

# Manifold Denosing

---

## Manifold Denosing

Introduction

The noise model and problem statement

Denosing Algorithm

Structure on the sample-based graph

The denoising algorithm

Diffusion and Tikonov regularization

K-Nearest neighbor graph versus  $h$ -neighborhood graph

Stopping Criterion

Large sample limit and theoritical analysis

Theorem 1

Note.

The noise-free case

Lemma 2

The noisy case

Experiments

Appendix

Introduction

The first fundamental form

Gradient and Divergence : For example,

Example : Gradient on Sphere Coordinate

Divergence of a vector field on the surface

Divergence of a vector **field**

Laplace Beltrami Operator

Jacobi Formula : Matrix Defferentiation for  $\det A$

Lemma 1

proof

Note

Lemma 2

proof

Theorem : Jacobi's Lemma

proof

Corollary

proof

Levi-Civita Connection[3]

Christoffel synbol

Note

Reference

본 문서는 [1] 논문을 간략히 요약한 것이다.

## Introduction

---

## The noise model and problem statement

---

데이터는  $m$  dimensional abstract manifold  $M$  위에 존재한다고 가정한다, 이 데이터는 smooth regular embedding  $i : M \rightarrow \mathbb{R}^d$  으로 Feature space  $\mathbb{R}^d$  에 embedding 된다. 즉,

$$i(M) \subset M \quad (1)$$

이때 data Generating process  $X \in \mathbb{R}^d$  는 다음과 같이 정의된다.

$$X = i(\Theta) + \epsilon \quad (2)$$

where  $\theta \sim P_M$  and  $\epsilon \sim N(0, \sigma)$ . Probability measure  $P_M$ 은  $M$  의에서 해당되는 Volume  $dV$ 의 비율로 정의된다, 그러므로,  $P_X(x)$ 는  $P_M$  으로 부터 다음과 같이 정의된다.

$$P_X(x) = (2\pi\sigma^2)^{-\frac{d}{2}} \int_M e^{-\frac{\|x-i(\theta)\|^2}{2\sigma^2}} p(\theta) dV(\theta) \quad (1)$$

- 이때 Volume  $dV$ 는, Local coordinates 가  $\theta_1, \dots, \theta_m$  이면 다음과 같다.

$$dV = \sqrt{\det g} d\theta_1, \dots, d\theta_m \quad (3)$$

이때,  $\det g$ 는 **metric tensor**  $g$ 의 determinant 이다.

## Denosing Algorithm

위 정의에 따라  $X$  는 i.i.d sample of  $P_X$  이다,

### Structure on the sample-based graph

- Sample  $X$ 로 부터 Diffusion process를 정의한다.
- 여기에서 diffusion process의 Generator, 즉, the Graph Laplacian을 유도한다.
- Graph vertices 를  $X_i$ 로 정의하고, k-nn distance  $\{h(X_i)\}_{i=1}^n$  일때, **the weight of the k-NN graph** 는 다음과 같이 정의한다.

if  $\|X_i - X_j\| < \max\{h(X_i), h(X_j)\}$

$$w(X_i, X_j) = \exp \left( -\frac{\|X_i - X_j\|^2}{(\max\{h(X_i), h(X_j)\})^2} \right), \quad (4)$$

Otherwise  $w(X_i, X_j) = 0$  또한 graph에 Loop가 없어도 0이다.

- **The degree function  $d$**

$$d(X_i) = \sum_{j=1}^n w(X_i, X_j) \quad (5)$$

-**The inner production (or Riemmanian metric)** between two hilbert space  $\mathcal{H}_V, \mathcal{H}_E$  ( $V$  denotes vertices,  $E$  denotes Edges)

$$\langle f, g \rangle_{\mathcal{H}_V} = \sum_{i=1}^n f(X_i)g(X_i)d(X_i), \quad \langle \phi, \psi \rangle_{\mathcal{H}_E} = \sum_{i,j=1}^n w(X_i, X_j)\phi(X_i, X_j)\psi(X_i, X_j) \quad (6)$$

- **The discrete differential**

$$\nabla : \mathcal{H}_V \rightarrow \mathcal{H}_E, \quad (\nabla f)(X_i, X_j) = f(X_i) - f(X_j) \quad (7)$$

- **the Graph Laplacian**

$$\Delta : \mathcal{H}_V \rightarrow \mathcal{H}_V, \Delta = \nabla * \nabla, \quad (\Delta f)(X_i) = f(X_i) - \frac{1}{d(X_i)} \sum_{j=1}^n w(X_i, X_j)f(X_j) \quad (8)$$

- Defining the matrix  $D$  with the degree function on the **diagonal** the graph Laplacian in matrix form (see [2])

$$D = I - D^{-1}W \quad (9)$$

위 방정식은 Graph Laplacian 정의를 Matrix 형태로 바꾸었을 뿐이다. 즉,

$$\Delta f = Df = (I - D^{-1}W)f = f - D^{-1}Wf \quad (10)$$

## The denoising algorithm

Graph Laplacian이 Graph 상에서의 Diffusion Process의 Generator 이므로다음과 같이, 그래프상에서의 미분 방정식을 정의한다.

