Евгений Борисов

способы организации данных и типы задач ML

supervised learning

- размеченный датасет $\{X, target\}$, (регрессия, классификация)

unsupervised learning

- НЕразмеченный датасет $\{X\}$ (кластеризация)

semi-supervised learning

- частично размеченный датасет {X,target,X'}, (трансдуктивные модели)

reinforcement learning

нет датасета { ??? }



Задача о многоруком бандите

Herbert Robbins Some aspects of the sequential design of experiments. 1952



цель: максимизировать "премию"

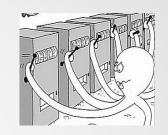






Задача о многоруком бандите

Herbert Robbins Some aspects of the sequential design of experiments. 1952



имеем фиксированного набор **действий**, выбираем и выполняем действие, на каждое действие получаем "**премию**", которая заранее не известна,

цель: максимизировать "премию"

A — множество возможных *действий* p(r|a) — неизвестное распределение *премии* $r \in \mathbb{R}$ для $a \in A$ $\pi_t(a)$ — *стратегия* (policy) агента в момент t, распределение на A

Игра агента со средой:

инициализация стратегии
$$\pi_1(a)$$
; для всех $t=1,\ldots,T,\ldots$ агент выбирает действие $a_t \sim \pi_t(a)$; среда генерирует премию $r_t \sim p(r|a_t)$; агент корректирует стратегию $\pi_{t+1}(a)$;

$$Q_t(a)=rac{\sum_{i=1}^t r_i[a_i=a]}{\sum_{i=1}^t [a_i=a]}$$
 — средняя премия в t раундах $Q^*(a)=\lim_{t o\infty}Q_t(a) o\max_{a\in A}$ — ценность действия a

Средняя премия Q — частотный вектор оценки действий А



Задача о многоруком бандите

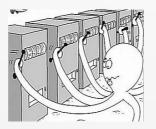
Herbert Robbins Some aspects of the sequential design of experiments. 1952

имеем фиксированного набор **действий**, выбираем и выполняем действие, на каждое действие получаем "**премию**", которая заранее не известна,

цель: максимизировать "премию"

Возможные стратегии для достижения цели

- Жадная стратегия
- Е-Жадная стратегия
- Softmax стратегия
- Полужадная стратегия



- Стратегия сравнения с подкреплением
- Стратегия преследования жадного

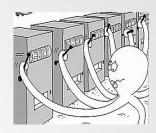


Задача о многоруком бандите

Herbert Robbins Some aspects of the sequential design of experiments. 1952



цель: максимизировать "премию"



Жадная стратегия

Собираем статистику [действие,премия] и выбираем действие, которое до этого выигрывало чаще.

Недостаток: некоторые действия могут вообще не применяться

 $A_t = \operatorname{Arg} \max_{a \in A} Q_t(a)$

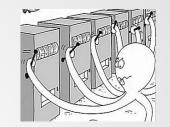
Е-Жадная стратегия

компромисс «изучение—применение»
Применяем жадную стратегию, периодически, с вероятностью є (параметр), выбираем случайное (не максимальное) действие.



Задача о многоруком бандите

Herbert Robbins Some aspects of the sequential design of experiments. 1952



имеем фиксированного набор **действий**, выбираем и выполняем действие, на каждое действие получаем "**премию**", которая заранее не известна,

цель: максимизировать "премию"

Softmax стратегия

считаем вероятности действий и выбираем случайно в соответствии с вероятностями, позволяет выбирать "хорошие" действия но с оценкой ниже максимума

Мягкий вариант компромисса «изучение—применение»: чем больше $Q_t(a)$, тем больше вероятность выбора a:

$$\pi_{t+1}(a) = \frac{\exp(Q_t(a)/\tau)}{\sum\limits_{b \in A} \exp(Q_t(b)/\tau)}$$

где au — параметр *температуры*,

при au o 0 стратегия стремится к жадной,

при $au o \infty$ — к равномерной, т.е. чисто исследовательской

Эвристика: параметр au имеет смысл уменьшать со временем.



