# 强化学习数学原理

## 第一章基本概念

- grid-world example ： 一个机器人走网格的经典例子，机器人尽量避免进入forbidden grid、尽量减少拐弯、不要走出边界、.....
- state: 状态，表示为一个节点，在grid-world中可以表示为一个格子（也可以添加其他信息到状态，如速度等）
- state space：状态空间，所有状态的集合。
- action：行动，能够使得状态变化的动作。（如向上/下/左/右移动，等）
- action space：行动的集合，通常依赖于当前的状态。
- state transition：状态转移，从一个状态移动到另一个状态。

  $s_5 \xrightarrow{a_1} s_6$ 表示从状态$s_5$ 经过动作$a_1$ 到达状态 $a_6$
- state transition probability: 状态转移的条件概率。（例如：$p(s_2|s_1,a_2)=0.8$ 代表在状态$s_1$，行动$a_2$ 下，$s_2$的概率是0.8)
- Policy: 策略，用箭头来表示。表示在某个状态更倾向于走哪个action

  $\pi(a_1|s_1)=0,\pi(a_2|s_1)=1,\pi(a_3|s_1)=0,\pi(a_4|s_1)=0$ 表示在状态$s_1$ 有1的概率进行行动$a_2$ 。显然$\sum_{i=1}^{k}\pi(a_i|s_1)=1$
- reward: 他是一个实数，代表我们的奖励，如果$reward>0$,则代表希望它发生，$reward<0$则表示不希望它发生。

  例如我们可以将“尝试逃出边界的时候，我们设$r_{bound}=-1$，将到达目的地设为$r_{target}=1$

  因此我们可以通过设计reward来实现到达目的地。

  $p(r=-1|s_1,a_1)=1,p(r\neq-1|s_1,a_1)=0$ 表示在状态$s_1$ 进行$a_1$ 得到-1的reward的概率是1，得到不是-1的reward的概率是0
- trajectory：一个由state、action、reward连接成的链。
- return：一个trajectory中所有的reward的总和。通过比较return来评估策略是好是坏

- Discounted rate: $\gamma \in [0,1)$。$discounted\ return = r_0 + \gamma r_1 + \gamma^2 r_2 + \dots$，$\gamma$通常表示是否更看重未来，$\gamma$越小，则越看重现在。
- Episode: 能够到达terminal states(停止状态) 的trajectory。一个Episode也叫一个Episode task与之对应的是continuing task（指永无止境的任务）。

## Markov decision process（MDP）

- 集合：
  - State：状态集合
  - Action：对于每个状态s的行动集合$A(s)$
  - Reward：奖励集合$R(s,a)$
- 概率要素(probability distribution)：
  - State transition probability:$p(s'|s,a)$ 在状态s下，进行行动a，到达另一个状态$s'$的概率。
  - Reward probability: $p(r|s,a)$在状态s下，进行行动a，得到r的奖励的概率。
  - Policy: $\pi(a|s)$ 在状态s下，进行行动a的概率。

MDP的独特性质（markov property）：与历史无关

$p(s_{t+1}|a_{t+1}s_t \dots a_1 s_0) = p(s_{t+1}|a_{t+1}, s_t)$

$p(r_{t+1}|a_{t+1}s_t \dots a_1 s_0) = p(r_{t+1}|a_{t+1}, s_t)$

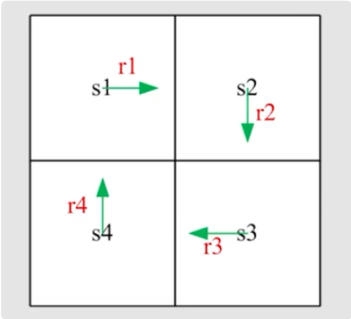
# 第二章 贝尔曼公式

## return

为什么return很重要？因为return评估的策略的好坏。

如何计算return？用$v_i$ 表示从$s_i$ 出发得到的return。

以下面的状态图为例：




- 那么根据定义有

  $v_1 = r_1 + \gamma r_2 + \gamma^2 r_3 + \dots$

  $v_2 = r_2 + \gamma r_3 + \gamma^2 r_4 + \dots$

  $v_3 = r_3 + \gamma r_4 + \gamma^2 r_1 + \dots$

  $v_4 = r_4 + \gamma r_1 + \gamma^2 r_2 + \dots$

- 也可以递推得到(Booststrapping):一个状态依赖于其他状态

  $v_1 = r_1 + \gamma(r_2 + \gamma r_3 + \dots) = r_1 + \gamma v_2$

  $v_2 = r_2 + \gamma(r_3 + \gamma r_4 + \dots) = r_2 + \gamma v_3$

  $v_3 = r_3 + \gamma(r_4 + \gamma r_1 + \dots) = r_3 + \gamma v_4$

  $v_4 = r_4 + \gamma(r_1 + \gamma r_2 + \dots) = r_4 + \gamma v_1$

  然后就有$v = r + \gamma P * v$ ， 这里的$v, r$ 是向量， $P$是变换矩阵。于是就能求解得出v的值。

## state value

$S_t \overset{A_t}{\to} R_{t+1}, S_{t+1}$ ,指在$S_t$ 下经过$A_t$ 得到$(R_{t+1}, S_{t+1})$

**state value：** $v_\pi(s) = \mathbb{E}[G_t | S_t = s]$当前状态为s的时候所有的return的期望值。

考虑下面的trajectory:$S_t \overset{A_t}{\to} R_{t+1}, S_{t+1} \overset{A_{t+1}}{\to} R_{t+2}, S_{t+2} \overset{A_{t+2}}{\to} R_{t+3}, S_{t+3} \dots$

那么$G_t = R_{t+1} + \gamma R_{t+2} + \gamma^2 R_{t+3} + \dots = R_{t+1} + \gamma G_{t+1}$

则有

$$v_\pi(s) = \mathbb{E}[G_t | S_t = s]$$
$$= \mathbb{E}[R_t | S_t = s] + \mathbb{E}[G_{t+1} | S_t = s]$$

公式中的第一项

$$\mathbb{E}[R_{t+1} | S_t = s] = \sum_a [\pi(a|s) \sum_r p(r|s,a) r]$$

公式中的第二项

$$\mathbb{E}[G_{t+1}|S_t=s]=\sum_{s'}\{\mathbb{E}[G_{t+1}|S_t=s,S_{t+1}=s']p(s'|s)\}$$
$$=\sum_{s'}\mathbb{E}[G_{t+1}|S_{t+1}=s']p(s'|s)$$
$$=\sum_{s'}\{v_\pi(s')p(s'|s)\}$$
$$=\sum_{s'}\{v_\pi(s')\sum_a[p(s'|s,a)\pi(a|s)]\}$$

- 于是，贝尔曼公式：

$$v_\pi(s)=\mathbb{E}[R_t|S_t=s]+\mathbb{E}[G_{t+1}|S_t=s]$$
$$=\sum_a\pi(a|s)[\sum_r p(r|s,a)r+\gamma\sum_{s'}p(s'|s,a)v_\pi(s')]$$

- 之后我们列出每个$s_i$对应的$v_\pi(s_i)$的公式，然后求解方程组即可得到每个状态的state value。

## 贝尔曼公式的矩阵/向量形式

- 由贝尔曼公式：$v_\pi(s)=\sum_a\pi(a|s)[\sum_r p(r|s,a)r+\gamma\sum_{s'}p(s'|s,a)v_\pi(s')]$

  可以简略写为$v_\pi(s)=r_\pi(s)+\gamma\sum_{s'}p_\pi(s'|s)v_\pi(s')$，(这里有

  $r_\pi(s)\iff\sum_a\pi(a|s)\sum_r p(r|s,a)r$

  $p_\pi(s'|s)\iff\sum_a\pi(a|s)p(s'|s,a)$ )

  对s进行标号得出$v_\pi(s_i)=r_\pi(s_i)+\gamma\sum_{s_j}p_\pi(s_j|s_i)v_\pi(s_j)$

  于是化为矩阵向量形式：$v_\pi=r_\pi+\gamma P_\pi v_\pi$ ,这里的$v_\pi,r_\pi$ 均为向量，$P_\pi$ 为状态转移矩阵($[P_\pi]_{i,j}=p_\pi(s_j|s_i)$ )

- 求解贝尔曼公式，进而得到state value是评判策略好坏(policy evaluation)的关键。

- 求解贝尔曼公式：
  - $v_\pi=(I-\gamma P_\pi)^{-1}r_\pi$ ,很简洁的公式，但是求逆太难算了。
  - 迭代求法：$v_{k+1}=r_\pi+\gamma P_\pi v_k$

    当$k\to\infty$时 ,有$v_k=v_\pi$

## action value

从一个状态出发， 选择了一个action之后， 得到的return的期望。

在做判断时，根据Action value的大小来判断选择哪个Action。

求解状态s下进行行动a的action value($q_\pi(s,a)$)

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

计算action value：

1. 根据state value求出
2. 直接计算action value

# 第三章 贝尔曼最优公式

- 直观上地说，选择action value比较大的action，将他设置为1，其他设置为0。不断如此迭代，就可以找到最优的策略。
- 严格证明则需要贝尔曼最优公式。

如果对于所有的s，都有$v_{\pi_1}(s)\geq v_{\pi_2}(s) for\ all\ s\in S$ ,那么说$\pi_1$ 是比$\pi_2$要好的。

1. 问题一：这样最优的策略是否存在？
2. 问题二：这个最优的策略是唯一的吗？
3. 问题三：策略是stochastic还是deterministic？
4. 问题四：如何找到这么一个策略？

## 贝尔曼最优公式

- 贝尔曼最优公式堂堂登场！

$$v(s)=max(\sum_a(\pi(a|s)q(s,a))),s\in S$$

可以发现，假设当$a=a'$时，$q(s,a)$ 最大，那么令$\pi(a|s)=\begin{cases}1 & a=a'\\0 & a\neq a'\end{cases}$ ,就会得到最大的$v(s)$。

即$v(s)=max(\sum_a(\pi(a|s)q(s,a)))=\max_{a\in A(s)}(q(s,a))$

- 将公式变为矩阵-向量形式

$$v = \max_{\pi}(r_\pi + \gamma P_\pi v)$$

我们设一个映射$f(v) := \max_{\pi}(r_\pi + \gamma P_\pi v)$ ,那么原式就可以化为$v = f(v)$

## 一些概念

FixedPoint 不动点： 对于映射$f : X \to X$ ， 存在$x \in X, f(x) = x$ ， 那么x是不动点。

Contraction mapping：在映射后两点的距离更小。
$||f(x_1) - f(x_2)|| = \gamma||x_1 - x_2||, \gamma < 1$ 。(例如$f(x) = 0.5x$ 就是一个contraction mapping)

## contraction Theorem

如果$f$是一个contraction mapping。那么一定有

1. 存在一个$x*$，满足$f(x^*) = x^*$ ， 即$x^*$ 是一个FixedPoint
2. 这样的$x^*$ 一定有且只有一个
3. 可以通过迭代算法求出这个$x^*$：$x_{k+1} = f(x_k)$ ， 当$k \to \infty$ 时，有$x_k \to x^*$

例如$f(x) = 0.5x$ ,那么$f(0) = 0, x^* = 0$ ,给出任意x，在不断进行$x = 0.5x$ 迭代后，会收敛于0

## 求解贝尔曼最优公式

可以证明在贝尔曼最优公式中$f(v) = \max_{\pi}(r_\pi + \gamma P_\pi v)$ 是一个contraction mapping，那么$v = f(v)$ 。于是就可以通过迭代算法来求解出来。

假设$v^*$ 是贝尔曼最优公式的解，即是他的不动点。即$v^* = \max_{\pi}(r_\pi + \gamma P_\pi v^*)$

所以就可以利用contraction Theorem中的迭代算法来求得$v^*$

所以**贝尔曼最优公式就是特殊的贝尔曼公式**。

# 第四章 Value iteration & Policy iteration

## Value iteration algorithm(值迭代算法)

值迭代算法就是根据贝尔曼最优公式来迭代求解优化问题。

$v_{k+1} = f(v_k) = \max_{\pi}(r_\pi + \gamma P_\pi v_\pi)$

---

**求解步骤：**最开始生成一个任意的状态$v_0$ ,不断循环以下两步

1. policy update更新策略：$\pi_{k+1} = \arg\max_{\pi}(r_\pi + \gamma P_\pi v_k)$
2. value update 更新值: $v_{k+1} = r_{\pi_{k+1}} + \gamma P_{\pi_{k+1}} v_k$

