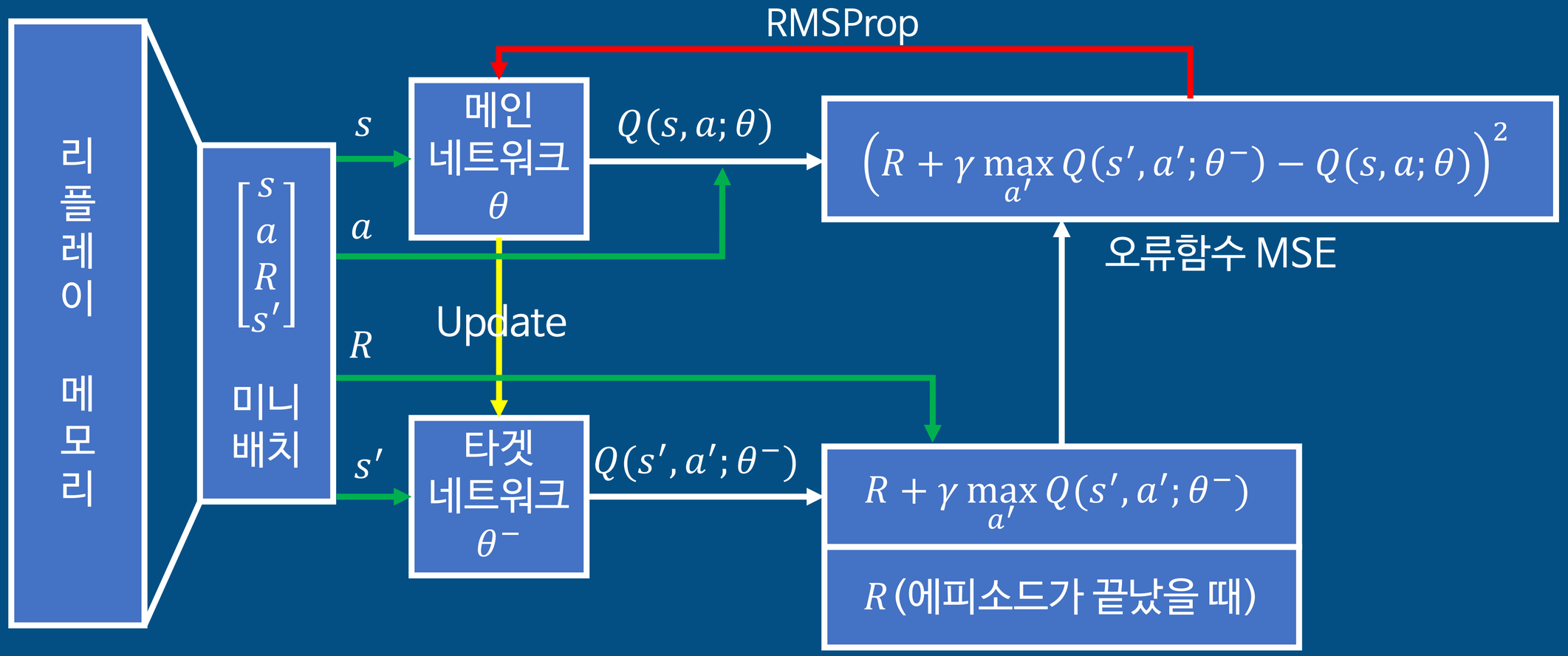
Rainbow Combining Improvements in Deep Reinforcement Learning, M. Hessel et al, 2017

옥찬호
utilForever@gmail.com

Basic DQN

Rainbow DQN
M. Hessel et al, 2017

- DQN 리마인드



Basic DQN

Rainbow DQN
M. Hessel et al, 2017

- DQN의 특징
  - 오프폴리시(Off-Policy)
  - 리플레이 메모리 + 미니배치
  - 타겟 신경망
- 온폴리시 : 학습하는 정책과 행동을 고르는 정책이 항상 같아야 한다.
  따라서 정책을 업데이트하면 과거의 경험들을 학습에 이용 불가능해 비효율적이다.
- 오프폴리시 : 학습하는 정책과 행동을 고르는 정책이 달라도 된다.
  따라서 과거에 경험한 에피소드들도 학습에 계속해서 이용 가능하다.

Basic DQN

Rainbow DQN
M. Hessel et al, 2017

- 리플레이 메모리 + 미니배치
  - 환경에서 받은 $[s, a, R, s']$을 저장한다.
  - 받은 s'를 새로운 s로 에이전트에게 전달해 에피소드를 계속 진행시킨다.
  - 리플레이 메모리에 저장되어 있는 $[s, a, R, s']$ 집합에서 일부를 무작위로 샘플링한 뒤 에이전트를 학습시킨다.
  - 리플레이 메모리 크기 이상으로 데이터가 추가되면 오래된 순서대로 지워준다.
- 타겟 신경망
  - 기존 오류 함수는 신경망이 스스로 목표를 만들어 내기 때문에 신경망이 업데이트될 때
    목표가 되는 정답 부분이 계속 변하고, 그 결과 학습이 굉장히 불안하게 이루어진다.

$$\text{MSE} = (\text{정답} - \text{예측})^2 = \left(R_{t+1} + \gamma \max_{a'} Q(s', a'; \theta) - Q(s, a; \theta)\right)^2$$

  - 따라서 θ^- 를 매개변수로 갖는 타겟 신경망을 추가한다.

$$\text{MSE} = (\text{정답} - \text{예측})^2 = \left(R_{t+1} + \gamma \max_{a'} Q(s', a'; \theta^-) - Q(s, a; \theta)\right)^2$$

  - 타겟 신경망은 일정 시간동안 그대로 유지되며 정답을 만들어내다가, 에피소드가 끝날 때마다 업데이트된다.

N-step DQN

Rainbow DQN
M. Hessel et al, 2017

- Learning to Predict by the Methods of Temporal Differences (Sutton, 1988)
- 큐러닝에서 사용했던 벨만 방정식

$$Q(s_t, a_t) = r_t + \gamma \max_a Q(s_{t+1}, a_{t+1})$$

- 위 방정식에서 $Q(s_{t+1}, a_{t+1})$을 풀어서 표현할 수 있다.

$$Q(s_t, a_t) = r_t + \gamma \max_a \left[r_{a,t+1} + \gamma \max_{a'} Q(s_{t+2}, a') \right]$$

- 여기서 $r_{a,t+1}$은 행동 a를 수행한 뒤 시간 $t+1$에 받은 보상을 말한다.

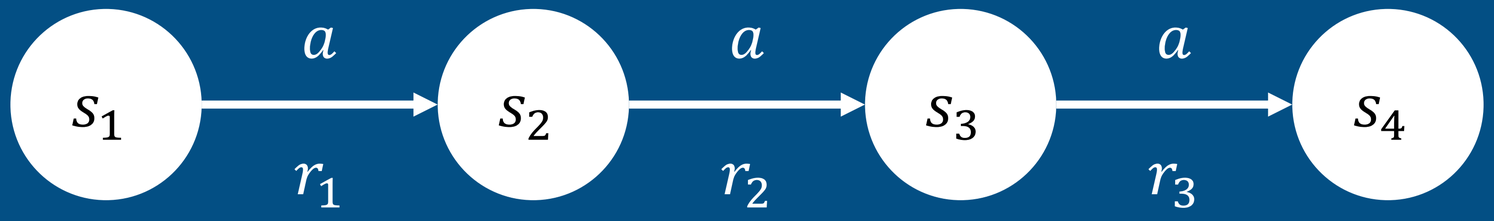
  만약 시간 $t+1$에서의 행동 a가 최적이었다고 가정한다면, $\max_a$ 연산을 생략할 수 있다.

$$Q(s_t, a_t) = r_t + \gamma r_{t+1} + \gamma^2 \max_{a'} Q(s_{t+2}, a')$$

N-step DQN

Rainbow DQN
M. Hessel et al, 2017

- 이를 활용해 DQN의 업데이트 공식을 N-step으로 바꿀 수 있다.
  → N-step까지 관찰된 누적 보상과 N번째 스텝에서 부트스트래핑 값을 합한다.
  N을 적절하게 선택한다면 1-step보다 좋은 성능을 낼 수 있다.
- 어떻게 가능할까? 예제를 한 번 살펴보자. 다음과 같이 상태가 4개인 환경이 있다고 하자.



N-step DQN

Rainbow DQN
M. Hessel et al, 2017

- 1-step인 경우에 무슨 일이 일어나는가? 총 3번의 업데이트가 발생한다.
  - $Q(s_1, a) \leftarrow r_1 + \gamma Q(s_2, a)$
  - $Q(s_2, a) \leftarrow r_2 + \gamma Q(s_3, a)$
  - $Q(s_3, a) \leftarrow r_3$
- 첫번째 반복에서 첫 두 업데이트는 쓸모가 없다.
  왜냐하면 현재 $Q(s_2, a)$와 $Q(s_3, a)$에 임의의 값으로 초기화되어 있기 때문이다.
- 두번째 반복에서는 어떤가?
  $Q(s_2, a)$에는 올바른 값이 대입되겠지만 $Q(s_1, a)$은 여전히 노이즈가 있다.
  세번째 반복이 되어서야 모두 올바른 값을 얻게 된다.
  → 따라서 1-step의 경우 모든 상태에 올바른 값을 전파하려면 3-step이 필요하다.

N-step DQN

Rainbow DQN
M. Hessel et al, 2017

- 이제 2-step으로 수정한 뒤 살펴보자. 총 3번의 업데이트가 발생한다.
  - $Q(s_1, a) \leftarrow r_1 + \gamma r_2 + \gamma^2 Q(s_3, a)$
  - $Q(s_2, a) \leftarrow r_2 + \gamma r_3$
  - $Q(s_3, a) \leftarrow r_3$
- 첫번째 반복에서 $Q(s_2, a)$와 $Q(s_3, a)$에 올바른 값이 대입될 것이다.
- 두번째 반복에서 $Q(s_1, a)$이 올바른 값으로 갱신될 것이다.

