
高级量化交易技术

闫涛
科技有限公司
北京
{yt7589}@qq.com

第零篇深度学习

第Z01章深度学习框架

Abstract

在本章中我们将利用Numpy开发一个小型的深度学习框架，实现类似PyTorch的功能。

1 深度学习框架概述

在本章中，我们将利用Numpy，开发一个基于动态计算图的深度学习框架。

1.1 张量

在深度学习中，最基本的元素是张量（Tensor）。1维张量就是我们所熟悉的向量，2维张量就是矩阵，3维及以上就是通用的张量。张量（Tensor）在 Numpy中就用多维数组来表示。我们首先定义一个仅支持加法运算，但是支持自动微分的张量原型，在后面的章节在逐渐扩充完善。

1.1.1 最简张量模型

我们首先定义一个最简单的张量，如下所示：

```
1 import numpy as np
2
3 class Tensor(object):
4     def __init__(self, data, autograd=False, creators=None, creation_op=
      None, cid=None):
5         self.data = np.array(data)
6         self.creators = creators
7         self.creation_op = creation_op
8         self.autograd = autograd
9         self.grad = None
10        self.children = {}
11        if (cid is None):
12            cid = np.random.randint(0, 10000000)
13        self.cid = cid
14        if creators is not None:
15            for c in creators:
16                if self.cid not in c.children:
17                    c.children[self.cid] = 1
18                else:
19                    c.children[self.cid] += 1
20
21        def all_children_grads_accounted_for(self):
22            for cid, cnt in self.children.items():
23                if cnt != 0:
24                    return False
25            return True
26
27        def backward(self, grad=None, grad_origin=None):
```

```

28         if self.autograd:
29             if grad_origin is not None:
30                 if self.children[grad_origin.cid] == 0:
31                     raise Exception('cannot backprop more than once')
32                 else:
33                     self.children[grad_origin.cid] -= 1
34             if self.grad is None:
35                 self.grad = grad
36             else:
37                 self.grad += grad
38             if self.creators is not None and (self.
all_children_grads_accounted_for() or grad_origin is None):
39                 if self.creation_op == 'add':
40                     self.creators[0].backward(self.grad, self)
41                     self.creators[1].backward(self.grad, self)
42
43     def __add__(self, other):
44         if self.autograd and other.autograd:
45             return Tensor(self.data + other.data, autograd=True, creators
=[self, other], creation_op='add')
46         return Tensor(self.data + other.data)
47
48     def __repr__(self):
49         return str(self.data.__repr__())
50
51     def __str__(self):
52         return str(self.data.__str__())
53
54     def to_string(self):
55         ts = 'tensor_{0};\r\n'.format(self.cid)
56         ts = '{0}    data: {1};\r\n'.format(ts, self.data)
57         ts = '{0}    autograd: {1};\r\n'.format(ts, self.autograd)
58         ts = '{0}    creators: {1};\r\n'.format(ts, self.creators)
59         ts = '{0}    creation_op: {1};\r\n'.format(ts, self.creation_op)
60         ts = '{0}    cid: {1};\r\n'.format(ts, self.cid)
61         ts = '{0}    grad: {1};\r\n'.format(ts, self.grad)
62         ts = '{0}    children: {1};\r\n'.format(ts, self.children)
63         return ts

```

Listing 1: 策略迭代(chpZ01/tensor.py)

直接看代码比较难以理解，下面我们先写一个单元测试用例，实现一个前向传播过程，如下所示：

```

1 class TTensor(unittest.TestCase):
2     @classmethod
3     def setUp(cls):
4         pass
5
6     @classmethod
7     def tearDown(cls):

```

```

8     pass
9
10    def test_init_001(self):
11        a = Tensor([1, 2, 3, 4, 5], autograd=True)
12        b = Tensor([10, 10, 10, 10, 10], autograd=True)
13        c = Tensor([5, 4, 3, 2, 1], autograd=True)
14        d = a + b
15        e = b + c
16        f = d + e
17        print('f: {0};'.format(f.to_string()))
18        print('d: {0};'.format(d.to_string()))
19        print('e: {0};'.format(e.to_string()))
20        print('a: {0};'.format(a.to_string()))
21        print('b: {0};'.format(b.to_string()))
22        print('c: {0};'.format(c.to_string()))

```

Listing 2: 向量前向传播测试用例(chpZ01/tensor.py)

运行上面的测试用例:

```
1 python -m unittest uts.apps.drl.chpZ01.t_tensor.TTensor.test_init_001
```

Listing 3: 向量前向传播测试用例运行(chpZ01/tensor.py)

运行结果如下所示: 其将形成如下所示的动态图: 接下来我们看一下反向传播过程, 首先

图 1: 向量前向传播执行结果

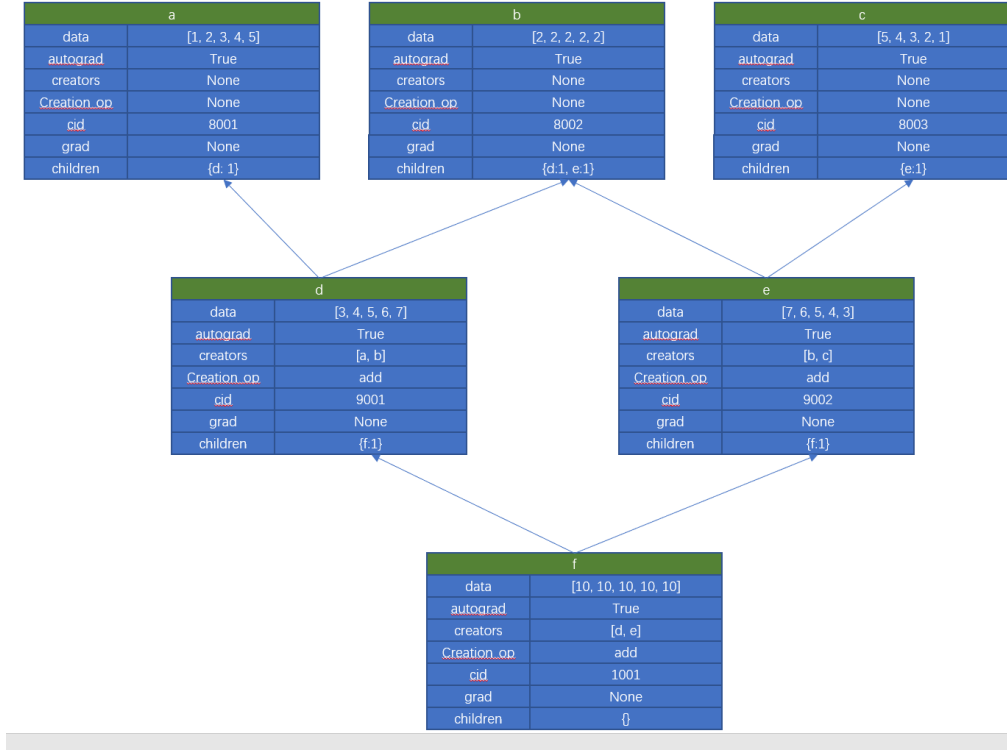
```

(pydev) E:\work\liching\python -m unittest uts.apps.drl.chpZ01.t_tensor.TTensor.test_init_001
f: tensor 5484831:
  data:[26 26 26 26 26];
  autograd: True;
  creators: [array([11, 12, 13, 14, 15]), array([15, 14, 13, 12, 11])];
  creation_op: add;
  cid: 5484831;
  grad: None;
  children: 0;
d: tensor 615923:
  data:[11 12 13 14 15];
  autograd: True;
  creators: [array([1, 2, 3, 4, 5]), array([10, 10, 10, 10, 10])];
  creation_op: add;
  cid: 615923;
  grad: None;
  children: [5484831: 1];
e: tensor 9670952:
  data:[15 14 13 12 11];
  autograd: True;
  creators: [array([10, 10, 10, 10, 10]), array([5, 4, 3, 2, 1])];
  creation_op: add;
  cid: 9670952;
  grad: None;
  children: [5484831: 1];
a: tensor 5048891:
  data:[1 2 3 4 5];
  autograd: True;
  creators: None;
  creation_op: None;
  cid: 5048891;
  grad: None;
  children: [615923: 1];
b: tensor 9288282:
  data:[10 10 10 10 10];
  autograd: True;
  creators: None;
  creation_op: None;
  cid: 9288282;
  grad: None;
  children: [615923: 1, 9670952: 1];
c: tensor 715550:
  data:[5 4 3 2 1];
  autograd: True;
  creators: None;
  creation_op: None;
  cid: 715550;
  grad: None;
  children: [9670952: 1];
-----
Ran 1 test in 0.002s
OK

```

来看测试用例:

图 2: 向量加法动态图示例



```

1 class TTensor(unittest.TestCase):
2
3     def test_add_backward_001(self):
4         a = Tensor([1, 2, 3, 4, 5], autograd=True)
5         b = Tensor([10, 10, 10, 10, 10], autograd=True)
6         c = Tensor([5, 4, 3, 2, 1], autograd=True)
7         d = a + b
8         e = b + c
9         f = d + e
10        f.backward(Tensor([1, 1, 1, 1, 1]))
11        print('f: {0};'.format(f.to_string()))
12        print('d: {0};'.format(d.to_string()))
13        print('e: {0};'.format(e.to_string()))
14        print('a: {0};'.format(a.to_string()))
15        print('b: {0};'.format(b.to_string()))
16        print('c: {0};'.format(c.to_string()))

```

Listing 4: 向量前向传播测试用例(chpZ01/tensor.py)

我们首先来看理论分析，对于 $f = d + e$ ，我们先定 $\frac{\partial f}{\partial f} = [1, 1, 1, 1, 1]$ ，根据链式求导法则，得到 $\frac{\partial f}{\partial e} = \frac{\partial f}{\partial f} \frac{\partial f}{\partial e}$ ，向量对向量微分得到的是Jacobian矩阵，如下所示：

$$\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{e}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial e_1} & \frac{\partial f_1}{\partial e_2} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial e_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial e_1} & \frac{\partial f_2}{\partial e_2} & \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial e_n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial e_1} & \frac{\partial f_n}{\partial e_2} & \cdots & \frac{\partial f_n}{\partial e_n} \end{bmatrix} \in R^{n \times n} \quad (1)$$

其实际执行为 $R^{1 \times n} \cdot R^{n \times n} = R^{1 \times n}$ ，以上为理论分析，下面我来看程序上面的代码实现。对于向量 \mathbf{f} ，我们直接指定 $\frac{\partial j}{\partial \mathbf{f}} = [1, 1, 1, 1, 1]$ ，向量 \mathbf{f} 当前状态为：反向传播程序如下所示：

图 3: 向量f原始状态

f	
data	[10, 10, 10, 10, 10]
autograd	True
creators	[d, e]
Creation_op	add
cid	1001
grad	None
children	{}

```

1  def backward(self, grad=None, grad_origin=None):
2      if self.autograd:
3          if grad_origin is not None:
4              if self.children[grad_origin.cid] == 0:
5                  raise Exception('cannot backprop more than once')
6              else:
7                  self.children[grad_origin.cid] -= 1
8          if self.grad is None:
9              self.grad = grad
10         else:
11             self.grad += grad
12         if self.creators is not None and (self.
all_children_grads_accounted_for() or grad_origin is None):
13             if self.creation_op == 'add':
14                 self.creators[0].backward(self.grad, self)
15                 self.creators[1].backward(self.grad, self)

```

Listing 5: 向量前向传播测试用例(chpZ01/tensor.py)

代码解读如下所示：

- 第2行：因为autograd为True，所以执行下面的代码；
- 第3~7行：因为grad_origin为False，所以不执行；
- 第8~11行：因为grad为None，因此执行第9行使 $grad = [1, 1, 1, 1, 1]$ ；
- 第12行：因为creators为d和e，且all_children_grads_accounted_for为True，且grad_origin为None，因此会执行下面的语句；
- 第13~15行：由于是add运算，以自己的grad和自身为参数，分别调用d和e的后向传播算法；

执行完上述代码后，系统状态如下所示：我们先来看传到d节点，这时grad_origin为f，此时d的children只有一个节点f，初始时children[f.cid]=1，运行后children[f.cid]=0，因为self.grad为空，所以self.grad=[1, 1, 1, 1, 1]，因为self.creators=[a, b]，又为add操作，所以会

