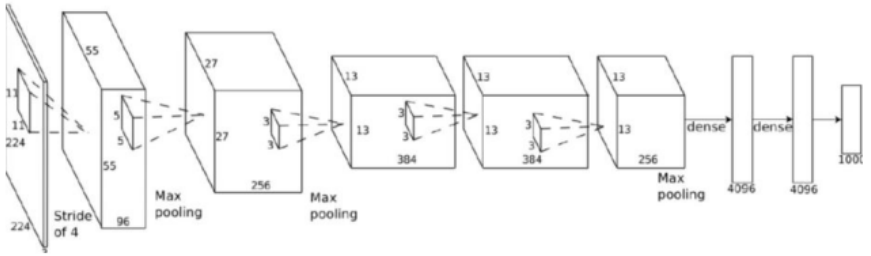
Pontificia Universidad Católica de Chile
Escuela de Ingeniería
Departamento de Ingeniería de Transporte y Logística


# Sistemas Urbanos Inteligentes

## Aprendizaje reforzado y funciones de valor

Hans Löbel
Dpto. Ingeniería de Transporte y Logística
Dpto. Ciencia de la Computación

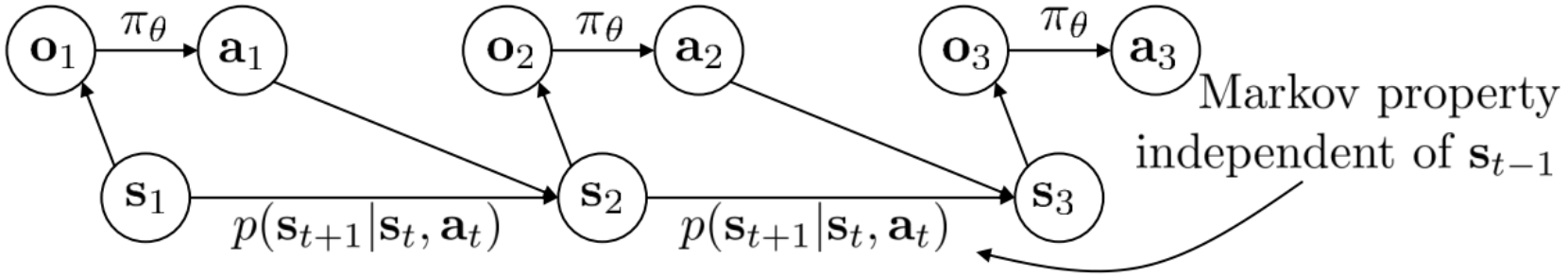
# Antes de empezar con las técnicas, un poco de notación…



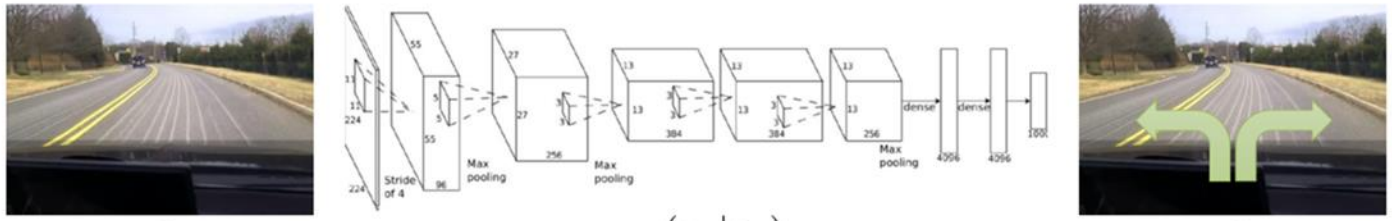

$\mathbf{o}_t$ $\pi_\theta(\mathbf{a}_t|\mathbf{o}_t)$ $\mathbf{a}_t$

$\mathbf{s}_t$ – state
$\mathbf{o}_t$ – observation
$\mathbf{a}_t$ – action

$\pi_\theta(\mathbf{a}_t|\mathbf{o}_t)$ – policy
$\pi_\theta(\mathbf{a}_t|\mathbf{s}_t)$ – policy (fully observed)



# La recompensa actúa como una especia de supervisión




$\mathbf{o}_t$ $\pi_\theta(\mathbf{a}_t|\mathbf{o}_t)$ $\mathbf{a}_t$

which action is better or worse?

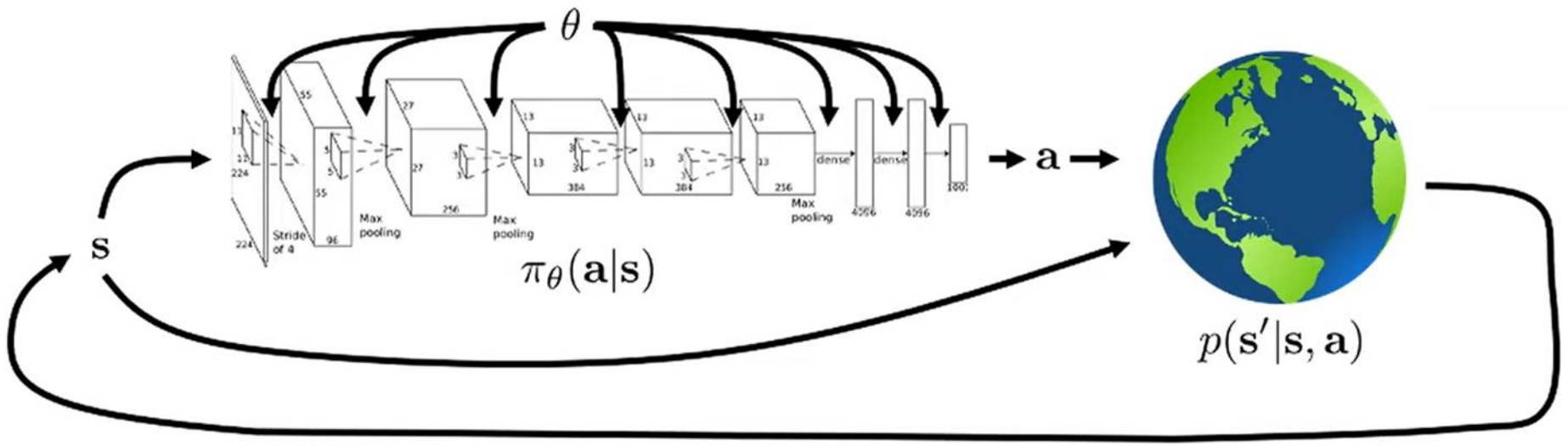
$r(\mathbf{s},\mathbf{a},\mathbf{s}')$: reward function ⟶ tells us which states and actions are better

