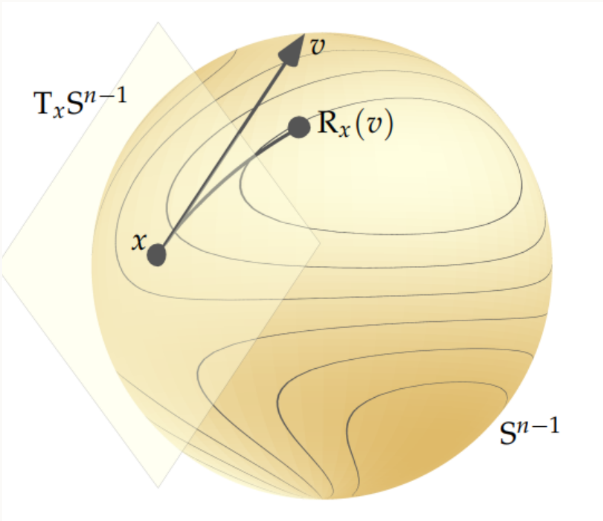
流形上的优化

Lin Wenjie
Nanjing Normal University

版本：1.0
更新：2025 年 10 月 10 日



目录

Part I

微分流形基础

1 拓扑空间与微分流形基础概念

1.1 拓扑空间

定义 1.1 (拓扑空间) 设 M 是一个非空集合，其子集组成的集合 $\mathrm{T} = \{U_\alpha \subset M \mid \alpha \in \mathrm{A}\}$。若 T 满足以下条件，则称 (M, T) 为一个拓扑空间，T 称为 M 的一个拓扑，T 中的元素称为拓扑空间 (M, T) 中的开集：

1. $\emptyset, M \in \mathrm{T}$；
2. T 中有限个元素的交仍属于 T；
3. T 中任意多个元素的并仍属于 T。

例 1.1 (相对拓扑/限制拓扑) 设 M 是一拓扑空间，$\mathrm{T} = \{U_\alpha \mid \alpha \in \mathrm{A}\}$ 为其拓扑。若 N 是 M 的一子集，令 $\mathrm{T}|_N = \{U_\alpha \cap N \mid \alpha \in \mathrm{A}\}$，则 $(N, \mathrm{T}|_N)$ 是一拓扑空间，$\mathrm{T}|_N$ 称为（相对于 M 的拓扑 T 而言）相对拓扑或者限制拓扑。

例 1.2 (积拓扑与积空间) 设 (M_1, T_1)、(M_2, T_2) 是两个拓扑空间。则 $M = M_1 \times M_2$ 以子集族

$$\mathrm{B} = \{U_1 \times U_2 \mid U_i \in \mathrm{T}_i, i = 1, 2\}$$

为基所确定的唯一拓扑 T 称为 T_1、T_2 的积拓扑，拓扑空间 (M, T) 称为拓扑空间 (M_1, T_1)、(M_2, T_2) 的积空间。

定义 1.2 (Hausdorff 空间) 设 (M, T) 是一拓扑空间。如果对 M 中任意不同的两点 p 和 q，存在包含 p 的开集 U 和包含 q 的开集 V 满足 $U \cap V = \emptyset$，则称 M 是一个 Hausdorff 空间。

定义 1.3 (连续映射) 设 M、N 是两个拓扑空间，$f : M \to N$。如果 N 中每个开集 U 的原象 $f^{-1}(U)$ 是 M 中的开集，则称 f 是从 M 到 N 的一个连续映射。

定义 1.4 (同胚与同胚空间) 设 M、N 是两个拓扑空间，映射 $f : M \to N$ 是同胚的，如果：

1. f 是 1-1 的（单射）、到上的（满射），即 f 是双射；
2. f、f^{-1} 都是连续的。

这时称 M 与 N 是同胚的。

定义 1.5 (局部欧氏拓扑空间) 设 M 是一拓扑空间。如果对 $\forall p \in M$，存在包含 p 的开集 U 和同胚映射 $\varphi : U \to \varphi(U) \subset \mathbb{R}^n$（其中 $\varphi(U)$ 是 $\mathbb{R}^n$ 中的开集），则称 M 是局部欧氏的拓扑空间，简称 M 是局部欧氏的。

1.2 拓扑流形

定义 1.6 (n 维拓扑流形) 设 M 是 Hausdorff 空间。若对于 M 中的任意一点 p，存在一个包含 p 的邻域 U_p 同胚于 $\mathbb{R}^n$ 中的一个开集，则称 M 为一个 n 维拓扑流形，或简称 n 维流形。

例 1.3 (非 Hausdorff 的局部欧氏空间) 设 $\{p\}$ 是单点集，取 $M = \mathbb{R}^1 \cup \{p\}$。令 $\mathrm{B} = \{U \mid U$ 是$\mathbb{R}^1$ 中的开集$\} \cup \{(a, 0) \cup \{p\} \cup (0, b) \mid a < 0, b > 0\}$，则 M 上有唯一的拓扑 T 以 B 为拓扑基。容易验证 (M, T) 是局部欧氏的拓扑空间，但不是 Hausdorff 空间——因为点 p 和 0 不能用两个不相交的开集隔离开。

思考 (非局部欧氏的 Hausdorff 空间): 取 $M = \{(x, 0) \cup (0, y) \mid x, y \in \mathbb{R}\}$，取 $\mathbb{R}^2$ 上的限制拓扑。可以证明 M 是 Hausdorff 的，但不是局部欧氏的。

例 1.4 (拓扑流形的局部坐标与转移映射) 设 M 是 n 维拓扑流形。U 是 M 中的开集，若映射

$$\varphi : U \to \varphi(U), \quad p \mapsto x(p) = \left(x^1(p), x^2(p), \ldots, x^n(p)\right)$$

是同胚映射（其中 $\varphi(U)$ 是 $\mathbb{R}^n$ 中的开集），则称 (U, φ) 为 M 的一个局部坐标（或坐标图、坐标卡）。设 $p \in U$，称 U 为 p 的一个坐标邻域，φ 称为坐标映射，$\varphi(p) = x(p) = (x^1(p), x^2(p), \ldots, x^n(p))$ 称为点 p 的坐标。

设 (U, φ)、(V, ψ) 为 M 的两个局部坐标，且 $U \cap V \neq \emptyset$，则有同胚映射：

$$\varphi|_{U \cap V} : U \cap V \to \varphi(U \cap V) \subseteq \mathbb{R}^n, \quad p \mapsto x(p) = \left(x^1(p), \ldots, x^n(p)\right),$$

$$\psi|_{U \cap V} : U \cap V \to \psi(U \cap V) \subseteq \mathbb{R}^n, \quad p \mapsto y(p) = \left(y^1(p), \ldots, y^n(p)\right).$$

由此得到 $\mathbb{R}^n$ 中开集的同胚映射（即同一点在两个不同坐标下的坐标变换公式）:

$$\psi \circ \varphi^{-1}|_{\varphi(U \cap V)} : \varphi(U \cap V) \to \psi(U \cap V), \quad \left(x^1(p), \ldots, x^n(p)\right) \mapsto \left(y^1(p), \ldots, y^n(p)\right),$$

$$\varphi \circ \psi^{-1}|_{\psi(U \cap V)} : \psi(U \cap V) \to \varphi(U \cap V), \quad \left(y^1(p), \ldots, y^n(p)\right) \mapsto \left(x^1(p), \ldots, x^n(p)\right),$$

上述映射称为转移映射。它是欧氏空间中开集到开集的映射，可讨论其可微性、解析性等微积分概念（拓扑流形本身无这些概念）.

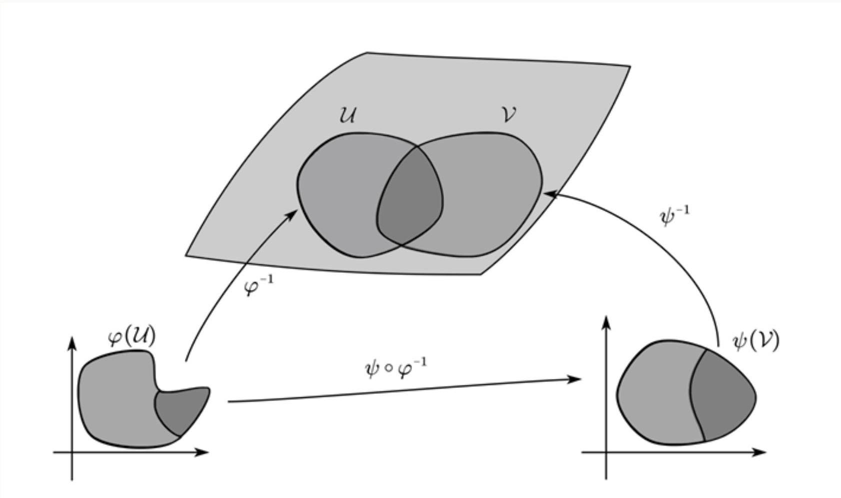
定义 1.7 (局部坐标系/坐标图册) 设 M 是拓扑流形。如果集合 $\mathrm{D} = \{(U_\alpha, \varphi_\alpha) \mid \alpha \in \mathrm{A}\}$ 满足:

1. $\{U_\alpha \mid \alpha \in \mathrm{A}\}$ 为 M 的开覆盖，即 $\bigcup_{\alpha\in\mathrm{A}} U_\alpha = M$；
2. 对任意的 α，$(U_\alpha, \varphi_\alpha)$ 是 M 的一个局部坐标（或坐标图）；

则称 D 为 M 的一个局部坐标系（或坐标图册）。

1.3 微分流形

定义 1.8 (C^k-相容局部坐标) 设 (U,φ)、(V,ψ) 为流形 M 的两个局部坐标。如果转移映射 $\psi\circ\varphi^{-1}$、$\varphi\circ\psi^{-1}$ 均为 C^k（$k\geq 1$）映射，则称 (U,φ)、(V,ψ) 为 C^k-相容的。若 $U\cap V=\emptyset$，则约定 (U,φ)、(V,ψ) 为 C^k-相容的。定义中的 C^k 可替换为 C^∞（光滑）或 C^ω（解析）。



例 1.5 (C^k-不相容的局部坐标) 以下例子说明“$\psi\circ\varphi^{-1}$、$\varphi\circ\psi^{-1}$ 均为 C^k 映射”是 C^k-相容的必要条件：

设 $M=\mathbb{R}^1$，取 $U=V=\mathbb{R}^1$，令

$$\varphi: U\to\mathbb{R}^1,\quad x\mapsto t=x,$$

$$\psi: V\to\mathbb{R}^1,\quad x\mapsto s=x^3,$$

则转移映射为

$$\psi\circ\varphi^{-1}:\mathbb{R}^1\to\mathbb{R}^1,\quad s=t^3,$$
$$\varphi\circ\psi^{-1}:\mathbb{R}^1\to\mathbb{R}^1,\quad t=s^{\frac{1}{3}}.$$

可验证：$\psi\circ\varphi^{-1}$ 是 C^∞ 的，但 $\varphi\circ\psi^{-1}$ 在 $s=0$ 处不可导（非 C^1），因此 $(\mathbb{R}^1,\varphi)$、$(\mathbb{R}^1,\psi)$ 不是 C^1-相容的。

定义 1.9 (C^k 微分结构与 C^k-微分流形) 设 M 为拓扑流形。若集合 D 满足以下条件，则称 D 为 M 上的一个 C^k 微分结构，(M,D) 称为 C^k-微分流形：

1. D 为 M 的局部坐标系；

2. 对任意的 α,β，$(U_\alpha,\varphi_\alpha)$ 和 (U_β,φ_β) 都是 C^k-相容的；
3. D 是最大的，即：若 (U,φ) 是 M 的局部坐标，且对任意的 α，(U,φ) 和 $(U_\alpha,\varphi_\alpha)$ 均 C^k-相容，则 $(U,\varphi)\in\mathrm{D}$。

注 1.1 讨论具体问题时，只需给出 M 的一组 C^k-相容局部坐标系，再“理论上”添加所有与这组坐标系 C^k-相容的局部坐标，即可确定 C^k 微分结构。

1.4 流形间的映射

定义 1.10 (C^k 映射) 设 M、N 为 C^∞ 流形，f 是从 M 到 N 的映射。若对 M、N 的任意局部坐标 (U,φ) 和 (V,ψ)，映射

$$\psi\circ f\circ\varphi^{-1}:\varphi(U)\to\psi(V)$$

是欧氏空间中开集之间的 k 阶连续可微映射，则称 f 是 M 到 N 的 C^k 映射。

注 1.2 C^k 映射的定义与局部坐标选取无关。设 (U_1,φ_1)、(V_1,ψ_1) 为另一组局部坐标，则

$$\psi_1\circ f\circ\varphi_1^{-1}=\left(\psi_1\circ\psi^{-1}\right)\circ\left(\psi\circ f\circ\varphi^{-1}\right)\circ\left(\varphi\circ\varphi_1^{-1}\right),$$

其可微性与 $\psi\circ f\circ\varphi^{-1}$ 一致（本质是利用微分结构定义可微性）。

例 1.6 (光滑函数与光滑曲线) 设 M 为光滑流形（C^∞-微分流形）：

1. 若映射 $f:M\to\mathbb{R}^1$ 是光滑的，则称 f 为 M 上的光滑函数，M 上所有光滑函数的全体记为 $C^\infty(M)$；
2. 若映射 $\gamma:\mathbb{R}^1\to M$ 是光滑的，则称 γ 为 M 上的光滑曲线。

定义 1.11 (微分同胚与微分同胚空间) 设 M、N 为光滑流形。若光滑映射 $f:M\to N$ 满足：

1. f 是同胚；
2. f 与 f^{-1} 均为光滑的；

则称 f 为微分同胚映射。若流形 M、N 间存在微分同胚映射，则称 M 与 N 微分同胚。

注 1.3 (微分同胚与 C^k-相容的关系) 例 1.5 中，$\mathbb{R}^1$ 的两个局部坐标 $\mathrm{D}_1=\{(U,\varphi)\}$、$\mathrm{D}_2=\{(U,\psi)\}$ 不是 C^1-相容的，因此诱导 $M=\mathbb{R}^1$ 上两个不同的微分结构 D_1 和 D_2，但 $(\mathbb{R}^1,\mathrm{D}_1)$ 与 $(\mathbb{R}^1,\mathrm{D}_2)$ 是微分同胚的。

事实上，作映射

$$f:\mathbb{R}^1\to\mathbb{R}^1,\quad x\mapsto y=x^{\frac{1}{3}},$$

直接验证可知 f 是微分同胚映射。由此可推出：- 同一拓扑流形 M 上的不同微分结构 D_1、D_2，其诱导的微分流形 (M,D_1)、(M,D_2) 可能微分同胚；- D_1 与 D_2 是 C^k-相容的，当且仅当恒同映射 id_M 是微分同胚。

注 1.4 判断同一流形上不同微分结构是否相容，核心是验证 id_M 是否为微分同胚。微分同胚的概念比 C^k-相容更广，在微分同胚意义下对流形微分结构分类是微分拓扑的核心主题。

Part II

流形优化的一阶工具

2 嵌入子流形

2.1 嵌入子流形的定义

由于在流形优化中, 一般考虑在有限维线性空间上的流形, 因此如未加特殊申明, 以下所考虑的流形都是指有限维线性空间 $\mathbb{R}^n$ 的流形, 且是光滑流形.

