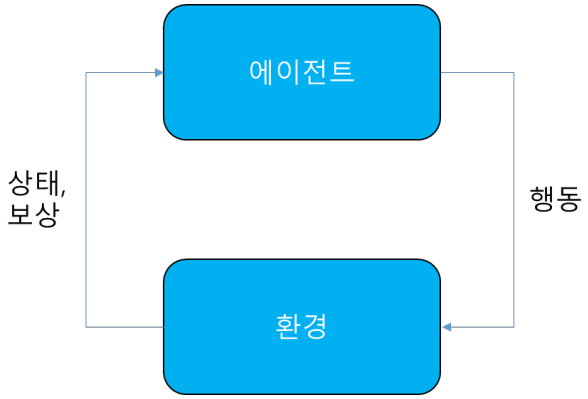
강화학습과 PPO 소개

Sang Yup Lee

Reinforcement Learning

Reinforcement Learning

- 강화학습 소개
  - 강화학습은 일반적으로 순차적인 의사결정 문제에 적용
  - 강화학습 문제는 에이전트(agent)와 환경(environment)으로 구성된 시스템으로 표현
    - 에이전트는 환경과의 상호작용을 통해서 주어진 문제 해결
    - 환경은 시스템의 상태를 나타내는 정보를 생성하고 에이전트에 제공 ⇒ 이러한 정보를 상태(state)라고 표현



Reinforcement Learning

- 강화학습에서 사용되는 주요 표현
  - 타임 스텝 t에서의 상태, 행동, 보상을 s_t, a_t, r_t로 표현
  - $(s_t, a_t, r_t) \Rightarrow$ 하나의 경험(experience)이라고 함
  - 이러한 경험은 여러 번 반복되는데 일반적으로 정해진 타입 스텝 (예, time step=T) 까지 반복
  - 타입 스텝 0에서부터 T까지를 하나의 에피소드(episode)라고 함
  - 궤적(trajectory, τ/tau/라고 표현)
    - 하나의 에피소드에서 발생하는 연속된 행동들
    - $\tau = (s_0, a_0, r_0), (s_1, a_1, r_1), \ldots, (s_T, a_T, r_T)$
  - 행동에 대한 보상은 보상 함수(reward function)를 이용해서 결정
    - 보상은 일반적으로 하나의 숫자

Reinforcement Learning

- 강화학습에서 사용되는 주요 표현 (cont'd)
  - 정책(policy): 주어진 상태에 따라 특정 행동을 선택할 때 사용되는 함수
    - 즉, 정책을 통해서 어떠한 행동을 수행할지를 결정
    - 좋은 정책을 학습하기 위해서는 많은 수의 에피소드 필요
  - 상태 전환 함수
    - 환경이 에이전트의 행동에 대해서 새로운 상태 정보를 제공할 때 사용되는 함수
    - $P(s_{t+1}|s_t, a_t) \Rightarrow$ 상태 전환 함수는 여러 가지 선택 가능한 상태들에 대한 확률 분포를 반환
      - 그 이전 타임 스텝에서의 상태와 행동에도 영향을 받을 수 있지만, 강화학습에서는 마르코브 특성(Markov property)을 사용

Reinforcement Learning

- 강화학습에서 사용되는 주요 표현 (cont'd)
  - 각 타임 스텝에서 에이전트는 **목적을 최대화하는 행동을 선택**
  - 그렇다면 목적은 어떻게 표현되는가? 이를 위해 먼저 이득(return)을 정의하는 것이 필요
  - 이득
    - $\mathrm{R}(\tau) = r_0 + \gamma r_1 + \gamma^2 r_2 + \cdots + \gamma^T r_T = \sum_{t=0}^{T} \gamma^t r_t$
      - τ는 궤적을 의미, r_t는 타입 스텝 t에서의 보상을, γ는 할인율 (discount factor)을 나타내며 γ은 0과 1사이의 값을 취함
      - 할인율은 먼 미래의 보상일수록 현재 가치를 낮추기 위해서 사용
  - 목적
    - $\mathrm{J}(\tau) = E_\tau[\mathrm{R}(\tau)] = E_\tau[\sum_{t=0}^{T} \gamma^t r_t]$
      - 모든 궤적으로부터 발생하는 이득(returns)에 대한 기댓값
      - 에이전트는 이러한 목적을 최대화하는 행동 선택

