Aprendizaje por refuerzo y técnicas generativas.

Deep Q Network (DQN)

Introducción a Deep Q-learning

Introducción

Previamente en "Aprendizaje por refuerzo", se ha introducido una de sus técnicas más populares: el *Q-learning*. Y además, se han establecido las bases hablando de procesos de decisión de Markov, políticas y funciones de valor.

En este apartado extenderemos las técnicas de *Q-Learning* clásico incorporando el uso de *redes neuronales*, dando pie a la evolución a los modelos de *Deep Q Network*.

Algunos conocimientos de Deep Learning y recursos recomendados de interes:

- https://www.coursera.org/learn/neural-networks-deep-learning
- https://www.tensorflow.org/guide/core/mlp_core
- https://www.tensorflow.org/agents/tutorials/0_intro_rl?hl=es-419

Un poco de historia

En *2015*, *DeepMind*, siendo ya parte de Google, presentó un avance en el campo del aprendizaje por refuerzo profundo con la introducción de *Deep Q Network (DQN)*, marcando el comienzo del campo conocido hoy como *Deep Reinforcement Learning*.

DQN cambia la forma en que se aborda el aprendizaje automático en entornos de toma de decisiones secuenciales.

- En lugar de procesar datos estáticos (imágenes o texto), el aprendizaje por refuerzo implica aprender a tomar decisiones secuenciales mientras se maximiza una recompensa acumulativa.
- **DQN** se lanzó en un videojuego de **Atari**, utilizando solo píxeles de la pantalla y retroalimentación de recompensa sencilla, logrando superar el rendimiento de los "expertos/frikies" en varios juegos, incluidos títulos icónicos como Breakout, Space Invaders y Pong.
- La capacidad de *DQN* radica aprender directamente de la experiencia, o más bien del escenario que se crea en cada instantem, y tomar decisiones óptimas en entornos complejos.
- Todo esto allanó el camino para aplicaciones en campos como la robótica, los sistemas de control, la gestión de inventario, los vehículos autónomos y más.

Q-Learning vs. Deep Q-Learning

- En *Q-Learning* usamos la tablas de estados y acciones, o Q-valores.
- En *Deep Q-Learning* utilizamos una red neuronal que aproxima o minimiza la función que aproxima esos Q-valores.

Q-Learning vs. Deep Q-Learning

El uso de *redes neuronales* tiene varios propósitos importantes en comparación con el enfoque tradicional de Q-Learning:

- Aproximación de la función Q: En Q-Learning la tabla que almacena los Q-valores de cada par estado-acción posible, haciendo dependiente de la complejidad del problema. Una red neuronal permite aproximar la función Q, lo que significa que cedemos a la red el aprender una representación de la función Q, como si generase su propia Q-tabla.
- *Generalización y abstracción*: Las redes neuronales por definición buscan generalizar a partir de ejemplos y extraer características relevantes de los datos de entrada.
- *Escalabilidad*: en Q-Learning vemos limitadas nuestras acciones por como de compleja podamos generar nuestra Q-tabla, las redes neuronales permiten manejar datos de alta dimensionalidad y extraer características relevantes para la toma de decisiones.
- Aprendizaje de representaciones jerárquicas: aprenden representaciones jerárquicas de los datos, lo que les permite capturar características tanto a nivel bajo (como bordes y texturas en una imagen) como a nivel alto (como objetos y patrones).

El agente y su entorno

<img width="65%"
src="images/DQN/AgentEnvironment.png">

El *agente* y el *entorno* interactúan continuamente entre sí, cada iteración el agente toma una acción en el entorno donde varía la observación actual, y recibe una recompensa y la siguiente observación desde el entorno.

El objetivo es mejorar el agente en cada iteración para maximizar la suma de recompensas.

El ellionio de Campole

<div class="noticia"> <img width="25%" class="izquierda"

src="images/DQN/cartpole.png"> <aside>Cartpole es uno de los problemas de aprendizaje de refuerzo clásicos ("Hola, mundo!"). Un poste está sujeto a un carro, que puede moverse a lo largo de una pista sin fricción. El poste comienza en posición vertical y el objetivo es evitar que se caiga controlando el carro.