$$\partial_t X = -\gamma \Delta X \quad (11)$$

where  $\gamma > 0$  is the diffusion constant

- By the Implicit Euler-scheme, the above equation is

$$X(t+1) - X(t) = -\delta t \gamma \Delta X(t+1) \quad (2)$$

- The solution of the implicit Euler scheme for one time step can be computed as :

$$X(t+1) = (1 + \delta t \gamma \Delta)^{-1} X(t) \quad (12)$$

- proof

$$\begin{aligned} X(t+1) + \delta t \gamma \Delta X(t+1) &= X(t) \\ (\mathbb{1} + \delta t \gamma \Delta) X(t+1) &= X(t) \\ X(t+1) &= (\mathbb{1} + \delta t \gamma \Delta)^{-1} X(t) \end{aligned} \quad (13)$$

- **Manifold Denoising Algorithm**

- Choose  $\delta t, k$
- **while** Stopping Criterion not satisfied **do**
  - Compute the k-NN distances  $h(X_i), i = 1, \dots, n$ ,
  - Compute the weights  $w(X_i, X_j)$  of the graph with  $w(X_i, X_j) = 0$
$$w(X_i, X_j) = \exp \left( -\frac{\|X_i - X_j\|^2}{(\max\{h(X_i), h(X_j)\})^2} \right), \text{ if } \|X_i - X_j\| < \max\{h(X_i), h(X_j)\}, \quad (14)$$
  - Compute the graph Laplacian  $\Delta, \Delta = \mathbb{1} - D^{-1}W$ ,
  - Solve  $X(t+1) - X(t) = -\delta t \gamma \Delta X(t+1) \Rightarrow X(t+1) = (\mathbb{1} + \delta t \Delta)^{-1} X(t)$ .
- **end while**

## Diffusion and Tikonov regularization

위에서 나온 The solution of the implicit Euler scheme 은 다음의 Regularization problem on the graph의 solution과 동등하다.

$$\arg \min_{Z^\alpha \in \mathcal{H}_V} S(Z^\alpha) := \arg \min_{Z^\alpha \in \mathcal{H}_V} \sum_{\alpha=1}^d \|Z^\alpha - X^\alpha(t)\|_{\mathcal{H}_V}^2 + \delta t \sum_{\alpha=1}^d \|\nabla Z^\alpha\|_{\mathcal{H}_V}^2 \quad (15)$$

where  $Z^\alpha$  denotes the  $\alpha$ -component of the vector  $Z \in \mathbb{R}^d$ , and  $\|\nabla Z^\alpha\|_{\mathcal{H}_V}^2 = \langle Z^\alpha, \Delta Z^\alpha \rangle$ .

위 방정식을 미분하면

$$\frac{\partial S(Z^\alpha)}{\partial Z^\alpha} = 2(Z^\alpha - X^\alpha(t)) + 2\delta t \Delta Z^\alpha = 0, \quad \alpha = 1, \dots, d. \quad (16)$$

따라서

$$Z = (\mathbb{1} + \delta t \Delta)^{-1} X_t \quad (17)$$

그러므로 Diffusion Process의 매 스텝은 Regression Problem으로 보이게 되고 새로운 Step  $Z$ 는  $X(t)$ 에 대한 Filtering된 결과임.

## K-Nearest neighbor graph versus $h$ -neighborhood graph

- K-NN을 사용하는 이유는 K-NN을 통해 얻어진 Graph가 h-Neighborhood 방법으로 얻어진 Graph 보다 좋은 3가지 특징이 있기 때문이다.
  - Graph가 더 좋은 Connectivity를 가지고 있다.
    - Data의 Density 차이로 인해 h-Neighborhood 에서 끊어지거나 가깝게 붙을 수 있는 graph가 k-NN 그래프에서는 더 좋은 결과를 보여준다.
    - 매우 큰 Noise 환경에서 강인하다.
    - 변수  $k$ 의 조절에 따라 Weight matrix  $W$ 와 Laplacian  $\Delta$ 의 sparsity를 조절하기 쉽다.

## Stopping Criterion

- Diffusion이 너무 오랫동안 이루어져 데이터가 Disconnected 되거나 하나의 클러스터로 몰리는 경우
- 또 하나의 경우는 Intrinsic Dimension에 대한 정보를 선형적으로 가지고 있어 sample의 Estimated dimension 이 Intrinsic Dimension과 같을 때.

알고리즘을 Stop 시킨다.

## Large sample limit and theoritical analysis

다음에 나오는 Theorem은 다음 논문 [2] 에서 유도된 결론이다.

즉, **Graph Laplacian**에 대한 내용이다.

## Theorem 1

Let  $\{X_i\}_{i=1}^n$  be an i.i.d. samples of a probability measure  $P_M$  on a  $m$ -dimensional compact submanifold  $M$  of  $\mathbb{R}^d$  has a density  $p_M \in C^3(M)$ . Let  $f \in C^3(M)$  and  $x \in M \setminus \partial M$ , then if  $g \rightarrow 0$  and  $nh^{m+2}/\log n \rightarrow \infty$ ,

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^2} (\Delta f)(x) \sim -(\Delta_M f)(x) - \frac{2}{p} \langle \nabla f, \nabla p \rangle_{T_x M} \quad (18)$$

where  $\Delta_M$  is the **Laplace-Beltrami** operator of  $M$  and  $\sim$  means upto a constant which depends on the kernel function  $k(\|x - y\|)$  used to define the weights  $W(x, y) = k(\|x - y\|)$  of the graph.