Reinforcement Learning

- 강화학습에서 에이전트가 학습할 수 있는 것 세 가지: 정책, 가치함수, 환경 모형
  - 정책 (policy)
    - 정책은 주어진 상태에서 목적을 최대화하는 행동을 선택하는데 사용되는 함수, 주로 π로 표현
    - 정책은 여러 선택 가능한 행동들에 대한 확률 분포(즉,$\pi(a|s)$)를 반환

Reinforcement Learning

- 가치 함수 (value function)
  - 목적을 최대화하는데 있어서 특정 행동이나 상태가 얼마나 좋은 것인지를 평가하는 목적으로 사용되는 함수
  - $V^{\pi}(s)$로 표현되는 가치 함수와, $Q^{\pi}(s,a)$로 표현되는 가치 함수 존재

$$V^{\pi}(s) = E_{s_0=s,\tau\sim\pi}\left[\sum_{t=0}^{T}\gamma^t r_t\right], \qquad Q^{\pi}(s,a) = E_{s_0=s,a_0=a,\tau\sim\pi}\left[\sum_{t=0}^{T}\gamma^t r_t\right]$$

  - $V^{\pi}(s)$는 목적과 관련해서 현재의 상태 s가 얼마나 좋은지를 파악하는데 사용되는 반면, $Q^{\pi}(s,a)$는 목적과 관련해서 하나의 상태 s와 행동 a 쌍이 얼마나 좋은지를 평가하는 목적으로 사용
  - 일반적으로 $V^{\pi}(s)$ 보다 $Q^{\pi}(s,a)$가 더 많이 사용

Reinforcement Learning

- 환경 모형 (environment model)
  - 환경 모형은 상태 전환 함수를 의미, $\mathrm{P}(s_{t+1}|s_t, a_t)$로 표현
  - 상태 전환 함수는 환경에 대한 정보를 제공
    - 만약 에이전트가 이 함수를 알 수 있다면, 에이전트는 지금의 상태 s에 대해 행동 a를 수행하면 (해당 행동을 수행하지 않고도) 어떠한 상태로 전환될 수 있는지를 미리 예측 가능 ⇒ 즉, 행동을 직접적으로 수행하지 않고서도 특정한 여러 행동들을 수행했을 때의 결과를 미리 예측할 수 있다는 것을 의미
    - 따라서 이러한 함수를 이용해서 목적을 최대로 하는 행동들을 미리 계획할 수 있다.

Reinforcement Learning

- 강화학습 알고리즘의 종류
  - 일반적으로 강화학습 알고리즘은 무엇을 학습하느냐에 따라 세 가지로 구분
    - 정책 기반 알고리즘, 가치 기반 알고리즘, 모형 기반 알고리즘
- 정책 기반 알고리즘
  - 목적을 최대로 하는 정책을 학습 ⇒ 그러한 정책에 의해서 에이전트의 행동이 결정
  - 대표적인 알고리즘: REINFORCE
    - PPO는 REINFORCE 알고리즘을 확장한 것으로 간주 가능 (정확하게는 PPO는 혼합 모형으로 분류)