high reward 

 low reward

$s, a, r(s, a, s')$ y $p(s'|s, a)$definen un proceso de decisión markoviano (MDP)

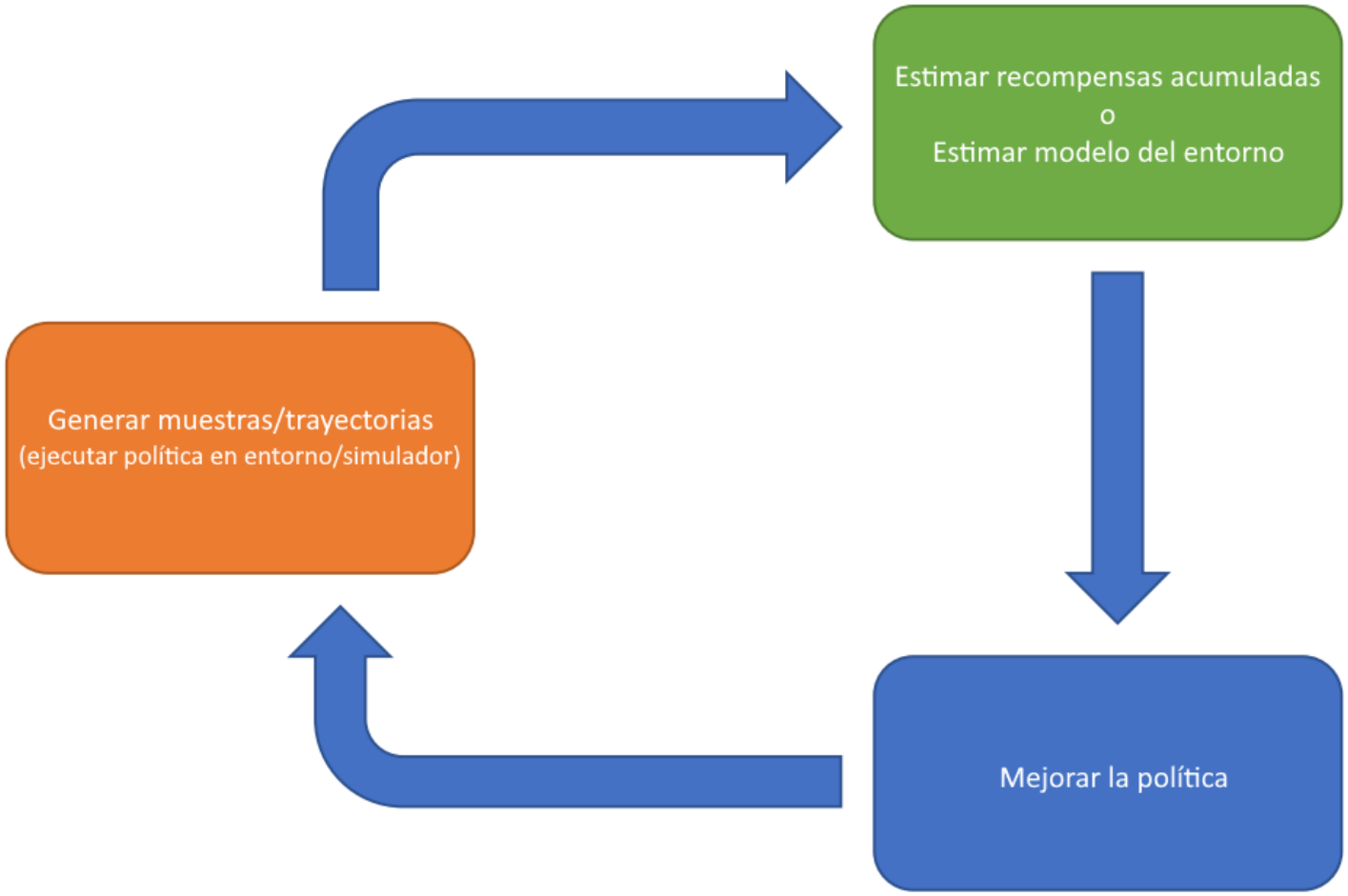
En (D)RL, buscamos la política que maximiza la recompensa esperada