### Note.

위 방정식 자체는 논문 [2]에서 Definition으로 주어졌다 (pp.1334). 그러나, 실제 논문은 A. Grigoryan [5] 의 논문을 찾아서 유도해야 한다. [2]에서 일부 유도 방법을 해설하였으나, 실제로는 [5]에서 제대로 유도를 해야한다.

## The noise-free case

Noise free case에서의 경우 식 (2)를 통해 다음과 같이 간단히 유도한다.

$$\frac{i(t+1) - i(t)}{\delta t} = -\frac{1}{\delta t} \Delta i = -\frac{h^2}{\delta t} \frac{1}{h^2} \Delta i \quad (19)$$

이때, **Diffusion Constant**  $D = \frac{h^2}{\delta t}$  으로 놓고  $h \rightarrow 0$  and  $\delta t \rightarrow 0$  에서 유한한 값을 가진다고 하면 **Theorem 1** 에서 다음의 Differential Equation을 유도할 수 있다.

$$\lim_{h \rightarrow 0} -D \frac{1}{h^2} \Delta i = D[\Delta_M i + \frac{2}{p} \langle \nabla p, \nabla i \rangle_{T_x M}] = \lim_{\delta t \rightarrow 0} \frac{i(t+1) - i(t)}{\delta t} = \partial_t i \quad (20)$$

이때,  $k$ -NN graph에서 neighborhood size  $h$  는 local density의 함수로서 Diffusion constant  $D$ 가 local density  $p(x)$ 의 함수가 되도록 한다.  $D = D(p(x))$

## Lemma 2

Let  $i : M \rightarrow \mathbb{R}$  be a regular, smooth embedding of an  $m$ -dimensional manifold  $M$ , then  $\Delta_M i = mH$  where  $H$  is the **mean curvature of  $M$**

이것은 매우 중요하고 독특한 Lemma 이다.

함수  $i$ 가  $M$ 위에서 regular smooth embedding 이면 이것의 **Laplace-Beltrami Operation의 결과는 mean Curvature가 된다는 것**. 그러므로 Noise free 인 경우의 Diffusion방정식

$$\partial_t i = D[\Delta_M i + \frac{2}{p} \langle \nabla p, \nabla i \rangle_{T_x M}] \quad (4)$$

은  $\Delta_M i = mH$  에서 다음과 같이 변한다.

$$\partial_t i = D[mH + \frac{2}{p} \langle \nabla p, \nabla i \rangle_{T_x M}] \quad (5)$$

이는  $M$ 위에 Probability measurer가 Constant 라면 다음과 동등하다.

$$\partial_t i = mH \quad (21)$$

다시말해, mean Curvature flow는 Manifold에서 Denosing Effect와 동등하다. 하지만, Lemma의 결과식 (4), (5)에서 보듯이  $M$ 위에 Non-uniform Probability Measure가 존재하면  $\nabla p(x) \neq 0$  이므로 Additional term이 존재하게 된다. 이것이 Noise Case 해석과 연관된다.

## The noisy case

The Large sample, 즉,  $n \rightarrow \infty$ 의 경우 그 때의 graph Laplacian  $\Delta$  at a sample point  $X_i$  는 다음과 같이 주어진다.

$$\Delta X_i = X_i - \frac{\int_{\mathbb{R}^d} k_h(\|X_i - y\|) y p_X(y) dy}{\int_{\mathbb{R}^d} k_h(\|X_i - y\|) p_X(y) dy} \quad (6)$$

where  $k_h(\|x - y\|)$  is the weight function used in the construction of the graph.

본 논문의 경우

$$k_h(\|x - y\|) = e^{-\frac{\|x-y\|^2}{2h^2}} \mathbb{1}_{\|x-y\| \leq h} \quad (22)$$

그런데 이것과 비슷한 kernel은 SOFM에서도 사용하고 있다.

그리고 다음의 3가지를 가정한다.

1. The noise level  $\sigma$  is small compared to the neighborhood size  $h$
2. The curvature of  $M$  is small compared to  $h$
3. The density  $p_M$  varies slowly along  $M$

이 경우  $-\Delta X_i$ 는  $X_i$ 에서  $p_X$ 의 Gradient Direction이 된다.

이 효과를 Noise free 경우에서의 mean curvature part와 분리하여 생각해 본다면, 먼저, 방정식 (6)에서의  $p_X$ 가 Gaussian이라는 가정하에 살펴보면

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^d} k_h(\|X - y\|) y p_X(y) dy &= \int_M \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} k_h(\|X - y\|) y e^{-\frac{\|y-i(\theta)\|^2}{2\sigma^2}} p(\theta) dy dV(\theta) \\ &= \int_M K_h(\|X - i(\theta)\|) i(\theta) p(\theta) dV(\theta) + O(\sigma^2) \end{aligned} \quad (23)$$

이것을 사용하여  $X$ 에 가장 가까운 submanifold  $M$  상의 한 점에 가장 가까운 점을

$$X : i(\theta_{\min}) = \arg \min_{i(\theta) \in M} \|X - i(\theta)\| \quad (24)$$

로 정의하면, Curvature 조건에서 diffusion step  $-\Delta X$ 는 다음과 같이 정의된다.

$$-\Delta X \approx i(\theta_{\min}) - X - \left( i(\theta_{\min}) - \frac{\int_M K_h(\|X - i(\theta)\|) i(\theta) p(\theta) dV(\theta)}{\int_M K_h(\|X - i(\theta)\|) p(\theta) dV(\theta)} \right) \quad (25)$$

여기서 우측항의 괄호 안의 부분은  $-\Delta M i(\theta_{\min}) - \frac{2}{p} \langle \nabla p, \nabla i \rangle = -mH - \frac{2}{p} \langle \nabla p, \nabla i \rangle$ 의 approximation이다. 반면, 그 앞의 부분은 Noise Reduction 부분이다.

