9. 탐색과 이용(Exploration and Exploitation)

김호철

Contents

---

1 소개

- **탐색과 이용 딜레마**
  - 온라인 의사 결정에는 기본적으로 2개의 선택이 있음
    - 이용(Exploitation): 최신 정보를 바탕으로 최선의 결정
    - 탐색(Exploration): 더 많은 정보를 수집
  - 최선의 장기 전략에는 단기적인 희생이 포함될 수 있다.
  - 전반적으로 최선의 결정을 내리기에 충분한 정보를 수집
- **탐색과 이용의 예**
  - 식당 선택
    - 이용 : 자주가는 식당으로 가기
    - 탐색 : 새로운 식당 시도
  - 온라인 배너 광고
    - 이용 : 가장 클릭수가 많았던 광고 보여주기
    - 탐색 : 새로운 실험적 광고 보여주기
  - 석유 시추
    - 이용 : 잘 알려진 위치에서 시추

    * 탐색 : 새로운 위치에서 시추
  - 게임 플레이
    * 이용 : 가장 좋다고 알고 있는 동작 수행
    * 탐색 : 새로운 실험적 동작 수행

- **원칙(Principles)**
  - 나이브 탐색(Naive Exploration) : ϵ-greedy같은 탐욕 정책에 노이즈를 추가
  - 초기화 낙관(Optimistic Initialisation) : 다르게 입증 될 때까지 현재가 최고라고 가정
  - 불확실 낙관(Optimism in the Face of Uncertainity) : 불확실한 value들을 가진 액션을 선호
  - 확률 매칭(Probability Matching) : 더 좋은 확률에 따라 행동을 선택
  - 정보 상태 서치(Information State Search) : 정보의 가치에 따라 예측적 검색

2 다중 슬롯 머신(Multi-Armed Bandit)

- **다중 슬롯 머신**
  - 다중 슬롯 머신은 $<\mathcal{A},\mathcal{R}>$로 된 튜플이다(매우 단순한 MDP, 상태가 없음)
  - $\mathcal{A}$는 m개의 알고 있는 액션(또는 "arm")들의 집합
  - $\mathcal{R}^a(r) = \mathbb{P}[r|a]$는 보상에 대한 알 수 없는 확률 분포
  - 각 단계 t에서 에이전트는 액션 $a_t \in \mathcal{A}$을 선택한다.
  - 환경은 보상 $r_t \sim \mathcal{R}^{a_t}$를 생성한다.
  - 목표는 누적 보상 $\sum_{T=1}^{t} r_T$을 최대화 하는 것이다.

2.1 Regret(후회)

- **Regret(후회)**
  - 액션-벨류(action-value)는 액션 a에 대한 평균 보상이다.

$$Q(a) = \mathbb{E}[r|a] \tag{1}$$

  - 최적 벨류 V* 는(할 수 있는 액션중에 기대값이 제일 높은 값),

$$V^* = Q(a*) = \max_{a\in\mathcal{A}} Q(a) \tag{2}$$

  - regret은 한 단계의 기회 손실(최적 보상과 새로운 시도의 보상이 더 안좋았을 경우에 보상의 차)

$$l_t = \mathbb{E}[V^* - Q(a_t)] \tag{3}$$

– 전체 regret은 전체 기회 손실의 합이다.

