12. PPO 알고리즘 분석

김호철

Contents

1 TRPO(Trust Region Policy Optimization)
1.1 개요
1.2 신뢰 영역(Trust region)
1.3 TRPO 단계별 이론
1.4 Natural Policy Gradient (NPG)
1.5 TRPO 알고리즘
1.6 TRPO의 단점

2 PPO(Proximal Policy Optimization)
2.1 개요
2.2 PPO 클리핑 써로게이트 목적 함수(clipped surrogate objective function)
2.3 실제 구현

3 DRL 알고리즘들의 비교

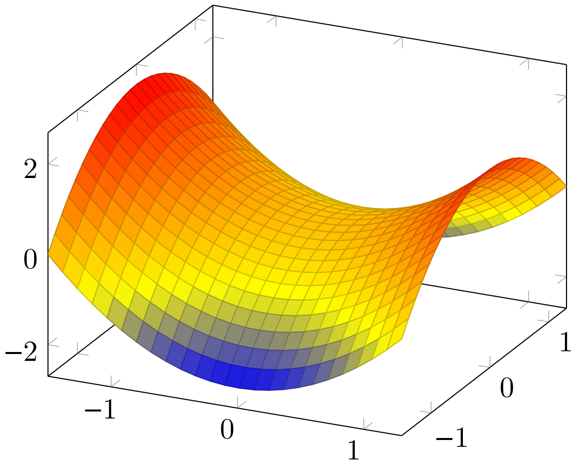
1 TRPO(Trust Region Policy Optimization)

1.1 개요

- Trust Region Policy Optimization, UC Berkeley 2015
- DDPG는 에이전트가 연속(continuous) 액션 공간에서 수행할 수 있도록 하는 획기적인 알고리즘이지만, 성능이 단조롭게(monotonically) 향상되지는 않는다.
- TRPO는 **Minorization-Maximization** 알고리즘과 **Trust region** 이라는 두 가지 개념을 채택하여 DDPG에서 발생하는 문제를 성공적으로 해결하였다.
- TRPO는 정책 공간의 쿨백-라이블러(Kullback-Leibler) 발산(다이버전스) 제약 조건에 따라 신뢰 영역(Trust region)에서 정책 파라메터 θ(기대 수익 극대화)를 업데이트한다.
- 신뢰 영역(Trust region)에 대한 정책 업데이트는 기대 리턴의 단조로운 개선을 보장하므로, TRPO는 스텝 크기(학습율)에 걱정할 필요가 없다.
- 실용적인 알고리즘 TRPO를 생성하기 위해 이론적으로 정당화된 알고리즘에 대한 일련의 근사치를 만들었다.

- TRPO는 고성능을 달성했지만 구현이 매우 복잡하고 고비용 계산이 필요하므로, 딥 CNN 이나 RNN이 필요한 작업에는 실용적이지 않다.

1.2 신뢰 영역(Trust region)



- DDPG를 사용할 때 중요한 문제는 적절한 범위 내에서 스텝 크기를 선택하는 방법이다.
- 스텝 크기가 너무 크면 노이즈에 압도되어 성능이 저하되는 경향이 있고, 너무 작으면 훈련 진행이 매우 느려진다.
- 기울기 상승에서는 가장 가파른 방향을 결정한 다음 앞으로 나아간다. 그러나 스텝 크기가 너무 크면(그래서 너무 앞으로 나아가면) 때때로 재앙이 된다.
- δ에 의해 제어되는 신뢰 영역(Trust region)을 사용하여 영역 내로 이동을 제한한다.
- 이론적으로 이 신뢰 영역은 새로운 최적 정책이 이전 정책보다는 우수함을 보장하므로, 반복을 계속하면 결국 로컬 또는 글로벌 최적 지점에 도달한다.

1.3 TRPO 단계별 이론

[0-단계] 기대 리턴 최대화

- DRL의 목표는 **기대 리턴** $\eta(\pi) = \mathbb{E}_{s_0,a_0,\ldots}\left[\sum_t^\infty \gamma^t r(s_t)\right]$를 극대화하는 것이다.

