Q P.

Least squares (LS)        Linear programm (LP)

Quadratic program (QP)

< Summary >

1. QP 가 무엇인지, LP와 LS가 QP의 special case 인지?

2. QP가 closed-form solution 을 가지는 special case : constrained LS에 대하여

3. general QP는 어떤식으로 다룰것인지!

# Quadratic Program

QP in standard form

⇒ QP의 standard form은 다음과 같음!

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d} \; \omega^T x + x^T Q x \; :$$

$$Ax + b \leq 0$$

$$Cx - e = 0$$

이때, $Q = Q^T \in \mathbb{R}^{d \times d} \succeq 0$ 이면 positive semi-definite (PSD) matrix 이다!

square & symmetric matrix (i.e., $Q = Q^T \in \mathbb{R}^{d \times d}$) is positive semi-definite, if $v^T Q v \geq 0$, $\forall v \in \mathbb{R}^d$ (i.e., all the eigenvalues of $Q$ are non-negative)

⇒ simply denoted by $Q \succeq 0$

* ($\succeq$ : curly inequality, which means that all the eigenvalues are non-negative)

이제 이 problem이 convex 가 맞는지 살펴보자. 먼저 inequality 및 equality constraint에 의해 유도되는 set은 convex 임이 자명하다. 이제 object function에 대해 살펴보자!

convex의 sum도 convex 임을 기억!

첫번째 항 $\omega^T x$ 은 affine (선형식) 이므로 convex 이다. 또한 convexity 는 additivity 에 의해 유지된다!

따라서 우리는 두번째 항 $x^T Q x$ 에 대해서만 판별하면 된다!

second order condition of convexity 에 의해, 우리는 objective function 의 Hessian 즉, second derivative가 PSD 라면 이는 convex 임을 알 수 있다!

$$
\begin{aligned}
\nabla^2 (x^T Q x) &= \nabla ((Q + Q^T) x) \\
&= \nabla (2 Q x) \\
&= 2Q \succeq 0 \quad \text{(Q가 PSD 인 경우 성립)}
\end{aligned}
$$

이제 QP가 LP와 LS를 포함하는 관계 연결을 알아보자!

## Subsumes LP

$Q=0$ 인 상황을 생각해보자!

$$
\min_{x \in \mathbb{R}^d} \omega^T x \ :
$$
$$
Ax - b \le 0
$$
$$
Cx - e = 0
$$

이는 LP와 같다. → 즉, $Q=0$ 인 상황에서 LP문제에에 LP가 QP에 포함된다!

## Subsumes LS

$$
\min_{x \in \mathbb{R}^d} \omega^T x + x^T Q x \ :
$$
$$
Ax - b \le 0
$$
$$
Cx - e = 0
$$

LS의 standard form을 생각해보면 다음과 같다.

$$
\min_{x \in \mathbb{R}^d} \| Ax - b \|^2
$$

이때 objective function을 변형하여 (message), QP form 으로 만들어보자!

$$\|Ax-b\|^2 = (Ax-b)^T(Ax-b)$$
$$= x^TA^TAx - 2b^TAx + b^Tb$$

먼저 $b^Tb$은 optimization variable $x$에 영향을 받지 않는 constant 이기 때문에 중요하지 않다. 두번째 term $-2b^TAx$는 $x$에 대해 affine (선형식) 이므로, QP의 $w^Tx$에 대응된다. 마지막으로! 첫번째 term $x^TQx$와 대응하는 것을 알 수 있는데, 이때 $A^TA$가 Q와 대응 됨에 따라 $A^TA$가 PSD 임을 보이면 된다!

$A^TA \succeq 0$ 의 증명:

$v \in \mathbb{R}^d$ 인 어떤 vector $v$를 생각해보자!

이때, $v^TA^TAv = (Av)^TAv$ 이다.

$(Av)^TAv$는 $Av$의 inner product 이므로, $(Av)^TAv = \|Av\|^2$. 이는 Euclidean distance 이므로

non-negative 하다 (PSD 임을 만족!)

위의 관계 $\forall v \in \mathbb{R}^d$에 의해 성립한다!