Задача о многоруком бандите

Herbert Robbins Some aspects of the sequential design of experiments. 1952



имеем фиксированного набор **действий**, выбираем и выполняем действие, на каждое действие получаем "**премию**", которая заранее не известна,

цель: максимизировать "премию"

Полужадная стратегия (UCB)

Определим оценку ценности действия, чем менее исследована стратегия (редко выбирали действие) тем выше должна быть его оценка, и выбираем действие с максимальной верхней оценкой ценности,

$$A_t = \operatorname{Arg} \max_{a \in A} \left(Q_t(a) + \varepsilon \sqrt{\frac{2 \ln t}{k_t(a)}} \right)$$

где
$$k_t(a) = \sum_{i=1}^t [a_i = a], \quad \varepsilon$$
 — параметр exr/ext-компромисса.

Интерпретация:

чем меньше $k_t(a)$, тем менее исследована стратегия, тем выше должна быть вероятность выбрать a;

чем больше ε , тем стратегия более исследовательская.

Эвристика: параметр ε уменьшать со временем.

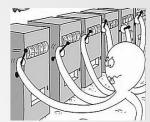


Задача о многоруком бандите

Herbert Robbins Some aspects of the sequential design of experiments. 1952



цель: максимизировать "премию"



$$Q_t(a)=rac{\sum_{i=1}^t r_i[a_i=a]}{\sum_{i=1}^t [a_i=a]}$$
 — средняя премия в t раундах $Q^*(a)=\lim_{t o\infty}Q_t(a) o\max_{a\in A}$ — ценность действия a

заменим среднюю премию Q на сглаженную оценку

Рекуррентная формула Moving Average для усреднения Q_t :

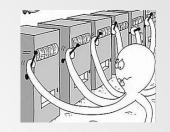
$$Q_t(a) = \alpha r_t + (1 - \alpha)Q_{t-1}(a) = \mathsf{MA}_{\alpha}(r_t)$$

При lpha= const это экспоненциальное скользящее среднее (EMA) При $lpha=rac{1}{k_t(a)}$ это среднее арифметическое



Задача о многоруком бандите

Herbert Robbins Some aspects of the sequential design of experiments. 1952



имеем фиксированного набор **действий**, выбираем и выполняем действие, на каждое действие получаем "**премию**", которая заранее не известна,

цель: максимизировать "премию"

Стратегия преследования жадного

Применяем жадную стратегию к сглаженной оценке средней премии Q

$$\pi_{t+1}(a) = \mathsf{EMA}_{\alpha}\left(rac{[a \in A_t]}{|A_t|}
ight), \quad a \in A$$

Сравнение с подкреплением (reinforcement comparison):

 $ar{r}_t = \mathsf{EMA}_lpha(r_t)$ — средняя премия по всем действиям, $p_t(a_t) = \mathsf{EMA}_eta(r_t - ar{r}_t)$ — преимущество (advantage) действия,

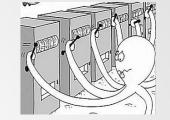
$$\pi_{t+1}(a) = \frac{\exp\left(\frac{1}{\tau}p_t(a)\right)}{\sum_{a'}\exp\left(\frac{1}{\tau}p_t(a')\right)},$$

при au o 0 стратегия стремится к жадной, при $au o \infty$ — к равномерной, т.е. чисто исследовательской.