La observación del entorno es un vector 4D representa la posición y la velocidad del carro, y el ángulo y la velocidad angular del polo. El agente puede controlar el sistema mediante 2 acciones, empujar a la derecha (1) o izquierda (-1).

</aside> </div>

Las claves del juego vienen dadas por:

- La recompensa de dá según pasa el tiempo y el palo permanece vertical.
- El juego termina cuando el poste se inclina por encima de algún límite o el carro se mueve fuera de los bordes del mundo.
- El objetivo del agente es aprender a maximizar la suma de recompensas.

Deep Q-Learning

Deep Q-Network o DQN combina la idea del Q-learning aplicando *redes neuronales*.

- Usa *una red neuronal* para aproximar la *función Q* (En realidad, utiliza dos redes neuronales para estabilizar el proceso de aprendizaje).
- La red neuronal principal (main Neural Network), representada por los parámetros θ, se utiliza para estimar los valores-Q del estado s y acción a actuales: Q(s, a; θ).
- La red neuronal objetivo (target Neural Network), parametrizada por θ´, tendrá la misma arquitectura que la red principal pero se usará para aproximar los valores-Q del siguiente estado s´ y la siguiente acción a´.

Deep Q-Learning - Ecuación de Bellman

La función de Bellman cambia para adaptarse a las redes neuronales partiendo de:

```
 <img width="35%"
src="images/DQN/bellmanDQN.png">
```

La adaptación de la ecuación se debe a la necesidad de una *función de pérdida* (*loss function*) definida como el cuadrado de la diferencia entre ambos lados de la ecuación.

Al convertirlo en una *loss function* el objetivo de la red será minimizar usando el algoritmo de descenso de gradientes (viene definida dentro de las librerías de *TensorFlow* o *PyTorch*).

Deep Q-Learning - wikidocs

Deep Q-Learning - train()

La función *train()*, *fit()*, *train_on_batch()* solo ocurre *en la red principal* y en la objetivo se utilizará *predict()*.

- El entrenamiento tiene un paso inicial o *arranque en frio* para generar los primeros escenarios.
- La *red objetivo se congela* (sus parámetros) durante varias iteraciones (2000~10000).
- Despues de las iteraciones predefinidas, *los parámetros de la red principal se copian* a la *red objetivo*, transmitiendo así el aprendizaje de una a otra, haciendo que las estimaciones calculadas por la red objetivo sean más precisas.

Deep Q-Learning - pseudo-código step 1

- 1. Inicialización o *arranque en frio*:
 - i. Inicializar la red neuronal profunda Q (*main_nn*) con pesos aleatorios.
 - ii. Inicializar el estado inicial del entorno (p.e. Cartpole).
 - iii. Realizar un "arranque en frío" para *poblar el búfer de reproducción*:
 - a. Realizar acciones aleatorias en el entorno durante un número predefinido de pasos.
 - b. Almacenar cada transición (estado, acción, recompensa, nuevo estado)
 en el búfer de reproducción.

Deep Q-Learning - pseudo-código step 2

- 2. Para cada episodio (¡Recordar! para cada grabación de diferentes jugadas):
 - i. Reiniciar el estado inicial del entorno.
 - ii. Para cada paso del episodio:
 - a. Elegir una acción utilizando una política de exploración/exploitación (por ejemplo, epsilon-greedy).
 - b. Ejecutar la acción en el entorno y observar la recompensa y el nuevo estado.
 - c. Almacenar la transición (estado, acción, recompensa, nuevo estado) en el búfer de reproducción.
 - d. Muestrear un lote de transiciones del búfer de reproducción.
 - e. Para cada transición en el lote:
 - a. Calcular el valor objetivo:

$$target = reward + discount_factor * max(Q(new_state, action))$$

- reward es la recompensa recibida por tomar la acción.
- discount_factor es el factor de descuento que pondera las recompensas futuras.
- Q(new state, action) es el valor de la acción óptima estimada para el nuevo estado.
- b. Calcular el error cuadrático medio (MSE) entre el valor objetivo y el valor estimado:

$$loss = (target - Q(state, action))^2$$

- c. Realizar un paso de retropropagación (backpropagation) para minimizar el error cuadrático medio.
- f. Actualizar el estado actual al nuevo estado.
- iii. Reducir el valor de epsilon si se está utilizando una política epsilon-greedy.

