Algorithms for Reinforcement Learning

김응서

February 6, 2026

SNU BI Lab (Seoul National University BioIntelligence Lab)

리뷰 대상 교재

Algorithms for Reinforcement Learning
저자: Csaba Szepesvári

출판: Morgan & Claypool Publishers

시리즈: Synthesis Lectures on Artificial Intelligence and Machine Learning

발행일: June 9, 2009

** 본 발표는 위 교재를 기반으로 하며, 김응서가 추가적으로 정리한 내용도 포함합니다.*

교재 목차 (1/2)

1. **Overview**
2. **Markov Decision Processes**
   - Preliminaries
   - Markov Decision Processes
   - Value functions
   - Dynamic programming algorithms for solving MDPs
3. **Value Prediction Problems**
   - Temporal difference learning in finite state spaces
     - Tabular TD(0)
     - Every-visit Monte-Carlo
     - TD(λ): Unifying Monte-Carlo and TD(0)
   - Algorithms for large state spaces

교재 목차 (2/2)

Overview

강화학습이란?

Reinforcement Learning (RL)
Learning to control a system so as to **maximize** some numerical value which represents a **long-term objective**;;

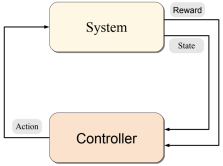


Figure 1: The basic reinforcement learning scenario

Agent ↔ Environment: State, Action, Reward의 순환

유명 교재별 강화학습 정의 (1/4)

저자	정의
Sutton & Barto	"Reinforcement learning problems involve learning **what to do—how to map situations to actions**—so as to **maximize a numerical reward signal**." → *상황→행동을 학습해 보상(수치 신호) 최대화*
Sutton & Barto	"Reinforcement learning is a **computational approach** to understanding and automating **goal-directed learning** and **decision-making**." → *목표지향적 학습 · 의사결정을 이해/자동화하려는 계산적 접근*

Source: Reinforcement Learning: An Introduction (2nd ed.)

유명 교재별 강화학습 정의 (2/4)

저자	정의
Kaelbling, Littman, Moore	"Reinforcement learning is the problem faced by **an agent that learns behavior** through **trial-and-error interactions** with a dynamic environment." → *동적 환경과 상호작용하며 시행착오로 행동을 학습*
David Silver	"The agent's job is to **maximise cumulative reward**." → *에이전트의 목적은 누적 보상 최대화*
David Silver	"The **environment is initially unknown** / The agent **interacts** with the environment / The agent **improves its policy**" → *환경이 미지인 상태에서 상호작용으로 정책을 개선*

Sources: "Reinforcement Learning: A Survey" (JAIR); UCL RL Lecture 1

유명 교재별 강화학습 정의 (3/4)

저자	정의
Bertsekas	"Reinforcement learning, **approximate dynamic programming**, and **neuro-dynamic programming**." *→ RL을 (근사)동적계획/최적제어 큰 틀(ADP · NDP)로 규정*
Bertsekas	"Our subject has benefited greatly from the **interplay of ideas from optimal control and from artificial intelligence**." *→ 최적제어와 AI의 접점/상호작용에서 발전*
Andrew Ng	"Our goal in reinforcement learning is to **choose actions over time** so as to **maximize the expected value of the total payoff**." *→ 시간에 걸쳐 행동을 선택해 기대 보상 총합 최대화*

Sources: Reinforcement Learning and Optimal Control (draft); Stanford CS229 Notes

유명 교재별 강화학습 정의 (4/4)

저자	정의
Szepesvári	"Reinforcement learning is a learning paradigm concerned with **learning to control a system** so as to maximize a numerical performance measure." → *시스템을 제어하는 정책을 학습해 장기 성능지표(수치) 최대화*
Dayan & Niv	"Animals learn to **choose actions to obtain rewards** and **avoid punishments**." → *동물이 보상 획득/벌 회피를 위해 행동 선택을 학습하는 틀*
Mnih et al.	"The theory of reinforcement learning provides a **normative account** of how agents may **optimize their control** of an environment." → *에이전트가 환경 제어를 최적화하는 방법에 대한 규범적 이론*

Sources: Algorithms for Reinforcement Learning; Dayan & Niv (2008); Nature (2015) DQN

주요 간단 용어 (1/3)

Environment (환경) Agent가 행동하는 공간

State (상태) $s \in \mathcal{S}$ 환경에서 agent가 있을 수 있는 여러 상태 중 하나

Action (행동) $a \in \mathcal{A}$ Agent가 한 상태에서 다른 상태로 전환하기 위해 선택할 수 있는 행동

Reward (보상) $r \in \mathcal{R}$ 행동을 취한 후 환경이 피드백으로 제공하는 보상

Transition Probability (전이 확률) P 행동 후 어떤 상태에 도달할지 결정하는 확률

주요 간단 용어 (2/3)

Model 환경이 특정 행동에 어떻게 반응할지 정의
보상 함수와 전이 확률을 포함

Policy (정책) $\pi(s)$ 특정 상태에서 최적의 행동을 안내
총 보상을 최대화하는 것이 목표

Value Function $V(s)$ 해당 상태에서 정책을 따를 때 받을 수 있는 미래 보상의 기댓값 예측
상태가 얼마나 좋은지를 정량화

주요 간단 용어 (3/3)

Agent와 environment의 상호작용은 시간에 따른 행동과 관찰된 보상의 **sequence**를 포함:

시간 단계: $t = 1, 2, \ldots, T$

Notation:

- S_t: 시간 t에서의 상태 (state)
- A_t: 시간 t에서의 행동 (action)
- R_t: 시간 t에서의 보상 (reward)

Episode
하나의 완전한 상호작용 시퀀스 (또한 "**trial**" 또는 "**trajectory**"로 불림)

Terminal state S_T에서 종료:

$$S_1, A_1, R_2, S_2, A_2, \ldots, S_T$$

Model (1/3): Transition and Reward

Model은 환경의 descriptor로, 두 가지 주요 부분으로 구성:

1. **Transition Probability Function** P
2. **Reward Function** R

Transition Step
상태 s에서 행동 a를 취해 다음 상태 s'에 도달하고 보상 r을 받음

Tuple로 표현: (s, a, s', r)

Transition Function:

$$P(s', r \mid s, a) = \mathbb{P}[S_{t+1} = s', R_{t+1} = r \mid S_t = s, A_t = a]$$

$\mathbb{P}$는 "probability"를 나타내는 기호

Model (2/3): State-Transition과 Reward Function

State-Transition Function:

$$P^a_{ss'} = P(s' \mid s, a) = \mathbb{P}[S_{t+1} = s' \mid S_t = s, A_t = a] = \sum_{r \in \mathcal{R}} P(s', r \mid s, a)$$

Reward Function:

$$R(s, a) = \mathbb{E}[R_{t+1} \mid S_t = s, A_t = a] = \sum_{r \in \mathcal{R}} r \sum_{s' \in \mathcal{S}} P(s', r \mid s, a)$$

- Transition function은 행동 a 후 상태 s에서 s'로 전환될 **확률**을 기록
- Reward function은 한 행동에 의해 발생하는 **다음 보상을 예측**

Model (3/3): Model-Based vs Model-Free RL

모델을 알고 있는지 여부에 따라 접근 방식이 달라짐:

Model-Based RL
모델을 알고 있는 경우

- Dynamic Programming (DP) 사용 가능할 수도.

Model-Free RL
모델을 모르는 경우

- 그러니까 학습 시 모델에 의존적이지 않음.

Policy

정의
Policy π는 agent의 **행동 함수(behavior function)**로, 상태 s에서 어떤 행동을 취할지 결정

상태 s에서 행동 a로의 매핑 (mapping from state to action)

두 가지 유형:

- **Deterministic Policy (결정적 정책):**

$$\pi(s) = a$$

  특정 상태에서 항상 같은 행동을 선택

- **Stochastic Policy (확률적 정책):**

$$\pi(a \mid s) = \mathbb{P}_\pi[A = a \mid S = s]$$

  특정 상태에서 확률 분포에 따라 행동을 선택

Value Function (1/5)

정의
Value function은 **상태 또는 행동이 얼마나 좋은지를** 미래 보상의 예측으로 측정

미래 보상(future reward)은 **return**이라고도 하며, 할인된 보상의 총합:

$$G_t = R_{t+1} + \gamma R_{t+2} + \cdots = \sum_{k=0}^{\infty} \gamma^k R_{t+k+1}$$

Discounting factor: $\gamma \in [0, 1]$

Value Function (2/5): State-Value Function

State-value function $V_\pi(s)$: 시간 t에 상태 s에 있을 때의 기댓값 return

$$V_\pi(s) = \mathbb{E}_\pi[G_t \mid S_t = s]$$

- 특정 정책 π를 따를 때 상태 s에서 기대되는 미래 보상의 총량
- "이 상태가 얼마나 좋은가?"에 대한 답

Value Function (3/5): Action-Value Function (Q-Value)

Action-value function $Q_\pi(s, a)$: 상태 s에서 행동 a를 취한 후의 기댓값 return

$$Q_\pi(s, a) = \mathbb{E}_\pi[G_t \mid S_t = s, A_t = a]$$

- "Q-value"라고도 불림 (Q는 "Quality"를 의미)
- 특정 상태-행동 쌍의 가치를 평가

State-value와의 관계:

정책 π를 따를 때, Q-value와 가능한 행동들의 확률 분포를 이용해 state-value 복원:

$$V_\pi(s) = \sum_{a \in \mathcal{A}} Q_\pi(s, a)\pi(a \mid s)$$

Value Function (4/5): Advantage Function

Advantage function $A_\pi(s, a)$: action-value와 state-value의 차이

$$A_\pi(s, a) = Q_\pi(s, a) - V_\pi(s)$$

- "A-value"라고도 불림
- 특정 행동이 평균적인 행동보다 얼마나 더 좋은지를 나타냄
- $A_\pi(s, a) > 0$: 행동 a가 평균보다 좋음
- $A_\pi(s, a) < 0$: 행동 a가 평균보다 나쁨
- $A_\pi(s, a) = 0$: 행동 a가 평균 수준

Value Function (5/5): Optimal Value and Policy

Optimal value function은 최대 return을 생성:

$$V_*(s) = \max_\pi V_\pi(s), \quad Q_*(s,a) = \max_\pi Q_\pi(s,a)$$

Optimal policy π_*는 optimal value functions를 달성:

$$\pi_* = \arg\max_\pi V_\pi(s), \quad \pi_* = \arg\max_\pi Q_\pi(s,a)$$

당연히, 다음이 성립:

$$V_{\pi_*}(s) = V_*(s) \quad \text{and} \quad Q_{\pi_*}(s,a) = Q_*(s,a)$$

- 모든 상태에서 최대 기댓값 return을 제공하는 정책이 optimal policy
- RL의 목표: optimal policy π_*를 찾는 것

Markov Decision Processes: in an Easy way

Markov Decision Processes (MDP) (1/2)

거의 모든 RL 문제는 MDP로 표현 가능

MDP의 모든 상태는 "**Markov**" 속성을 가짐:

Markov Property
미래는 **현재 상태**에만 의존하며, 과거 이력에는 의존하지 않음

$$\mathbb{P}[S_{t+1} \mid S_t] = \mathbb{P}[S_{t+1} \mid S_1, \ldots, S_t]$$

다시 말해, **미래와 과거는 현재 주어진 상황에서 조건부 독립**

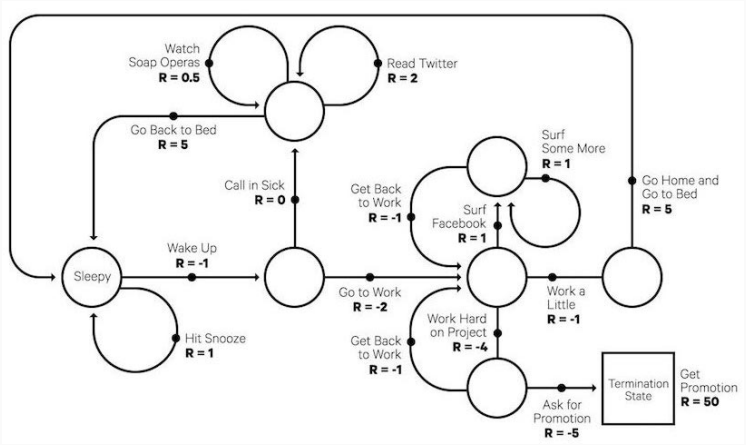
→ 현재 상태가 미래를 결정하는 데 필요한 모든 통계를 포함

Markov Decision Processes (MDP) (2/2)

MDP는 5개의 요소로 구성: $\mathcal{M} = \langle \mathcal{S}, \mathcal{A}, P, R, \gamma \rangle$

- $\mathcal{S}$ - 상태의 집합 (a set of states)
- $\mathcal{A}$ - 행동의 집합 (a set of actions)
- P - 전이 확률 함수 (transition probability function)
- R - 보상 함수 (reward function)
- γ - 미래 보상에 대한 할인 계수 (discounting factor for future rewards)

MDP Example: A Typical Work Day



A fun example of Markov decision process: a typical work day. Image source: randomant.net/reinforcement-learning-concepts

Bellman Equations

Bellman equations decompose the value function into **immediate reward** and **discounted future values**:

State-Value Function:

$$\begin{aligned} V(s) &= \mathbb{E}[G_t \mid S_t = s] \\ &= \mathbb{E}[R_{t+1} + \gamma R_{t+2} + \gamma^2 R_{t+3} + \cdots \mid S_t = s] \\ &= \mathbb{E}[R_{t+1} + \gamma(R_{t+2} + \gamma R_{t+3} + \cdots) \mid S_t = s] \\ &= \mathbb{E}[R_{t+1} + \gamma G_{t+1} \mid S_t = s] \\ &= \mathbb{E}[R_{t+1} + \gamma V(S_{t+1}) \mid S_t = s] \end{aligned}$$

Action-Value Function (Q-value):

$$\begin{aligned} Q(s,a) &= \mathbb{E}[R_{t+1} + \gamma V(S_{t+1}) \mid S_t = s, A_t = a] \\ &= \mathbb{E}[R_{t+1} + \gamma \mathbb{E}_{a\sim\pi} Q(S_{t+1}, a) \mid S_t = s, A_t = a] \end{aligned}$$