这一节考虑嵌入子流形, 这里嵌入子流形比子流形要求更高, 他不仅是子流形, 而且需要子流形上的拓扑结构是继承于大流形的拓扑, 换句话说嵌入子流形上的开集都可以表示成大流形上的开集与子流形的交.

定义 2.1 (有限维线性空间嵌入子流形) 设 $\mathcal{E}$ 是一个维数为 d 的线性空间。$\mathcal{E}$ 的一个非空子集 $\mathcal{M}$ 是 $\mathcal{E}$ 的一个（光滑）嵌入子流形，维数为 n，如果满足以下两种情况之一：

1. $n = d$ 且 $\mathcal{M}$ 在 $\mathcal{E}$ 中是开集——我们也将其称为开子流形；或者
2. 存在某个 $k \geq 1$，使得 $n = d - k$，并且对于每个 $x \in \mathcal{M}$，存在 x 在 $\mathcal{E}$ 中的一个邻域 U 以及一个光滑函数 $h : U \to \mathbb{R}^k$，满足：
   (a) 若 y 在 U 中，则 $h(y) = 0$ 当且仅当 $y \in \mathcal{M}$;
   (b) $\mathrm{rank}\mathrm{D}h(x) = k$。

这样的函数 h 被称为 $\mathcal{M}$ 在 x 处的局部定义函数.

定理 2.1 设 $\mathcal{E}$ 是一个维度为 d 的线性空间. $\mathcal{E}$ 的一个子集 $\mathcal{M}$ 是 $\mathcal{E}$ 的一个维度为 $n = d-k$ 的嵌入子流形, 当且仅当
对于每个 $x \in \mathcal{M}$，存在 $\mathcal{E}$ 中 x 的一个邻域 U、$\mathbb{R}^d$ 中的一个开集 V 以及一个微分同胚 $F : U \to V$，使得

$$F(\mathcal{M} \cap U) = E \cap V,$$

其中 $E = \{y \in \mathbb{R}^d : y_{n+1} = \cdots = y_d = 0\}$ 是 $\mathbb{R}^d$ 的一个线性子空间.

评论 2.1 其实个人感觉, 定理 2.1更适合作为嵌入子流形的定义; 可以这样看 定理 2.1:

- 如果 $\mathcal{E}$ 的一个子集 $\mathcal{M}$ 本身是一个开集, 那么很明显有 $\mathcal{M}$ 作为拓扑 $\mathcal{E}$ 的限制拓扑或者说相对拓扑 (见例 1.1), 这时 $\mathcal{M}$ 上定义的开集依然是 $\mathcal{E}$ 的开集, 因此 $\mathcal{M}$ 某个点处的坐标卡可以直接继承 $\mathcal{E}$ 的坐标卡, 例如：对于 $x \in \mathcal{M}$, 由于 $x \in \mathcal{E}$, 于是存在坐标卡 (U, F), 使得 $F(U)$ 是 $\mathbb{R}^d$ 的开集, 于是 $(U \cap \mathcal{M}, F)$ 可以作为 x 在 $\mathcal{M}$ 的坐标卡, 使得 $F(U \cap \mathcal{M})$ 仍为开集 (由于 $U \cap \mathcal{M}$ 为开集以及同胚映射的性质). 这样我们就找到了 $\mathcal{M}$ 成为 $\mathcal{E}$ 嵌入子流形的流形结构, 其某个领域处的微分同胚直接继承于被嵌入的流形;
- 如果 $\mathcal{M}$ 不是开集, 尽管 $\mathcal{M}$ 也可以作为拓扑 $\mathcal{E}$ 的相对拓扑, 但是上面的特点将会被改变, 其原因是上述的 $F(U \cap \mathcal{M})$ 不一定是开集 (因为 $U \cap \mathcal{M}$ 不一定是开集) 因此此时如果想找到想要的同胚映射就不一定是继承被嵌入流形; 此时我们只需要找到满足 定理 2.1 的 F 即可, 这里 $F(U \cap \mathcal{M})$ 相当于是 $\mathbb{R}^d$ 的一个子空间的开集 (或者说是相对开集). **其实的嵌入子流形是一个维数更小的流形，丢失的维数被隐藏在 定义 2.1 所谓的局部定义函数的导数的核空间内.**

下面是在一般拓扑空间上的嵌入子流形的定义.

定义 2.2 (嵌入子流形) 设 $\mathcal{E}$ 是一个维数为 d 的流形。$\mathcal{E}$ 的一个非空子集 $\mathcal{M}$ 是 $\mathcal{E}$ 的一个（光滑）嵌入子流形，维数为 n，如果满足以下两种情况之一：

1. $n = d$ 且 $\mathcal{M}$ 在 $\mathcal{E}$ 中是开集——我们也将其称为开子流形；或者
2. 存在某个 $k \geq 1$，使得 $n = d - k$，并且对于每个 $x \in \mathcal{M}$，存在 x 在 $\mathcal{E}$ 中的一个坐标卡 (U, ϕ) 以及一个光滑函数 $h : U \to \mathbb{R}^k$，满足：
   (a) 若 y 在 U 中，则 $h(y) = 0$ 当且仅当 $y \in \mathcal{M}$;
   (b) $\operatorname{rank} \mathrm{D}(h \circ \phi^{-1})(\phi(x)) = k$.

这样的函数 h 被称为 $\mathcal{M}$ 在 x 处的局部定义函数.

定理 2.2 设 $\mathcal{E}$ 是一个维数为 d 的流形. $\mathcal{E}$ 的一个子集 $\mathcal{M}$ 是 $\mathcal{E}$ 的一个维度为 $n = d - k$ 的嵌入子流形, 当且仅当
对于每个 $x \in \mathcal{M}$，存在 $\mathcal{E}$ 中 x 的一个邻域 U、$\mathbb{R}^d$ 中的一个开集 V 以及一个微分同胚 $F : U \to V$，使得

$$F(\mathcal{M} \cap U) = E \cap V,$$

其中 $E = \{y \in \mathbb{R}^d : y_{n+1} = \cdots = y_d = 0\}$ 是 $\mathbb{R}^d$ 的一个线性子空间.

2.2 嵌入子流形之间的映射

当我们考虑两个嵌入子流形之间的光滑映射时，我们可能立马想到嵌入子流形也是流形，那直接用流形间的光滑映射不就可以了吗？其实，在这里我们着重强调的是嵌入子流形的“嵌入”，因此我们希望两个嵌入子流形之间的光滑映射要与被嵌入流形存在一定关系，于是定义如下。

定义 2.3 设 $\mathcal{M}$ 和 $\mathcal{M}'$ 分别是 $\mathcal{E}$ 和 $\mathcal{E}'$ 的嵌入子流形。映射 $F:\mathcal{M}\to\mathcal{M}'$ 在 $x\in\mathcal{M}$ 处是光滑的，如果存在一个函数 $\bar{F}:U\to\mathcal{E}'$，它在 $\mathcal{E}$ 中 x 的一个邻域 U 上是光滑的，并且使得 F 和 $\bar{F}$ 在 $\mathcal{M}\cap U$ 上重合，即对于所有 $y\in\mathcal{M}\cap U$，都有 $F(y)=\bar{F}(y)$。我们称 $\bar{F}$ 是 F 在 x 附近的（局部）光滑延拓。如果映射 F 在所有 $x\in\mathcal{M}$ 处都是光滑的，那么就称 F 是光滑的。

注 2.1 上述定义，先是在被嵌入的两个流形间的光滑映射已定义的情况下，来定义嵌入子流形间的光滑映射。

下面的命题是显然的。

命题 2.3 设 $\mathcal{M}$ 和 $\mathcal{M}'$ 分别是 $\mathcal{E}$ 和 $\mathcal{E}'$ 的嵌入子流形。映射 $F:\mathcal{M}\to\mathcal{M}'$ 是光滑的，当且仅当 $F=\bar{F}|_{\mathcal{M}}$，其中 $\bar{F}$ 是从 $\mathcal{E}$ 中 $\mathcal{M}$ 的某个邻域到 $\mathcal{E}'$ 的某个光滑映射。

2.3 嵌入子流形之间光滑映射的微分

下面我们考虑嵌入子流形之前光滑映射的微分，再次强调我们这里只考虑在线性空间中的流形。

设 $\bar{F}:U\subseteq\mathcal{E}\to\mathcal{E}'$ 是两个线性空间之间的光滑函数，可能限制在开集 U 上。$\bar{F}$ 在 $x\in U$ 处的微分是一个线性映射 $\mathrm{D}\bar{F}(x):\mathcal{E}\to\mathcal{E}'$，定义为：

$$\mathrm{D}\bar{F}(x)[v]=\lim_{t\to 0}\frac{\bar{F}(x+tv)-\bar{F}(x)}{t}.$$

这告诉我们当沿 v 推动 x 时，$\bar{F}(x)$ 是如何变化的。将这个定义应用到两个嵌入子流形之间的光滑映射 $F:\mathcal{M}\to\mathcal{M}'$ 时会有问题，因为即使 t 取很小的非零值，$x+tv$ 通常也不属于 $\mathcal{M}$：F 在该点可能没有定义。

我们至少可以用两种方法来解决这个问题：

- (1) $t\mapsto x+tv$ 不过是 $\mathcal{E}$ 中过 x 且速度为 v 的一条曲线；我们可以改用 $\mathcal{M}$ 上的曲线。
- (2) 我们可以对 F 进行光滑延拓，然后对延拓后的函数求微分。

事实证明，这两种方法是等价的。第一种方法更具几何意义：它给出了一般流形上事物运作的正确图景。第二种方法便于计算。

对于任意切向量 $v\in T_x\mathcal{M}$，存在 $\mathcal{M}$ 上的一条光滑曲线 c 过 x 且速度为 v。那么，$t\mapsto F(c(t))$ 本身定义了 $\mathcal{M}'$ 上过 $F(x)$ 的一条曲线。通过复合，这条曲线是光滑的。因此，它以某一速度过 $F(x)$。根据定义，该速度是 $\mathcal{M}'$ 在 $F(x)$ 处的一个切向量。我们称这个切向量为 F 在 x 处沿 v 的微分，记为 $\mathrm{D}F(x)[v]$。

定义 2.4 (微分) 设 $F:\mathcal{M}\to\mathcal{M}'$ 是映射，$x\in\mathcal{M}$，F 在点 x 处的微分是线性映射 $\mathrm{D}F(x):T_x\mathcal{M}\to T_{F(x)}\mathcal{M}'$，定义为：

$$\mathrm{D}F(x)[v]=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}F(c(t))\Big|_{t=0}=(F\circ c)'(0),$$

其中 c 是 $\mathcal{M}$ 上的光滑曲线，在 $t=0$ 时过 x 且速度为 v。

需要说明的是

- 这个定义不依赖于曲线 c 的选择（因为可能有许多曲线满足要求；
- $\mathrm{D}F(x)$ 确实是线性的。为了做到这一点，我们与第二种方法联系起来。

设 $\mathcal{M}$ 和 $\mathcal{M}'$ 是 $\mathcal{E}$ 和 $\mathcal{E}'$ 的嵌入子流形。那么，光滑映射 $F:\mathcal{M}\to\mathcal{M}'$ 存在一个光滑延拓 $\bar{F}:U\to\mathcal{E}'$，其中 U 是 $\mathcal{M}$ 在 $\mathcal{E}$ 中的一个邻域，且 $F=\bar{F}|_{\mathcal{M}}$。注意到 $F\circ c=\bar{F}\circ c$。后者是线性空间开子集之间的函数复合，因此通常的链式法则适用：

$$\mathrm{D}F(x)[v]=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}F(c(t))\Big|_{t=0}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\bar{F}(c(t))\Big|_{t=0}=\mathrm{D}\bar{F}(c(0))[c'(0)]=\mathrm{D}\bar{F}(x)[v].$$

这对所有 $v\in T_x\mathcal{M}$ 都成立。我们总结如下。

定理 2.4 (微分与延拓的关系) 在上述记号下，$\mathrm{D}F(x)=\mathrm{D}\bar{F}(x)|_{T_x\mathcal{M}}$。