需要注意的是$v_k$ 只是一个值，并不是一个state value。

不断迭代直到$v_k - v_{k-1}$ 足够小就认为已经收敛了。

## Policy iteration algorithm(策略迭代算法)

最开始生成一个任意策略$\pi_0$

1. policy evalution(PE): $v_{\pi_k} = r_{\pi_k} + \gamma P_{\pi_k} v_{\pi_k}$
2. policy improvement(PI): $\pi_{k+1} = \arg\max_{\pi}(r_\pi + \gamma P_\pi v_{\pi_k})$

整体过程即$\pi_0 \overset{PE}{\rightarrow} v_{\pi_0} \overset{PI}{\rightarrow} \pi_1 \overset{PE}{\rightarrow} v_{\pi_1} \overset{PI}{\rightarrow} \pi_2 \overset{PE}{\rightarrow} v_{\pi_2} \overset{PI}{\rightarrow} \pi_3 \ldots$

- 几个核心问题：
  1. 在policy evaluation中如何求解 state value？
  2. 为什么进行PI后， $\pi_{k+1}$比$\pi_k$ 更优？
  3. 为什么最终能找到最优解？
  4. Policy iteration和Value iteration 有什么关系？
- Q1: 有两种方法(即求解贝尔曼公式的两种方法)：
  1. closed-form solution : $v_{\pi_k} = (I - \gamma P_{\pi_k})^{-1} r_{\pi_k}$
  2. iterative solution: $v_{\pi_k}^{j+1} = r_{\pi_k} + \gamma P_{\pi_k} v_{\pi_k}^{(j)}, j = 0, 1, 2, \ldots$

  Q2: $\pi_{k+1} = \underset{\pi}{argmax}(r_\pi + \gamma P_\pi v_{\pi_k})$ ， 因为$\pi_{k+1}$ 一定比$\pi_k$ 要更大

  Q3： $v_{\pi_0} \leq v_{\pi_1} \leq v_{\pi_2} \leq \ldots \leq v_{\pi_k} \leq v^*$

  Q4: 二者是两个极端

## truncated policy iteration algorithm

他是值迭代算法和策略迭代算法的推广，值迭代算法和策略迭代算法是truncated policy iteration algorithm的极端情况。

Policy iteration: $\pi_0 \overset{PE}{\rightarrow} v_{\pi_0} \overset{PI}{\rightarrow} \pi_1 \overset{PE}{\rightarrow} v_{\pi_1} \overset{PI}{\rightarrow} \pi_2 \overset{PE}{\rightarrow} v_{\pi_2} \overset{PI}{\rightarrow} \pi_3 \ldots$

Value iteration: $u_0 \overset{PU}{\rightarrow} \pi_1' \overset{VU}{\rightarrow} u_1 \overset{PU}{\rightarrow} \pi_2' \overset{VU}{\rightarrow} u_2 \ldots$

| | Policy Iteration algorithm | Value iteration algorithm | Comments |
|---|---|---|---|
| 1) Policy: | $\pi_0$ | N/A | |
| 2) Value: | $v_{\pi_0} = r_{\pi_0} + \gamma P_{\pi_0} v_{\pi_0}$ | $v_0 := v_{\pi_0}$ | |
| 3) Policy: | $\pi_1 = \underset{\pi}{argmax}(r_\pi + \gamma P_\pi v_{\pi_0})$ | $\pi_1 = \underset{\pi}{argmax}(r_\pi + \gamma P_\pi v_0)$ | 两个算法的第一步Policy是相同的。 |
| 4) Value: | $v_{\pi_1} = r_{\pi_1} + \gamma P_{\pi_1} v_{\pi_1}$ | $v_1 = r_{\pi_1} + \gamma P_{\pi_1} v_0$ | 两个算法求$v_\pi$ 的方法是不一样的 |
| 5) Policy: | $\pi_2 = \underset{\pi}{argmax}(r_\pi + \gamma P_\pi v_{\pi_1})$ | $\pi_2' = \underset{\pi}{argmax}(r_\pi + \gamma P_\pi v_1)$ | |
| ... | ... | ... | ... |

区别在于计算$v_{\pi_1}$的时候是使用贝尔曼公式求，还是直接继承上一步的求法。

考虑公式$v_{\pi_1} = r_{\pi_1} + \gamma P_{\pi_1} v_{\pi_1}$

$$
\begin{aligned}
v_{\pi_1}^{(0)} &= v_0 \\
v_{\pi_1}^{(1)} &= r_{\pi_1} + \gamma P_{\pi_1} v_{\pi_1}^{(0)} && \rightarrow value\ iteration\ v_1 \\
v_{\pi_1}^{(2)} &= r_{\pi_1} + \gamma P_{\pi_1} v_{\pi_1}^{(1)} \\
&\cdots \\
v_{\pi_1}^{(j)} &= r_{\pi_1} + \gamma P_{\pi_1} v_{\pi_1}^{(j-1)} && \rightarrow truncated\ policy\ iteration\ \overline{v}_1 \\
&\cdots \\
v_{\pi_1}^{(\infty)} &= r_{\pi_1} + \gamma P_{\pi_1} v_{\pi_1}^{(\infty)} && \rightarrow policy\ iteration\ v_{\pi_1}
\end{aligned}
$$

可以发现，value iteration就是在得到第一个$v$ 后就进行下一步操作；policy iteration则是不断你迭代直到收敛。 那么 truncated policy iteraion则是二者的结合，选择在中间的某一步停下。

# 第五章 MonteCarlo learning

蒙特卡洛方法是一个model-free RL的方法。（前面讲的算法都是model-based RL方法）

## 抛硬币例子

假设抛硬币问题： 抛一个硬币，正面价值为1，反面为-1，期望是多少？

那么 model-based方法：直接计算数学期望
$\mathbb{E}[X] = \sum_x xp(x) = 1 * 0.5 + (-1) * 0.5 = 0$

结果很精确，但是通常很难找到这样的数学模型。
model-free方法：做实验，随机扔硬币，然后统计值，最终可以得到近似值。

## 一个简单的MC-based RL算法

（我们称这个算法为MC-basic算法）

可以通过改变Policy iteration算法来变成model-free 算法。

1. policy evalution(PE): $v_{\pi_k} = r_{\pi_k} + \gamma P_{\pi_k} v_{\pi_k}$
2. policy improvement(PI): $\pi_{k+1} = \underset{\pi}{argmax}(r_\pi + \gamma P_\pi v_{\pi_k})$

$\pi_{k+1}(s) = \underset{\pi}{argmax} \sum_a \pi(a|s) q_{\pi_k}(s,a)$

关键在于计算$q_{\pi_k}(s,a)$，两种方法：

1. 需要模型：$q_{\pi_k}(s,a)=\sum_r p(r|s,a)r+\gamma\sum_{s'}p(s'|s,a)v_{\pi_k}(s')$

2. 不需要模型：$q_{\pi_k}(s,a)=\mathbb{E}[G_t|S_t=s,A_t=a]$

基于蒙特卡洛的model即通过大量采样来估计$G_t$

## MC exploring Starts

遵循策略$\pi$，我们会得到一个episode如下：

$s_1 \xrightarrow{a_2} s_2 \xrightarrow{a_4} s_1 \xrightarrow{a_2} s_2 \xrightarrow{a_3} s_5 \xrightarrow{a_1} \dots$

定义Visit：一个episode中访问的$(state,action)$对的数量。

在MC-basic方法中，使用的是Initial-visit method，即只考虑$s_1 \xrightarrow{a_2}$这一个(state,action)对。这导致了没有充分利用了整个episode。

那么对于一个episode:

$$
\begin{array}{lll}
s_1 \xrightarrow{a_2} s_2 \xrightarrow{a_4} & s_1 \xrightarrow{a_2} s_2 \xrightarrow{a_3} & s_5 \xrightarrow{a_1} \dots [original\ episode] \\
s_2 \xrightarrow{a_4} & s_1 \xrightarrow{a_2} s_2 \xrightarrow{a_3} & s_5 \xrightarrow{a_1} \dots [episode\ starting\ from (s_2,a_4)] \\
 & s_1 \xrightarrow{a_2} s_2 \xrightarrow{a_3} & s_5 \xrightarrow{a_1} \dots [episode\ starting\ from (s_1,a_2)] \\
 & s_2 \xrightarrow{a_3} & s_5 \xrightarrow{a_1} \dots [episode\ starting\ from (s_2,a_3)] \\
 & & s_5 \xrightarrow{a_1} \dots [episode\ starting\ from (s_5,a_1)]
\end{array}
$$

因此我们就可以通过这一个episode来估计$(s_1,a_2),(s_2,a_4),(s_1,a_2),(s_2,a_3),(s_5,a_1),\dots$的action value。而不是仅仅用于$(s_1,a_2)$。

- first-visist：指在遇到相同的(state,action)时，只使用第一次遇到的。
- every-visit：指在遇到相同的(state,action)时，每个都做考虑，最后综合起来。

generalized policy iteration(广义策略迭代)：指并不是精确求解的代码，使用迭代来得到策略，像truncated policy iteration algorithm和 MC都属于generalized policy iteration 。

## soft policies

因为我们从一个(state,action)出发能够到达多个状态，所以我们也就没必要把所有的(state,action)都设置为出发点了。

那么如何选择出发点？

$\epsilon - greedy\ policies$：

$$\pi(a|s) = \begin{cases} 1 - \frac{\epsilon}{|A(s)|}(|A(s)| - 1) & for\ the\ greedy\ action \\ \frac{\epsilon}{|A(s)|} & for\ the\ other\ |A(s)| - 1\ actions \end{cases}$$

这里的greedy action指的就是$q_\pi(s, a^*)$ 最大的那个action。($\epsilon$通常很小)， 这样在保证greedy action被选择的概率较大的情况下，其他的action同样有一些概率被选择。

- $\epsilon - greedy\ policies$能够平衡$exploitation$和$exploration$

exploitation：指的是充分利用value，贪心于当前。

exploration：指的是探索当前非最佳的情况，可能会找到未来更优的情况。

这样选择一个(state,action)作为出发点，就可以通过exploration来得到所有的(state,action)的策略。

## MC $\epsilon$-Greedy algorithm

对于之前的方法，只会选择最优的action，即$a^*$ 。

$\pi_{k+1}(s) = arg\ \max_{\pi \in \Pi_\epsilon} \sum_a \pi(a|s) q_{\pi_k}(s, a)$

那么对于MC $\epsilon$-Greedy algorithm

$$\pi(a|s) = \begin{cases} 1 - \frac{\epsilon}{|A(s)|}(|A(s)| - 1) & a = a_k^* \\ \frac{\epsilon}{|A(s)|} & a \neq a_k^* \end{cases}$$

便是给了其他action一个较小的$\frac{\epsilon}{|A(s)|}$

$\epsilon$-Greedy algorithm 中的$\epsilon$ 较大的时候，探索性很强，但是最优性比较差。

我们可以通过起初设置较大的$\epsilon$，然后逐渐减小他来平衡探索性和最优性。

# 第六章 Stochastic Approximation & Stochastic Grandient Descent

Stochastic Approximation（随机近似理论） 和Stochastic Grandient Descent（随机梯度下降）

## Motivating example

mean estimation problem：

1. 考虑有一个随机变量 X
2. 目标是计算期望 $\mathbb{E}[X]$
3. 假设我们有N个采样$\{x_i\}_{i=1}^N$
4. 那么期望可以被估计为$\mathbb{E}[X] \approx \overline{x} := \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i$
5. 当$N \to \infty$，$\overline{x} \to \mathbb{E}[X]$

怎么计算$mean\ \overline{x}$？

方法一： 计算所有的总和，然后除以$N$

方法二（iterative mean estimation)：实时估计$\overline{x}$，当出现新的$x_i$时，更新$\overline{x}$

我们规定$w_{k+1}$ 表示前$k$个x的均值。即$w_{k+1} = \frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k} x_i$ 。（一般设置$w_1 = x_1$)