  → N-step을 사용하면 값의 전파 속도가 향상되고, 더 빨리 수렴하게 된다.

Double DQN

Rainbow DQN
M. Hessel et al, 2017

- Deep Reinforcement Learning with Double Q-Learning
  (van Hasselt, Guez, and Silver, 2015)
- DQN에서 타겟 값으로 사용한 식은 다음과 같다. 이대로 괜찮은가?

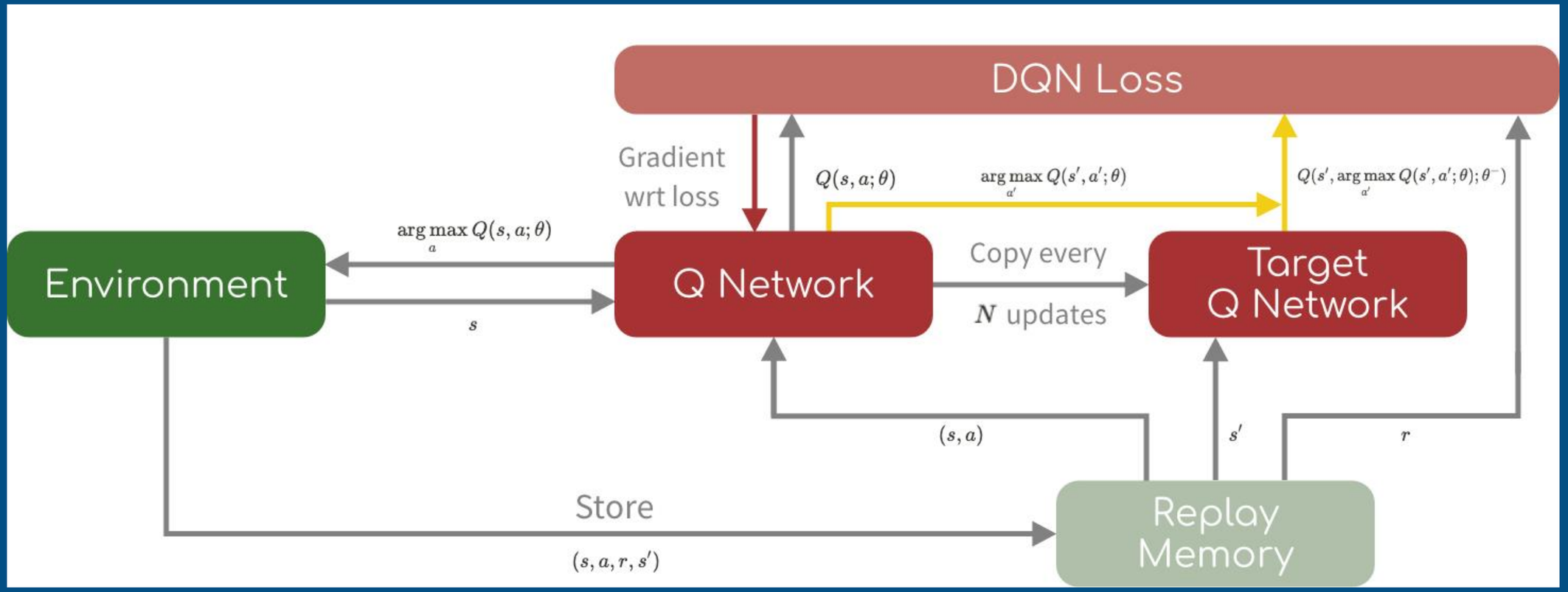
$$Y_t^{DQN} = R_{t+1} + \gamma \max_a Q(S_{t+1}, a; \theta_t^-)$$

- 위 식에서 $\max_a$ 함수가 쫓아가야 할 타겟 값을 최적 값보다 크게 추정(Overestimate)한다.
  → 논문에서는 타겟 값으로 사용하는 식을 수정한다. (Double DQN)

$$Y_t^{DDQN} = R_{t+1} + \gamma Q\left(S_{t+1}, \operatorname*{argmax}_a Q(S_{t+1}, a; \theta_t); \theta_t'\right)$$

Double DQN

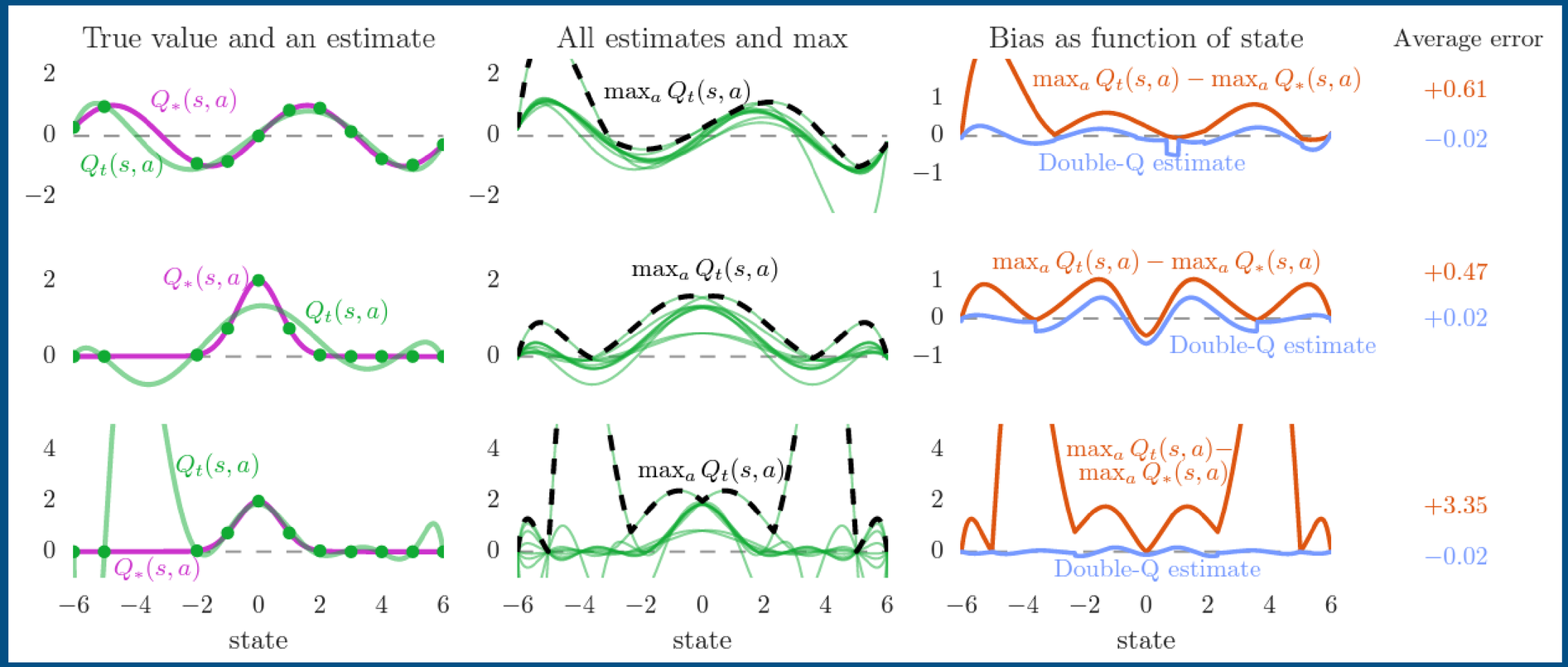
Rainbow DQN
M. Hessel et al, 2017



Double DQN

Rainbow DQN
M. Hessel et al, 2017

- Q_* : 최적 값, Q_t : DDQN을 이용한 함수 추정 값



Noisy Networks

Rainbow DQN
M. Hessel et al, 2017

- Noisy Networks for Exploration (Fortunato and others, 2017)
- Exploitation vs Exploration