## Experiments

## Appendix

### Introduction

surface parameter  $x(q)$ 를  $x \in \mathbb{R}^n, q \in \mathbb{R}^d$  for  $n > d$ 라 정의하고 다음과 같은 metric tensor를 정의하자.

$$g_{ij} = \frac{\partial x}{\partial q_i} \cdot \frac{\partial x}{\partial q_j} \quad (26)$$

$G = [g_{ij}]$ 는 symmetruc matrix로서 curve의 길이, surface내 patch의 면적등을 계산하기 위한 모든 Information을 가지게 된다.

### The first fundamental form

이때 **The first fundamental form**을 다음과 같이 정의하자.

$$\mathcal{F}^{(1)}(dq, dq) \doteq dq^T G(q) dq \quad (27)$$

- 이를 이렇게 생각해보자.  $t : \mathbb{R} \rightarrow q(t) \in \mathbb{R}^d \rightarrow x(q) \in \mathbb{R}^n$ 인 상태에서

$$\frac{dx}{dt} = \left[ \frac{\partial x}{\partial q} \right] \frac{\partial q}{\partial t} \in \mathbb{R}^n \quad (28)$$

이어야 한다. 그렇다면  $\frac{\partial q}{\partial t} \in \mathbb{R}^d$ 일때,  $\left[ \frac{\partial x}{\partial q} \right] \in \mathbb{R}^{n \times d}$ 이다.

따라서,  $\left[\frac{\partial x}{\partial q}\right]$ 는 일반적인 Matrix 이므로 다루기가 쉽지 않다. 여기에 Symmetry 성질을 부여한  $d \times d$  matrix를 생각하면, 다음과 같이 정의할 수 있다.

$$G(q) = \left[\frac{\partial x}{\partial q}\right]^T \left[\frac{\partial x}{\partial q}\right] \in \mathbb{R}^{d \times d} \quad (29)$$

즉, Jacobian  $J(q) = \left[\frac{\partial x}{\partial q}\right]$  에 대하여  $G(q) = J^T J$  이다.

한편  $q = q(s)$  라고 할 때 parameterize surface의 Coordinate Change는 Chain-rule에 의해 다음과 같다.

$$dq = J(s)ds, \quad \text{where } J(s) = \left[\frac{\partial q}{\partial s_i}, \frac{\partial q}{\partial s_j}\right] \quad (30)$$

좌표계 변환에 대하여 **Fundamental form**은 **Invariance** 이므로  $\mathcal{F}_q^{(1)} = \mathcal{F}_s^{(1)}$  i.e.

$$ds^T G_s(s) ds = ds^T J^T(s) G_q(q(s)) J(s) ds \quad (31)$$

다시말해, The metric Tensor Transform under coordinate change as

$$G_s(s) = J^T(s) G_q(q(s)) J(s) \quad (32)$$

그러므로 만일  $G(s)$ 를 알 수 있다면 Differential form의 주요 정보를 알 수 있다. 예를 들어,  $\tilde{x}(t) = x(q(t))$  for  $t \in [t_1, t_2]$  로 정의되는 Curve의 Arc Length를 구하는 경우

$$L(t_1, t_2) = \int_{t_1}^{t_2} \left( \frac{d\tilde{x}}{dt} \cdot \frac{d\tilde{x}}{dt} \right)^{\frac{1}{2}} dt = \int_{t_1}^{t_2} \left( \left[ \frac{dq}{dt} \right]^T G(q) \frac{dq}{dt} \right)^{\frac{1}{2}} dt \quad (33)$$

**Notice**

$$\left( \frac{d\tilde{x}}{dt} \right)^T \left( \frac{d\tilde{x}}{dt} \right) = \left( \left[ \frac{\partial x}{\partial q} \right] \frac{\partial q}{\partial t} \right)^T \left( \left[ \frac{\partial x}{\partial q} \right] \frac{\partial q}{\partial t} \right) = \left( \frac{\partial q}{\partial t} \right)^T \left[ \frac{\partial x}{\partial q} \right]^T \left[ \frac{\partial x}{\partial q} \right] \left( \frac{\partial q}{\partial t} \right) = \left( \frac{\partial q}{\partial t} \right)^T G(q) \left( \frac{\partial q}{\partial t} \right) \quad (34)$$

또한 element of surface area는 다음과 같다.

$$dS = |G(q)|^{\frac{1}{2}} dq_1 \wedge \cdots \wedge dq_n \quad (35)$$

where  $|G(q)|^{\frac{1}{2}} \doteq \sqrt{\det G(q)}$

$G = [g_{ij}]$  로 정의되었는데, Metric Tensor의 Inverse를 다음과 같이 표시한다.