例 2.1 给定实对称矩阵 $A\in\mathrm{Sym}(d)$，非零向量 $x\in\mathbb{R}^d$ 处的瑞利商由 $\frac{x^\top Ax}{x^\top x}$ 给出。得到了球面上的一个函数：

$$f:\mathbb{S}^{d-1}\to\mathbb{R}:x\mapsto x^\top Ax.$$

函数 f 可通过 $\bar{f}(x)=x^\top Ax$ 光滑延拓到 $\mathbb{R}^d$，因此 f 是光滑的。它的微分表达式：对所有 $v\in\mathbb{R}^d$，

$$\begin{aligned}\mathrm{D}\bar{f}(x)[v]&=\lim_{t\to0}\frac{\bar{f}(x+tv)-\bar{f}(x)}{t}\\&=\lim_{t\to0}\frac{(x+tv)^\top A(x+tv)-x^\top Ax}{t}\\&=x^\top Av+v^\top Ax\\&=x^\top(A+A^\top)v=2x^\top Av.\end{aligned}$$

因此，由定理 2.4可得：

$$\mathrm{D}f(x)[v]=\mathrm{D}\bar{f}(x)[v]=2x^\top Av$$

对所有 $v\in\mathrm{T}_x\mathbb{S}^{d-1}=\{v\in\mathbb{R}^d:x^\top v=0\}$ 成立。注意，$\mathrm{D}\bar{f}(x)$ 定义在整个 $\mathbb{R}^d$ 上，而 $\mathrm{D}f(x)$ 仅定义在 $\mathrm{T}_x\mathbb{S}^{d-1}$ 上。

例 2.2 对于光滑映射 $F_1, F_2 : \mathcal{M} \to \mathcal{E}'$ 和实数 a_1, a_2，可证明 $F : x \mapsto a_1F_1(x) + a_2F_2(x)$ 是光滑的，且其微分有线性：

$$\mathrm{D}F(x) = a_1\mathrm{D}F_1(x) + a_2\mathrm{D}F_2(x).$$

例 2.3 对于光滑映射 $f : \mathcal{M} \to \mathbb{R}$ 和 $G : \mathcal{M} \to \mathcal{E}'$，证明 $fG : x \mapsto f(x) \cdot G(x)$ 是从 $\mathcal{M}$ 到 $\mathcal{E}'$ 的光滑映射，且我们有乘积法则：

$$\mathrm{D}(fG)(x)[v] = \mathrm{D}f(x)[v] \cdot G(x) + f(x) \cdot \mathrm{D}G(x)[v].$$

例 2.4 设 $F : \mathcal{M} \to \mathcal{M}'$ 和 $G : \mathcal{M}' \to \mathcal{M}''$ 是光滑的，其中 $\mathcal{M}, \mathcal{M}'$ 和 $\mathcal{M}''$ 分别是 $\mathcal{E}, \mathcal{E}'$ 和 $\mathcal{E}''$ 的嵌入子流形。可证明复合映射保持光滑性，即 $G \circ F : x \mapsto G(F(x))$ 是光滑的。且有链式法则：

$$\mathrm{D}(G \circ F)(x)[v] = \mathrm{D}G(F(x))[\mathrm{D}F(x)[v]].$$

3 切空间、切丛与收缩算子

3.1 切空间

一般流形上的切空间的定义相对比较抽象, 流形优化一般只考虑有限维线性空间上的流形, 此时的切空间定义简单一些. 一般的情况可以类似的推广, 这里不去讨论.

定义 3.1 设 $\mathcal{M}$ 是 $\mathcal{E}$ 的一个子集。对于所有 $x \in \mathcal{M}$，定义：

$$\mathrm{T}_x\mathcal{M} = \{c'(0) \mid c : I \to \mathcal{M} \text{ 是光滑的且} c(0) = x\},$$

其中 I 是包含 $t = 0$ 的任意开区间。也就是说，$v \in \mathrm{T}_x\mathcal{M}$ 当且仅当存在 $\mathcal{M}$ 上经过 x 且导数为 v 的光滑曲线。

定理 3.1 设 $\mathcal{M}$ 是 $\mathcal{E}$ 的一个嵌入子流形. 考虑 $x \in \mathcal{M}$ 以及集合 $\mathrm{T}_x\mathcal{M}$. 若 $\mathcal{M}$ 是一个开子流形，那么 $\mathrm{T}_x\mathcal{M} = \mathcal{E}$. 否则, $\mathrm{T}_x\mathcal{M} = \ker \mathrm{D}h(x)$, 其中 h 是在 x 处的任意局部定义函数.

证明.

(1) 若 $\mathcal{M}$ 是一个开子流形, 显然 $\mathrm{T}_x\mathcal{M} \subset \mathbb{R}^d = \mathcal{E}$,
又 $\forall v \in \mathbb{R}^d = \mathcal{E}$, 令 $c(t) = x + tv$, 则光滑且 $c(0) = x$; 于是 $c'(0) = v \in \mathrm{T}_x\mathcal{M}$, 则 $\mathbb{R}^d = \mathcal{E} \subset \mathrm{T}_x\mathcal{M}$, 综上:

$$\mathrm{T}_x\mathcal{M} = \mathcal{E}.$$

(2) 否则

(2-1) 先证 $\mathrm{T}_x\mathcal{M} \subset \ker \mathrm{D}h(x)$;

$\forall v \in \mathrm{T}_x\mathcal{M}$, $\exists\, c : I \to \mathcal{M}$, $c(0) = x$, $c'(0) = v$.

又因为 $c(t) \in \mathcal{M}, \forall t \in I$, 又由 c 的连续性, 当 t 充分小时, 有 $c(t) \in U \bigcap \mathcal{M}$, 则 $h(c(t)) = 0$, 于是

$$0 = \frac{d}{dt}(h(c(t))) = \mathrm{D}h(c(t))c'(t),$$

令 $t = 0$, 则 $0 = \mathrm{D}h(x)v$, 于是 $v \in \ker \mathrm{D}h(x)$, $\mathrm{T}_x\mathcal{M} \subset \ker \mathrm{D}h(x)$ 得证.

(2-2) 下证 $\ker \mathrm{D}h(x) \subset \mathrm{T}_x\mathcal{M}$;

取 $u \in \mathbb{R}^{d-k}$, 令 $\gamma(t) = F(x) + t \begin{bmatrix} u \\ 0 \end{bmatrix}$, F 即为定理 2.1 中的;

由 $x \in U \cap \mathcal{M}$, 则 $F(x) \in V \cap \mathcal{M}$,

又 $\begin{bmatrix} u \\ 0 \end{bmatrix} \in E$, 则 $\gamma(t) \in E$,

而 V 是开集，则当 t 充分小的时候, $\gamma(t) \in V \cap E$,

令 $c(t) = F^{-1}(\gamma(t))$, 则 $c(0) = F^{-1}(F(x)) = x$,

则 $c'(t) = \mathrm{D}F^{-1}(\gamma(t))\gamma'(t)$, 则 $c'(0) = \mathrm{D}F^{-1}(F(x)) \begin{bmatrix} u \\ 0 \end{bmatrix} = (\mathrm{D}F(x))^{-1}x$,

其中最后一个等式是因为 $\mathrm{D}x = I = \mathrm{D}(F^{-1} \circ F(x)) = \mathrm{D}F^{-1}(F(x))\mathrm{D}F(x)$,

于是 $\forall v \in \ker \mathrm{D}h(x)$, $\exists \begin{bmatrix} u \\ 0 \end{bmatrix} = \mathrm{D}F(x)v = \begin{bmatrix} * \\ \mathrm{D}h(x) \end{bmatrix} v$, 则 $v \in \mathrm{T}_x\mathcal{M}$.

则 $\ker \mathrm{D}h(x) \subset \mathrm{T}_x\mathcal{M}$ 得证.

综上 $\ker \mathrm{D}h(x) = \mathrm{T}_x\mathcal{M}$.

3.2 切丛

定义 3.2 (切丛) 流形 $\mathcal{M}$ 的切丛定义为：

$$\mathrm{T}\mathcal{M} = \{(x, v) : x \in \mathcal{M} \text{ 且} v \in \mathrm{T}_x\mathcal{M}\}.$$

注 3.1 对于切向量 $v \in \mathrm{T}_x\mathcal{M}$，我们有时会将 v 和 (x, v) 这两个概念混同。如果从上下文能清楚知道 v 的基点是 x，我们可以写成 $(x, v) \in \mathrm{T}_x\mathcal{M}$，甚至 $v \in \mathrm{T}\mathcal{M}$。

切丛是一个流形。

定理 3.2 若 $\mathcal{M}$ 是 $\mathcal{E}$ 的一个嵌入子流形，则切丛 $\mathrm{T}\mathcal{M}$ 是 $\mathcal{E} \times \mathcal{E}$ 的一个嵌入子流形，且 $\dim \mathrm{T}\mathcal{M} = 2 \dim \mathcal{M}$。

证明. $\forall (\bar{x}, \bar{v}) \in \mathrm{T}\mathcal{M}$, 根据定义 2.1, 只需要在 $(\bar{x}, \bar{v})$ 处找到对应的局部定义函数即可.

由于 $\bar{x}\in\mathcal{M}$, 而 $\mathcal{M}$ 是 $\mathcal{E}$ 的一个嵌入子流形, 则存在 $\bar{x}$ 在 $\mathcal{E}$ 中的一个邻域 U 以及一个光滑函数 $h:U\to\mathbb{R}^k$，满足：

(a) 若 y 在 U 中，则 $h(y)=0$ 当且仅当 $y\in\mathcal{M}$;
(b) $\mathrm{rank}\mathrm{D}h(\bar{x})=k$。

我们现在的任务是，找到 $(\bar{x},\bar{v})$ 对应的局部定义函数, 一个自然的想法是 $H:U\times\mathcal{E}\to\mathbb{R}^{2k}$

$$H(x,v)=\begin{bmatrix} h(x) \\ \mathrm{D}h(x)[v] \end{bmatrix}.$$

这时

$$\mathrm{D}H(\bar{x},\bar{v})=\begin{bmatrix} \mathrm{D}h(\bar{x}) & 0 \\ \mathcal{L}(\bar{x},\bar{v}) & \mathrm{D}h(\bar{x}) \end{bmatrix},$$

于是 $\mathrm{rank}\,\mathrm{D}H(\bar{x},\bar{v})=\mathrm{rank}\,\mathrm{D}h(\bar{x})+\mathrm{rank}\,\mathrm{D}h(\bar{x})=2k$。问题好像变得容易解决了。

不过此时还有一个问题没有解决：否有 $\mathrm{T}\mathcal{M}\cap(U\times\mathcal{E})=H^{-1}(0)$？我们先来逐步分析一下：

当 $(x,v)\in\mathrm{T}\mathcal{M}\cap(U\times\mathcal{E})$, 显然有 $x\in\mathcal{M}\cap U=h^{-1}(0)$, 下面只需要说明 $v\in\ker\mathrm{D}h(x)$.

当 $(x,v)\in H^{-1}(0)$, 显然有 $x\in h^{-1}(0)=\mathcal{M}\cap U$, 下面只需要说明 $v\in\mathrm{T}_x\mathcal{M}$.

于是我们需要说明的应该是 $\mathrm{T}_x\mathcal{M}=\ker\mathrm{D}h(x)$, 而根据定理 3.1, 只需要证明 h 也是 x 处的局部定义函数。

而 h 只是 $\bar{x}$ 的局部定义函数，x 是 $\bar{x}$ 的领域 U 中的一个点, 为了使得 h 也是 x 处的局部定义函数, 就要证明在 x 处 $\mathrm{rank}\mathrm{D}h(x)=k$, 目前有个条件是 $\mathrm{rank}\mathrm{D}h(\bar{x})=k$, 根据 $\mathrm{D}h(x)$ 的连续性，当 x 在 $\bar{x}$ 的某一个领域内 (仍然记为 U) 时, $\mathrm{rank}\mathrm{D}h(\bar{x})=k$, 这时回带到上面的论证，就可以了。

对于维数，利用 $\mathrm{T}_{(\bar{x},\bar{v})}\mathrm{T}\mathcal{M}=\ker\mathrm{D}H(\bar{x},\bar{v})$ 和秩 - 零化度定理，可得出 $\dim\mathrm{T}\mathcal{M}=\dim\mathrm{T}_{(\bar{x},\bar{v})}\mathrm{T}\mathcal{M}=2\dim\mathcal{E}-2k=2\dim\mathcal{M}$。

注 3.2 在上述证明中可以发现，一个嵌入子流形某一点处的局部定义函数是 h，则在这一点的某个领域内的任意一个点，h 也可以成为其局部定义函数，相当于 h 是这个领域一致的局部定义函数。

定义 3.3 (光滑向量场) 流形 $\mathcal{M}$ 上的向量场是一个映射 $V:\mathcal{M}\to\mathrm{T}_x\mathcal{M}$，使得对所有 $x\in\mathcal{M}$，有 $V(x)\in\mathrm{T}_x\mathcal{M}$。如果 V 是一个光滑映射，我们称它是一个光滑向量场。光滑

向量场的集合记为 $\mathfrak{X}(\mathcal{M})$。

3.3 收缩算子

给定一点 $x \in \mathcal{M}$ 和一个切向量 $v \in \mathrm{T}_x\mathcal{M}$，我们经常需要从 x 出发沿着方向 v 移动，同时保持在流形上：这是梯度下降算法以及流形上几乎所有优化算法的基本操作。我们可以通过沿着流形 $\mathcal{M}$ 上任意一条满足 $c(0) = x$ 且 $c'(0) = v$ 的光滑曲线 c 来实现这一点，但当然存在许多这样的曲线。一个收缩（retraction）为每一个可能的 $(x, v) \in \mathrm{T}\mathcal{M}$ 选取一条特定的曲线。此外，这种曲线的选择光滑地依赖于 (x, v)，我们利用切丛 $\mathrm{T}\mathcal{M}$ 是一个流形这一事实来精确表述这种依赖关系。