[1-단계] 이전 정책에서 새 정책을 계산

- π_{old}에 대한 어드밴티지 $A_{\pi_{old}}$를 사용해서, 기존 정책 π_{old}의 $\eta(\pi_{old})$로 새 정책 π의 $\eta(\pi)$를 계산한다.

$$\begin{aligned}\eta(\pi) &= \eta(\pi_{old}) + \mathbb{E}_{\tau\sim\pi}\left[\sum_{t=0}^{\infty} A_{\pi_{old}}(s_t,a_t)\right] \\ &= \eta(\pi_{old}) + \sum_s \rho_\pi(s) \sum_a \pi(a|s) A_{\pi_{old}}(s,a)\end{aligned} \tag{1}$$

– 상태 방문 빈도 (state visitation frequency)

$$\rho_\pi(s) = \sum_{t=0}^{\infty} \gamma^t P(s_t = s|\pi) \tag{2}$$

– 증명을 위한 식 1

$$\begin{aligned}\mathbb{E}_{\tau\sim\pi}\Big[\sum_{t=0}^{\infty}\gamma^t A_{\pi_{old}}(s_t,a_t)\Big] &= \mathbb{E}_{\tau\sim\pi}\Big[\sum_{t=0}^{\infty}\gamma^t\big(r(s_t)+\gamma V_{\pi_{old}}(s_{t+1})-V_{\pi_{old}}(s_t)\big)\Big]\\ &= \eta(\pi)+\mathbb{E}_{\tau\sim\pi}\Big[\sum_{t=0}^{\infty}\gamma^t\big(r(s_{t+1})+\gamma V_{\pi_{old}}(s_{t+1})-\sum_{t=0}^{\infty}\gamma^t V_{\pi_{old}}(s_t)\big)\Big]\\ &= \eta(\pi)-\mathbb{E}_{s_0}\big[V_{\pi_{old}}(s_0)\big]=\eta(\pi)-\eta(\pi_{old})\end{aligned} \tag{3}$$

– 증명을 위한 식 2

$$\begin{aligned}\mathbb{E}_{\tau\sim\pi}\Big[\sum_{t=0}^{\infty}\gamma^t A_{\pi_{old}}(s_t,a_t)\Big] &= \sum_{t=0}^{\infty}\sum_s P(s_t=s|\pi)\sum_a \pi(a|s)\gamma^t A_{\pi_{old}}(s,a)\\ &= \sum_s\sum_{t=0}^{\infty}\gamma^t P(s_t=s|\pi)\sum_a \pi(a|s)A_{\pi_{old}}(s,a)\\ &= \sum_s \rho_\pi(s)\sum_a \pi(a|s)A_{\pi_{old}}(s,a)\end{aligned} \tag{4}$$

– 이전 어드밴티지에 대한 식

$$\begin{aligned}A_{\pi_{old}}(s_t,a_t) &= Q_{\pi_{old}}(s_t,a_t)-V_{\pi_{old}}(s_t)\\ &= r(s_t)+\gamma\mathbb{E}_{s_{t=1}\sim P(s_{t+1}|s_t,a_t)}\big[V_{\pi_{old}}(s_{t+1})\big]-V_{\pi_{old}}(s_t)\end{aligned} \tag{5}$$

- 그래서 어떤 정책 업데이트 $\pi_{old} \to \pi$를 하는 경우에, 모든 상태에서 $\sum_a \pi(a|s)A_{\pi_{old}}(s,a) \geq 0$ 이면, 정책 성능 η는 증가함이 보장된다.
- 그런데, 근사를 할 때 기대 어드밴티지가 음수인 상태 s들이 있는 경우가 있다. (그래서 다음 단계에서 신뢰 영역(Trust Region)을 사용하게 된다.)
- 더구나, π에 대한 $\rho_\pi(s)$의 복잡한 의존성(새로운 정책에 대한 상태 방문 빈도를 구하기 어려움)은 이 방정식을 최적화하기 어렵게 만든다.

[2-단계] 로컬 근사(local approximation)

- 로컬 근사는 ρ_π 를 사용하는 $\eta(\pi)$ 대신 $\rho_{\pi_{old}}$를 사용하는 로컬 근사치 $L_{\pi_{old}}(\pi)$를 사용하는데, 이는 정책 업데이트할 때의 상태 방문 빈도의 변화를 무시하게 된다.

$$L_{\pi_{old}} = \eta(\pi_{old}) + \sum_s \rho_{\pi_{old}}(s)\sum_a \pi(a|s)A_{\pi_{old}}(s,a) \tag{6}$$

- 정책 π_θ가 θ에 대해 미분 가능한 파라메터(신경망)인 경우, 어떤 파라메터 값 θ_0에 대해 $L_{\pi_{old}}(\pi_{\theta_0}) = \eta(\pi_{\theta_0})$와 $\nabla_\theta L_{\pi_{\theta_0}}(\pi_\theta)|_{\theta=\theta_0} = \nabla_\theta \eta(\pi_\theta)|_{\theta=\theta_0}$가 되어, $L_{\pi_{old}}$는 η를 매치(근사)한다.
- 이러한 $L_{\pi_{old}}$를 개선시키는 것은, 충분히 작은 단계로 $\pi_{old} \to \pi$(오래된 정책을 새로운 정책으로 업데이트)시에 η도 개선(근사로 사용 가능하다)시킬 것이라는 것을 의미하지만, 얼마나 큰 단계를 밟아야 하는지에 대한 지침을 제공하지는 않는다.