$$G^{-1} = [G^{ij}] \quad (36)$$

**Gradient and Divergence : For example,**

**Gradient vector field** of a real-valued function on the surface can be defined as

$$(\nabla f)_i \doteq \sum_j g^{ij} \frac{\partial f}{\partial q_j} \quad (37)$$

- 보다 정확히 표시하면 다음의 의미이다.

$$\nabla_x f = \sum_i \frac{\partial f}{\partial x_i} e_i^x = \sum_i \left( \sum_j g^{ij} \frac{\partial f}{\partial q_j} \right) e_i^x \quad (38)$$

- 즉,  $e^q$  Frame에서 만들어진 Gradient의 계수는 Metric Tensor의 Inverse  $g^{ij}$ 를 통해  $e^x$  Frame의 Gradient의 계수로 보내는 것이다.
- 이를 통해 서로 다른 Frame 혹은 Tangent Space에서의 Gradient 를 모든 정보가 없어도 Frame간의 Metric Tensor만 있다면 구할 수 있다.

**proof**  $f(x(q))$  에 대하여 생각하면 간단하다. 먼저  $x$ 에 대한 Orthogonal Frame을  $e_k^x \triangleq \frac{\partial}{\partial x_k}$  라 정의하면  $q$ 에 대한 Frame vector는

$$e_i^q \triangleq \frac{\partial}{\partial q_i} = \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\partial x_k}{\partial q_i} = e_k^x \frac{\partial x_k}{\partial q_i} \quad (39)$$

이때  $e_k^x \in \mathbb{R}$  이고  $|\frac{\partial x_k}{\partial q_i}| = 1$  이다. 만일  $e_k^x \in \mathbb{R}^n$  이면  $|e_i^q| = 1$  이므로

$$e_i^q \triangleq \alpha_i \frac{\partial}{\partial q_i} = \frac{1}{|J_i(q)|} \sum_k \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\partial x_k}{\partial q_i} = \frac{1}{|G_i(q)|^{\frac{1}{2}}} \sum_k e_k^x \frac{\partial x_k}{\partial q_i} \quad (40)$$

위 식에서  $J_i(q)$ 는 Jacobian의  $i$  번째 Column Vector를 가리키며  $J_i(q)$ 는 크기이다. 마찬가지로  $G_i(q)$ 가 결정된다.

Gradient는 각 Frame에 대하여 다음과 같다.

$$\nabla_x f(x) = \sum_k \frac{\partial f}{\partial x_k} e_k^x, \quad \nabla_q f(x(q)) = \sum_i \frac{\partial f(x(q))}{\partial q_i} e_i^q \quad (41)$$

논의를 간편하게 하기 위해  $|G_i(q)| = 1$ 인 경우만 생각하자.

위 Gradient 식은 좌향의  $e_k^x$  Frame상의 Gradient를  $e_i^q$  Frame에 대하여 표현하는 것이므로

$$\begin{aligned} \nabla_q f(x(q)) &= \sum_i \frac{\partial f}{\partial q_i} e_i^q \\ &= \sum_i \sum_k \frac{\partial f}{\partial x_k} \frac{\partial x_k}{\partial q_i} e_i^q \\ &= \sum_k \sum_{i,j} \frac{\partial f}{\partial x_k} \frac{1}{|G_i(q)|^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial x_k}{\partial q_i} \cdot \frac{\partial x_k}{\partial q_j} e_k^x = \sum_k \sum_{i,j} \frac{\partial x_k}{\partial q_i} \frac{\partial x_k}{\partial q_j} \frac{\partial f}{\partial x_k} e_k^x \\ &= \sum_k \sum_{i,j} g_{ij} \frac{\partial f}{\partial x_k} e_k^x = G(q) \nabla_x f(x) \end{aligned} \quad (42)$$

따라서  $g_{ij}$ 의 Inverse의 정의에 의해  $(\cdot : G(q)^{-1} \triangleq |G(q)|^{-\frac{1}{2}} [\tilde{g}^{ij}] = [g^{ij}])$

$$(\nabla_x f)_i = \frac{\partial f}{\partial x_i} = \sum_j g^{ij} \frac{\partial f}{\partial q_j} \quad (43)$$

$G$ 가  $d \times d$  matrix이므로 단순 Matrix 표현식으로는  $n \times 1$  벡터인  $\nabla_x f$ 를 표현할 수 없으며, 내부 Component의 관계를 통해 얻어 낼 수 밖에 없다. **Q.E.D**

#### Example : Gradient on Sphere Coordinate

The spherical coordinate 는 다음과 같다.

$$\begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \phi \\ y &= r \sin \theta \sin \phi \\ z &= r \cos \theta \end{aligned} \quad (44)$$

그리고  $e_k^x \in \{\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\}$  라 하고  $e_k^\phi \in \{\alpha_1 \frac{\partial}{\partial r}, \alpha_2 \frac{\partial}{\partial \phi}, \alpha_3 \frac{\partial}{\partial \theta}\}$  이라 하자,

let  $J$  be the Jacobi matrix

$$J = \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \phi & -r \sin \phi \sin \theta & r \cos \phi \cos \theta \\ \sin \theta \sin \phi & r \cos \phi \sin \theta & r \sin \phi \cos \theta \\ \cos \theta & 0 & -r \sin \theta \end{pmatrix}, \quad (45)$$

the metric tensor can be obtained as

$$[g_{ij}] = J^T J = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & r^2 \sin^2 \theta & 0 \\ 0 & 0 & r^2 \end{pmatrix} \quad (46)$$