那么根据如下公式

$$
\begin{aligned}
w_{k+1} = \frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k} x_i &= \frac{1}{k}\left(\frac{1}{k-1}\sum_{i=1}^{k-1} x_i + x_k\right) \\
&= \frac{1}{k}((k-1)w_k + x_k) = w_k - \frac{1}{k}(w_k - x_k)
\end{aligned}
$$

我们就可以迭代地计算$w_{k+1}$ 了。

于是我们稍作改进，把$\frac{1}{k}$ 换成$\alpha$ .于是我们就可以通过调整$\alpha$ 来改变公式的计算了。

$$
w_{k+1} = w_k - \alpha(w_k - x_k)
$$

## Robbins-Monro algorithm

> stochastic approximation能够做到在不知道函数具体公式的情况下求出解。
>
> RM算法是stochastic approximation中的开创性工作。
>
> 而stochastic gradient descent algorithm 则是RM的一种特殊情况。

问题：求解$g(w) = 0$方程， 其中$w$是未知量，$g$是函数。

于是RM算法可以求解如下问题：

$w_{k+1} = w_k - a_k\tilde{g}(w_k, \eta_k)$

其中$\eta_k$ 是噪声， $\tilde{g}(w_k, \eta_k) = g(w_k) + \eta_k$ ， $\alpha$是一个正数 。

> 函数$g(w_k)$ 是一个黑盒函数，我们无法得出它的具体公式。

不断迭代这个公式，就能够收敛到$g(w)=0$

## RM算法-Convergence properties

RM算法的三个条件：

1. $0<c_1\leq\nabla_w g(w)\leq c_2$ ，即导数大于0，并且不会趋于无穷。
2. $\sum_{k=1}^{\infty}a_k=\infty$ 并且$\sum_{k=1}^{\infty}a_k^2<\infty$ 。
   $\sum_{k=1}^{\infty}a_k^2<\infty$ 保证了$a_k$一定会收敛到0。
   $\sum_{k=1}^{\infty}a_k=\infty$ 保证了$a_k$收敛的不会太快，否则加起来就不会是无穷了。
3. $\mathbb{E}[\eta_k]=0$ 并且$\mathbb{E}[n_k^2|\mathcal{H}]<\infty$ (这里的$\mathbb{E}[\eta_k^2|\mathcal{H}]$的意思是$\eta_k$的方差)。通常这里的噪声通过同分布(Independent and Identically Distriuted)采样得来，并且在此处$\eta_k$并没有强制要求满足高斯分布。

> 对于条件二的解释：
>
> 根据上面的公式$w_{k+1}-w_k=a_k\tilde{g}(w_k,\eta_k)$ ,那么$a_k$收敛到0，才能保证$w_{k+1}-w_k$不断收敛到0，从而趋于稳定。
>
> 而将$k=1,2,\ldots,\infty$ 的公式相加可以得到
>
> $$w_\infty-w_1=\sum_{k=1}^{\infty}a_k\tilde{g}(w_k,\eta_k)\ .$$
>
> $w^*\approx w_\infty$是我们猜测的值，$w_1$ 是初始值，那么$\sum_{k=1}^{\infty}a_k=\infty$ 保证了不管我们选的初始值$w_1$离目标值有多远，最终都可以通过不断迭代得到$w^*$

$a_k$取什么值是符合条件的？ $a_k=\frac{1}{k}$ 。（但一般在$k$很大的时候，不会让$a_k$一直变小，达到某个较小值后则会不再改变）

## SGD(stochatic gradient descent)

目标是解决如下优化问题：

$$\min_w J(w)=\mathbb{E}[f(w,X)]$$

算法一、 gradient descent(GD)梯度下降法：

$$w_{k+1}=w_k-\alpha_k\nabla_w\mathbb{E}[f(w_k,X)]=\alpha_k\mathbb{E}[\nabla_w f(w_k,X)]$$

这里的$\alpha_k$ 是步长，就是学习率。 但是一般无法得到准确的梯度的期望。

算法二、batch gradient descent(BGD)批量梯度下降法：

$[\nabla_w f(w_k, X)] \approx \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\nabla_w f(w_k, x_i)$

于是得到：$w_{k+1} = w_k - \alpha_k \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\nabla_w f(w_k, x_i)$

不需要求期望，用多次采样的平均值来代替期望值，但是每次都需要求n个数的平均太耗时了。（n为采样次数）

算法三、stochastic gradient descent(SGD) 随机梯度下降：

$w_{k+1} = w_k - \alpha_k \nabla_w f(w_k, x_k)$

和GD相比，替使用随机梯度来替换准确的期望的梯度。

和BGD相比，其实就是把n设置为了1。

## SGD 的例子和练习

假设如下例子：$\min_w J(w) = \mathbb{E}[f(w, X)] = \mathbb{E}[\frac{1}{2}||w - X||^2]$

此处的$f(w, X) = ||w - X||^2/2, \nabla_w f(w, X) = w - X$

三个练习：

1. 证明最优解$w^*$ 满足$w^* = \mathbb{E}[X]$

$$\begin{aligned}&\nabla_w J(w) = 0\\ \Rightarrow&\mathbb{E}[\nabla_w f(w, X)] = 0\\ \Rightarrow&\mathbb{E}[w - X] = 0\\ \Rightarrow&w^* = \mathbb{E}[X]\end{aligned}$$

2. 这个例子的GD算法是什么？

$$\begin{aligned}w_{k+1} &= w_k - \alpha_k \nabla_w J(w_k)\\ &= w_k - \alpha_k \mathbb{E}[\nabla_w J(w_k)]\\ &= w_k - \alpha_k \mathbb{E}[w_k - X]\end{aligned}$$

3. 这个例子的SGD算法是什么？

不求期望了，直接用某一个的$w_k - x_k$ 来代替$\mathbb{E}[w_k - X]$

$$w_{k+1} = w_k - \alpha_k \nabla_w f(w_k, x_k) = w_k - \alpha_k (w_k - x_k)$$

我们发现最后的公式和mean alogrithm算法是一样的，所以mean algorithm算法就是一种特殊的SGD算法。

## SGD算法的收敛性(convergence)

1. 首先证明SGD是一种特殊的RM算法：

SGD的目标是最小化$J(w)=\mathbb{E}[f(w,X)]$，这个问题可以转换为寻根问题：

$\nabla_w J(w)=\mathbb{E}[\nabla_w f(w,X)]=0$

设$g(w)=\nabla_w J(w)=\mathbb{E}[\nabla_w f(w,X)]$

那么SGD的目标就是找到$g(w)=0$的根。

我们可以测量的是：

$$\begin{aligned}\tilde{g}(w,\eta)&=\nabla_w f(w,x)\\&=\mathbb{E}[\nabla_w f(w,X)]+(\nabla_w f(w,x)-\mathbb{E}[\nabla_w f(w,X)])\end{aligned}$$

而与之对应的RM算法是

$$w_{k+1}=w_k-\alpha_k\tilde{g}(w,\eta)=w_k-\alpha_k\nabla_w f(w_k,x_k)$$

2. 接下来我们就可以应用RM算法的收敛性条件，来证明SGD是收敛的。

## SGD算法的收敛模式

SGD收敛的过程中，是否会收敛很慢或者收敛随机？

我们定义相对误差$\delta_k$

$$\delta_k=\frac{|\nabla_w f(w,x)-\mathbb{E}[\nabla_w f(w,X)]|}{|\mathbb{E}[\nabla_w f(w,X)]|}$$

此处的$\mathbb{E}[\nabla_w f(w,X)]$是true gradient， 而$\nabla_w f(w,x)$ 是 stochastic gradient。

> 性质：当$w_k$ 离$w^*$ 较远时，相对误差较小， 当$w_k$ 离$w^*$ 很近的时候，才会有比较大的相对误差（即随机性）

如何得到如上性质？

使用拉格朗日中值定理$f(x_1)-f(x_2)=f'(x_3)(x_1-x_2)$

那么由$\mathbb{E}[\nabla_w f(w^*,X)]=0$和中值定理 ,我们有

$$\delta_k=\frac{|\nabla_w f(w,x)-\mathbb{E}[\nabla_w f(w,X)]|}{|\mathbb{E}[\nabla_w f(w,X)]-\mathbb{E}[\nabla_w f(w^*,X)]|}=\frac{|\nabla_w f(w,x)-\mathbb{E}[\nabla_w f(w,X)]|}{|\mathbb{E}[\nabla_w^2 f(\tilde{w},X)(w_k-w^*)]|}$$

我们假设$\nabla_w^2 f \geq c > 0$

那么我们考虑分母项，就有

$$\begin{aligned}|\mathbb{E}[\nabla_w^2 f(\tilde{w}, X)(w_k - w^*)]| &= |\mathbb{E}[\nabla_w^2 f(\tilde{w}, X)](w_k - w^*)| \\ &= |\mathbb{E}[\nabla_w^2 f(\tilde{w}, X)]||(w_k - w^*)| \geq c|w_k - w^*|\end{aligned}$$

于是误差$\delta_k$满足

$$\delta_k \leq \frac{|\nabla_w f(w, x) - \mathbb{E}[\nabla_w f(w, X)]|}{c|w_k - w^*|}$$

于是当$w_k$ 距离$w^*$比较远，那么分母比较大，相对误差$\delta_k$ 的上界比较小。

当$w_k$ 距离$w^*$比较近，那么分母比较小，此时相对误差$\delta_k$ 的上界才会变大一些。

## BGD,MBGD和SGD

- BGD(batch gradient descent)，用到所有的采样来平均求期望
- MBGD(min-batch gradient descent) ,选择一部分采样(m个采样)
- SGD(stocastic gradient descent) ， 选择一个采样

在MBGD中，当MBGD中的采样数量$m = 1$时，等价于SGD。

当采样数量$m = n$时，趋近于BGD(注意！此时不完全等于BGD，因为BGD是取出所有的n个样本，而MBGD是对样本集进行n次的采样)

考虑如下优化问题：

$\min\limits_{w} J(w) = \frac{1}{2n}\sum\limits_{i=1}^{n}||w - x_i||^2$

那么三种算法的迭代公式如下：

$$w_{k+1} = w_k - \alpha_k \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(w_k - x_i) = w_k - \alpha_k(w_k - \overline{x}) \qquad (BGD)$$

$$w_{k+1} = w_k - \alpha_k \frac{1}{m}\sum_{j \in I_k}^{n}(w_k - x_j) = w_k - \alpha_k(w_k - \overline{x}^{(m)}) \quad (MBGD)$$

$$w_{k+1} = w_k - \alpha_k(w_k - x_k) \qquad (SGD)$$

# 第七章 Temporal-Difference learning

Temporal-Difference learning （TD）时序差分算法

这是一个incremental 迭代式的算法。

## motivating example

1. 先考虑一个简单的问题 mean estimation： 计算

$w = [X]$，(X是一些iid(独立同分布)采样$\{x\}$)

令$g(w) = w - \mathbb{E}[X]$ ,则有

$\tilde{g}(w, \eta) = w - x = (w - \mathbb{E}[X]) + (\mathbb{E}[X] - x) \approx g(w) + \eta$

然后根据RM算法，可以得到$w_{k+1} = w_k - \alpha_k \tilde{g}(w_k, \eta_k) = w_k - \alpha_k(w_k - x_k)$

2. 考虑一个复杂一些的例子：计算

$w = \mathbb{E}[v(X)]$，(X是一些iid(独立同分布)采样$\{x\}$)

令$g(w) = w - \mathbb{E}[v(X)]$

$\tilde{g}(w, \eta) = w - v(x) = (w - \mathbb{E}[X]) + (\mathbb{E}[X] - v(x)) \approx g(w) + \eta$

然后根据RM算法，可以得到$w_{k+1} = w_k - \alpha_k \tilde{g}(w_k, \eta_k) = w_k - \alpha_k(w_k - v(x_k))$

3. 第三个例子：计算

$w = [R + \gamma v(X)]$，($R, X$ 是随机变量，$\gamma$ 是常量，$v(\cdot)$ 是函数)