[3-단계] 보수적 정책 반복 업데이트

- 이러한 이슈를 해결하기 위해 보수적 정책 반복 업데이트(conservative policy iteration update:Kakade 2002)를 사용한다.
- $\pi' = \operatorname{argmax}_\pi L_{\pi_{old}}(\pi)$ 인 경우, 새로운 혼합 정책(mixture policy) $\pi(a|s) = (1-\alpha)\pi_{old}(a|s) + \alpha\pi'(a|s)$을 사용한다.
- 이것은 다음의 하한(lower bound)을 가지게 한다.

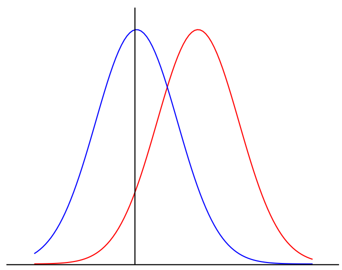
$$\begin{gathered} \eta(\pi) \geq L_{\pi_{old}}(\pi) - \frac{2\epsilon\gamma}{(1-\gamma)^2}\alpha^2 \\ where\ \epsilon = \max_s \left| \mathbb{E}_{a\sim\pi'(a|s)}\left[A_{\pi_{old}}(s,a)\right]\right| \end{gathered} \tag{7}$$

- 그러나 이러한 bound는 위의 혼합 정책에만 적용되며 실제로는 제한적이다.

[4-단계] 일반적 확률 정책

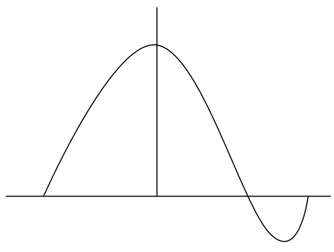
- 이전의 정책 개선 바운드를 확장하여 혼합 정책보다는 실제에서 사용가능한 일반적 확률 정책(general stochastic policies)을 사용한다.
- Total Variation distance와 KL다이버전스는 두 확률 분포간의 차이를 계산하는데 사용한다.
  - Total Variation distance는 두 확률 분포의 차에 대한 면적을 2로 나눈 것

$D_{TV}(P,Q) = \frac{1}{2}\|P-Q\|$



  - KL다이버전스는 정보 엔트로피를 사용

$D_{KL}(P\|Q) = \int_x p(x)\log\frac{p(x)}{qx}dx$



  - 머신러닝에서는 주로 KL다이버전스를 사용한다.

- 이전 bound 식의 하이퍼-파라미터 α 대신에 Total Variation distance를 사용한다.

$$\alpha = \max_s D_{TV}\left(\pi_{old}(\cdot|s) \| \pi(\cdot|s)\right) \tag{8}$$

- ϵ을 다음으로 변경한다.

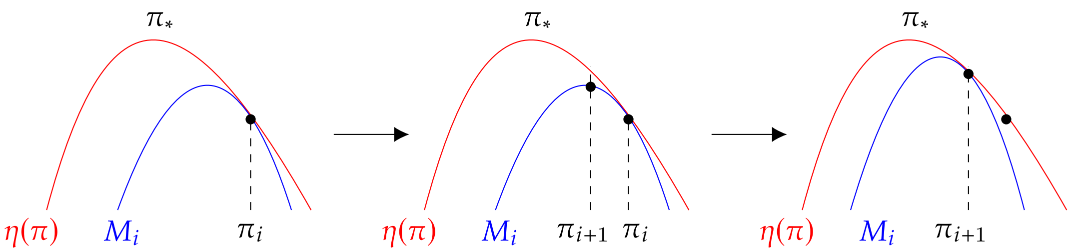
$$\max_{s,a} \left|A_{\pi_{old}}(s,a)\right| \leftarrow \max_s \left|\mathbb{E}_{a\sim\pi'(a|s)}\left[A_{\pi_{old}}(s,a)\right]\right| \tag{9}$$

- $D_{TV}(p\|q)^2 \leq D_{KL}(p\|q)$이기 때문에, Total Variation distance를 KL다이버전스로 대체해도 된다.

$$\begin{aligned} \eta(\pi) &\geq L_{\pi_{old}}(\pi) - CD_{KL}^{\max}(\pi_{old}, \pi) \\ where\ C &= \frac{4\epsilon\gamma}{(1-\gamma)^2} \end{aligned} \tag{10}$$

[5-단계] **최소-최대 알고리즘**

- **최소-최대 알고리즘(Minorization-Maximization algorithm)** (Hunter 2004)
  - 최소-최대(MinMax, MM) 알고리즘은 이터러티브 방법으로 다음을 반복한다.
    1. 대행 목적 함수(surrogate objective function) M_i를 찾는다.
       * 현재 정책 π_i에 목적 함수 η를 근사한다.(M_i는 π_i에서 같은 값을 가지는 η를 최소화한다.)
       * η에 대한 하한(lower bound) 함수
       * η보다 최적화하기 쉬움(2차 방정식같은)
    2. M_i에 대한 최적점 π_{i+1}을 찾아 다음 정책으로 사용한다.(M_i 최대화)
    3. 새 정책에서 하한 M_{i+1}를 재평가하고 다시 반복한다.