Built-in Assumptions

Core Idea: The optimal value of a state is the best expected return achievable from that state onward.

$$V^{\pi}(s) = E_{\pi}\left[\sum_{t=0}^{T} \gamma^{t} r_t \mid s_0 = s\right] \qquad V^{*}(s) = \max_a E_{s'}[r(s,a) + \gamma V^{*}(s')]$$

Built-in Assumptions:

- **Markovian** - 미래는 현재 상태에만 의존 (과거 이력 무관)
- **Stationarity** - 환경의 동역학과 보상 함수가 시간에 따라 변하지 않음
- **Scalar rewards** - 보상은 단일 스칼라 값
- **Additivity of rewards** - 보상은 시간에 따라 가산적으로 누적
- **Estimation** - Value function을 근사 가능하다고 가정
- **Uniqueness** - 최적 value function이 존재

Source: Joelle Pineau: Beyond Bellman's Legacy: Rethinking What we Value

Markov Decision Processes: in a Harder way

Preliminaries: 표기

Sets and Spaces:

- $\mathbb{N}$ - Natural numbers: $\mathbb{N} = \{0, 1, 2, \ldots\}$
- $\mathbb{R}$ - Real numbers
- v - Column vector, $v^\top$ - Row vector

Inner Product and Norms:

- Inner product: $\langle u, v \rangle = \sum_{i=1}^{d} u_i v_i$
- 2-norm: $\|u\|_2 = \sqrt{\langle u, u \rangle}$
- Max norm: $\|u\|_\infty = \max_{i=1,\ldots,d} |u_i|$
- Function norm: $\|f\|_\infty = \sup_{x \in X} |f(x)|$

Preliminaries: 주요 개념

Lipschitz Mapping:

두 거리 공간 (M_1, d_1), (M_2, d_2) 사이의 매핑 T가 Lipschitz 상수 L을 가지면:

$$d_2(T(a), T(b)) \leq L \cdot d_1(a, b), \quad \forall a, b \in M_1$$

- $L \leq 1$: **Non-expansion** (비확장)
- $L < 1$: **Contraction** (수축)

Other Notations:

- $I\{S\}$ - Indicator function: S가 참이면 1, 아니면 0
- $\frac{\partial}{\partial \theta} v$ - Partial derivative w.r.t. θ (row vector)
- $\nabla_\theta v$ - Gradient (column vector)
- $X \sim P$ - Random variable X is drawn from distribution P

Markov Decision Processes (MDP): Recap

Concept: A framework for modeling sequential decision-making problems where an agent observes states, selects actions, and probabilistically receives next states and rewards.

An MDP consists of 5 components: $\mathcal{M} = \langle \mathcal{S}, \mathcal{A}, P, R, \gamma \rangle$

- $\mathcal{S}$: set of states, $\mathcal{A}$: set of actions
- P: transition probability function $P(s, a, s') = \Pr(S_{t+1} = s' \mid S_t = s, A_t = a)$
- R: reward function $R(s, a) = \mathbb{E}[R_{t+1} \mid S_t = s, A_t = a]$
- $\gamma \in [0, 1]$: discount factor

Transition dynamics:

$$S_0 \sim \rho,\ A_t \sim \pi(\cdot \mid S_t),\ S_{t+1} \sim P(\cdot \mid S_t, A_t),\ R_{t+1} \sim R(S_t, A_t)$$

Objective: Maximize expected discounted cumulative reward

$$G = \sum_{t=0}^{\infty} \gamma^t R_{t+1}, \qquad \pi^* \in \arg\max_{\pi}\ \mathbb{E}_{\pi}[G]$$

Value Functions: Motivation

Why value functions?

Naive approach: List all possible behaviors and identify optimal ones for each initial state

- The number of deterministic policies: $|\Pi| = |\mathcal{A}|^{|\mathcal{S}|}$ [1]
- Problem: **exponential complexity** in the number of states $\rightarrow$ computationally infeasible

Better approach: Compute value functions

1. First, compute the **optimal value function**
2. Then, derive an optimal policy with relative ease

[1] https://math.stackexchange.com/questions/4449548

Stationary Policies (1/2)

Deterministic stationary policy: A mapping $\pi : \mathcal{S} \to \mathcal{A}$

$$A_t = \pi(S_t), \quad \forall t \geq 0$$

Stochastic stationary policy: Maps states to distributions over actions

$$A_t \sim \pi(\cdot \mid S_t), \quad \forall t \geq 0$$

where $\pi(a|s)$ denotes the probability of selecting action a in state s.

Notation:

- Π_{stat} denotes the set of all stationary policies
- In what follows, "policy" means "stationary policy" unless stated otherwise

Stationary Policies (2/2): Markov Reward Process

Markov Reward Process (MRP): Induced by a stationary policy π and MDP $\mathcal{M}$

Definition: Determined by $(\mathcal{S}, P^\pi)$ where

$$P^\pi(\cdot|s) = \sum_{a \in \mathcal{A}} \pi(a|s) P(\cdot|s, a)$$

Key properties:

- The state process $(S_t; t \geq 0)$ becomes a time-homogeneous Markov chain
- Generates stochastic process $((S_t, R_{t+1}); t \geq 0)$
- Simplifies analysis by removing action selection decisions

Value Functions (1/2): Policy Value Functions

Fix a policy $\pi \in \Pi_{\text{stat}}$. Assume $\mathbb{P}(S_0 = s) > 0$ for all $s \in \mathcal{S}$.

State-value function $V^\pi : \mathcal{S} \to \mathbb{R}$ underlying policy π:

$$V^\pi(s) = \mathbb{E}\left[\sum_{t=0}^{\infty} \gamma^t R_{t+1} \,\middle|\, S_0 = s\right], \quad s \in \mathcal{S}$$

Action-value function $Q^\pi : \mathcal{S} \times \mathcal{A} \to \mathbb{R}$ underlying policy π:

$$Q^\pi(s, a) = \mathbb{E}\left[\sum_{t=0}^{\infty} \gamma^t R_{t+1} \,\middle|\, S_0 = s, A_0 = a\right]$$

where $(s, a) \in \mathcal{S} \times \mathcal{A}$.

Value Functions (2/2): Optimal Value Functions

Optimal state-value function $V_* : \mathcal{S} \to \mathbb{R}$:

$$V_*(s) = \sup_{\pi \in \Pi_{\text{stat}}} V^\pi(s), \quad s \in \mathcal{S}$$

Optimal action-value function $Q_* : \mathcal{S} \times \mathcal{A} \to \mathbb{R}$:

$$Q_*(s,a) = \sup_{\pi \in \Pi_{\text{stat}}} Q^\pi(s,a), \quad (s,a) \in \mathcal{S} \times \mathcal{A}$$

Interpretation:

- $V_*(s)$: highest expected return achievable from state s
- $Q_*(s,a)$: highest expected return when starting from s and taking action a first

Optimal Value Functions: Properties

Connection between V_* and Q_*:

$$V_*(s) = \sup_{a \in \mathcal{A}} Q_*(s, a), \quad s \in \mathcal{S}$$

$$Q_*(s, a) = R(s, a) + \gamma \sum_{s' \in \mathcal{S}} P(s, a, s') V_*(s'), \quad (s, a) \in \mathcal{S} \times \mathcal{A}$$

Optimal policy existence:

- An optimal stationary policy always exists in the class of MDPs considered
- We have: $V_*(s) = \sup_{\pi \in \Pi_{\text{stat}}} V^\pi(s)$ for all $s \in \mathcal{S}$

Optimal Policies and Greedy Actions

Characterization of optimal policies:

A policy $\pi \in \Pi_{\text{stat}}$ is optimal if and only if

$$\sum_{a \in \mathcal{A}} \pi(a|s) Q_*(s,a) = V_*(s), \quad \forall s \in \mathcal{S}$$

Greedy action: An action a is *greedy* w.r.t. Q in state s if

$$a \in \arg\max_{a' \in \mathcal{A}} Q(s,a')$$

Key result: A greedy policy w.r.t. Q_* is optimal

- Knowing Q_* alone is sufficient for finding an optimal policy
- Knowing V_*, R, and P also suffices to act optimally

Bellman Equations for Policy Evaluation (1/2)

Goal: Compute V^π for a given policy π

Bellman equation for V^π (deterministic policy):

$$V^\pi(s) = R(s, \pi(s)) + \gamma \sum_{s' \in \mathcal{S}} P(s, \pi(s), s') V^\pi(s'), \quad \forall s \in \mathcal{S}$$

Bellman operator $T^\pi : \mathbb{R}^{\mathcal{S}} \to \mathbb{R}^{\mathcal{S}}$:

$$(T^\pi V)(s) = R(s, \pi(s)) + \gamma \sum_{s' \in \mathcal{S}} P(s, \pi(s), s') V(s')$$

Compact form: $T^\pi V^\pi = V^\pi$ (fixed-point equation)

Bellman Equations for Policy Evaluation (2/2)

Properties of T^π:

- T^π is an **affine linear** operator
- If $0 < \gamma < 1$, then T^π is a **maximum-norm contraction**
- The fixed-point equation $T^\pi V = V$ has a **unique solution**

Finite state space:

For $|\mathcal{S}| = D$, we can write

$$V^\pi = (I - \gamma P^\pi)^{-1} r^\pi$$

where $r^\pi \in \mathbb{R}^D$ and $P^\pi \in \mathbb{R}^{D \times D}$ are appropriately defined.

Bellman Optimality Equations (1/2)

Bellman optimality equation for V_*:

$$V_*(s) = \sup_{a \in \mathcal{A}} \left\{ R(s,a) + \gamma \sum_{s' \in \mathcal{S}} P(s,a,s') V_*(s') \right\}, \quad \forall s \in \mathcal{S}$$

Bellman optimality operator $T_* : \mathbb{R}^{\mathcal{S}} \to \mathbb{R}^{\mathcal{S}}$:

$$(T_* V)(s) = \sup_{a \in \mathcal{A}} \left\{ R(s,a) + \gamma \sum_{s' \in \mathcal{S}} P(s,a,s') V(s') \right\}$$

Compact form: $T_* V_* = V_*$ (fixed-point equation)

Bellman Optimality Equations (2/2)

Properties of T_*:

- T_* is a **nonlinear** operator (due to sup)
- If $0 < \gamma < 1$, then T_* is a **maximum-norm contraction**
- The fixed-point equation $T_* V = V$ has a **unique solution**

Bellman optimality equation for Q_*:

$$Q_*(s,a) = R(s,a) + \gamma \sum_{s' \in \mathcal{S}} P(s,a,s') \sup_{a' \in \mathcal{A}} Q_*(s',a')$$

for all $(s,a) \in \mathcal{S} \times \mathcal{A}$.

Value Iteration (VI)

Key idea: Instead of enumerating policies, directly update the **value function** V

Update rule:

$$V_{k+1}(s) = \max_{a \in \mathcal{A}} \left(R(s,a) + \gamma \sum_{s' \in \mathcal{S}} P(s,a,s') V_k(s') \right)$$

Convergence property:

- With sufficient iterations: $V_k \to V^*$ (optimal value function)
- Guaranteed by contraction mapping theorem (when $0 < \gamma < 1$)

Extracting optimal policy: After convergence, use greedy action selection:

$$\pi^*(s) \in \arg\max_{a \in \mathcal{A}} \left(R(s,a) + \gamma \sum_{s' \in \mathcal{S}} P(s,a,s') V^*(s') \right)$$

Value Iteration: Convergence Rate

Geometric convergence: By Banach's fixed-point theorem,

The sequence $V_{k+1} = T_* V_k$ converges to V^* at a **geometric rate**:

$$\|V_k - V^*\|_\infty \leq \gamma^k \|V_0 - V^*\|_\infty$$

Q-value version: VI can also be applied to action-value functions:

$$Q_{k+1} = T_* Q_k, \quad k \geq 0$$

which also converges to Q^* at a geometric rate.

Approximate optimality guarantee: For greedy policy π w.r.t. Q:

$$V^\pi(s) \geq V^*(s) - \frac{2}{1-\gamma} \|Q - Q^*\|_\infty, \quad \forall s \in \mathcal{S}$$

This means if $Q_k \approx Q^*$, then a greedy policy w.r.t. Q_k is near-optimal.

VI: Iteration Complexity (1/2)

Question: How many iterations to achieve ε-accuracy?

Contraction property: T_* is a γ-contraction in sup-norm:

$$\|T_* U - T_* V\|_\infty \leq \gamma \|U - V\|_\infty$$

여기서 $U, V : \mathcal{S} \to \mathbb{R}$는 임의의 value function 후보들이고,
$\|U - V\|_\infty = \max_{s \in \mathcal{S}} |U(s) - V(s)|$ (최대 차이).
즉, 임의의 두 value function에 T_*를 적용하면 그 최대 차이가 γ배 이하로 줄어든단 소리.

Error bound after k iterations:

$$\|V_k - V^*\|_\infty \leq \gamma^k \|V_0 - V^*\|_\infty$$

This shows the error decreases by a factor of γ at each iteration.

VI: Iteration Complexity (2/2)

Iteration count for ε-accuracy: To achieve $\|V_k - V^*\|_\infty \leq \varepsilon$:

$$\gamma^k \|V_0 - V^*\|_\infty \leq \varepsilon \quad \Rightarrow \quad k \geq \frac{\log(\|V_0 - V^*\|_\infty / \varepsilon)}{-\log \gamma}$$

Since $-\log \gamma \approx 1 - \gamma$ when $\gamma \to 1$:

$$K(\varepsilon) = O\left(\frac{\log(1/\varepsilon)}{1-\gamma}\right)$$

Interpretation:

- **Logarithmic** in $1/\varepsilon$: Very fast convergence!
- **Linear** in $1/(1-\gamma)$: Slower when γ is close to 1
- Standard result in RL/MDP literature

VI: Total Computational Cost

Total cost = (Cost per iteration) $\times$ (Number of iterations)

Cost per iteration:

- Dense transitions: $O(|\mathcal{S}|^2|\mathcal{A}|)$
- Sparse transitions (branching factor d): $O(|\mathcal{S}||\mathcal{A}|d)$

Number of iterations for ε-accuracy: $K(\varepsilon) = O\left(\frac{\log(1/\varepsilon)}{1-\gamma}\right)$

Total computational complexity:

- **Dense:** $\widetilde{O}\left(\frac{|\mathcal{S}|^2|\mathcal{A}|}{1-\gamma}\right)$ to reach ε-accuracy
- **Sparse:** $\widetilde{O}\left(\frac{|\mathcal{S}||\mathcal{A}|d}{1-\gamma}\right)$ to reach ε-accuracy

(The $\widetilde{O}$ notation hides logarithmic factors in $1/\varepsilon$)

VI Complexity (1/2): Dense Transitions

Transition probability: $P(s, a, s') = \Pr(S_{t+1} = s' \mid S_t = s, A_t = a)$

Dense transition: For many (s, a), **many** s' have non-zero probability

When computing the expectation:

$$\sum_{s' \in \mathcal{S}} P(s, a, s') V(s')$$

we must sum over nearly all $s' \in \mathcal{S}$ since $P(s, a, s') \neq 0$ for most s'.