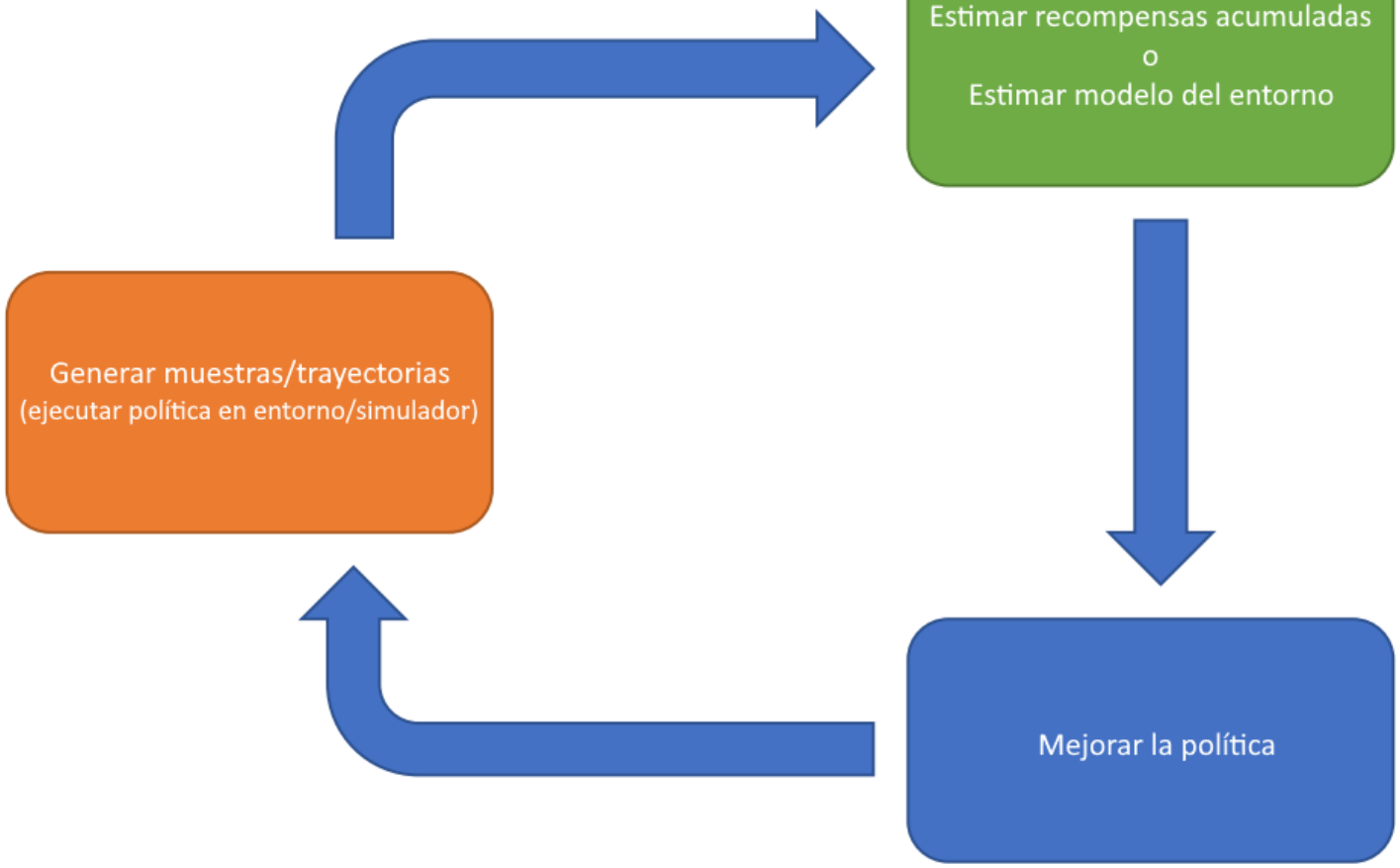

$$\underbrace{p_\theta(\mathbf{s}_1, \mathbf{a}_1, \ldots, \mathbf{s}_T, \mathbf{a}_T)}_{p_\theta(\tau)} = p(\mathbf{s}_1) \prod_{t=1}^{T} \pi_\theta(\mathbf{a}_t|\mathbf{s}_t) p(\mathbf{s}_{t+1}|\mathbf{s}_t, \mathbf{a}_t)$$

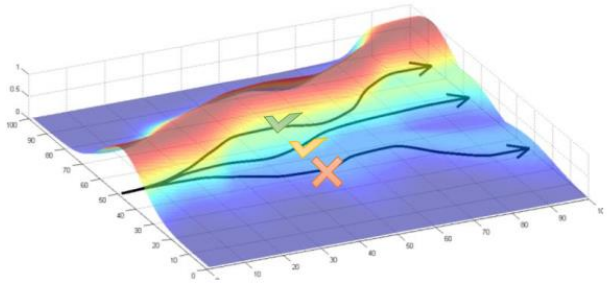
$$\theta^\star = \arg\max_\theta E_{\tau \sim p_\theta(\tau)} \left[ \sum_t r(\mathbf{s}_t, \mathbf{a}_t, \mathbf{s}_{t+1}) \right]$$

# Todos los algoritmos siguen la misma estructura básica



# Por ejemplo, si queremos optimizar directamente la política…



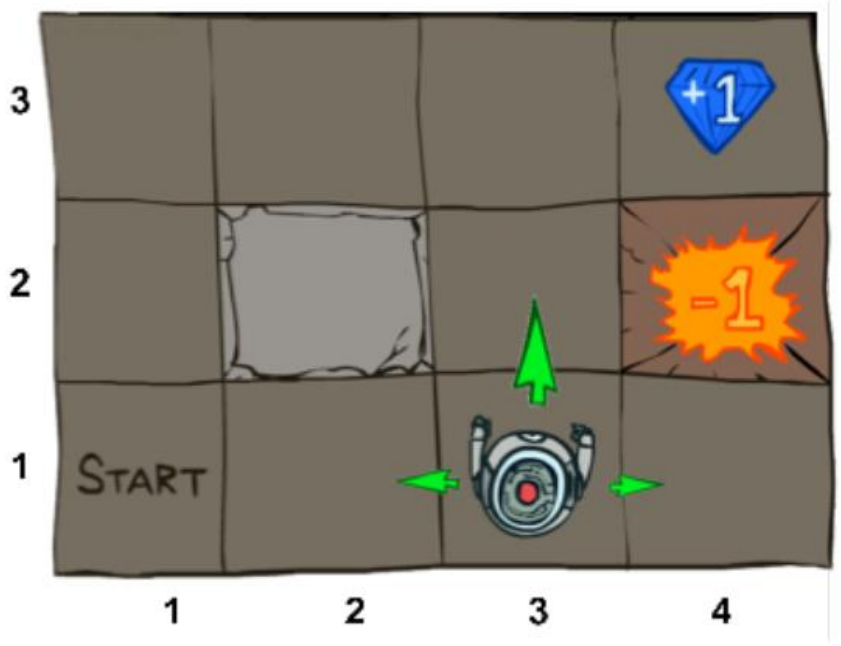



$$J(\theta) = E_\pi \left[ \sum_t r_t \right] \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \sum_t r_t^i$$