Задача о многоруком бандите

Herbert Robbins Some aspects of the sequential design of experiments. 1952



имеем фиксированного набор **действий**, выбираем и выполняем действие, на каждое действие получаем "**премию**", которая заранее не известна,

цель: максимизировать "премию"

Стратегия сравнения с подкреплением

используем не сами значения премий, а их разности со средней премией.

$$ar{r}_{t+1} = ar{r}_t + lpha(r_t - ar{r}_t) - c$$
редняя премия $p_{t+1}(a_t) = p_t(a_t) + eta(r_t - ar{r}_t - p_t(a_t)) -$ предпочтения действий $\pi_{t+1}(a) = rac{\exp\left(p_{t+1}(a)/ au
ight)}{\sum\limits_{b \in A} \exp\left(p_{t+1}(b)/ au
ight)} -$ softmax-стратегия агента

Начальное приближение r_0 : оптимистично завышенное стимулирует изучающие действия в начале

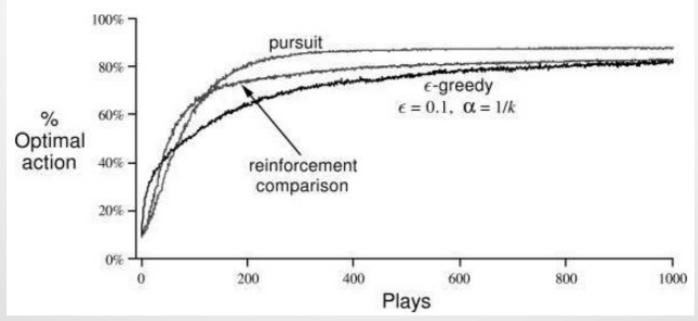
Задача о многоруком бандите Модельные данные для тестов и оценки

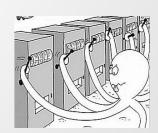
 $\ll 10$ -рукая испытательная среда»: Генерируется 2000 задач, в каждой задаче |A|=10, $p_a(r)=\mathcal{N}(r;Q^*(a),1)$, $Q^*(a)\sim\mathcal{N}(0,1)$. Строятся графики зависимости

- среднего вознаграждения (average reward),
- доли оптимальных действий (% optimal action), от числа действий (сыгранных игр), усреднённые по 2000 задачам.

Сравнение с подкреплением лучше є-жадных стратегий Стратегия преследования ещё лучше







Модель среды

введём понятие состояния среды, которое агент может наблюдать

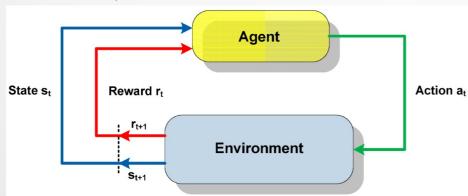
после совершения действия агентом кроме выдачи премии **среда** ещё меняет своё **состояние**

пример: дом с несколькими лифтами,

состояние среды это положение лифтов,

Действие - выбор лифта,

Цель: минимизация времени ожидания







- учебного набора в явном виде нет
- собираем историю действий и последствий
- наблюдаем состояние среды
- предсказываем реакцию среды на действие
- выбираем оптимальное действие

Формальное описание задачи

```
A — конечное множество возможных действий (action) S — конечное множество состояний среды (state)
```

Игра агента со средой:

```
инициализация стратегии \pi_1(a|s) и состояния среды s_1; для всех t=1,\ldots,T,\ldots агент выбирает действие a_t \sim \pi_t(a|s_t); среда генерирует премию r_t \sim p(r|a_t,s_t) и новое состояние s_{t+1} \sim p(s|a_t,s_t); агент корректирует стратегию \pi_{t+1}(a|s);
```

Марковский процесс принятия решений (МППР, МDР): $P\big(s_{t+1},r_t\,|\,s_t,a_t,r_{t-1},s_{t-1},a_{t-1},r_{t-2},\ldots,s_1,a_1\big) = \\ = P\big(s_{t+1},r_t\,|\,s_t,a_t\big)$

Формальное описание задачи

```
    А — конечное множество возможных действий (action)
    S — конечное множество состояний среды (state)
```

Игра агента со средой:

```
инициализация стратегии \pi_1(a|s) и состояния среды s_1; для всех t=1,\ldots,T,\ldots агент выбирает действие a_t \sim \pi_t(a|s_t); среда генерирует премию r_t \sim p(r|a_t,s_t) и новое состояние s_{t+1} \sim p(s|a_t,s_t); агент корректирует стратегию \pi_{t+1}(a|s);
```