Computational cost:

- Per (s, a) pair: $O(|\mathcal{S}|)$ operations
- Total states: $|\mathcal{S}|$, total actions: $|\mathcal{A}|$
- **One VI iteration:** $O(|\mathcal{S}|^2|\mathcal{A}|)$

VI Complexity (2/2): Sparse Transitions

Sparse transition: For each (s, a), reachable next states are **limited to a few**

Definition of d: Number of non-zero transition probabilities

$$d = |\{s' \in \mathcal{S} : P(s, a, s') > 0\}| \quad \text{where } d \ll |\mathcal{S}|$$

When computing the expectation:

$$\sum_{s' \in \mathcal{S}} P(s, a, s') V(s')$$

we only need to sum over d terms (non-zero probabilities).

Computational cost:

- Per (s, a) pair: $O(d)$ operations
- **One VI iteration:** $O(|\mathcal{S}||\mathcal{A}|d)$
- Much faster when $d \ll |\mathcal{S}|$

Policy Iteration (PI)

Alternative approach: Alternate between policy evaluation and policy improvement

Algorithm: Start with arbitrary policy π_0. At iteration $k \geq 0$:

1. **Policy Evaluation:** Compute Q^{π_k} (or V^{π_k}) by solving:

$$Q^{\pi_k} = T^{\pi_k} Q^{\pi_k}$$

2. **Policy Improvement:** Define greedy policy w.r.t. Q^{π_k}:

$$\pi_{k+1}(s) \in \arg\max_{a \in \mathcal{A}} Q^{\pi_k}(s, a)$$

Key property: Each iteration is guaranteed to improve (or maintain) the policy:

$$V^{\pi_{k+1}}(s) \geq V^{\pi_k}(s), \quad \forall s \in \mathcal{S}$$

Value Iteration vs. Policy Iteration

Aspect	Value Iteration	Policy Iteration
Update	$V_{k+1} = T_* V_k$	Solve $V^{\pi_k} = T^{\pi_k} V^{\pi_k}$
Cost per step	Low: single sweep	High: solve linear system
Convergence	Geometric rate	Fewer iterations
Policy quality	Implicit (via greedy)	Explicit improvement

Trade-off:

- **VI:** Fast per iteration, but may need many iterations
- **PI:** Slow per iteration (policy evaluation), but converges in fewer iterations
- PI gives a policy not worse than VI after k iterations (if started with same V_0)

A. The Theory of Discounted Markovian Decision Processes

A.1. Contractions and Banach's fixed-point theorem

Definition 1 (Norm)

정의: 실수 위의 벡터 공간 V에 대해, 함수 $f : V \to \mathbb{R}_0^+$가 다음 조건들을 만족하면 V 위의 **norm**이라고 한다:

1. 어떤 $v \in V$에 대해 $f(v) = 0$이면 $v = 0$이다;
2. 임의의 $\lambda \in \mathbb{R}$, $v \in V$에 대해 $f(\lambda v) = |\lambda| f(v)$;
3. 임의의 $v, u \in V$에 대해 $f(v + u) \leq f(v) + f(u)$.

여기서 f 또는 Norm이 정의된 벡터 공간을 **normed vector space**라고 한다.

참고: Norm은 각 벡터에 음이 아닌 실수를 할당하는 함수이다. 이 값을 벡터의 "길이(length)" 또는 "norm"이라고 부르며, 벡터 v의 norm을 $\|v\|$로 표기한다.

Example: Norm의 예시 (1)

벡터 공간 $V = (\mathbb{R}^d, +, \lambda\cdot)$ 위의 norm들:

1. ℓ_p **norm:** $p \geq 1$에 대해,

$$\|v\|_p = \left(\sum_{i=1}^{d} |v_i|^p \right)^{1/p}$$

$p = 2$일 때 Euclidean distance, $p = 1$일 때 Manhattan distance

2. ℓ_∞ **norm:**

$$\|v\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq d} |v_i|$$

최대 성분 값으로 정의되는 Chebyshev distance (또는 supremum norm)

쉽게는, 각 성분의 절댓값을 전부 보고, 그중에서 가장 큰 값 하나를 고른다는 소리

여기서 d는 벡터 공간의 차원(dimension)을 나타냄

Example: Norm의 예시 (2)

3. Weighted norms:

$$\|v\|_p = \begin{cases} \left(\sum_{i=1}^{d} \frac{|v_i|^p}{w_i}\right)^{1/p}, & \text{if } 1 \le p < \infty; \\ \max_{1 \le i \le d} \frac{|v_i|}{w_i}, & \text{if } p = \infty, \end{cases}$$

여기서 $w_i > 0$. 각 차원에 서로 다른 가중치를 부여하여 중요도를 조절

4. Matrix-weighted 2-norm:

$$\|v\|_{2,P} = \sqrt{v^T P v}$$

여기서 P는 고정된 positive definite matrix이다. (P는 대칭행렬 + 모든 고유값이 양수)

Positive definite matrix로 각 차원 간 상관관계를 반영한 거리

Matrix-weighted 2-norm은 행렬 P로 공간을 변형한 뒤, 그 변형된 공간에서 벡터의 길이를 재는 norm 이다.

함수 공간에서의 Norm

벡터 공간뿐만 아니라 함수 공간에서도 norm을 정의할 수 있다.

예시: V가 정의역 X 위에서 bounded인 함수들의 벡터 공간이면,

$$\|f\|_\infty = \sup_{x \in X} |f(x)|$$

참고: 함수 f가 bounded인 것은 정확히 $\|f\|_\infty < +\infty$를 의미한다.

Definition 2 (Convergence in norm)

정의: $\mathcal{V} = (V, \|\cdot\|)$를 normed vector space라 하고, $v_n \in V$를 벡터들의 수열($n \in \mathbb{N}$)이라 하자.

수열 $(v_n; n \geq 0)$이 벡터 v로 **노름 $\|\cdot\|$에서 수렴한다(converge to v in the norm)**는 것은 다음을 의미한다:

$$\lim_{n\to\infty} \|v_n - v\| = 0$$

이를 $v_n \to_{\|\cdot\|} v$로 표기한다.

참고: d-차원 벡터 공간에서 $v_n \to_{\|\cdot\|} v$는 모든 성분이 수렴하는 것, 즉 각 $1 \leq i \leq d$에 대해 $v_{n,i} \to v_i$가 성립하는 것과 같다. (단, $v_{n,i}$는 v_n의 i번째 성분)

무한차원 벡터 공간에서의 수렴

주의: 무한차원 벡터 공간에서는 pointwise convergence와 norm convergence가 다르다!

예시: $X = [0, 1]$이고 X 위의 bounded 함수 공간을 고려하자. 다음과 같이 정의하면:

$$f_n(x) = \begin{cases} 1, & \text{if } x < 1/n; \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

그리고 f를 다음과 같이 정의하자:

$$f(x) = \begin{cases} 1, & \text{if } x = 0; \\ 0, & \text{if } x \neq 0. \end{cases}$$

Pointwise vs Norm Convergence

앞의 예시에서:

Pointwise convergence: 각 x에 대해 $f_n(x) \to f(x)$

- 즉, f_n은 f로 pointwise하게 수렴한다

그러나, Norm convergence는 성립하지 않는다:

$$\|f_n - f\|_\infty = 1 \not\to 0$$

$\Rightarrow$ 무한차원 공간에서는 pointwise convergence가 norm convergence를 함의하지 않는다!

추가 예시: 박스 이동

함수 정의:

$$f_n(x) = \begin{cases} 1, & \text{if } n \le x \le n+1; \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

높이 1짜리 박스가 오른쪽으로 계속 이동

왜 pointwise 수렴?

- x를 하나 고정하면, 어느 순간부터 박스가 x를 지나쳐 감
- 이후로는 계속 0: $f_n(x) \to 0$
- 모든 x에서 0으로 감

Pointwise convergence to 0

박스 이동: Norm Convergence는?

앞의 예시에서:

Norm convergence는 성립하지 않는다:

$$\|f_n - 0\|_\infty = \|f_n\|_\infty = \sup_x |f_n(x)| = 1 \not\to 0$$

왜?

- 각 n마다 함수 f_n은 어딘가($[n, n+1]$ 구간)에서 여전히 1의 값을 가짐
- Supremum norm은 함수가 가질 수 있는 최댓값을 측정
- 박스가 오른쪽으로 계속 이동해도, 높이는 항상 1로 유지됨

Norm convergence 실패

Cauchy Sequence

실수 수열 $(a_n; n \geq 0)$의 경우, 극한값을 모르더라도 수렴성을 검증할 수 있다.

Cauchy sequence: 다음을 만족하는 수열

$$\lim_{n\to\infty} \sup_{m\geq n} |a_n - a_m| = 0$$

("진동이 사라지는 수열"이라는 이름이 더 직관적일 수 있다)

실수의 중요한 성질: 모든 실수의 Cauchy sequence는 극한을 가진다.

Cauchy sequence 개념은 normed vector space로 자연스럽게 확장된다.

Definition 3 (Cauchy sequence)

정의: $(v_n; n \geq 0)$을 normed vector space $\mathcal{V} = (V, \|\cdot\|)$의 벡터들의 수열이라 하자.

v_n이 **Cauchy sequence**라는 것은 다음을 의미한다:

$$\lim_{n\to\infty} \sup_{m\geq n} \|v_n - v_m\| = 0$$

중요한 사실: 모든 Cauchy sequence가 수렴하는 normed vector space는 특별하다!

일부 Cauchy sequence가 극한을 가지지 않는 normed vector space의 예시도 존재한다.

Definition 4 (Completeness)

정의: Normed vector space $\mathcal{V}$가 **complete**라는 것은 다음을 의미한다:

> Every Cauchy sequence in $\mathcal{V}$ converges with respect to the norm of the vector space.

의미:

- Completeness는 "빈 곳이 없다"는 느낌(?)
- 해석학과 최적화 이론에서 매우 중요한 성질

Definition 5 (Banach space)

정의: Complete normed vector space를 **Banach space**라고 한다.

Banach space의 예시:

- $(\mathbb{R}^d, \|\cdot\|_p)$ (모든 $p \geq 1$에 대해)
- Bounded function space $(B(X), \|\cdot\|_\infty)$
- L^p spaces (이건 뭔지 모르겠네.)

Definition 6 (Lipschitz, Contraction)

정의: $\mathcal{V} = (V, \|\cdot\|)$를 normed vector space라 하자. Mapping $T : V \to V$에 대해:

1. L-Lipschitz: 임의의 $u, v \in V$에 대해

$$\|Tu - Tv\| \leq L\|u - v\|$$

두 점 사이의 거리를 최대 L배까지만 변화시킴

2. Non-expansion: $L \leq 1$인 Lipschitz mapping 거리를 늘리지 않음 (유지하거나 줄임)

3. Contraction: $L < 1$인 Lipschitz mapping 거리를 반드시 줄임! 이때 L을 **contraction factor**라 하고, T를 L-contraction이라 함

Lipschitz Mapping의 연속성

중요한 성질: T가 Lipschitz이면 연속(continuous)이다.

즉, $v_n \to_{\|\cdot\|} v$이면 $Tv_n \to_{\|\cdot\|} Tv$도 성립한다.

증명:

$$\|Tv_n - Tv\| \leq L\|v_n - v\| \to 0 \quad \text{as } n \to \infty$$

입력이 가까우면 출력도 가까워진다는 의미

Definition 7 (Fixed Point)

정의: $T : V \to V$를 어떤 mapping이라 하자.

벡터 $v \in V$가 T의 **fixed point**라는 것은 다음을 의미한다:

$$Tv = v$$

의미:

- Fixed point는 mapping T를 적용해도 변하지 않는 점
- 일종의 "평형점" 또는 "불동점"
- RL에서는 optimal value function이 Bellman operator의 fixed point가 됨

Theorem 1 (Banach's Fixed-Point Theorem)

정리: $\mathcal{V}$를 Banach space라 하고, $T : V \to V$를 contraction mapping이라 하자.

그러면:

1. T는 **유일한(unique)** fixed point를 가진다
2. 임의의 $v_0 \in V$에 대해, $v_{n+1} = Tv_n$으로 정의하면

$$v_n \to_{\|\cdot\|} v^*$$

   여기서 v^*는 T의 유일한 fixed point

3. 수렴은 **기하급수적(geometric)**이다:

$$\|v_n - v^*\| \leq \gamma^n \|v_0 - v^*\|$$

의미: Contraction을 반복 적용하면 항상 유일한 fixed point로 빠르게 수렴!

증명 개요

증명 전략: T를 γ-contraction이라 하자 ($\gamma < 1$).

Step 1: 수열 (v_n)이 수렴함을 보이기

- (v_n)이 Cauchy sequence임을 보임
- Banach space는 complete이므로 수렴

Step 2: 극한 v^*가 fixed point임을 보이기

- $v_{n+1} = Tv_n$의 양변에 극한을 취함

Step 3: Fixed point의 uniqueness 증명

- 두 개의 fixed point가 있다고 가정하면 모순

Step 4: Geometric convergence 증명

증명 Part 1: Cauchy Sequence

목표: (v_n)이 Cauchy sequence임을 보이기

임의의 $k \geq 0$에 대해:

$$\begin{aligned}
\|v_{n+k} - v_n\| &= \|Tv_{n-1+k} - Tv_{n-1}\| \\
&\leq \gamma \|v_{n-1+k} - v_{n-1}\| \\
&= \gamma \|Tv_{n-2+k} - Tv_{n-2}\| \\
&\leq \gamma^2 \|v_{n-2+k} - v_{n-2}\| \\
&\vdots \\
&\leq \gamma^n \|v_k - v_0\|
\end{aligned}$$

이제 $\|v_k - v_0\|$을 bound해야 함...