图 4: 反向传播从f到d和e

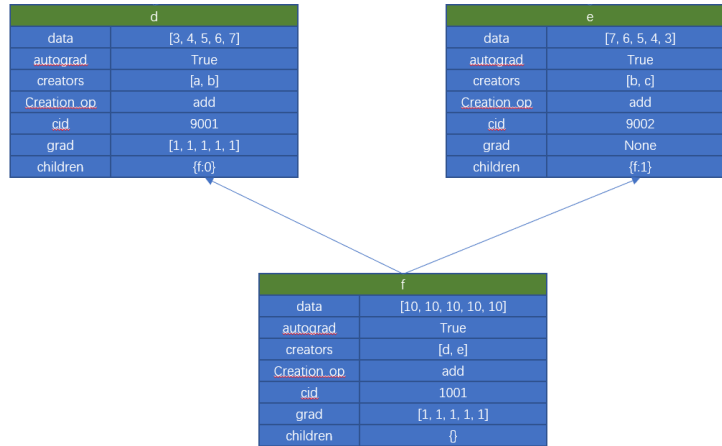
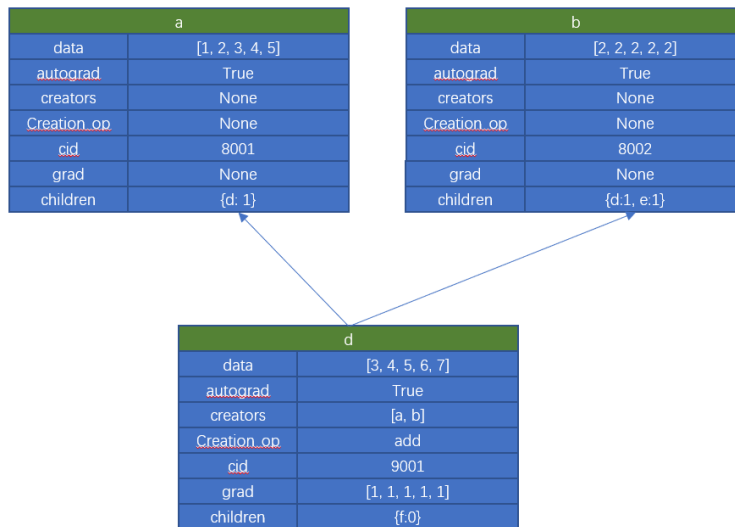


图 5: 反向传播从d到a和b



调用a和b的反向传播算法。经过a和b的反向传播算法处理后，结果如下所示：我们再来看传到e节点，这时grad_origin为f，此时d的children只有一个节点f，初始时children[f.cid]=1，运行后children[f.cid]=0，因为self.grad为空，所以self.grad=[1, 1, 1, 1, 1]，因为self.creators=[a, b]，又为add操作，所以会调用b和c的反向传播算法。经过b和c的反向传播算法处理后，结果如下所示：

1.1.2 负号

我们首先定义负号方法：

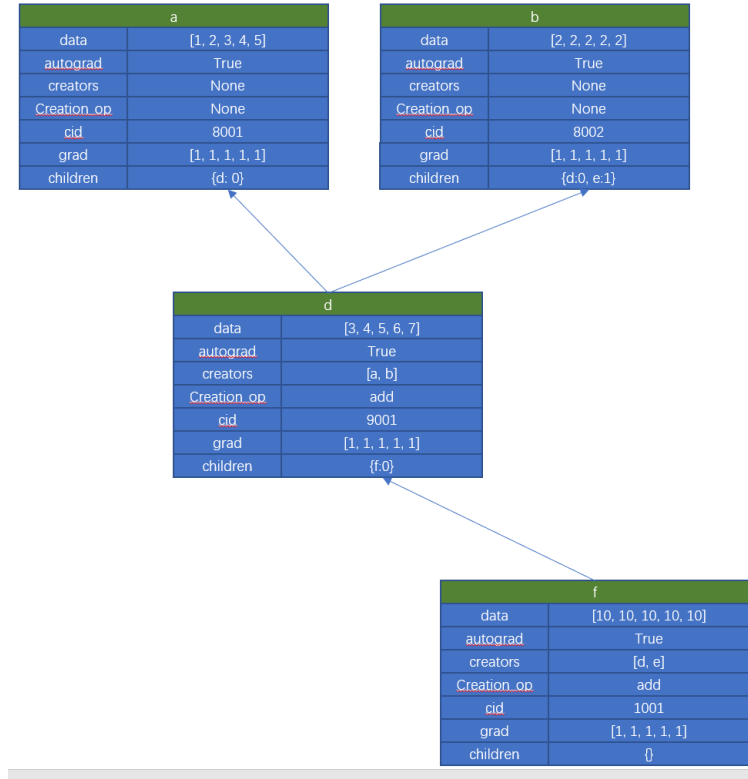
```

1 def __neg__(self):
2     if self.autograd:
3         return Tensor(self.data * -1, autograd=True, creators=[self],
4             creation_op='neg')
5     return Tensor(self.data * -1)

```

Listing 6: 张量负号方法(chpZ01/tensor.py)

图 6: 反向传播从d到a和b后的处理结果



其后向传播定义为:

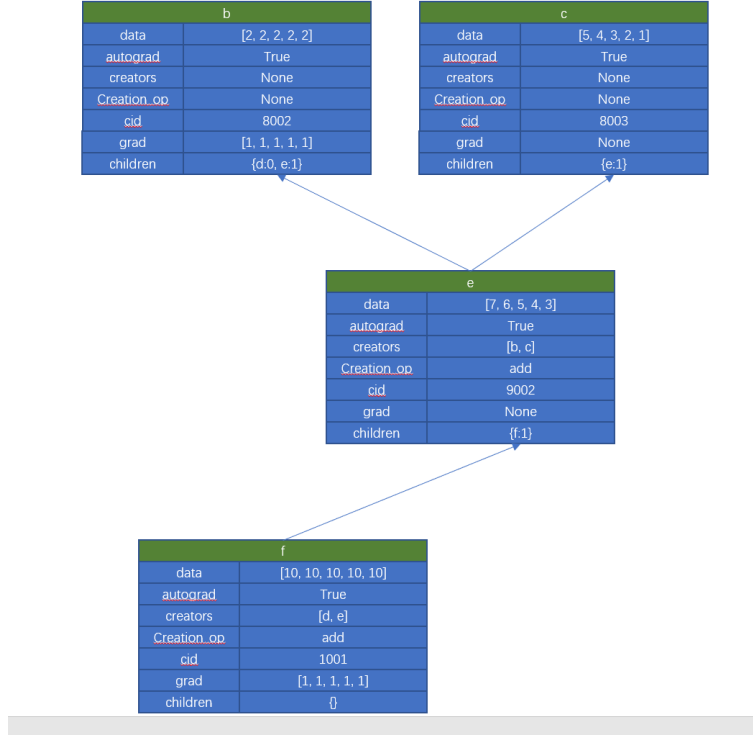
```

1  def backward(self, grad=None, grad_origin=None):
2      if self.autograd:
3          if grad_origin is not None:
4              if self.children[grad_origin.cid] == 0:
5                  raise Exception('cannot backprop more than once')
6              else:
7                  self.children[grad_origin.cid] -= 1
8          if self.grad is None:
9              self.grad = grad
10         else:
11             self.grad += grad
12         if self.creators is not None and (self.
all_children_grads_accounted_for() or grad_origin is None):
13             if self.creation_op == 'add':
14                 self.creators[0].backward(self.grad, self)
15                 self.creators[1].backward(self.grad, self)
16             elif self.creation_op == 'neg':
17                 self.creators[0].backward(self.grad.__neg__())

```

Listing 7: 张量负号反向传播(chpZ01/tensor.py)

图 7: 反向传播从e到b和c



1.1.3 减法

我们首先定义减法:

```

1  def __sub__(self, other):
2      if self.autograd:
3          return Tensor(self.data - other.data, autograd=True, creators
4              =[self, other], creation_op='sub')
5          return Tensor(self.data - other.data)

```

Listing 8: 张量减法(chpZ01/tensor.py)

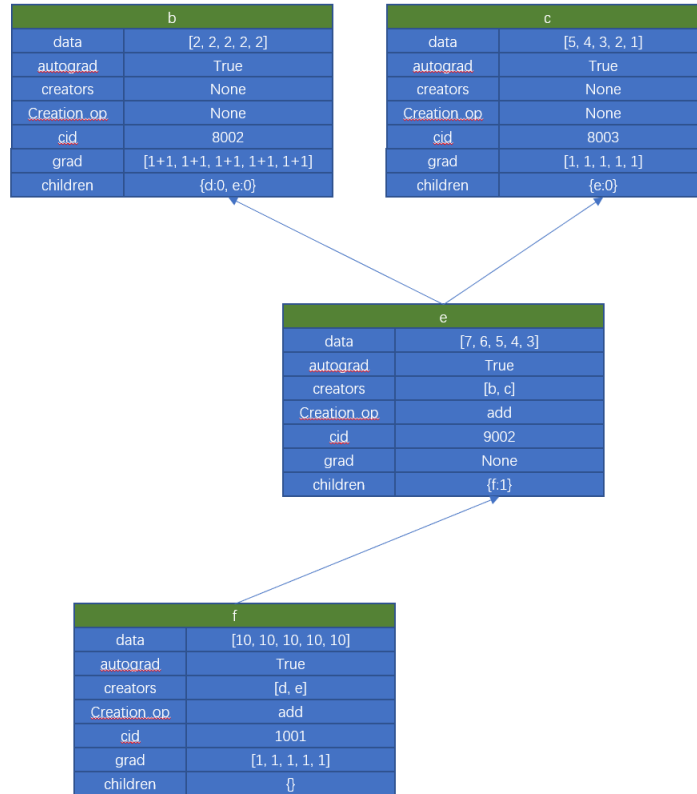
减法的后向传播定义为:

```

1  def backward(self, grad=None, grad_origin=None):
2      if self.autograd:
3          if grad_origin is not None:
4              if self.children[grad_origin.cid] == 0:
5                  raise Exception('cannot backprop more than once')
6              else:
7                  self.children[grad_origin.cid] -= 1
8          if self.grad is None:
9              self.grad = grad
10         else:
11             self.grad += grad
12         if self.creators is not None and (self.
            all_children_grads_accounted_for() or grad_origin is None):

```

图 8: 反向传播从e到b和c后的处理结果



```

13         if self.creation_op == 'add':
14             self.creators[0].backward(self.grad, self)
15             self.creators[1].backward(self.grad, self)
16         .....
17         elif self.creation_op == 'sub':
18             org = Tensor(self.grad.data)
19             self.creators[0].backward(org, self)
20             org = Tensor(self.grad.__neg__().data)
21             self.creators[1].backward(org, self)

```

Listing 9: 张量减法后台传播(chpZ01/tensor.py)

1.1.4 乘法

我们首先定义乘法，这里的乘法是指对*运算符的重载，就是两个数组对应元素相乘（Elementwise Multiplication），不是我们将在后面介绍的矩阵和向量的乘法：

```

1     def __mul__(self, other):
2         if self.autograd and other.autograd:
3             return Tensor(self.data * other.data, autograd=True, creators
4                             =[self, other], creation_op='mul')
5         return Tensor(self.data * other.data)

```

Listing 10: 张量乘法(chpZ01/tensor.py)

乘法反向传播算法:

```

1  def backward(self, grad=None, grad_origin=None):
2      if self.autograd:
3          if grad_origin is not None:
4              if self.children[grad_origin.cid] == 0:
5                  raise Exception('cannot backprop more than once')
6              else:
7                  self.children[grad_origin.cid] -= 1
8          if self.grad is None:
9              self.grad = grad
10         else:
11             self.grad += grad
12         if self.creators is not None and (self.
all_children_grads_accounted_for() or grad_origin is None):
13             if self.creation_op == 'add':
14                 self.creators[0].backward(self.grad, self)
15                 self.creators[1].backward(self.grad, self)
16                 .....
17             elif self.creation_op == 'mul':
18                 rst = self.grad * self.creators[1]
19                 self.creators[0].backward(rst, self)
20                 rst = self.grad * self.creators[0]
21                 self.creators[1].backward(rst, self)

```

Listing 11: 张量乘法反向传播(chpZ01/tensor.py)

从数学概念上来看，两个向量Elementwise相乘之后，得到的是同维度的向量，再求出的微分是一个矩阵，如下所示：

$$\mathbf{c} = \mathbf{a} * \mathbf{b} = \begin{bmatrix} c_1 & c_2 & \dots & c_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 * b_1 & a_2 * b_2 & \dots & a_n * b_n \end{bmatrix} \in R^n \quad (2)$$