令$g(w) = w - \mathbb{E}[R + \gamma v(X)]$ ，

$$\begin{aligned} \tilde{g}(w, \eta) &= w - \mathbb{E}[R + \gamma v(X)] \\ &= (w - \mathbb{E}[R + \gamma v(X)]) + (\mathbb{E}[R + \gamma v(X)] - [r + \gamma v(X)]) \\ &\approx g(w) + \eta \end{aligned}$$

然后根据RM算法，可以得到

$w_{k+1} = w_k - \alpha_k \tilde{g}(w_k, \eta_k) = w_k - \alpha_k[w_k - (r_k + \gamma v(x_k))]$

## TD算法中的state values

> 注意：
>
> - TD算法通常指的是一大类的RL算法。
> - TD算法也可以特指一种用于估计state values的算法。

TD算法基于数据：$(s_0, r_1, s_1, \ldots, s_t, r_{t+1}, s_{t+1}, \ldots)$ 或者$\{(s_t, r_{t+1}, s_{t+1})\}_t$ ，这种数据通过给定的策略$\pi$ 来生成。

TD算法则是：

$$v_{t+1}(s_t) = v_t(s_t) - \alpha_t(s_t)[v_t(s_t) - [r_{t+1} + \gamma v_t(s_{t+1})]] \quad (1)$$

$$v_{t+1}(s) = v_t(s), \forall s \neq s_t \quad (2)$$

对于公式(2) 表示，如果现在的状态是$s_t$ ，那么其他状态的value是不更新的。

我们关注于第一个式子：

$v_{t+1}(s_t) = v_t(s_t) - \alpha_t(s_t)[v_t(s_t) - [r_{t+1} + \gamma v_t(s_{t+1})]]$

其中的$v_{t+1}(s_t)$ 是新的估计值，$v_t(s_t)$ 是现在的估计值。

$v_t(s_t) - [r_{t+1} + \gamma v_t(s_{t+1})]$ 是误差$\delta_t$

$[r_{t+1} + \gamma v_t(s_{t+1})]$ 是目标$\overline{v}_t$

> 为什么$\overline{v}_t$ 是“TD目标” ？因为每次$v(s_t)$ 都会向着 $\overline{v}_t$ 移动。
>
> $$\begin{aligned} & v_{t+1}(s_t) = v_t(s_t) - \alpha_t(s_t)[v_t(s_t) - \overline{v}_t] \\ \Rightarrow & v_{t+1}(s_t) - \overline{v}_t = v_t(s_t) - \overline{v}_t - \alpha_t(s_t)[v_t(s_t) - \overline{v}_t] \\ \Rightarrow & v_{t+1}(s_t) - \overline{v}_t = [1 - \alpha_t(s_t)][v_t(s_t) - \overline{v}_t] \end{aligned}$$
>
> 因为$0 < 1 - \alpha_t(s_t) < 1$
>
> 于是$|v_{t+1}(s_t) - \overline{v}_t| \leq |v_t(s_t) - \overline{v}_t|$

> 为什么 $\delta_t$是“TD error”？
>
> $\delta_t = v(s_t) - [r_{t+1} + \gamma v(s_{t+1})]$
>
> 因为发生在t和t+1两个时刻 ，所以才叫时序差分，
>
> TD error 描述了$v_t$ 和$v_\pi$ 之间的误差。
>
> 当$v_t = v_\pi$ 时，那么应该有$\delta_t = 0$ 。
>
> TD error是一种 innovation，这是经验$(s_t, r_{t+1}, s_{t+1})$的一种新的信息。

## TD算法的数学意义

他解决了给定$\pi$，求解贝尔曼公式。

新的贝尔曼公式：

$$v_\pi(s) = \mathbb{E}[R + \gamma G | S = s], s \in S$$

在这之中G是下个状态的Reward，所以$\mathbb{E}[G|S = s]$可以表示为：

$$\mathbb{E}[G|S = s] = \sum_a \pi(a|s) \sum_{s'} p(s'|s, a) v_\pi(s') = \mathbb{E}[v_\pi(S')|S = s]$$

其中$S'$ 是下一个状态

于是s的state value可以写为：

$$v_\pi(s) = \mathbb{E}[R + \gamma v_\pi(S')|S = s], s \in S$$

这个公式也被称为贝尔曼期望公式。

接下来使用RM算法来求解这个贝尔曼期望公式：
定义$g(v(s)) = v(s) - \mathbb{E}[R + \gamma v_\pi(S')|S = s] = 0$

于是我们有$g(v(s)) = 0$

$$\begin{aligned}\tilde{g}(v(s)) &= v(s) - [r + \gamma v_\pi(s')] \\ &= (v(s) - \mathbb{E}[R + \gamma v_\pi(S')|s]) + (\mathbb{E}[R + \gamma v_p i(S')|s] - [r + \gamma v_\pi(s')])\end{aligned}$$

在这之中，$g(v(s)) = (v(s) - \mathbb{E}[R + \gamma v_\pi(S')|s])$ ,误差
$\eta = E[R + \gamma v_p i(S')|s] - [r + \gamma v_\pi(s')])$

那么与之对应的RM算法是：

$$\begin{aligned}v_{k+1}(s) &= v_k(s) - \alpha_k \tilde{g}(v_k(s)) \\ &= v_k(s) - \alpha_k(v_k(s) - [r_k + \gamma v_\pi(s'_k)]), k = 1, 2, 3, \dots\end{aligned}$$

这里的$v_k(s)$代表$v_\pi(s)$在第k步的估计，而$r_k, s'_k$ 是第k步中从$R, S'$中取出的样本。

对公式做以下替换：

- 将一组采样$\{(s, r, s')\}$ 替换为一组序列$\{s_t, r_{t+1}, s_{t+1}\}$， 从而做到对所有的s都进行更新。
- 将$v_\pi(s')$ 换为$v_k(s'_k)$ ，即我们直接用$s'$ 在第k步的估计值来替代真实值。虽然会有一些偏差，但是最终会收敛到$v_\pi$

> TD算法的收敛：
>
> 对于所有状态$s \in S$ 。当$t \to \infty$ 时， $v_t(s)$ 以概率1收敛到策略$\pi$ 下的状态值函数$v_\pi(s)$。
>
> 如果对于所有的状态$s \in S$ ，步长参数序列$\alpha_t(s)$ 都满足$\sum_t \alpha_t = \infty$ 并且$\sum_t \alpha_t^2(s) < \infty$ 那么上述收敛成立。

| TD/Sarsa learning | MC learning |
| --- | --- |
| online：TD学习是在线的，在接收到一个奖励后可以更新state/action value | Not online：MClearning是非在线的，必须等到整个episode已经完成之后，计算return值然后进行估计。 |
| continuing tasks：即能处理一直持续下去的任务，同时也能解决episodic tasks。 | Episodic tasks：必须是有限步的episode，才能等到他的返回值。 |
| Bootstrapping：会基于之前对状态的猜测，加上一些新的信息来形成一个新的猜测 | Non-boostrapping：直接根据当前的episode计算return，不涉及到之前的估计值 |
| Low estimation variance：在算法过程中涉及到的随机变量比较少，所以方差会比较小 | High estimation variance：它涉及到了很多的variable，因为一次episode会涉及到很多的Reward，而只用其中一次的采样，所以就会有比较大的方差。 |
| bias：因为基于之前的经验，所以可能会因为之前的经验而产生bias，导致有偏估计，但是在不断增加经验后还是会趋于正确结果 | no bias：不基于之前的估计，所以不会产生bias |

## TD算法中的action values：Sarsa

> Sarsa是经验集$(s_t, a_t, r_{t+1}, s_{t+1}, a_{t+1})$ 的拼接。

TD算法是用来估计给定策略$\pi$ 的state value，但我们需要估计的是action value。下面引入Sarsa。

假设我们有如下经验$\{(s_t, a_t, r_{t+1}, s_{t+1}, a_{t+1})\}_t$ ，那么我们定义Sarsa公式如下：

$$q_{t+1}(s_t, a_t) = q_t(s_t, a_t) - \alpha_t(s_t, a_t)[q_t(s_t, a_t) - [r_{t+1} + \gamma q_t(s_{t+1}, a_{t+1})]]$$
$$q_{t+1}(s, a) = q_t(s, a), \forall (s, a) \neq (s_t, a_t)$$

这个式子和TD算法几乎一样，只是类似地把$v_t(s_t)$ 改成了$q_t(s_t, a_t)$这样子。

Sarsa的数学意义和TD也是几乎一样的。（如贝尔曼公式，收敛性等）

Sarsa所求解的贝尔曼公式：

$$q_\pi(s, a) = \mathbb{E}[R + \gamma q_\pi(S', A')|s, a], \forall s, a$$

1. 收集经验：$(s_t, a_t, r_{t+1}, s_{t+1}, a_{t+1})$ ,遵循$\pi_t(s_t)$执行$a_t$ ， 得到$r_{t+1}$的奖励，然后走到状态$s_{t+1}$ 并遵循$\pi_t(s_{t+1})$ 来采取行动$a_{t+1}$ 。

2. 更新q值(q value update/policy evaluaton)：
   $q_{t+1}(s_t, a_t) = q_t(s_t, a_t) - \alpha_t(s_t, a_t)[q_t(s_t, a_t) - [r_{t+1} + \gamma q_t(s_{t+1}, a_{t+1})]]$

3. 更新策略policy(policy update/policy improvement)：

$$\pi_{t+1}(a|s_t) = 1 - \frac{\epsilon}{|\mathrm{A}|}(|\mathrm{A} - 1|), \qquad if\ a = arg\,max_a q_{t+1}(s_t, a)$$
$$\pi_{t+1}(a|s_t) = \frac{\epsilon}{|\mathrm{A}|}, \qquad otherwise$$

注意这里的PE和PI是立刻执行的，而不是等return之后再精确计算。

注意这个策略是一个$\epsilon - greedy$策略，也就是说倾向于采取qvalue最大的action，但是其他的action同样有概率取到。

## Expected Sarsa

公式如下：

$$q_{t+1}(s_t, a_t) = q_t(s_t, a_t) - \alpha_t(s_t, a_t)[q_t(s_t, a_t) - (r_{i+1} + \gamma \mathbb{E}[q_t(s_{t+1}, A)])]$$
$$q_{t+1}(s, a) = q_t(s, a), \forall (s, a) \neq (s_t, a_t)$$

此处的$\mathbb{E}[q_t(s_{t+1}, A)] = \sum_\pi \pi_t(a|s_{t+1}) q_t(s_{t+1}, a) \approx v_t(s_{t+1})$

和普通的sarsa的区别是用$(r_{i+1} + \gamma \mathbb{E}[q_t(s_{t+1}, A)])$ 替换了$r_{t+1} + \gamma q_t(s_{t+1}, a_{t+1})$
.

