcal{S} \times \mathcal{A}$, and $\max_{i \in [d]} \|\mu_h^{(i)}\| \leq \sqrt{d}$ for all $h \in [H]$.

需要注意几件事情：

- 虽然特征向量只有 **d** 维，但是 transition function 中 $\mu_h(\cdot)$ 可以是任意在状态空间上的函数，因此在该模型下 transition function 的自由度仍然为无穷维；显然，reward function 的自由度是 **d** 维。
- Linear MDP 看起来做了比较强的假设，要求这些过程都是线性的。但是只要 **d** 足够大，该模型可以完全概括 tabular MDP 的情形。参见下图的 Example 2.1。
- 要使得 transition function 是一个合法的函数，在特征向量 $\phi(x, a)$ 给定的情况下， $\mu_h(\cdot)$ 的选取需要有一定的限制。下图的 Example 2.2 给出了一个合法的例子。下图的 Proposition A.1. 给出了具体的限制条件。
- 最后这件事情最为重要：**Linear MDP** 和 **linear function approximation** 之间具有必然联系！具体来说，
 - 如果模型为线性的，那么任意策略的价值函数就可以用线性函数拟合来准确表示（Proposition 2.3.）；
 - 如果价值函数用线性函数拟合来表示，要希望任意策略的 Bellman 算子作用到某个线性价值函数上之后还是线性价值函数，那么 MDP 模型必须为线性（Proposition 5.1.）。

Example 2.1 (Tabular MDP). For the scenario with finitely many states and actions, letting $d = |\mathcal{S}| \times |\mathcal{A}|$, then each coordinate can be indexed by state-action pair $(x, a) \in \mathcal{S} \times \mathcal{A}$. Let $\phi(x, a) = \mathbf{e}_{(x,a)}$ be the canonical basis in \mathbb{R}^d . Then if we set $\mathbf{e}_{(x,a)}^\top \mu_h(\cdot) = \mathbb{P}_h(\cdot | x, a)$ and $\mathbf{e}_{(x,a)}^\top \theta_h = r_h(x, a)$ for any $h \in [H]$, we recover the tabular MDP.

Example 2.2 (Simplex Feature Space). When the feature space, $\{\phi(x, a): (x, a) \in \mathcal{S} \times \mathcal{A}\}$, is a subset of the d -dimensional simplex, $\{\psi | \sum_{i=1}^d \psi_i = 1 \text{ and } \psi_i \geq 0 \text{ for all } i\}$, a linear MDP can be instantiated by choosing $\mathbf{e}_i^\top \mu_h$ to be an arbitrary probability measure over \mathcal{S} and letting θ_h be any vector such that $\|\theta_h\|_\infty \leq 1$.

Proposition A.1. For a linear MDP, for any $(x, a, h) \in \mathcal{S} \times \mathcal{A} \times [H]$, we have

$$\phi(x, a)^\top \mu_h(\mathcal{S}) = 1, \quad \phi(x, a)^\top \mu_h(\mathcal{B}) \geq 0, \quad \forall \text{ measurable } \mathcal{B} \subseteq \mathcal{S}. \quad (12)$$

Proposition 2.3. For a linear MDP, for any policy π , there exist weights $\{\mathbf{w}_h^\pi\}_{h \in [H]}$ such that for any $(x, a, h) \in \mathcal{S} \times \mathcal{A} \times [H]$, we have $Q_h^\pi(x, a) = \langle \phi(x, a), \mathbf{w}_h^\pi \rangle$.

Proof. The linearity of the action-value functions directly follows from the Bellman equation in Eq. (1):

$$Q_h^\pi(x, a) = r(x, a) + (\mathbb{P}_h V_{h+1}^\pi)(x, a) = \langle \phi(x, a), \boldsymbol{\theta}_h \rangle + \int_{\mathcal{S}} V_{h+1}^\pi(x') \cdot \langle \phi(x, a), d\mu_h(x') \rangle.$$

Therefore, we have $Q_h^\pi(x, a) = \langle \phi(x, a), \mathbf{w}_h^\pi \rangle$ where \mathbf{w}_h^π is given by $\mathbf{w}_h^\pi = \boldsymbol{\theta}_h + \int_{\mathcal{S}} V_{h+1}^\pi(x') d\mu_h(x')$.