좌표 변환을 위해 다음을 각각 살펴보면

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r} &= \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial r} \\ \frac{\partial}{\partial r} &= \frac{\partial}{\partial x} \cos \phi \sin \theta + \frac{\partial}{\partial y} \sin \phi \sin \theta + \frac{\partial}{\partial z} \cos \theta \\ \left| \frac{\partial}{\partial r} \right| &= \sqrt{\cos^2 \phi \sin^2 \theta + \sin^2 \phi \sin^2 \theta + \cos^2 \theta} = 1 \end{aligned} \quad (47)$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \phi} &= \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \phi} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \phi} + \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \phi} \\
\frac{\partial}{\partial \phi} &= \frac{\partial}{\partial x} (-r \sin \phi \sin \theta) + \frac{\partial}{\partial y} r \cos \phi \sin \theta + \frac{\partial}{\partial z} 0 \\
\left| \frac{\partial}{\partial \phi} \right| &= \sqrt{r^2 \cos^2 \phi \sin^2 \theta + \sin^2 \phi \sin^2 \theta} = r \sin \theta
\end{aligned} \tag{48}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \theta} &= \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \theta} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \theta} + \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \theta} \\
\frac{\partial}{\partial \theta} &= \frac{\partial}{\partial x} r \cos \phi \cos \theta + \frac{\partial}{\partial y} r \sin \phi \cos \theta + \frac{\partial}{\partial z} (-r \sin \theta) \\
\left| \frac{\partial}{\partial \theta} \right| &= \sqrt{r^2 \cos^2 \phi \sin^2 \theta + r^2 \sin^2 \phi \sin^2 \theta + r^2 \cos^2 \theta} = r
\end{aligned} \tag{49}$$

그러므로 Spherical Coordinate에서의 Element Vector  $e_k^\phi$ 는 다음과 같다.

$$\begin{aligned}
1 = |e_1^\phi| &= |\alpha_1| \left| \frac{\partial}{\partial r} \right| \Rightarrow |\alpha_1| = 1 \quad \Rightarrow e_1^\phi = \frac{\partial}{\partial r} \\
|e_2^\phi| &= |\alpha_2| \left| \frac{\partial}{\partial \phi} \right| \Rightarrow |\alpha_2| = \frac{1}{r \sin \theta} \quad \Rightarrow e_2^\phi = \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \\
|e_3^\phi| &= |\alpha_3| \left| \frac{\partial}{\partial \theta} \right| \Rightarrow |\alpha_3| = \frac{1}{r} \quad \Rightarrow e_3^\phi = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}
\end{aligned} \tag{50}$$

따라서

$$\begin{aligned}
\nabla f(x) &= \frac{\partial f}{\partial r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial f}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial f}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \\
&= \frac{\partial f}{\partial r} e_1^\phi + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial f}{\partial \phi} e_2^\phi + \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} e_3^\phi \\
&= \left( \frac{\partial f}{\partial r}, \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial f}{\partial \phi}, \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} \right)^T
\end{aligned} \tag{51}$$

## Divergence of a vector field on the surface

- Definition of Divergence  $\nabla \cdot f : M \rightarrow \mathbb{R}$  for  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ 
  - $\nabla \cdot f = \text{trace}(df)$
- Definiton of Divergence for Frame  $\{e_k^x\}$  and a vector field  $f(x) \in \mathbb{R}^n$

$$\nabla \cdot f(x) = \sum_k \frac{\partial f_k}{\partial x_k} \tag{52}$$

그러므로 Divergence는 다음과 같이 정의될 수 있다.

For  $e_k^x \triangleq \frac{\partial}{\partial x_k}$ , and  $f(x) = \sum_i f_i e_i^x$

$$\begin{aligned}
\nabla \cdot f(x) &= \sum_k \frac{\partial}{\partial x_k} e_k^x \cdot \sum_i f_i e_i^x \\
&= \sum_k \sum_i \frac{\partial f_i}{\partial x_k} e_k^x \cdot e_i^x = \sum_k \frac{\partial f_k}{\partial x_k} \quad \because e_k^x \cdot e_i^x = 1 \text{ if } k = i, \text{ else } 0
\end{aligned} \tag{53}$$

만일 위에서  $e_k^x \cdot e_i^x$  Euclidean Space가 아니라면 Metric Tensor에 의한 해석이 필요하다. 이때 Divergence는 다음과 같이 정의된다.

$$\nabla \cdot f = \text{tr}(Y \mapsto \nabla_Y f) \tag{54}$$

이때 Vector field  $f$  는

$$f = f^i \frac{\partial}{\partial q_i} e_i^q \triangleq f^i \partial_i \tag{55}$$

Divergence의 정의를 생각해보면 Trace이므로 Scalar 값이다. 이를 생각해보면 특정 Component의 값으로 만들어 줄 수 있다는 것이 된다. 일반적으로 Vector field  $V = \sum_j v^j X_j$  를 정의하고 이것의 Covariant Differential을 생각해보면



$$\frac{DV}{dt} = \sum_k \left[ \frac{dv^k}{dt} + \sum_{ij} \Gamma_{ij}^k \frac{dx^i}{dt} v_j \right] X_k \quad (56)$$

그런데 여기서 출력을  $k$ 가 아닌  $i$  성분으로 보내면 이는 **Trace** 중의 한 성분과 같은 의미가 된다.