  - 프로세스를 계속 진행함에 따라 정책은 계속 개선된다.
  - 정책의 유한성으로 인해 정책은 결국 로컬 또는 전역 최적으로 수렴된다.
- **모델에 MM 알고리즘 적용하기**
  - 대행 목적 함수(surrogate objective function)

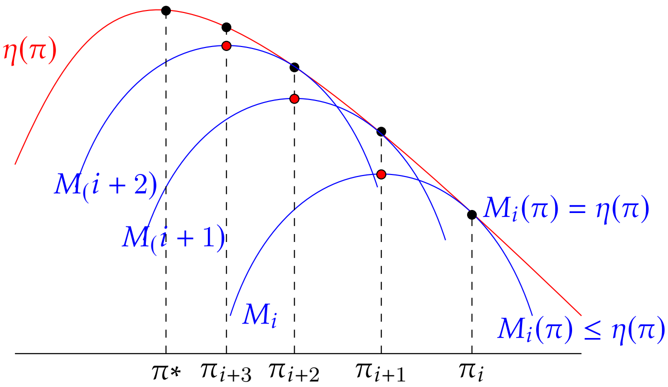
$$M_i(\pi) = L_{\pi_i}(\pi) - CD_{KL}^{max}(\pi_i, \pi) \tag{11}$$

  - 여기에서,

$$\begin{aligned} L_{\pi_i} &= \eta(\pi_i) + \sum_s \rho_{\pi_i}(s) \sum_a \pi(a|s) A_{\pi_i}(s,a) \\ C &= \frac{4\epsilon\gamma}{(1-\gamma)^2} \\ D_{KL}^{max}(\pi_i, \pi) &= \max D_{KL}(\pi_{old}(\cdot|s) \| \pi(\cdot|s)) \end{aligned} \tag{12}$$

– 실제 목적 함수 η의 단조(Monotonic) 증가가 보장된다

$$\eta(\pi_i) = M_i(\pi_i)\ and\ \eta(\pi) \geq M_i(\pi)$$
$$\Rightarrow \eta(\pi_i) = M_i(\pi_i) \leq M_i(\pi_{\pi_{i+1}}) \leq \eta(\pi_{i+1})$$
$$for\ \pi_{i+1} = \text{argmax}_\pi\, M_i\pi$$



– 이제 이러한 이론적 토대위에 실용적인 알고리즘을 도출하면(정책 $\pi_\theta(a|s)$에 대해 정책 네트워크 파라메터 θ를 사용),

– 이전 파라메터를 θ_{old}로, 새로운 파라메터를 θ로, surrogate objective 함수에 적용하면,

$$\eta(\theta) \geq L_{\theta_{old}}(\theta) - CD_{KL}^{\max}(\theta_{old}, \theta) \tag{13}$$

– 그런데 surrogate objective 함수를 최대화하는 다음 함수는, 최적(optimal) 정책이 아니라, 다음(next) 정책이 된다.

$$\max_\theta \left[L_{\theta_{old}}(\theta) - CD_{KL}^{\max}(\theta_{old}, \theta)\right] \tag{14}$$

– 이러한 계산을 최적이 될 때까지 반복해야 함으로 TRPO는 상당히 많은 계산을 필요로 한다.

– 그리고 $C = \frac{4\epsilon\gamma}{(1-\gamma)^2}$에서 γ가 1에 가깝게 커지면 실질적으로 학습 스텝 크기가 너무 작아져서 학습이 느려진다.

[6-단계] 신뢰 구간 제약(Trust region constraint)

- 다음을 KL 페널티라이즈드 목적(KL penalized objective)라 할 수 있고,

$$\max_\theta \left[L_{\theta_{old}}(\theta) - CD_{KL}^{\max}(\theta_{old}, \theta)\right] \tag{15}$$

- 다음은 KL 제약 목적(KL constrained objective)이 된다.

$$\max_\theta L_{\theta_{old}}(\theta)\ subject\ to\ D_{KL}^{\max}(\theta_{old}, \theta) \leq \delta \tag{16}$$

- 이 두 오브젝티브들은 무한히 반복하면 수학적으로 일치한다(Lagrangian duality).
- 실제로, 앞선 이론에 따라 C값이 크게될 가능성이 높아서, 스텝 크기를 매우 작게 해야한다.
- 스텝 크기를 크게할 수 있는 방법중에 하나는 δ로 KL 제약 조건을 바운딩(δ보다 작거나 같게) 하는 것이다.