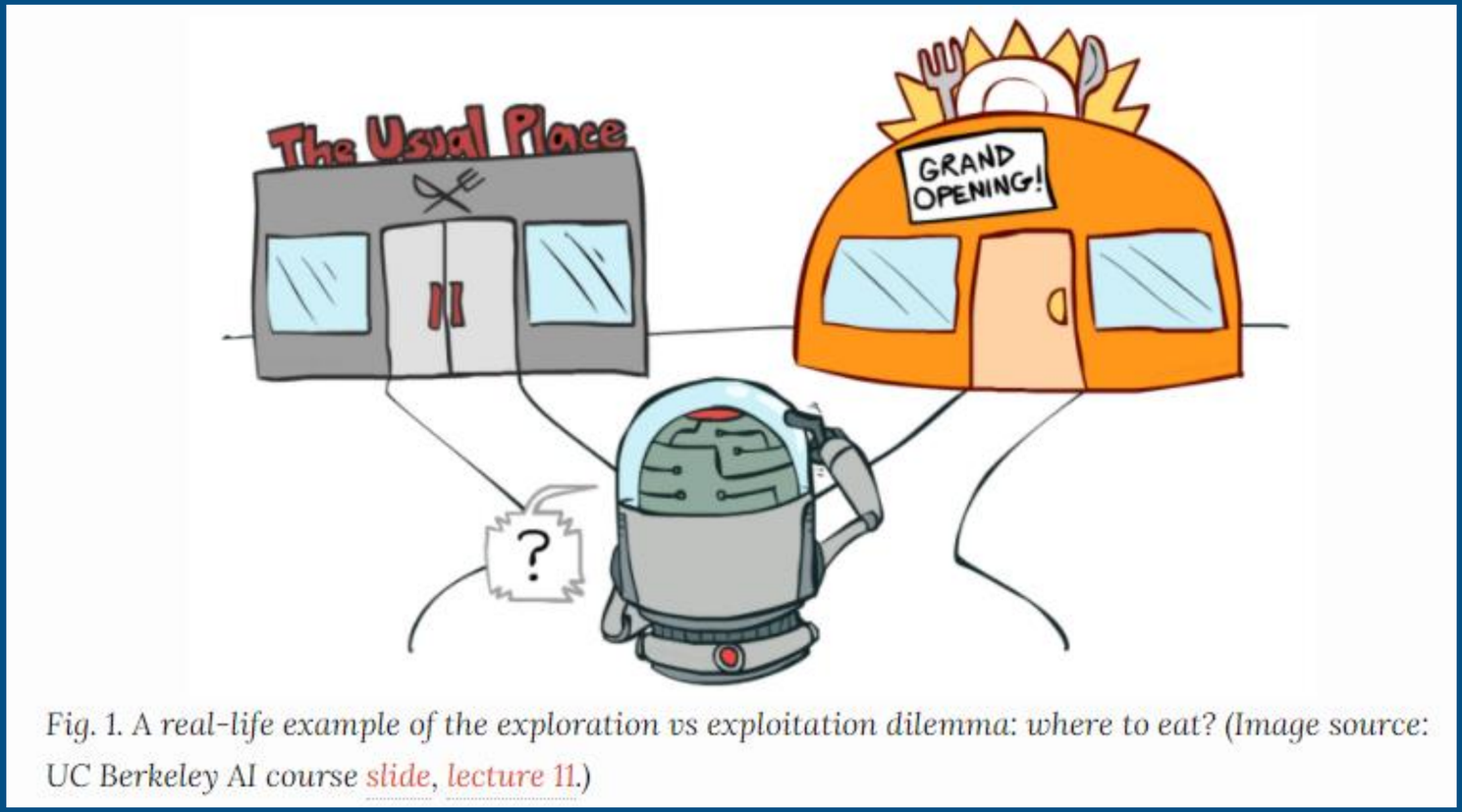


Fig. 1. A real-life example of the exploration vs exploitation dilemma: where to eat? (Image source: UC Berkeley AI course slide, lecture 11.)

Noisy Networks

Rainbow DQN
M. Hessel et al, 2017

- DQN에서는 Epsilon-Greedy 알고리즘을 사용한다.

$$\pi(s) = \begin{cases} a^* = \text{argmax}_{a \in A} Q(s,a), & 1-\epsilon \\ a \neq a^* & , \epsilon \end{cases}$$

  - $1-\epsilon$의 확률로 현재 상태에서 가장 큰 큐함수의 값을 갖는 행동을 선택 = 탐욕 정책
  - ϵ의 확률로 엉뚱한 행동을 선택 = 탐험
- 하지만 위와 같은 탐험 알고리즘은 단점이 존재한다.
  - 휴리스틱한 방법이다.
  - 현재 상태에 관계 없이 노이즈를 적용한다.
- 그렇다면 휴리스틱하지 않고 현재 상태에 따라 노이즈를 어떻게 적용할 수 있을까?
  → 신경망의 가중치에 가우시안 노이즈를 적용해서 탐험을 하자! (Noisy Network)

Noisy Networks

Rainbow DQN
M. Hessel et al, 2017

- Parameters and Variables

Noisy networks

- Fully connected layer

w shape=(q, p), b shape=(q)

$$y = wx + b,$$

- Noisy fully connected layer

$$y \overset{\text{def}}{=} (\mu^w + \sigma^w \odot \varepsilon^w)x + \mu^b + \sigma^b \odot \varepsilon^b,$$

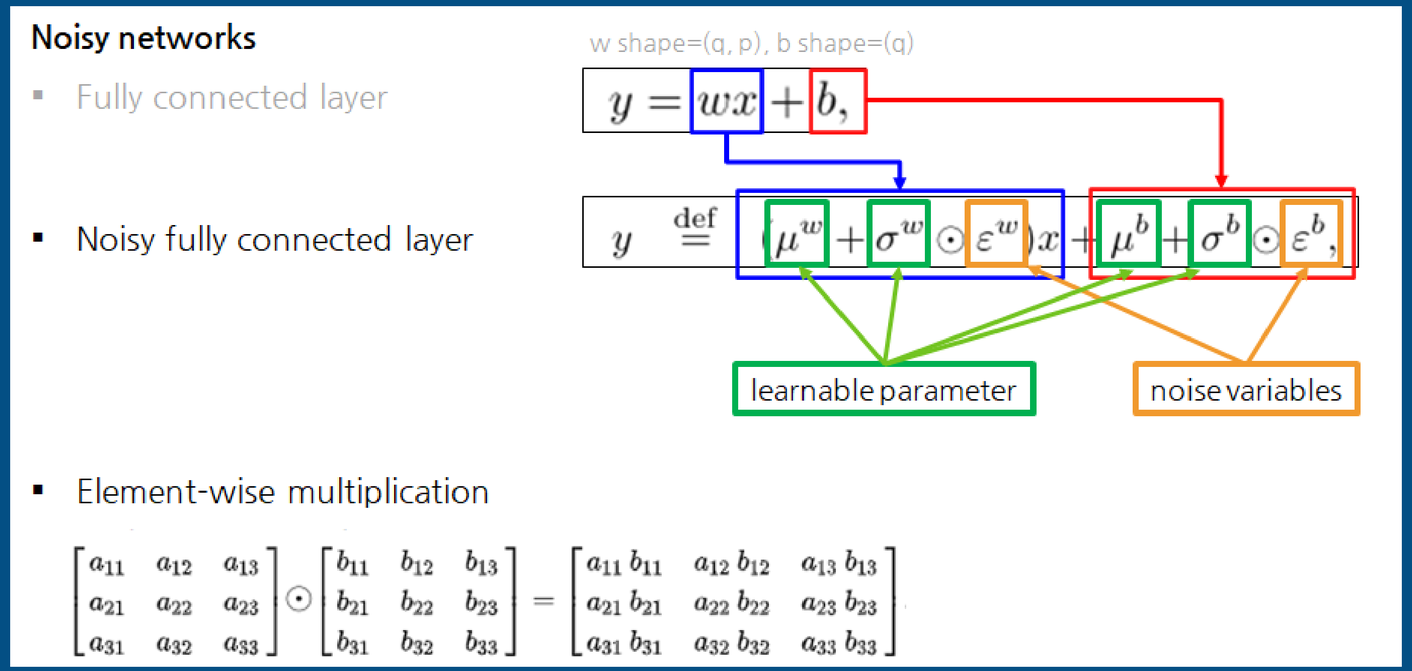
(q, p) (q, p) (q, p) (q) (q) (q)