증명 Part 2: Cauchy Sequence (계속)

삼각부등식을 이용하면:

$$\|v_k - v_0\| \leq \|v_k - v_{k-1}\| + \|v_{k-1} - v_{k-2}\| + \cdots + \|v_1 - v_0\|$$

각 항에 대해: $\|v_i - v_{i-1}\| \leq \gamma^{i-1}\|v_1 - v_0\|$

따라서:

$$\begin{aligned}\|v_k - v_0\| &\leq (\gamma^{k-1} + \gamma^{k-2} + \cdots + 1)\|v_1 - v_0\| \\ &\leq \frac{1}{1-\gamma}\|v_1 - v_0\|\end{aligned}$$

결론:

$$\|v_{n+k} - v_n\| \leq \gamma^n \cdot \frac{1}{1-\gamma}\|v_1 - v_0\| \to 0 \text{ as } n \to \infty$$

(v_n)은 Cauchy sequence! Banach space이므로 수렴. 극한을 v^*라 하자.

증명 Part 3: Fixed Point & Uniqueness

v^*가 fixed point임:

$v_{n+1} = Tv_n$의 양변에 극한을 취하면:

- 좌변: $v_{n+1} \to_{\|\cdot\|} v^*$
- 우변: $Tv_n \to_{\|\cdot\|} Tv^*$ (contraction은 연속)

따라서 $v^* = Tv^*$

Uniqueness: v, v'가 모두 fixed point라 가정하면:

$$\begin{aligned} \|v - v'\| &= \|Tv - Tv'\| \\ &\leq \gamma \|v - v'\| \end{aligned}$$

$(1-\gamma)\|v - v'\| \leq 0$이고 $\gamma < 1$이므로 $\|v - v'\| = 0$

따라서 $v = v'$

증명 Part 4: Geometric Convergence

목표: $\|v_n - v^*\| \leq \gamma^n \|v_0 - v^*\|$를 보이기

$$\begin{aligned}
\|v_n - v^*\| &= \|Tv_{n-1} - Tv^*\| \quad (\because v^* = Tv^*) \\
&\leq \gamma \|v_{n-1} - v^*\| \\
&= \gamma \|Tv_{n-2} - Tv^*\| \\
&\leq \gamma^2 \|v_{n-2} - v^*\| \\
&\vdots \\
&\leq \gamma^n \|v_0 - v^*\|
\end{aligned}$$

결론: $\gamma < 1$이므로 $\gamma^n \to 0$ exponentially fast!

오차가 기하급수적으로 감소 $\Rightarrow$ 매우 빠른 수렴

Banach Fixed-Point Theorem의 의의

이 정리는 세 가지를 모두 보장한다:

1. **Existence:** Fixed point가 존재한다
2. **Uniqueness:** Fixed point가 유일하다
3. **계산 방법 (Computation):** 임의의 점에서 시작해서 $v_{n+1} = Tv_n$을 반복하면 fixed point로 수렴한다

RL에서의 중요성:

- Bellman operator가 contraction임을 보이면
- Value iteration, Policy iteration 등의 알고리즘이 수렴함을 보장
- Optimal value function의 existence와 uniqueness 보장

A.2. Application to MDPs

Optimal Value Function 정의

이 섹션에서는 V^*를 다음과 같이 정의한다:

$$V^*(s) = \sup_{\pi \in \Pi_{\text{stat}}} V^\pi(s), \quad s \in S$$

의미:

- $V^*(s)$는 stationary policy를 선택하여 달성할 수 있는 값의 상한

Bounded Function Space $B(S)$

정의: $B(S)$를 정의역이 S인 bounded 함수들의 공간이라 하자:

$$B(S) = \{V : S \to \mathbb{R} : \|V\|_\infty < +\infty\}$$

(강화학습 문맥에서는 V를 value function으로 봐도 무방)

앞으로 $B(S)$를 norm $\|\cdot\|_\infty$가 주어진 normed vector space로 볼 것이다.

중요한 성질: $(B(S), \|\cdot\|_\infty)$는 **complete**이다!

즉, $B(S)$는 Banach space이다.

$B(S)$의 Completeness 증명

목표: $(V_n; n \geq 0)$이 $B(S)$의 Cauchy sequence이면 수렴함을 보이기

증명:

- 임의의 $s \in S$에 대해, $(V_n(s); n \geq 0)$은 실수의 Cauchy sequence
- 실수는 complete이므로 $V_n(s) \to V(s)$로 수렴
- $V(s)$를 각 s의 극한으로 정의하면 $\|V_n - V\|_\infty \to 0$

직관:

- (V_n)이 norm $\|\cdot\|_\infty$에서 Cauchy sequence이므로
- $V_n(s)$가 $V(s)$로 수렴하는 속도가 s에 무관
- 따라서 uniform convergence 보장

Bellman Operator T^π의 Recap

임의의 stationary policy π에 대해, Bellman operator $T^\pi : B(S) \to B(S)$를 다음과 같이 정의:

$$(T^\pi V)(s) = r(s, \pi(s)) + \gamma \sum_{s' \in S} P(s, \pi(s), s') V(s'), \quad s \in S$$

Well-definedness: $U \in B(S)$이면 $T^\pi U \in B(S)$도 성립

핵심 성질:

1. V^π는 T^π의 fixed point
2. T^π는 γ-contraction

V^π는 T^π의 Fixed Point

식 (7)로 정의된 V^π는 T^π의 fixed point이다:

$$\begin{aligned} V^\pi(s) &= \mathbb{E}[R_1 | S_0 = s] + \gamma \sum_{s' \in S} P(s, \pi(s), s') \mathbb{E}\left[\sum_{t=0}^{\infty} \gamma^t R_{t+2} \,\middle|\, S_1 = s' \right] \\ &= T^\pi V^\pi(s) \end{aligned}$$

의미:

- Immediate reward + Discounted future value
- Bellman equation의 해

T^π는 Contraction

정리: T^π는 γ-contraction이다.

증명:

$$\begin{aligned}
\|T^\pi U - T^\pi V\|_\infty &= \gamma \sup_{s\in S} \left| \sum_{s'\in S} P(s,\pi(s),s')(U(s') - V(s')) \right| \\
&\le \gamma \sup_{s\in S} \sum_{s'\in S} P(s,\pi(s),s') |U(s') - V(s')| \quad \text{(Triangle ineq.)} \\
&\le \gamma \sup_{s\in S} \sum_{s'\in S} P(s,\pi(s),s') \|U - V\|_\infty \quad \text{(sup norm 정의)} \\
&= \gamma \|U - V\|_\infty \quad (\textstyle\sum_{s'} P = 1)
\end{aligned}$$

V^π 계산 방법

Banach fixed-point theorem에 의해:

임의의 $V_0 \in B(S)$에서 시작하여 수열을 구성:

$$V_0, \quad T^\pi V_0, \quad (T^\pi)^2 V_0, \quad (T^\pi)^3 V_0, \quad \dots$$

이 수열은 V^π로 **기하급수적 속도로 수렴**한다!

수렴 속도:

$$\|(T^\pi)^n V_0 - V^\pi\|_\infty \leq \gamma^n \|V_0 - V^\pi\|_\infty$$

$\Rightarrow$ Policy evaluation의 이론적 근거

Bellman Optimality Operator T^*

Bellman optimality operator $T^* : B(S) \to B(S)$를 다음과 같이 정의:

$$(T^*V)(s) = \sup_{a \in A} \left\{ r(s,a) + \gamma \sum_{s' \in S} P(s,a,s')V(s') \right\}, \quad s \in S$$

T^*도 well-defined: $V \in B(S)$이면 $T^*V \in B(S)$

목표: T^*도 γ-contraction임을 보이자!

보조 부등식

먼저 다음 부등식을 주목하자:

$$\left|\sup_{a\in A} f(a) - \sup_{a\in A} g(a)\right| \leq \sup_{a\in A} |f(a) - g(a)|$$

증명 : case analysis로 보일 수 있음

직관:

- 두 supremum의 차이는
- 각 점에서의 차이의 supremum보다 클 수 없다

이 부등식을 T^*의 contraction 증명에 사용할 것이다.

T^*는 Contraction

정리: T^*는 γ-contraction이다.

증명:

$$\begin{aligned}\|T^*U - T^*V\|_\infty &\leq \gamma \sup_{(s,a)\in S\times A} \sum_{s'\in S} P(s,a,s')|U(s') - V(s')| \\ &\leq \gamma \sup_{(s,a)\in S\times A} \sum_{s'\in S} P(s,a,s')\|U - V\|_\infty \\ &= \gamma\|U - V\|_\infty\end{aligned}$$

마지막 등식: $\sum_{s'\in S} P(s,a,s') = 1$

$\Rightarrow$ T^*도 유일한 fixed point를 가지며, 반복 적용으로 기하급수적 수렴!

Theorem 2: Characterization of Optimal Policy

정리: V를 T^*의 fixed point라 하고, policy π가 V에 대해 greedy라고 하자:

$$T^\pi V = T^* V$$

그러면 $V = V^*$이고, π는 optimal policy이다.

의미:

- T^*의 fixed point를 찾으면 그것이 곧 V^*
- 그 fixed point에 대해 greedy한 policy가 optimal policy
- Value iteration의 이론적 근거

Theorem 2 증명 (1/2)

Step 1: 임의의 stationary policy π에 대해 $V^\pi \leq V$임을 보이기

$T^\pi \leq T^*$임에 주목 (임의의 $W \in B(S)$에 대해 $T^\pi W \leq T^* W$)

따라서:

$$V^\pi = T^\pi V^\pi \leq T^* V^\pi$$

T^*가 monotone이므로 ($U \leq W \Rightarrow T^* U \leq T^* W$):

$$T^* V^\pi \leq (T^*)^2 V^\pi$$

부등식을 연쇄시키면:

$$V^\pi \leq (T^*)^n V^\pi \quad \text{for all } n \geq 0$$

T^*가 contraction이므로 우변은 V로 수렴. 따라서 $V^\pi \leq V$.

π가 임의였으므로: $V^* \leq V$

Theorem 2 증명 (2/2)

Step 2: $T^\pi V = T^* V$인 policy π를 선택

V가 T^*의 fixed point이므로:

$$T^\pi V = T^* V = V$$

T^π는 유일한 fixed point V^π를 가지므로:

$$V^\pi = V$$

결론:

- $V^* \leq V = V^\pi \leq V^*$
- 따라서 $V = V^*$
- π는 optimal policy

□

Existence of Greedy Policy

주의: Theorem 2에서 V에 대해 greedy한 policy가 존재해야 함

존재 조건:

- **Finite action space:** 항상 존재
- **Infinite action space:** 추가적인 연속성 가정 필요

Greedy policy:

$$\pi(s) \in \arg\max_{a \in A} \left\{ r(s,a) + \gamma \sum_{s' \in S} P(s,a,s') V(s') \right\}$$

Theorem 3 (Policy Improvement Theorem)

정리: Stationary policy π_0를 선택하고, π가 V^{π_0}에 대해 greedy라 하자:

$$T^{\pi} V^{\pi_0} = T^{*} V^{\pi_0}$$

그러면 $V^{\pi} \geq V^{\pi_0}$ (즉, π는 π_0의 improvement)

특히:

- 어떤 state s에서 $T^{*} V^{\pi_0}(s) > V^{\pi_0}(s)$이면: $V^{\pi}(s) > V^{\pi_0}(s)$ (strict improvement)
- $T^{*} V^{\pi_0} = V^{\pi_0}$이면: π_0은 이미 optimal policy

$\Rightarrow$ Policy iteration의 이론적 근거

Theorem 3 증명

증명:

$$T^{\pi} V^{\pi_0} = T^* V^{\pi_0} \geq T^{\pi_0} V^{\pi_0} = V^{\pi_0}$$

양변에 T^{π}를 적용:

$$(T^{\pi})^2 V^{\pi_0} \geq T^{\pi} V^{\pi_0} \geq V^{\pi_0}$$

계속 반복하면:

$$(T^{\pi})^n V^{\pi_0} \geq V^{\pi_0} \quad \text{for all } n \geq 0$$

양변의 극한을 취하면: $V^{\pi} \geq V^{\pi_0}$ □

Strict improvement: $(T^{\pi})^n V^{\pi_0}(s) \geq T^* V^{\pi_0}(s) > V^{\pi_0}(s)$

극한을 취하면: $V^{\pi}(s) > V^{\pi_0}(s)$

Theorem 3 증명: 세 번째 부분

$T^*V^{\pi_0} = V^{\pi_0}$이면 π_0가 optimal:

$T^*V^{\pi_0} = V^{\pi_0}$이면 V^{π_0}는 T^*의 fixed point

T^*는 contraction이므로 유일한 fixed point V를 가짐

따라서 $V = V^{\pi_0}$

또한 $V^{\pi_0} \leq V^* \leq V$이므로:

$$V^{\pi_0} = V^* = V$$

$\Rightarrow$ π_0는 optimal policy □

Corollary 4: Termination of Policy Iteration

Corollary: MDP가 finite이면:

1. Policy iteration은 유한 단계에서 terminate
2. Termination 시 optimal policy를 반환

또한: Stationary policy가 optimal $\Leftrightarrow$ 그 value function이 T^*의 fixed point

증명:

- Theorem 3에 의해 policy 수열은 strictly improving
- Finite MDP에서는 policy의 개수가 유한
- 따라서 반드시 terminate
- Termination 시 $T^*V^\pi = T^\pi V^\pi = V^\pi \Rightarrow \pi$는 optimal $\square$

Corollary 5: Optimality of Greedy Policy

Corollary: V를 T^*의 유일한 fixed point라 하자.

Part 1: V에 대해 greedy한 모든 policy는 optimal policy이다.

Part 2: Optimal stationary policy π^*가 존재하면:

- $V = V^*$
- π^*는 V^*에 대해 greedy

의미: Optimal policy는 정확히 V^*에 대해 greedy한 policy들이다!