我们要求的 $\frac{\partial \mathbf{c}}{\partial \mathbf{a}}$ 是一个向量对向量的微分，其为一个 $R^{n \times n}$ 的矩阵，如下所示：

$$\frac{\partial \mathbf{c}}{\partial \mathbf{a}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial c_1}{\partial a_1} & \frac{\partial c_1}{\partial a_2} & \dots & \frac{\partial c_1}{\partial a_n} \\ \frac{\partial c_2}{\partial a_1} & \frac{\partial c_2}{\partial a_2} & \dots & \frac{\partial c_2}{\partial a_n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial c_n}{\partial a_1} & \frac{\partial c_n}{\partial a_2} & \dots & \frac{\partial c_n}{\partial a_n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & b_2 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & b_n \end{bmatrix} \in R^{n \times n} \quad (3)$$

我们上面的结果就是这个矩阵对角线的值。

1.1.5 sum运算

我们首先来看sum运算，其有一个参数dim，表明要对哪维操作（即消除哪维），例如v.sum(0)，就是消除行，如下所示：

$$sum(v, 0) = sum\left(\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 6 & 7 & 9 & 10 & 11 \end{bmatrix}, 0\right) = \begin{bmatrix} 9 & 12 & 16 & 19 & 22 \end{bmatrix} \quad (4)$$

同理sum(1)如下所示：

$$sum(v, 1) = sum\left(\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 6 & 7 & 8 & 9 & 10 \end{bmatrix}, 1\right) = \begin{bmatrix} 15 \\ 20 \\ 40 \end{bmatrix} \quad (5)$$

接下来我们来看`expand`操作，其有两个操作，第1个参数是扩展哪维，第2个参数是重复几份，如下所示：

```
1 org: [  
2     [1, 2, 3],  
3     [4, 5, 6]  
4 ]  
5 expand(0, 4):  
6 [  
7     [  
8         [1, 2, 3],  
9         [4, 5, 6]  
10    ],  
11    [  
12        [1, 2, 3],  
13        [4, 5, 6]  
14    ],  
15    [  
16        [1, 2, 3],  
17        [4, 5, 6]  
18    ],  
19    [  
20        [1, 2, 3],  
21        [4, 5, 6]  
22    ]  
23 ]  
24 expand(1, 4):  
25 [  
26     [  
27         [1, 1, 1, 1],  
28         [2, 2, 2, 2],  
29         [3, 3, 3, 3]  
30     ],  
31     [  
32         [4, 4, 4, 4],  
33         [5, 5, 5, 5],  
34         [6, 6, 6, 6]  
35     ]  
36 ]
```

Listing 12: 张量`expand`示例(chpZ01/tensor.py)

下面我们来看具体的代码实现：

```
1 def sum(self, dim):  
2     if self.autograd:  
3         return Tensor(self.data.sum(dim), autograd=True, creators=[  
4             self], creation_op='sum_' + str(dim))  
5         return Tensor(self.data.sum(dim))  
6  
7 def expand(self, dim, copies):  
8     trans_cmd = list(range(0, len(self.data.shape)))
```

```

8     trans_cmd.insert(dim, len(self.data.shape))
9     new_shape = list(self.data.shape) + [copies]
10    new_data = self.data.repeat(copies).reshape(new_shape)
11    new_data = new_data.transpose(trans_cmd)
12    if self.autograd:
13        return Tensor(new_data, autograd=True, creators=[self],
creation_op='expand_'+str(dim))
14    return Tensor(new_data)

```

Listing 13: 张量expand示例(chpZ01/tensor.py)

代码解读如下所示:

- 第1~4行: 定义sum运算, 其直接调用numpy的sum函数, 比较简单;
- 第6行: 定义expand运算, 我们以上例中 $v = [[1, 2, 3], [4, 5, 6]] \in R^{2 \times 3}$ 为例进行讲解, 我们先来看 $dim = 0, copies = 4$ 的情况;
- 第7行: $trans_cmd$ 为 $[0, 1]$;
- 第8行: $trans_cmd$ 为 $[2, 0, 1]$, 因为 $len(self.data.shape)$ 的值为2, 当 $dim = 0$ 时, 在列表最前面插入;
- 第9行: new_shape 为 $[2, 3, 4]$;
- 第10行: $self.data.repeat(4)$ 后为 R^{24} 的数组 $[111122223333444455556666]$, 将其重新定义为 $R^{2 \times 3 \times 4}$, 其值如下所示:

```

1     [
2         [
3             [1  1  1  1]
4             [2  2  2  2]
5             [3  3  3  3]
6         ]
7         [
8             [4  4  4  4]
9             [5  5  5  5]
10            [6  6  6  6]
11        ]
12    ]
13

```

Listing 14: 张量expand代码解读1(chpZ01/tensor.py)

- 第11行: 将最后1维放到前面, 如下所示:

```

1     [
2         [
3             [1  2  3]
4             [4  5  6]
5         ]
6         [
7             [1  2  3]
8             [4  5  6]
9         ]

```

```

10     [
11         [1 2 3]
12         [4 5 6]
13     ]
14     [
15         [1 2 3]
16         [4 5 6]
17     ]
18 ]
19

```

Listing 15: 张量expand代码解读1(chpZ01/tensor.py)

- 第6行：定义expand运算，我们以上例中 $v = [[1, 2, 3], [4, 5, 6]] \in R^{2 \times 3}$ 为例进行讲解，我们先来看 $dim = 1, copies = 4$ 的情况；
- 第7行： $trans_md$ 为 $[0, 1]$ ；
- 第8行： $trans_md$ 为 $[0, 2, 1]$ ，因为 $len(self.data.shape)$ 的值为2，当 $dim = 0$ 时，在列表最前面插入；
- 第9行： new_shape 为 $[2, 3, 4]$ ；
- 第10行： $self.data.repeat(4)$ 后为 R^{24} 的数组 $[111122223333444455556666]$ ，将其重新定义为 $R^{2 \times 3 \times 4}$ ，其值如下所示：

```

1     [
2         [
3             [1 1 1 1]
4             [2 2 2 2]
5             [3 3 3 3]
6         ]
7         [
8             [4 4 4 4]
9             [5 5 5 5]
10            [6 6 6 6]
11        ]
12    ]
13

```

Listing 16: 张量expand代码解读1(chpZ01/tensor.py)

- 第11行：将最后1维放到中间 $R^{2 \times 4 \times 3}$ ，如下所示：

```

1     [
2         [
3             [1 2 3]
4             [1 2 3]
5             [1 2 3]
6             [1 2 3]
7         ]
8         [
9             [4 5 6]
10            [4 5 6]
11            [4 5 6]

```

```

12         [4 5 6]
13     ]
14 ]
15

```

Listing 17: 张量expand代码解读1(chpZ01/tensor.py)

我们用符号来表示这一过程 $u = \text{sum}(\mathbf{v}, 0)$ 为例:

$$u = v_1 + v_2 + v_3 + v_4 + v_5 = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \\ v_5 \end{bmatrix} \quad (6)$$

注意: 上面是行向量, 只是一行写不下而折行显示。我们来看 $\frac{u}{v}$, 根据定义其是一个行向量, 形状为 $R^{1 \times n}$, 如下所示:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial \mathbf{v}} &= \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial v_1} & \frac{\partial u}{\partial v_2} & \frac{\partial u}{\partial v_3} & \frac{\partial u}{\partial v_4} & \frac{\partial u}{\partial v_5} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (7)$$

我们来看更一般的情况:

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} v_{1,1} + v_{1,2} + v_{1,3} \\ v_{2,1} + v_{2,2} + v_{2,3} \end{bmatrix} \quad (8)$$

对其进行求解:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{V}} = \begin{bmatrix} \frac{\mathbf{u}}{V_{1,1}} & \frac{\mathbf{u}}{V_{1,2}} & \frac{\mathbf{u}}{V_{1,3}} \\ \frac{\mathbf{u}}{V_{2,1}} & \frac{\mathbf{u}}{V_{2,2}} & \frac{\mathbf{u}}{V_{2,3}} \end{bmatrix} \quad (9)$$

对于其中的每一项来说, 是向量对标量的导数, 其仍为一个向量, 如下所示:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial V_{1,1}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial V_{1,1}} \\ \frac{\partial u_2}{\partial V_{1,1}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial v_{1,1} + v_{1,2} + v_{1,3}}{\partial V_{1,1}} \\ \frac{\partial v_{2,1} + v_{2,2} + v_{2,3}}{\partial V_{1,1}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (10)$$

我们为了简化计算的需要, 通常将式10视为全1的矩阵, 但是实际上, 其是一个每个元素均为只有一个元素为1其余元素为0的向量。求导程序如下所示:

```

1  def backward(self, grad=None, grad_origin=None):
2      if self.autograd:
3          if grad_origin is not None:
4              if self.children[grad_origin.cid] == 0:
5                  raise Exception('cannot backprop more than once')
6              else:
7                  self.children[grad_origin.cid] -= 1
8              if self.grad is None:
9                  self.grad = grad
10             else:
11                 self.grad += grad
12             if self.creators is not None and (self.
all_children_grads_accounted_for() or grad_origin is None):
13                 if self.creation_op == 'add':
14                     self.creators[0].backward(self.grad, self)
15                     self.creators[1].backward(self.grad, self)

```



```

16         .....
17         elif 'sum' in self.creation_op:
18             dim = int(self.creation_op.split('_')[1])
19             ds = self.creators[0].data.shape[dim]
20             self.creators[0].backward(self.grad.expand(dim, ds))
21         elif 'expand' in self.creation_op:
22             dim = int(self.creation_op.split('_')[1])
23             self.creators[0].backward(self.grad.sum(dim))
24 # testing program
25 def test_sum_grad_001(self):
26     v = Tensor(np.array([
27         [1, 2, 3],
28         [4, 5, 6]
29     ]), autograd=True)
30     u = v.sum(0)
31     u.backward(Tensor(np.array([1, 1, 1])))
32     print('grad: {0};'.format(v.to_string()))

```

Listing 18: 张量expand示例(chpZ01/tensor.py)

运行结果如下所示:

```

1 grad: tensor_2961896:
2   data:[[1 2 3]
3   [4 5 6]];
4   autograd: True;
5   creators: None;
6   creation_op: None;
7   cid: 2961896;
8   grad: [[1 1 1]
9   [1 1 1]];
10  children: {9624403: 1};

```

Listing 19: 张量expand示例(chpZ01/tensor.py)

1.1.6 转置运算

下面我们来看转置运算:

```

1 def transpose(self):
2     if self.autograd:
3         return Tensor(self.data.transpose(), autograd=True, creators
4         =[self], creation_op='transpose')
5     return Tensor(self.data.transpose())
6
7 def backward(self, grad=None, grad_origin=None):
8     if self.autograd:
9         if grad_origin is not None:
10            if self.children[grad_origin.cid] == 0:
11                raise Exception('cannot backprop more than once')
12            else:
13                self.children[grad_origin.cid] -= 1

```

```

13         if self.grad is None:
14             self.grad = grad
15         else:
16             self.grad += grad
17         if self.creators is not None and (self.
all_children_grads_accounted_for() or grad_origin is None):
18             if self.creation_op == 'add':
19                 self.creators[0].backward(self.grad, self)
20                 self.creators[1].backward(self.grad, self)
21                 .....
22             elif 'transpose' in self.creation_op:
23                 self.creators[0].backward(self.grad.transpose())
24
25 def test_transpose_001(self):
26     v = Tensor(np.array([
27         [1, 2, 3],
28         [4, 5, 6]
29     ]), autograd=True)
30     v_t = v.transpose()
31     print('v_t: \r\n{0};'.format(v_t))
32     v_t.backward(Tensor(np.array([[1, 1], [1, 1], [1, 1]])))
33     print('grad v: \r\n{0};'.format(v.grad))

```

Listing 20: 张量expand示例(chpZ01/tensor.py)

运行结果如下所示:

```

1 v_t:
2 [[1 4]
3    [2 5]
4    [3 6]];
5 grad v:
6 [[1 1 1]
7    [1 1 1]];

```

Listing 21: 张量expand示例(chpZ01/tensor.py)