https://velog.io/@isseebx/Noisy-networks-for-exploration

Noisy Networks

Rainbow DQN
M. Hessel et al, 2017

- Learnable Parameters vs Noise Variables

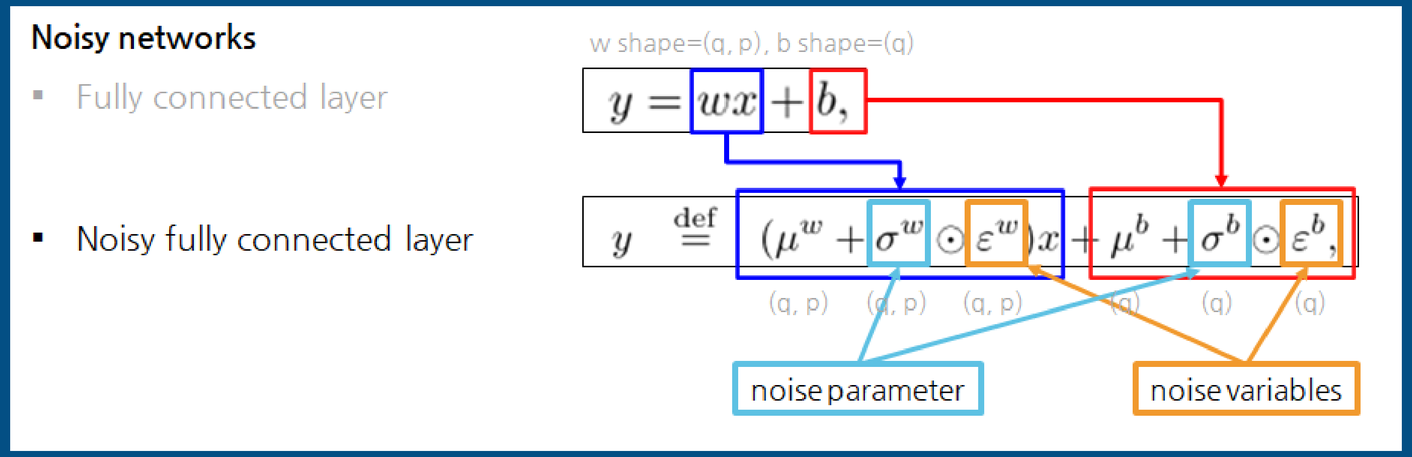


https://velog.io/@isseebx/Noisy-networks-for-exploration

Noisy Networks

Rainbow DQN
M. Hessel et al, 2017

- Noise Parameters vs Noise Variables

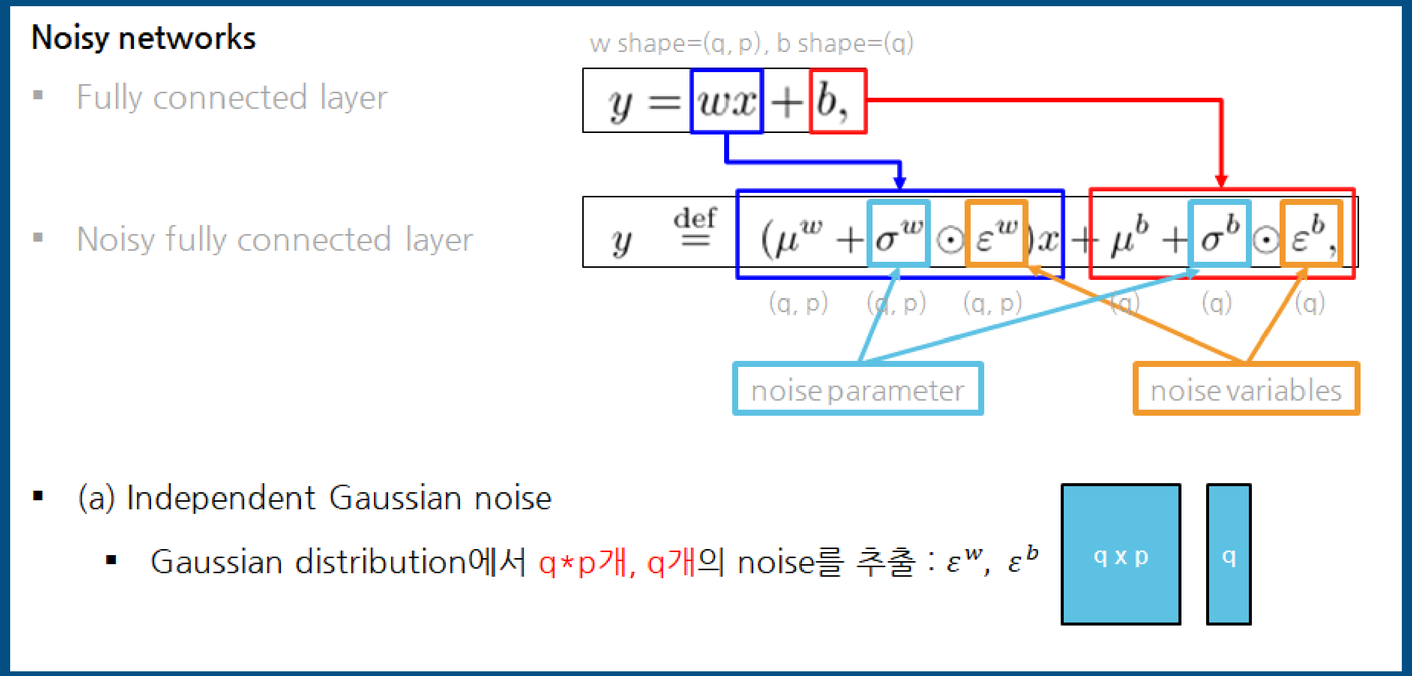


https://velog.io/@isseebx/Noisy-networks-for-exploration

Noisy Networks

Rainbow DQN
M. Hessel et al, 2017

- Independent Gaussian Noise



https://velog.io/@isseebx/Noisy-networks-for-exploration

Noisy Networks

Rainbow DQN
M. Hessel et al, 2017

- Factorized Gaussian Noise

Noisy networks

- Fully connected layer

w shape=(q, p), b shape=(q)

$$y = wx + b,$$

- Noisy fully connected layer

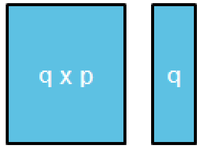
$$y \overset{\text{def}}{=} (\mu^w + \sigma^w \odot \varepsilon^w)x + \mu^b + \sigma^b \odot \varepsilon^b,$$

(q, p) (q, p) (q, p) (q) (q) (q)

noise parameter

noise variables

- (a) Independent Gaussian noise
  - Gaussian distribution에서 q∗p개, q개의 noise를 추출 : ε^w, ε^b



- (b) Factorised Gaussian noise
  - Gaussian distribution에서 p개, q개의 noise를 추출 : ε_p, ε_q
  - 우리가 필요한 건 q∗p개인 ε^w, q개인, ε^b
  - $\varepsilon^w = f(\varepsilon_p) \otimes f(\varepsilon_q)$, $\varepsilon^b = f(\varepsilon_q)$, $f(x) = \text{sgn}(x)\sqrt{|x|}$

https://velog.io/@isseebx/Noisy-networks-for-exploration

Prioritized Replay Buffer

Rainbow DQN
M. Hessel et al, 2017

- Prioritized Experience Replay (Schaul and others, 2015)
- 게임을 할 때 승패에 지대한 영향을 주는 사건이나 경험은 드문드문 발생한다.
  대부분의 경험은 그에 비해 상대적인 중요성이 떨어진다.
- 우리가 학습시킬 에이전트 역시 균등한 랜덤 샘플링으로 모든 경험을 균등하게
  취급할 것이 아니라, 더 중요하고 희소한 경험들에 더 가중치를 주어야 하지 않을까?
  → 각 경험의 우선 순위를 매기고 이를 기반으로 샘플링을 수행! (PER)

Prioritized Replay Buffer

Rainbow DQN
M. Hessel et al, 2017

- TD Error as a Reasonable Proxy
  - 에이전트가 환경 안에서 쌓는 수많은 경험 데이터 $[s, a, R, s']$ 중에 어떤 경험이 더 중요한 경험일까?
    중요한 경험을 무엇을 기준으로 정량화할 수 있을까? 어떤 경험으로부터 얻는 교훈의 크기가 클수록
    그 경험이 중요하다고 할 수 있겠지만, 이는 강화학습에서 직접적으로 얻을 수 없다.
  - 논문에서는 기준으로 TD Error δ의 크기를 사용한다.
    TD Error은 큐러닝 시 Target Q와 Expected Q 값의 차이를 의미한다.

$$\delta_t = R_t + \gamma_t \max_a Q(S_t, a) - Q(S_{t-1}, A_{t-1})$$

  - PER에서는 각 경험의 가중치를 우선 순위(Priority)로 명명하고 다음과 같이 정의한다.

$$p_i = |\delta_i| + \epsilon$$

  - TD Error δ의 크기를 구해야 하므로 절대값을 씌운다. 그리고 아주 작은 상수 ϵ을 더해주는데, 만약 Target Q와 Expected Q 값이 완전 같아 δ가 0이 되어버리면 해당 경험은 아예 뽑히지 않을 가능성이 생기기 때문이다.
    모든 경험이 약간씩은 추출될 가능성을 담보하는 역할을 ϵ이 수행한다.

Prioritized Replay Buffer

Rainbow DQN
M. Hessel et al, 2017

- Hyperparameter α
  - 우선 순위를 샘플링 확률로 그대로 사용하면 우선 순위가 높은 소수의 샘플만 계속 학습에 사용될 가능성이 있다.
    이를 어느정도 조절하기 위해 하이퍼파라미터 α를 사용해 샘플링 확률 $P(i)$를 계산한다.

$$P(i) = \frac{p_i^\alpha}{\sum_k p_k^\alpha}$$

  - α는 0과 1사이의 값으로, 0이 되면 $P(i) = \frac{1}{k}$가 되어 균등한 랜덤 샘플링과 같아진다.
    그리고 1이 되면 $P(i) = p_i$이 되어 우선 순위가 그대로 샘플링 확률에 반영된다.

Prioritized Replay Buffer

Rainbow DQN
M. Hessel et al, 2017

- Hyperparameter β
  - 몬테 카를로 방식은 수많은 에피소드 샘플을 생성한 다음, 각 에피소드를 순회하면서 상태-행동에 해당하는 Q 테이블의 값을 업데이트하는 방식을 취했다.

$$Q \leftarrow Q + \frac{1}{N}(G - Q)$$

  - G는 해당 에피소드의 상태-행동 값, Q는 누적 이동 평균의 값, N은 에피소드의 횟수를 의미한다. 에피소드가 계속 쌓일수록 N이 커져 업데이트의 크기가 줄어드는 문제를 해결하기 위해 $1/N$을 상수 α로 바꾸는 방식을 사용하게 되었다.
  - α를 사용하더라도 각 샘플 마다 다른 값이 곱해지는 것은 아니기 때문에 모든 샘플이 똑같이 사용되지만, PER에서는 우선 순위를 사용하기 때문에 가중치가 높은 샘플들이 더 많이 사용될 가능성이 매우 높다. PER 이전까지는 균등 분포를 따르는 샘플링을 썼기 때문에 이러한 균등 가정을 깨뜨릴 이유가 없었다.

Prioritized Replay Buffer

Rainbow DQN
M. Hessel et al, 2017

- Hyperparameter β
  - 균등하지 않은 랜덤 샘플링에 따른 바이어스를 보정하기 위해 PER에서는 매개 변수를 업데이트할 때 중요도 샘플링 (Importance Sampling; IS) 가중치를 곱해주고, 보정을 얼마나 할 지 결정하는 하이퍼파라미터 β를 사용한다.

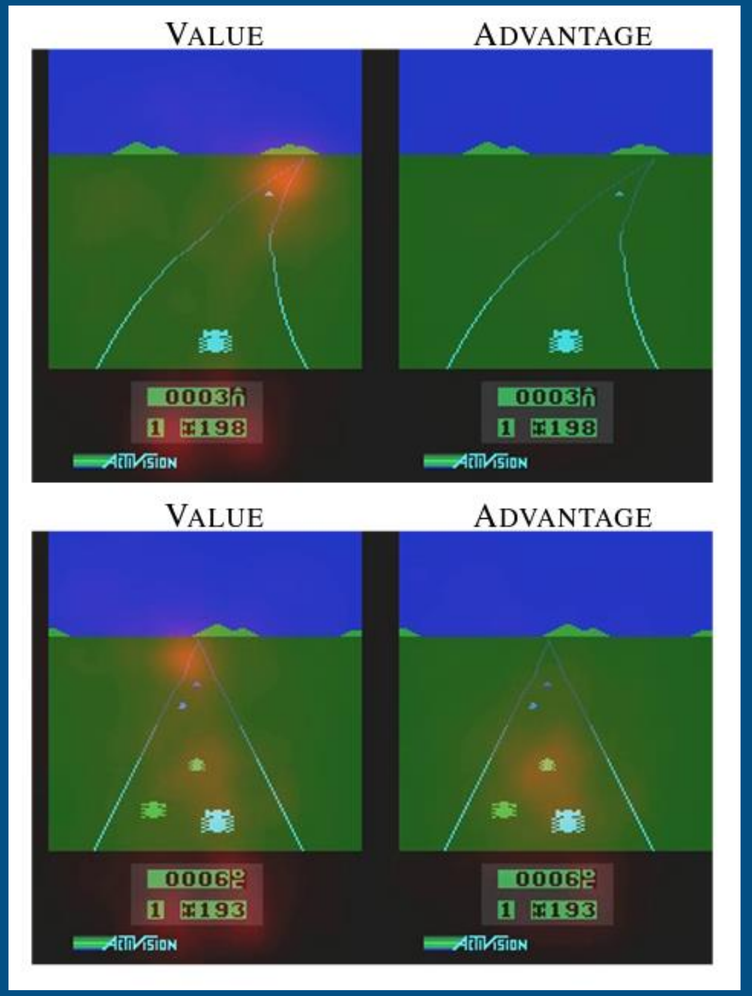
$$w_i = \left(\frac{1}{N} \cdot \frac{1}{P(i)}\right)^{\beta}$$