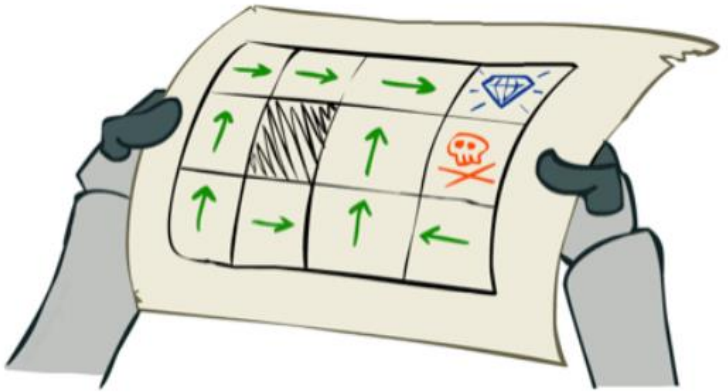
$$\theta \leftarrow \theta + \alpha \nabla_\theta J(\theta)$$

Este último esquema no es el único que se puede tomar

Este último esquema no es el único que se puede tomar




$\pi$:

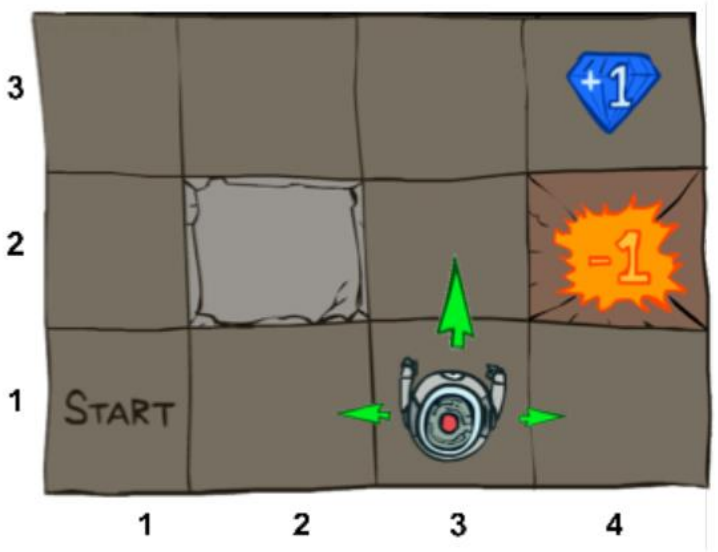


$$max_{\pi} \mathrm{E}[\sum_{t=0}^{H} \gamma^t R(S_t, A_t, S_{t+1}) | \pi]$$

Esta idea se puede formalizar a través de la función de valor

$$V^*(s) = \max_{\pi} \mathbb{E}\left[\sum_{t=0}^{H} \gamma^t R(s_t, a_t, s_{t+1}) \mid \pi, s_0 = s\right]$$

$V^*(s)$= suma de las recompensas con descuento al empezar en el estado s y actuar óptimamente




Supongamos acciones siempre exitosas, $\gamma = 1, H = 100$

$V^*(4,3) =$

$V^*(3,3) =$

$V^*(2,3) =$

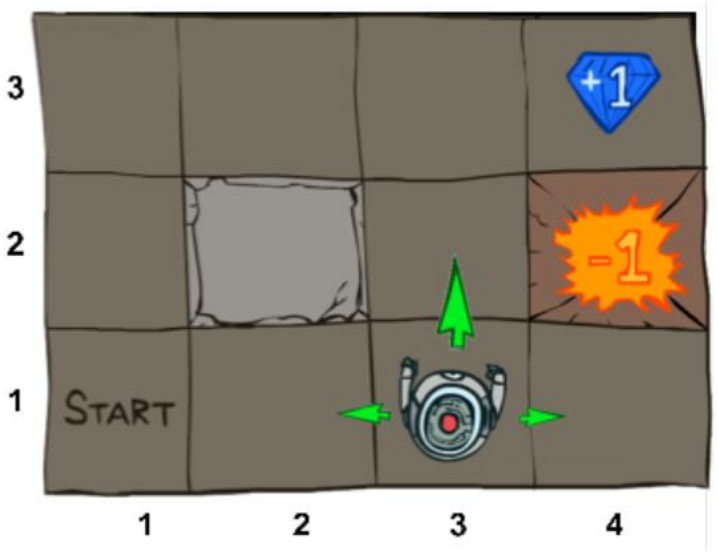
$V^*(1,1) =$

$V^*(4,2) =$

Esta idea se puede formalizar a través de la función de valor

$$V^*(s) = \max_{\pi} \mathbb{E}\left[\sum_{t=0}^{H} \gamma^t R(s_t, a_t, s_{t+1}) \mid \pi, s_0 = s\right]$$

$V^*(s)$= suma de las recompensas con descuento al empezar en el estado s y actuar óptimamente