不再需要$a_{t+1}$ 了,随机性会减小一些，但是需要更大的计算量。

Expected Sarsa的数学意义也是在求解贝尔曼公式：

$q_\pi(s, a) = \mathbb{E}[R_{t+1} + \gamma \mathbb{E}_{A_{t+1} \sim \pi(S_{t+1})}[q_\pi(S_{t+1}, A_{t+1})] | S_t = s, A_t = a]$

## n-step Sarsa

是Sarsa的一个推广，包含了Sarsa和蒙德卡罗方法。

我们的action value如下定义：$q_\pi(s, a) = \mathbb{E}[G_t | S_t = a, A_t = a]$

那么$G_t$ 可以被写成如下形式：

$$
\begin{aligned}
\text{Sarsa} \leftarrow G_t^{(1)} &= R_{t+1} + \gamma q_\pi(S_{t+1}, A_{t+1}) \\
G_t^{(2)} &= R_{t+1} + \gamma R_{t+1} + \gamma^2 q_\pi(S_{t+2}, A_{t+2}) \\
&\dots \\
\text{n-step Sarsa} \leftarrow G_t^{(n)} &= R_{t+1} + \gamma R_{t+2} + \dots + \gamma^n q_\pi(S_{t+n}, A_{t+n}) \\
&\dots \\
MC \leftarrow G_t^{(\infty)} &= R_{t+1} + \gamma R_{t+2} + \gamma^2 R_{t+3} \dots
\end{aligned}
$$

所以n-step Sarsa对应的贝尔曼公式是：

$$
q_{t+1}(s_t, a_t) = q_t(s_t, a_t) - \alpha_t(s_t, a_t)[q_t(s_t, a_t) - [r_{t+1} + \gamma r_{t+2} + \dots + \gamma^n q_t(s_{t+n}, a_{t+n})]]
$$

n-step Sarsa需要的数据是$(s_t, a_t, r_{t+1}, s_{t+1}, a_{t+1}, \dots, r_{t+n}, s_{t+n}, a_{t+n})$

所以他的数据需要等到$t+n$ 时刻，才能进行更新。是online和offline的结合。

- 当n比较大的时候，更接近于MC，会有比较大的variance，比较小的bias。
- 当n比较小的时候，更接近于Sarsa，会有比较小的variance，比较大的bias。

## TD中最优action value学习:Q-learning

算法如下：

$$
\begin{aligned}
q_{t+1}(s_t, a_t) &= q_t(s_t, a_t) - \alpha_t(s_t, a_t)[q_t(s_t, a_t) - [r_{t+1} + \gamma \max_{a \in \mathcal{A}} q_t(s_{t+1}, a)]] \\
q_{t+1}(s, a) &= q_t(s, a), \forall (s, a) \neq (s_t, a_t)
\end{aligned}
$$

和Sarsa相比，用$r_{t+1} + \gamma \max_{a \in \mathcal{A}} q_t(s_{t+1}, a)$ 替换了$r_{t+1} + \gamma q_t(s_{t+1}, a_{t+1})$

Q-learning求解的数学问题是（不是在求解贝尔曼方程）：

求解一个贝尔曼最优方程：

$$
q(s, a) = \mathbb{E}[R_{t+1} + \gamma \max_a q(S_{t+1}, a) | S_t = s, A_t = a], \forall s, a
$$

## off-policy 和 on-policy

两种策略：

1. behavior policy用来生成经验样本
2. target policy不断地更新来将target policy更新到optimal policy。

基于这两种策略，可以分为两类算法：

- on-policy： 其中的behavior policy和target policy是相同的，即用自己的策略来和环境交互，然后得到经验并改进自己的策略，之后再用相同的策略和环境交互。
- off-policy：用一个策略和环境交互得到大量经验，然后用这些经验来不断改进策略（一步到位，不再通过新的策略引入新的经验）

on-policy的好处就是可以不断接收新的经验，实时更新策略。

off-policy的好处就是可以直接使用别人已经获取过的经验。如用之前通过探索性较强的算法得到的经验。

如何判断一个TD算法是on-policy还是off-policy？

1. 看这个TD算法是在解决什么样的数学问题
2. 看在算法的执行过程中需要什么东西才能使算法跑起来

- Sarsa是on-policy的：

Sarsa在数学上就是在求解一个贝尔曼公式：

$$q_\pi(s,a) = \mathbb{E}[R + \gamma q_\pi(S', A')|s, a], \forall s, a$$

此处的$R \sim p(R|s,a), S' \sim p(S'|s,a), A' \sim \pi(A'|S')$

Sarsa在算法中：

$$q_{t+1}(s_t, a_t) = q_t(s_t, a_t) - \alpha_t(s_t, a_t)[q_t(s_t, a_t) - [r_{t+1} + \gamma q_t(s_{t+1}, a_{t+1})]]$$

1. 如果给定了$(s_t, a_t)$ 那么$r_{t+1}$和$s_{t+1}$和任何策略无关，和$p(r|s,a), p(s'|s,a)$有关。
2. $a_{t+1}$是由策略$\pi_t(s_{t+1})$ 产生。 所以$\Pi_t$ 既是behavior policy也是target policy

- MC learning 是on-policy的：

MC目的是求解如下贝尔曼方程：

$$q_\pi(s,a) = \mathbb{E}[R_{t+1} + \gamma R_{t+2} + \ldots | S_t = s, A_t = a]$$

MC的实现是

$$q(s,a) \approx r_{t+1} + \gamma r_{t+2} + \ldots$$

> 我们用策略$\Pi$ 来得到trajectory经验，然后得到return来近似估计$q_\pi$ 进而改进$\Pi$

- Q learning 是off-policy的：

Q learning求解的数学问题是：

求解贝尔曼最优公式：

$$q(s,a)=\mathbb{E}[R_{t+1}+\gamma \underset{a}{max} q(S_{t+1},a)|S_t=s,A_t=a],\forall s,a$$

Q learning的实现过程是：

$$q_{t+1}(s_t,a_t)=q_t(s_t,a_t)-\alpha_t(s_t,a_t)[q_t(s_t,a_t)-[r_{t+1}+\gamma \underset{\alpha\in \mathrm{A}}{max}\ q_t(s_{t+1},a)]]$$

需要的经验是$(s_t,a_t,r_{t+1},s_{t+1})$

注意这里的经验不包含$a_{t+1}$

> 如果$(s_t,a_t)$ 给定，那么$r_{t+1}$ 和$s_{t+1}$ 不依赖于策略。
>
> behavior policy是从$s_t$ 出发得到$a_t$
>
> target policy 是根据$q_\pi$ 来选择action

## Q-learning 的实施

如果将Q-learning中的behavior policy 和target policy强行设置为一致的，那么它可以是on-policy的：

0. 对每个episode执行以下三步
1. 收集经验$(s_t,a_t,r_{t+1},s_{t+1})$ ，在这一步根据$\pi_t(s_t)$ 采取行动$a_t$ 来生成$(r_{t+1},s_{t+1})$
2. 更新q-value：
   $q_{t+1}(s_t,a_t)=q_t(s_t,a_t)-\alpha_t(s_t,a_t)[q_t(s_t,a_t)-[r_{t+1}+\gamma max_a\ q_t(s_{t+1},a)]]$
3. 更新policy：

$$\pi_{t+1}(a|s_t)=1-\frac{\epsilon}{|\mathrm{A}|}(|\mathrm{A}|-1)\ \text{if}\ a=\underset{a}{argmax}\ q_{t+1}(s_t,a)$$
$$\pi_{t+1}(a|s_t)=\frac{\epsilon}{|\mathrm{A}|}\ \text{otherwise}$$

也可以是off-policy的：

0. 对每个episode生成策略$\pi_b$ (这里的b代表behavior),这个策略用来生成experience
1. 对episode的每一步$t = 0, 1, 2, \ldots$ 执行以下两步：
2. 更新q-value:
   $q_{t+1}(s_t, a_t) = q_t(s_t, a_t) - \alpha_t(s_t, a_t)[q_t(s_t, a_t) - [r_{t+1} + \gamma max_a\, q_t(s_{t+1}, a)]]$
3. 更新target policy:

$$\pi_{T,t+1}(a|s_t) = 1 \text{ if } a = \underset{a}{argmax}\ q_{t+1}(s_t, a)$$
$$\pi_{T,t+1}(a|s_t) = 0 \text{ otherwise}$$

注意这里的第三步是greedy不是$\epsilon - greedy$，因为我们不需要新的策略来生成经验，所以也就不需要使用$\epsilon - greedy$ 来增加探索性，只需要保证最优性。

使用off-policy的话，使用的behavior policy最好是探索度比较强的策略，否则可能得不到好的target policy。

## TD的统一表示

所有的TD算法都能用如下公式表达：

$$q_{t+1}(s_t, a_t) = q_t(s_t, a_t) - \alpha_t(s_t, a_t)[q_t(s_t, a_t) - \overline{q}_t]$$

这里的$\overline{q}_t$ 就是TD target。

TD算法的目标就是接近TD target ， 减小TD error

| 算法 | $\overline{q}_t$ 的表示 |
|---|---|
| Sarsa | $\overline{q}_t = r_{t+1} + \gamma q_t(s_{t+1}, a_{t+1})$ |
| n-step Sarsa | $\overline{q}_t = r_{t+1} + \gamma r_{t+2} + \ldots + \gamma^n q_t(s_{t+n}, a_{t+n})$ |
| Expected Sarsa | $\overline{q}_t = r_{t+1} + \gamma \sum_a \pi_i(a\|s_{t+1}) q_t(s_{t+1}, a)$ |
| Q-learning | $\overline{q}_t = r_{t+1} + \gamma \underset{a}{max} q_t(s_{t+1}, a)$ |
| Monte Carlo | $\overline{q}_t = r_{t+1} + \gamma r_{t+2} + \gamma^2 r_{t+3} + \ldots$ |

# 第八章 value function Approximation

在此之前，所有的state value和action value都是用表格表示出来的，例如：

| | $a_1$ | $a_2$ | $a_3$ | $a_4$ | $a_5$ |
|---|---|---|---|---|---|
| $s_1$ | $q_\pi(s_1,a_1)$ | $q_\pi(s_1,a_2)$ | $q_\pi(s_1,a_3)$ | $q_\pi(s_1,a_4)$ | $q_\pi(s_1,a_5)$ |
| ... | ... | ... | ... | ... | ... |
| $s_9$ | $q_\pi(s_9,a_1)$ | $q_\pi(s_9,a_2)$ | $q_\pi(s_9,a_3)$ | $q_\pi(s_9,a_4)$ | $q_\pi(s_9,a_5)$ |

使用表格的好处就是可以直观地分析

坏处就是无法处理很大的state space 或者action space、无法处理连续的state和action。泛化能力不强。

## Value Function Approximation的含义

使用直线来拟合点：

$\hat{v}(s,w) = as + b = [s,1]\begin{bmatrix}a\\b\end{bmatrix} = \phi^T(s)w$

> 这里的w是parameter vector(参数向量)
>
> $\phi(s)$ 是s的feature vector(特征向量)
>
> $\hat{v}(s,w)$ 是w的linear(线性关系)

使用函数来拟合可以节省存储空间(只需要存w的值(a,b)即可)

缺点是拟合后不太精确。

同样可以用二次函数来拟合：

$\hat{v}(s,w) = as^2 + bs + c = \phi^T(s)w$

(需要注意的是，这样的曲线对于w来说同样是一种线性的拟合)

- 使用Value Function Approximation的优点：

1. 便于存储，只需要存储w即可，不用存储大量数据。
2. 泛化能力更强，假设s2进行了更改，在表格存储中只会更改s2对应的内容，而使用value function approximation则会改变w的值，从而影响其他的值（如s1和s3），这样会增强泛化能力

## objective funciton

令$v_\pi(s)$ 作为真正的state value。 $\hat{v}(s,w)$是函数的近似值。

我们目标就是找到最优的w来使得$\hat{v}(s,w)$ 可以很好的拟合出$v_\pi(s)$

目标函数objective function如下：

$$J(w) = \mathbb{E}[(v_\pi(S) - \hat{v}(S,w))^2]$$

我们目标就是找到最好的w使得$J(w)$ 最小化。

求解期望常见的两种方法：
uniform distribution 平均分布：
认为每一个状态都是同等重要的。那么每一个状态的权重就是$\frac{1}{|S|}$

$$J(w) = \mathbb{E}[(v_\pi(S) - \hat{v}(S,w))^2] = \frac{1}{|S|}\sum_{s\in S}(v_\pi(s) - \hat{v}(s,w))^2$$

使用均匀策略的缺点是，我们将很远处的状态和距离目标近处的状态设置权重一样。导致没有侧重点

第二个概率分布：

stationary distribution：

这是一种Markov下的long-run behavior

让$\{d_\pi(s)\}_{s\in S}$ 作为在策略$\pi$ 下的Markov stationary distribution，通过定义$d_\pi(s) \geq 0 \text{ and } \sum_{s\in S} d_\pi(s) = 1$

于是目标函数objective function可以被写为：

$$J(w) = \mathbb{E}[(v_\pi(S) - \hat{v}(S,w))^2] = \sum_{s\in S} d_\pi(s)(v_\pi(s) - \hat{v}(s,w))^2$$

Stationary distribution 也被称为steady-state distribution 或者limit distribution。

怎么求$d_\pi(s)$ ？给出一个很长很长的episode：

我们定义$n_\pi(s)$ 表示s出现的次数。于是我们用频率来近似估计$d_\pi(s)$

$$d_\pi(s) \approx \frac{n_\pi(s)}{\sum_{s'\in S} n_\pi(s')}$$

我们没必要真正的模拟这个episode并统计次数，可以通过数学公式得到：

最终趋于稳定的$d_\pi^T$ 要满足：

$$d_\pi^T = d_\pi^T P_\pi$$

这里的$P_\pi$ 是一个矩阵，代表从$s$ 到$s'$ 转移的概率$p(s'|s)$

## optimization algorithms

目标函数的优化算法(optimization algorithms of objective function)