Deep Q-Learning - esquema del entrenamiento

DQN: Creación de las redes neuronales

```
class DQN(tf.keras.Model):
  """Perceptron multicapa de 2 capas de 32 y una se salida"""
  def __init__(self):
    super(DQN, self).__init__()
    self.dense1 = tf.keras.layers.Dense(32, activation="relu")
    self.dense2 = tf.keras.layers.Dense(32, activation="relu")
    self.dense3 = tf.keras.layers.Dense(num_actions, dtype=tf.float32) # No activation
  def call(self, x):
    """Construcción de las capas"""
   x = self.densel(x)
   x = self.dense2(x)
    return self.dense3(x)
main_nn = DQN() # Red principal
target_nn = DQN() # Red objetivo
optimizer = tf.keras.optimizers.Adam(1e-4) #Optimizados Adam
mse = tf.keras.losses.MeanSquaredError() #Loss function MSE
```

DQN: Creación del buffer para la experiencia

```
class ReplayBuffer(object):
  """Experience replay buffer that samples uniformly."""
  def init (self, size):
    self.buffer = deque(maxlen=size)
  def add(self, state, action, reward, next_state, done):
    self.buffer.append((state, action, reward, next_state, done))
  def __len__(self):
    return len(self.buffer)
  def sample(self, num_samples):
    states, actions, rewards, next_states, dones = [], [], [], []
   idx = np.random.choice(len(self.buffer), num samples)
   for i in idx:
      elem = self.buffer[i]
      state, action, reward, next state, done = elem
      states.append(np.array(state, copy=False))
      actions.append(np.array(action, copy=False))
      rewards.append(reward)
      next_states.append(np.array(next_state, copy=False))
      dones.append(done)
    states = np.array(states)
    actions = np.array(actions)
    rewards = np.array(rewards, dtype=np.float32)
    next_states = np.array(next_states)
    dones = np.array(dones, dtype=np.float32)
    return states, actions, rewards, next_states, dones
```

DQN: función epsilon-greedy() y train_step()

```
def select_epsilon_greedy_action(state, epsilon):
  """Acción aleatoria con probabilidad menor que epsilon, en otro caso la mejor."""
  result = tf.random.uniform((1,))
  if result < epsilon:</pre>
    return env.action_space.sample() # Elegimos una acción aleatória
  else:
    return tf.argmax(main_nn(state)[0]).numpy() # Elección de acción Greedy.
@tf.function # Configuración de cada iteración de entrenamiento
def train_step(states, actions, rewards, next_states, dones):
  # Calculo de los objetivos (segunda red)
  next_qs = target_nn(next_states)
  max_next_qs = tf.reduce_max(next_qs, axis=-1)
  target = rewards + (1. - dones) * discount * max_next_qs
  with tf.GradientTape() as tape:
    qs = main_nn(states)
    action_masks = tf.one_hot(actions, num_actions)
    masked_qs = tf.reduce_sum(action_masks * qs, axis=-1)
    loss = mse(target, masked_qs)
  grads = tape.gradient(loss, main_nn.trainable_variables)
  optimizer.apply_gradients(zip(grads, main_nn.trainable_variables))
  return loss
```

DQN: Hyperparámetros y entrenamiento

```
# Hyperparámetros
num_episodes = 1000
epsilon = 1.0
batch size = 32
discount = 0.99
buffer = ReplayBuffer(100000)
cur_frame = 0
# Comienzo del entrenamiento. Jugamos una vez y entrenamos con un batch.
last 100 ep rewards = []
for episode in range(num_episodes+1):
  state = env.reset() #reseteo del ecosistema
  ep reward, done = 0, False
  while not done:
    state_in = tf.expand_dims(state, axis=0)
    action = select_epsilon_greedy_action(state_in, epsilon)
    next_state, reward, done, info = env.step(action)
    ep reward += reward
    # Guardamos el juego.
    buffer.add(state, action, reward, next_state, done)
    state = next state
    cur frame += 1
    # CoCopiamos los pesos de main nn a target nn.
    if cur frame % 2000 == 0:
      target_nn.set_weights(main_nn.get_weights())
```