$$L_t = \mathbb{E}\Big[\sum_{T=1}^{t} V^* - Q(a_T)\Big] \tag{4}$$

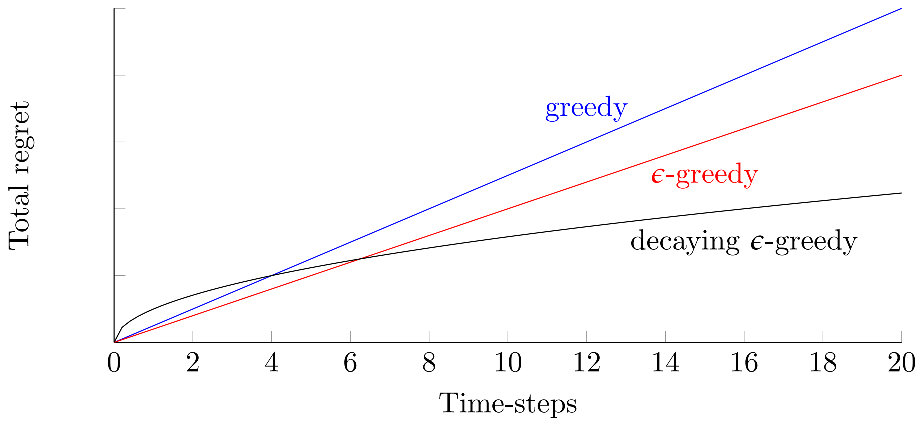
– 최대 누적 보상 = 최소 전체 regret

- **Regret 카운팅**
  – 카운트 $N_t(a)$는 액션 a의 선택이 기대되는 수이다.
  – 간격(gap) Δa는 동작 a와 최적 동작 a^* 사이의 값 차이이다.

$$\Delta a = V^* - Q(a) \tag{5}$$

  – Regret은 간격과 카운트에 대한 함수이다.
  – 좋은 알고리즘은 큰 간격에서는 카운트가 작다.
  – 문제는 간격을 모른다는 것이다.

- **선형이나 준선형 Regret**



  – 알고리즘이 영원히 탐색하면, 선형적인 regret이 될 것이다.
  – 알고리즘이 전혀 탐색하지 않으면, 선형적인 regret이 될 것이다.
  – 준선형(Sublinear)적인 regret이 가능할까?

2.2 Greedy와 ϵ-Greedy 알고리즘들

- **Greedy 알고리즘**
  – $\hat{Q}_t(a) \approx Q(a)$를 추정하는 알고리즘을 고려

- 몬테카를로 평가로 각 액션들의 벨류(value)를 추정

$$\hat{Q}_t(a) = \frac{1}{N_t(a)} \sum_{t=1}^{T} r_t 1\ (a_t = a) \tag{6}$$

- 그리디 알고리즘은 가장 높은 값을 가진 액션을 선택한다.

$$a_t^* = \underset{a \in \mathcal{A}}{\operatorname{argmax}}\, \hat{Q}_t(a) \tag{7}$$

- 그리디 알고리즘은 차선최적(suboptimal) 액션에 영원히 빠질 수 있다.
- $\Rightarrow$ 그리디는 선형적 regret을 가진다.

- **ϵ-Greedy 알고리즘**
  - -greedy 알고리즘은 영원히 탐색한다.
    * $1-\epsilon$ 확률로 $a = \operatorname{argmax}_{a \in A} \hat{Q}(a)$를 선택
    * ϵ 확률로 무작위 액션 선택
  - 상수 ϵ은 최소 regret을 보장

$$l_t \geq \frac{\epsilon}{\mathcal{A}} \sum_{a \in \mathcal{A}} \Delta_a \tag{8}$$

  - $\Rightarrow$ ϵ-greedy는 선형적 regret을 가진다.

- **초기화 낙관(Optimistic Initialisation)**
  - 간단하고 실용적인 아이디어 : $Q(a)$를 높은 값으로 초기화
  - 모든 value들을 최대값(maximum)으로 초기화
  - 점진적 몬테카를로 평가를 통해 액션 벨류 업데이트
  - $N(a) > 0$ 으로 시작

$$\hat{Q}_t(a_t) = \hat{Q}_{t-1} + \frac{1}{N_t(a_t)}(r_t - \hat{Q}_{t-1}) \tag{9}$$

  - 초기 단계에 탐색을 많이 하게 하려는 의도
  - 그러나 여전히 차선(suboptimal) 액션에 고정될 수 있음
  - $\Rightarrow$ greedy + 초기화 낙관은 선형적 regret을 가진다.
  - $\Rightarrow$ ϵ-greedy + 초기화 낙관은 선형적 regret을 가진다.
  - 실무에서는 충분히 좋은 성능을 제공