Proposition 5.1. Let $\mathcal{Q} = \{Q | Q(\cdot, \cdot) = \phi(\cdot, \cdot)^\top \mathbf{w}, \mathbf{w} \in \mathbb{R}^d\}$ be the family of linear action-value functions. Suppose that \mathcal{S} is a finite set, and for any $x \in \mathcal{S}$, there exist two actions $a, \bar{a} \in \mathcal{A}$ such that $\phi(x, a) \neq \phi(x, \bar{a})$. Then, $\mathbb{T}_h^\pi \mathcal{Q} \subset \mathcal{Q}$ for all π only if the Markov transition measures \mathbb{P}_h are linear in ϕ .

二、算法

算法使用 Least-Square Value Iteration (LSVI) + Upper-Confidence Bound (UCB)。每一轮迭代分为两个步骤：

- 第一个步骤是基于历史上所有的样本来估计 Q 函数的参数，该 Q 函数是增加了 UCB bonus 的 Q 函数置信上界；
- 第二个步骤是基于估计到的 Q 函数，直接采用 argmax 来做 rollout（注意到在标准的 Q-learning 中，这一步需要加 ϵ -greedy 来做探索，但是这里由于使用了更有效的 UCB 因此代替了 ϵ -greedy）。

先给出算法框图，然后再详细讲解。

Algorithm 1 Least-Squares Value Iteration with UCB (LSVI-UCB)

<pre> 1: for episode $k = 1, \dots, K$ do 2: Receive the initial state x_1^k. 3: for step $h = H, \dots, 1$ do 4: $\Lambda_h \leftarrow \sum_{\tau=1}^{k-1} \phi(x_h^\tau, a_h^\tau) \phi(x_h^\tau, a_h^\tau)^\top + \lambda \cdot \mathbf{I}$. 5: $\mathbf{w}_h \leftarrow \Lambda_h^{-1} \sum_{\tau=1}^{k-1} \phi(x_h^\tau, a_h^\tau) [r_h(x_h^\tau, a_h^\tau) + \max_a Q_{h+1}(x_{h+1}^\tau, a)]$. 6: $Q_h(\cdot, \cdot) \leftarrow \min\{\mathbf{w}_h^\top \phi(\cdot, \cdot) + \beta[\phi(\cdot, \cdot)^\top \Lambda_h^{-1} \phi(\cdot, \cdot)]^{1/2}, H\}$. 7: for step $h = 1, \dots, H$ do 8: Take action $a_h^k \leftarrow \operatorname{argmax}_{a \in \mathcal{A}} Q_h(x_h^k, a)$, and observe x_{h+1}^k. </pre>	<p>Initialize:</p> <p>$\Lambda_h \leftarrow \lambda \mathbf{I}$</p> <p>$\mathbf{w}_h \leftarrow \mathbf{0}$</p>
--	---

知乎 @张楚珩

Least-Square Value Iteration (LSVI)

假设 transition function 已知，那么要求解 optimal Q function，只需要依照如下更新方式按 $h = H, \dots, 1$ 撸一遍就好了（动态规划）。

$$Q_h^*(x, a) \leftarrow [r_h + \mathbb{P}_h \max_{a' \in \mathcal{A}} Q_{h+1}^*(\cdot, a')](x, a), \quad \forall (x, a) \in \mathcal{S} \times \mathcal{A}.$$

但是实际上 transition function 是不知道的，因此只能在估计的样本上最小化上式左边和右边之间的 MSE；同时，当状态空间、动作空间很大时，很难对于每一个 (\mathbf{s}, \mathbf{a}) pair 都有数据，因此把它们往 d 维空间上做一个投影 $\phi(\mathbf{s}, \mathbf{a})$ ，并限定线性模型。得到以下优化问题

$$\mathbf{w}_h \leftarrow \operatorname{argmin}_{\mathbf{w} \in \mathbb{R}^d} \sum_{\tau=1}^{k-1} [r_h(x_h^\tau, a_h^\tau) + \max_{a \in \mathcal{A}} Q_{h+1}(x_{h+1}^\tau, a) - \mathbf{w}^\top \phi(x_h^\tau, a_h^\tau)]^2 + \lambda \|\mathbf{w}\|^2.$$