  - β는 0과 1사이의 값으로 1이 되면 균등하지 않은 확률 $P(i)$를 완전 보상하고 0이 되면 w_i가 1이 되어 사라진다.
  - 보통 강화학습에서 바이어스를 수정하는 건 수렴하게 되는 학습 후반부에 중요해진다.
    따라서 논문에서는 시작 값 β_0를 0.4나 0.5로 설정한 다음, 학습 종료 시 1이 되도록 선형적으로 증가시켰다.

Dueling DQN

Rainbow DQN
M. Hessel et al, 2017

- Dueling Network Architectures for Deep Reinforcement Learning (Wang, 2015)
- 위 그림 (플레이어 차와 다른 차들이 먼 상황)
  - Value Stream : 앞으로의 보상을 최대화하기 위해
    1) 점수, 2) 멀리 있는 차, 3) 가야할 길에 집중한다.
  - Advantage Stream : 크게 신경쓰지 않는다.
    (당장에 행동을 하지 않아도 어차피 차는 나아가고 점수는 쌓이고 있기 때문)
- 아래 그림 (플레이어 차와 다른 차들이 매우 가까운 상황)
  - Value Stream : **1) 점수, 2) 앞에 있는 차, 3) 가야할 길**에 집중한다.
  - Advantage Stream : 앞에 있는 차에 집중한다.
    (당장에 행동을 취하지 않으면 보상을 얻는 데 영향이 있기 때문)



Dueling DQN

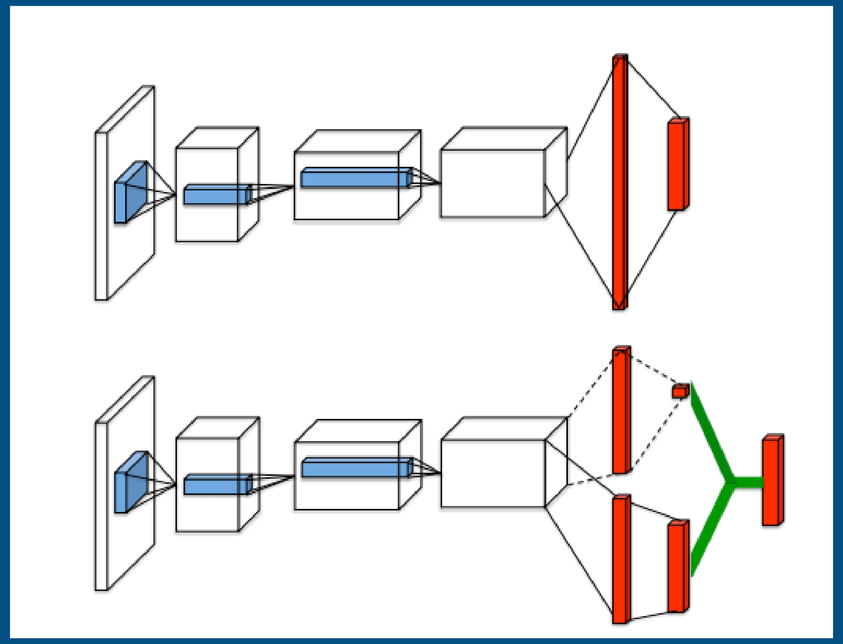
Rainbow DQN
M. Hessel et al, 2017

- Dueling DQN은 Q 값을 두 값으로 나눈다.

$$Q(s, a; \theta, \alpha, \beta) = V(s; \theta, \beta) + A(s, a; \theta, \alpha)$$

  - $V(s)$: 상태 s로부터 얼마나 많은 보상을 받을지 알려주는 함수 (Value)
  - $A(s, a)$: 해당 행동이 다른 행동에 비해 얼마나 더 좋은지를 나타내는 함수 (Advantage)

→ 행동에 대해서 정확한 값을 알 필요 없이, 상태 가치 함수를 배우는 것만으로도 충분하다.



Dueling DQN

Rainbow DQN
M. Hessel et al, 2017

- 하지만, Q 값에 V와 A가 얼마나 영향을 줬는지 알 방법이 없다는 문제가 있다.
  예를 들어 $Q = 20$이면 $V + A = 20$인데, 이때 경우의 수는 거의 무한에 가깝다.
- 이 문제를 해결하기 위해, 가장 높은 Q 값($Q(s, a^*)$)을 $V(s)$와 같게 한다.
  즉, Advantage 함수의 최댓값을 0으로 만들고 다른 모든 값을 음수로 만든다.
  이렇게 하면 V 값을 정확하게 알 수 있으므로 문제를 해결할 수 있다.

$$Q(s, a; \theta, \alpha, \beta) = V(s; \theta, \beta) + \left(A(s, a; \theta, \alpha) - \max_{a' \in |\mathcal{A}|} A(s, a'; \theta, \alpha)\right)$$

Dueling DQN

Rainbow DQN
M. Hessel et al, 2017

- 논문에서는 max 연산자를 평균으로 대체해서 사용한다.

$$Q(s,a;\theta,\alpha,\beta) = V(s;\theta,\beta) + \left(A(s,a;\theta,\alpha) - \frac{1}{|\mathcal{A}|} A(s,a';\theta,\alpha) \right)$$

- 원래 수식을 사용하면 V와 A의 의미를 갖게 되지만 평균으로 대체하면 의미를 잃게 된다. 하지만 상수로 고정해 놓은 목표가 아니기 때문에, 최적화의 안정성이 증가하게 된다.
- 실제로 두 수식을 같이 실험하면 유사한 결과가 나온다.

Categorical DQN

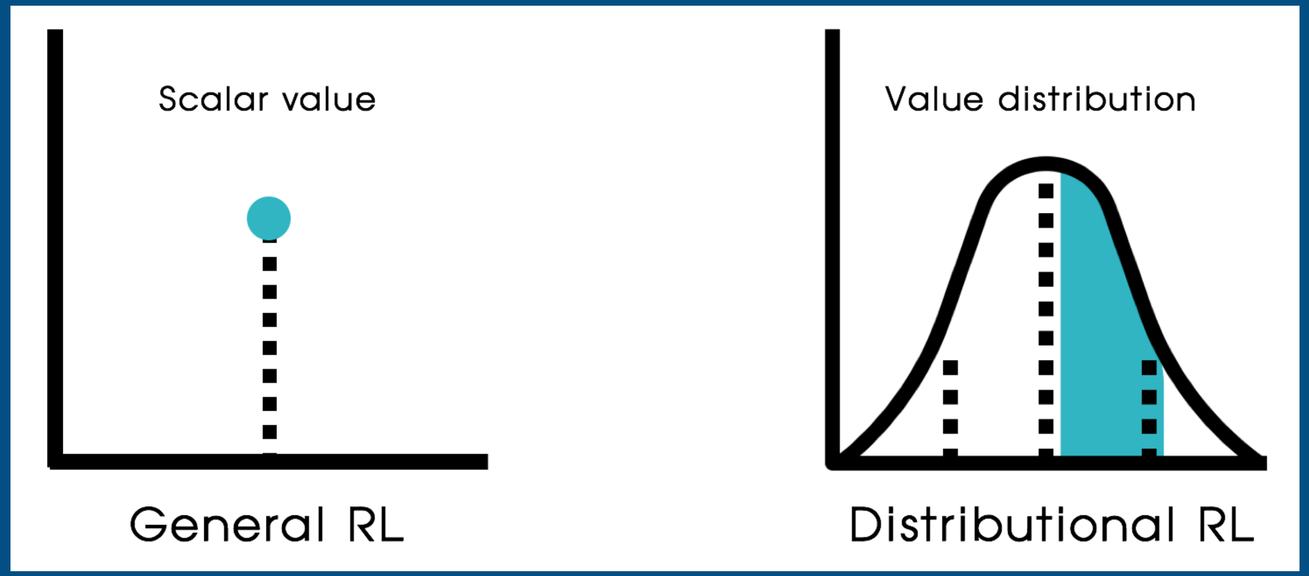
Rainbow DQN
M. Hessel et al, 2017

- A Distributional Perspective on Reinforcement Learning (Bellemare, 2017)
- General RL : 가치를 하나의 스칼라 값으로 예측