- **감쇠(Decaying) ϵ_t-Greedy 알고리즘**

- $\epsilon_1, \epsilon_2, \ldots$들에 대한 감쇠 스케쥴 선택
- 다음 스케쥴을 보면,

$$\begin{aligned} c &> 0 \\ d &= \min_{a|\Delta_a > 0} \Delta i \\ \epsilon_t &= \min\left\{1, \frac{c|\mathcal{A}|}{d^2 t}\right\} \end{aligned} \tag{10}$$

- 감쇠 ϵ_t-Greedy는 로그적 regret을 가진다.
- 불행히도 스케쥴에는 간격들에 대한 사전 지식이 필요하다.
- 목표 : 어떤 다중 슬릿 머신에도 적용 가능한 준선형(sublinear-선형에 가까운) regret이 있는 알고리즘 찾기(보상에 대한 지식없이)

2.3 하한(Lower Bound)

- **하한(Lower Bound)**
  - 모든 알고리즘의 성능은 최적 머신과 다른 머신들 사이의 유사도에 의해 결정된다.
  - 확률 분포가 유사한 머신들일수록 문제는 어려워진다.
  - 이것은 간격 Δ_a와 분포의 유사성 $KL(\mathcal{R}^a||\mathcal{R}^{a*})$에 의해 설명된다

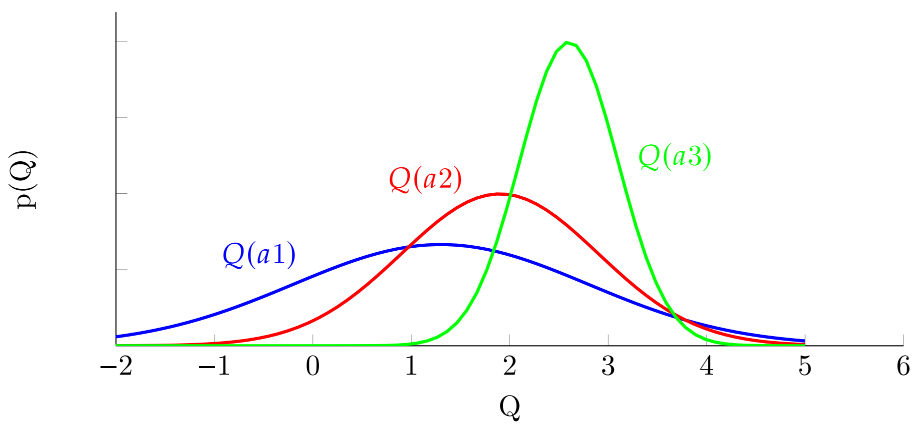
라이와 로빈스 정리

점근적(점점 가까워지는)인 총 regret은 무한 단계를 수행해도 로그보다 좋을 수 없다.

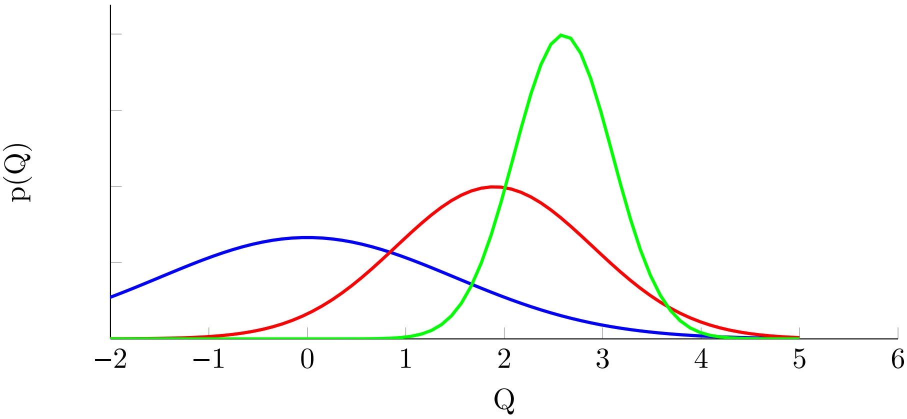
$$\lim_{t\to\infty} L_t \geq \log t \sum_{(a|\Delta_a>0)} \frac{\Delta_a}{KL(\mathcal{R}^a||\mathcal{R}^{a*})}$$

2.4 신뢰 상한선(Upper Confidence Bound)

- **불확실 긍정(Optimism in the Face of Uncertainty)**



- 어떤 액션을 선택해야 할까?
- 액션-벨류에 대해 불확실할수록, 그 액션을 탐색하는 것이 더 중요하다.
- 최적의 액션이 될 수 있기 때문이다.