Марковский процесс принятия решений (МППР, MDP):

$$P(s_{t+1}, r_t | s_t, a_t, r_{t-1}, s_{t-1}, a_{t-1}, r_{t-2}, \dots, s_1, a_1) = P(s_{t+1}, r_t | s_t, a_t)$$

- \bullet выборка (s_t, a_t, r_t) не является независимой
- распределение $p(s_t, a_t, r_t)$ может меняться во времени и зависеть от стратегии агента π
- премии могут
- оценивать действия с большой задержкой
- быть разреженными (почти всё время $r_t = 0$)
- быть зашумлёнными (не ясно, за что именно премия)

Формальное описание задачи

```
    А — конечное множество возможных действий (action)
    S — конечное множество состояний среды (state)
```

Игра агента со средой:

```
инициализация стратегии \pi_1(a|s) и состояния среды s_1; для всех t=1,\ldots,T,\ldots агент выбирает действие a_t \sim \pi_t(a|s_t); среда генерирует премию r_t \sim p(r|a_t,s_t) и новое состояние s_{t+1} \sim p(s|a_t,s_t); агент корректирует стратегию \pi_{t+1}(a|s);
```

Какие параметрические модели можно обучать:

- \bullet стратегию $\pi_{t+1}(a|s;\theta)$
- \bullet функцию ценности состояния $V(s;\theta)$
- ullet функцию ценности действия в состоянии Q(s,a; heta)
- \bullet модель среды $(r_t, s_{t+1}) = \mu(s_t, a_t; \theta)$

Марковский процесс принятия решений (МППР, MDP):

$$P(s_{t+1}, r_t | s_t, a_t, r_{t-1}, s_{t-1}, a_{t-1}, r_{t-2}, \dots, s_1, a_1) = P(s_{t+1}, r_t | s_t, a_t)$$

- выборка (s_t, a_t, r_t) не является независимой
- распределение $p(s_t, a_t, r_t)$ может меняться во времени и зависеть от стратегии агента π
- премии могут
- оценивать действия с большой задержкой
- быть разреженными (почти всё время $r_t = 0$)
- быть зашумлёнными (не ясно, за что именно премия)

Формальное описание задачи

А — конечное множество возможных действий (action)
 S — конечное множество состояний среды (state)

Игра агента со средой:

```
инициализация стратегии \pi_1(a|s) и состояния среды s_1; для всех t=1,\ldots,T,\ldots агент выбирает действие a_t\sim\pi_t(a|s_t); среда генерирует премию r_t\sim p(r\,|\,a_t,s_t) и новое состояние s_{t+1}\sim p(s\,|\,a_t,s_t); агент корректирует стратегию \pi_{t+1}(a|s);
```

Функции ценности состояния $V^{\pi}(s)$ и ценности действия

в состоянии $Q^{\pi}(s,a)$ при условии, что агент следует стратегии π :

 $1+\gamma+\gamma^2+\cdots=rac{1}{1-\gamma}$ — горизонт дальновидности агента.

 $R_t = r_t + \gamma r_{t+1} + \dots + \gamma^k r_{t+k} + \dots$

Дисконтированная выгода (discounted return):

где $\gamma \in [0,1]$ — коэффициент дисконтирования,

$$V^{\pi}(s) = \mathsf{E}_{\pi}(R_{t} \mid s_{t} = s) \qquad = \mathsf{E}_{\pi}\left(\sum_{k=0}^{\infty} \gamma^{k} r_{t+k} \mid s_{t} = s\right)$$

$$Q^{\pi}(s, a) = \mathsf{E}_{\pi}(R_{t} \mid s_{t} = s, \ a_{t} = a) = \mathsf{E}_{\pi}\left(\sum_{k=0}^{\infty} \gamma^{k} r_{t+k} \mid s_{t} = s, \ a_{t} = a\right)$$