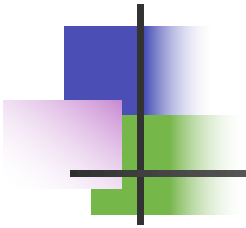
Reinforcement Learning

- 정책 기반 알고리즘 (cont'd)
  - 딥러닝 기반의 정책 알고리즘들은 신경망 모형을 이용해서 정책을 표현, 즉, 신경망 모형이 정책을 의미
    - 신경망 모형은 파라미터(θ)를 갖는데, 이러한 신경망 모형을 **파라미터 θ를 갖는 정책 신경망**이라고 하며, π_θ라고 표현
    - 학습을 통해서 목적을 최대화하는 방향으로 파라미터를 업데이트하여 더 좋은 정책을 도출
    - 신경망 모형이 정책을 나타내는 경우, 파라미터가 구체적으로 어떠한 값을 갖느냐에 따라 정책이 달라짐
      - 즉, $\theta_1 \neq \theta_2 \implies \pi_{\theta_1}(s) \neq \pi_{\theta_2}(s)$
    - $\max_\theta \mathrm{J}(\pi_\theta)$ 즉, $\max_\theta E_{\tau\sim\pi_\theta}[\mathrm{R}(\tau)]$
      - 경사상승법: $\theta \leftarrow \theta + \alpha\nabla_\theta \mathrm{J}(\pi_\theta)$

Reinforcement Learning

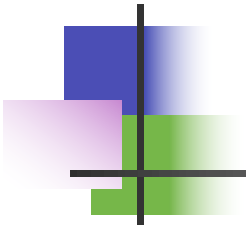
- 가치 기반 알고리즘
  - 가치 기반 알고리즘은 가치 함수를 학습
  - 학습된 가치 함수를 이용해서 특정 상태와 행동을 평가하고 더 좋은 결과를 낼 수 있는 정책을 반환
  - 대표적인 알고리즘: SARSA, Deep Q-Networks (DQN) 등
- 모형 기반 알고리즘
  - 모형 기반 알고리즘은 환경 모형, 즉 상태 전환 함수를 학습
  - 상태 전환 함수를 알게 되면, 행동을 직접적으로 수행하지 않고서도 특정한 여러 행동들을 수행했을 때 혹은 여러 궤적들에 대한 결과를 미리 예측할 수 있다는 것을 의미
  - 이러한 예측을 기반으로해서 목적을 최대로 하는 행동들을 미리 계획 가능
  - 일반적으로 컴퓨터 게임 등에서 자주 사용
  - 최근까지 몬테 카를로 트리 탐색 (Monte Carlo Tree Search, MCTS) 방법이 주로 사용
- 하이브리드 알고리즘
  - 많은 경우, 하이브리드 알고리즘은 정책과 가치 함수를 동시에 학습 ⇒ 행위자-평가자(Actor-Critic) 알고리즘

PPO 소개



PPO

- PPO (Proximal Policy Optimization)
  - 초기의 정책 기반 알고리즘들(예, REINFORCE)이 갖는 주요한 문제: 성능 붕괴 (performance collapse)
    - 에이전트가 갑자기 결과가 좋지 못한 행동을 하는 것을 의미
    - 다르게 표현하면, 정책에 따라 선택되어진 행동의 결과가 이전 단계에서의 결과 보다 나빠지는 것을 의미
    - 강화학습의 경우, 한 번 이렇게 성능이 갑자기 나빠지게 되면 이후의 단계에서 회복하는 것이 많이 어려움
  - 주요 이유
    - 파라미터 값의 차이(업데이트의 정도)가 정책을 통해 도출되는 성능의 차이와 매칭이 되지 않기 때문 ⇒ 예를 들어, 파라미터 값의 차이가 작을지라도 (파라미터가 조금만 업데이트될 지라도) 파라미터값의 업데이트로 달라진 정책에 의해 반환되는 결과에는 큰 차이 존재 가능
    - 이러한 차이는 경우에 따라 성능 저하로 이어짐



PPO

- 성능 붕괴 해결책
  - 이를 해결하기 위해서 직접적으로 파라미터가 업데이트 되는 정도를 제한하는 것은 효과적이지 못함
  - 대신, 파라미터 업데이트로 인한 정책 변화에 따른 성능 변화를 목적함수에 반영하는 것이 필요.
  - 그리고 이러한 목적함수를 이용해서 **성능 변화가 너무 크지 않고, 성능이 좋아지는 방향으로 업데이트**가 진행될 수 있도록 하는 것이 필요