- 이를 hard constraint라 하는데, 정책 공간에서 나쁜 사례를 제어하기 위해 사용되는 것으로, C보다 δ를 조정하는 것이 더 쉽다.
- 결론적으로 $\max_\theta L_{\theta_{old}}$를 만족하는 θ가, $D_{KL}^{\max}(\theta_{old}, \theta) \leq \delta$를 만족하면 정책 개선은 보장이 된다. 그래서 이 KL 제약 조건을 신뢰 구간(Trust region)이라 한다.
- 이 제약 조건은 모든 상태에 대해서 만족해야하기 때문에, KL 제약 조건의 최대값이 작은 δ보다 작아야한다.
- 그런데 불행히도, 많은 수의 제약 조건이나 상태로 인해 이를 만족하는 것을 찾기가 쉽지 않다.

[7-단계] 휴리스틱 근사(Heuristic approximation)

- 상태들에 max 대신 기대(expected, 샘플링) KL 발산을 하는 휴리스틱 근사를 사용한다.

$$\max_\theta L_{\theta_{old}}(\theta) \; subject \; to \; \mathbb{E}_{s \sim \rho_{\theta_{old}}}[D_{KL}(\pi_{\theta_{old}}(\cdot|s) \| \pi_\theta(\cdot|s))] \leq \delta \tag{17}$$

[8-단계] 몬테카를로 시뮬레이션(Monte Carlo simulation)

- 샘플 기반의 에피소드 추정

$$\begin{aligned} &\max_\theta \sum_s \rho_{\theta_{old}}(s) \sum_a \pi_\theta(a|s) A_{\theta_{old}}(s,a) \\ &subject \; to \; \mathbb{E}_{s \sim \rho_{\theta_{old}}}[D_{KL}(\pi_{\theta_{old}}(\cdot|s) \| \pi_\theta(\cdot|s))] \leq \delta \end{aligned} \tag{18}$$

- 다음을 대체
  - $\sum_s \rho_{\theta_{old}}(s)[\dots]$를 $\frac{1}{1-\gamma}\mathbb{E}_{s \sim \rho_{\theta_{old}}}[\dots]$로 대체
  - 어드밴티지 $A_{\theta_{old}}$를 Q-벨류 $Q_{\theta_{old}}$로 대체
  - 임포턴스 샘플링(Importance sampling)

$$\sum_a \pi_\theta(a|s) A_{\theta_{old}}(s,a) = \mathbb{E}_{a \sim \pi_{\theta_{old}}}\left[\frac{\pi_\theta(a|s)}{\pi_{\theta_{old}}(a|s)} A_{\theta_{old}(s,a)}\right] \tag{19}$$

  - 일반적인 PG에서는 정책이 업데이트될 때마다 새로운 샘플을 수집하고 이전 샘플은 폐기한다. 임포턴스 샘플링을 사용하면 이전 정책의 샘플을 사용하여 정책 기울기를 계산한다.

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_{x \sim p}[f(x)] = \mathbb{E}_{x \sim q}\left[\frac{p(x)}{q(x)} f(x)\right] \approx \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} w(x_n) f(x_n) \\ from \; x_n \sim q(x) \; where \; w(x) = \frac{p(x)}{q(x)} \end{aligned} \tag{20}$$

- 최종 최적화 문제

$$\begin{aligned} &\max_\theta \mathbb{E}_{s \sim \rho_{\theta_{old}}, a \sim \pi_{\theta_{old}}}\left[\frac{\pi_\theta(a|s)}{\pi_{\theta_{old}}(a|s)} Q_{\theta_{old}(s,a)}\right] \\ &subject \; to \; \mathbb{E}_{s \sim \rho_{\theta_{old}}}[D_{KL}(\pi_{\theta_{old}}(\cdot|s) \| (\pi_\theta(\cdot|s))] \leq \delta \end{aligned} \tag{21}$$

- 뒤의 식의 조건을 만족하면서 앞의 식을 최대화(maximize)하는 θ는 최적 정책이 아니라, π_{old}에서 π로 한번 업데이트하는 것이다.
- 남은 것은 기대값을 샘플 평균(몬테카를로 시뮬레이션)으로 대체하고, Q-벨류를 추정하기 위해서 별도의 네트워크를 가지고 있어야 한다.