- 파란 액션을 선택하면,
- 벨류에 대한 불확실성이 감소한다.
- 그리고 다른 액션을 선택할 가능성이 더 높음
- 최선의 액션을 취할 때까지

- **신뢰 상한선(Upper Confidence Bounds)**
  - 각 액션-벨류(action value)에 대하여 신뢰 상한 $\hat{U}_t(a)$을 추정 - 신뢰 구간의 상한(예 95% 상한)
  - $Q(a) \leq \hat{Q}_t(a) + \hat{U}_t(a)$가 높은 확률로,
  - 선택된 횟수(머신을 당긴 횟수) $N(a)$에 종속적이다.
    * 작은 $N_t(a)$(머신을 적게 당길수록) $\Rightarrow$ 큰 $U_t(a)$ (추정된 value는 부정확하다) - 신뢰구간이 넓다
    * 큰 $N_t(a)$ (머신을 많이 당길수록) $\Rightarrow$ 작은 $U_t(a)$ (추정된 value는 정확하다) - 신뢰 구간이 좁다
  - 신뢰 상한선(UCB)을 최대로 하는 액션을 선택

$$a_t = \underset{a \in A}{\operatorname{argmax}}\, \hat{Q}_t(a) + \hat{U}_t(a) \tag{11}$$

- **호프딩 부등식(Hoeffding's Inequality)**
  - 모분포를 몰라도 UCB를 적용하기 위한 부등식

호프딩 부등식 정리

$X_1, ..., X_t$가 0과 1사이의 무작위 변수이고, $\overline{X}_t = \frac{1}{T}\sum_{T=1}^{t} X_t$이 샘플 평균이면,

$$\mathbb{P}\left[\mathbb{E}[X] > \overline{X}_t + u\right] \leq e^{-2tu^2}$$

($\mathbb{E}[X]$:실제 X의 모평균, u:틀린 정도)

– 슬롯 머신의 보상에 호프딩 부등식을 적용하면,
– 액션 a를 선택하는 조건은($Q(a)$:기대값, $\hat{Q}_t(a)$:샘플 평균, $U_t(a)$:UCB),

$$\mathbb{P}\left[Q(a) > \hat{Q}_t^(a) + U_t(a)\right] \leq e^{-2N_t(a)U_t(a)^2} \tag{12}$$

- **UCB 계산하기**
  – 트루 벨류(true value)가 UCB를 넘길 확률 p를 선택
  – $Q(a) \leq \hat{Q}_t(a) + \hat{U}_t(a)$가 높은 확률로,
  – $U_t(a)$를 풀면,

$$\begin{aligned} e^{-2Nt(a)U_t(a)^2} &= p \\ U_t(a) &= \sqrt{\frac{-\log p}{2N_t(a)}} \end{aligned} \tag{13}$$

  – 더 많은 보상을 위해 p를 $p = t^{-4}$처럼 줄일 수 있다.
  – 최적의 액션 선택을 위해 $t \to \infty$로 한다.

$$U_t(a) = \sqrt{\frac{2\log t}{N_t(a)}} \tag{14}$$

- **UCB1**
  – 다음이 UCB1 알고리즘이다.

$$a_t = \underset{a \in A}{\operatorname{argmax}}\, \hat{Q}_t(a) + \sqrt{\frac{2\ log\ t}{N_t(a)}} \tag{15}$$

정리

UCB 알고리즘은 로그 점근적 총 regret을 달성한다.

$$\lim_{t\to\infty} L_t \leq 8\log t \sum_{a|\Delta_a>0} \Delta a$$

2.5 베이지안 밴딧(Bayesian Bandits)