Рекуррентная формула для функции ценности $Q^{\pi}(s,a)$:

$$Q^{\pi}(s, a) = E_{\pi}(\sum_{k=0}^{\infty} \gamma^{k} r_{t+k} \mid s_{t} = s, a_{t} = a)$$

$$= E_{\pi}(r_{t} + \gamma \sum_{k=0}^{\infty} \gamma^{k} r_{t+k+1} \mid s_{t} = s, a_{t} = a)$$

$$= E_{\pi}(r_{t} + \gamma Q^{\pi}(s_{t+1}, a_{t+1}) \mid s_{t} = s, a_{t} = a)$$

Уравнение Беллмана для оптимальной функции ценности Q^* :

$$Q^*(s, a) = \mathsf{E}_{\pi} \big(r_t + \gamma \max_{a' \in A} Q^*(s_{t+1}, a') \mid s_t = s, \ a_t = a \big)$$

Утв. Жадная стратегия π относительно $Q^*(s,a)$ «выбирать то действие, на котором достигается максимум в уравнениях Беллмана», является оптимальной:

$$A_t = \operatorname{Arg} \max_{a \in A} Q^*(s_t, a)$$

Mетод SARSA (state-action-reward-state-action)

Апроксимируем оценнку действия в состоянии Q(s,a) экспоненциальным скользящим средним

$$Q(s_t, a_t) = EMA_{\alpha}(r_t + \gamma Q(s_{t+1}, a'))$$

```
инициализация стратегии \pi_1(a \mid s) и состояния среды s_1; для всех t=1,\ldots T,\ldots агент выбирает действие a_t \sim \pi_t(a \mid s_t), например, a_t=\arg\max_a Q(s_t,a) — жадная стратегия; среда генерирует r_t \sim p(r \mid a_t,s_t) и s_{t+1} \sim p(s \mid a_t,s_t); агент разыгрывает ещё один шаг: a' \sim \pi_t(a \mid s_{t+1}); Q(s_t,a_t):=Q(s_t,a_t)+\alpha(r_t+\gamma Q(s_{t+1},a')-Q(s_t,a_t));
```

Метод Q-learning

Апроксимируем оптимальную оценнку действия в состоянии Q*(s,a) экспоненциальным скользящим средним

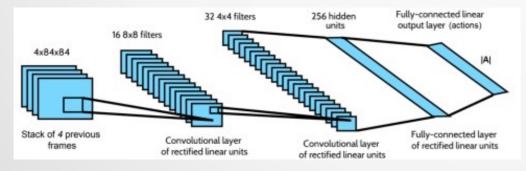
$$Q(s_t, a_t) = \mathsf{EMA}_{\alpha} (r_t + \gamma \max_{a'} Q(s_{t+1}, a'))$$

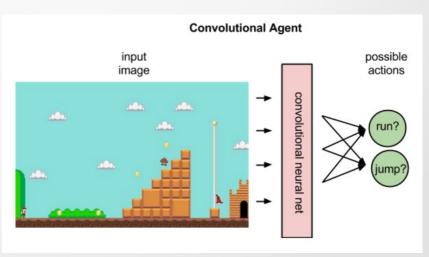
```
инициализация стратегии \pi_1(a \mid s) и состояния среды s_1; для всех t=1,\ldots,T,\ldots агент выбирает действие a_t \sim \pi_t(a \mid s_t); среда генерирует r_t \sim p(r \mid a_t,s_t) и s_{t+1} \sim p(s \mid a_t,s_t); Q(s_t,a_t):=Q(s_t,a_t)+\alpha(r_t+\gamma\max_{a'}Q(s_{t+1},a')-Q(s_t,a_t));
```

Метод DQN (Deep Q-learning Network)



Среда — эмулятор игр Atari Состояние - 4 последовательных кадра Действия - зависят от игры Премия — текущий score игры Функция ценности действия в состоянии — свёрточная сеть





Метод DQN (Deep Q-learning Network)