[9-단계] TRPO를 해결하는 실용적인 알고리즘

- 각 이터레이션(정책을 π_{old}에서 π로 한번 업데이트 하는 것)에서 다음 3단계를 반복적으로 수행하여, TRPO를 실용적으로 해결한다.
  - π_{old}로 상태-액션 쌍을 샘플하여 트라젝토리들을 만들고, 그것을 가지고 Q-네트워크에 있는 Q-벨류를 추정한다.
  - 최종 최적화 함수의 목적 함수와 제약 조건을 샘플들에 대해 평균을 구해서 계산한다.
  - 정책 파라메터 θ를 업데이트하기 위해 이 제한된 최적화(constrained optimization)를 근사적으로 해결한다. 그런데 기존의 Policy Gradient가 아닌 Natural Policy Gradient를 사용한다. 이 NPG의 효율을 높히기 위해 Conjugate gradient를 사용하고, 이 업데이트에 의해 개선되었는지와 제한 조건을 만족하는지를 확인하기 위해 Line search라는 방법을 사용한다.

1.4 Natural Policy Gradient (NPG)

- 8단계의 최종 최적화 문제를 간략히 하면,
  - 목적 함수(Objective function)는,

$$\max_{\theta} L_{\theta_{old}} \theta \tag{22}$$

  - 신뢰 구간(Trust region)은,

$$\overline{D}_{KL(\theta_{old}\|\theta)} = \mathbb{E}_{s\sim\rho_{\theta_{old}}}[D_{KL}(\pi_{\theta_{old}}(\cdot|s)\|(\pi_{\theta}(\cdot|s))] \le \delta \tag{23}$$

- NPG는 테일러 급수를 사용하여 근사하는데, 목적 함수 $L_{\theta_{old}}$는 테일러 급수의 1차(선형)로 $L_{\theta_{old}}$를 근사하며, 제약 조건 $D_{KL}(\theta_{old}\|\theta)$는 2차(quadratic)로 기대 KL 발산 $D_{KL}(\theta_{old}\|\theta)$를 근사한다.
  - 목적 함수(Objective function)는,

$$\max_{\theta} \nabla_{\theta} L_{\theta_{old}}(\theta)|_{\theta=\theta_{old}}(\theta - \theta_{old}) \tag{24}$$

  - 신뢰 구간(Trust region)은,

$$\frac{1}{2}(\theta - \theta_{old})^T H(\theta - \theta_{old}) \le \delta \tag{25}$$

- 헤시안(Hessian)으로 Fisher Information Matrix $H = \nabla_{\theta}^2 \overline{D}_{KL}(\theta_{old}\|\theta) = \frac{\partial^2 \overline{D}_{KL}(\theta_{old}\|\theta)}{\partial\theta_i \partial\theta_j}$를 사용하고, 실제에서는 N개의 샘플을 해서 $H \approx \left(\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} \frac{\partial^2}{\partial\theta_i\partial\theta_j} D_{KL}(\pi_{\theta_{old}}(\cdot|s_n)\|\pi_{\theta}(\cdot|s_n))\Big|_{\theta=\theta_{old}}\right)$를 사용한다.

- 테일러 시리즈에서 $L_{\theta_{old}}$의 2차는 $\overline{D}_{KL}(\theta_{old}\|\theta)$보다 너무 작아서 무시된다.

$$L_{\theta_{old}}(\theta) \approx \cancel{L_{\theta_{old}}(\theta_{old})} + \nabla_\theta L_{\theta_{old}}(\theta)\big|_{\theta=\theta_{old}}(\theta-\theta_{old}) + \dots \qquad \overline{D}_{KL}(\theta_{old}\|\theta_{old}) = 0 \text{ and } \overline{D}_{KL}(\theta_{old}\|\theta) \geq 0$$

$$\overline{D}_{KL}(\theta_{old}\|\theta) \approx \cancel{\overline{D}_{KL}(\theta_{old}\|\theta_{old})} + \cancel{\nabla_\theta \overline{D}_{KL}(\theta_{old}\|\theta)}\big|_{\theta_{\theta_{old}}} + (\theta-\theta_{old}) + \frac{1}{2}(\theta-\theta_{old})^T H(\theta-\theta_{old})$$

- 기울기 상승 대신 사용되는 Natural gradient $H^{-1}\nabla_\theta L_{\theta_{old}}(\theta)\big|_{\theta=\theta_{old}}$는 가장 가파른(steepest) 방향이다.
  - $\nabla_\theta L_{\theta_{old}}(\theta)|\theta = \theta_{old}$는 기존의 폴리시 그레디언트이다.
  - H는 모델 파라메터 θ에 대한 정책의 민감도(curvature:곡률)를 측정한다.
- 정책 업데이트는 분석적으로 얻을 수 있다.
- Nature Policy Gradient

$$\theta = \theta_{old} + \sqrt{\frac{2\delta}{g^T H^{-1} g}} H^{-1} g \; where \; g = \nabla_\theta L_{\theta_{old}}(\theta)\big|_{\theta=\theta_{old}} \tag{26}$$