其中，L2 正则项可以避免 over-fitting（我记得至少 PRML 书里面讲过其原理）。对上述待优化函数写下来，求导，并且令导数为零，可以直接写出闭式解（见算法框图的第 4-5 行）。

Upper-Confidence Bound (UCB)

首先， $m(\mathbf{s}, \mathbf{a}) := (\phi^\top(\mathbf{s}, \mathbf{a}) \Delta_h^{-1} \phi(\mathbf{s}, \mathbf{a}))^{-1}$ （参考算法框图第 6 行）表示了 (\mathbf{s}, \mathbf{a}) 被等效地访问了多少次。考虑 Example 2.1. 中的 tabular MDP 的情形。 Δ_h 是一个 $S \times S \times A$ 的对角矩阵，对角元上的元素为该 (\mathbf{s}, \mathbf{a}) pair 在历史数据中被访问了多少次（为了防止某些 (\mathbf{s}, \mathbf{a}) pair 一次都没有访问到，会不能取逆，因此加了正则）。而接下来的操作则提取出来具体的某个 (\mathbf{s}, \mathbf{a}) 访问的次数。在非 tabular MDP 的情形下，该计数等于是把历史数据的特征向量朝 $\phi(\mathbf{s}, \mathbf{a})$ 做投影并且计数。

最后，考虑到 UCB bonus 的公式为 β/\sqrt{m} ，由此可以写出算法框图第 6 行的公式。

三、理论结果

如果实际 MDP 满足前述 Linear MDP 的要求，则有如下 regret bound。

Theorem 3.1. Under Assumption A, there exists an absolute constant $c > 0$ such that, for any fixed $p \in (0, 1)$, if we set $\lambda = 1$ and $\beta = c \cdot dH\sqrt{\epsilon}$ in Algorithm 1 with $\epsilon := \log(2dT/p)$, then with probability $1 - p$, the total regret of LSVI-UCB (Algorithm 1) is at most $\mathcal{O}(\sqrt{d^3 H^3 T \epsilon^2})$, where $\mathcal{O}(\cdot)$ hides only absolute constants.

- 该 regret bound 可以被转化为 PAC 的结果：考虑固定初始状态 \mathbf{s}_1 （而不再是每轮对手选定），根据 regret 的定义有 $\sum_{k=1}^K (V^*(\mathbf{s}_1) - V^{k*}(\mathbf{s}_1)) = \mathcal{O}(\sqrt{d^3 H^3 T}) = \mathcal{O}(\sqrt{d^3 H^4 K})$ ，取 $K = \mathcal{O}(d^3 H^4 / \epsilon^2)$ ，并且随机取一个 $k \in [K]$ ，则有 $K(V^*(\mathbf{s}_1) - V^{k*}(\mathbf{s}_1)) \approx \sum_{k=1}^K (V^*(\mathbf{s}_1) - V^{k*}(\mathbf{s}_1)) = \mathcal{O}(d^3 H^4 / \epsilon)$ ，其中约等号表示随机选取可以大概率取到低于均值的情形，在这种情况下有 $V^*(\mathbf{s}_1) - V^{k*}(\mathbf{s}_1) \approx \epsilon$ ，即需要 $KH = \mathcal{O}(d^3 H^4 / \epsilon^2)$ 的样本以拿到一个 ϵ -optimal 的策略。（跟文中算出来的差了一个 H。。）
- 空间复杂度为 $\mathcal{O}(d^2 H + dAT)$ ：储存 Δ_h 需要 $d^2 H$ ，储存 \mathbf{w}_h 需要 dH ，储存所有的 reward 需要 T ，储存所有遇到的 $\phi(\mathbf{s}, \mathbf{a})$ pair 以及所遇到状态下所有其他行动的 $\phi(\mathbf{s}, \mathbf{a}')$ ，它们需要 dAT 。
- 计算复杂度为 $\mathcal{O}(d^2 AKT)$ ：有点没算出来，跟文中的差了一个 d。。