Corollary 5 증명

Part 1: Theorem 2에서 바로 따름

Part 2 증명:

π^*가 optimal stationary policy라 가정. 따라서 $V^{\pi^*} = V^*$

$V^{\pi^*} = T^{\pi^*} V^{\pi^*} \leq T^* V^{\pi^*}$

Corollary 4의 두 번째 부분에 의해: $T^* V^{\pi^*} = V^{\pi^*}$

따라서:

$$V^{\pi^*} \leq V^* \leq V = V^{\pi^*}$$

모두 같으며: $T^{\pi^*} V^* = T^* V^*$ □

핵심: Optimal policy $\Leftrightarrow$ V^*에 대해 greedy

Value Prediction Problems

What is Value Prediction?

How do we estimate the **Value Function** V in an **MRP (Markov Reward Process)**?

Problem Setup:

- States evolve according to Markov dynamics
- Rewards are generated based on states
- Goal: Estimate the discounted sum of future rewards starting from state s

Value Function:

$$V(s) = \mathbb{E}[G \mid S_0 = s]$$

where $G = R_1 + \gamma R_2 + \gamma^2 R_3 + \cdots$ (Return)

Why "Value Prediction"?

Many real-world problems take the form of "expected cumulative future outcomes":

- **Probability** of future events
  - e.g., machine failure probability, customer churn probability
- **Expected time** until an event occurs
  - e.g., mean waiting time, mean time to failure
- **Value Function** under a policy
  - State value $V^{\pi}(s)$, Action value $Q^{\pi}(s, a)$

Monte-Carlo (MC) Methods

핵심 아이디어: $V(s) = \mathbb{E}[G_t \mid S_t = s]$를 경험에서 학습

MC는 간단한 아이디어를 사용:

- 환경 dynamics를 모델링하지 않고 raw experience의 episode로부터 학습
- 관측된 평균 return을 기대 return의 근사로 계산

중요: Empirical return G_t를 계산하려면

- **Complete** episodes $S_1, A_1, R_2, \ldots, S_T$가 필요
- $G_t = \sum_{k=0}^{T-t-1} \gamma^k R_{t+k+1}$
- 모든 episode는 결국 종료되어야 함

MC의 Empirical Mean Return

State s에 대한 empirical mean return:

$$V(s) = \frac{\sum_{t=1}^{T} 1[S_t = s] G_t}{\sum_{t=1}^{T} 1[S_t = s]}$$

여기서 $1[S_t = s]$는 binary indicator function

두 가지 방식:

- **Every-visit:** State s를 방문할 때마다 카운트
  - 한 episode에서 같은 state의 여러 방문을 모두 포함
- **First-visit:** Episode에서 처음 만난 때만 카운트
  - 한 episode에서 state를 처음 만났을 때만 포함

숫자 예제

State s가 3번 등장했고, 그때 return이:

$$G_1 = 10, \quad G_2 = 4, \quad G_3 = 7$$

MC Value 계산:

$$V(s) = \frac{G_1 + G_2 + G_3}{3} = \frac{10 + 4 + 7}{3} = 7$$

해석:

- State s에서 시작했을 때 평균적으로 7의 return을 받음
- 실제 관측된 return들의 단순 평균
- 더 많은 sample이 모이면 추정이 더 정확해짐

Every-visit vs First-visit 예시

Episode 예시: $s_0 \to s_1 \to s_0 \to s_2$ (state s_0가 두 번 등장)

Reward: $R_1 = 2, R_2 = 3, R_3 = 5$ (할인율 $\gamma = 1$로 단순화)

First-visit MC:

- s_0의 첫 방문 (시간 0): $G_0 = R_1 + R_2 + R_3 = 2 + 3 + 5 = 10$
- 두 번째 방문은 무시
- $V(s_0) = 10$

Every-visit MC:

- 첫 번째 방문 (시간 0): $G_0 = 2 + 3 + 5 = 10$
- 두 번째 방문 (시간 2): $G_2 = 5$
- $V(s_0) = \frac{10+5}{2} = 7.5$

Every-visit MC

Algorithm 2 The function that implements the every-visit Monte-Carlo algorithm to estimate value functions in episodic MDPs. This routine must be called at the end of each episode with the state-reward sequence collected during the episode. Note that the algorithm as shown here has linear time- and space-complexity in the length of the episodes.

function EVERYVISITMC($X_0, R_1, X_1, R_2, \ldots, X_{T-1}, R_T, V$)

Input: X_t is the state at time t, R_{t+1} is the reward associated with the t^{th} transition, T is the length of the episode, V is the array storing the current value function estimate

1: $sum \leftarrow 0$
2: **for** $t \leftarrow T-1$ **downto** 0 **do**
3: $\quad sum \leftarrow R_{t+1} + \gamma \cdot sum$
4: $\quad target[X_t] \leftarrow sum$
5: $\quad V[X_t] \leftarrow V[X_t] + \alpha \cdot (target[X_t] - V[X_t])$
6: **end for**
7: **return** V

Every-visit MC는 episode에서 같은 state를 여러 번 방문할 때마다 모두 카운트

Action-Value Function으로 확장

이 근사 방법은 action-value function으로 쉽게 확장됨:

$$Q(s,a) = \frac{\sum_{t=1}^{T} 1[S_t = s, A_t = a] G_t}{\sum_{t=1}^{T} 1[S_t = s, A_t = a]}$$

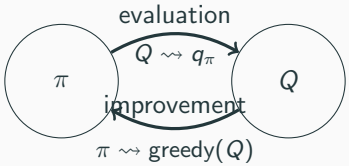
(s,a) pair를 카운트

왜 Q가 중요한가?

- Model-free 환경에서 policy improvement를 위해 필요
- V만으로는 다음 action을 선택하기 어려움 (transition model 필요)
- Q가 있으면 $\pi(s) = \arg\max_a Q(s,a)$로 바로 선택 가능

MC로 Optimal Policy 학습

MC로 optimal policy를 학습하려면, **GPI (Generalized Policy Iteration)**와 유사한 아이디어를 따름:



반복 과정:

1. **Policy Evaluation:** 현재 policy π에 대해 $Q^\pi(s, a)$ 추정
2. **Policy Improvement:** Q에 대해 greedy하게 policy 개선

MC Control Algorithm

1. Policy Improvement: 현재 value function에 대해 greedy하게 policy 개선

$$\pi(s) = \arg\max_{a \in \mathcal{A}} Q(s, a)$$

2. Generate Episode: 새 policy π로 새 episode 생성

- ε-greedy 같은 알고리즘 사용하여 exploration과 exploitation 균형

3. Estimate Q: 새 episode로 Q 추정

$$q_\pi(s, a) = \frac{\sum_{t=1}^{T} \left(1[S_t = s, A_t = a] \sum_{k=0}^{T-t-1} \gamma^k R_{t+k+1} \right)}{\sum_{t=1}^{T} 1[S_t = s, A_t = a]}$$

이 과정을 수렴할 때까지 반복

ε-Greedy Exploration

문제: 순수 greedy policy는 exploration이 부족할 수 있음

ε-Greedy Solution:

- 확률 $1 - \varepsilon$로: 현재 최선의 action 선택 (exploitation)

$$a = \arg\max_{a'} Q(s, a')$$

- 확률 ε로: 랜덤하게 action 선택 (exploration)

$$a \sim \text{Uniform}(\mathcal{A})$$

Trade-off:

- ε가 크면: 더 많은 exploration, 느린 수렴
- ε가 작으면: 더 많은 exploitation, local optimum 위험

MC의 한계 (1): 높은 Variance

문제: Return의 variance가 크면 sample이 많이 필요함

이유:

- Return $G = R_1 + \gamma R_2 + \gamma^2 R_3 + \cdots$
- 미래에 일어나는 여러 random 요소가 쌓임
- $\Rightarrow$ Variance가 커지기 쉬움

결과:

- 평균이 안정되려면 sample을 많이 모아야 함
- 추정 품질이 천천히 좋아짐
- Data efficiency가 낮음

MC의 한계 (2): Reset 불가

문제: State를 특정 위치로 "reset"하는 게 어려운 경우가 많음

MC는 "state s에서 시작하는 독립 실험"이 필요한데...

현실에서는:

- 특정 state로 돌아가는 게 **불가능**
  - 예: 공항 운영, 전력망, 금융 시장
- Reset 비용이 너무 **비쌈**
- **Online/실시간**으로 계속 돌아가야 함
  - "s로 돌아가서 다시 해볼게요"가 안 됨

$\Rightarrow$ 억지로 MC 쓰면 **bias**가 생길 수 있음

대안: TD (Temporal Difference) Learning

핵심 아이디어:

Episode 끝날 때까지 기다리지 말고,
한 step 보고 바로 update하자!

TD(0) Update Rule:

$$V(S_t) \leftarrow V(S_t) + \alpha\Big(\underbrace{R_{t+1} + \gamma V(S_{t+1})}_{\text{TD target}} - V(S_t)\Big)$$

TD Error:

$$\delta_t = R_{t+1} + \gamma V(S_{t+1}) - V(S_t)$$

Bellman equation을 써서 다음 state의 estimate로 **bootstrapping**

TD는 **Markov property 활용**: 현재 state S_t와 다음 state S_{t+1}만으로 update

MC vs TD: Target 비교

MC Target: 실제 Return (episode 끝까지 기다림)

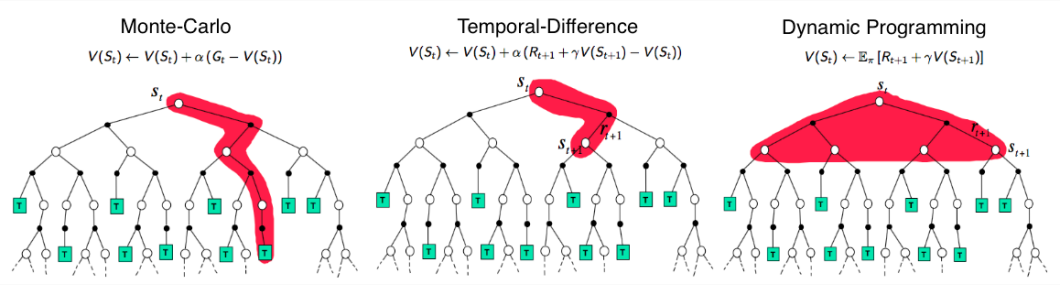
$$G_t = R_{t+1} + \gamma R_{t+2} + \gamma^2 R_{t+3} + \cdots$$

TD Target: Bootstrapped estimate (한 step만 기다림)

$$R_{t+1} + \gamma V(S_{t+1})$$

	MC	**TD**
Target	실제 G_t	$R_{t+1} + \gamma V(S_{t+1})$
기다리는 시간	Episode 끝	한 step
Bias	없음	있음 (bootstrapping)
Variance	높음	낮음

MC vs TD: 시각적 비교



Bias-Variance Trade-off

	Bias	Variance
MC	Low	High
TD	High	Low

MC:

- 실제 return을 쓰므로 unbiased
- 하지만 return에 많은 random 요소가 쌓여서 $\rightarrow$ high variance

TD:

- 현재 estimate $V(S_{t+1})$을 쓰므로 biased
- 하지만 한 step의 randomness만 관여해서 $\rightarrow$ low variance

γ가 작거나 episode가 길수록 TD의 이점이 커짐

When are Monte Carlo methods preferred over TD?

Question from Stack Exchange[2]**:**

"TD-learning uses bootstrapping to approximate the action-value function and Monte Carlo uses an average to accomplish this. I just can't really think of a scenario when MC is the better way to go."

Main answer:

TD learning과 DP의 주요 문제는 step updates가 **초기 조건에 biased**되어 있다는 점. Bootstrapping 과정에서 $Q(s', a')$를 사용하는데, 학습 초기에는 실제 보상 정보를 포함하지 않음.

Bias는 점진적으로 감소하지만, 특히 **off-policy methods**(e.g. Q-Learning)와 **function approximators**를 함께 사용할 때 문제 발생 $\rightarrow$ **deadly triad**

Monte Carlo methods: 실제 sample을 사용하므로 unbiased. 하지만 **high variance** $\rightarrow$ 더 많은 samples 필요

실용적 관점: TD learning이 더 효율적으로 학습 (deadly triad를 극복할 수 있다면). Experience replay와 frozen estimators가 해결책 (e.g., DQN)

MC의 실용적 장점: 개념적으로 단순하고 robust하며 구현이 쉬움. **Policy evaluation**에 적합 (unbiased measure로 여러 agent 비교 시)

[1] https://stats.stackexchange.com/questions/336974

Tabular TD(0) (1/5): 알고리즘

목표: 유한한 MRP M의 value function V를 추정하기

$((X_t, R_{t+1}); t \geq 0)$: MRP에서 실제로 관측한 데이터

$\hat{V}_t(x)$: 시간 t에서 상태 x의 value 추정값 (처음엔 $\hat{V}_0 \equiv 0$)

TD(0) 업데이트:

$$\delta_{t+1} = R_{t+1} + \gamma \hat{V}_t(X_{t+1}) - \hat{V}_t(X_t)$$

$$\hat{V}_{t+1}(x) = \hat{V}_t(x) + \alpha_t \delta_{t+1} \mathbb{I}\{X_t = x\}, \quad x \in \mathcal{X}$$

핵심:

- 방금 방문한 상태 X_t의 값만 업데이트함
- $\alpha_t \leq 1$이면: 현재 값을 목표값 $R_{t+1} + \gamma \hat{V}_t(X_{t+1})$ 쪽으로 조금씩 이동
- **TD error** δ_{t+1}: 연속된 두 시점의 상태 가치 차이

TD(0)

Algorithm 1 The function implementing the tabular TD(0) algorithm. This function must be called after each transition.

function TD0(X, R, Y, V)

Input: X is the last state, Y is the next state, R is the immediate reward associated with this transition, V is the array storing the current value estimates

1: $\delta \leftarrow R + \gamma \cdot V[Y] - V[X]$

2: $V[X] \leftarrow V[X] + \alpha \cdot \delta$

3: **return** V

TD(0)는 한 step만 보고 바로 업데이트 (bootstrapping)

Tabular TD(0) (2/5): 의사코드

Listing 1: TD(0) Implementation

```
def TD0(X, R, Y, V, alpha, gamma):
    """
    X: last state
    R: immediate reward
    Y: next state
    V: array storing current value estimates
    """
    delta = R + gamma * V[Y] - V[X]
    V[X] = V[X] + alpha * delta
    return V
```