第一篇深度强化学习

第1章强化学习概述

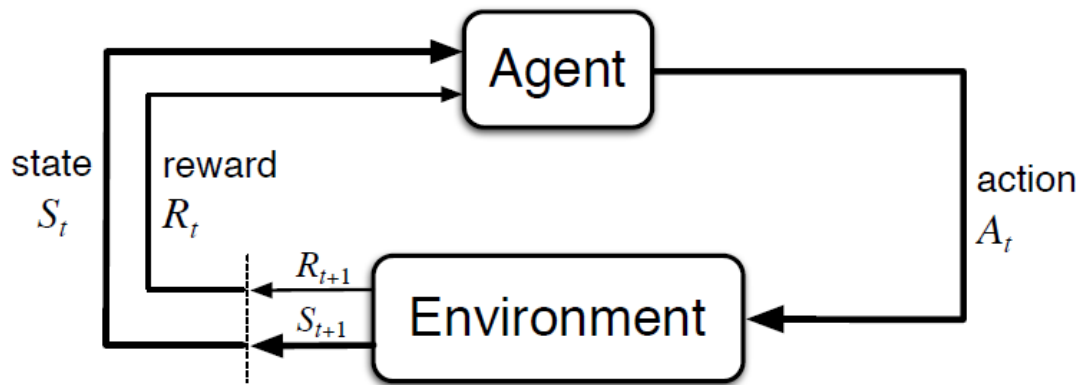
Abstract

在本章中我们将讨论强化学习中的环境、Agent、状态、Action和奖励，并重点讨论MDP相关内容。

2 MDP概述

一个典型的强化学习系统结构如下所示：

图 9: 典型强化学习系统架构图



如图所示：

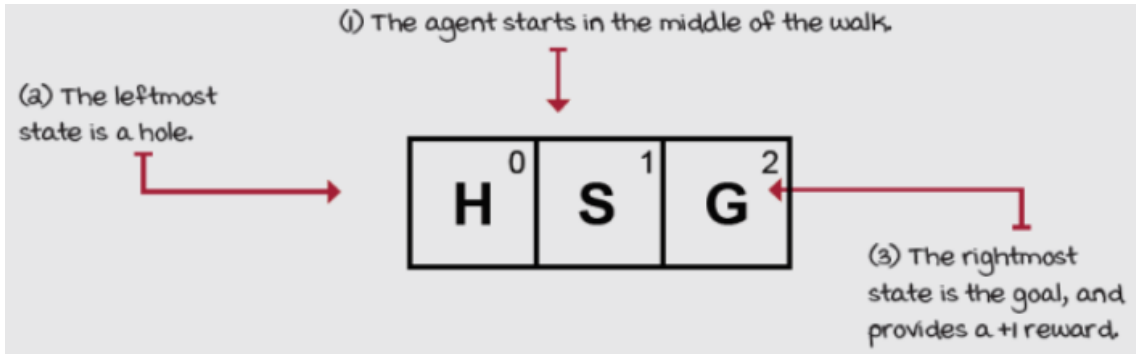
1. 在 t 时刻Agent观察到环境状态 S_t ，并得到上一时刻所采取的行动 A_{t-1} （在图中未画出）所得到的奖励 r_t ；
2. Agent根据环境状态 S_t ，根据某种策略 π ，选择行动 A_t ；
3. 环境接收到Agent的行动 A_t 后，根据环境的动态特性，转移到新的状态 S_{t+1} ，并产生 R_t 的奖励信号；

2.1 典型环境

2.1.1 Bandit Walk环境

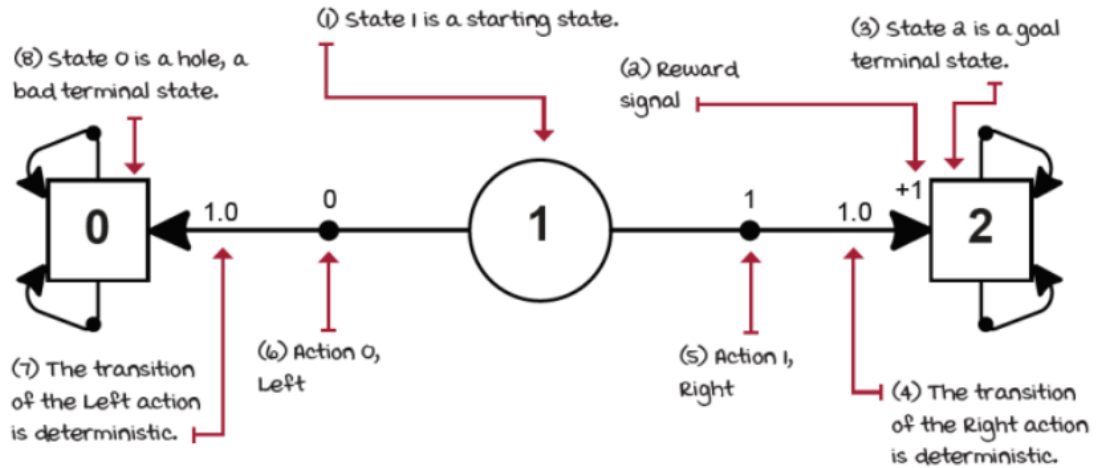
下面我们来研究一个最简单的强化学习环境，叫Bandit Walk，如下所示：

图 10: Bandit Walk环境图



如图所示，Agent初始时位于中间的S格，状态编号为 S_0 ，其可以采取向左、向右两个动作，向左则进入状态H，其是一个洞，就会掉到洞里，过程就会结束，此时得到的奖励为0；当Agent采取向右行动时，就会进入G状态，此时会获得奖励+1，由此可见其是一个确定性的环境，就是说当Agent采取向右行动时，会100%确定进行G状态。我们可以通过如下的图来表示上述过程：

图 11: Bandit Walk环境MDP图



如图所示：

- 在初始状态 S_0 时，有两个可选行动，分别表示为向左、向右的直线；
- 当采取向右行动时，就会到达小黑点位置，然后由环境决定将转到哪个状态，以及转到这个状态的概率，以本例为例，其就是以100% 的概率转到G状态 S_2 ，其中小黑点上面的1代表行动编号，向右简头上面的1.0代表100%的概率，向右简头处的1代表奖励为+1；

我们首先安装所需要的库：

```
pip install gym -i https://pypi.tuna.tsinghua.edu.cn/simple
```

Listing 22: 安装gym库

下面我们用Python对象来表示这一过程：

```
1 P = {  
2     0: {  
3         0: [(1.0, 0, 0.0, True)],  
4         1: [(1.0, 0, 0.0, True)]  
5     },  
6     1: {  
7         0: [(1.0, 0, 0.0, True)],  
8         1: [(1.0, 2, 1.0, True)]  
9     },  
10    2: {  
11        0: [(1.0, 2, 0.0, True)],  
12        1: [(1.0, 2, 0.0, True)]  
13    }  
14 }  
15 print(P)
```

Listing 23: Bandit Walk python程序

代码解读如下所示：

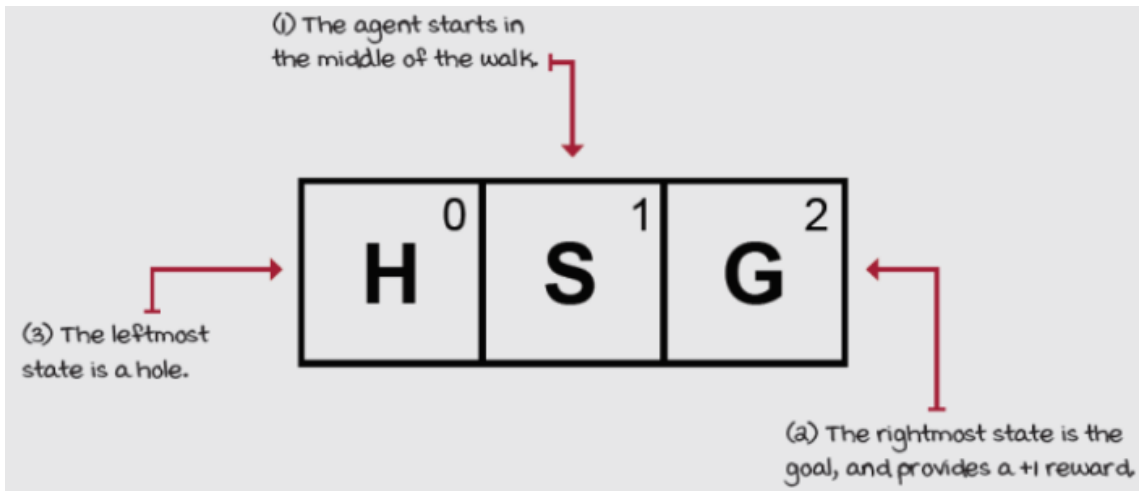
- P为一个字典对象，其键值0、1、2代表三个状态；
- P的键值0：其同样是一个字典对象，键值代表可以采取的行动，0代表向右，1代表向右；
- P的键值0下键值0：即在状态0下面采取行动0，其值为一个数组，代表由环境决定要转到哪个状态，转到每个状态为一个Tuple，含义为：（概率, 目的状态, 获得奖励, 新状态是否为终止状态），注意：我们规定在终止状态采取任何行动都会回到自身；

上面我们仅举了一个例子，其他状态读者可以自己解析出来。

2.1.2 Bandit Slippery Walk环境

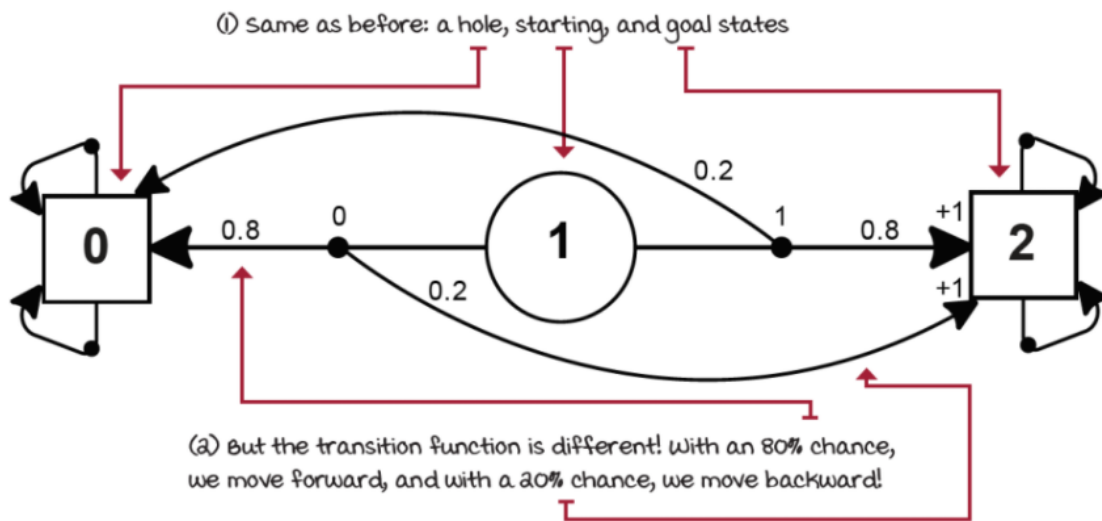
在上面的环境中，我们向左移动，环境会确定地向左移动。但是在本节中，当我们向左移动时，环境在80%的情况下会向左移动，20%的情况会向右移动。如下图所示：

图 12: Bandit Slippery Walk环境图



除了环境的随机性之外，环境与上一节相同。其MDP图如下所示：

图 13: Bandit Slippery Walk环境MDP图



如上图所示，在开始时Agent位于状态S，其可以采取的行动为向左编号为0或向右编号为1，我们以向右为例，当Agent采取向右行动时，其达到状态S右侧的小黑点，上面的1代表是编号为1的行动，此时环境将以80%的概率转变为状态G，得到+1的奖励，如图中的右箭头所示，同时环境还可能将以20%的概率变为状态H，其所获得的奖励为0，如图中向左的曲线箭头所示。读者可以按照上面的描述，自己补充出其他状态变化情况。由前面的讨论可以看出，在这个例子中，当Agent采取向右行动Action时，环境仅以80%的概率完成该Action，同时还可能以20%的概率向相反的方向变化，既环境具有一定的随机性。我们可以通过如下的Python代码来表示这一过程：

```
1 def bandit_slippery_walk(self):
2     P = {
```

```

3         0: {
4             0: [(1.0, 0, 0.0, True)],
5             1: [(1.0, 0, 0.0, True)]
6         },
7         1: {
8             0: [(0.8, 0, 0.0, True), (0.2, 2, 1.0, True)],
9             1: [(0.8, 2, 1.0, True), (0.2, 0, 0.0, True)]
10        },
11        2: {
12            0: [(1.0, 2, 0.0, True)],
13            1: [(1.0, 2, 0.0, True)]
14        }
15    }
16    print(P)

```

Listing 24: Bandit Slippery Walk python程序

如上所示，在状态S时，如果采取编号为0的向左行动，则有80%的概率会进入到状态H，奖励为0.0，并且是终止状态，当采用编号为1的向右行动时，将进入到状态G，获得奖励为1.0，并且为终止状态，采用这种方式我们就表示了环境的随机性。

2.2 典型交互

Agent与环境的交互分为分段的或连续的，由一系列时间步聚组成，在时间 t 时刻：

- Agent得到环境给的奖励信号 R_t ，其由Agent在上一时刻 S_{t-1} 采取行动 A_{t-1} 时所获得的，并且Agent观察到环境状态 S_t ；
- Agent根据所观察到的环境状态 S_t ，选择采取行动 A_t ；
- 环境接收到行动 A_t 后，会转移到新的状态 S_{t+1} ，并且会给Agent奖励 R_{t+1} ；
- 依次循环.....