Supongamos acciones siempre exitosas, $\gamma = 0{,}9$, $H = 100$

$V^*(4,3) =$

$V^*(3,3) =$

$V^*(2,3) =$

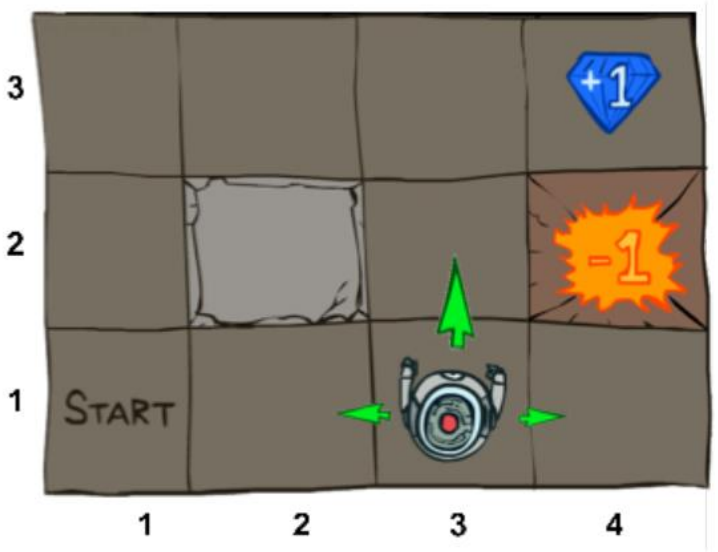
$V^*(1,1) =$

$V^*(4,2) =$

Esta idea se puede formalizar a través de la función de valor

$$V^*(s) = \max_{\pi} \mathbb{E}\left[\sum_{t=0}^{H} \gamma^t R(s_t, a_t, s_{t+1}) \mid \pi, s_0 = s\right]$$

$V^*(s)$= suma de las recompensas con descuento al empezar en el estado s y actuar óptimamente




Supongamos acciones con $P = 0{,}8$, $\gamma = 0{,}9$, $H = 100$

$V^*(4,3) =$

$V^*(3,3) =$

$V^*(2,3) =$

$V^*(1,1) =$

$V^*(4,2) =$

¿Cómo podemos estimar esta función de valor?

$V_0^*(s)$ = optimal value for state s when H=0

¿Cómo podemos estimar esta función de valor?

$V_0^*(s)$ = optimal value for state s when H=0

- $V_0^*(s) = 0 \quad \forall s$

¿Cómo podemos estimar esta función de valor?

$V_0^*(s)$ = optimal value for state s when H=0

- $V_0^*(s) = 0 \quad \forall s$

$V_1^*(s)$ = optimal value for state s when H=1

¿Cómo podemos estimar esta función de valor?

$V_0^*(s)$ = optimal value for state s when H=0

- $V_0^*(s) = 0 \quad \forall s$

$V_1^*(s)$ = optimal value for state s when H=1

- $V_1^*(s) = \max_a \sum_{s'} P(s'|s,a)(R(s,a,s') + \gamma V_0^*(s'))$

¿Cómo podemos estimar esta función de valor?

$V_0^*(s)$ = optimal value for state s when H=0

- $V_0^*(s) = 0 \quad \forall s$

$V_1^*(s)$ = optimal value for state s when H=1

- $V_1^*(s) = \max_a \sum_{s'} P(s'|s,a)(R(s,a,s') + \gamma V_0^*(s'))$

$V_2^*(s)$ = optimal value for state s when H=2

- $V_2^*(s) = \max_a \sum_{s'} P(s'|s,a)(R(s,a,s') + \gamma V_1^*(s'))$

¿Cómo podemos estimar esta función de valor?

$V_0^*(s)$ = optimal value for state s when H=0

- $V_0^*(s) = 0 \quad \forall s$

$V_1^*(s)$ = optimal value for state s when H=1

- $V_1^*(s) = \max_a \sum_{s'} P(s'|s,a)(R(s,a,s') + \gamma V_0^*(s'))$

$V_2^*(s)$ = optimal value for state s when H=2

- $V_2^*(s) = \max_a \sum_{s'} P(s'|s,a)(R(s,a,s') + \gamma V_1^*(s'))$

$V_k^*(s)$ = optimal value for state s when H = k

- $V_k^*(s) = \max_a \sum_{s'} P(s'|s,a)(R(s,a,s') + \gamma V_{k-1}^*(s'))$

Este simple algoritmo es conocido como *Value Iteration*

Start with $V_0^*(s) = 0$ for all s.

For k = 1, … , H:

For all states s in S:

$$V_k^*(s) \leftarrow \max_a \sum_{s'} P(s'|s,a) \left(R(s,a,s') + \gamma V_{k-1}^*(s')\right)$$

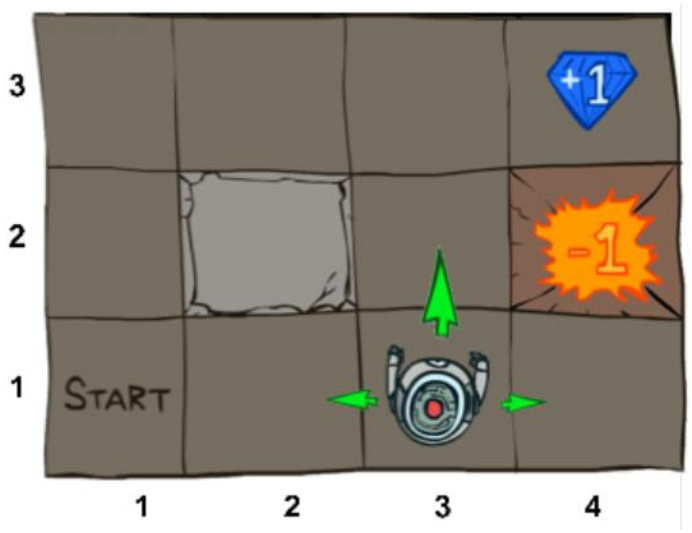
$$\pi_k^*(s) \leftarrow \arg\max_a \sum_{s'} P(s'|s,a) \left(R(s,a,s') + \gamma V_{k-1}^*(s')\right)$$