특징:

- 매 transition마다 호출됨
- Bootstrapping 사용: 다음 상태의 추정값 $\hat{V}(X_{t+1})$를 활용
- Stochastic Approximation (확률적 근사) 알고리즘

Tabular TD(0) (3/5): 수렴성

수렴 원리: TD(0)가 수렴하면 $\hat{V}$는 다음을 만족:

$$F_{\hat{V}}(x) = \mathbb{E}[R_{t+1} + \gamma \hat{V}(X_{t+1}) - \hat{V}(X_t) \mid X_t = x] = 0$$

간단히 계산하면: $F_{\hat{V}} = T\hat{V} - \hat{V}$ (T는 Bellman operator)

$F_{\hat{V}} = 0$의 유일한 해는 참 value function $V \Rightarrow$ TD(0)는 V로 수렴

수렴 조건: $(X_t; t \in \mathbb{N})$이 stationary, ergodic Markov chain이고, step-size가 Robbins-Monro 조건을 만족하면:

$$\sum_{t=0}^{\infty} \alpha_t = \infty, \quad \sum_{t=0}^{\infty} \alpha_t^2 < +\infty$$

$\hat{V}_t$는 거의 확실히 V로 수렴

Tabular TD(0) (4/5): Step-Size 설정하기

이론적으로 좋은 step-size (Robbins-Monro 조건):

- $\alpha_t = c/t$ (가장 단순한 형태)
- 일반적으로: $\alpha_t = ct^{-\eta}$, 단 $1/2 < \eta \leq 1$
  - $\eta = 1$: 장기적으로 최선 (step-size가 제일 천천히 감소)
  - $\eta \to 1/2$: 초기 학습이 빠름 (step-size가 천천히 감소)

실전에선 고정 step-size를 많이 씀:

- 이론적 조건은 안 맞지만, 실용적인 이유가 있음:
  1. **환경이 변할 때**: Policy가 계속 바뀌는 경우
  2. **데이터가 적을 때**: 샘플이 충분하지 않은 경우
- 고정 step-size 쓰면: 분포 수렴 (분산이 step-size에 비례)

수렴 속도: Linear SA이므로 $O(1/\sqrt{t})$

Tabular TD(0) (5/5): Off-Policy 학습

더 일반적인 형태: $((X_t, R_{t+1}, Y_{t+1}); t \geq 0)$ 데이터에도 적용 가능

$(X_t; t \geq 0)$은 임의의 ergodic Markov chain, $(Y_{t+1}, R_{t+1}) \sim P(\cdot|X_t)$

TD error만 바꾸면 됨:

$$\delta_{t+1} = R_{t+1} + \gamma \hat{V}(Y_{t+1}) - \hat{V}(X_t)$$

이렇게 쓸 수 있음:

1. **시뮬레이터로 상태 제어**: MRP와 무관하게 $\{X_t\}$ 분포를 조절 가능
2. **Off-policy 학습**: 한 policy를 따라가면서 다른 policy를 평가
   - 여러 policy를 동시에 학습할 수 있음
3. **에피소드 문제**: 종료 상태에 도달하면 초기 분포 P_0에서 다시 시작
   - "재시작이 있는 연속 샘플링"

TD(0) vs MC: 수렴 속도 비교 (1/3)

상황에 따라 다름. 구체적 예시로 살펴보자.

예제 MRP (Figure 4):

- 초기 state: state 1 (확률 0.9) 또는 state 2 (확률 0.1)
- State 1 $\rightarrow$ 0 $\rightarrow$ 3 $\rightarrow$ 4 (종료)
- State 2 $\rightarrow$ 3 $\rightarrow$ 4 (종료)
- State 3 $\rightarrow$ 4로 갈 때만 보상: $R \sim$ Bernoulli(0.5)
- 나머지 transition은 보상 0

핵심 관찰:

- State 1은 자주 방문 (90%)
- State 2는 가끔 방문 (10%)
- State 3은 state 2보다 약 10배 자주 방문

TD(0) vs MC: 수렴 속도 비교 (2/3)

Case 1: TD(0)가 더 빠른 경우

State 3에서 보상이 Bernoulli(0.5)로 random일 때:

TD(0)의 장점:

- State 2를 k번째 방문 시, state 3은 약 $10k$번 방문
- State 3의 estimate 정확: $\mathrm{Var}[\hat{V}_t(3)] \approx 1/(10k)$
- State 2는 정확한 estimate를 target으로 사용
- 시간에 따라 target 정확도 향상

MC의 한계:

- State 3 estimate 무시, Bernoulli 보상 직접 사용
- $\mathrm{Var}[R_t|X_t = 2] = 0.25$ 계속 유지
- Target variance 불변 $\Rightarrow$ 수렴 느림

$\Rightarrow$ **Bootstrapping이 도움됨!**

TD(0) vs MC: 수렴 속도 비교 (3/3)

Case 2: MC가 더 빠른 경우

State 3 $\rightarrow$ 4의 보상이 deterministic하게 1일 때:

MC의 장점:

- $R_t = 1$이 정확한 target
- 바로 정확한 값으로 업데이트, 빠르게 수렴

TD(0)의 한계:

- State 2 값이 정확해지려면 State 3 estimate가 먼저 정확해져야 함
- 연쇄 과정으로 수렴 느림

극단적 예: Chain $1 \rightarrow 2 \rightarrow \cdots \rightarrow N$

- MC: N과 무관하게 일정
- TD(0): N 증가 시 느려짐

$\Rightarrow$ **상황에 따라 선택.**

TD(λ): MC와 TD(0)의 통합 (1/5)

핵심 아이디어: MC와 TD(0)를 통합하는 방법이 존재

TD(λ) family (Sutton, 1984, 1988):

- $\lambda \in [0, 1]$: MC와 TD(0) 사이를 보간하는 파라미터
- $\lambda = 0$: TD(0)
- $\lambda = 1$: MC (every-visit)
- $0 < \lambda < 1$: 중간 형태 (multi-step method)

Multi-step return:

$$R_{t:k} = \sum_{s=t}^{t+k} \gamma^{s-t} R_{s+1} + \gamma^{k+1} \hat{V}_t(X_{t+k+1})$$

k-step 동안의 실제 보상 + bootstrapping

TD(λ)는 이러한 multi-step returns를 exponential weights $(1-\lambda)\lambda^k$로 혼합

TD(λ)

Algorithm 3 The function that implements the tabular TD(λ) algorithm with replacing traces. This function must be called after each transition.

function TDLAMBDA(X, R, Y, V, z)

Input: X is the last state, Y is the next state, R is the immediate reward associated with this transition, V is the array storing the current value function estimate, z is the array storing the eligibility traces

$\delta \leftarrow R + \gamma \cdot V[Y] - V[X]$
for all $x \in \mathcal{X}$ **do**
    $z[x] \leftarrow \gamma \cdot \lambda \cdot z[x]$
    if $X = x$ **then**
        $z[x] \leftarrow 1$
    end if
    $V[x] \leftarrow V[x] + \alpha \cdot \delta \cdot z[x]$
end for
return (V, z)

TD(λ)는 λ 값에 따라 MC($\lambda = 1$)와 TD(0)($\lambda = 0$) 사이를 보간

TD(λ): MC와 TD(0)의 통합 (2/5)

Eligibility Traces: Incremental 구현의 핵심

Accumulating traces:

$$\delta_{t+1} = R_{t+1} + \gamma \hat{V}_t(X_{t+1}) - \hat{V}_t(X_t)$$
$$z_{t+1}(x) = \mathbb{I}\{x = X_t\} + \gamma\lambda z_t(x)$$
$$\hat{V}_{t+1}(x) = \hat{V}_t(x) + \alpha_t \delta_{t+1} z_{t+1}(x)$$

초기값: $z_0(x) = 0$

Trace $z_t(x)$:

- TD error가 value 업데이트에 미치는 영향 조절
- 최근 방문 state일수록 큰 값
- $\gamma\lambda$로 지수적 감쇠

TD(λ): MC와 TD(0)의 통합 (3/5)

Replacing traces:

$$z_{t+1}(x) = \max(\mathbb{I}\{x = X_t\}, \gamma\lambda z_t(x))$$

Accumulating vs Replacing:

- **Accumulating**: 방문마다 누적
- **Replacing**: 방문 시 1로 리셋
- 실전에선 replacing이 더 나은 경우 많음

Parameter λ:

- Bootstrapping 정도 조절
- $\lambda = 0$: TD(0)
- $\lambda = 1$: MC

TD(λ): MC와 TD(0)의 통합 (4/5)

Pseudocode (Replacing traces):

Listing 2: TD(lambda) with Replacing Traces

```
def TDLambda(X, R, Y, V, z, alpha, gamma, lam):
    """
    z: array storing eligibility traces
    lam: lambda parameter
    """
    delta = R + gamma * V[Y] - V[X]

    for x in States:
        z[x] = gamma * lam * z[x]
        if X == x:
            z[x] = 1
        V[x] = V[x] + alpha * delta * z[x]

    return V, z
```

TD(λ): MC와 TD(0)의 통합 (5/5)

극한 경우의 동작:

- $\lambda = 0$: TD(0)와 동일
- $\lambda = 1$ + accumulating traces: Every-visit MC와 동일 (episodic)
- $\lambda = 1$ + replacing traces: First-visit MC와 동일 (undiscounted)

실전 팁:

- λ는 trial and error로 결정
- 학습 중에 λ를 변경해도 수렴성 유지

장점:

- MRP의 value function 추정
- Non-episodic 문제에 사용 가능
- 적절한 λ로 MC나 TD(0)보다 훨씬 빠른 수렴

Large State Space 문제 (1/3)

문제: State space가 크거나 무한할 때 tabular 방식 불가능

해결책: Function Approximation

$$V_\theta(x) = \theta^\top \phi(x), \quad x \in \mathcal{X}$$

- $\theta \in \mathbb{R}^d$: Parameter vector
- $\phi : \mathcal{X} \to \mathbb{R}^d$: Feature extraction
- $\phi_i(x)$: State x의 features

핵심:

- 모든 state 값 개별 저장 $\to$ 불가능
- Parameter θ로 근사 $\to$ 가능!
- Feature $\phi(x)$가 중요 정보 압축

Large State Space 문제 (2/3)

Feature Extraction 방법들:

1. Polynomial/Fourier/Wavelet Basis

- 예: $\phi(x) = (1, x, x^2, \ldots, x^{d-1})^\top$

2. Radial Basis Functions (RBF)

- $\phi_i(x) = \exp(-\eta \|x - x^{(i)}\|^2)$, Grid에 Gaussian 배치

3. State Aggregation

- $\phi(x) \in \{0, 1\}^d$, Binary features
- 계산 효율적: $V_\theta(x) = \sum_{i:\phi_i(x)=1} \theta_i$

4. Tile Coding (CMAC)

- Multiple shifted tilings, s-sparse features

Large State Space 문제 (3/3)

Curse of Dimensionality:

- D-차원을 ϵ 간격으로 discretize: $d = \epsilon^{-D}$
- 예: $\epsilon = 1/2$, $D = 100 \Rightarrow d \approx 10^{30}$

왜 때로는 가능한가?

- Intrinsic complexity는 낮을 수 있음
- 많은 variable이 irrelevant
- State가 low-dim submanifold에 존재

TD(λ) with Function Approximation (1/5)

문제: Large state space에서 TD(λ) 사용하기

Parametric function approximation ($V_\theta; \theta \in \mathbb{R}^d$) 사용:

- $V_\theta : \mathcal{X} \to \mathbb{R}$, smooth ($\nabla_\theta V_\theta(x)$ exists)

Tabular TD(λ)의 일반화 (Sutton, 1984, 1988):

$$\delta_{t+1} = R_{t+1} + \gamma V_{\theta_t}(X_{t+1}) - V_{\theta_t}(X_t)$$
$$z_{t+1} = \nabla_\theta V_{\theta_t}(X_t) + \gamma\lambda z_t$$
$$\theta_{t+1} = \theta_t + \alpha_t \delta_{t+1} z_{t+1}$$

초기값: $z_0 = 0 \in \mathbb{R}^d$

핵심 차이:

- Tabular: $z_t(x)$ (각 state마다)
- Function approx: $z_t \in \mathbb{R}^d$ (parameter space)

TD(λ) with Function Approximation

Algorithm 4 The function implementing the TD(λ) algorithm with linear function approximation. This function must be called after each transition.

function TDLambdaLinFApp(X, R, Y, θ, z)

Input: X is the last state, Y is the next state, R is the immediate reward associated with this transition, $\theta \in \mathbb{R}^d$ is the parameter vector of the linear function approximation, $z \in \mathbb{R}^d$ is the vector of eligibility traces

1: $\delta \leftarrow R + \gamma \cdot \theta^\top \varphi[Y] - \theta^\top \varphi[X]$
2: $z \leftarrow \varphi[X] + \gamma \cdot \lambda \cdot z$
3: $\theta \leftarrow \theta + \alpha \cdot \delta \cdot z$
4: **return** (θ, z)

TD(λ)를 function approximation과 결합하여 large state space에서 사용

TD(λ) with Function Approximation (2/5)

Linear Function Approximation: $V_\theta(x) = \theta^\top \phi(x)$

$\nabla_\theta V_\theta = \phi$이므로 업데이트가 단순해짐:

Listing 3: TD(lambda) with Linear Function Approx

```
def TDLambdaLinFA(X, R, Y, theta, z, phi, alpha, gamma, lam):
    """
    phi: feature function
    """
    delta = R + gamma * theta.dot(phi(Y)) - theta.dot(phi(X))
    z = phi(X) + gamma * lam * z
    theta = theta + alpha * delta * z
    return theta, z
```

Tabular case 복원:

- $\mathcal{X} = \{x_1, \ldots, x_D\}$, $\phi_i(x) = \mathbb{I}\{x = x_i\}$
- $z_{t,i} \leftrightarrow z_t(x_i)$, $\theta_{t,i} \leftrightarrow \hat{V}_t(x_i)$

TD(λ) with Function Approximation (3/5)

수렴 조건 (Linear case):

TD(λ)가 거의 확실하게 수렴하려면:

1. Linear function approximation: $V_\theta = \theta^\top \phi$
2. $(X_t; t \geq 0)$이 ergodic Markov process
3. Stationary distribution μ가 MRP와 동일
4. Step-size가 RM 조건 만족

수렴 시 만족하는 식: Projected fixed-point equation

$$V_{\theta^{(\lambda)}} = \Pi_{F,\mu} T^{(\lambda)} V_{\theta^{(\lambda)}}$$

- $F = \{V_\theta | \theta \in \mathbb{R}^d\}$: Representable functions
- $T^{(\lambda)}$: Exponentially weighted Bellman operator
- $\Pi_{F,\mu}$: Projection onto F w.r.t. $\|\cdot\|_\mu$

주의: Off-policy나 nonlinear function approx 시 발산 가능!