为了最小化目标函数$J(w)$，我们可以使用梯度优化gradient-descent

$$w_{k+1} = w_k - \alpha_k \nabla_w J(w_k)$$

这里的true gradient是:

$$\begin{aligned}\nabla_w J(w) &= \nabla_w \mathbb{E}[(v_\pi(S) - \hat{v}(S,w))^2] \\ &= \mathbb{E}[\nabla_w (v_\pi(S) - \hat{v}(S,w))^2] \\ &= 2\mathbb{E}[(v_\pi(S) - \hat{v}(S,w))(-\nabla_w \hat{v}(S,w))] \\ &= -2\mathbb{E}[(v_\pi(S) - \hat{v}(S,w))\nabla_w \hat{v}(S,w)]\end{aligned}$$

但是求期望很麻烦，所以我们用sotcastic gradient descent来替代gradient descent

$$w_{t+1} = w_t + \alpha_k (v_\pi(s_t) - \hat{v}(s_t, wt))\nabla_w \hat{v}(s_t, w_t)$$

但是在现实中，我们是无法得知$v_\pi(s_t)$ 的。

有如下方法：

1. Monte Carlo learning 和 value function approximation结合

   让$g_t$ 表示从$s_t$ 开始的episode的return。那么

   $w_{t+1} = w_t + \alpha_t (g_t - \hat{v}(s_t, w_t))\nabla_w \hat{v}(s_t, w_t)$

2. TD learning 和value function approximation结合

   在TD算法中可以用$r_{t+1} + \gamma \hat{v}(s_{t+1}, w_t)$ 来作为$v_\pi(s_t)$ 的一个估计值。于是有

   $w_{t+1} = w_t + \alpha_t [r_{t+1} + \gamma \hat{v}(s_{t+1}, w_t) - \hat{v}(s_t, w_t)]\nabla_w \hat{v}(s_t, w_t)$

目前只能用来估计给定策略的state values。

## selection of function approximators

函数的选取方法

1. 选择线性函数（之前广为使用）：

   $$\hat{v}(s,w)=\phi^T(s)w$$

   此处的$\phi(s)$ 是特征向量，他是基于多项式的(polynomial basis),基于傅里叶的(Fourier basis),...

2. 选择神经网络（现在广为使用）：

   网络的参数是w，神经网络的输入是state，输出是估计值$\hat{v}(x,w)$

考虑线性函数：$\hat{v}(s,w)=\phi^T(s)w$ ,我们有

$$\nabla_w\hat{v}(s,w)=\phi(s)$$

代入TD算法可以得到TD-Linear：

$$w_{t+1}=w_t+\alpha_t[r_{t+1}+\gamma\phi^T(s_{t+1})w_t-\phi^T(s_t)w_t]\phi(s_t)$$

> Linear function approximation的劣势：、
>
> - 很难去选择一个合适的feature vectors
>
> Linear function approximation的优势：
>
> - 数学原理清晰，能够可以帮助我们更透彻地研究。
> - 表征能力还算可以。表格形式tabular representation是Linear function approximation 的特殊形式。

Tabular representation 是Linear funciton的一种特殊情况：

首先考虑如下的特征向量：

$$\phi(s)=e_s\in\mathbb{R}^{|S|}$$

这里的$e_s$ 是一个只有一个1，其他都是0的向量。

那么这样的话$\hat{v}(s,w)=e_s^Tw=w(s)$ , 这样$w(s)$ 就是w的第s个元素了。也就是tabular representation。

然后我们把$\phi(s_t)=e_s$ 带入到TD-Linear中。

$$w_{t+1}=w_t+\alpha(r_{t+1}+\gamma w_t(s_{t+1})-w_t(s_t))e_{S_t}$$

因为$e_{s_t}$ 只有在$w_t$ 的位置是1，其他位置是0，所以在$w_t$ 中只有$S_t$的位置被更新了。

$$w_{t+1}(s_t) = w_t(s_t) + \alpha_t(r_{t+1} + \gamma w_t(s_{t+1}) - w_t(s_t))$$

于是我们发现这个式子和之前tabular的TD算法是一样的。

## Sarsa

Sarsa和value function estimation结合：

$$w_{t+1} = w_t + \alpha_t[r_{t+1} + \gamma\hat{q}(s_{t+1}, a_{t+1}, w_t) - \hat{q}(s_t, a_t, w_t)]\nabla_w\hat{q}(s_t, a_t, w_t)$$

除了标蓝的地方略有差别，其他和tabular是一样的。

1. 因为我们描述的参数从state变为了parameter, 所以更新的内容从$q(s,a)$变为了$w$
2. 使用估计值来估计一个点的state，所以原先的$q(s,a)$ 变为了由函数估计产生的$\hat{q}(s,a,w)$
3. 最后乘上$\hat{q}$ 的梯度来使得向零点移动。

步骤如下：

1. 对每个episode 执行如下操作：
2. 遵循$\pi_t(s_t)$ 执行动作$a_t$ ，然后生成$r_{t+1}, s_{t+1}$ ，然后遵循$\pi_t(s_{t+1})$执行$a_{t+1}$ .
3. 更新值（parameter update）：

   $$w_{t+1} = w_t + \alpha_t[r_{t+1} + \gamma\hat{q}(s_{t+1}, a_{t+1}, w_t) - \hat{q}(s_t, a_t, w_t)]\nabla_w\hat{q}(s_t, a_t, w_t)$$

4. 更新策略(policy update):

$$\pi_{t+1}(a|s_t) = 1 - \frac{\epsilon}{|\mathrm{A}(s)|}(|\mathrm{A}(s)| - 1) \qquad if a = arg\,max_{a\in\mathrm{A}(s_t)}\hat{q}(s_t, a, w_{t+1})$$

$$\pi_{t+1}(a|s_t) = \frac{\epsilon}{|\mathrm{A}(s)|} \qquad otherwise$$

## Q-learning

Q-learning 和value function estimation 结合：

$$w_{t+1} = w_t + \alpha_t[r_{t+1} + \gamma \max_{\alpha\in\mathrm{A}(s_{t+1})}\hat{q}(s_{t+1}, a, w_t) - \hat{q}(s_t, a, w_t)]\nabla_w\hat{q}(s_t, a_t, w_t)$$

蓝色部分为value function estimation 版本的Q-learning和tabular 版本之间的区别。

步骤如下（on-policy）：

1. 对每个episode 执行如下操作：
2. 遵循$\pi_t(s_t)$ 执行动作$a_t$ ， 然后生成$r_{t+1}, s_{t+1}$
3. 更新值（parameter update）：

$$w_{t+1} = w_t + \alpha_t[r_{t+1} + \gamma \max_{\alpha \in \mathrm{A}(s_t+1)} \hat{q}(s_{t+1}, a, w_t) - \hat{q}(s_t, a, w_t)]\nabla_w \hat{q}(s_t, a_t, w_t)$$

4. 更新策略(policy update)：

$$\pi_{t+1}(a|s_t) = 1 - \frac{\epsilon}{|\mathrm{A}(s)|}(|\mathrm{A}(s)| - 1) \qquad if a = arg\,max_{a \in \mathrm{A}(s_t)} \hat{q}(s_t, a, w_{t+1})$$

$$\pi_{t+1}(a|s_t) = \frac{\epsilon}{|\mathrm{A}(s)|} \qquad otherwise$$

## Deep Q-learning(deep Q-network)

首先定义损失函数：objective function/loss function:

$$J(w) = \mathbb{E}[(R + \gamma \max_{\alpha \in \mathrm{A}(S')} \hat{q}(S', a, w) - \hat{q}(S, A, w))^2]$$

这是一个贝尔曼最优误差，下式为Q-learning的Bellman optimality error：

$$q(s, a) = \mathbb{E}[R_{t+1} + \gamma \max_{\alpha \in \mathrm{A}(S-t+1)} q(S_{t+1}, a)|S_t = s, A_t = a], \forall s, a$$

因此$R + \gamma \max_{\alpha \in \mathcal{A}(S')} \hat{q}(S', a, w) - \hat{q}(S, A, w)$ 的期望应该是0.

如何最小化这个损失函数？ 使用梯度下降法 Grradient-descent：

求$J(w)$ 关于w的梯度，难点在于表达式中由两个地方出现了$w$ ，于是基本思想为我们把前半部分当作一个常数y：

$$y = R + \gamma \max_{\alpha \in \mathrm{A}(S')} \hat{q}(S', a, w)$$

这样就只有$\hat{q}(S, A, w)$ 项包含w了，就可以比较简单地求解梯度。

求解方法：

引入两个网络

- main network 表示$\hat{q}(s,a,w)$
- target network $\hat{q}(s,a,w_T)$

将损失函数改写为：

$$J(w)=\mathbb{E}[(R+\gamma \underset{\alpha\in \mathrm{A}(S')}{max}\hat{q}(S',a,w_T)-\hat{q}(S,A,w))^2]$$

即我们保持target network一段时间不动，因此就能将前半部分作为常数，然后来更新main network。 之后再更新target network。这样也能保证两个网络最后都收敛。

## DQN-Experience replay

Experience replay经验回放 ，具体为：

- 我们在收集完数据后，并不根据他们被收集的顺序来使用他们。
- 而是我们把他们存储到一个集合replay buffer 中， $\mathcal{B}=\{(s,a,r,s')\}$
- 每次训练神经网络的时候， 把他们混到一起，然后取出一些样本(mini-batch)来进行训练。
- 在取出样本的时候一定要服从均匀分布(uniform distribution)

为什么需要经验回放？为什么必须服从均匀分布？

我们观察损失函数：

$$J(w)=\mathbb{E}[(R+\gamma \underset{\alpha\in \mathrm{A}(S')}{max}\hat{q}(S',a,w)-\hat{q}(S,A,w))^2]$$

- $(S,A)\sim d$ 我们根据索引(S,A) 就能够找到一个唯一的随机变量d
- $R\sim p(R|S,A),S'\sim p(S'|S,A)$ ， R和S’ 由给定的模型决定。
- 在数据采集的时候，我们可能并不是按照均匀分布采样的。因为他们被确定的策略产生。
- 为了打破连续样本之间的相关性(通常他们有很强的时间相关性)，我们可以从replay buffer中进行随机均匀采样。
- 这就是为什么经验回放是必须的，并且是必须均匀分布采样的。

## Deep Q-learning

off-policy version:
目标是从通过 behavior policy $\pi_b$ 生成的一些经验中学习一个优化的target network来逼近最优action values 。

步骤如下：

1. 存储由behavior policy 生成的经验，存放到replay buffer中 $\mathcal{B}=\{(s,a,r,s')\}$
2. 对每一次迭代重复如下动作：
3. 从$\mathcal{B}$ 中均匀提取一些样本(mini-batch)
4. 对于每个样本$(s,a,r,s')$ ,计算target value $y_T=r+\gamma\, max_{\alpha\in\mathcal{A}(s')}(\hat{q},a,w_T)$ , 在这之中$w_T$ 是target network(两个网络之一)
5. 使用mini-batch$\{(s,a,y_T)\}$ 更新main network 来最小化$(y_T-\hat{q}(s,a,w))^2$
6. 每进行C次迭代，更新target network：$w_T=w$