Es posible demostrar que al converger, el valor obtenido para la función $V^*(s)$ es óptimo y satisface las ecuaciones de Bellman:

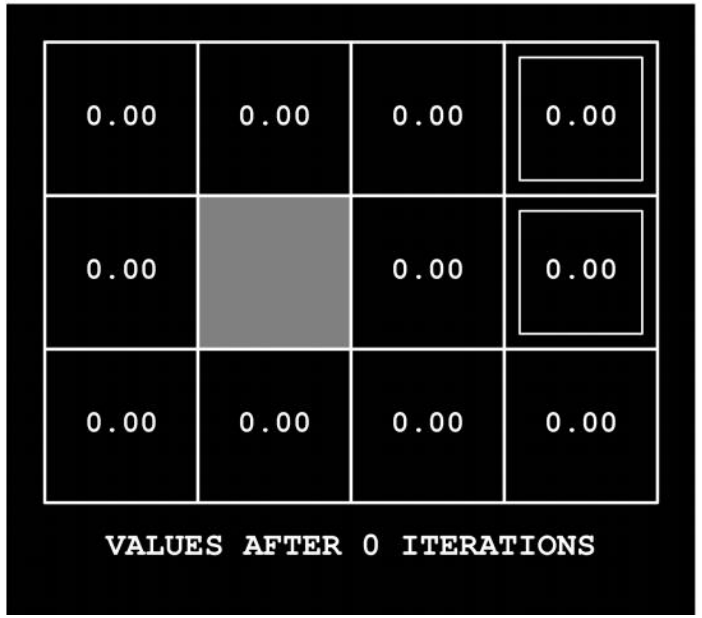
$$\forall\, s \in S: \quad V^*(s) = \max_a \sum_{s'} P(s'|s,a)\left[R(s,a,s') + \gamma V^*(s')\right]$$