PPO

- 목적함수 도출
  - 이러한 목적함수를 도출하기 위해서는 일단 두 정책 간의 성능 차이를 측정할 수 있는 지표가 존재해야 함
    - 이를 위해, 상대적 정책 성능 비교 지표(relative policy performance identity) 사용, 다음과 같이 정의
    - $\mathrm{J}(\pi') - \mathrm{J}(\pi) = E_{\tau\sim\pi'}[\sum_{t=0}^{T} \gamma^t A^{\pi}(s_t, a_t)]$
      - π는 현 정책을, π'는 업데이트된 정책을 의미
      - $A^{\pi}(s_t, a_t)$는 어드밴티지(advantage)라고 표현되며, Q 가치함수와 V 가치함수의 차로 계산, $A^{\pi}(s_t, a_t) = Q^{\pi}(s_t, a_t) - V^{\pi}(s_t)$
      - $\mathrm{J}(\pi') - \mathrm{J}(\pi)$를 최대화 하는 것은 $\mathrm{J}(\pi')$를 최대화 하는 것과 동일하기 때문에 $\mathrm{J}(\pi')$ 대신 $\mathrm{J}(\pi') - \mathrm{J}(\pi)$를 목적함수로 사용 가능
    - 하지만, 한 가지 문제 존재
      - 새로운 정책(π')으로부터의 궤적(τ) (즉, $\tau\sim\pi'$)에 대한 기댓값
      - 하지만, 업데이트를 하지 않은 상황에서는 업데이트된 정책(π')으로부터의 궤적을 사용 불가능 ⇒ $\mathrm{J}(\pi') - \mathrm{J}(\pi)$를 현재 정책($\pi$)을 이용해서 표현해야 함

PPO

- 목적함수 도출 (cont'd)
  - $J(\pi') - J(\pi) = E_{\tau\sim\pi'}[\sum_{t=0}^{T}\gamma^t A^{\pi}(s_t, a_t)]$를 현재 정책을 이용해서 표현하기 위해, π와 π' 차이가 크지 않다고 가정
    - π가 반환하는 확률 분포와 π'가 반환하는 확률 분포의 차이가 크지 않다는 것
    - 두 분포의 차이는 KL 발산을 이용해서 표현, 이를 이용해서 차 통제 가능
    - π와 π' 차이가 크지 않다면, $E_{\tau\sim\pi'}[\sum_{t=0}^{T}\gamma^t A^{\pi}(s_t, a_t)]$을 π으로부터의 궤적을 이용해서 근사하는 것이 가능

알려진 확률 분포를 이용해서 표집된 데이터를 이용해서 알지 못하는 분포를 추정하는 방법

→ 중요도 표집 가중치(importance sampling weights)를 사용, $\frac{\pi'(a_t|s_t)}{\pi(a_t|s_t)}$

  - $J(\pi') - J(\pi) = E_{\tau\sim\pi'}[\sum_{t=0}^{T} A^{\pi}(s_t, a_t)] \approx E_{\tau\sim\pi}\left[\sum_{t=0}^{T} A^{\pi}(s_t, a_t)\frac{\pi'(a_t|s_t)}{\pi(a_t|s_t)}\right] = J_{\pi}^{SO}(\pi')$

PPO

- 대리 목적 (surrogate objective) 함수: $\mathrm{J}_{\pi}^{SO}(\pi')$
  - 성능 붕괴의 문제를 해결하기 위해서 원래의 목적함수를 사용하지 않고, $\mathrm{J}_{\pi}^{SO}(\pi')$를 대신 사용
  - 하지만, $\mathrm{J}_{\pi}^{SO}(\pi')$는 $\mathrm{J}(\pi') - \mathrm{J}(\pi)$의 근사치이기 때문에 둘 간에는 오차 존재
  - 오차가 너무 커지게 되면 학습이 제대로 되지 않기 때문에 오차를 제한하는 것이 필요 ⇒ 이를 위해서 KL 발산을 사용
    - $\left|\left(\mathrm{J}(\pi') - \mathrm{J}(\pi)\right) - \mathrm{J}_{\pi}^{SO}(\pi')\right| \leq C\sqrt{E_t\left[KL\left(\pi'(a_t|s_t)||\pi(a_t|s_t)\right)\right]}$
      - C는 상수
      - 위 식은 만약 π와 π'가 반환하는 확률 분포의 차이가 크지 않다면, 두 분포 간의 KL 발산이 작다는 것을 의미하고 이는 위 식의 오른쪽 항의 값이 작다는 것 ⇒ 즉, $\mathrm{J}_{\pi}^{CPI}(\pi')$가 $\mathrm{J}(\pi') - \mathrm{J}(\pi)$을 잘 근사한다는 것을 의미