Сохранение траекторий $(s_t, a_t, r_t)_{t=1}^T$ в памяти (reply memory) для многократного воспроизведения опыта (experience replay)

Аппроксимация оптимальной функции ценности $Q(s_t, a_t)$ при фиксированных текущих параметрах сети w_t :

$$y_t = egin{cases} r_t, & ext{если состояние } s_{t+1} & ext{терминальное} \ r_t + \gamma \max_a Q(s_{t+1}, a; extbf{w}_t), & ext{иначе} \end{cases}$$

Функция потерь для обучения нейросевой модели Q(s,a;w):

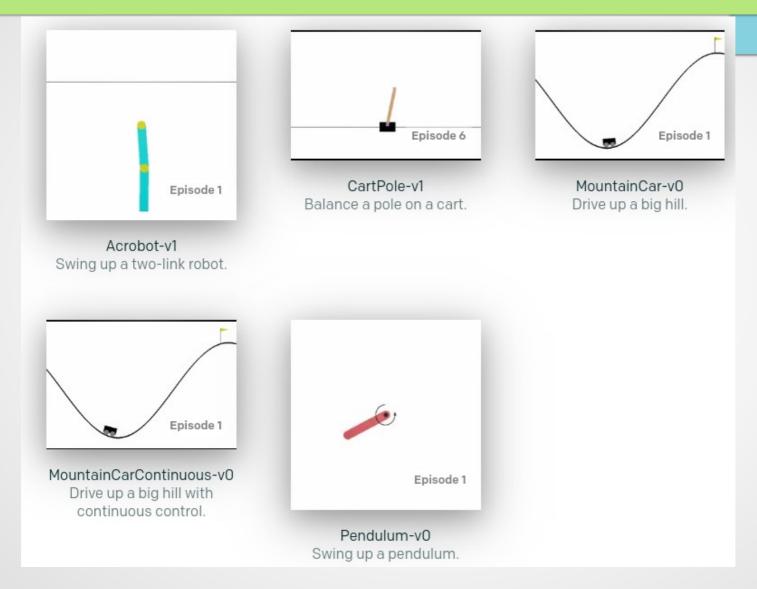
$$\mathscr{L}_t(w) = (Q(s_t, a_t; w) - y_t)^2$$

Стохастический градиент SGD (по мини-батчам длины 32):

$$w_{t+1} = w_t - \eta (Q(s_t, a_t; w_t) - y_t) \nabla_w Q(s_t, a_t; w_t)$$

Метод DQN (Deep Q-learning Network)

```
инициализация reply-памяти и параметров сети w;
для всех эпизодов m=1,\ldots,M
    инициализация состояния среды s_1;
    для всех t = 1, ..., T_m (длина m-го эпизода)
       a_t = egin{cases} 	ext{cлучайное действие}, & 	ext{c вероятностью } arepsilon; \ 	ext{arg max } Q(s_t, a, w), & 	ext{c вероятностью } 1 - arepsilon; \end{cases}
        среда генерирует r_t \sim p(r \mid a_t, s_t) и s_{t+1} \sim p(s \mid a_t, s_t);
        запомнить (s_t, a_t, r_t) в reply-памяти;
        выбрать случайный фрагмент траектории из памяти;
        для всех j = 1, ..., J (длина мини-батчей)
             оценить y_i;
            сделать градиентный шаг, обновить w;
```



обучение с подкреплением: литература

git clone https://github.com/mechanoid5/ml_lectorium.git

K.B. Воронцов Обучение с подкреплением. https://www.youtube.com/watch?v=ZkZQwKizgLM

Радослав Нейчев Intro to Reinforcement Learning. https://www.youtube.com/watch?v=BwLIPEUkjxQ

Саттон Р.С., Барто Э. Г. Обучение с подкреплением. - Москва:Бином, 2014г.

Николенко С., Кадурин А., Архангельская Е. Глубокое обучение. Погружение в мир нейронных сетей. - "Питер", 2018 г.