# Veamos gráficamente un ejemplo de su ejecución

$$V_0(s) \leftarrow 0$$



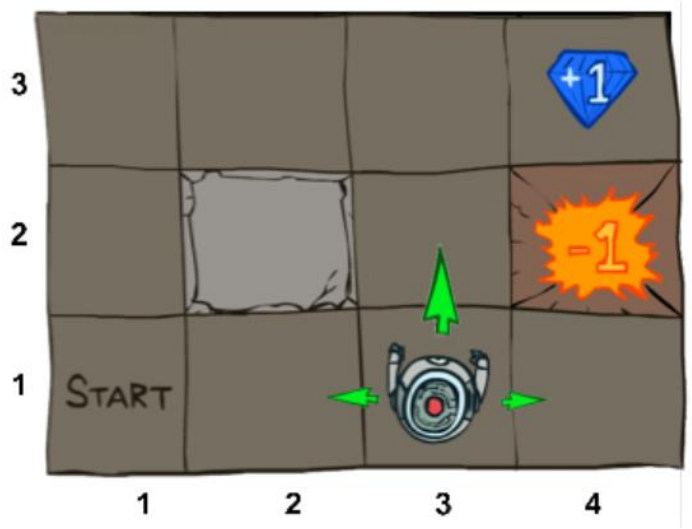

k = 0




Noise = 0.2
Discount = 0.9

# Veamos gráficamente un ejemplo de su ejecución

$$V_1(s) \leftarrow \max_a \sum_{s'} P(s'|s,a)(R(s,a,s') + \gamma V_0(s'))$$

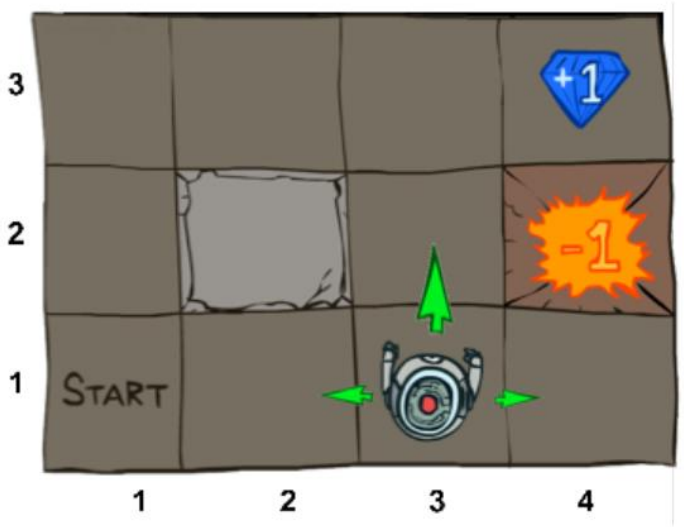



k = 0


Noise = 0.2
Discount = 0.9

# Veamos gráficamente un ejemplo de su ejecución

$$V_2(s) \leftarrow \max_a \sum_{s'} P(s'|s,a)(R(s,a,s') + \gamma V_1(s'))$$



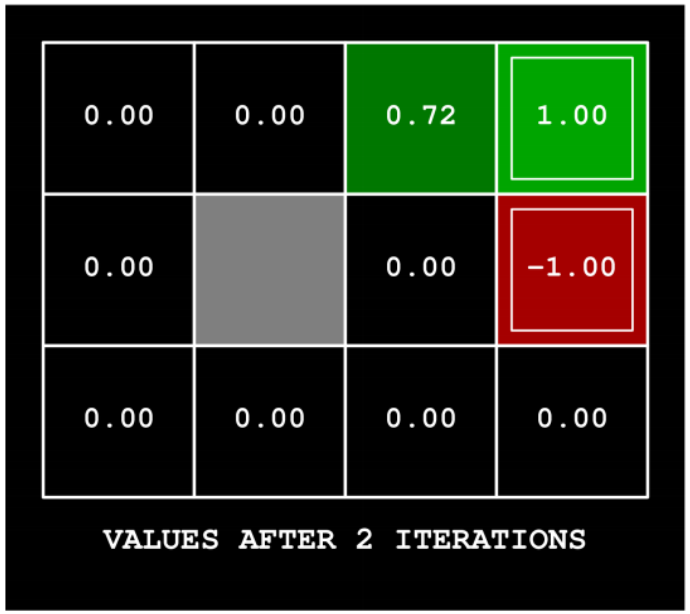

k = 1


Noise = 0.2
Discount = 0.9

Veamos gráficamente un ejemplo de su ejecución

$$V_2(s) \leftarrow \max_a \sum_{s'} P(s'|s,a)(R(s,a,s') + \gamma V_1(s'))$$

k = 2




Noise = 0.2
Discount = 0.9

Veamos gráficamente un ejemplo de su ejecución

$$V_{k+1}(s) \leftarrow \max_a \sum_{s'} P(s'|s,a)(R(s,a,s') + \gamma V_k(s'))$$

k = 3


Noise = 0.2
Discount = 0.9

Veamos gráficamente un ejemplo de su ejecución

$$V_{k+1}(s) \leftarrow \max_a \sum_{s'} P(s'|s,a)(R(s,a,s') + \gamma V_k(s'))$$

k = 4


Noise = 0.2
Discount = 0.9

Veamos gráficamente un ejemplo de su ejecución

$$V_{k+1}(s) \leftarrow \max_a \sum_{s'} P(s'|s,a)(R(s,a,s') + \gamma V_k(s'))$$

k = 5


Noise = 0.2
Discount = 0.9

# Veamos gráficamente un ejemplo de su ejecución

$$V_{k+1}(s) \leftarrow \max_a \sum_{s'} P(s'|s,a)(R(s,a,s') + \gamma V_k(s'))$$

k = 12


Noise = 0.2
Discount = 0.9

# Veamos gráficamente un ejemplo de su ejecución

$$V_{k+1}(s) \leftarrow \max_a \sum_{s'} P(s'|s,a)(R(s,a,s') + \gamma V_k(s'))$$

k = 100


Noise = 0.2
Discount = 0.9

Podemos refinar la función de valor y estimar la función Q

Bellman Equation:

$$Q^*(s,a) = \sum_{s'} P(s'|s,a)(R(s,a,s') + \gamma \max_{a'} Q^*(s',a'))$$

Q-Value Iteration:

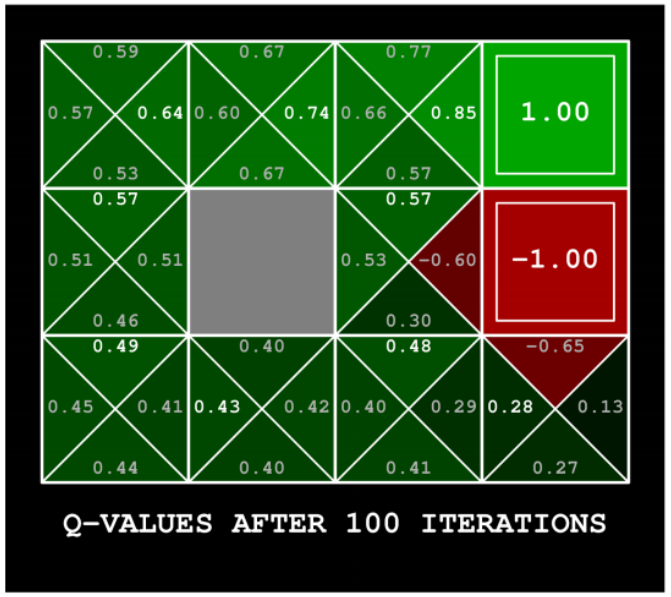
$$Q_{k+1}(s,a) \leftarrow \sum_{s'} P(s'|s,a)(R(s,a,s') + \gamma \max_{a'} Q_k(s',a'))$$

- La función $Q^*(s,a)$ estima la utilidad esperada partiendo desde $s$, tomando la acción $a$ y luego actuando óptimamente
- Nos es evidente en este momento por qué esto sirve de algo

Podemos refinar la función de valor y estimar la función Q

$$Q^*_{k+1}(s,a) \leftarrow \sum_{s'} P(s'|s,a)(R(s,a,s') + \gamma \max_{a'} Q^*_k(s',a'))$$

k = 100




Noise = 0.2
Discount = 0.9

# ¿Qué limitantes tienen estos métodos de estimación de funciones de valor?

- Ecuaciones requieren la existencia de las probabilidades de transición (modelo dinámico del mundo):

$$V^*(s) = \max_a \sum_{s'} P(s'|s,a)\left[R(s,a,s') + \gamma V^*(s')\right]$$

$$Q^*(s,a) = \sum_{s'} P(s'|s,a)(R(s,a,s') + \gamma \max_{a'} Q^*(s',a'))$$

- Algoritmos requieren iterar y almacenar sobre gran cantidad de estados, lo que fuerza a tener una cantidad de estados y acciones manejable.

# Q-Learning al rescate

- La función Q nos entrega la solución a ambos problemas.
- Al desacoplar la optimalidad del estado y la acción, es posible utilizar un enfoque de muestreo, cambiando las transiciones por un valor esperado:

$$Q_{k+1}(s,a) \leftarrow \sum_{s'} P(s'|s,a)(R(s,a,s') + \gamma \max_{a'} Q_k(s',a'))$$

$$Q_{k+1} \leftarrow \mathbb{E}_{s' \sim P(s'|s,a)} \left[ R(s,a,s') + \gamma \max_{a'} Q_k(s',a') \right]$$

# Q-Learning al rescate

Start with $Q_0(s, a)$ for all s, a.