如果实际 MDP 和前述 Linear MDP 的假设有一定的差距（misspecification），差距定义为

Assumption B (ζ -Approximate Linear MDP). For any $\zeta \leq 1$, we say that $\text{MDP}(\mathcal{S}, \mathcal{A}, H, \mathbb{P}, r)$ is a ζ -approximate linear MDP with a feature map $\phi : \mathcal{S} \times \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{R}^d$, if for any $h \in [H]$, there exist d unknown (signed) measures $\mu_h = (\mu_h^{(1)}, \dots, \mu_h^{(d)})$ over \mathcal{S} and an unknown vector $\theta_h \in \mathbb{R}^d$ such that for any $(x, a) \in \mathcal{S} \times \mathcal{A}$, we have

$$\|\mathbb{P}_h(\cdot | x, a) - \langle \phi(x, a), \mu_h(\cdot) \rangle\|_{\text{TV}} \leq \zeta, \quad |r_h(x, a) - \langle \phi(x, a), \theta_h \rangle| \leq \zeta. \quad (4)$$

Without loss of generality, we assume that $\|\phi(x, a)\| \leq 1$ for all $(x, a) \in \mathcal{S} \times \mathcal{A}$, and $\max_{h \in [H]} \|\theta_h\| \leq \sqrt{d}$ for all $h \in [H]$.

则有如下 regret bound。

Theorem 3.2. Under Assumption B, there exists an absolute constant $c > 0$ such that, for any fixed $p \in (0, 1)$, if we set $\lambda = 1$ and $\beta_k = c \cdot (d\sqrt{\iota} + \zeta\sqrt{kd})H$ in Algorithm 1 with $\iota := \log(2dT/p)$, then with probability $1 - p$, the total regret of LSVI-UCB (Algorithm 1) is at most $\mathcal{O}(\sqrt{d^3 H^3 T \iota^2} + \zeta d H T \sqrt{\iota})$.

不难理解，但存在 misspecification 的时候，最后学习到的模型一定存在 bias，因此 regret 中肯定会有关于 T 线性的项。

四、算法机制

算法中有两点最为关键

- 探索的实质就是说明要如何估计 transition function，因此这里证明的重点之一就是说明 LSVI 是如何估计到 transition function 的。
- UCB 的作用机理可以概括为：加上 UCB bonus 之后，估计的价值函数 > 最优价值函数；通过采样样本的增多，估计的价值函数 \rightarrow 实际的策略性能；而最优价值函数 > 实际的策略性能。最后的结果是实际的策略性能最后能够逼近最优价值函数。需要注意的一点是由于价值函数的更新是 bootstrapped，因此分析上也是后一层的误差会传递到前一层。
 - 关于 UCB 的机理，可以具体参考该作者前面的一篇工作 [UCB+Q-learning](#)。注意到前面的算法是 online 的，因此 Q 值的更新设置了一个 learning rate α_n 。这里比较粗暴，每次都对于所有的样本一锅端，直接计算 optimal Bellman operator 作用之后的闭式解。

这里主要来讲第一点。即，算法中使用样本估计 transition function 的方法能够逼近一个完美的 optimal Bellman operation。为了简化分析，可以 1) 扔掉 UCB 项；2) 扔掉 smoothing 的项（即 $\lambda=0$ ）。在第二个简化下，有

$$\Lambda_h^{-1} \sum_{\tau=1}^{k-1} \phi(x_h^\tau, a_h^\tau) \phi(x_h^\tau, a_h^\tau)^\top \approx \mathbf{I}.$$

一个 optimal Bellman operation，对于所有的 (x, a) 的 Q 值都做如下更新：

$$Q_h^*(x, a) \leftarrow [r_h + \mathbb{P}_h \max_{a' \in \mathcal{A}} Q_{h+1}^*(\cdot, a')](x, a), \quad \forall (x, a) \in \mathcal{S} \times \mathcal{A}.$$

算法中的基于样本的更新如下，即对于 w_h 的所有维度都做如下更新：

$$Q_h(x, a) \approx \phi(x, a)^\top w_h = \phi(x, a)^\top \Lambda_h^{-1} \sum_{\tau=1}^{k-1} \phi(x_h^\tau, a_h^\tau) [r_h(x_h^\tau, a_h^\tau) + V_{h+1}(x_{h+1}^\tau)],$$