## Equality-constrained LS

유한한 수의 표준 수학 연산을 통해 정확한 해를 명시적으로 표현 가능!

이제 closed-form solution 이 존재하는 QP에 대해 알아보자: Equality-constrained LS

(기존 LS와 다른점은 equality constraint 가 추가되었다는 점!)

$$\min_{x\in\mathbb{R}^d} \|Ax-b\|^2$$
$$Cx - e = 0$$
$$(\text{where } A \in \mathbb{R}^{m\times d},\ C \in \mathbb{R}^{p\times d})$$

여기서 A의 dimension 을 생각해보자! 우리는 $m \ge d$ 인 상황에만 관심이 있다!

(만약 $m < d$ 이면 under-determined system 이므로 in general, infinite solution 존재

→ objective function 을 0으로 만들기 쉽다!)

이제 C를 보자! 이는 p와 d의 관계에 따라 두가지 case로 나뉘어 진다.

1. $p \ge d$

이는 interesting case가 아니다. 이경우엔 equality constraint에 의해 $x^*$가 쉽게 결정되거나 근이 없게 된다.

쉽게 결정 ← $p=d$ 인 경우를 생각해 보면, 미지수와 식의 개수가 같은 경우이므로 이때의 근은 하나로 결정된다. 따라서 objective function의 값도 결정이 되기 때문에 이 case에서는 특별히 얻을 수 있는 것이 없다!

근이 없음! ← $p>d$ 인 경우에, 주어진 변수에 대한 constraint 가 매우 많다는 것이다. 이때는 equality constraint 이기에! 가지고 있는 변수가 더 적기 때문에 no solution case가 된다.

2. $p<d$

앞서 설명했던 이유로 인해, 본 case가 interesting 하다.

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d} \|Ax-d\|^2 : \quad A \in \mathbb{R}^{m \times d} \quad (m \ge d)$$

$$Cx - e = 0 \quad C \in \mathbb{R}^{p \times d} \quad (p < d)$$

이제 두가지 가정을 할것! (wide matrix : 열 > 행, tall matrix : 행 > 열)

① $\mathrm{rank}(C) = p$ → fat matrix, row 끼리 linear independent, full rank

② $\mathrm{rank}\left(\begin{bmatrix} A \\ C \end{bmatrix}\right) = d$ → tall matrix, column 끼리 linear independent, full rank.

* 이 조건들은 보통 실제로 성립.

# Closed-form solution.

이제, 위에서 정리한 조건들을 다 적어 새로 식을 작성해보자!

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d} \|Ax - b\|^2 \quad : \quad A \in \mathbb{R}^{m \times d} \ (m \geq d)$$

$$Cx - e = 0 \qquad C \in \mathbb{R}^{p \times d} \ (p < d)$$

$$\left(\text{where } \operatorname{rank}(C) = p, \ \operatorname{rank}\left(\begin{bmatrix} A \\ C \end{bmatrix}\right) = d \right)$$

이때의 closed-form solution을 먼저 표현해 볼 것인데, 이에 앞서 일반적인 LS problem 에서의 closed-form solution을 다시 복습해보자!

$$x^* = (A^T A)^{-1} A^T b$$

이를 아래와 같이 변형가능!

$$(A^T A) x^* = A^T b$$

$$\Rightarrow 2(A^T A) x^* = 2A^T b$$

행렬 곱으로 정리하면 아래와 같음!

$$\begin{bmatrix} 2A^T A & C^T \\ C & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x^* \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2A^T b \\ e \end{bmatrix}$$

여기에서 $x^*$는 다음과 같이 구해질 수 있다. 참고로 'd-components(·) : takes the first d components of (·)' 이다! 즉, 여기서는 (d+p) 차원 vector 에서 처음 d개의 성분만 얻는것을 의미!

$$x^* = d\text{-components}\left\{ \begin{bmatrix} 2A^T A & C^T \\ C & 0 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 2A^T b \\ e \end{bmatrix} \right\}$$

closed-form 을 조건 식에서 바로 유도하는 것은 어려우나, $x^*$ 가 위의 조건을 만족하면 optimal 함을 보이는 방식으로 증명을 진행할 것임!