定义 3.4 (收缩) 流形 $\mathcal{M}$ 上的一个收缩是一个光滑映射

$$\mathrm{R} : \mathrm{T}\mathcal{M} \to M : (x, v) \mapsto \mathrm{R}_x(v)$$

使得每条曲线 $c(t) = \mathrm{R}_x(tv)$ 满足 $c(0) = x$ 且 $c'(0) = v$。

例 3.1 在线性流形上，$R_x(v) = x + v$ 是一个收缩。

例 3.2 设 x 是球面 $\mathbb{S}^{d-1}$ 上的一个点，且设 v 在 x 处是切向量，即 $x^\top v = 0$。为了沿 v 从 x 出发移动同时保持在球面上，一种方法是先在 $\mathbb{R}^d$ 中迈出一步，然后投影回球面：

$$\mathrm{R}_x(v) \triangleq \frac{x+v}{\|x+v\|} = \frac{x+v}{\sqrt{1+\|v\|^2}}.$$

考虑由下式定义的曲线 $c : \mathbb{R} \to \mathbb{S}^{d-1}$：

$$c(t) = \mathrm{R}_x(tv) = \frac{x+tv}{\sqrt{1+t^2\|v\|^2}}.$$

显然，$c(0) = x$。此外，可以计算得 $c'(0) = v$，也就是说，在 x 附近，直到一阶近似，收缩曲线沿 v 移动。为了验证 R 是光滑的，注意到 $\overline{\mathrm{R}}_x(v) \triangleq (x+v)/\sqrt{1+\|v\|^2}$ 是到整个 $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$ 的光滑延拓。

另一个合理的选择是沿大圆从 x 出发移动：

$$\mathrm{R}_x(v) \triangleq \cos(\|v\|)x + \frac{\sin(\|v\|)}{\|v\|}v,$$

采用通常的约定 $\sin(0)/0 = 1$。事实上，曲线

$$c(t) = \mathrm{R}_x(tv) = \cos(t\|v\|)x + \frac{\sin(t\|v\|)}{\|v\|}v$$

描绘出 $\mathbb{S}^{d-1}$ 上的大圆，该大圆在 $t = 0$ 时经过 x，且速度为 $c'(0) = v$。

4 黎曼流形与黎曼梯度

4.1 黎曼流形 (Riemannian manifolds)

定义 4.1 切空间 $\mathrm{T}_x\mathcal{M}$ 上的内积是一个双线性、对称、正定的函数 $\langle\cdot,\cdot\rangle_x : \mathrm{T}_x\mathcal{M}\times\mathrm{T}_x\mathcal{M}\to\mathbb{R}$。它诱导出切向量的范数：$\|u\|_x=\sqrt{\langle u,u\rangle_x}$。流形 $\mathcal{M}$ 上的度量是为每个 $x\in M$ 选择一个内积 $\langle\cdot,\cdot\rangle_x$。

注 4.1 内积是对于切空间 $\mathrm{T}_x\mathcal{M}$ 而言的概念，而度量则是在流形 $\mathcal{M}$ 每一个点处的切空间定义的整体概念。

我们需要特别希望的是在某种意义上随 x 光滑变化的度量。于是有如下含义:

定义 4.2 (黎曼度量) 若流形 $\mathcal{M}$ 上的度量 $\langle\cdot,\cdot\rangle_x$ 随 x 光滑变化，即对于 $\mathcal{M}$ 上所有的光滑向量场 (见定义 3.3) V,W，函数 $x\mapsto\langle V(x),W(x)\rangle_x$ 是从 $\mathcal{M}$ 到 $\mathbb{R}$ 的光滑函数，那么该度量就是黎曼度量。

定义 4.3 (黎曼流形) 黎曼流形是带有黎曼度量的流形。

欧几里得空间是一个带有内积 $\langle\cdot,\cdot\rangle$（在所有点处都相同）的线性空间 $\mathcal{E}$——我们称之为欧几里得度量。当 $\mathcal{M}$ 是欧几里得空间 $\mathcal{E}$ 的一个嵌入子流形时，$\mathcal{M}$ 的切空间是 $\mathcal{E}$ 的线性子空间。这就有了一个在每个切空间上定义内积的特别简便的方法：只需将 $\mathcal{E}$ 的内积限制到每个切空间上。由此在 $\mathcal{M}$ 上得到的度量称为诱导度量。易得诱导度量是一个黎曼度量，这引出了黎曼子流形的概念。

定理 4.1 设 $\mathcal{M}$ 是 $\mathcal{E}$ 的一个嵌入子流形，且 $\langle\cdot,\cdot\rangle$ 是 $\mathcal{E}$ 上的欧几里得度量。那么，在每个 x 处通过限制定义的 $\mathcal{M}$ 上的度量，即对于 $u,v\in T_x\mathcal{M}$，有 $\langle u,v\rangle_x=\langle u,v\rangle$，是一个黎曼度量。

证明. 对于任意两个光滑向量场 $V,W\in\mathfrak{X}(\mathcal{M})$，设 $\bar{V},\bar{W}$ 是 V,W 到 $\mathcal{E}$ 中 $\mathcal{M}$ 的一个邻域 U 的两个光滑延拓。然后，考虑 $g(x)=\langle V(x),W(x)\rangle_x$（$\mathcal{M}$ 上的一个函数），并令 $\bar{g}(x)=\langle\bar{V}(x),\bar{W}(x)\rangle$（$U$ 上的一个函数）。显然，$\bar{g}$ 是光滑的，且 $g=\bar{g}|_{\mathcal{M}}$。因此，g 是光滑的。

定义 4.4 设 $\mathcal{M}$ 是欧几里得空间 $\mathcal{E}$ 的一个嵌入子流形。将 $\mathcal{E}$ 的内积限制到每个切空间上得到的黎曼度量，我们称 $\mathcal{M}$ 是 $\mathcal{E}$ 的一个黎曼子流形。

注 4.2 黎曼子流形不仅仅是带有某种黎曼结构的嵌入子流形，还必须是继承了被嵌入空间的内积作为度量。

例 4.1 给 $\mathbb{R}^d$ 赋予标准度量 $\langle u,v\rangle=u^\top v$，并考虑球面 $\mathrm{S}^{d-1}=\{x\in\mathbb{R}^d:\|x\|=1\}$ 为 $\mathbb{R}^d$ 的嵌入子流形。在每个切空间 $T_x\mathrm{S}^{d-1}$ 上，利用继承的度量 $\langle u,v\rangle_x=\langle u,v\rangle=u^\top v$，该球面成为 $\mathbb{R}^d$ 的一个黎曼子流形。

例 4.2 对于上述流形，还可以考虑这样的度量：在每个切空间 $T_x\mathrm{S}^{d-1}$ 上，定义内积 $\langle u,v\rangle_x = u^\top G(x)v$，其中 $G:\mathcal{M}\to\mathbb{R}^{d\times d}$ 为连续映射，则该球面成为一个黎曼流形。(注意此时不能称之为黎曼子流形，因为它的度量并不是继承于 $\mathcal{E}$)

4.2 黎曼梯度 (Riemannian gradients)

设 $\mathcal{M}$ 是一个黎曼流形。给定一个光滑函数 $f:\mathcal{M}\to\mathbb{R}$，我们可以定义它的梯度了。

定义 4.5 设 $f:\mathcal{M}\to\mathbb{R}$ 是黎曼流形 $\mathcal{M}$ 上的光滑函数。f 的黎曼梯度是 $\mathcal{M}$ 上的一个向量场 $\operatorname{grad} f$(所谓向量场，就是由一个点确定一个向量，有点像一个向量空间到向量空间的映射)，它由以下恒等式唯一确定：

$$\forall (x,v)\in \mathrm{T}\mathcal{M}, Df(x)[v] = \langle v, \operatorname{grad} f(x)\rangle_x,$$

其中 $\mathrm{D}f(x)$ 如定义 2.4 中所示，$\langle\cdot,\cdot\rangle_x$ 是黎曼度量。

注 4.3 注意上述的 $\operatorname{grad} f(x)\in \mathrm{T}_x\mathcal{M}$. $\operatorname{grad} f$ 是一个从 $\mathrm{T}\mathcal{M}$ 到 $\mathbb{R}$ 的一个映射. 回想一下，在数学分析中也有一样的东西:

$$\forall (x,v)\in \mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n, Df(x)[v] = \langle v, \operatorname{grad} f(x)\rangle,$$

这里的切丛 $\mathrm{T}\mathcal{M}$ 其实就是 $\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n$, 因为函数的定义域是全空间 $\mathbb{R}^n$.

要计算 f 的梯度，首选方法是得到 $\mathrm{D}f(x)[v]$ 的表达式，然后对其进行运算，直到它呈现出 $\langle v,\cdot\rangle_x$ 的形式，其中 v 是 x 处的切向量。根据唯一性，这样就能得到梯度。可以通过回缩来采用间接方法:

定理 4.2 设 $f:\mathcal{M}\to\mathbb{R}$ 是黎曼流形 $\mathcal{M}$ 上的光滑函数, R 是 $\mathcal{M}$ 上一个回缩算子。那么，对于所有 $x\in\mathcal{M}$，有

$$\operatorname{grad} f(x) = \operatorname{grad}(f\circ R_x)(0),$$

其中 $f\circ R_x : T_x\mathcal{M}\to\mathbb{R}$ 定义在欧几里得空间（具有内积 $\langle\cdot,\cdot\rangle_x$ 的线性空间 $T_x\mathcal{M}$）上。

证明. $\forall v\in T_x\mathcal{M}$，因为 $R_x(0)=x$ 且 $DR_x(0)$ 是恒等映射）于是有

$$\mathrm{D}(f\circ R_x)(0)[v] = \mathrm{D}f(R_x(0))[\mathrm{D}R_x(0)[v]] = \mathrm{D}f(x)[v],$$

对 $f\circ R_x$ 和 f 都使用梯度的定义，我们可以得出，对于所有 $v\in T_x\mathcal{M}$，

$$\langle \operatorname{grad}(f\circ R_x)(0), v\rangle_x = \langle \operatorname{grad} f(x), v\rangle_x.$$

由梯度的唯一性可得该结论。□

假设 $\mathcal{M}$ 嵌入到具有欧几里得度量 $\langle\cdot,\cdot\rangle$ 的欧几里得空间 $\mathcal{E}$ 中。由于 f 是光滑的，则有在 $\mathcal{E}$ 中 $\mathcal{M}$ 的一个邻域上一个光滑延拓 $\bar{f}$，其具有欧几里得梯度 $\operatorname{grad}\bar{f}$。于是：

$$\forall(x,v)\in T\mathcal{M},\quad \langle v,\operatorname{grad}f(x)\rangle_x=\mathrm{D}f(x)[v]=\mathrm{D}\bar{f}(x)[v]=\langle v,\operatorname{grad}\bar{f}(x)\rangle.$$

由于 $T_x\mathcal{M}$ 是 $\mathcal{E}$ 的子空间，且 $\operatorname{grad}\bar{f}(x)$ 是 $\mathcal{E}$ 中的向量，因此，后者在 $\mathcal{E}$ 中可以唯一分解为

$$\operatorname{grad}\bar{f}(x)=\operatorname{grad}\bar{f}(x)_{\|}+\operatorname{grad}\bar{f}(x)_{\perp},$$

其中一个分量在 $\mathrm{T}_x\mathcal{M}$ 中，另一个与 $\mathrm{T}_x\mathcal{M}$ 正交，正交性由 $\mathcal{E}$ 的内积判断。即，$\operatorname{grad}\bar{f}(x)_{\|}$ 在 $T_x\mathcal{M}$ 中，且 $\forall v\in\mathrm{T}_x\mathcal{M},\quad\langle v,\operatorname{grad}\bar{f}(x)_{\perp}\rangle=0.$

因此，$\forall(x,v)\in T\mathcal{M}$，

$$\langle v,\operatorname{grad}f(x)\rangle_x=\langle v,\operatorname{grad}\bar{f}(x)\rangle=\langle v,\operatorname{grad}\bar{f}(x)_{\|}+\operatorname{grad}\bar{f}(x)_{\perp}\rangle=\langle v,\operatorname{grad}\bar{f}(x)_{\|}\rangle.$$

这将 f 的黎曼梯度与 $\bar{f}$ 的欧几里得梯度联系起来。

现在进一步假设 $\mathcal{M}$ 是 $\mathcal{E}$ 的黎曼子流形。那么，由于黎曼度量是欧几里得度量在切空间上的限制，我们得到：

$$\forall(x,v)\in T\mathcal{M},\quad\langle v,\operatorname{grad}f(x)\rangle=\langle v,\operatorname{grad}\bar{f}(x)_{\|}\rangle.$$

于是

$$\operatorname{grad}f(x)=\operatorname{grad}\bar{f}(x)_{\|}.$$

换句话说：要确定 $\operatorname{grad}f$，首先求出 f 的任意光滑延拓的（经典）梯度的表达式，然后正交投影到切空间上。这是一个实用的方法，因为我们通常可以得到一个光滑延拓。这促使我们引入正交投影算子。

定义 4.6 设 $\mathcal{M}$ 是欧几里得空间 $\mathcal{E}$ 的一个嵌入子流形。到 $\mathrm{T}_x\mathcal{M}$ 的正交投影是满足以下性质的线性映射 $\operatorname{Proj}_x:\mathcal{E}\to\mathcal{E}$：

- 值域：$\operatorname{im}(\operatorname{Proj}_x)=\mathrm{T}_x\mathcal{M}$;
- 投影性：$\operatorname{Proj}_x\circ\operatorname{Proj}_x=\operatorname{Proj}_x$;
- 正交性：对所有 $v\in\mathrm{T}_x\mathcal{M}$ 和 $u\in\mathcal{E}$，有 $\langle u-\operatorname{Proj}_x(u),v\rangle=0.$

注 4.4 对于一个开子流形，因为 $\mathrm{T}_x\mathcal{M}=\mathcal{E}$，所以 Proj_x 是恒等映射。

于是根据上述讨论得到:

命题 4.3 设 $\mathcal{M}$ 是欧几里得空间 $\mathcal{E}$ 的一个黎曼子流形，且 $f:\mathcal{M}\to\mathbb{R}$ 是一个光滑函数。则 f 的黎曼梯度由下式给出：

$$\operatorname{grad}f(x)=\operatorname{Proj}_x(\operatorname{grad}\bar{f}(x)),$$

其中 $\bar{f}$ 是 f 到 $\mathcal{E}$ 中 $\mathcal{M}$ 的某一邻域的任意光滑延拓。

命题 4.4 设 Proj_x 是从 $\mathcal{E}$ 到 $\mathcal{E}$ 的一个线性子空间的正交投影。那么，Proj_x 是自伴的。具体来说：

$$\forall u, v \in \mathcal{E}, \quad \langle u, \mathrm{Proj}_x(v)\rangle = \langle \mathrm{Proj}_x(u), v\rangle,$$

其中 $\langle\cdot,\cdot\rangle$ 是 $\mathcal{E}$ 上的欧几里得度量。

证明. 根据正交投影的性质，对所有 $u, v \in \mathcal{E}$：

$$\begin{aligned}
0 &= \langle u - \mathrm{Proj}_x(u), \mathrm{Proj}_x(v)\rangle \\
&= \langle u, \mathrm{Proj}_x(v)\rangle - \langle \mathrm{Proj}_x(u), \mathrm{Proj}_x(v)\rangle \\
&= \langle u, \mathrm{Proj}_x(v)\rangle - \langle \mathrm{Proj}_x(u), v - (v - \mathrm{Proj}_x(v))\rangle \\
&= \langle u, \mathrm{Proj}_x(v)\rangle - \langle \mathrm{Proj}_x(u), v\rangle + \underbrace{\langle \mathrm{Proj}_x(u), v - \mathrm{Proj}_x(v)\rangle}_{=0} \\
&= \langle u, \mathrm{Proj}_x(v)\rangle - \langle \mathrm{Proj}_x(u), v\rangle.
\end{aligned}$$

Part III

流形优化的一阶算法

5 流形优化基础

考虑流形优化问题：

$$\min_{x\in\mathcal{M}} f(x),$$

其中 $\mathcal{M}$ 是一个光滑流形，f 是一个光滑函数。

对于一个优化问题最好可以找到他的全局最优点:

$$x : \forall\, y \in \mathcal{M},\ f(x) \le f(y),$$

但是这有时并不现实，一个可行的替代方式是寻找局部最优点：

$$x : \exists \text{ 领域 } U, \forall\, y \in U \subset \mathcal{M},\ f(x) \le f(y).$$

定义 5.1 (流形上序列的极限与聚点) 考虑流形 $\mathcal{M}$ 上的点列 $S = \{x_0, x_1, x_2, \ldots\}$。

- 若对 $x \in \mathcal{M}$, $\mathcal{M}$ 中的每个开集 $\mathcal{U}$，都 $\exists\, K \in \mathbb{N}^+$，使得 $\forall k \ge K, x_k \in \mathcal{U}$ 中，则称 x 是 S 的极限。由于流形的拓扑是 Hausdorff 的，则一个点列至多有一个极限。若 x 是该极限，记为 $\lim_{k\to\infty} x_k = x$ 或 $x_k \to x$。

- 若 $x \in \mathcal{M}$ 是 S 的某个子列的极限，则称 x 是 S 的聚点。

5.1 流形上光滑函数的泰勒展开

在一般的优化问题中，我们通常需要对目标函数进行近似化处理，而对一个光滑函数进行泰勒展开式是一个常用的处理方式。

设 $c : I \to \mathcal{M}$ 是 $\mathcal{M}$ 上的一条光滑曲线，满足 $c(0) = x$ 且 $c'(0) = v$，其中 I 是 $\mathbb{R}$ 包含 0 的开区间。令

$$g : I \to \mathbb{R} : t \mapsto g(t) = f(c(t)).$$

由于 $g = f \circ c$ 是光滑函数，他的泰勒展开式：

$$g(t) = g(0) + tg'(0) + O(t^2).$$

由于 $g(0) = f(x)$ 和链式法则：

$$g'(t) = \mathrm{D}f(c(t))[c'(t)] = \langle \mathrm{grad} f(c(t)), c'(t) \rangle_{c(t)} \Rightarrow g'(0) = \langle \mathrm{grad} f(x), v \rangle_x,$$

因此得到:

$$f(c(t)) = f(x) + t\langle \mathrm{grad} f(x), v \rangle_x + O(t^2).$$

特别地，如果曲线由回缩得到，即 $c(t) = \mathrm{R}_x(tv)$，则

$$f(\mathrm{R}_x(tv)) = f(x) + t\langle \mathrm{grad} f(x), v \rangle_x + O(t^2).$$

等价地令 $s = tv$：

$$f(\mathrm{R}_x(s)) = f(x) + \langle \mathrm{grad} f(x), s \rangle_x + O(\|s\|_x^2).$$

5.2 流形优化的一阶最优性条件

定义 5.2 (临界点 (驻点)) 设 $f : \mathcal{M} \to \mathbb{R}$ 是光滑函数，若对 $\mathcal{M}$ 上所有满足 $c(0) = x$ 的光滑曲线 c，都有

$$(f \circ c)'(0) \geq 0,$$

则称点 $x \in \mathcal{M}$ 是 f 的临界点 (或驻点)。

注 5.1

- 现在看来流形在某个点的切方向特别像之前学过的可行方向；
- 根据定义，函数 f 无法从临界点 x 出发移动并使 f 的值以线性速率初始递减。注意，该定义等价于 $(f \circ c)'(0) = 0$：只需同时考虑曲线 $t \mapsto c(t)$ 和 $t \mapsto c(-t)$ 即可。进一步等价地，由 $f \circ c$ 的链式法则可知，x 是 f 的临界点当且仅当 $\mathrm{D}f(x) = 0$：

$$(f \circ c)'(0) = 0 \iff \mathrm{D}f(x)[v] = 0, \forall\, v \in \mathrm{T}_x\mathcal{M} \iff \mathrm{D}f(x) = 0$$

定理 5.1 设 $f:\mathcal{M}\to\mathbb{R}$ 是光滑函数，任何 f 的局部极小点都是 f 的临界点。

证明. 设 x 是 f 的局部极小点：存在 x 在 $\mathcal{M}$ 中的邻域 $\mathcal{U}$，使得对所有 $y\in\mathcal{U}$，有 $f(y)\geq f(x)$。为了导出矛盾，假设存在光滑曲线 $c:I\to\mathcal{M}$ 满足 $c(0)=x$ 且 $(f\circ c)'(0)<0$。由 $(f\circ c)'$ 的连续性，存在 $\delta>0$，使得对所有 $\tau\in[0,\delta]$，有 $(f\circ c)'(\tau)<0$。这进一步意味着，对所有 $t\in(0,\delta]$，

$$f(c(t))=f(c(0))+\int_0^t(f\circ c)'(\tau)\mathrm{d}\tau<f(x).$$

然而，由于 c 是连续的，$c^{-1}(\mathcal{U})=\{t\in I:c(t)\in\mathcal{U}\}$ 是开集，且因 $c(0)=x\in\mathcal{U}$ 而包含 0。因此，$c^{-1}(\mathcal{U})\cap(0,\delta]$ 非空：存在 $t\in(0,\delta]$（意味着 $f(c(t))<f(x)$）使得 $c(t)\in\mathcal{U}$（意味着 $f(c(t))\geq f(x)$），矛盾。

注 5.2 上述命题的逆命题一般不成立：容易验证，局部极大点也是临界点。

在黎曼流形上，函数的临界点恰好是黎曼梯度为零的那些点。

定理 5.2 设 $f:\mathcal{M}\to\mathbb{R}$ 是黎曼流形 $\mathcal{M}$ 上的光滑函数。则 x 是 f 的临界点当且仅当 $\mathrm{grad}f(x)=0$。

证明. 设 $c:I\to\mathcal{M}$ 是 $\mathcal{M}$ 上任意满足 $c(0)=x$ 且 $c'(0)=v$ 的光滑曲线，因此

$$(f\circ c)'(0)=\mathrm{D}f(x)[v]=\langle\mathrm{grad}f(x),v\rangle_x.$$

若 $\mathrm{grad}f(x)=0$，则显然 x 是临界点。反之，若 x 是临界点，则对所有 $v\in\mathrm{T}_x\mathcal{M}$，有 $\langle\mathrm{grad}f(x),v\rangle_x\geq 0$。同时考虑 v 和 $-v$，可得对所有 $v\in\mathrm{T}_x\mathcal{M}$，有 $\langle\mathrm{grad}f(x),v\rangle_x=0$。因此，$\mathrm{grad}f(x)=0$。

注 5.3 在构造算法时，一个较朴素的目标是算法的迭代点列的聚点是临界点：这样可以得到小的梯度。

6 黎曼梯度下降法

欧氏空间 $\mathcal{E}$ 中的标准梯度下降法迭代为

$$x_{k+1}=x_k-\alpha_k\mathrm{grad}f(x_k),\quad k=0,1,2,\ldots.$$

受此启发，对于流形有黎曼梯度下降（RGD）：给定 $x_0\in\mathcal{M}$ 和 $\mathcal{M}$ 上的一个回缩 R，迭代式为

$$x_{k+1}=\mathrm{R}_{x_k}(-\alpha_k\mathrm{grad}f(x_k)),\quad k=0,1,2,\ldots.$$

这里的回缩将迭代点拉回流形上，使得每一步迭代点都满足流形约束。

Algorithm 1 RGD：黎曼梯度下降方法

输入: $x_0 \in \mathcal{M}$

for $k = 0, 1, 2, \ldots$ 选取步长 $\alpha_k > 0$,$s_k = -\alpha_k \mathrm{grad} f(x_k)$

$$x_{k+1} = \mathrm{R}_{x_k}(s_k)$$

有多种方式选取步长 α_k：线搜索方法，定义

$$g(t) = f(\mathrm{R}_{x_k}(-t\mathrm{grad} f(x_k))).$$

线搜索的目的是近似最小化 g：不仅要让下一个迭代点处的函数值尽可能的小，也要考虑到计算成本。主要的策略包括：

- 固定步长：对所有 k，$\alpha_k = \alpha$；
- 最优步长：α_k 精确地最小化 $g(t)$；通常来说计算成本较高；
- 回溯法：从 $t_0 > 0$ 开始，令 $t_i = \tau t_{i-1}$，直到 t_i 被认为是可接受的，并设置 $\alpha_k = t_i$。

Part IV

流形优化的二阶工具

前面我们对流形上的光滑函数进行一阶泰勒展开，得到了梯度法，这是一个一阶算法。在一般的优化问题中，二阶算法通常会比一阶算法更高效，因此我们希望对流形优化也采用二阶算法。而二阶算法的理论基础是对目标函数进行二阶泰勒近似，这就需要用到海瑟矩阵：

定义 6.1 (光滑函数的梯度与 Hessian 矩阵) 设 $f : \mathcal{E} \to \mathbb{R}$ 是欧式空间 $\mathcal{E}$ 上的光滑函数，其中 $\mathcal{E}$ 的内积 $\langle \cdot, \cdot \rangle$。

- f 的梯度是映射 $\mathrm{grad} f : \mathcal{E} \to \mathcal{E}$，满足对所有 $x, v \in \mathcal{E}$，有 $\langle \mathrm{grad} f(x), v \rangle = Df(x)[v]$。
- f 在 x 处的 Hessian 是线性映射 $\mathrm{Hess} f(x) : \mathcal{E} \to \mathcal{E}$，定义为

$$\mathrm{Hess} f(x)[v] = \mathrm{D}(\mathrm{grad} f)(x)[v] = \lim_{t \to 0} \frac{\mathrm{grad} f(x + tv) - \mathrm{grad} f(x)}{t}$$

值得注意的是之前我们在定义黎曼梯度的时候，我们将其限制在了切空间上，使得在做梯度法时，其先沿着切空间移动然后在回缩到流形上。然后我们想用二阶算法例如

牛顿法，则需要 Hess$f(x)$[grad$f(x)$] 也在切空间上，这就需要 Hess$f(x)$ 是一个从切空间到切空间的映射，如果流形上函数的 Hessian 矩阵像上述那样定义，是否满足这个性质呢？我们可以考虑一个简单的例子：

例 6.1 考虑单位球面 S^{d-1} 作为 $\mathbb{R}^d$ 的黎曼子流形，配备内积 $\langle u,v\rangle = u^\top v$。给定 d 阶对称矩阵 A，定义 $f(x)=\frac{1}{2}x^\top Ax$ 于 S^{d-1} 上。f 的黎曼梯度如下

$$V(x)=\mathrm{grad}f(x)=Ax-(x^\top Ax)x$$

考虑在整个 $\mathbb{R}^d$ 上定义的光滑延拓

$$\bar{V}(x)=Ax-(x^\top Ax)x$$

对所有切向量 $u\in \mathrm{T}_xS^{d-1}$，有：

$$\begin{aligned}\mathrm{D}V(x)[u]=D\bar{V}(x)[u]&=Au-(x^\top Ax)u-(u^\top Ax+x^\top Au)x\\&=\mathrm{Proj}_x(Au)-(x^\top Ax)u-(u^\top Ax)x\end{aligned}$$

其中 $\mathrm{Proj}_x(v)=v-(x^\top v)x$ 是从 $\mathbb{R}^d$ 到 T_xS^{d-1} 的正交投影。

显然，$DV(x)[u]$ 并非总在 x 处的切空间处：上式前两项是切向量，但只要 $u^\top Ax\neq 0$，第三项就不是切向量。

下面我们就需要找到使得 $\mathrm{D}V(x)[u]$ 是切向量的 $\mathrm{D}V(x)$

7 联络 (connection)