其中记 $V(s_{h+1}) = \max_a Q(s_{h+1}, a)$ 。

1. Reward Function Term

根据 Linear MDP 的假设，奖励函数是确定性的，因此很容易得到

$$\begin{aligned} & \phi(s, a)^T \Lambda_h^{-1} \sum_{\tau=1}^{k-1} \phi(s_h^\tau, a_h^\tau) r(s_h^\tau, a_h^\tau) \\ &= \phi(s, a)^T \Lambda_h^{-1} \sum_{\tau=1}^{k-1} \phi(s_h^\tau, a_h^\tau) \phi(s_h^\tau, a_h^\tau)^T \theta_h \\ &= \phi(s, a)^T \theta_h \\ &= r(s, a) \end{aligned}$$

2. Transition Function Term

定义以下两个算子

$$\hat{\mathbb{P}}_h(\cdot|x, a) := \phi(x, a)^T \Lambda_h^{-1} \sum_{\tau=1}^{k-1} \phi(x_h^\tau, a_h^\tau) \delta(\cdot, x_{h+1}^\tau),$$

$$\bar{\mathbb{P}}_h(\cdot|x, a) := \phi(x, a)^T \Lambda_h^{-1} \sum_{\tau=1}^{k-1} \phi(x_h^\tau, a_h^\tau) \mathbb{P}_h(\cdot|x_h^\tau, a_h^\tau). \quad (5)$$

不难看出，算法中的 transition function term 为 $\hat{\mathbb{P}}_h V_{h+1}$ ，而在线性模型下 $\hat{\mathbb{P}}_h V_{h+1} = \mathbb{P}_h V_{h+1}$ ，而 $\mathbb{P}_h V_{h+1}$ 就是 optimal Bellman operation 中对应的项。这一点容易看出：

$$\bar{\mathbb{P}}_h(\cdot|x, a) = \phi(x, a)^T \Lambda_h^{-1} \sum_{\tau=1}^{k-1} \phi(x_h^\tau, a_h^\tau) \phi(x_h^\tau, a_h^\tau)^T \mu_h(\cdot) \approx \phi(x, a)^T \mu_h(\cdot) = \mathbb{P}_h(\cdot|x, a).$$

下面的重点就是

Prove $\hat{\mathbb{P}}_h V_{h+1}(x, a) \approx \bar{\mathbb{P}}_h V_{h+1}(x, a)$ via Value-Aware Uniform Concentration.

注意到

$$(\hat{\mathbb{P}}_h - \bar{\mathbb{P}}_h) V_{h+1}(x, a) = \phi(x, a)^T \Lambda_h^{-1} \sum_{\tau=1}^{k-1} \phi(x_h^\tau, a_h^\tau) [V_{h+1}(x_{h+1}^\tau) - \mathbb{P}_h V_{h+1}(x_h^\tau, a_h^\tau)].$$

由于 $s_{h+1}^\tau \sim \mathbb{P}_h(s_{h+1}^\tau, a_h^\tau)$ ，因此可以使用 concentration inequality 来 bound。但是这里面有一些难处理的地方，这就是 V_{h+1} 每一轮是在变化的，但是这个变化的过程很难去 track，因此文章直接在如下函数族上做 concentration。

$$\mathcal{V} = \left\{ V(\cdot) | V(\cdot) = \min_{a \in \mathcal{A}} \left\{ \max_{a \in \mathcal{A}} \phi(\cdot, a)^T \mathbf{w} + \beta \sqrt{\phi(\cdot, a)^T \Lambda^{-1} \phi(\cdot, a)} \right\}, \mathbf{w} \in \mathbb{R}^d, \beta \in \mathbb{R}, \Lambda \in \mathbb{R}^{d \times d} \right\}, \quad (6)$$

这一个部分给我们的启示是，虽然要准确估计 transition function 很难，但是通过把它往线性基底上面投影，可以使用更少的样本来对其有准确估计。

UCB 的探索奖励是 Hoeffding type，如果改用 Bernstein type 的 regret 可能可以去掉一个 $\frac{1}{\epsilon}$ 。

机器学习

强化学习 (Reinforcement Learning)

深度学习 (Deep Learning)

▲ 赞同 19



💬 1 条评论

🔗 分享

❤️ 喜欢

★ 收藏



文章被以下专栏收录



强化学习前沿
读呀读paper

进入专栏