- **베이지안 밴딧**
  - 지금까지 보상 분산 R에 대해서는 가정하지 않았다.
    - 보상의 제한(bound)은 예외
  - 베이지안 밴딧은 보상에 대한 사전 지식($p[R]$)을 이용한다.
  - 실제 보상 $p[R|h_t]$ 의 사후 분포를 계산
    - 여기서 $h_t = a_1, r_1, ..., a_{t-1}, r_{t-1}$은 히스토리
  - 탐색을 가이드하기 위해 이 사후를 이용
    - 신뢰 상한선(베이지안 UCB)
    - 확률 매칭(톰슨 샘플링)
  - 사전 지식이 정확하면 성능이 향상

- **확률 매칭(Probability Matching)**
  - 확률 매칭은 액션 a가 최적의 액션일 확률에 따라 액션 a를 선택

$$\pi(a|h_t) = \mathbb{P}[Q(a) > Q(a'), \forall a' \neq a|h_t] \tag{16}$$

  - 확률 매칭은 불확실성에 대해 낙관적(optimistic)이다.
    - 불확실한 액션은 최대가 될 확률이 더 높다
  - 사후(posterior)로부터 분석적 계산은 어려워질 수 있다.

- **톰슨 샘플링(Thompson Sampling)**
  - 톰슨 샘플링은 확률 매칭을 구현하였다.

$$\begin{aligned} \pi(a|h_t) &= \mathbb{P}[Q(a) > Q(a'), \forall a' \neq a|h_t] \\ &= \mathbb{E}_{R|h_t}\left[1(a = \operatorname*{argmax}_{a \in A} Q(a))\right] \end{aligned} \tag{17}$$

  - 베이즈 법칙을 이용하여 사후 분포 $p[R|h_t]$를 계산한다.
  - 사후에서 보상 분포 R을 샘플링 한다.
  - 액션-가치 함수(action-value function) $Q(a) = \mathbb{E}[R_a]$를 계산한다.
  - 샘플에서 최대값의 액션을 선택 $a_t = \operatorname{argmax}_{a \in A} Q(a)$
  - 톰슨 샘플링은 라이와 로빈스의 하한을 달성했다.

2.6 정보 상태 검색(Information State Search)

- **정보의 가치(Value)**
  - 탐색은 정보를 얻기 위해서는 유용하다.
  - 정보의 가치(value)를 계량화(quantify) 할 수 있을까?
    * 의사 결정을 내리기 전에 정보를 얻기 위해 의사 결정자가 지불 할 준비가 된 보상의 양
    * 정보(즉시 보상)를 얻은 후에 장기 보상
  - 불확실한 상황에서 정보 획득이 더 높다
  - 따라서 불확실한 상황을 더 탐구하는 것이 합리적
  - 정보의 가치(value)를 안다면 탐색(exploration)과 이용(exploitation)을 최적으로 절충 할 수 있다.

- **정보 상태 공간**
  - 밴딧은 1-단계 의사 결정 문제이다. : A와 R만 있다.
  - 또한 순서적 의사 결정 문제로 볼 수도 있다,
  - 각 단계에는 정보 상태 $\tilde{s}$ (틸다) 가 있다
    * $\tilde{s}$는 히스토리의 통계이다. $\tilde{s} = f(h_t)$
    * 지금까지 누적된 모든 정보의 합
  - 각 액션 a는 확률 $\tilde{P}^a_{\tilde{s},\tilde{s}'}$와 함께 새로운 정보 상태 $\tilde{s}$(정보의 추가에 의한)로 전환 된다.
  - 이것은 증강된(augmented) 정보 상태 공간에서 MDP $\tilde{M}$를 정의 한다.

$$\tilde{M} = <\tilde{S}, A, \tilde{P}, R, \gamma> \tag{18}$$

3 결론(Conclusion)

- 탐색/이용에 관한 몇가지 원칙이 발견되었다.
  - ϵ-그리디 같은 나이브(naive)한 방법
  - 초기화 낙관(Optimistic initialisation)
  - 신뢰 상한선(Upper confidence bounds)
  - 확률 매칭(Probability matching)
  - 정보 상태 서치(Information state search)
- 각 원칙은 밴딧 설정을 위해 개발되었지만,
- MDP설정에도 동일한 원칙이 적용된다.