$$Q(x,a) = \mathbb{E}R(x,a) + \gamma \mathbb{E}Q(X',A')$$

- Distributional RL : 가치를 분포로 예측

$$Z(x,a) = R(x,a) + \gamma Z(X',A')$$

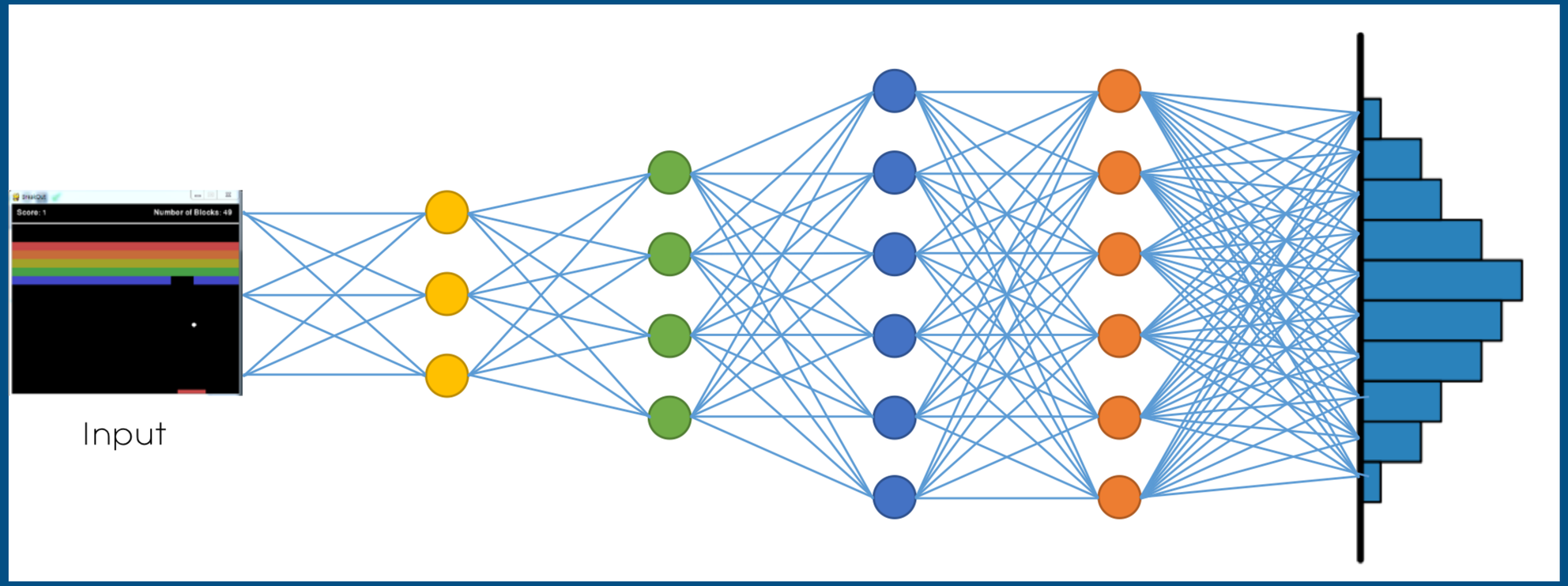


https://reinforcement-learning-kr.github.io/2018/10/02/C51/

Categorical DQN

Rainbow DQN
M. Hessel et al, 2017

- DQN에서 네트워크의 출력 : 각 행동에 대한 Q 값
- Distributional RL에서 네트워크의 출력 : 각 행동에 대한 가치 분포

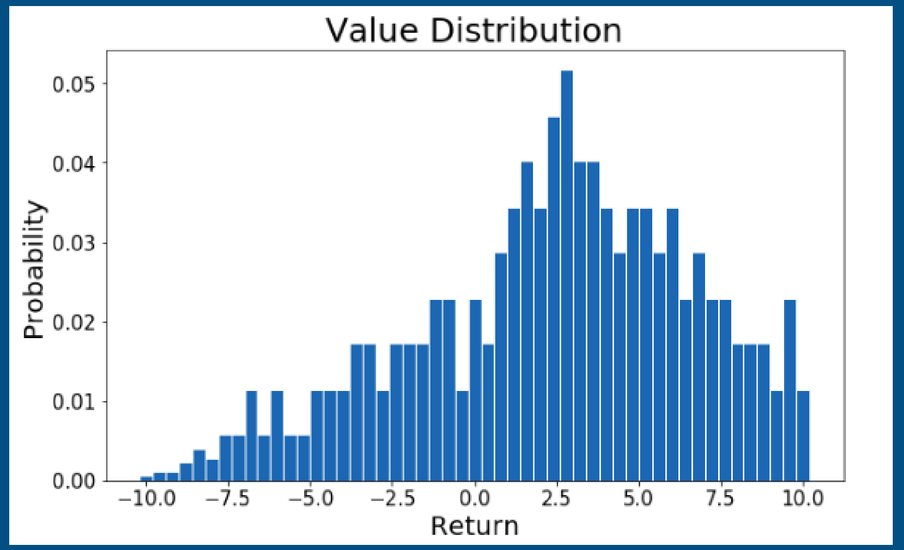


https://reinforcement-learning-kr.github.io/2018/10/02/C51/

Categorical DQN

Rainbow DQN
M. Hessel et al, 2017

- 각 행동에 대한 가치 분포 = 이산 확률 분포 (Discrete Probability Distribution)
  - 가로축 : Support 또는 Atom (가치 값), 세로축 : 확률 → 각각의 가치와 그 가치를 받을 확률을 나타내는 분포
- 이 분포를 결정하기 위해서 몇 가지 매개 변수가 필요하다.
  - Support의 개수, Support의 최댓값, Support의 최솟값
  - Support 값은 최솟값부터 최댓값까지 Support의 개수에 맞게 일정한 간격으로 나누게 된다.
    즉, 미리 결정된 매개 변수들에 의해 그 값이 정해지게 된다. 신경망은 바로 이 Support들에 대한 확률을 구한다.
    각 행동에 대해서 하나의 분포가 필요하기 때문에 신경망의 출력 크기는 [Support의 개수 * 행동의 개수]가 된다.



Categorical DQN

Rainbow DQN
M. Hessel et al, 2017

- Categorical DQN의 알고리즘은 DQN과 유사하다. 차이점은 다음과 같다.
- Q 값 계산 : 이산 확률 분포의 기댓값

$$Q(x_{t+1}, a) = \sum_i z_i p_i(x_{t+1}, a)$$

- Loss 계산 : 타겟 분포와 추정 분포 간의 차이를 줄이는 방향으로 학습
  → 크로스 엔트로피 (Cross Entropy)

$$Loss = -\sum_i m_i \log p_i(x_t, a_t)$$

Categorical DQN

Rainbow DQN
M. Hessel et al, 2017

- 타겟 분포 : 우선 Support 값들을 통해 타겟 값을 구한다.

$$\hat{\mathcal{T}} z_j \leftarrow \left[r_t + \gamma_t z_j \right]_{V_{\mathrm{MIN}}}^{V_{\mathrm{MAX}}}$$

- 각 Support에 감가율을 곱하고 보상을 더해준다. (에피소드가 끝난 경우에는 모든 Support 값들을 보상 값으로 사용)
  그리고 최댓값보다 큰 경우 최댓값과 같도록, 최솟값보다 작은 경우 최솟값과 같도록 설정한다.
- 그런데 이 경우 문제가 생길 수 있다.
  - 예를 들어, Support들이 $[1, 2, 3, 4, 5]$이고 $r_t = 0.1$, $\gamma_t = 0.9$라고 가정하자.
    위 식에 따라 연산을 하면 Support들이 $[1, 1.9, 2.8, 3.7, 4.6]$이 된다.
  - Loss인 크로스 엔트로피 연산을 하기 위해서는 두 분포의 Support들이 일치해야 하는데, 현재는 서로 다르다.
    → 타겟 분포의 Support들을 원래의 Support들과 같이 분배해주는 Projection 과정이 추가로 필요하다.

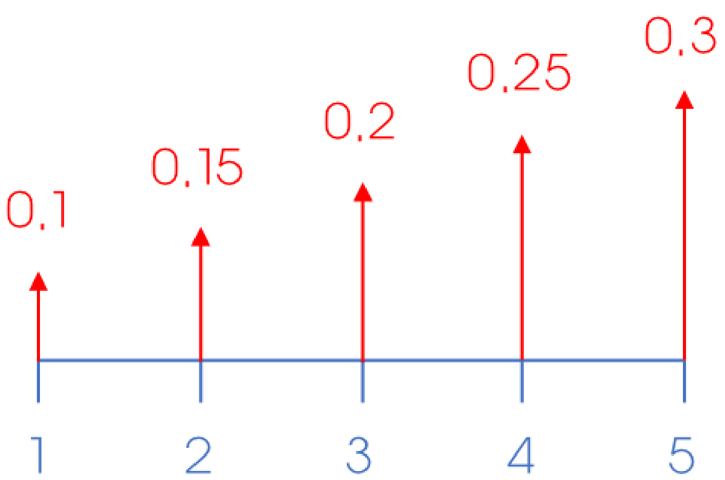
$$m_l \leftarrow m_l + p_j(x_{t+1}, a^*)\left(u - b_j\right)$$

$$m_u \leftarrow m_u + p_j(x_{t+1}, a^*)\left(b_j - l\right)$$

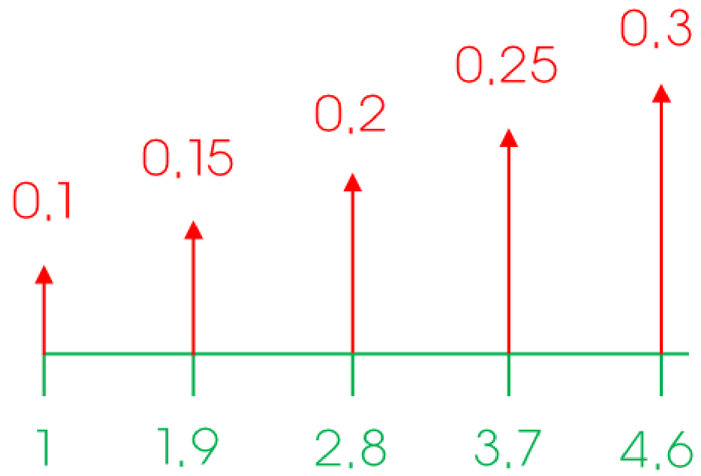
Categorical DQN

Rainbow DQN
M. Hessel et al, 2017

- Support: [1, 2, 3, 4, 5]
- Probability: [0.1, 0.15, 0.2, 0.25, 0.3]
- Reward: 0.1
- Discount factor: 0.9