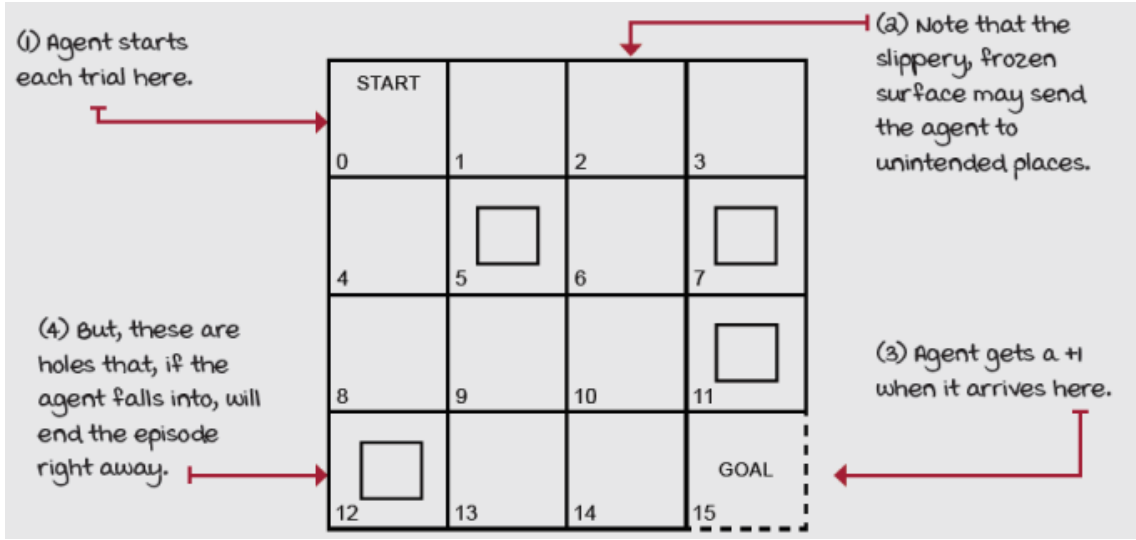
上述过程可以表示为：

$$(R_0, S_0, A_0), (R_1, S_1, A_1), (R_2, S_2, A_2), \dots, (R_t, S_t, A_t), \dots, (R_T, S_T, A_T) \quad (11)$$

2.3 MDP定义

我们以Frozen Lake为例来定义MDP过程。该环境如下所示：

图 14: Frozen Lake环境图



如图所示：

- Agent从状态Start开始；
- 在每个状态，Agent可以采取向左、向上、向下、向右行动，当在边缘状态时，走出环境的行动会100%使Agent留在原状态；
- 由于是冻冰的湖面，例如当Agent选择向下行动时，其有33.3%的概率向下运动，还有66.7%的概率会向垂直的方向运动，既以33.3%的概率向左运动，33.3%的概率向右运动；
- 当Agent到达有洞的状态时，过程立即结束；
- 当Agent到达最终节点时，可以获得+1的奖励；

2.3.1 环境状态建模

时刻 t 环境状态的状态表示为 S_t ，环境所有可能的状态用集合 \mathcal{S} 表示，通常我们用 n 维向量来表示一个状态：

$$S_t = \mathbf{s} = \begin{bmatrix} s_1 \\ s_2 \\ \dots \\ s_n \end{bmatrix} \in R^n \quad (12)$$

对于我们当前研究的这个问题，环境状态只需要表示Agent处于哪个状态即可，我们采用0~15来对状态进行编号，因此状态可以用0~15来表示：

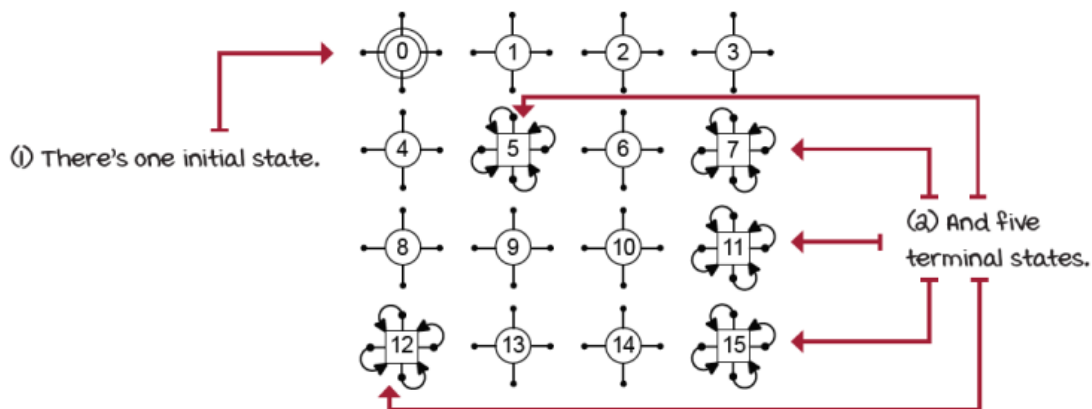
$$S_t = \mathbf{s} = [i] \in R^1, i \in \{0, 1, 2, 3, \dots, 15\} \quad (13)$$

我们规定环境只与当前状态有关，而与过去的历史无关，这就是马可夫特性，即我们研究的过程是无记忆的。乍一看，这是一个非常严重的限制条件，但是在实际应用中，我们通常可以通过设计合适的状态，使所研究的问题变为无记忆的。用数学语言可以表示为：

$$P(S_{t+1}|S_t, A_t) = P(S_{t+1}|S_t, A_t, S_{t-1}, A_{t-1}, \dots) \quad (14)$$

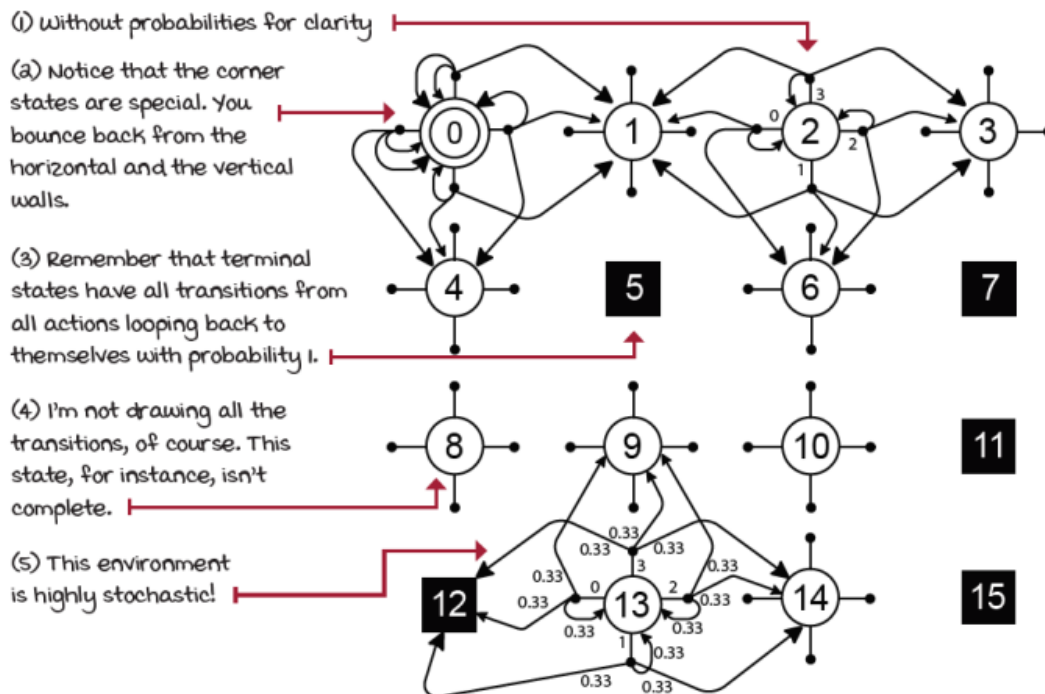
以Frozen Lake为例，其每个状态和在状态上可以采取的行动如下所示：

图 15: Frozen Lake状态和行动图



当Agent采取行动后，环境会根据自身的动态特性，转移到下一个状态，我们称之为转移函数，如下图所示：

图 16: Frozen Lake状态转移图



在状态13时，共有向左、向下、向右、向上编号分别为0、1、2、3的四种行动，当Agent采取行动0向左时，将到达左侧的小黑点，

- 行动0（向左）：到达左侧小黑点，由于冻冰原因，其有如下三种可能性：
 - 33.3%：向左，进入状态12，获取奖励0.0，并且为终止状态，用(0.333, 12, 0.0, True)表示；

- 33.3%: 向下, 由于是边缘节点, 其仍然在状态13, 获取奖励0.0, 不为终止状态, 用(0.333, 13, 0.0, False)表示;
- 33.3%: 向上, 进入状态9, 获取奖励为0.0, 不是终止状态, 用(0.33, 9, 0.0, False)表示;
- 行动1 (向下): 到达下面小黑点, 有如下三种可能性:
 - 33.3% (向下): 由于是边缘节点, 其仍然在状态13, 获得奖励为0.0, 不是终止状态, 用(0.333, 13, 0.0, False)表示;
 - 33.3% (向左): 进入状态12, 获得奖励0.0, 并且为终止状态, 用(0.333, 12, 0.0, True)表示;
 - 33.3% (向右): 进入状态14, 获得奖励0.0, 不是终止状态, 用(0.333, 14, 0.0, False)表示;

我们这里仅举了两个例子, 其余内容读者可以自己补全。环境的状态转移函数如下所示:

$$p(s'|s, a) = P(S_t = s' | S_{t-1} = s, A_{t-1} = a)$$

$$\sum_{s' \in S} p(s'|s, a) = 1, \forall s \in S, \forall a \in A(s) \quad (15)$$

上式表明在任意时刻, 环境状态为 $S_{t-1} = s$, Agent采取行动为 $A_{t-1} = a$ 时, 环境由于具有随机性, 以一个确定的概率分布进入新状态 $S_t = s'$, 并且如果我们将所有可能到达的新状态的概率相加, 其值为1。当Agent根据自己的策略, 在任意时刻采取行动后, 系统会给Agent一个奖励Reward, 其是一个标量, 越大代表该行动决策越好, 越小代表越差, 甚至可以为负值, 代表需要尽力避免的情况。需要注意的是, Agent不仅要关注当前获得的奖励, 还要关注最终获得的累积的奖励, Agent的目标就是使最终获得的累积奖励最大。环境的奖励函数如下表示:

$$r(s, a) = E\left(R_t | S_{t-1} = s, A_{t-1} = a\right) \quad (16)$$

上式表明在 $t-1$ 时刻, 环境状态为 $S_{t-1} = s$, Agent采取行动 $A_{t-1} = a$, 环境在 t 时刻给出奖励 R_t , 由于环境具有随机性, 环境可能进入不同的状态, 从而获得不同的奖励, 而且即使是进入同一个状态, 获得的奖励也有可能不同, 因此在这种情况下, 下的奖励就是所有这种情况下获得奖励的期望值。在 $t-1$ 时刻, 环境状态为 $S_{t-1} = s$, Agent采取行动 $A_{t-1} = a$, 环境进入 $S_t = s'$ 时, 获得的奖励为:

$$r(s, a, s') = E\left(R_t | S_{t-1} = s, A_{t-1} = a, S_t = s'\right) \quad (17)$$