DQN: resto del código

```
# Entrenamiento de la red neuronal.
    if len(buffer) >= batch_size:
      states, actions, rewards, next_states, dones = buffer.sample(batch_size)
      loss = train_step(states, actions, rewards, next_states, dones)
  if episode < 950:</pre>
   epsilon -= 0.001
  if len(last_100_ep_rewards) == 100:
    last_100_ep_rewards = last_100_ep_rewards[1:]
  last_100_ep_rewards.append(ep_reward)
  if episode % 50 == 0:
    print(f'Episode {episode}/{num_episodes}. Epsilon: {epsilon:.3f}. '
          f'Reward in last 100 episodes: {np.mean(last_100_ep_rewards):.3f}')
env.close()
```

Double DQN y Dueling DQN

Algoritmos avanzados de DQN

El algoritmo de *Deep Q-Network*, es capaz de solucionar problemas complejos, pero también tiene deficiencias.

Por ello, aparecen algoritmos aportando mejoras como lo son *Double Deep Q-Network* (Double DQN) y *Dueling Deep Q-Network* (Dueling DQN).

Ambos modelos tienen la capacidad para *mejorar la estabilidad y eficacia del aprendizaje* por refuerzo en entornos desafiantes.

Double Deep Q-Network

Double DQN surge para mitigar el sesgo que **comete algoritmo DQN** al sobreestimar las recompensas reales; es decir, los valores-Q que genera, piensa que va a obtener una recompensa mayor de la que tendrá en realidad.

Double DQN propone separar la selección y la evaluación de una acción en dos pasos, usando **dos redes neuronales** para estimar los valores de acción y actualizarlas de manera independiente.

<img width="65%"
src="images/DQN/BELLMANdoubleDQN.png">

Este modelo añade un paso, de la red neuronal principal θ que decide cuál es la mejor acción entre todas las posibles, hace pasar ese resultado sobre la *red objetivo* que evalúa esa acción para conocer su *valor-Q*.

Double Deep Q-Network

<div class="content-wrapc" align="center" width="100%"> Double
Deep Q-Network Deep Q-Network </div> <div align="center"
width="100%">
 </div>

Dueling Deep Q-Network

Este algoritmo divide los *valores-Q en dos partes distintas*, la función de valor (value function) *V(s)* y la función de ventaja (advantage function) *A(s, a)*.

- La función de valor V(s) nos dice cuánta recompensa obtendremos desde el estado s.
- La *función de ventaja A(s, a)* nos dice cuánto mejor es una acción respecto a las demás.
- Combinando el valor *V* y la ventaja *A* de cada acción, obtenemos los valores-Q:
 align="center" width="100%"> <img width="45%"</p>
 src="images/DQN/BELLMANDuelingDQN.png">

Dueling Deep Q-Network

Dueling DQN divide la capa final de la red en dos:

- 1. Estima el valor del estado $s \to V(s)$
- 2. Estima la ventaja de cada acción $a ext{ --> } A(s,a)$

Dueling Deep Q-Network

Es importante mantener el número de Q-valores tanto en la capa final como en la interna de evaluación de acciones.

DDQN: estructura CNN de la red

```
class DuelingDQN(tf.keras.Model):
  """CNN para juegos de Atari."""
 def __init__(self, num_actions):
    super(DuelingDQN, self).__init__()
    self.conv1 = tf.keras.layers.Conv2D(
        filters=32, kernel_size=8, strides=4, activation="relu",
    self.conv2 = tf.keras.layers.Conv2D(
        filters=64, kernel_size=4, strides=2, activation="relu",
    self.conv3 = tf.keras.layers.Conv2D(
        filters=64, kernel_size=3, strides=1, activation="relu",
    self.flatten = tf.keras.layers.Flatten()
    self.dense1 = tf.keras.layers.Dense(units=512, activation="relu")
    self.V = tf.keras.layers.Dense(1)
    self.A = tf.kears.layers.Dense(num_actions)
```