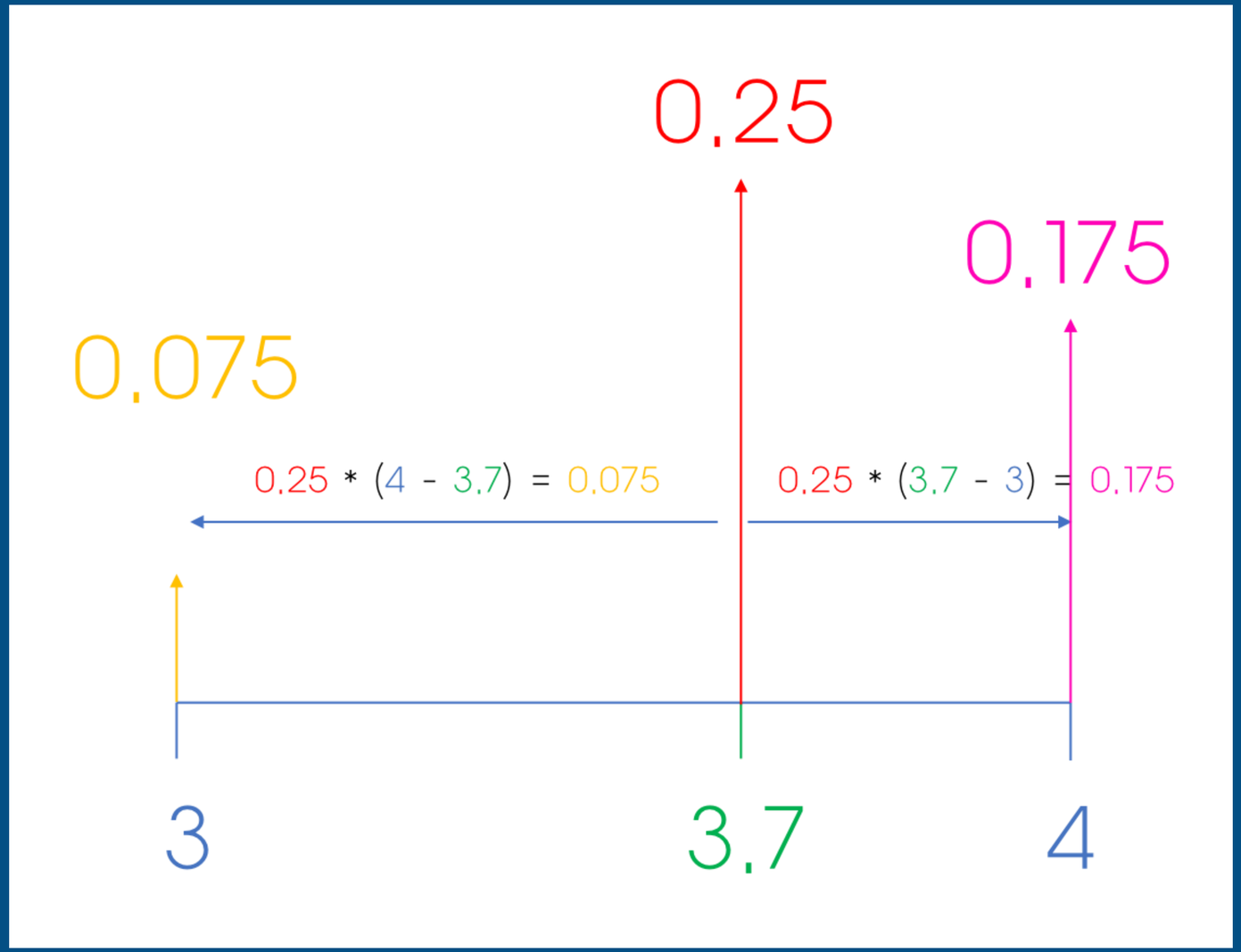
$$\hat{\mathcal{T}} z_i \leftarrow [r_t + \gamma z_i]_{V_{min}}^{V_{max}}$$