从上式就可以看出, 即使是转移到同一个状态, 也可能获得不同的奖励, 所以我们将奖励定义所有这些值的期望。在上面我们定义在任意时刻, Agent通过与环境交互, 获得的奖励为 R_t , 同时我们知道, Agent的目标是使整个过程, 所有时刻所获得奖励的累加值最大, 我们将其定义为回报 G_t 。但是由于未来具有更大的不确定性, 因此距离当前时间点越近, 获得的奖励就越有价值, 越远则价值越小, 因此我们引入折扣的概念, 如下所示:

$$G_t = R_{t+1} + \gamma R_{t+2} + \gamma^2 R_{t+3} + \dots + \gamma^{k-1} R_{t+k} + \dots + R_T$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} \gamma^k R_{t+k+1} \quad (18)$$

$$= R_{t+1} + \gamma G_{t+1}$$

2.4 状态价值函数

我们假定Agent的策略为 π ，我们定义当Agent在某个状态可以获得的累积奖励的期望值为该状态的值函数，如下所示：

$$v_{\pi}(s) = E_{\pi}(G_t | S_t = s) = E_{\pi}(R_{t+1} + \gamma G_{t+1} | S_t = s) \quad (19)$$

由于上式是求期望值，根据期望值定义，可以得到：

$$v_{\pi}(s) = \sum_a \pi(a|s) \sum_{s',r} p(s', r | s, a) (r + \gamma v_{\pi}(s')) \quad (20)$$

这个公式在本质上是一个递归形式的公式，我们将用递归的方法来求解。

2.5 行动价值函数

我们还需要知道在某个状态下，采取某个行动到底有多好，这就是行动价值函数：

$$q_{\pi}(s, a) = E_{\pi}(G_t | S_t = s, A_t = a) = E_{\pi}(R_{t+1} + \gamma G_{t+1} | S_t = s, A_t = a) \quad (21)$$

根据期望的定义可得：

$$q_{\pi}(s, a) = \sum_{s',r} p(s', r | s, a) (r + \gamma v_{\pi}(s')) \quad (22)$$

这就是所谓的Q函数，需要注意的是这个公式的含义，这个公式表示在状态 $S_t = s$ 时Agent不按照策略 π 情况下采取 $A_t = a$ ，然后Agent会一直采用策略 π ，这种情况下所取得的累积奖励的期望值。

2.6 优势函数

当在状态 $S_t = s$ 时Agent不按照策略 π 情况下采取 $A_t = a$ ，与在状态 $S_t = s$ 时Agent按照策略 π 相比，所取得的累积奖励的期望值的变化量定义为优势函数（Advantage Function）：

$$a_{\pi}(s, a) = q_{\pi}(s, a) - v_{\pi}(s) \quad (23)$$

2.7 优化

我们的目的是要找到最优策略，使得在每个状态下的状态价值函数可以最大，每个行动价值函数也达到最大，需要注意的是，最优策略可能不止一种，但是对于每个状态的状态价值函数值却是唯一的，同时每个状态采取行动的行动价值函数值也是唯一的。我们用 π^* 来表示最优策略，定义如下所示：

$$v_*(s) = \max_{\pi} v_{\pi}(s), \forall s \in S \quad (24)$$

我们可以将 v_{π} 的计算公式代入可得：

$$v_*(s) = \max_a \sum_{s',r} p(s', r | s, a) \left(r + \gamma v_*(s') \right) \quad (25)$$

同样对于行动价值函数来说，最优策略可以定义为：

$$q_*(s, a) = \max_{\pi} q_{\pi}(s, a), \forall s \in S, \forall a \in A \quad (26)$$

代入具体的计算公式可行：

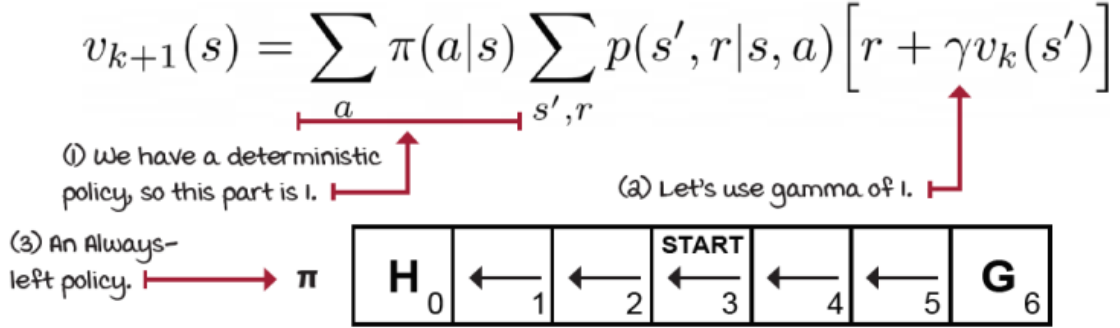
$$q_*(s, a) = \sum_{s',r} p(s', r | s, a) \left(r + \gamma \max_{a'} q_*(s', a') \right) \quad (27)$$

在有了最佳策略定义之后，我们就需要来评估策略，我们首先用状态价值函数来评估策略，我们称之为预测问题：

$$v_{k+1}(s) = \sum_a \pi(a|s) \sum_{s',r} p(s',r|s,a) \left(r + \gamma v_k(s') \right) \quad (28)$$

在上式中，下标 k 代表是第几次迭代，通过迭代，我们可以求出每个状态的状态价值函数的值。我们以Slippery Walk Floor为例，来看上面公式的具体使用：

图 17: Slippery Walk Floor环境示意图



如上图所示，我们的策略是在每个状态均采取向左的行动，我们假设现在我们在状态5处，根据当前策略，我们只有一个行动既向左行动，同时由于环境具有随机性，使我们可能进入到状态4（50%概率）、状态5（33.3%概率）和状态6（16.6%概率），初始时，我们设所有状态的状态价值函数的值为0，如下所示：

$$\begin{aligned}
 v_1^\pi(5) &= \sum_a \pi(a|s) \sum_{s',r} p(s',r|s,a) \left(r + \gamma v_0^\pi(s') \right) \\
 &= \sum_{s',r} p(s',r|s,a) \left(r + \gamma v_0^\pi(s') \right) & 1 \\
 &= p(s'=4, r=0|s=5, a=Left) (r=0 + 1.0 * v_0^\pi(4)) & 2 \\
 &+ p(s'=5, r=0|s=5, a=Left) (r=0 + 1.0 * v_0^\pi(5)) & 3 \\
 &+ p(s'=6, r=1|s=5, a=Left) (r=1 + 1.0 * v_0^\pi(6)) & 4 \\
 &= 0.5 * (0 + 0) + 0.33 * (0 + 0) + 0.16 * (1 + 0) = 0.16
 \end{aligned} \quad (29)$$

公式解读如下所示：

- 第1行：由于本策略只采取向左行动，因此前面的 $\sum_a \pi(a|s)$ 的概率值为1，所以可以去掉；
- 第2行：转移到状态4时的情况；
- 第3行：转移到状态5时的情况；
- 第4行：转移到状态6时的情况；

通过上面的计算过程可以看出，我们将初始状态时所有状态的状态价值函数值设置为0，然后通过上面的迭代算法，就可以算出各个状态的状态价值函数的真实值，并且收敛的速度还是比较快的。我们首先初始化强化学习环境，我们先安装所需的库：

```

1 cd /e/awork/ext
2 git clone https://github.com/mimoralea/gym-walk.git
3 cd gym-walk
4 pip install .

```

Listing 25: 安装依赖库

环境初始化代码如下所示：

```

1 def startup(self):
2     env = gym.make('SlipperyWalkFive-v0')
3     P = env.env.P
4     init_state = env.reset()
5     goal_state = 6
6     LEFT, RIGHT = range(2)
7     pi = lambda s: {
8         0:LEFT, 1:LEFT, 2:LEFT, 3:LEFT, 4:LEFT, 5:LEFT, 6:LEFT
9     }[s]
10    self.print_policy(pi, P, action_symbols('<', '>'), n_cols=7)
11
12    def print_policy(self, pi, P, action_symbols('<', 'v', '>', '^'),
13        n_cols=4, title='Policy:'):
14        print(title)
15        arrs = {k:v for k,v in enumerate(action_symbols)}
16        for s in range(len(P)):
17            a = pi(s)
18            print("| ", end="")
19            if np.all([done for action in P[s].values()
20                for _, _, _, done in action]):
21                print(" ".rjust(9), end=" ")
22            else:
23                print(str(s).zfill(2), arrs[a].rjust(6), end=" ")
24            if (s + 1) % n_cols == 0: print("|")

```

Listing 26: SWF环境初始化(chp001/exp001_002.py)

代码解读如下所示：

- 第2行：生成强化学习环境，使用的是gmy_walk包中定义的环境；
- 第3行：P为我们在前面讨论的结构：

```

1 {
2     si:{
3         ai: [(p, s', r, False)]
4     }
5 }

```

Listing 27: SWF环境初始化(chp001/exp001_002.py)

第一层为以状态为键的字典，每个状态是以行动为键的字典，值为一个列表，代表在当前状态下采取行动后，环境会以多大的概率，转移动新状态，获得的奖励以及新状态是否为终止状态；

- 第4行：重置环境状态，并获取初始状态；
- 第5行：将状态6设置为目标状态；
- 第6行：设置行动LEFT为0，RIGHT为1；
- 第7~9行：定义策略，其为lambda表达式，参数为s，定义了一个字典，策略为取出该字典中以参数s为键的元素，其中s代表状态编号，策略的类型为函数；
- 第10行：打印策略；
- 第12、13行：定义打印策略函数：，
 - pi为策略类型为函数，参数为状态编号，返回值为所采取的行动；
 - P为状态、行动的转移矩阵，即环境的MDP特性；
 - action_symbols 行动的符号表示；
 - n_cols 共有几个状态，这里有7个状态，0和6代表终止状态；
 - title 标题；
- 第15行：arrs的形式为：0: '<', 1: '>';
- 第16行：循环处理每个状态，s为状态编号；
- 第27行：以状态编号为参数，调用策略函数，求出该状态下采取的行动编号（在其他复杂问题中，可能是采取一系列行动的概率分布）；
- 第19、20行：通过如下代表：

```

1 def test001(self, P, state):
2     v1 = [action for action in P[state].values()]
3     print('v1: {0};'.format(v1))
4     v2 = [done for action in P[state].values() for _, _, _, done
5           in action]
6     print('v2: {0};'.format(v2))
7     v3 = np.all(v2)
8     print('v3: {0};'.format(v3))

```

Listing 28: SWF环境初始化(chp001/exp001_002.py)

状态0时：

```

1     v1: [
2         [
3             (0.5000000000000001, 0, 0.0, True),
4             (0.3333333333333333, 0, 0.0, True),
5             (0.16666666666666666, 0, 0.0, True)
6         ],
7         [
8             (0.5000000000000001, 0, 0.0, True),
9             (0.3333333333333333, 0, 0.0, True),
10            (0.16666666666666666, 0, 0.0, True)
11        ]
12    ];
13    v2: [True, True, True, True, True, True];
14    v3: True;

```

Listing 29: SWF环境初始化(chp001/exp001_002.py)

状态1时:

```
1  v1: [  
2      [  
3          (0.5000000000000001, 0, 0.0, True),  
4          (0.3333333333333333, 1, 0.0, False),  
5          (0.1666666666666666, 2, 0.0, False)  
6      ],  
7      [  
8          (0.5000000000000001, 2, 0.0, False),  
9          (0.3333333333333333, 1, 0.0, False),  
10         (0.1666666666666666, 0, 0.0, True)  
11     ]  
12 ];  
13 v2: [True, False, False, False, False, True];  
14 v3: False;
```

Listing 30: SWF环境初始化(chp001/exp001_002.py)

状态2时:

```
1  v1: [  
2      [  
3          (0.5000000000000001, 1, 0.0, False),  
4          (0.3333333333333333, 2, 0.0, False),  
5          (0.1666666666666666, 3, 0.0, False)  
6      ],  
7      [  
8          (0.5000000000000001, 3, 0.0, False),  
9          (0.3333333333333333, 2, 0.0, False),  
10         (0.1666666666666666, 1, 0.0, False)  
11     ]  
12 ];  
13 v2: [False, False, False, False, False, False];  
14 v3: False;
```

Listing 31: SWF环境初始化(chp001/exp001_002.py)

上面的代码就是确定某个状态是否是终止状态:

- 第21行: 当为终止状态时打印空;
- 第23行: 当不为终止状态时, 打印状态编号和行动的符号;