7.1 联络的定义

我们先来看一下一般的向量场在某点处的微分满足的性质设 $\mathcal{E}$ 是一个线性空间, 光滑向量场 $V\in\mathfrak{X}(\mathcal{E})$ 在点 x 处沿 u 的微分为：

$$\mathrm{D}V(x)[u]=\lim_{t\to 0}\frac{V(x+tu)-V(x)}{t}$$

给定三个光滑向量场 $U,V,W\in\mathfrak{X}(\mathcal{E})$，两个向量 $u,w\in\mathcal{E}$，两个实数 $a,b\in\mathbb{R}$ 以及一个光滑函数 $f\in\mathfrak{F}(\mathcal{E})$，则以下性质成立：

- $\mathrm{D}V(x)[au+bw]=a\mathrm{D}V(x)[u]+b\mathrm{D}V(x)[w]$；
- $\mathrm{D}(aV+bW)(x)[u]=a\mathrm{D}V(x)[u]+b\mathrm{D}W(x)[u]$；
- $\mathrm{D}(fV)(x)[u]=\mathrm{D}f(x)[u]\cdot V(x)+f(x)\mathrm{D}V(x)[u]$。

此外，映射 $x\mapsto \mathrm{D}V(x)[U(x)]$ 是光滑的，因为 U 和 V 是光滑的，并且它在 $\mathcal{E}$ 上定义了一个向量场。这构成了我们希望在流形上保持的第一组性质。

定义 7.1 (联络) 流形 $\mathcal{M}$ 上的一个联络是一个算子

$$\nabla : \mathrm{T}\mathcal{M} \times \mathfrak{X}(\mathcal{M}) \to \mathrm{T}\mathcal{M} : ((x,u),V) \mapsto (x, \nabla_u V)$$

使得当 $u \in \mathrm{T}_x\mathcal{M}$ 时，$\nabla_u V \in \mathrm{T}_x\mathcal{M}$，且对所有 $U,V,W \in \mathfrak{X}(\mathcal{M})$，$u,w \in \mathrm{T}_x\mathcal{M}$ 和 $a,b \in \mathbb{R}$，满足以下四个性质：

(0) 光滑性：$(\nabla_U V)(x) \triangleq \nabla_{U(x)} V$ 定义了一个光滑向量场 $\nabla_U V$，称为 V 沿 U 关于 ∇ 的协变导数；

(1) 对 u 的线性性：$\nabla_{au+bw} V = a\nabla_u V + b\nabla_w V$；

(2) 对 V 的线性性：$\nabla_u(aV+bW) = a\nabla_u V + b\nabla_u W$；

(3) 莱布尼茨法则：$\nabla_u(fV) = \mathrm{D}f(x)[u]\cdot V(x) + f(x)\nabla_u V$。

注 7.1

- 这是流形上向量场的新导数。形式上，我们应该写成 $\nabla_{(x,u)}V$，但基点 x 通常可由上下文明确。
- 在线性空间 $\mathcal{E}$ 上，$\nabla_u V = \mathrm{D}V(x)[u]$ 就是一个联络
- 如果 $\mathcal{M}$ 是 $\mathcal{E}$ 的嵌入子流形，则 $\nabla_u V = \mathrm{Proj}_x(\mathrm{D}\bar{V}(x)[u])$ 也是流形 $\mathcal{M}$ 上的联络，其中 $\bar{V}$ 是 V 的光滑延拓。这是由于正交投影算子是一个线性算子，结合 $\mathrm{D}\bar{V}(x)[u]$ 满足联络定义中的四个性质，则 $\mathrm{Proj}_x(\mathrm{D}\bar{V}(x)[u])$ 显然也满足四个性质。也就是说：

$$\nabla_u V = \mathrm{Proj}_x(\bar{\nabla}_u \bar{V})$$

  其中，$\bar{\nabla}_u\bar{V} = \mathrm{D}\bar{V}(x)[u]$.

下一个结论说明：所有联络在向量场的临界点处重合。在优化中，当将其应用于代价函数 f 临界点处的梯度向量场时，我们会看到这一事实的体现。

命题 7.1 设 $\mathcal{M}$ 是带有任意联络 ∇ 的流形。给定光滑向量场 $V \in \mathfrak{X}(\mathcal{M})$ 和点 $x \in \mathcal{M}$，若 $V(x) = 0$，则对所有 $u \in T_x\mathcal{M}$，有

$$\nabla_u V = \mathrm{D}V(x)[u]$$

特别地，$\mathrm{D}V(x)[u]$ 在 x 处是切向量。

证明. 在 $\mathcal{M}$ 上 x 的某个邻域 $\mathcal{U}$ 上，将 V 按局部标架 $W_1,\ldots,W_n \in \mathfrak{X}(\mathcal{U})$ 展开（命题 3.69）：

$$V|_{\mathcal{U}} = g_1W_1 + \cdots + g_nW_n,$$

其中 $g_1,\ldots,g_n : \mathcal{U} \to \mathbb{R}$ 是光滑的。给定 $u \in T_x\mathcal{M}$，联络的性质允许我们写出如下式子（关于为何可以说 $\nabla_u V = \nabla_u(V|_{\mathcal{U}})$，详见第 5.6 节的技术要点）：

$$\nabla_u V = \sum_i \nabla_u(g_iW_i) = \sum_i \mathrm{D}g_i(x)[u]\cdot W_i(x) + g_i(x)\nabla_u W_i.$$

此外，直接计算可得

$$\mathrm{D}V(x)[u]=\sum_i \mathrm{D}(g_iW_i)(x)[u]=\sum_i \mathrm{D}g_i(x)[u]\cdot W_i(x)+g_i(x)\mathrm{D}W_i(x)[u].$$

由于 $V(x)=0$，我们知道对所有 i，$g_i(x)=0$，因此

$$\nabla_u V=\sum_i \mathrm{D}g_i(x)[u]\cdot W_i(x)=\mathrm{D}V(x)[u].$$

7.2 Riemannian 联络

流形上存在许多不同于上一节的例子的联络。在配备黎曼度量后，如果加入两个额外的性质，使得联络和度量能良好交互，那么这样的联络就是唯一的了，这就是**黎曼几何基本定理**。特别地，这两个额外性质确保本章后续定义的 Hessian 在每个切空间上是自伴映射。

首先引入一些符号定义 (注意区分 Uf 和 fU):

定义 7.2 对于 $U,V\in\mathfrak{X}(\mathcal{M})$，以及 $f\in\mathfrak{F}(\mathcal{U})$（其中 $\mathcal{U}$ 是 $\mathcal{M}$ 中的开集），定义：

- $Uf\in\mathfrak{F}(\mathcal{U})$，满足 $(Uf)(x)=\mathrm{D}f(x)[U(x)]$；
- $[U,V]:\mathfrak{F}(\mathcal{U})\to\mathfrak{F}(\mathcal{U})$，满足 $[U,V]f=U(Vf)-V(Uf)$；
- $\langle U,V\rangle\in\mathfrak{F}(\mathcal{M})$，满足 $\langle U,V\rangle(x)=\langle U(x),V(x)\rangle_x$。

注 7.2

- Uf 通过求导刻画了光滑向量场 U 在光滑函数 f 上的作用，将 f 转化为另一个光滑函数。
- 第二个定义中交换子 $[U,V]$ 称为李括号。即使在线性空间中，$[U,V]f$ 一般也非零
- $Uf=\langle U,\mathrm{grad}f\rangle$

定理 7.2 在黎曼流形 $\mathcal{M}$ 上，存在唯一的联络 ∇，对所有 $U,V,W\in\mathfrak{X}(\mathcal{M})$ 满足以下两个额外性质：

(4) 对称性：对所有 $f\in\mathfrak{F}(\mathcal{M})$，有 $[U,V]f=(\nabla_UV-\nabla_VU)f$；
(5) 与度量的相容性：$U\langle V,W\rangle=\langle\nabla_UV,W\rangle+\langle V,\nabla_UW\rangle$。

该联络称为 Levi-Civita 或 Riemannian 联络。

Part V

常见的流形约束

8 嵌入子流形的例子

8.1 Stiefel 流形: 标准正交矩阵

对于 $p \le n$，设 $\mathbb{R}^{n\times p}$ 赋予标准内积 $\langle U, V\rangle = \mathrm{Tr}(U^\top V)$。Stiefel 流形是 $\mathbb{R}^{n\times p}$ 中那些列在 $\mathbb{R}^n$ 上关于内积 $\langle u, v\rangle = u^\top v$ 是标准正交的矩阵的集合。即

$$\mathrm{St}(n,p) = \left\{X \in \mathbb{R}^{n\times p} : X^\top X = I_p\right\},$$

其中 I_p 是大小为 p 的单位矩阵。特别地，$\mathrm{St}(n,1)$ 是 $\mathbb{R}^n$ 中的单位球面。我们把 $\mathrm{St}(n,p)$ 中的矩阵称为标准正交矩阵。

8.1.1 证明嵌入子流形

考虑如下函数：

$$h : \mathbb{R}^{n\times p} \to \mathrm{Sym}(p) : X \mapsto h(X) = X^\top X - I_p,$$

其中 $\mathrm{Sym}(p)$ 是大小为 p 的对称矩阵构成的线性空间。后者的维数为 $k = \frac{p(p+1)}{2}$。我们可以验证 h 是 $\mathrm{St}(n,p)$ 的一个定义函数。事实上，h 是光滑的，且 $h^{-1}(0) = \mathrm{St}(n,p)$；接下来只需验证对所有 $X \in \mathrm{St}(n,p)$，h 的微分的秩为 k。为此，考虑 $\mathrm{D}h(X) : \mathbb{R}^{n\times p} \to \mathrm{Sym}(p)$：

$$\begin{aligned}
\mathrm{D}h(X)[V] &= \lim_{t\to 0} \frac{h(X+tV) - h(X)}{t} \\
&= \lim_{t\to 0} \frac{(X+tV)^\top (X+tV) - X^\top X}{t} \\
&= X^\top V + V^\top X.
\end{aligned}$$

要证明 $\mathrm{D}h(X)$ 的秩为 k，我们必须证明它的像（或值域）是一个维数为 k 的线性子空间。由于陪域 $\mathrm{Sym}(p)$ 的维数为 k，我们必须证明 $\mathrm{D}h(X)$ 的像就是整个 $\mathrm{Sym}(p)$，即 $\mathrm{D}h(X)$ 是满射的。为此，考虑 $V = \frac{1}{2}XA$，其中 $A \in \mathrm{Sym}(p)$ 是任意的。于是，

$$\mathrm{D}h(X)[V] = \frac{1}{2}X^\top XA + \frac{1}{2}A^\top X^\top X = A.$$

换句话说：对于任意矩阵 $A \in \mathrm{Sym}(p)$，存在矩阵 $V \in \mathbb{R}^{n\times p}$ 使得 $\mathrm{D}h(X)[V] = A$。这就确认了 $\mathrm{D}h(X)$ 的像就是整个 $\mathrm{Sym}(p)$，因此它的秩为 k。这样一来，h 是 $\mathrm{St}(n,p)$ 的一个局部定义函数，这使得 $\mathrm{St}(n,p)$ 成为 $\mathbb{R}^{n\times p}$ 的一个嵌入子流形，其维数为

$$\dim \mathrm{St}(n,p) = \dim \mathbb{R}^{n\times p} - \dim \mathrm{Sym}(p) = np - \frac{p(p+1)}{2}.$$

8.1.2 切空间的形式

切空间是 $\mathbb{R}^{n\times p}$ 的子空间：

$$\mathrm{T}_X\mathrm{St}(n,p)=\ker \mathrm{D}h(X)=\left\{V\in\mathbb{R}^{n\times p}:X^\top V+V^\top X=0\right\}.$$

但是上述表示切空间的方式不是很友好，因为他得不到关于切向量的具体形式。可以考虑改用下面的方法：

注 8.1 这个切空间的形式也可以直接根据定义得到：设 $c(t)$ 为流形 $\mathrm{St}(m,p)$ 上的光滑曲线，且 $c(0)=X$，则 $c(t)^\top c(t)=I_p$, 求导得

$$X^\top c'(0)+(c')^\top(0)X=0$$

于是 $c'(0)\in\left\{V\in\mathbb{R}^{n\times p}:X^\top V+V^\top X=0\right\}$,

先用矩阵 $X_\perp\in\mathbb{R}^{n\times(n-p)}$ 来补全由 X 的列所构成的标准正交基，使得 $[X\ X_\perp]\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 是正交的。由于 $[X\ X_\perp]$ 可逆，任意矩阵 $V\in\mathbb{R}^{n\times p}$ 都可写成

$$V=[X\ X_\perp]\begin{bmatrix}\Omega\\ B\end{bmatrix}=X\Omega+X_\perp B,$$

其中 $\Omega\in\mathbb{R}^{p\times p}$ 和 $B\in\mathbb{R}^{(n-p)\times p}$ 是唯一确定的。利用这种分解，V 是 X 处的切向量当且仅当

$$0=\mathrm{D}h(X)[V]=X^\top(X\Omega+X_\perp B)+(X\Omega+X_\perp B)^\top X=\Omega+\Omega^\top.$$

即 Ω 必须是反对称的，而 B 是任意的。因此，

$$T_X\mathrm{St}(n,p)=\left\{X\Omega+X_\perp B:\Omega\in\mathrm{Skew}(p),B\in\mathbb{R}^{(n-p)\times p}\right\},$$