- $\theta = \theta_{old} + \beta H^{-1} g$가 $\delta = \frac{1}{2}(\beta H^{-1} g)^T H(\beta H^{-1g})$를 만족하도록 최대 스텝 길이 β를 찾는다.
- NPG는 2차 최적화이며 일반 1차 기울기 상승보다 빠르게 수렴하지만, 정책이 DNN처럼 많은 파라메터로 파라메터라이즈된 경우 H^{-1}을 찾는 데 비용이 많이 든다.
- 대신 $x = H^{-1} g$을 직접 계산하는데, 이것은 $Hx = g$에서 x의 해를 구하는 것이 되고, 이는 이 식을 2차식으로 표현한 $\min_\theta f(x) = \frac{1}{2}x^T Hx - gx$를 최소화하는 x를 찾는다는 것과 동일한 문제라서 결국 $f'(x) = Hx - g = 0$으로 하는 문제임
- 그로므로 $\min_\theta f(x) = \frac{1}{2}x^T Hx - gx$를 최소화하는 x를 찾으면 된다.
- Conjugate gradient 방법은 정정 행렬(positive-definite matrix) H를 사용하여 특정 선형 방정식 시스템 $Hx = g$를 일반 기울기 하강법보다 더 적은 이터레이션 횟수로 수치적으로 푼다(구현은 더 복잡).
- Line search는 목적 함수를 개선하는지와 KL 제약 조건을 만족하는지에 대한 보장을 위해 사용한다. 최대값 β에서 시작하여 목적 함수가 개선되고 KL 제약 조건이 충족될 때까지 반복적으로 $\alpha(0 < \alpha < 1)$를 곱하여 β를 감소시킨다.

1.5 TRPO 알고리즘

입력 : 정책 파라메터 θ를 초기화

$k = 0, 1, 2, \ldots$를 반복(한번의 정책 업데이트 단위)

정책 $\pi_k = \pi(\theta_k)$에서 트라젝토리 $\mathcal{D}_k$의 집합을 수집(샘플링)한다.

어떤 어드밴티지 추정 알고리즘을 사용해서 어드밴티지 $\hat{A}_t^{\pi_k}$를 추정한다.

이 샘플들을 사용해서 다음을 구한다.

어드밴티지 추정을 사용해서 정책 기울기 g_k

KL-발산 헤시안-벡터 함수 $f(v) = \hat{H}_k v$

n_{cg} 이터레이션을 하는 Conjugate Gradient를 사용해서, $x_k \approx \hat{H}_k^{-1}\hat{g}_k$를 얻는다.

제안된 스텝을 추정 $\Delta_k \approx \sqrt{\frac{2\delta}{x_k^T \hat{H}_k x_k}} x_k$

최종 업데이트를 얻기위해 지수적 감쇠를 하는 역추적 Line Search를 수행한다.

$$\theta_{k+1} = \theta_k + \alpha^j \Delta_k$$

1.6 TRPO의 단점

- TRPO는 Adam과 같은 1차 옵티마이저를 사용하는 정책 그래디언트에 비해 샘플 효율성이 떨어진다.
- TRPO는 2차 방정식 $\min_x \frac{1}{2}x^T H x - gx$를 근사 $H^{-1}g$로 최소화한다. 그러나 각 파라메터 업데이트에서 여전히 H를 위한 고가의 컴퓨팅이 필요하며 이는 확장성을 손상시킨다.
- TRPO는 심층 CNN 및 RNN이 필요한 작업에는 실용적이지 않다.

2 PPO(Proximal Policy Optimization)

2.1 개요

- TRPO는 높은 성능을 달성했지만, 정책이 너무 크게 변경되는 것을 방지하는, KL 제약 조건으로 인해 구현 및 계산이 복잡하다. 다음은 TRPO의 써로게이트 오브젝티브 펑션이었다.

$$\begin{aligned} \max_\theta L^{TRPO}(\theta) &= \mathbb{E}\left[\frac{\pi_\theta(a|a)}{\pi_{\theta_{old}}(a|s)} A_{\theta_{old}}(s,a)\right] \\ subject\ to\ &\mathbb{E}\left[D_{KL}(\pi_{\theta_{old}}(\cdot|s)\|\pi_\theta(\cdot|s))\right] \le \delta \end{aligned} \tag{27}$$