이때, Divergence는 다음과 같이 **Normal ([partial ]성분의 미분** (그래서 **Tangent Space**위로 **Projection**)과 **Tangent 성분의 미분** (Christoffel Symbolic part)으로 표현된다.

$$\nabla \cdot f = \frac{\partial f^i}{\partial q_i} + \Gamma_{ij}^i f^j \quad (57)$$

그러면  $k$  대신 하나의 성분  $i$ 로만 보내는 것이므로 Christoffel 기호는

$$\Gamma_{ij}^i = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial}{\partial q_i} g_{jk} + \frac{\partial}{\partial q_j} g_{ki} - \frac{\partial}{\partial q_k} g_{ij} \right) g^{ki} \quad (58)$$

이 경우

$$g^{ki} \frac{\partial}{\partial q_i} g_{jk} = g^{ki} \frac{\partial}{\partial q_k} g_{ij} \quad (59)$$

즉, 아래 위 첨자를 지워보면  $g_j$  만 양변에 똑같이 남게되어 같다.

이를 이용하여 다음을 증명한다.

## Divergence of a vector field

**Divergence of a vector field** on the surface 는 따라서 다음과 같이 정의된다.

$$\nabla \cdot f \doteq |G|^{-\frac{1}{2}} \sum_k \frac{\partial}{\partial q_k} (|G|^{\frac{1}{2}} f_k) \quad (60)$$

**proof**

위에서 Trace의 경우 Christoffel 기호는

$$\Gamma_{ij}^i = \frac{1}{2} g^{ki} \frac{\partial}{\partial q_j} g_{ki} \quad (61)$$

**Jacobi Formula**의 Corollary에서

$$\frac{1}{2} g^{ki} \frac{\partial}{\partial q_j} g_{ki} = \frac{\partial}{\partial q_j} \log \sqrt{|G|} \quad (62)$$

Label을 수정하고 Divergence 정의에서

$$\begin{aligned} (\nabla \cdot f)^i &= \frac{\partial f^i}{\partial q_i} + \Gamma_{ij}^i f^j \\ &= \frac{\partial f^i}{\partial q_i} + \frac{\partial}{\partial q_i} \log \sqrt{|G|} f^i \\ &= \frac{\partial f^i}{\partial q_i} + \frac{1}{\sqrt{|G|}} \frac{\partial \sqrt{|G|}}{\partial q_i} f^i \\ &= \frac{1}{\sqrt{|G|}} \frac{\partial \sqrt{|G|} f^i}{\partial q_i} \end{aligned} \quad (63)$$

그러므로

$$\nabla \cdot f = \frac{1}{\sqrt{|G|}} \sum_i \frac{\partial \sqrt{|G|} f^i}{\partial q_i} \quad (64)$$

## Laplace Beltrami Operator

- **The Laplace (or Laplace Beltrami Operator)** of the smooth real-valued function os defined as **the divergence of the gradient**

$$\nabla \cdot \nabla f \doteq |G|^{\frac{1}{2}} \sum_i \frac{\partial}{\partial q_i} \left( |G|^{\frac{1}{2}} \sum_j g^{ij} \frac{\partial f}{\partial q_j} \right) \quad (65)$$

위에서의 Gradient 정의와 Divergence 정의를 가져와서 Laplace -Beltrami 정의에 대입하면 증명 끝.

## Jacobi Formula : Matrix Defferentiation for $\det A$

$$\frac{d}{dt} \det A(t) = \text{tr} \left( \text{adj} A \cdot \frac{dA(t)}{dt} \right) \quad (66)$$

### Lemma 1

$$\frac{d \det I(s)}{ds} = \text{trace} \quad (67)$$

그러므로 differential  $\det'(I)$  는 Linear operator로서  $\det'(I) : \mathbb{R}^{n \times n} \rightarrow \mathbb{R}$

#### proof

$$\frac{d}{dT} \det(I)(T) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\det(I + \varepsilon T) - \det I}{\varepsilon} \quad (68)$$

논의를 간단하게 하기 위하여  $T$ 도 Diagonal  $n \times n$  matrix라고 하면 (그냥 해도 결과는 같다.)

$$\det(I + \varepsilon T) - \det I = 1 + \binom{n}{1} \varepsilon T + \dots + \binom{n}{n} \varepsilon^n T^n - 1 \quad (69)$$

에서  $\varepsilon$ 이 1차인 항은  $n\varepsilon T$  뿐이다. 따라서 Trace.

#### Note

그러므로

$$\frac{dI(T)}{dT} = \text{trace} \Rightarrow dI(T) = \text{trace } T \quad (70)$$

### Lemma 2

For an invertible matrix  $A$ , we have :

$$\frac{d \det A(T)}{dT} = \det A \cdot \text{tr}(A^{-1}T) \quad (71)$$

#### proof

임의의 정방형 matrix  $X$ 에 대하여

$$\det X = \det(AA^{-1}X) = \det(A) \det(A^{-1}X) \quad (72)$$

이므로

에 대하여 미분하고 이 결과를  $X = A$ 로 대입하면

$$\begin{aligned} \left. \frac{d \det X(T)}{dT} \right|_{X=A} &= \left. \frac{d}{dT} \det(AA^{-1}X)(T) \right|_{X=A} \\ &= \det(A) \frac{d}{dT} \det(A^{-1}A)(T) \\ &= \det(A) \frac{d \det I}{dA^{-1}T} \frac{dA^{-1}T}{dT} \\ &= \det(A) \frac{d \det I}{dA^{-1}T} (A^{-1}T) \\ &= \det(A) \text{tr}(A^{-1}T) \quad \because \text{by Lemma 1} \end{aligned} \quad (73)$$