下面我们来看我们取得胜利的的概率, 如下所示:

```
1  def probability_success(self, env, pi, goal_state, n_episodes=100,  
2  max_steps=200):  
3      random.seed(123); np.random.seed(123); env.seed(123)  
4      results = []  
5      for epoch in range(n_episodes):  
6          state, done, steps = env.reset(), False, 0  
7          while not done and steps < max_steps:  
8              state, _, done, h = env.step(pi(state))  
9              steps += 1
```



```

9         results.append(state == goal_state)
10    return np.sum(results)/len(results)

```

Listing 32: 求获得胜利既到达状态6的概率(chp001/exp001_002.py)

代码解读如下所示：

- 第4行：循环指定epoch数；
- 第5行：初始化环境，我们假定开始时Agent在状态3；
- 第6行：完整执行一个epoch，并且如果超过指定步数后，强制终止此epoch；
- 第7行：在当前状态state下，根据策略pi，采取一个行协pi(state)，调用环境的env.step方法，转移到下一个状态，其返回值为：下一状态、奖励、是否完结、附加信息，其中新状态和奖励是根据我们状态转移P来决定的；
- 第8行：统计当前epoch中的步数；
- 第9行：当完成一个epoch后，如果终止状态为Goal状态，则将1加入到results列表中，否则将0加入到results列表中；
- 第10行：results列表中为1的项数除以总项数即为获胜的概率；

接下来我们看一下在该策略下，我们可以获取平均回报：

```

1    def mean_return(self, env, pi, n_episodes=100, max_steps=200):
2        random.seed(123); np.random.seed(123); env.seed(123)
3        results = []
4        for _ in range(n_episodes):
5            state, done, steps = env.reset(), False, 0
6            results.append(0.0)
7            while not done and steps < max_steps:
8                state, reward, done, _ = env.step(pi(state))
9                results[-1] += reward
10               steps += 1
11    return np.mean(results)

```

Listing 33: 求平均回报(chp001/exp001_002.py)

这段代码的逻辑与32类似，只不过是每个epoch开始前，向results列表中加入一个0.0元素，在该epoch中的每一步，都会将所获得奖励reward叠加到该值上，这样可以求出每个epoch的累积奖励，最后我们返回这些累积奖励值的平均值。接下来我们对当前策略进行评估，利用迭代法求出所状态价值函数的值：

```

1    def policy_evaluation(self, pi, P, gamma=1.0, theta=1e-10):
2        prev_V = np.zeros(len(P), dtype=np.float64)
3        while True:
4            V = np.zeros(len(P), dtype=np.float64)
5            for s in range(len(P)):
6                for prob, next_state, reward, done in P[s][pi(s)]:
7                    V[s] += prob * (reward + gamma * prev_V[next_state] *
8                    (not done))
9                if np.max(np.abs(prev_V - V)) < theta:
10                   break
11            prev_V = V.copy()

```

Listing 34: 策略评估(chp001/exp001_002.py)

代码解读如下所示：

- 第2行：初始时将所有状态的状态价值函数的值设置为0，将其作为上一迭代的值；
- 第4行：进行无限次迭代循环；
- 第5行：当前状态的状态价值函数的初始值置为0；
- 第6行：对每个状态进行循环；
- 第7行：对每个状态，在当前策略下采取的行动，根据转移函数P，得到概率prob，下一个状态next_state和奖励reward，以及是否结束标志done；
- 第8行：利用公式 $v_{k+1} = \sum_a \pi(a|s) \sum_{s',r} (r + \gamma v_k)$ 求出新的状态价值函数的值；
- 第8、9行：当求完所有状态的状态价值函数值时，看两次迭代之间状态价值函数的差值是否小于阈值，如果小于则退出最外层的无限循环；
- 第10行：如果二者的差值大于阈值，则将当前值设置为上一次迭代值，重复进行循环；

上面程序的最终结果就是求出所有状态的真实的状态价值函数的值，接下来我们打印状态价值函数的值：

```

1  def print_state_value_function(self, V, P, n_cols=4, prec=3, title='
    State-value function:'):
2      print(title)
3      for s in range(len(P)):
4          v = V[s]
5          print(" | ", end="")
6          if np.all([done for action in P[s].values() for _, _, _, done
    in action]):
7              print("".rjust(9), end=" ")
8          else:
9              print(str(s).zfill(2), '{}'.format(np.round(v, prec)).
    rjust(6), end=" ")
10             if (s + 1) % n_cols == 0: print("|")
11
12  def startup(self):
13      env = gym.make('SlipperyWalkFive-v0')
14      P = env.env.P
15      init_state = env.reset()
16      goal_state = 6
17      LEFT, RIGHT = range(2)
18      pi = lambda s: {
19          0:LEFT, 1:LEFT, 2:LEFT, 3:LEFT, 4:LEFT, 5:LEFT, 6:LEFT
20      }[s]
21      self.print_policy(pi, P, action_symbols=('<', '>'), n_cols=7)
22      prob = self.probability_success(env, pi, goal_state)
23      print('win prob:{0};'.format(prob))
24      g_mean = self.mean_return(env, pi)

```

```

25     print('mean return:{0};'.format(g_mean))
26     V = self.policy_evaluation(pi, P)
27     self.print_state_value_function(V, P, n_cols=7, prec=5)
28     improved_pi = self.policy_improvement(V, P)
29     self.print_policy(improved_pi, P, action_symbols=('<', '>'),
n_cols=7)

```

Listing 35: 打印状态价值函数的值(chp001/exp001_002.py)

这个函数比较简单，我们就不做介绍了。通过对策略的评价，我们得到了每个状态的状态价值函数的值，接下来我们讨论怎样根据这些内容来优化我们的策略。这里我们需要用到行动函数，即在每个状态，我们从所有行动中，找出可以使我们转到的新状态，可以获得最高的状态价值函数，并以此为新的策略：

$$\pi'(s) = \arg \max_a \sum_{s', r} p(s', r | s, a) (r + \gamma v_{\pi}(s')) \quad (30)$$

上式中的 $\pi'(s)$ 就是改进后的策略。策略改进代码如下所示：

```

1  def policy_improvement(V, P, gamma=1.0):
2      Q = np.zeros((len(P), len(P[0])), dtype=np.float64)
3      for s in range(len(P)):
4          for a in range(len(P[s])):
5              for prob, next_state, reward, done in P[s][a]:
6                  Q[s][a] += prob * (reward +
7                      gamma * V[next_state] * (not done))
8      new_pi = lambda s: {s:a for s, a
9          in enumerate(np.argmax(Q, axis=1))
10         }[s]
11      return new_pi

```

Listing 36: 策略改进(chp001/exp001_002.py)

代码解读如下所示：

- 第2行：Q为一个二维数组，第一维是所有的状态，第二维是在某个状态下所有的行动选项，其值为该行动的行动价值函数，初始时设置为0；
- 第3行：循环处理所有状态：
- 第4行：循环处理每个状态下可以采取的所有行动：
- 第5行：根据环境的状态转移函数，在该状态下采取该行动，可以得到：转移到新状态的概率、新状态、奖励、是否为终止状态；
- 第6、7行行：根据公式 $q_{\pi}(s, a) = \sum_{s', r} p(s', r | s, a) (r + \gamma v_{\pi}(s'))$ ；
- 第8~10行：求出新的优化过的策略：

$$\begin{bmatrix} q(s_0, a_0) & q(s_0, a_1) & \dots & q(s_0, a_{k_0}) \\ q(s_1, a_0) & q(s_1, a_1) & \dots & q(s_1, a_{k_1}) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ q(s_l, a_0) & q(s_l, a_1) & \dots & q(s_l, a_{k_l}) \end{bmatrix} \quad (31)$$

上式中每一行代表一个状态，每一列代表在该状态下采取某个行动可以获取到的累积回报，注意每行的数量可能并不相同。`np.argmax(,axis=1)`代表把第2维去掉，即求每一行的最大值，也就是求出某个状态采取什么行动可以获得最大的回报。最终形成每个状态应该采取的行动编号，利用`lambda`表达式形成策略函数。；

- 第11行：返回这个新生成的策略函数：

运行结果如下所示：

图 18: Slippery Walk Floor策略优化一次结果

```
(pydev) E:\awork\iching>python app_main.py
易经量化交易系统 v0.0.1
MDP应用
Policy:
| 01 < | 02 < | 03 < | 04 < | 05 < |
获胜概率: 0.07;
平均回报: 0.07;
State-value function:
| 01 0.00275 | 02 0.01099 | 03 0.03571 | 04 0.10989 | 05 0.33242 |
Policy:
| 01 > | 02 > | 03 > | 04 > | 05 > |
```

如上图可以看出，仅经过一次策略优化，我们就可以得到正确的策略。实际上我们对策略优化之后，我们可以重新进行策略评估，然后再进行优化，形成所谓的策略迭代，程序如下所示：

```
1 def policy_iteration(self, P, gamma=1.0, theta=1e-10):
2     random_actions = np.random.choice(tuple(P[0].keys()), len(P))
3     pi = lambda s: {s:a for s, a in enumerate(random_actions)}[s]
4     while True:
5         old_pi = {s:pi(s) for s in range(len(P))}
6         V = self.policy_evaluation(pi, P, gamma, theta)
7         pi = self.policy_improvement(V, P, gamma)
8         if old_pi == {s:pi(s) for s in range(len(P))}:
9             break
10    return V, pi
11
12 def startup(self):
13    env = gym.make('SlipperyWalkFive-v0')
14    P = env.env.P
15    init_state = env.reset()
16    goal_state = 6
17    LEFT, RIGHT = range(2)
18    pi = lambda s: {
19        0:LEFT, 1:LEFT, 2:LEFT, 3:LEFT, 4:LEFT, 5:LEFT, 6:LEFT
20    }[s]
21    self.print_policy(pi, P, action_symbols=('<', '>'), n_cols=7)
22    prob = self.probability_success(env, pi, goal_state)
23    print('win prob:{0};'.format(prob))
24    g_mean = self.mean_return(env, pi)
25    print('mean return:{0};'.format(g_mean))
26    V = self.policy_evaluation(pi, P)
27    self.print_state_value_function(V, P, n_cols=7, prec=5)
28    improved_pi = self.policy_improvement(V, P)
29    self.print_policy(improved_pi, P, action_symbols=('<', '>'),
30    n_cols=7)
31    # policy iteration
32    optimal_V, optimal_pi = self.policy_iteration(P)
```

```

32     self.print_policy(optimal_pi, P, action_symbols=('<', '>'),
33                       n_cols=7)
    self.print_state_value_function(optimal_V, P, n_cols=7, prec=5)

```

Listing 37: 策略迭代(chp001/exp001_002.py)

代码解读如下所示：

- 第2行：其中 $P[0]=[(0.5, 0, 0.0, \text{True}), \dots, 1:[\dots]]$ ，所以 $\text{tuple}(P[0].\text{keys}())$ 为(0, 1)，因此 np.random.choice 为生成长度为 $\text{len}(P)$ 的所有状态数的数组，数组的每一位由(0,1)中随机抽取；
- 第3行：生成策略的lambda表达式，参数为状态编号；
- 第4行：进入无限循环；
- 第5行：将当前策略保存为原始策略，类型为字典，格式为：状态: 行动；
- 第6行：求出在当前策略下的状态价值函数；
- 第7行：根据状态价值函数得到优化后的策略；
- 第8、9行：将优化后策略也转为格式为状态: 行动的字典，与原来的策略形成的字典进行比较，如果相等则意味着找到了最佳策略，则退出无限循环，否则继续循环优化；

运行结果如下所示：

图 19: Slippery Walk Floor策略迭代结果

```

(pydev) E:\awork\iching>python app_main.py
易经量化交易系统 v0.0.1
MDP应用
Policy:
| 01 < | 02 < | 03 < | 04 < | 05 < |
获胜概率: 0.07;
平均回报: 0.07;
State-value function:
| 01 0.00275 | 02 0.01099 | 03 0.03571 | 04 0.10989 | 05 0.33242 |
Policy:
| 01 > | 02 > | 03 > | 04 > | 05 > |
Policy:
| 01 > | 02 > | 03 > | 04 > | 05 > |
State-value function:
| 01 0.66758 | 02 0.89011 | 03 0.96429 | 04 0.98901 | 05 0.99725 |