PPO

- 대리 목적 (surrogate objective) 함수 (cont'd)
  - 앞의 식을 이용하면 위 식을 이용하면 $\mathrm{J}(\pi') - \mathrm{J}(\pi) \geq 0$을 보장하는 업데이트 방식이 가능
  - 이를 위해, 위 식을 아래와 같이 다시 표현
    - $\mathrm{J}(\pi') - \mathrm{J}(\pi) \geq \mathrm{J}_{\pi}^{SO}(\pi') - C\sqrt{E_t\left[KL\left(\pi'(a_t|s_t)||\pi(a_t|s_t)\right)\right]}$
    - 이 식을 이용해서 업데이트를 특정 조건이 만족하는 경우에만 수행
      - 업데이트를 했을 때 성능이 좋아지지 않는 경우에는 $\pi' = \pi$로 설정하고, 업데이트를 진행하지 않음
        - $\mathrm{J}_{\pi}^{SO}(\pi') = E_{\tau\sim\pi}\left[\sum_{t=0}^{T} A^{\pi}(s_t, a_t)\frac{\pi'(a_t|s_t)}{\pi(a_t|s_t)}\right]$의 값이 0 & KL 발산의 값이 0 $\Rightarrow \mathrm{J}(\pi') - \mathrm{J}(\pi) \geq 0$

PPO

- 대리 목적 (surrogate objective) 함수 (cont'd)
  - $\mathrm{J}_{\pi}^{SO}(\pi') > C\sqrt{E_t\left[KL\left(\pi'(a_t|s_t)||\pi(a_t|s_t)\right)\right]}$인 경우에만 업데이트를 수행하게 되면 $\mathrm{J}(\pi') - \mathrm{J}(\pi) \geq 0$가 보장
  - 이를 위해 풀고자 하는 최적화 문제에 $C\sqrt{E_t\left[KL\left(\pi'(a_t|s_t)||\pi(a_t|s_t)\right)\right]}$를 페널티 항으로 포함
    - $\underset{\pi'}{\mathrm{argmax}}\left\{\mathrm{J}_{\pi}^{SO}(\pi') - C\sqrt{E_t\left[KL\left(\pi'(a_t|s_t)||\pi(a_t|s_t)\right)\right]}\right\}$
    - 위의 최적화 문제는 $\mathrm{J}(\pi') - \mathrm{J}(\pi) \geq 0$을 보장 & No performance collapse
    - 참고로, $\mathrm{J}(\pi') - \mathrm{J}(\pi) \geq 0$을 단순 성능 향상(monotonic performance improvement)이라고 표현

PPO

- 실제 구현의 경우
  - 앞의 페날티를 그대로 사용하지 않고, KL 발산의 기댓값을 직접적으로 제한하는 방법을 사용
  - $E_t\left[KL\left(\pi'(a_t|s_t)||\pi(a_t|s_t)\right)\right] \leq \delta$
    - δ는 하이퍼파라미터
    - KL 발산은 π와 π'의 차이를 나타내기 때문에 δ 값이 작을수록 π와 π'의 차이가 작아진다는 것을 의미
    - 일반적으로 δ의 값을 작게 설정해서 업데이트된 정책(π')이 현재 정책(π)과 큰 차이가 없도록 함 ⇒ 즉, π'의 후보로 π의 근처에 존재하는 정책들만이 고려
      - 새로운 정책 고려의 대상이 되는 현 정책 주변을 신뢰 영역(trust region)이라고 표현
      - $E_t\left[KL\left(\pi'(a_t|s_t)||\pi(a_t|s_t)\right)\right] \leq \delta$는 신뢰 영역을 한정하는 역할