TD(λ) with Function Approximation (4/5)

Multi-step Bellman Operator:

$$T^{[m]}\hat{V}(x) = \mathbb{E}\left[\sum_{t=0}^{m}\gamma^t R_{t+1} + \gamma^{m+1}\hat{V}(X_{m+1}) \,\middle|\, X_0 = x\right]$$

TD(λ) Operator:

$$T^{(\lambda)}\hat{V}(x) = (1-\lambda)\sum_{m=0}^{\infty}\lambda^m T^{[m]}\hat{V}(x)$$

특수한 경우: $\lambda = 0 \Rightarrow T^{(0)} = T$, $\lambda = 1 \Rightarrow T^{(1)} = V$

Error Bound:

$$\|V_{\theta(\lambda)} - V\|_\mu \leq \frac{1}{\sqrt{1-\gamma_\lambda}}\|\Pi_{F,\mu}V - V\|_\mu$$

여기서 $\gamma_\lambda = \gamma(1-\lambda)/(1-\lambda\gamma)$ (contraction modulus)

- $\lambda = 1$: Best approximation in F
- $\lambda \to 0$: Bound가 커짐 (더 큰 error 허용)

TD(λ) with Function Approximation (5/5)

TD(λ)가 해결하는 Model:

Bellman error: $\Delta^{(\lambda)}(\hat{V}) = T^{(\lambda)}\hat{V} - \hat{V}$

Error decomposition:

$$\Delta^{(\lambda)}(V_{\theta^{(\lambda)}}) = (1-\lambda)\sum_{m\geq 0}\lambda^m \Delta_m^{[r]} + \gamma\left((1-\lambda)\sum_{m\geq 0}\lambda^m \Delta_m^{[\phi]}\right)\theta^{(\lambda)}$$

- $\Delta_m^{[r]}$: m-step reward modeling error
- $\Delta_m^{[\phi]}$: m-step transition modeling error

해석:

- $\lambda \to 1$: Features가 value function 구조를 잘 잡아야 함
- $\lambda \to 0$: Features가 immediate rewards/transitions를 잘 잡아야 함
- Best λ는 features가 short-term vs long-term 중 어느 것을 더 잘 capture하는지에 따라 달라짐

실전: TD(λ) with $\lambda < 1$이 TD(1)보다 훨씬 빠르게 수렴

Gradient Temporal Difference Learning (1/4)

문제: TD(λ)의 off-policy divergence

TD(λ)는 off-policy 상황에서 발산 가능 $\Rightarrow$ 안정성 문제

해결책: GTD2 & TDC (Sutton et al., 2009)

- Off-policy에서도 수렴 보장
- On-policy에서 TD(λ) 솔루션으로 수렴
- TD(λ)와 거의 같은 계산 효율성

설정: $\lambda = 0$ (TD(0)), linear function approximation

- (X_t, R_{t+1}, Y_{t+1}): Stationary process
- $X_t \sim \nu$ (ν는 stationary distribution과 다를 수 있음)
- Features ϕ는 linearly independent

핵심 아이디어: Projected fixed-point equation의 solution $\theta^{(0)}$를 찾되, gradient 기반 방법 사용

Gradient Temporal Difference Learning (2/4)

Objective Function:

$$J(\theta) = \|V_\theta - \Pi_{F,\nu} T V_\theta\|_\nu^2$$

- Projected fixed-point equation의 모든 solution은 J의 minimizer
- Linear independent features $\Rightarrow$ unique minimizer θ^*

Notation:

$$\begin{aligned}\delta_{t+1}(\theta) &= R_{t+1} + \gamma V_\theta(Y_{t+1}) - V_\theta(X_t) \\ &= R_{t+1} + \gamma \theta^\top \phi'_{t+1} - \theta^\top \phi_t\end{aligned}$$

여기서 $\phi_t = \phi(X_t)$, $\phi'_{t+1} = \phi(Y_{t+1})$

Gradient:

$$\nabla_\theta J(\theta) = -2\mathbb{E}[(\phi_t - \gamma\phi'_{t+1})\phi_t^\top] w(\theta)$$

여기서 $w(\theta) = \mathbb{E}[\phi_t \phi_t^\top]^{-1} \mathbb{E}[\delta_{t+1}(\theta)\phi_t]$

Gradient Temporal Difference Learning (3/4)

GTD2 Algorithm: Two sets of weights - θ_t (primary), w_t (auxiliary)

Update rules:

$$\theta_{t+1} = \theta_t + \alpha_t(\phi_t - \gamma\phi'_{t+1})\phi_t^\top w_t$$
$$w_{t+1} = w_t + \beta_t(\delta_{t+1}(\theta_t) - \phi_t^\top w_t)\phi_t$$

Listing 4: GTD2 Implementation

```
def GTD2(X, R, Y, theta, w, phi, alpha, beta, gamma):
    f = phi(X)
    f_prime = phi(Y)
    delta = R + gamma * theta.dot(f_prime) - theta.dot(f)
    a = f.dot(w)
    theta = theta + alpha * (f - gamma * f_prime) * a
    w = w + beta * (delta - a) * f
    return theta, w
```

특징: w_t 업데이트는 LMS (Least-Mean Square) rule 사용

GTD2: Visualization

Algorithm 5 The function implementing the GTD2 algorithm. This function must be called after each transition.

function GTD2(X, R, Y, θ, w)

Input: X is the last state, Y is the next state, R is the immediate reward associated with this transition, $\theta \in \mathbb{R}^d$ is the parameter vector of the linear function approximation, $w \in \mathbb{R}^d$ is the auxiliary weight

1: $f \leftarrow \varphi[X]$
2: $f' \leftarrow \varphi[Y]$
3: $\delta \leftarrow R + \gamma \cdot \theta^\top f' - \theta^\top f$
4: $a \leftarrow f^\top w$
5: $\theta \leftarrow \theta + \alpha \cdot (f - \gamma \cdot f') \cdot a$
6: $w \leftarrow w + \beta \cdot (\delta - a) \cdot f$
7: **return** (θ, w)

Gradient Temporal Difference Learning (5/5)

TDC (TD with Corrections):

Alternative gradient formulation:

$$\theta_{t+1} = \theta_t + \alpha_t(\delta_{t+1}(\theta_t)\phi_t - \gamma\phi'_{t+1}\phi_t^\top w_t)$$
$$w_{t+1} = w_t + \beta_t(\delta_{t+1}(\theta_t) - \phi_t^\top w_t)\phi_t$$

주요 차이:

- GTD2: θ update에서 $(\phi_t - \gamma\phi'_{t+1})\phi_t^\top w_t$
- TDC: θ update에서 $\delta_{t+1}\phi_t - \gamma\phi'_{t+1}\phi_t^\top w_t$
- TDC는 two-timescale SA: $\alpha_t = o(\beta_t)$ 필요

수렴 보장:

- RM 조건 하에서 $\theta_t \to \theta^*$ almost surely
- Distribution ν와 무관하게 수렴 (off-policy 안전!)
- Computational cost: TD(0)의 약 2배

확장: Eligibility traces, nonlinear function approximation으로 확장 가능

Least-Squares Methods (1/9)

기존 방법들의 한계:

TD(λ), GTD2, TDC는 모두 LMS 스타일의 작은 스텝 업데이트

- Step-size 선택에 민감
- 초기값과 limit point $\theta^{(\lambda)}$의 거리에 민감
- Matrix A의 eigenvalue 구조에 영향 받음
  (예: TD(0)의 경우 $A = \mathbb{E}[\phi_t(\phi_t - \gamma\phi'_{t+1})^\top]$)

개선 시도들:

- Adaptive step-sizes (Sutton, 1992)
- Normalizing updates (Bradtke, 1994)
- Reusing previous samples (Lin, 1992)
- 각각 장단점 존재

해결책: Adaptive filtering의 LS (Least-Squares) 알고리즘을 RL에 적용
$\Rightarrow$ LMS의 모든 결점 해결

LSTD: Least-Squares TD Learning (2/9)

핵심 아이디어:

TD(0)는 무한 샘플의 극한에서 다음을 만족하는 θ 찾음:

$$\mathbb{E}[\phi_t \delta_{t+1}(\theta)] = 0$$

유한 샘플 $D_n = ((X_0, R_1, Y_1), \ldots, (X_{n-1}, R_n, Y_n))$로 근사:

$$\frac{1}{n} \sum_{t=0}^{n-1} \phi_t \delta_{t+1}(\theta) = 0$$

$\delta_{t+1}(\theta) = R_{t+1} - (\phi_t - \gamma \phi'_{t+1})^\top \theta$를 대입하면 θ에 대한 선형 방정식!

$\hat{A}_n = \frac{1}{n} \sum_{t=0}^{n-1} \phi_t (\phi_t - \gamma \phi'_{t+1})^\top$가 non-singular이면:

$$\theta_n = \hat{A}_n^{-1} \hat{b}_n$$

여기서 $\hat{b}_n = \frac{1}{n} \sum_{t=0}^{n-1} R_{t+1} \phi_t$

LSTD: Least-Squares TD Learning (3/9)

LSTD의 장점:

- TD(0)보다 빠른 수렴 (eigenvalue spread에 영향 받지 않음)
- Sample average approximation 사용
- Projected squared Bellman error의 empirical approximation 최소화: $\|\Pi_{F,\mu}(TV - V)\|_\mu^2$

LSTD의 단점:

- Matrix inversion 필요 (d가 크면 비용 증가)
- 자주 호출되면 계산 부담

제안: Bradtke & Barto (1996)

통계적 관점:

- Stochastic programming: Sample average approximation
- Statistics: Z-estimation family

RLSTD: Recursive LSTD (4/9)

Sherman-Morrison formula 활용: Incremental version of LSTD

초기화: $\theta_0 \in \mathbb{R}^d$, $C_0 = \beta I$ ($\beta > 0$ small)

업데이트 ($t \geq 0$):

$$C_{t+1} = C_t - \frac{C_t \phi_t (\phi_t - \gamma \phi'_{t+1})^\top C_t}{1 + (\phi_t - \gamma \phi'_{t+1})^\top C_t \phi_t}$$

$$\theta_{t+1} = \theta_t + \frac{C_t}{1 + (\phi_t - \gamma \phi'_{t+1})^\top C_t \phi_t} \delta_{t+1}(\theta_t) \phi_t$$

계산 복잡도: $O(d^2)$ per update

특징:

- Adaptive filtering의 RLS (Recursive Least-Squares)와 유사
- Online learning에 적합
- Matrix inversion을 incremental하게 수행

RLSTD: Visualization

Algorithm 6 The function implementing the RLSTD algorithm. This function must be called after each transition. Initially, C should be set to a diagonal matrix with small positive diagonal elements: $C = \beta\, I$, with $\beta > 0$.

function RLSTD(X, R, Y, C, θ)

Input: X is the last state, Y is the next state, R is the immediate reward associated with this transition, $C \in \mathbb{R}^{d \times d}$, and $\theta \in \mathbb{R}^d$ is the parameter vector of the linear function approximation

1: $f \leftarrow \varphi[X]$
2: $f' \leftarrow \varphi[Y]$
3: $g \leftarrow (f - \gamma f')^\top C$ ▷ g is a $1 \times d$ row vector
4: $a \leftarrow 1 + gf$
5: $v \leftarrow Cf$
6: $\delta \leftarrow R + \gamma \cdot \theta^\top f' - \theta^\top f$
7: $\theta \leftarrow \theta + \delta \,/\, a \cdot v$
8: $C \leftarrow C - v\, g \,/\, a$
9: **return** (C, θ)

LSTD(λ): Extension to Eligibility Traces (5/9)

LSTD(λ) (Boyan, 2002): λ parameter 추가

전제조건: $\lambda > 0$일 때 $X_{t+1} = Y_{t+1}$ 필요 (TD errors가 telescope하려면)

Solution은 다음을 만족:

$$\frac{1}{n}\sum_{t=0}^{n-1}\delta_{t+1}(\theta)z_{t+1} = 0$$

여기서 $z_{t+1} = \sum_{s=0}^{t}(\gamma\lambda)^{t-s}\phi_s$ (eligibility traces)

Recursive form: RLSTD(λ) (Xu et al., 2002; Nedić & Bertsekas, 2003)

문제점: Equation (30)이 해를 갖지 않을 수 있음

- On-policy + 큰 샘플: 항상 해 존재
- 해가 없을 때의 trick: Small positive diagonal matrix 추가
  (보장 안됨)
- **Better approach:** Projected Bellman error 최소화
  (항상 well-defined)

LSTD(λ): Convergence Properties (6/9)

수렴성:

Standard assumptions 하에서 LSTD(λ) (및 recursive variants)는 projected fixed-point equation (22)의 solution으로 almost surely 수렴

이론적 결과:

- $\lambda = 0$: Bradtke & Barto (1996)
- $\lambda > 0$: Xu et al. (2002), Nedić & Bertsekas (2003)
- On-policy case에서 증명되었으나, off-policy에서도 성립
  (limiting solution이 존재한다면)

(R)LSTD(λ)의 장점:

- Step-size 튜닝 불필요
- Matrix A의 eigenvalue 구조에 민감하지 않음
- 초기값 θ의 선택에 민감하지 않음

실험적 확인: TD(λ)보다 빠른 수렴 (Bradtke & Barto, 1996; Boyan, 2002; Xu et al., 2002)

LSPE: Least-Squares Policy Evaluation (7/9)

λ-**LSPE** (Bertsekas & Ioffe, 1996): Multi-step value iteration 모방

$(n-s)$-step prediction:

$$\hat{V}_{s,n}^{(\lambda)}(\theta) = \theta^\top \phi_s + \sum_{q=s}^{n-1} (\gamma\lambda)^{q-s} \delta_{q+1}(\theta)$$