其中

$$\mathrm{Skew}(p)=\{\Omega\in\mathbb{R}^{p\times p}:\Omega^\top=-\Omega\}$$

是 p 阶反对称矩阵的集合。

8.1.3 回缩算子

$\mathrm{St}(n,p)$ 的一种常用收缩是 $Q-$ 因子收缩

$$\mathrm{R}_X(V)=Q,$$

其中 $QR=X+V$ 是 QR 分解：$Q\in\mathrm{St}(n,p)$，且 $R\in\mathbb{R}^{p\times p}$ 是具有非负对角元的上三角矩阵。这是良定义的，因为对于切向量 $V\in\mathrm{T}_X\mathrm{St}(n,p)$，

$$(X+V)^\top(X+V)=I_p+V^\top V$$

是正定的，这表明 $X+V$ 有满秩 p(对于满秩矩阵来说，QR 分解是唯一的)。该过程约 np^2 次运算。收缩的定义性质都得到了满足：

- $\mathrm{R}_X(0)=X$;
- 考察 Gram-Schmidt 算法可知，它通过一系列光滑运算将 $\mathbb{R}^{n\times p}$ 中的满秩矩阵映射到它们的 Q-因子，因此 R 是光滑的（通过复合）;
- 可验证 $\mathrm{DR}_X(0)$ 是恒等映射：
  - $\forall V\in \mathrm{T}_X\mathrm{St}(n,p)$，令 $X+tV=Q(t)R(t)$ 为其 QR 分解，则

    $$\mathrm{DR}_X(0)[V]=\lim_{t\to 0}\frac{Q(t)-Q}{t}=Q'(0),$$

    且

    $$V=Q'(0)R(0)+Q(0)R'(0)=Q'(0)+XR'(0),$$

    我们希望得到 $\mathrm{DR}_X(0)[V]=V$, 则希望 $R'(0)=0$;
  - 考虑

    $$\begin{aligned}M(t)&=(X+tV)^\top(X+tV)=I_p+t^2V^\top V\\&=(Q(t)R(t))^\top(Q(t)R(t))=R(t)^\top R(t)\end{aligned}$$

    于是 $M'(0)=0=R'(0)^\top R(0)+R(0)^\top R'(0)=R'(0)^\top+R'(0)$ 又因为 $R'(0)$ 为上三角，则 $R'(0)=0$.
  - 综上，$\mathrm{DR}_X(0)[V]=V$，于是 $\mathrm{DR}_X(0)$ 为恒等映射。

8.1.4 计算黎曼梯度

下面我们想来计算黎曼梯度，根据定理 4.3，我们先考虑 $\mathbb{R}_r^{m\times n}$ 的正交投影算子。

U 到 $\mathrm{St}(n,p)$ 切空间的正交投影算子必须满足 $U-\mathrm{Proj}_X(U)$ 与 $\mathrm{T}_X\mathrm{St}(n,p)$ 正交，即该差值必须属于 $\mathbb{R}^{n\times p}$ 中切空间的正交补, 称为 $\mathrm{St}(n,p)$ 在 X 处的法空间：

定义 8.1 $\mathrm{St}(n,p)$ 在 X 处的法空间 $\mathrm{N}_X\mathrm{St}(n,p)$ 定义为

$$\begin{aligned}&\mathrm{N}_X\mathrm{St}(n,p)=(\mathrm{T}_X\mathrm{St}(n,p))^\perp\\=&\{U\in\mathbb{R}^{n\times p}:\langle U,V\rangle=0,\forall\,V\in\mathrm{T}_X\mathrm{St}(n,p)\}\\=&\{U\in\mathbb{R}^{n\times p}:\langle U,X\Omega+X_\perp B\rangle=0\;\forall\,\Omega\in\mathrm{Skew}(p),B\in\mathbb{R}^{(n-p)\times p}\}\end{aligned}$$

注 8.2 将法向量展开为 $U=XA+X_\perp C$，其中 $A\in\mathbb{R}^{p\times p}$，$C\in\mathbb{R}^{(n-p)\times p}$；则：

$$\begin{aligned}&\mathrm{N}_X\mathrm{St}(n,p)\\=&\{U\in\mathbb{R}^{n\times p}:\langle XA+X_\perp C,X\Omega+X_\perp B\rangle=0,\ \forall\,\Omega\in\mathrm{Skew}(p),B\in\mathbb{R}^{(n-p)\times p}\}\\=&\{U\in\mathbb{R}^{n\times p}:\langle A,\Omega\rangle+\langle C,B\rangle=0,\ \forall\,\Omega\in\mathrm{Skew}(p),B\in\mathbb{R}^{(n-p)\times p}\}\\=&\{U\in\mathbb{R}^{n\times p}:\langle A,\Omega\rangle=0\text{ 且}\langle C,B\rangle=0,\ \forall\,\Omega\in\mathrm{Skew}(p),B\in\mathbb{R}^{(n-p)\times p}\}\\=&\{XA:A\in\mathrm{Sym}(p)\}\end{aligned}$$

其中, 第三个等号是因为可以分别取 $B=0$ 以及 $\Omega=0$, 第四个等号是因为

- 取 $B=C$, 则 $C=0$;
- $A\in\mathrm{Sym}(p)\Rightarrow\mathrm{Tr}(A^\top\Omega)=\mathrm{Tr}(A\Omega)=\mathrm{Tr}(A^\top\Omega^\top)=-\mathrm{Tr}(A^\top\Omega)\Rightarrow\mathrm{Tr}(A^\top\Omega)=\langle A,\Omega\rangle=0,\forall\,\Omega\in\mathrm{Skew}(p)$
- $\langle A,\Omega\rangle=0,\forall\,\Omega\in\mathrm{Skew}(p)\Rightarrow\forall i,j$设$\Omega_{ij}=1,\Omega_{ji}=-1$,其余为0, $\mathrm{Tr}(A^\top\Omega)=A_{ij}-A_{ji}=0\Rightarrow A\in\mathrm{Sym}(p)$

因此，$U\in\mathbb{R}^{n\times p}$ 的正交投影满足

$$U-\mathrm{Proj}_X(U)=XA$$

其中 A 是某个对称矩阵。因为 $\mathrm{Proj}_X(U)\in\mathrm{T}_X\mathrm{St}(n,p)$，因此

$$\mathrm{Proj}_X(U)^\top X+X^\top\mathrm{Proj}_X(U)=0$$

代入后得

$$(U-XA)^\top X+X^\top(U-XA)=0$$

即 $U^\top X+X^\top U=2A$。因此，

$$\begin{aligned}\mathrm{Proj}_X(U)&=U-X\frac{X^\top U+U^\top X}{2}\\&=(I-XX^\top)U+X\frac{X^\top U-U^\top X}{2}.\end{aligned}$$

注 8.3 这个投影公式还可以从下面这个角度思考：投影实际上是下面这个问题的解

$$\begin{aligned}\min_{V\in\mathbb{R}^{n\times p}}\quad&\frac{1}{2}\|U-V\|_F^2\\\text{s.t.}\quad&X^\top V+V^\top X=0\end{aligned}$$

他的拉格朗日函数为

$$\begin{aligned}L(V,\Lambda)=&\frac{1}{2}\|U-V\|_F^2+\mathrm{Tr}(\Lambda^\top(X^\top V+V^\top X))\\=&\frac{1}{2}\|U-V\|_F^2+\mathrm{Tr}(\Lambda^\top X^\top V)+\mathrm{Tr}(V^\top X\Lambda^\top)\end{aligned}$$

于是 KKT 条件为

$$\begin{cases}V-U+X(\Lambda+\Lambda^\top)=0\iff V=U-X(\Lambda+\Lambda^\top)\\X^\top V+V^\top X=0\end{cases}$$

于是

$$\begin{aligned}X^\top(U-X(\Lambda+\Lambda^\top))+U-X(\Lambda+\Lambda^\top)^\top X=&0\\X^\top U+U^\top X-X^\top X(\Lambda+\Lambda^\top)-(\Lambda+\Lambda^\top)X^\top X=&0\\X^\top U+U^\top X=&2(\Lambda+\Lambda^\top)\end{aligned}$$

则得到 $V=U-X(\Lambda+\Lambda^\top)=U-X\frac{X^\top U+U^\top X}{2}$.

将 $\mathrm{St}(n,p)$ 转化为黎曼流形的一种便捷方式是将其作为 $\mathbb{R}^{n\times p}$ 的黎曼子流形，在这种情况下，根据定理 4.3, 我们得到了黎曼梯度的表达：

$$\operatorname{grad} f(X) = \operatorname{Proj}_X(\operatorname{grad}\bar{f}(X)) = \operatorname{grad}\bar{f}(X) - X\operatorname{sym}(X^\top \operatorname{grad}\bar{f}(X)),$$

其中 $\operatorname{sym}(M) = \frac{M+M^\top}{2}$。

8.2 不定 Stiefel 流形 (indefinite Stiefel manifold)

不定 Stiefel 流形定义为

$$\mathrm{iSt}_{A,J}(k,n) = \{X \in \mathbb{R}^{n\times k} : X^T A X = J\}$$

其中 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 是对称可逆的，且 $J \in \mathrm{Sym}(k)$ 满足 $J^2 = I_k$。

注 8.4 注意如果不对 A 和 J 的进一步限制时，集合 $\mathrm{iSt}(k,n)$ 可能为空。例如，不存在实数组对 (x_1,x_2) 使得 $x_1^2 + x_2^2 = -1$。通常我们会进一步假设

$$\mathrm{i}_+(J) \le \mathrm{i}_+(A) 且 \mathrm{i}_-(J) \le \mathrm{i}_-(A),$$

其中 $\mathrm{i}_+(M)$ 和 $\mathrm{i}_-(M)$ 分别表示实对称矩阵 M 的正特征值个数和负特征值个数。这个要求与集合 $\mathrm{iSt}_{A,J}(k,n)$ 非空是等价的。因为：

证明. $\mathrm{iSt}_{A,J}(k,n)$ 非空的必要性可直接由 [70, 引理 1.6] 得出。此外，由假设，存在 $n\times k$ 实矩阵 V 使得 $V^T A V = \mathrm{Diag}(I_{\mathrm{i}_+(J)}, -I_{\mathrm{i}_-(J)})$，以及 $k\times k$ 正交矩阵 U 使得 $U^T J U = \mathrm{Diag}(I_{\mathrm{i}_+(J)}, -I_{\mathrm{i}_-(J)})$。因此，$VU^T \in \mathrm{iSt}_{A,J}(k,n)$。

8.2.1 证明嵌入子流形

$\mathrm{iSt}(k,n)$ 是 $\mathbb{R}^{n\times k}$ 的一个闭嵌入子流形，且 $\dim(\mathrm{iSt}(k,n)) = nk - \frac{1}{2}k(k+1)$。

证明. 定义映射

$$F : \mathbb{R}^{n\times k} \to \mathrm{Sym}(k)$$

$$X \mapsto X^T A X - J$$

由于 F 是连续的且 $F^{-1}(0) = \mathrm{iSt}(k,n)$，故 $\mathrm{iSt}(k,n)$ 是闭的。

$\forall\, X \in \mathrm{iSt}(k,n)$，可以验证 $\mathrm{D}F(X)$ 是满射。事实上，因为

$$\mathrm{D}F(X)[Z] = X^T A Z + Z^T A X,\ \forall Z \in \mathbb{R}^{n\times k},$$

且 $J^T = J$，对 $\forall Y \in \mathrm{Sym}(k)$，取 $Z := \frac{1}{2}XJY$，则有

$$\mathrm{D}F(X)[Z] = \frac{1}{2}X^TAXJY + \frac{1}{2}Y^TJ^TX^TAX = Y.$$

于是 $\mathrm{iSt}(k,n)$ 是 $\mathbb{R}^{n\times k}$ 的闭嵌入子流形，且

$$\dim(\mathrm{iSt}(k,n)) = \dim(\mathbb{R}^{n\times k}) - \dim \mathrm{Sym}(k) = nk - \frac{1}{2}k(k+1).$$

注 8.5 还有一种证明线性算子满射 (或者说对应的矩阵行满秩)(列满秩对应的应该是单射) 的方法：即验证 $\mathrm{D}F(x)\mathrm{D}F(x)^*$ 是限制在 $\mathrm{Sym}(k)$ 上的正定算子，其中 $\mathrm{D}F(x)^*$ 为伴随算子 (如果把线性算子看成一个矩阵，则伴随算子其实就是矩阵的共轭转置，当然这里是实数域所以就是转置)

$\forall Z \in \mathbb{R}^{n\times k}$, $\forall \Omega \in \mathbb{R}^{k\times k}$, 则根据伴随算子的定义有

$$\begin{aligned}
\langle \Omega, \mathrm{D}F(x)[Z]\rangle &= \langle \mathrm{D}F(x)^*[\Omega], Z\rangle \\
\mathrm{Tr}(\Omega^\top(X^TAZ + Z^TAX)) &= \mathrm{Tr}(\mathrm{D}F(x)^*[\Omega]^\top Z) \\
\mathrm{Tr}((\Omega + \Omega^\top)X^TAZ) &= \mathrm{Tr}(\mathrm{D}F(x)^*[\Omega]^\top Z) \\
\mathrm{Tr}((AX(\Omega + \Omega^\top))^\top Z) &= \mathrm{Tr}(\mathrm{D}F(x)^*[\Omega]^\top Z)
\end{aligned}$$

由 Z 的任意性，于是 $\mathrm{D}F(x)^*[\Omega] = AX(\Omega + \Omega^\top)$，则 $\forall \Omega \in \mathrm{Sym}(k)$, 有

$$\begin{aligned}
&\langle \Omega, \mathrm{D}F(x)\mathrm{D}F(x)^*[\Omega]\rangle \\
=&\left\langle \Omega, \mathrm{D}F(x)[AX(\Omega + \Omega^\top)]\right\rangle \\
=&\left\langle \Omega, X^\top AAX(\Omega + \Omega^\top) + (\Omega + \Omega^\top)X^\top AAX\right\rangle \\
=&2\left\langle \Omega, X^\top AAX\Omega + \Omega X^\top AAX\right\rangle \\
=&4\|AX\Omega\|_F^2
\end{aligned}$$

根据 AX 是列满秩的，于是可以得到 $\mathrm{D}F(x)\mathrm{D}F(x)^*$ 是限制在 $\mathrm{Sym}(k)$ 上的正定算子。

8.2.2 切空间的形式

$\mathrm{iSt}(k,n)$ 上 X 处的切空间的形式有以下三种表达形式:

$$\begin{aligned}
T_X\mathrm{iSt}(k,n) =&\{Z \in \mathbb{R}^{n\times k} : Z^TAX + X^TAZ = 0\} \\
=&\left\{XW + A^{-1}X_\perp K : JW \in \mathrm{Skew}(k),\ K \in \mathbb{R}^{(n-k)\times k}\right\} \\
=&\{SAX : S \in \mathrm{Skew}(n)\}.
\end{aligned}$$

证明.