- π_{old}와 π 사이의 거리에 대한 신뢰 영역에 대한 제약 조건이 없으면, 최대화는 큰 정책 비율 (policy ratio)을 유발하여 큰 파라메터 업데이트로 불안정성을 초래한다.
- PPO는 정책 비율(policy ratio) $r(\theta) = \frac{\pi_\theta(a|a)}{\pi_{\theta_{old}}(a|s)}$을 클리핑하는, 클리핑 써로게이트 목적 함수 (Clipped surrogate objective function)를 도입하였다.

$$\max_\theta L^{CLIP}(\theta) = \mathbb{E}\left[\min(r(\theta)A_{\theta_{old}}(s,a), clip(r(\theta), 1-\epsilon, 1+\epsilon)A_{\theta_{old}}(s,a))\right] \tag{28}$$

- KL 제약을 대체하는 이 클리핑은 정책 업데이트가 너무 클 때 페널티를 제공하고 무거운 계산을 줄인다(1차 확률적 경사 상승만 사용).
- $L^{CLIP}(\theta)$는 정책 성능의 하한을 보장하는 $L^{TRPO}(\theta)$의 하한이다. 이것으로 PPO가 OpenAI의 기본 DRL 알고리즘이 되었다.

2.2 PPO 클리핑 써로게이트 목적 함수(clipped surrogate objective function)

$$L^{CLIP}(\theta) = \mathbb{E}\Big[\min(r(\theta)A_{\theta_{old}}(s,a), clip(r(\theta), 1-\epsilon, 1+\epsilon)A_{\theta_{old}}(s,a))\Big]$$
$$for\ r(\theta) = \frac{\pi_\theta(a|a)}{\pi_{\theta_{old}}(a|s)} \tag{29}$$

- $A_{\theta_{old}}(s,a) > 0$일 때, 액션 a는 상태 s의 모든 행동의 평균보다 좋고, a가 채택될 확률이 높아지도록 $r(\theta)$를 증가시켜 a를 장려해야 한다.
- 그러나 $r(\theta)$가 너무 높으면 큰 변화를 방지하기 위해 $1+\epsilon$만큼 클리핑한다. (논문에서 $\epsilon = 0.2$)
- $A_{\theta_{old}}(s,a) < 0$인 경우, 액션이 권장되지 않으며, $r(\theta)$는 $1-\epsilon$만큼만 감소한다.

2.3 실제 구현

$$L^{CLIP+VF+S}(\theta) = \mathbb{E}\big[L^{CLIP}(\theta) -_{c_1} L^{VF}(\theta) +_{c2} S[\pi_\theta](s)\big] \tag{30}$$

- $L^{VF}(\theta) = (V_{target} - V_\theta(s))^2$는 벨류(value) 추정시 에러 항
- 분산 감소 어드밴티지 함수 추정을 계산하기 위한 대부분의 기술은 학습된 상태-벨류(state-value) 함수 $V_\theta(s)$를 사용한다.
- 정책과 가치 함수 간에 파라메터를 공유하는 신경망을 사용하는 경우, 손실 함수는 정책 써로게이트와 이 에러 항을 결합해야 한다.
- $S[\pi_\theta](s)$는 충분한 탐색(exploration)을 보장하기 위한 엔트로피 보너스이다.

3 DRL 알고리즘들의 비교

알고리즘	모델	상태 공간	액션 공간	정책	오브젝티브
살사	모델-프리 RL	이산적	이산적	온-폴리시	Q-벨류
Q-러닝	모델-프리 RL	이산적	이산적	오프-폴리시	Q-벨류
DQN	모델-프리 DRL	연속적	이산적	오프-폴리시	Q-벨류
A3C	모델-프리 DRL	연속적	연속적	온-폴리시	어드밴티지
DDPG	모델-프리 DRL	연속적	연속적	오프-폴리시	Q-벨류
TRPO	모델-프리 DRL	연속적	연속적	온-폴리시	어드밴티지
PPO	모델-프리 DRL	연속적	연속적	온-폴리시	어드밴티지

- DQN은 RL의 상태 공간을 이산에서 연속 공간으로 크게 개선시켰다.
- A3C 및 DDPG는 에이전트가 정책 기울기(Policy Gradient) 알고리즘으로 지속적인 작업을 수행할 수 있게 하여, 로봇 제어와 같은 RL의 적용을 확장할 수 있는 또 다른 혁신이었다.
- TRPO는 KL 발산 제약 조건이 있는 써로게이트 목적 함수를 도입하여, 무감소 리턴을 보장함으로써 DDPG의 성능을 향상시켰다.
- PPO는 클리핑된 써로게이트 목적 함수를 사용하는데, TRPO를 수정하여 성능을 개선하고, 구현 및 계산의 복잡성을 줄였다.