Dueling Deep Q-Network: Código

```
@tf.function
def call(self, states):
  """Forward pass of the neural network with some inputs."""
  x = self.conv1(states)
  x = self.conv2(x)
  x = self.conv3(x)
  x = self.flatten(x)
  x = self.dense1(x)
  V = self.V(x)
  A = self.A(x)
  Q = V + tf.subtract(A, tf.reduce_mean(A, axis=1, keepdims=True))
  return 0
```

Código en tensorflow Código en Pytorch

Dueling Deep Q-Network: Código entrenamiento

```
@tf.function
def train_step(states, actions, rewards, next_states, dones):
  # Selección de la proxima mejor acción con main_nn.
  next_qs_main = main_nn(next_states)
  next_qs_argmax = tf.argmax(next_qs_main, axis=-1)
  next_action_mask = tf.one_hot(next_qs_argmax, num_actions)
  # Evaluamos la mejor acción con target_nn para sacar el Q-value.
  next_qs_target = target_nn(next_states)
  masked_next_qs = tf.reduce_sum(next_action_mask * next_qs_target, axis=-1)
  # Creamos el objetivo usando la recompensa y el descuento del proximo Q-value.
  target = rewards + (1. - dones) * discount * masked_next_qs
  with tf.GradientTape() as tape:
    qs = main_nn(states) # Q-values del estado actual.
    action_mask = tf.one_hot(actions, num_actions)
    masked_qs = tf.reduce_sum(action_mask * qs, axis=-1)
    loss = loss_fn(target, masked_qs)
  grads = tape.gradient(loss, main_nn.trainable_variables)
  optimizer.apply_gradients(zip(grads, main_nn.trainable_variables))
  return loss
```

Lunar Lander

Es parte de la libreria de Gymnasium, y uno de los entornos dentro de Box2D.

```
<div class="noticia"> <img class="izquierda" width="25%"
src="https://www.gymlibrary.dev/_images/lunar_lander.gif"
href="https://www.gymlibrary.dev/environments/box2d/lunar_lander/"> <aside>
```

</aside>

</div>

Acciones:

- 1. no hacer nada
- 2. encender motor izquierdo
- 3. encender motor principal
- 4. encender motor derecho

Actor-Critic

Recopilando

Desde el principio hemos obviado como clasificar los modelos de Aprendizaje por refuerzo, pero hay que situarse en contexto para seguir avanzando:

1. Modelos basados en el conocimiento del entorno

- Aprendizaje basado en el modelo: el agente tiene un conocimiento explicito del entorno y puede predecir como reacciona el entorno para cada acción. (Model-Based Reinforced Learning)
- Aprendizaje basado en el modelo libre: el agente no tiene un conocimiento explicito y debe aprender a partir de la interacción directa con él. (Q-Learning)

2. Modelos basados en el tipo de aprendizaje

- Aprendizaje de valor: el agente aprende a estimar la función de valor, la información que recibe en cada decisión guía el comportamiento del agente. (Deep Q-Learning)
- Aprendizaje de política: el agente aprende una política óptima sin necesidad de estimar la función de valor, la política puede ser determinista o estocástica (Policy Gradiente o Advantage Actor-Critic)

Actor-Critic [5]

Actor-Critic es una combinación de métodos basados en el valor y basados en la política, donde *el Actor controla cómo se comporta nuestro agente* utilizando Policy gradient, y *el Crítico evalúa qué tan buena es la acción tomada* por el Agente basándose en la función de valor.

Actor-Critic

Recursos didácticos

- 1. Mnih, V. et al. (2015). Human-level control through deep reinforcement learning. Nature, 518(7540), 529.
- 2. Wang, Ziyu, et al. "Dueling network architectures for deep reinforcement learning." arXiv preprint arXiv:1511.06581 (2015)
- 3. Van Hasselt, Hado, Arthur Guez, and David Silver. "Deep reinforcement learning with double q-learning." Thirtieth AAAI conference on artificial intelligence. 2016
- 4. Tensorflow tutoriales de agentes para aprendizaje por refuerzo
- 5. Deep Multi-Agent Reinforcement Learning using DNN-Weight Evolution to Optimize Supply Chain Performance