# 第九章 Policy Function Approximation

policy function approximation 也叫policy gradient

之前的方法都是value based ， 本次的算法是policy based

在这之前的策略都是用表格来表达的： 即给定$(s_i,a_j)$ ， 会得到一个策略 $\pi(a_i|s_j)$ 。

我们将他写成函数

$$\pi(a|s,\theta)$$

这里的$\theta$ 是一个向量，表示参数。

> 用函数代替表格的好处：
>
> - 如果state有很多很多个，那么在存储上会很费力，
> - 难以进行泛化，在表格中，如果要更改$\pi(a|s)$，那么一定要访问$\pi(a|s)$ ，而如果用表达式来表达的话，则可以通过更改参数来更改一系列的 $\pi$

tabular 和function representations的区别：

1. 定义最优的策略：

   在表格情况下，策略$\pi$ 当在每一个state value上都最大的时候是最优的。

   在函数表示中，策略$\pi$ 当能够最大化scalar metrics的时候是最优的

2. 怎么获取一个action的probability？

   在表格中，使用索引来得到一个action的probability。

   在函数中，需要放入神经网络中进行计算得出。

3. 如何更新policies？

   在表格中：直接改变表格中的$\pi(a|s)$ 的值

   在函数中，通过更改$\theta$ 间接修改策略。

policy gradient的目标函数(metric)是：最大化 $J(\theta)$

$$\theta_{t+1} = \theta_t + \alpha \nabla_\theta J(\theta_t)$$

## policy gradient的两个metrics

metric（度量）

1. 第一个metric是state value的加权平均。

$$\overline{v}_\pi = \sum_{s \in S} d(s) v_\pi(s) = d^T v_\pi$$

在这里$\sum_{s \in S} d(s) = 1$ ，既可以代表权重，可以代表选择$v_\pi(s)$ 的概率。

如何选择d(s)？

第一种情况是d和$\pi$ 无关。

- 那么求$\overline{v}_\pi$ 的梯度不需要得到d对$\pi$ 的梯度。
- 例如令$d_0(s) = \frac{1}{|S|}$ ,得到均匀分布。
- 或者我们对其中的某些状态很关心$d_0(s_0) = 1, d_0(s \neq s_0) = 0$ ，这时候$\overline{v}_\pi = v_\pi(s_0)$

第二种情况是d和$\pi$有关,即d依赖于$\pi$

- 一种基本的情况是$d_\pi$满足$d_\pi^T P_\pi = d_\pi^T$
- 那么会有些状态访问的次数较多，有些状态访问的次数较少。

2. 第二个metric是average one-step reward

$$r_\pi \approx \sum_{s\in S} d_\pi(s) r_\pi(s) = [r_\pi(S)]$$

在这里$S \sim d_\pi$ ,有如下公式：

$$r_\pi(s) \approx \sum_{a\in\mathcal{A}} \pi(a|s) r(s,a)$$

代表在一个状态得到的reward的加权平均。

$$r(s,a) = \mathbb{E}(R|s,a) = \sum_r r p(r|s,a)$$

下面给出average one-step reward的第二种形式：

假设根据一个给定的策略生成了一个trajectory，并有着 $(R_{t+1}, R_{t+2}, R_{t+3}, \dots)$ 的reward。

那么在这个trajectory中，平均的single-step reward是

$$\begin{aligned} &\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \mathbb{E}[R_{t+1} + R_{t+2} + \dots + R_{t+n} | S_t = s_0] \\ =&\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \mathbb{E}[\sum_{k=1}^{n} R_{t+k} | S_t = s_0] = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \mathbb{E}[\sum_{k=1}^{n} R_{t+k}] \end{aligned}$$

注意到最后当$n \to \infty$ 时，可以将$S_t = s_0$ 省去，因为当走了无穷步的时候，从哪一步开始就已经无所谓了。

注意点1：
所有这些的metrics都是$\pi$ 的函数。因为$\pi$ 是由参数$\theta$ 决定，这些metrics也是关于$\theta$ 的函数，也就是说不同的$\theta$ 会产生不同的metric values. 我们就可以找到最优的$\theta$ 来使得这些metrics最优。

注意点2：

这些metrics可以被定义为有折旧的情况(discounted case)，即$\gamma \in [0,1)$ ，也可以是undiscounted case的，即$\gamma = 1$

注意点3：

在直观上，$\overline{r}_\pi$和 $\overline{v}_\pi$ 相比，似乎更加”近视“，因为他更多地考虑立即的reward，而$\overline{v}_\pi$ 考虑整个过程的reward。

实则不然，两个metrics实际上是相互等价的。当$\gamma < 1$ ，有如下公式：

$$\overline{r}_\pi = (1-\gamma)(\overline{v}_\pi)$$

metric还有一种常见的表示形式如下：

$$J(\theta)=\mathbb{E}[\sum_{i=0}^{\infty}\gamma^t R_{t+1}]$$

它实际上和$\overline{v}_\pi$ 是相同的，下面给出推导过程：

$$\begin{aligned}J(\theta)&=\mathbb{E}[\sum_{i=0}^{\infty}(\gamma^t R_{t+1})]\\&=\mathbb{E}[\sum_{i=0}^{\infty}(\gamma^t\sum_{s\in S}d(s)R_{t+1,s})]\\&=\sum_{s\in S}(d(s)\mathbb{E}[\sum_{t=0}^{\infty}\gamma^t R_{t+1}|S_0=s])\\&=\sum_{s\in S}d(s)v_\pi(s)=\overline{v}_\pi\end{aligned}$$

## 目标函数的梯度计算

梯度如下：

$$\nabla_\theta J(\theta)=\sum_{s\in S}\eta(s)\sum_{a\in\mathcal{A}}\nabla_\theta\pi(a|s,\theta)q_\pi(s,a)$$

又可以写作

$$\nabla_\theta J(\theta)=\mathbb{E}[\nabla_\theta ln\,\pi(A|S,\theta)q_\pi(S,A)]$$

写成期望的形式便于我们用采样来模拟期望。

下面是推导期望公式的过程：

由链式法则得：

$$\begin{aligned}\nabla_\theta ln\pi(a|s,\theta)&=\frac{\nabla_\theta\pi(a|s,\theta)}{\pi(a|s,\theta)}\\\nabla_\theta\pi(a|s,\theta)&=\pi(a|s,\theta)\nabla_\theta ln\pi(a|s,\theta)\end{aligned}$$

把式子带入梯度表达式中：

$$\begin{aligned}\nabla_\theta J(\theta)&=\sum_s d(s)\sum_a\nabla_\theta\pi(a|s,\theta)q_\pi(s,a)\\&=\sum_s d(s)\sum_a\pi(a|s,\theta)\nabla_\theta ln\pi(a|s,\theta)q_\pi(s,a)\\&=\mathbb{E}_{S\sim d}[\sum_a\pi(a|S,\theta)q_\pi(S,A)]\\&=\mathbb{E}_{S\sim d,A\sim\pi}[\nabla_\theta ln\pi(A|S,\theta)q_\pi(S,A)]\\&=\mathbb{E}[\nabla_\theta ln\pi(A|S,\theta)q_\pi(S,A)]\end{aligned}$$

因为我们求了$ln(\pi(a|s,\theta))$ 所以我们的$\pi$必须满足$\pi(a|s,\theta)>0$ ,可以用softmax方式来将$(-\infty,\infty)$ 的值域归一化到$(0,1)$

$$z_i=\frac{e^{x_i}}{\sum_{j=1}^{b}e^{x_j}}$$

同时还满足$\sum_{i=1}^{b}z_i=1$

## REINFORCE

reinforce是一种 policy gradient algorithm

根据上一节的目标函数，我们可以得到迭代方程：

$$\begin{aligned}\theta_{t+1}&=\theta_t+\alpha_\theta J(\theta)\\&=\theta_t+\alpha_\theta\mathbb{E}[\nabla_\theta ln\pi(A|S,\theta)q_\pi(S,A)]\end{aligned}$$

但我们知道，期望是很难算的， 我们要用stochastic方式来代替真实的期望。

$$\theta_{t+1}=\theta_t+\alpha_\theta\nabla_\theta ln\pi(a_t|s_t,\theta_t)q_\pi(s_t,a_t)$$

但我们的$q_\pi$ 是不知道的，于是我们可以用$q_t$ 来代替$q_\pi$

$$\theta_{t+1}=\theta_t+\alpha\nabla_\theta ln\pi(a_t|s_t,\theta_t)q_t(s_t,a_t)$$

如何对$q_t$进行采样？

1. 基于蒙德卡罗的方法，即本节的REINFORCE
2. 其他方法

注意一：

如何做采样？

1. 如何对S做采样？ $S\sim d$ ， 经过$\pi$ 下不断迭代得到$d$ ,然后采样得到S。但实际中我们没时间等d趋于平稳再采样。
2. 如何对A做采样？ $A\sim\pi(A|S,\theta)$ , 根据 在$s_t$ 处的策略$\pi(\theta_t)$ 来对A进行采样。

因此，这个policy gradient 方法是on-policy的。

注意二：

如何理解算法？

$$\begin{aligned}\theta_{t+1} &= \theta_t \alpha \nabla_\theta ln\pi(a_t|s_t,\theta_t) q_t(s_t,a_t) \\ &= \theta_t + \alpha(\frac{q_t(s_t,a_t)}{\pi(a_t|s_t,\theta_t)}) \nabla_\theta \pi(a_t|s_t,\theta_t)\end{aligned}$$

我们设定$\beta_t = \frac{q_t(s_t,a_t)}{\pi(a_t|s_t,\theta_t)}$

于是原式变为如下：

$$\theta_{t+1} = \theta_t + \alpha\beta_t \nabla_\theta \pi(a_t|s_t,\theta_t)$$

于是我们就可以发现，我们是通过改变$\theta$ ，来优化$\pi(a_t|s_t,\theta)$ 的值。

所以我们步长$\alpha\beta_t$ 要足够小才能收敛。

- 当$\beta_t > 0$ , 那么选择$(s_t,a_t)$ 的可能更大，于是有$\pi(a_t|s_t,\theta_{t+1}) > \pi(a_t|s_t,\theta_t)$
- 当$\beta_t < 0$ ，那么$\pi(a_t|s_t,\theta_{t+1}) < \pi(a_t|s_t,\theta_t)$

数学推导如下：

当$\theta_{t+1} - \theta_t$ 足够小时，有

$$\begin{aligned}\pi(a_t|s_t,\theta_{t+1}) &\approx \pi(a_t|s_t,\theta_t) + (\nabla_\theta \pi(a_t|s_t,\theta_t))^T(\theta_{t+1} - \theta_t) \\ &= \pi(a_t|s_t,\theta_t) + \alpha\beta_t(\nabla_\theta \pi(a_t|s_t,\theta_t))^T(\nabla_\theta \pi(a_t|s_t,\theta_t)) \\ &= \pi(a_t|s_t,\theta_t) + \alpha\beta_t||\nabla_\theta \pi(a_t|s_t,\theta_t)||^2\end{aligned}$$

系数$\beta_t$ 能够很好地平衡$exploration$ 和$exploitation$

首先$\beta_t$ 与$q_t(s_t,a_t)$ 成正比。

- 如果$q_t(s_t,a_t)$ 比较大，那么$\beta_t$ 也比较大。
- 因此此时算法倾向于使用更大的值来增强$q_t$ ,也就是exploitation

其次：$\beta_t$ 与$\pi(a_t|s_t,\theta_t)$ 成反比。

- 如果$\pi(a_t|s_t,\theta_t)$ 很小，那么$\beta_t$ 很大。下次的$pi(a_t|s_t,\theta_{t+1})$更大，就会给出更大的选择概率。
- 因此算法倾向于概率较低的探索操作。即exploration

REINFORCE算法实现如下；

初始化参数$\pi(a|s,\theta), \gamma \in (0,1), \alpha > 0$

目标是最大化$J(\theta)$

对于第k次迭代：

1. 选择一个$s_0$，遵循$\pi(\theta_k)$生成episode，假设episode是$\{s_0, a_0, r_1, \ldots, s_{T-1}, a_{T-1}, r_T\}$
2. 对于每个$t = 0, 1, 2, ., ., , T-1$ 执行3和4：
3. value update：$q_t(s_t, a_t) = \sum_{k=t+1}^{T} \gamma^{k-t-1} r_k$
4. policy update:$\theta_{t+1} = \theta_t + \alpha \nabla_\theta ln\pi(a_t|s_t, \theta_t) q_t(s_t, a_t)$

# 第十章 actor-critic 方法

actor-critic本身就是policy gradient

## The simplest actor-critic

也称QAC（这里的Q是公式中的q，也就是action value）

policy gradient算法：

$$\begin{aligned}\theta_{t+1} &= \theta + \alpha \nabla_\theta J(\theta_t) \\ &= \theta_t + \alpha \mathbb{E}_{S\sim\eta, A\sim\pi}[\nabla_\theta ln\pi(A|S, \theta_t) q_\pi(S, A)] \\ \theta_{t+1} &= \theta_t + \alpha \nabla_\theta ln\pi(a_t|s_t, \theta_t) q_t(s_t, a_t)\end{aligned}$$