```

上面讲的是策略迭代算法（PI: Policy Iteration），其核心思想是先根据策略求出状态价值函数，然后根据状态价值函数，在每个状态下选择能够达到最大状态价值函数状态的行动，形成优化后的策略，然后循环执行上述过程。但是这种方法通常收敛速度较慢，我们接下来介绍值迭代算法（VI: Value Iteration）。

2.8 值迭代（VI）

值迭代（VI: Value Iteration）的核心思想是先令所有状态的状态价值函数值为0.0，在每个状态下求出所采取的行动的回报，找到得到最大回报的行动，根据下面的公式确定新的状态价值函数值：

$$v_{k+1} = \max_a \sum_{s', r} p(s', r | s, a) \left(r + \gamma v_k(s') \right) \quad (32)$$

代码实现如下所示:

```
1 def value_iteration(self, P, gamma=1.0, theta=1e-10):
2     V = np.zeros(len(P), dtype=np.float64)
3     while True:
4         Q = np.zeros((len(P), len(P[0])), dtype=np.float64)
5         for s in range(len(P)):
6             for a in range(len(P[s])):
7                 for prob, next_state, reward, done in P[s][a]:
8                     Q[s][a] += prob * (reward + gamma * V[next_state]
9 * (not done))
10                if np.max(np.abs(V - np.max(Q, axis=1))) < theta:
11                    break
12            V = np.max(Q, axis=1)
13        pi = lambda s: {s:a for s, a in enumerate(np.argmax(Q, axis=1))}[
14        s]
15        return V, pi
16
17 def startup(self):
18     env = gym.make('SlipperyWalkFive-v0')
19     P = env.env.P
20     init_state = env.reset()
21     goal_state = 6
22     LEFT, RIGHT = range(2)
23     pi = lambda s: {
24         0:LEFT, 1:LEFT, 2:LEFT, 3:LEFT, 4:LEFT, 5:LEFT, 6:LEFT
25     }[s]
26     self.print_policy(pi, P, action_symbols=('<', '>'), n_cols=7)
27     prob = self.probability_success(env, pi, goal_state)
28     print('win prob: {0};'.format(prob))
29     g_mean = self.mean_return(env, pi)
30     print('mean return: {0};'.format(g_mean))
31     V = self.policy_evaluation(pi, P)
32     self.print_state_value_function(V, P, n_cols=7, prec=5)
33     improved_pi = self.policy_improvement(V, P)
34     self.print_policy(improved_pi, P, action_symbols=('<', '>'),
35 n_cols=7)
36     # policy iteration
37     print('PI: Policy Iteration')
38     optimal_V, optimal_pi = self.policy_iteration(P)
39     self.print_policy(optimal_pi, P, action_symbols=('<', '>'),
40 n_cols=7)
41     self.print_state_value_function(optimal_V, P, n_cols=7, prec=5)
42     print('VI: Value Iteration')
43     V2, pi2 = self.value_iteration(P)
44     self.print_policy(optimal_pi, P, action_symbols=('<', '>'),
45 n_cols=7)
46     self.print_state_value_function(optimal_V, P, n_cols=7, prec=5)
```

Listing 38: 策略迭代(chp001/exp001_002.py)

代码解读如下所示：

- 第2行：初始状态下状态价值函数值为0.0；
- 第3行：无限循环求解状态价值函数和策略；
- 第4行：初始化 $q(s, a)$ 函数，第0维是状态，第1维是行动，初始值为0.0；
- 第5、6行：循环处理每个 (s, a) 组合；
- 第7行：当在状态 s 采取行动 a 后，环境会转移到新状态 s' 并给出奖励 r ，用环境 \mathbf{P} 中的 $(prob, s', r, isTerminal)$ 来表示，其中 $prob$ 为转移到新状态 s' 并获取奖励 r 的概率，最后一项表示 s' 是否是终止状态；
- 第8行：利用公式 $q(s, a) = \sum_{s', r} p(s', r | s, a)(r + \gamma v_{\pi}(s'))$ ，求出Q函数的值；
- 第9、10行：如果上一步得到状态价值函数值，与Q函数值对每个状态采取行动可以获得最大Q函数值所组成的新状态价值函数值之间的差距小于阈值时终止最外层无限循环；
- 第11行：对于每个状态，用采取所有行动中取得最大Q值作为状态价值函数的值；
- 第12行：当结束无限循环之后，将策略定为在每个状态，取可以取得最大Q值的行动作为应该选取的行动；

第2章 Bandit问题

Abstract

在本章中我们将介绍Bandit问题，就是Agent并不知道MDP环境，即第1章中的P，Agent可以通过适当的策略来获得最优策略。

3 Bandit问题概述

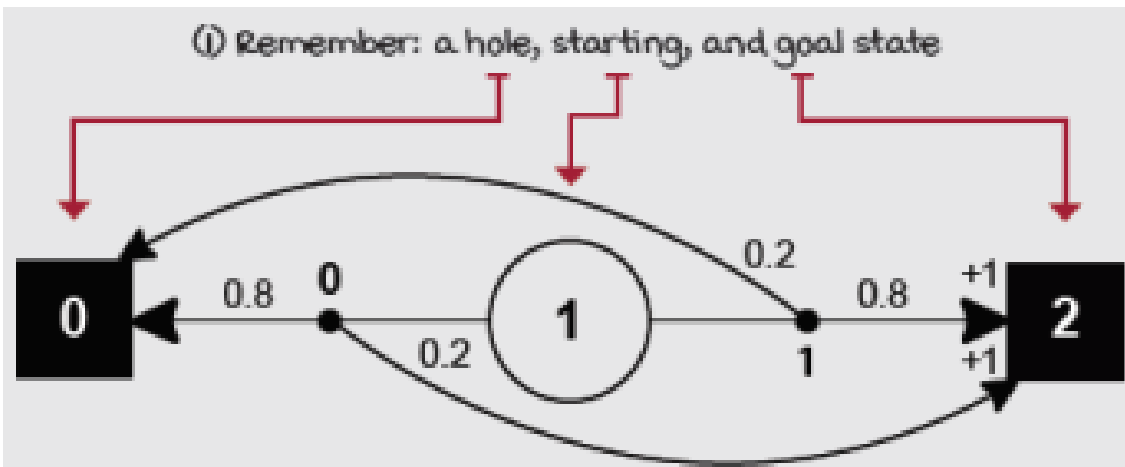
我们以SBW（Slippery Bandit Walk）为例，如下图所示：

图 20: Slippery Bandit Walk环境



初始时，Agent位于状态S，左侧状态H为一个洞，是终止状态，获得奖励为0.0；右侧状态G为目标，获得奖励为+1.0，是终止状态。其MDP环境如下所示：

图 21: Slippery Bandit Walk环境之MDP



如上图所示：

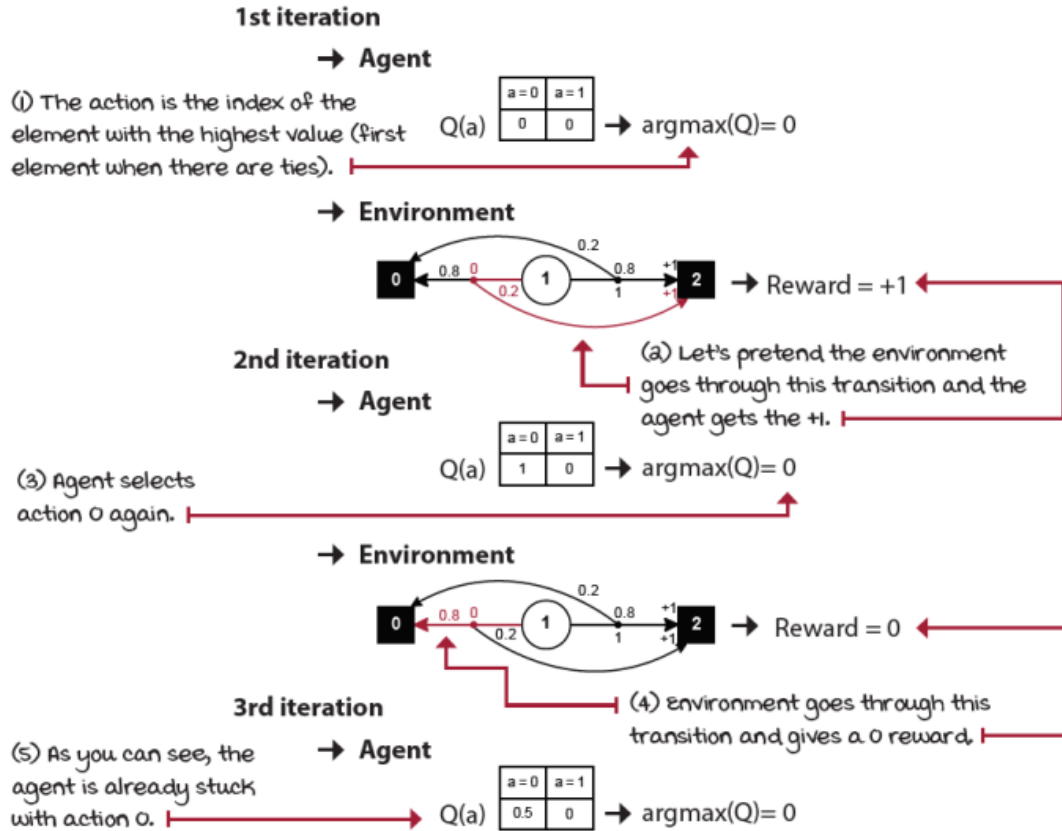
- Agent在状态S时，选择行动0（向左），进入左侧小黑点：
 - 以80%概率进入状态H，获得奖励0.0并终止；
 - 以20%概率进入状态G，获得奖励+1.0并终止；
- Agent在状态S时，选择行动1（向右），进入右侧小黑点：
 - 以80%概率进入状态G，获得奖励+1.0并终止；
 - 以20%概率进入状态H，获得奖励0.0并终止；

但是与第1章不同，我们这里假设我们并不知道这个转移函数。我们要研究在这种情况下，Agent怎样找到最佳策略。

3.1 贪婪策略

Agent会首先随机选择一个行动，如果该行动产生正的奖励，之后就一直坚持采用该行动，以SBW环境为例，如图所示：

图 22: SBW环境之Greedy Policy



我们将在状态S能采取的所有行动的Q值设为0，即 $\{0 : 0.0, 1 : 0.0\}$ ，假设我们初始时在状态S选择行动0（向左），进入左侧实心小点，此时环境随机进入状态G，因此我们得到了+1.0的奖励，更新Q值为 $\{0 : 1.0, 1 : 0.0\}$ ，因为我们看到采取行动0可以获得1.0的奖励，因此我们会一直选择行动0。当第2次时，我们仍然选择行动0，此时环境随机地转到状态H，此时我们获得的奖励为0.0，我们重新计算Q值： $q = \frac{1.0+0.0}{2} = 0.5$ ，式中分子表示我们分别获得了+1.0和0.0的奖励，分母为我们进行试验的次数。当第3次时，我们仍然会选择行动0，此时环境随机地转到状态H，我们获得的奖励为0.0，我们重新计算Q值： $q = \frac{1.0+0.0+0.0}{3} = 0.333333$ ，分子表示历次试验获得的奖励，分子为试验次数。最终我们策略的Q值为0.2左右。

第二篇时序信号分析

第三篇 量化交易平台

第四篇 50ETF期权

第五篇 50ETF量化交易

第六篇常用工具

第601章强化学习环境

Abstract

采用创新方式运行gym。

4 强化学习环境概述

我们以SBW（Slippery Bandit Walk）为例，如下图所示：

4.1 Docker模式

如下所示：

```
1 # install docker
2 https://docs.docker.com/engine/install/ubuntu/
3 # install nvidia-docker
4 https://docs.nvidia.com/datacenter/cloud-native/container-toolkit/install
   -guide.html#docker
5 # download image
6 sudo nvidia-docker pull mimoralea/gdrl:v0.14
7 # startup image
8 sudo nvidia-docker run -it --rm -p 8888:8888 -v /home/ps/yantao/:/mnt/
   yantao/ mimoralea/gdrl:v0.14 -d /bin/bash
9 # jupyter notebook access
10 http://192.168.2.66:8888
11 # list image list
12 sudo nvidia-docker ps
13 # enter specific image: mimoralea/gdrl:v0.14
14 sudo nvidia-docker exec -it image-container-id /bin/bash
```

Listing 39: 张量expand示例(chpZ01/tensor.py)

注意：由于已经安装了Docker，所以需要忽略第一个命令。

5 附录X

参考文献