PPO

- 대리 목적 함수
  - $\mathrm{J}_{\pi}^{SO}(\pi') \Longrightarrow \mathrm{J}^{SO}(\theta) = E_t\left[\frac{\pi_\theta(a_t|s_t)}{\pi_{\theta_{old}}(a_t|s_t)} \cdot A_t^{\pi_{\theta_{old}}}\right]$
  - 따라서 최종적인 최적화 문제는 아래와 같이 표현
    - $\max_\theta E_t\left[\frac{\pi_\theta(a_t|s_t)}{\pi_{\theta_{old}}(a_t|s_t)} \cdot A_t^{\pi_{\theta_{old}}}\right]$
      $\text{subject to } E_t\left[KL\left(\pi_\theta(a_t|s_t)||\pi_{\theta_{old}}(a_t|s_t)\right)\right] \leq \delta$
    - 신뢰 영역 최적화 문제라고 표현
    - 여러 알고리즘들 제안
      - 자연 정책 경사 (Natural Policy Gradient, NPG), 신뢰 영역 정책 최적화 (Trust Region Policy Optimization, TRPO) 등 ⇒ 이론적으로 복잡하여 구현이 어렵다는 단점
      - 이러한 단점을 보완하기 위해 PPO 제안

PPO

- PPO (Proximal Policy Optimization)
  - 구현이 쉽고, 많은 컴퓨팅 파워를 필요로 하지 않고, δ의 값을 직접적으로 설정할 필요없다는 장점
  - 두 가지 버전
    - 적응적 KL 페널티(adaptive KL penalty) 방법
      - 목적함수에 적응적 KL 발산을 페널티항으로 추가한 방법
      - InstructGPT에서 사용
    - 한정된 목적(clipped objective) 방법
      - 목적함수가 취할 수 있는 구간을 한정(clipping)하는 방법

PPO

- 적응적 KL 페널티(adaptive KL penalty) 방법
  - 목적함수에 적응적 KL 발산을 페널티항(아래 식에서 $\beta KL\left(\pi_\theta(a_t|s_t)||\pi_{\theta_{old}}(a_t|s_t)\right)$)으로 추가한 방법
  - 적응적 KL 페널티 방법에서의 최적화 문제는 아래와 같이 표현
    - $\max_\theta E_t\left[r_t(\theta)A_t - \beta KL\left(\pi_\theta(a_t|s_t)||\pi_{\theta_{old}}(a_t|s_t)\right)\right]$
      - 여기에서 $r_t(\theta) = \frac{\pi_\theta(a_t|s_t)}{\pi_{\theta_{old}}(a_t|s_t)}$, $A_t = A_t^{\pi_{\theta_{old}}}$을 의미
      - β는 적응 계수 (adaptive coefficient)로 KL 페널티의 크기를 조절 ⇒ 이는 신뢰 영역을 조절하는 역할, 즉, 새로운 정책이 기존의 정책과 얼마나 달라질 수 있는지를 조절하는 역할 수행
      - β이 클수록, 더 넓은 영역 (즉, 차이가 커질 수 있다)
  - 이러한 방법은 적절한 β의 값을 설정하는 것이 어렵다는 단점 존재

PPO

- 적응적 KL 페널티(adaptive KL penalty) 방법 (cont'd)
  - 이러한 문제를 해소하기 위해 PPO 논문에서는 정책 파라미터 업데이트시 특정한 기준에 따라 β의 값을 조절하는 방법을 사용
  - $KL\left(\pi_\theta(a_t|s_t)||\pi_{\theta_{old}}(a_t|s_t)\right)$의 목표값($d_{target}$)을 설정하고 그 값과 업데이트시에 계산된 $KL\left(\pi_\theta(a_t|s_t)||\pi_{\theta_{old}}(a_t|s_t)\right)$ 값 (d)을 비교하여 β의 업데이트 값을 결정
    - $d < \frac{d_{target}}{1.5}$인 경우에는 $\beta \leftarrow {}^{\beta}/_{2}$로, $d > d_{target} \times 1.5$인 경우에는 $\beta \leftarrow 2\beta$로 업데이트

Q & A