这个更新策略的算法就是actor， critic则用来估计$q_t(s_t, a_t)$

如何得到$q_t(s_t, a_t)$ ？

两种方法：

1. MC learning：这样结合就得到了REINFORCE算法。
2. Temporal-difference learning： actor-critic算法。

优化目标函数$J(\theta)$，使其最大化。

对于每个episode的第t步，执行如下：

1. 遵循$\pi(a|s_t, \theta_t)$ 生成$a_t$，得到$(r_{t+1}, s_{t+1})$ ,然后遵循$\pi(a|s_{t+1}, \theta_t)$ 生成$a_{t+1}$
2. Critic（value update）：

   $$w_{t+1} = w_t + \alpha_w[r_{t+1} + \gamma q(s_{t+1}, a_{t+1}), w_t] - q(s_t, a_t, w_t) \nabla_w q(s_t, a_t, w_t)$$

   Actor (policy update):

   $$\theta_{t+1} = \theta_t + \alpha_\theta \nabla_\theta ln\pi(a_t|s_t, \theta_t) q(s_t, a_t, w_{t+1})$$

这个算法是on-policy 的。

The simplest actor-critic实际上就是 SARSA + value function approximation

## advantage actor-critic

也叫AAC ， A2C

首先我们为policy gradient 引入一个新的baseline（b函数）

$$\begin{aligned}\nabla_\theta J(\theta) &= \mathbb{E}_{S\sim\eta, A\sim\pi}[\nabla_\theta \ln \pi(A|S,\theta_t) q_\pi(S,A)] \\ &= \mathbb{E}_{S\sim\eta, A\sim\pi}[\nabla_\theta \ln \pi(A|S,\theta_t)(q_\pi(S,A) - b(S))]\end{aligned}$$

为什么引入新的b 函数，等式依然成立？

因为如下公式成立：

$$\mathbb{E}_{S\sim\eta, A\sim\pi}[\nabla_\theta \ln \pi(A|S,\theta_t) b(S)] = 0$$

详细地说:

$$\begin{aligned}\mathbb{E}_{S\sim\eta, A\sim\pi}[\nabla_\theta \ln \pi(A|S,\theta_t) b(S)] &= \sum_{s\in S}\eta(s)\sum_{a\in\mathcal{A}}\pi(a|s,\theta_t)\nabla_\theta \ln\pi(a|s,\theta_t)b(s) \\ &= \sum_{s\in S}\eta(s)\sum_{a\in\mathcal{A}}\nabla_\theta\pi(a|s,\theta_t)b(s) \\ &= \sum_{s\in S}\eta(s)b(s)\sum_{a\in\mathcal{A}}\nabla_\theta\pi(a|s,\theta_t) \\ &= \sum_{s\in S}\eta(s)b(s)\nabla_\theta\sum_{a\in\mathcal{A}}\pi(a|s,\theta_t) \\ &= \sum_{s\in S}\eta(s)b(s)\nabla_\theta 1 = 0\end{aligned}$$

引入这个b函数有什么用？

我们说$\nabla_\theta J(\theta) = \mathbb{E}[X]$

那么我们知道

- $\mathbb{E}[X]$ 和b(S) 无关。
- X的方差和b有关。

所以我们可以通过设置b函数来减小方差。

设置b函数为如下值时，能使得方差最小：

$$b^*(s) = \frac{\mathbb{E}_{A\sim\pi}[||\nabla_\theta \ln\pi(A|s,\theta_t)||^2 q(s,A)||]}{\mathbb{E}_{A\sim\pi}[||\nabla_\theta \ln\pi(A|s,\theta_t)||^2||]}$$

其中$||\nabla_\theta \ln\pi(A|s,\theta_t)||^2$ 可以被认为是一个权重。

但是这个公式太复杂了。我们一般直接用

$b(s) = \mathbb{E}_{A\sim\pi}[q(s,A)] = v_\pi(s)$

把上式带入公式中，我们可以得到gradient-ascent算法：

$$\begin{aligned}\theta_{t+1} &= \theta_t + \alpha\mathbb{E}[\nabla_\theta \ln\pi(A|S,\theta_t)(q_\pi(S,A) - v_\pi(S))] \\ &= \theta_t + \alpha\mathbb{E}[\nabla_\theta \ln\pi(A|S,\theta_t)(\delta_\pi(S,A))]\end{aligned}$$

我们叫$\delta_\pi(S,A) = q_\pi(S,A) - v_\pi(S)$ 为advantage funciton（优势函数）

$v_\pi(S)$ 是某个状态下的action的平均值， 所以$\delta_\pi(S,A)$ 描述了当前的action和同状态的其他action相比的优劣。

公式还可以写成下面：

$$\begin{aligned}\theta_{t+1} &= \theta_t + \alpha\nabla_\theta \ln\pi(a_t|s_t,\theta_t)\delta_t(s_t,a_t) \\ &= \theta_t + \alpha\frac{\nabla_\theta\pi(a_t|s_t,\theta_t)}{\pi(a_t|s_t,\theta_t)}\delta_t(s_t,a_t) \\ &= \theta_t + \alpha\frac{\delta_t(s_t,a_t)}{\pi(a_t|s_t,\theta_t)}\nabla_\theta\pi(a_t|s_t,\theta_t)\end{aligned}$$

于是我们公式中的$\frac{\delta_t(s_t,a_t)}{\pi(a_t|s_t,\theta_t)}$ 决定了step-size（和第9讲REINFORCE中的$\beta_t$ 一样能够很好地平衡*exploration* 和*exploitation*

A2C ，或者TD actor-critic 的过程：

目标是寻找最大的$J(\theta)$

在每个episode的第t时刻，我们执行如下：

1. 遵循$\pi(a|s_t,\theta_t)$生成$a_t$ 然后得到$r_{t+1}, s_{t+1}$
2. TD error(advantage function):

   $\delta_t = r_{t+1} + \gamma v(s_{t+1},w_t) - v(s_t,w_t)$
3. Critic (value update):

   $w_{t+1} = w_t + \alpha_w\delta_t\nabla_w v(s_t,w_t)$
4. Actor(plicy update):

   $\theta_{t+1} = \theta_t + \alpha_\theta\delta_t\nabla_\theta \ln\pi(a_t|s_t,\theta_t)$

这是一个on-policy 的。

## off-policy actor-critic

Policy gradient是on-policy的原因是梯度必须服从$\pi$ 策略，这里的$\pi$ 既是behavior policy ， 同时这个$\pi$ 也是我们要更新的target policy。

可以使用importance sampling 来把on-policy转为off-policy。

$$\mathbb{E}_{X\sim p_0}[X]=\sum_x p_0(x)x=\sum_x p_1(x)\frac{p_0(x)}{p_1(x)}x=\mathbb{E}_{X\sim p_1}[f(X)]$$

于是我们就可以通过$p_1$ 进行采样，然后估计$p_0$ 采样下的均值。 那么热和计算$\mathbb{E}_{X\sim p_1}[f(X)]$ ?

令f为如下函数：

$$f=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}f(x_i),\text{where } x_i\sim p_i$$

那么就有

$$\mathbb{E}_{X\sim p_1}[\overline{f}]=\mathbb{E}_{X\sim p_1}[f(X)]$$
$$var_{X\sim p_1}[\overline{f}]=\frac{1}{n}var_{X\sim p_1}[f(X)]$$

所以$\overline{f}$ （f的平均数）就可以用来估计$\mathbb{E}_{X\sim p_1}[\overline{f}]=\mathbb{E}_{X\sim p_0}[X]$

$$\mathbb{E}_{X\sim p_0}[X]\approx\overline{f}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}f(x_i)=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\frac{p_0(x_i)}{p_1(x_i)}x_i$$

这里的$\frac{p_0(x_i)}{p_1(x_i)}$ 可以被认为是权重，那么直观地看就是对于$p_0$ 相对难取的样本，赋予更高的权重。

这个权重叫做 importance权重。

就是因为我们只能知道$p_0(x)$ ，但求不出$\mathbb{E}_{X\sim o_0}[X]$ , 所以才需要importance sampling。

假设$\beta$ 是behavior policy生成的经验采样。

我们的目标是更新target policy $\pi$ 来最大化$J(\theta)$

$$J(\theta)=\sum_{s\in S}d_\beta(s)v_\pi(s)=\mathbb{E}_{S\sim d_\beta}[v_\pi(S)]$$

他的梯度如下：

$$\nabla_\theta J(\theta)=\mathbb{E}_{S\sim\rho,A\sim\beta}[\frac{\pi(A|S,\theta)}{\beta(A|S)}\nabla_\theta\ln\pi(A|S,\theta)q_\pi(S,A)]$$

这里的$\beta$ 是behavior policy ， $\rho$ 是state distribution。

优化：

我们仍然可以通过加上baseline来进行优化：$\delta_\pi(S,A)=q_\pi(S,A)-v_\pi(S)$ 。

$$\theta_{t+1}=\theta_t+\alpha_\theta\frac{\pi(a_t|s_t,\theta_t)}{\beta(a_t|s_t)}\nabla_\theta\ln\pi(a_t|s_t,\theta_t)(q_t(s_t,a_t)-v_t(s_t))$$

在这之中

$$q_t(s_t,a_t)-v_t(s_t)\approx r_{t+1}+\gamma v_t(s_{t+1})-v_t(s_t)=\delta_t(s_t,a_t)$$

于是最终的算法就是

$$\theta_{t+1}=\theta_t+\alpha_\theta\frac{\delta_t(s_t,a_t)}{\beta(a_t|s_t)}\nabla_\theta\ln\pi(a_t|s_t,\theta_t)\pi(a_t|s_t,\theta_t)$$

## Deterministic actor-critic

DPG和之前的（QAC，A2C、off-policy的actor-critic）相比的一大特点就是他的策略$\pi(a|s,\theta)$ 可以是负数。

于是我们用deterministic policies来解决continuous action（无限个的、连续的action）

之前我们是通过策略 $\pi(a|s,\theta)\in[0,1]$ 来决定要采取哪个动作a。

而现在我们改成下面这样：

$$a=\mu(s,\theta)$$

意味着我们直接通过s得到a的值，而不是借助每一个action的概率来决定选择哪个a。

$$J(\theta)=\mathbb{E}[v_\mu(s)]=\sum_{s\in S}d_0(s)v_\mu(s)$$

$d_0$ 的选择和$\mu$ 无关。

选择$d_0$的两种特殊的情况：

1. $d_0(s_0)-1$ ,$d_0(s\neq s_0)=0$ . 在这里$s_0$ 是一个特殊的开始状态。
2. $d_0$ 取决于behavior policy 在$\mu$ 上的内容。

$$\begin{aligned}\nabla_\theta J(\theta)&=\sum_{s\in S}\rho_\mu(s)\nabla_\theta\mu(s)(\nabla_a q_\mu(s,a))|_{a=\mu(s)}\\&=\mathbb{E}_{S\sim\rho_\mu}[\nabla_\theta\mu(s)(\nabla_a q_\mu(s,a))|_{a=\mu(s)}]\end{aligned}$$

这里面的梯度没有action A。

所以这个deterministic policy gradient 是一个off-policy的方法。（因为我们不需要关心这个a是通过哪个策略得到的）

梯度上升：

$$\theta_{t+1} = \theta_t + \alpha_\theta \mathbb{E}_{S\sim\rho_\mu}[\nabla_\theta \mu(s)(\nabla_a q_\mu(s,a))|_{a=\mu(s)}]$$
$$\theta_{t+1} = \theta_t + \alpha_\theta \nabla_\theta \mu(s_t)(\nabla_a q_\mu(s_t,a))|_{a=\mu(s)}$$

注意：

- $\beta$ 和$\mu$ 是不同的。
- $\beta$ 也可以设置为$\mu + noise.$

如何选取$q(s,a,w)$ ?

1. 线性函数： $q(s,a,w) = \phi^T(s,a)w$
2. 神经网络：DDPG