Get initial state s

For k = 1, 2, … till convergence

Sample action a, get next state s'

If s' is terminal:

$$\text{target} = R(s, a, s')$$

Sample new initial state s'

else:

$$\text{target} = R(s, a, s') + \gamma \max_{a'} Q_k(s', a')$$

$$Q_{k+1}(s, a) \leftarrow (1 - \alpha) Q_k(s, a) + \alpha \, [\text{target}]$$

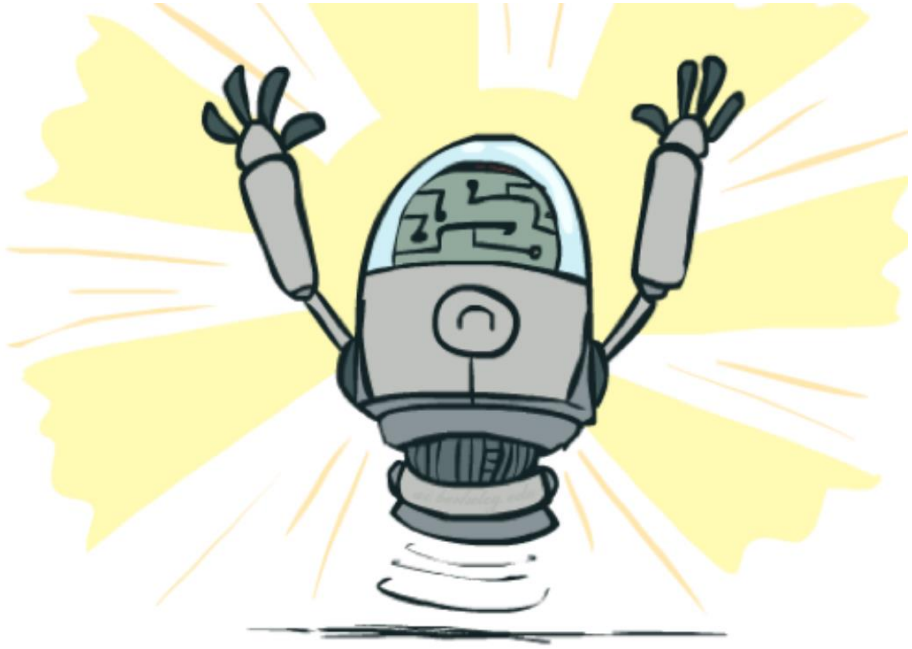
$$s \leftarrow s'$$

# La pregunta es ahora cómo muestrear

- Esta es la madre de todas las batallas: exploration vs exploitation
- En otras palabras, ¿elijo la acción optima de acuerdo a $Q_k(s, a)$, o busco nuevas posibilidades?
- En la práctica se utiliza una técnica mixta, $\epsilon$-Greedy: acción al azar con probabilidad $\epsilon$, en otro caso, acción que maximiza $Q_k(s, a)$.

# Propiedades de Q-learning

- El principal resultado de Q-Learning es que converge a una política óptima, a pesar de actuar de manera subóptima.
- En otras palabras, desacopla exploración de optimización: off-policy learning.
- Requiere mucha exploración y ajustes cuidadosos del learning rate, pero funciona.



https://youtu.be/bszMAul9ld4

# Escapando de las tablas

- Un supuesto implícito de Q-Learning es que almacenamos cada par $(s, a)$ en una tabla.
- Esto no es realista en entornos reales y cuando tenemos acciones continuas.
- ¿Imaginan un mecanismo que permita estimar una función (Q) a partir de ejemplos y luego generalizar a nuevas situaciones?

# Escapando de las tablas: Q-Learning aproximado

- En vez de una tabla, utilizaremos una función parametrizada por $\theta$: $Q_\theta\,(s, a)$
- No hay restricciones para esta función, por lo que podemos utilizar redes tan complejas como queramos.
- El algoritmos ahora actualiza los parámetros de la función, en vez de la tabla:

$$\text{target}(s') = R(s, a, s') + \gamma \max_{a'} Q_{\theta_k}(s', a')$$

$$\theta_{k+1} \leftarrow \theta_k - \alpha \nabla_\theta \left[ \frac{1}{2} (Q_\theta(s, a) - \text{target}(s'))^2 \right] \Bigg|_{\theta=\theta_k}$$

La regla de actualización viene directamente del Q-Learning tabular

Suppose $\theta \in \mathbb{R}^{|S|\times|A|}, \quad Q_\theta(s,a) \equiv \theta_{sa}$

$$\nabla_{\theta_{sa}} \left[\frac{1}{2}(Q_\theta(s,a) - \text{target}(s'))^2\right]$$

$$= \nabla_{\theta_{sa}} \left[\frac{1}{2}(\theta_{sa} - \text{target}(s'))^2\right]$$

$$= \theta_{sa} - \text{target}(s')$$

Plug into update: $\theta_{sa} \leftarrow \theta_{sa} - \alpha(\theta_{sa} - \text{target}(s'))$

$$= (1-\alpha)\theta_{sa} + \alpha[\text{target}(s')]$$

Compare with Tabular Q-Learning update:

$$Q_{k+1}(s,a) \leftarrow (1-\alpha)Q_k(s,a) + \alpha\,[\text{target}(s')]$$

Pontificia Universidad Católica de Chile
Escuela de Ingeniería
Departamento de Ingeniería de Transporte y Logística


# Sistemas Urbanos Inteligentes

## Aprendizaje reforzado y funciones de valor

Hans Löbel
Dpto. Ingeniería de Transporte y Logística
Dpto. Ciencia de la Computación