Loss function:

$$J_n(\hat{\theta}, \theta) = \frac{1}{n} \sum_{s=0}^{n-1} \left(\hat{\theta}^\top \phi_s - \hat{V}_{s,n}^{(\lambda)}(\theta) \right)^2$$

Update:

$$\theta_{t+1} = \theta_t + \alpha_t \left(\arg\min_{\hat{\theta}} J_{n_t}(\hat{\theta}, \theta_t) - \theta_t \right)$$

여기서 $(n_t; t \geq 0)$는 non-decreasing integer sequence

특징: J_n은 $\hat{\theta}$에 대해 quadratic $\Rightarrow$ closed form solution

λ-LSPE: Visualization

Algorithm 7 The function implementing the batch-mode λ-LSPE update. This function must be called repeatedly until convergence.

function LAMBDALSPE(D, θ)

Input: $D = ((X_t, A_t, R_{t+1}, Y_{t+1}); t = 0, \ldots, n-1)$ is a list of transitions, $\theta \in \mathbb{R}^d$ is the parameter vector

$A, b, \delta \leftarrow 0$ ▷ $A \in \mathbb{R}^{d \times d}$, $b \in \mathbb{R}^d$, $\delta \in \mathbb{R}$

for $t = n-1$ **downto** 0 **do**

  $f \leftarrow \varphi[X_t]$

  $v \leftarrow \theta^\top f$

  $\delta \leftarrow \gamma \cdot \lambda \cdot \delta + \left(R_{t+1} + \gamma \cdot \theta^\top \varphi[Y_{t+1}] - v\right)$

  $b \leftarrow b + (v + \delta) \cdot f$

  $A \leftarrow A + f \cdot f^\top$

end for

$\theta' \leftarrow A^{-1} b$

$\theta \leftarrow \theta + \alpha \cdot (\theta' - \theta)$

return θ

LSPE: Properties and Comparison (9/9)

특별 케이스 ($\lambda = 0$, $\alpha_t = 1$):

$$\theta_{t+1} = \arg\min_{\hat{\theta}} \frac{1}{n_t} \sum_{s=0}^{n_t-1} \{\hat{\theta}^\top \phi(X_s) - (R_{s+1} + \gamma V_{\theta_t}(Y_{s+1}))\}^2$$

$\Rightarrow$ Fitted value iteration with linear function approximation

$\alpha_t < 1$**의 역할:**

- 작은 샘플에서 parameter 안정화
- Control algorithm의 subroutine으로 사용 시 policy를 점진적으로 변경

수렴성: Standard assumptions + $n_t = t$ 하에서 almost surely 수렴

- Decreasing step-sizes (Nedić & Bertsekas, 2003)
- Constant step-sizes: $0 < \alpha < \frac{2-2\gamma\lambda}{1+\gamma-2\gamma\lambda}$ (항상 1 포함)

Least-Squares vs TD-like Methods (1/3)

계산 복잡도 비교 (샘플 크기 n):

Method	Complexity	비고
LSTD	$O(nd^2 + d^3)$	Matrix inversion
RLSTD	$O(nd^2)$	Recursive update
LSPE	$O(nd^2)$	
TD(λ)	$O(nd)$	Lightweight
GTD2/TDC	$O(nd)$	Lightweight

Trade-off:

- Least-squares: 높은 안정성 & 정확도 $\Leftrightarrow$ 높은 계산 복잡도
- Lightweight: 낮은 복잡도 $\Leftrightarrow$ step-size 민감

Observation: Lightweight는 least-squares가 1번 pass하는 동안 d번 pass 가능!

Experience Replay (Lin, 1992): 관측을 저장/재사용하여 정확도 향상

Least-Squares vs TD-like Methods (2/3)

d가 매우 큰 경우:

- Lightweight methods가 같은 계산 시간 내에 least-squares만큼 성능 발휘 가능
- 예: Go 게임의 value function (Silver et al., 2007) - 백만 개 이상의 features 사용
- 이 경우 least-squares methods는 실행 불가능

분석 시나리오: 새로운 관측이 negligible cost로 가능한 경우

- 데이터 저장/재사용 불필요
- 성능은 계산 속도에 의존

계산 시간 T 고정 시:

- Least-squares: 샘플 크기 $n \approx T/d^2$ 처리 가능
- Lightweight methods: 샘플 크기 $n' \approx nd = T/d$ 처리 가능

$\Rightarrow$ Lightweight methods가 d배 많은 샘플 처리!

Least-Squares vs TD-like Methods (3/3)

정확도 비교: Limit parameter θ^*

수렴 속도:

$$\|\theta_t - \theta^*\| \approx C_1 t^{-1/2} \quad \text{(LSTD)}$$
$$\|\theta'_t - \theta^*\| \approx C_2 t^{-1/2} \quad \text{(TD-like)}$$

같은 계산 시간 T 후의 정확도 비율:

$$\frac{\|\theta'_{n'} - \theta^*\|}{\|\theta_n - \theta^*\|} \approx \frac{C_2}{C_1} d^{-1/2}$$

결론:

- $C_2/C_1 < d^{1/2}$: Lightweight TD-like 방법이 더 정확
- $C_2/C_1 > d^{1/2}$: Least-squares 방법이 더 정확
- **경험적 rule:** d 작으면 least-squares, d 크면 lightweight

iLSTD (Geramifard et al., 2007): Incremental LSTD

- Sparse features (s nonzero): Complexity $O(sd)$ per iteration
- Storage: $O(\min(ns^2 + d, d^2))$
- $ns^2 \ll d^2$일 때 경쟁적

Function Space 선택 (1/8)

Value function 품질 측정:

목표가 value-prediction일 때, 적절한 state distribution μ에 대한 MSE (Mean-Squared Error) 사용

Learning의 관점:

Function space F에서 함수 선택: $F = \{V_\theta \mid \theta \in \mathbb{R}^d\}$

Approximation Error:

$$\inf_{V_\theta \in F} \|V_\theta - V^*\|_\mu$$

- 더 큰 function space $\Rightarrow$ 작은 approximation error
- 예: Linear approximation에서 독립적인 features 추가

문제: Incomplete information을 사용하는 learning에서 function space 크기 증가는 양날의 검!

- Approximation error $\downarrow$, but Estimation error $\uparrow$

Function Space 선택 (2/8)

단순화된 분석:

Linear approximation + LSTD, $\gamma = 0$, (X_t, R_{t+1}) i.i.d., $X_t \sim \mu$

이 경우: $V(x) = r(x) = \mathbb{E}[R_{t+1}|X_t = x]$

LSTD는 empirical loss의 minimizer 계산:

$$L_n(\theta) = \frac{1}{n}\sum_{t=0}^{n-1}(\theta^\top \phi(X_t) - R_{t+1})^2$$

핵심 질문:

- Feature dimensionality d가 클 때 어떤 일이 발생하는가?
- Sample size n과 d의 관계는?

Function Space 선택 (3/8)

Overfitting 시나리오:

$d \geq n$이고 feature matrix가 full row rank라면:

- L_n의 minimum $= 0$
- LSTD solution θ_n: $\theta_n^\top \phi(X_t) = R_{t+1}$ for all t
- Perfect fit on training data!

문제점:

- Noisy rewards $\Rightarrow$ 큰 estimation error
- $\|\theta_n^\top \phi - V\|_\mu$ 매우 큼
- **Overfitting:** Model이 "noise"에 fitting됨

해결책: 더 작은 d (더 작은 F) 선택

- Overfitting 감소
- But: Approximation error 증가
- $\Rightarrow$ Tradeoff 존재!

Function Space 선택 (4/8)

Tradeoff 정량화:

θ^*: True loss의 minimizer

$$\theta^* = \arg\min_{\theta} L(\theta), \quad L(\theta) = \mathbb{E}[(\theta^\top \phi(X_t) - R_{t+1})^2]$$

V_{θ^*}는 V의 F로의 projection

핵심 아이디어:

- LSTD는 θ^*를 근사
- 하지만 유한 샘플 $\Rightarrow$ Estimation error 발생
- Function space 크기에 따라 error가 달라짐

Function Space 선택 (5/8)

통계적 bound (Györfi et al., 2002):

Bounded rewards ($|R| \leq R$) + truncation 가정:

$$\mathbb{E}[\|\theta_n^\top \phi - V\|_\mu^2] \leq C_1 \frac{d(1+\log n)}{n} + C_2 \|(\theta^*)^\top \phi - V\|_\mu^2$$

항목 분석:

- **첫 번째 항:** Estimation error bound
  - d 증가 $\Rightarrow$ 증가
  - n 증가 $\Rightarrow$ 감소
- **두 번째 항:** Approximation error
  - d 증가 $\Rightarrow$ (일반적으로) 감소

Constants:

- C_1: Reward의 variance & range에 비례
- C_2: Universal constant

Function Space 선택 (6/8)

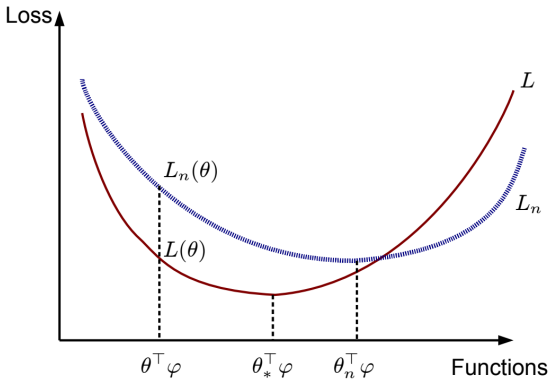


Figure 5: Convergence of $L_n(\cdot)$ to $L(\cdot)$. Shown are the curves of the empirical loss, L_n and the true loss L, as a function of the parameter θ. If the two curves are uniformly close to each other (i.e., for every θ, $L_n(\theta) - L(\theta)$ is small), then one can expect that the loss of $\theta_n^\top\varphi$

Function Space 선택 (7/8)

일반화:

Similar bounds는 다음 경우에도 성립:

- $\gamma > 0$
- Dependent sequence $(X_t; t \geq 0)$ (잘 mixing하면)
- $\gamma \neq 0$: Noise는 R_{t+1}과 Y_{t+1} 모두에서 발생

Control algorithms에서도:

- Fitted value iteration (Munos & Szepesvári, 2008)
- Fitted actor-critic (Antos et al., 2007)
- Approximate policy iteration (Antos et al., 2008)
- Finite-sample performance bounds 존재

결론: Approximation-Estimation tradeoff는 RL의 근본적인 문제

- Function space 너무 크면: Overfitting (high variance)
- Function space 너무 작으면: Underfitting (high bias)

Function Space 선택 (8/9)

자동 Feature Selection & Regularization:

Function space 선택의 중요성과 어려움 인식 $\Rightarrow$ 자동화 연구 증가

Parsimonious basis functions 구성:

- Gaussian RBF 파라미터 튜닝 (Menache et al., 2005)
- Nonparametric techniques (Keller et al., 2006; Parr et al., 2007)
- Numerical analysis + nonparametric (Mahadevan, 2009)

Supervised learning 기법 활용:

- Regression trees (Ernst et al., 2005)
- Kernel methods (Rasmussen & Kuss, 2004; Engel et al., 2005)
- ℓ_1-regularization (LASSO-inspired, Kolter & Ng, 2009)
- Regularization with statistical guarantees (Farahmand et al., 2009)

Function Space 선택 (9/9)

개사기 Neural Network의 등장:

개레전드 Neural Networks가 제공하는 것:

- **Universal Approximation:** 충분한 크기의 네트워크는 임의의 연속 함수 근사 가능
- **Automatic Feature Learning:** Hand-crafted features 대신 데이터로부터 representation 학습
- **Scalability:** 고차원 state/action spaces 처리 가능
- **End-to-End Learning:** Raw sensory input부터 action까지 직접 학습

마침내. Deep Reinforcement Learning의 시작:

- DQN (Mnih et al., 2015): Atari 게임을 raw pixels로부터 학습
- 이전 방법들과 달리 feature engineering 불필요
- TD learning + Deep Neural Networks의 결합
- Experience replay & Target networks로 안정성 확보

현대 RL의 방향: Function approximation의 선택이 linear에서 deep neural networks로 확장

Control

For Further Exploration

참고문헌 i

주요 참고 자료:

1. **Szepesvári, C. (2009).**
   Algorithms for Reinforcement Learning
   Synthesis Lectures on Artificial Intelligence and Machine Learning,
   Morgan & Claypool Publishers
   `https://sites.ualberta.ca/~szepesva/rlbook.html`

2. **Sutton, R. S., & Barto, A. G. (2018).**
   Reinforcement Learning: An Introduction (2nd ed.)
   MIT Press

참고문헌 ii

3. **Kaelbling, L. P., Littman, M. L., & Moore, A. W. (1996).**
   Reinforcement Learning: A Survey
   Journal of Artificial Intelligence Research (JAIR), 4, 237-285

4. **Silver, D.**
   UCL Course on Reinforcement Learning - Lecture 1: Introduction to RL

5. **Zhou, Y. (2019).**
   IE 498: Online Learning and Decision Making
   Fall 2019, University of Illinois at Urbana-Champaign
   Teaching Assistant: Tanmay Gangwani

6. **Bertsekas, D. P. (2019).**
   Reinforcement Learning and Optimal Control
   Athena Scientific

참고문헌 iii

7. **Ng, A.**
   CS229 Lecture Notes - Reinforcement Learning and Control
   Stanford University

8. **Dayan, P., & Niv, Y. (2008).**
   Reinforcement learning: The Good, The Bad and The Ugly
   Current Opinion in Neurobiology, 18(2), 185-196

9. **Mnih, V., et al. (2015).**
   Human-level control through deep reinforcement learning
   Nature, 518(7540), 529-533

10. **Pineau, J.**
    Beyond Bellman's Legacy: Rethinking What we Value

참고문헌 iv

11. **Weng, L. (2018).**
A (Long) Peek into Reinforcement Learning
Lil'Log Blog
https://lilianweng.github.io/posts/2018-02-19-rl-overview/

12. **Stack Exchange Discussion (2018).**
When are Monte Carlo methods preferred over temporal difference ones?
Cross Validated
https://stats.stackexchange.com/questions/336974

본 발표 자료는 위 교재와 논문들을 바탕으로 작성되었습니다.