### Theorem : Jacobi's Lemma

$$\frac{d}{dt} \det A(t) = \text{tr} \left( \text{adj} A \cdot \frac{dA(t)}{dt} \right) \quad (74)$$

where **adj** is the adjugate of  $A$  such that

$$A^{-1} = \frac{\text{adj} A}{\det A}, \quad \text{where } \text{adj} A \in \mathbb{R}^{n \times n} \quad (75)$$

**proof**

In Lemma 2, Let  $T = \frac{dA(t)}{dt}$ , then

$$\frac{d}{dt} \det A(t) = \det A \cdot \text{tr} \left( A^{-1} \frac{dA(t)}{dt} \right) = \det A \cdot \text{tr} \left( \frac{\text{adj} A}{\det A} \cdot \frac{dA}{dt} \right) = \text{tr} \left( \text{adj} A \cdot \frac{dA}{dt} \right) \quad (76)$$

## Corollary

Let  $U \subseteq \mathbb{R}^n$  be open and let  $g : U \rightarrow GL(n, \mathbb{C}) \subseteq M_n(\mathbb{C})$  be differentiable.  $g$ 의 component를  $g_{ij}$  로 표현하고 그 Inverse를  $g^{ij}$  라 할 때

$$g^{ij} \frac{\partial g_{ij}}{\partial q_k} = \frac{\partial g_{ij} g^{ij}}{\partial q_k} = \frac{1}{\det g} \frac{\partial \det g}{\partial q_k} = \frac{\partial}{\partial q_k} \log(|\det g|) \quad (77)$$

위 표현은 Manifold 의 Tangent space의 vector space를  $\frac{\partial}{\partial q_k}$ 로 보았을 때 이다. 이를 단순하게  $X_k$ 로 보고 이를 생략한 형태로 다시 쓰면 다음과 같다.

$$g^{ij} \partial_k g_{ij} = \partial_k g_{ij} g^{ij} = \frac{\partial_k \det g}{\det g} = \partial_k \log(|\det g|) \quad (78)$$

**proof**

Fix  $x \in U$  and consider the family  $h(t) = g(x + tq_k)$  then,

$$\left. \frac{\partial h(t)}{\partial t} \right|_{t=0} = \frac{\partial g(x)}{\partial q_k} \quad (79)$$

and

$$\left. \frac{\partial \det h(t)}{\partial t} \right|_{t=0} = \frac{\partial(\det g(x))}{\partial q_k} \quad (80)$$

By Jacobi Formula

$$\left. \frac{\partial \det h(t)}{\partial t} \right|_{t=0} = \text{tr} \left( \text{Adj}(h(0)) \left. \frac{\partial h(t)}{\partial t} \right|_{t=0} \right) = \det(g(x)) \text{tr} \left( g^{-1}(x) \frac{\partial g(x)}{\partial q_k} \right) = \det(g(x)) g^{ij} \frac{\partial g_{ij}}{\partial q_k} \quad (81)$$

그러므로

$$\frac{1}{\det(g(x))} \frac{\partial(\det g(x))}{\partial q_k} = \frac{\partial}{\partial q_k} \log(|\det g(x)|) \quad (82)$$

그리고 나머지는 모두 성립한다.

## Levi-Civita Connection[3]

Affine Connection  $\nabla$  에서 다음의 2가지 조건이 만족되면 이를 Levi-Civita Connection이라 한다.

1. **it preserves the metric**, i.e.,  $\nabla g = 0$ .
2. **it is torsion-free**, i.e., for any vector fields  $X$  and  $Y$  we have  $\nabla_X Y - \nabla_Y X = [X, Y]$ , where  $[X, Y]$  is the [Lie bracket](#) of the [vector fields](#)  $X$  and  $Y$ .

## Christoffel symbol

한편 Christoffel 기호는 다음과 같이 정의된다[3].

$$\Gamma_{ij}^m = \frac{1}{2} \sum_k \left( \frac{\partial}{\partial q_i} g_{jk} + \frac{\partial}{\partial q_j} g_{ki} - \frac{\partial}{\partial q_k} g_{ij} \right) g^{km} \quad (83)$$

- $ijk \rightarrow jki \rightarrow -kij$  with  $k$  and  $m$  으로 외우면 된다.

## Note

1. Upper Index는 Scalar 의 index, Lower index는 vector의 index로 생각하면 된다.

## Reference

---

- [1] Matthias Hein, Markus Maier, "Manifold Denosing",
- [2] Hein, Matthias, Audibert, Jean-Yves von Luxburg, Ulrike, "From Graphs to Manifolds – Weak and Strong Pointwise Consistency of Graph Laplacians"
- [3] Do Carmo, "Riemannian Geometry", pp. 50-54
- [4] G.S. Chirikjian, 'Stochastic Models, Information theory, and Lie Groups', Vol 1, Birkhauser, 2000
- [5] A. Grigoryan, 'Heat kernels on weighted manifolds and applications', Cont. Math, 398:93-191, 2006