한편, 증명에 앞서서 정리하고 넘어가야 할 식이 있음!

$$\begin{bmatrix} 2A^TA & C^T \\ C & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x^* \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2A^Tb \\ e \end{bmatrix} \quad \cdots (*) \rightarrow \text{KKT equation}$$

위의 equation 을 KKT equation 이라고 함! 그리고 가장 왼쪽에 matrix를 KKT (Karush - Kuhn - Trucker) matrix 라고 함! (이후 다룰 KKT conditions 와 관련)

다시 증명으로 돌아오면 우리에게 필요한 증명은 두가지임! 각각을 증명해보자!

$x^*$, $z$가 존재한다 를 의미.

1. If $\exists (x^*, z) \in \mathbb{R}^{d+p}$ s.t. $(*)$, then $x^*$ must be optimal solution.

   i.e., $\|Ax-b\|^2 \geq \|Ax^*-b\|^2$, $\forall x$ subject to $Cx-e=0$

   → 이걸 증명하면 됨!

$$\begin{aligned} \|Ax-b\|^2 &= \|(Ax-Ax^*) + (Ax^*-b)\|^2 \\ &= \|Ax-Ax^*\|^2 + \|Ax^*-b\|^2 - 2(Ax-Ax^*)^T(Ax^*-b) \\ &= \|Ax-Ax^*\|^2 + \|Ax^*-b\|^2 - 0 \quad \cdots (**) \\ &\geq \|Ax^*-b\|^2 \end{aligned}$$

이제 $(**)$를 증명하자!

$$\begin{aligned} 2(Ax-Ax^*)^T(Ax^*-b) &= 2(x-x^*)^TA^T(Ax^*-b) \\ &= -(x-x^*)^TC^Tz \quad \because (***) \\ &= -(Cx-Cx^*)^Tz \\ &= -(e-e)^Tz \\ &= 0 \end{aligned}$$

$(***)$ 이 성립하는 이유는 $(*)$에서 $2A^TAx^* - 2A^Tb = -C^Tz$ 이므로.

2. $\begin{bmatrix} 2A^TA & C^T \\ C & 0 \end{bmatrix}$ is invertible

이는 귀류법을 통해 증명 할것! : 만약 invertible 하지 않다고 가정!

Not invertible 이라는 말은 곧 full-rank 가 아니라는 것과 같음! 또한 주어진 행렬의 차원은 $(d+p) \times (d+p)$ 이다. 여기서는 invertible 하지 않음을 가정했으므로 어떠한 column은 다른 column 들을 통해 표현될 수 있다. (linearly dependent)

따라서 다음의 식이 성립한다!

$$\exists [\bar{x} ; \bar{z}] \neq 0 : \begin{bmatrix} 2A^TA & C^T \\ C & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{z} \end{bmatrix} = 0$$

이를 풀어보면,

$$2A^TA\bar{x} + C^T\bar{z} = 0$$

$$\Rightarrow 2\bar{x}^TA^TA\bar{x} + \bar{x}^TC^T\bar{z} = 0$$

$$\Rightarrow 2\|A\bar{x}\|^2 = 0 \quad (\because C\bar{x} = 0)$$

$$\Rightarrow A\bar{x} = 0$$

$$\Rightarrow \begin{bmatrix} A \\ C \end{bmatrix} \bar{x} = 0$$

앞서 우리는 $\begin{bmatrix} A \\ C \end{bmatrix}$ 가 full-rank 임을 가정했다. 따라서 $\bar{x} = 0$ 이다.

이를 앞선 관계식에 적용해보면, $C^T\bar{z} = 0$ 이다. 그런데 이 역시 앞선 가정에서 $C^T$의 column들이 linearly independent 하므로, $\bar{z} = 0$ 이다!

정리하면 $\bar{x} = \bar{z} = 0$, 이는 처음 가정에 모순된다!

# General QP

초반에 언급됐던 바와 같이, 일반적으로 QP는 다음과 같은 standard form을 가진다!

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d} \; w^Tx + x^TQx :$$

$$Ax - b \leq 0$$

$$Cx - e = 0 \qquad \text{where } Q = Q^T \succeq 0$$