https://reinforcement-learning-kr.github.io/2018/10/02/C51/

Categorical DQN

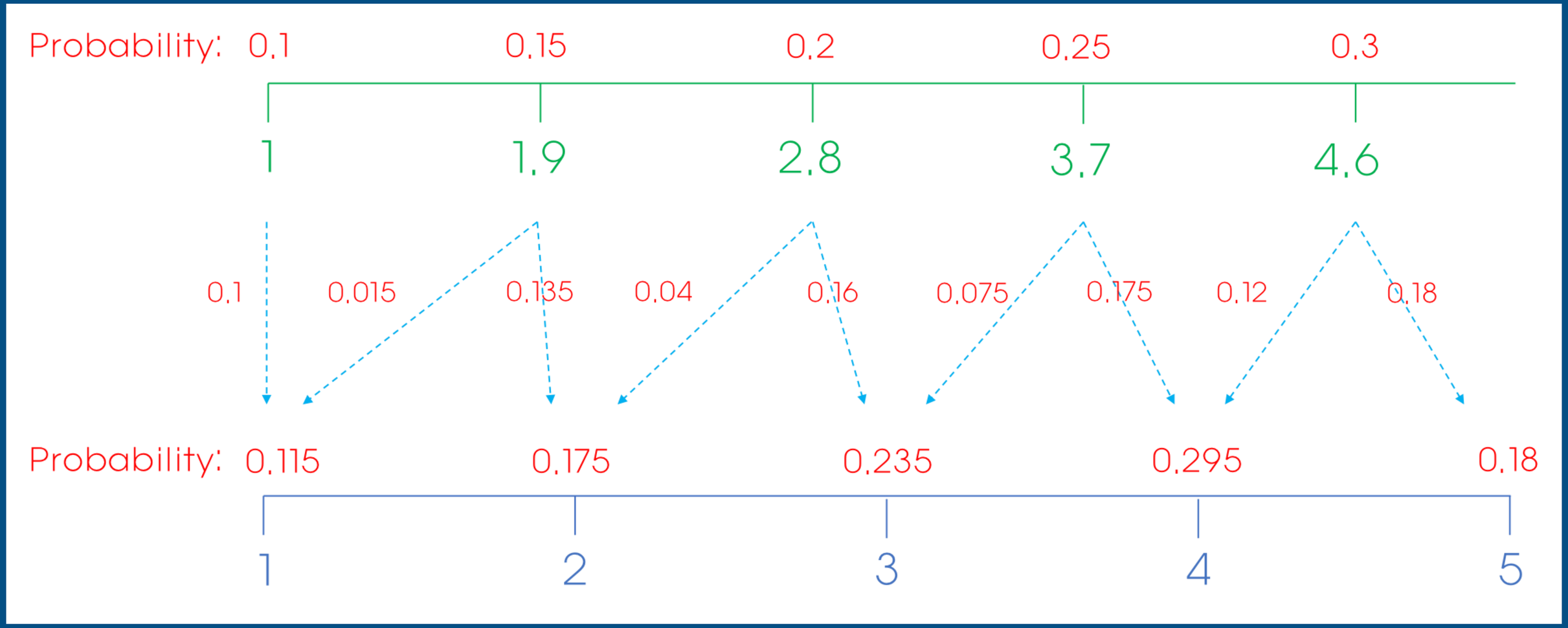
Rainbow DQN
M. Hessel et al, 2017



https://reinforcement-learning-kr.github.io/2018/10/02/C51/

Categorical DQN

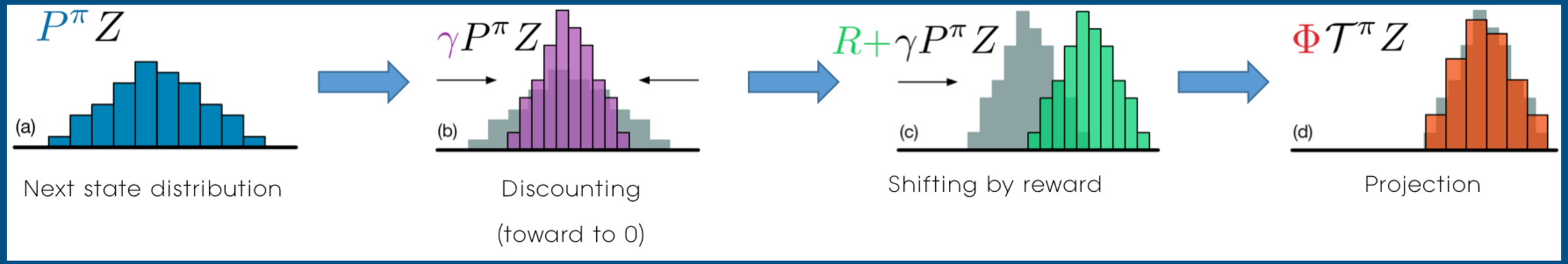
Rainbow DQN
M. Hessel et al, 2017



https://reinforcement-learning-kr.github.io/2018/10/02/C51/

Categorical DQN

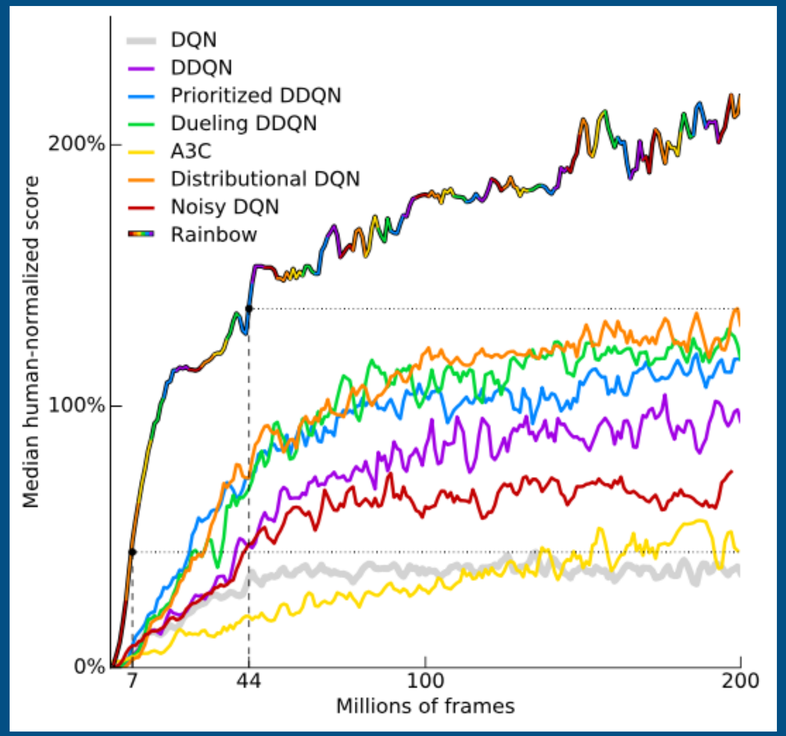
Rainbow DQN
M. Hessel et al, 2017

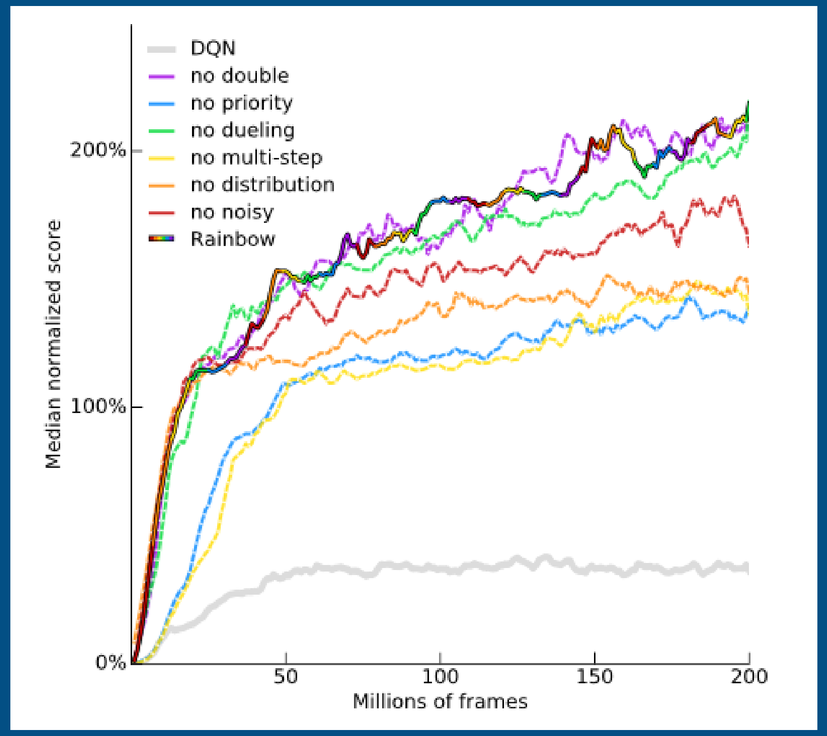


Rainbow DQN

Rainbow DQN
M. Hessel et al, 2017

- Rainbow: Combining Improvements in Deep Reinforcement Learning
- Rainbow = DQN + Multi-step DQN + Double DQN (DDQN) + Noisy Network + Prioritized Experience Replay(PER) + Dueling DQN + Categorical DQN

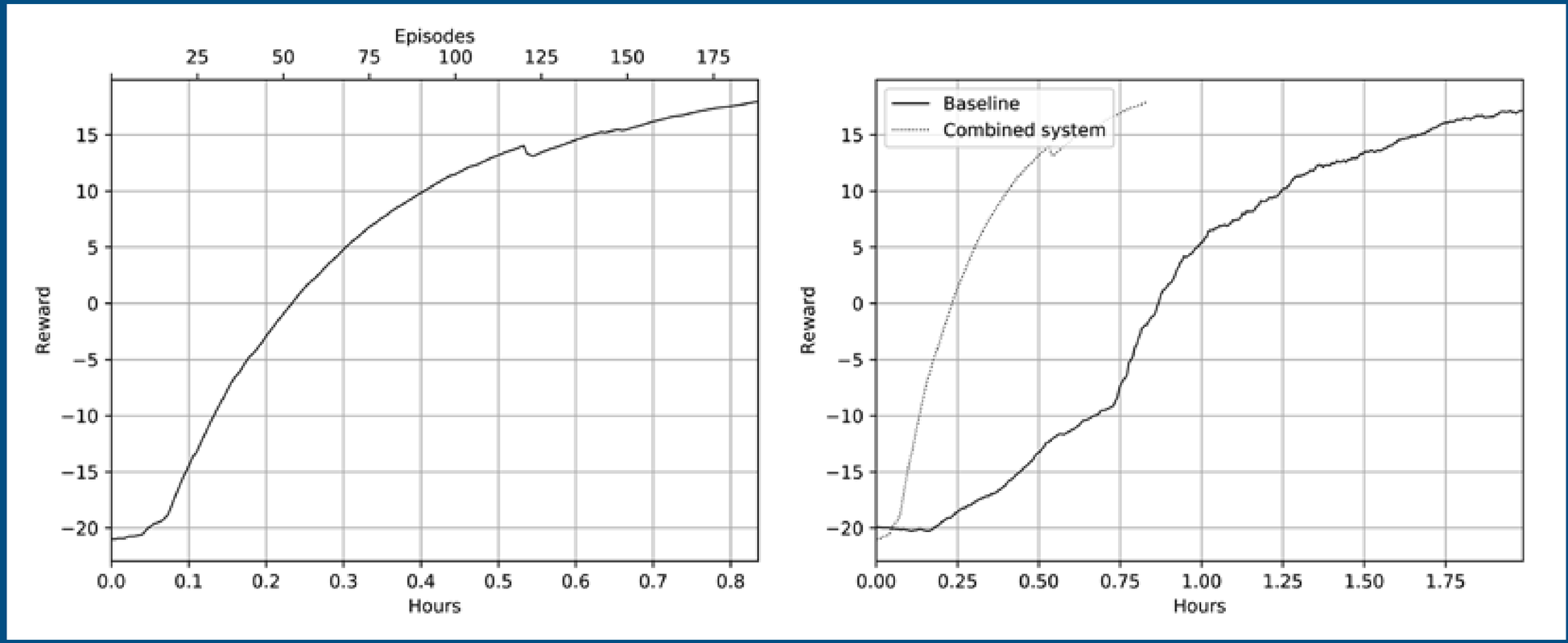




Rainbow DQN

Rainbow DQN
M. Hessel et al, 2017

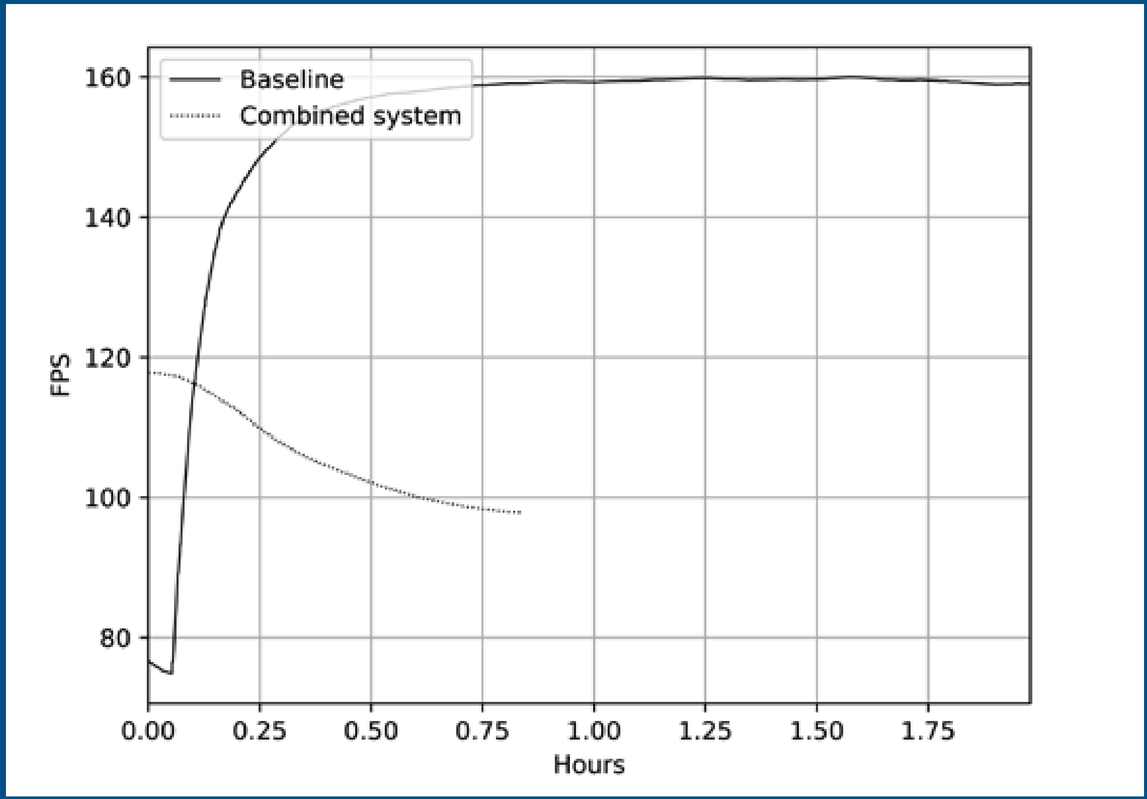
- Basic DQN vs Rainbow DQN (Reward)



Rainbow DQN

Rainbow DQN
M. Hessel et al, 2017

- Basic DQN vs Rainbow DQN (FPS)



Thank you!