- 第一个形式就是根据 $T_X\mathrm{iSt}(k,n)=\ker \mathrm{D}F(X)$ 得到的，也可通过对 $X(t)^TAX(t)=J$ 在 0 处求导来证明。
- 第二个表达形式的证明与 Steifel 流形那里的证明很类似:
因为 $\left[X, A^{-1}X_\perp\right]$ 是一个可逆矩阵, 则 $\forall Z\in\mathbb{R}^{n\times k}$，$\exists\, W\in\mathbb{R}^{k\times k}$ 和 $K\in\mathbb{R}^{(n-k)\times k}$ 使得 $Z=XW+A^{-1}X_\perp K$，因此，

$$\begin{aligned}Z^TAX+X^TAZ&=(W^TX^T+K^TX_\perp^TA^{-1})AX+X^TA(XW+A^{-1}X_\perp K)\\&=W^TJ+JW=(JW)^T+JW.\end{aligned}$$

因此 $Z^TAX+X^TAZ \iff JW\in\mathrm{Skew}(k)$, 于是

$$T_X\mathrm{iSt}(k,n)=\left\{XW+A^{-1}X_\perp K: JW\in\mathrm{Skew}(k),\ K\in\mathbb{R}^{(n-k)\times k}\right\}$$

- 最后一个形式的想法可能是这样的：根据第一个形式，其实我们只要找到一个 Z 使得 $X^\top AZ$ 为反对称矩阵，那可能的形式就是 SAX，其中 $S\in\mathrm{Skew}(n)$. 进一步验证：
  - $\{SAX : S\in\mathrm{Skew}(n)\}$ 是 $T_X\mathrm{iSt}(k,n)$ 的线性子空间，因为 $(SAX)^TAX+X^TA(SAX)=X^TAS^TAX+X^TASAX=0$。
  - 下面只需要说明 $\dim\{SAX : S\in\mathrm{Skew}(n)\}=\dim\mathrm{iSt}(k,n)$. 事实上，令 $S\in\mathrm{Skew}(n)$，记 $P=[AX\ X_\perp]$，则 P 非奇异且 $AX=P\begin{bmatrix}I_k\\0\end{bmatrix}$。于是 $P^TSAX=P^TSP\begin{bmatrix}I_k\\0\end{bmatrix}:=B\begin{bmatrix}I_k\\0\end{bmatrix}$，其中 $B:=P^TSP\in\mathrm{Skew}(n)$. 假设 $B=\begin{bmatrix}B_{11}&-B_{21}^T\\B_{21}&B_{22}\end{bmatrix}$，其中 $B_{11}\in\mathrm{Skew}(k)$，$B_{22}\in\mathrm{Skew}(n-k)$ 且 $B_{21}\in\mathbb{R}^{(n-k)\times k}$。则 $P^TSAX=B\begin{bmatrix}I_k\\0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}B_{11}\\B_{21}\end{bmatrix}$。因此，

$$\begin{aligned}\dim\{SAX : S\in\mathrm{Skew}(n)\}&=\dim\{P^TSAX : S\in\mathrm{Skew}(n)\}\\&=\dim\left\{\begin{bmatrix}B_{11}\\B_{21}\end{bmatrix} : B_{11}\in\mathrm{Skew}(k),\ B_{21}\in\mathbb{R}^{(n-k)\times k}\right\}\\&=\dim\mathrm{Skew}(k)+\dim\mathbb{R}^{(n-k)\times k}\\&=\frac{1}{2}k(k-1)+(n-k)k=nk-\frac{1}{2}k(k+1)\\&=\dim\mathrm{iSt}(k,n).\end{aligned}$$

  这里，第一个等式源于 P 和 P^T 的非奇异性.

8.3 定秩矩阵 (Fixed-rank matrices)

$$\mathbb{R}_r^{m\times n}=\{X\in\mathbb{R}^{m\times n}:\operatorname{rank}(X)=r\},$$

是 $\mathbb{R}^{m\times n}$ 的一个嵌入子流形。

注 8.6 $\mathbb{R}^{m\times n}$ 中秩至多为 r 的矩阵的集合不是 $\mathbb{R}^{m\times n}$ 的嵌入子流形。$\mathbb{R}_r^{m\times n}$ 在 $\mathbb{R}^{m\times n}$ 中既不是开集也不是闭集。

8.3.1 证明嵌入子流形

下面来证明 $\mathbb{R}_r^{m\times n}$ 是 $\mathbb{R}^{m\times n}$ 的一个嵌入子流形.

首先对于一种特殊情况 $r=\min\{m,n\}$ 即满秩，则 $\mathbb{R}_r^{m\times n}$ 为开集，于是为开子流形。

注 8.7 原因如下：

- $r=n$, 则是列满秩集合，定义 $F(H)=\det((X+H)^\top(X+H))$ 这是一个关于 H 的连续函数，且由于 $F(0)=\det(X^\top X)>0$, 于是当 $\|H\|$ 充分小时，$F(H)>0$, 于是 $X+H$ 列满秩。于是 $\mathbb{R}_n^{m\times n}$ 是一个开集。
- $r=m$, 则是行满秩集合，定义 $F(H)=\det((X+H)(X+H)^\top)$ 这是一个关于 H 的连续函数，且由于 $F(0)=\det(XX^\top)>0$, 于是当 $\|H\|$ 充分小时，$F(H)>0$, 于是 $X+H$ 行满秩。于是 $\mathbb{R}_m^{m\times n}$ 是一个开集。

一般情况下，我们考虑 $r<\min\{m,n\}$

对于任意 $X\in\mathbb{R}_r^{m\times n}$，我们现在构造一个局部定义函数。注意不能用 $h(X)=\operatorname{rank}(X)-r$ 作为定义函数，因为它不连续，更不用说光滑了。我们按如下方式进行。由于 X 的秩为 r，它包含一个大小为 $r\times r$ 的可逆子矩阵，即可以提取 X 的 r 列和 r 行，使得得到的 $\mathbb{R}^{r\times r}$ 中的矩阵是可逆的。为了方便，现在先假设前 r 行和前 r 列所构成的子矩阵是可逆的，因此 X 可以写成块形式：

$$X=\begin{bmatrix}X_{11} & X_{12}\\ X_{21} & X_{22}\end{bmatrix}$$

其中 $X_{11}\in\mathbb{R}^{r\times r}$ 是可逆的，且 $X_{12}\in\mathbb{R}^{r\times(n-r)}$，$X_{21}\in\mathbb{R}^{(m-r)\times r}$ 以及 $X_{22}\in\mathbb{R}^{(m-r)\times(n-r)}$。

由于 X 的秩为 r，它的最后 $n-r$ 列必须是其前 r 列的线性组合，也就是说，存在 $W\in\mathbb{R}^{r\times(n-r)}$，使得

$$\begin{bmatrix}X_{12}\\ X_{22}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}X_{11}\\ X_{21}\end{bmatrix}W.$$

因此，$W = X_{11}^{-1}X_{12}$ 且 $X_{22} = X_{21}W = X_{21}X_{11}^{-1}X_{12}$。在我们假设 X_{11} 可逆的情况下，X 的块之间的这种关系对于 X 的秩为 r 是充分必要的。

我们知道在 X 附近存在领域 $\mathcal{U}$, 使得 $\forall\, Y \in \mathcal{U}$, 其 Y_{11} 是可逆的。则

$$Y \in \mathbb{R}_r^{m\times n} \iff \operatorname{rank}(Y) = r \iff \begin{bmatrix} Y_{12} \\ Y_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Y_{11} \\ Y_{21} \end{bmatrix} Y_{11}^{-1}Y_{12} \iff Y_{22} - Y_{21}Y_{111}^{-1}Y_{12} = 0,$$

即 $\mathbb{R}_r^{m\times n} \cap \mathcal{U} = \{Y : Y_{22} - Y_{21}Y_{11}^{-1}Y_{12} = 0\}$, 于是我们定义这样一个局部定义函数，令

$$h : \mathcal{U} \to \mathbb{R}^{(m-r)\times(n-r)} : Y = \begin{bmatrix} Y_{11} & Y_{12} \\ Y_{21} & Y_{22} \end{bmatrix} \mapsto h(Y) = Y_{22} - Y_{21}Y_{11}^{-1}Y_{12},$$

$h^{-1}(0) = \mathbb{R}_r^{m\times n} \cap \mathcal{U}$ 且 h 在 $\mathcal{U}$ 中是光滑的。最后，它在 Y 处的微分是（$V \in \mathbb{R}^{m\times n}$ 具有与 Y 相同的块结构）：

$$\mathrm{D}h(Y)[V] = V_{22} - V_{21}Y_{11}^{-1}Y_{12} + Y_{21}Y_{11}^{-1}V_{11}Y_{11}^{-1}Y_{12} - Y_{21}Y_{11}^{-1}V_{12},$$

注 8.8 这个微分是这样求解的，设 $h_{22}(t) = (Y_{22} + tV_{22}), h_{21}(t) = (Y_{21} + tV_{21}), h_{12}(t) = (Y_{12} + tV_{12}), h_{11}(t) = (Y_{11} + tV_{11})^{-1}$, 则 $h(Y + tV) = h_{22}(t) - h_{21}(t)h_{11}(t)h_{12}(t)$ 于是

$$\begin{aligned} \mathrm{D}h(Y)[V] &= \lim_{t\to 0} \frac{h(Y+tV) - h(Y)}{t} \\ &= h_{22}'(0) - h_{21}'(0)h_{11}(0)h_{12}(0) - h_{21}(0)h_{11}(0)h_{12}'(0) - h_{21}(0)h_{11}'(0)h_{12}(0) \\ &= V_{22} - V_{21}Y_{11}^{-1}Y_{12} - Y_{21}Y_{11}^{-1}V_{12} + Y_{21}Y_{11}^{-1}V_{11}Y_{11}^{-1}Y_{12}. \end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned} h_{11}'(0) &= \lim_{t\to 0} \frac{(Y_{11} + tV_{11})^{-1} - Y_{11}^{-1}}{t} \\ &= \lim_{t\to 0}(Y_{11} + tV_{11})^{-1} \lim_{t\to 0} \frac{I_r - (Y_{11} + tV_{11})Y_{11}^{-1}}{t} \\ &= \lim_{t\to 0}(Y_{11} + tV_{11})^{-1} \lim_{t\to 0} \frac{-tV_{11}Y_{11}^{-1}}{t} \\ &= -\, Y_{11}^{-1}V_{11}Y_{11}^{-1} \end{aligned}$$

当然 $h_{11}'(0)$ 还可以用下面的方式容易得到：

$$\begin{aligned} & h_{11}(t)(Y_{11} + tV_{11}) = I_r \\ \Rightarrow & h_{11}'(0)Y_{11} + h_{11}(0)V_{11} = 0 \\ \Rightarrow & h_{11}'(0)Y_{11} + Y_{11}^{-1}V_{11} = 0 \\ \Rightarrow & h_{11}'(0) = -Y_{11}^{-1}V_{11}Y_{11}^{-1} \end{aligned}$$

注 8.9 需要注意的是，前面我们在定义嵌入子流形时，一般都是在有限维线性空间 $\mathbb{R}^d$ 的背景中，而这里虽然也是有限维线性空间，但是不是 $\mathbb{R}^d$。于是我们定义的局部定义函数的导函数 $\mathrm{D}h(Y)$ 并非是像之前一样的矩阵，而是一个线性算子。不过两个有限维空间之间的线性算子其实等价于一个矩阵。

$\mathrm{D}h(Y)$ 的陪域 (codomain) 是 $\mathbb{R}^{(m-r)\times(n-r)}$。该陪域中的任何矩阵都可以通过某个输入 V 得到（只需考虑将 V_{11}, V_{12}, V_{21} 设为零，这样 $\mathrm{D}h(Y)[V] = V_{22}$）。因此，$h$ 的微分在 $\mathcal{U}$ 内处处是满射的：它是 $\mathbb{R}_r^{m\times n}$ 在 X 附近的一个局部定义函数。如果 X 的大小为 $r\times r$ 的左上角子矩阵不可逆，我们可以使用相同的步骤构造另一个局部定义函数：对每个子矩阵的选择都构造一个, 过程几乎相同，只不过书写起来很麻烦。

上述讨论表明 $\mathbb{R}_r^{m\times n}$ 是 $\mathbb{R}^{m\times n}$ 的一个嵌入子流形，其维数为

$$\begin{aligned}\dim \mathbb{R}_r^{m\times n} &= \dim \mathbb{R}^{m\times n} - \dim \mathbb{R}^{(m-r)\times(n-r)}\\ &= mn - (m-r)(n-r)\\ &= r(m+n-r).\end{aligned}$$

注 8.10 我想是不是可以这样考虑, 如果我已经说明了固定秩矩阵是一个嵌入子流形, 那么怎么思考它的维数呢？要知道子流形的维数只考虑某一个点处的领域与子流形的交的维数，那么对于某个确定的点 A（秩为 r 的矩阵），就存在他的某个满秩的子矩阵 $B\in\mathbb{R}^{m\times r}$，则在 A 附近某个领域处的点对应的子矩阵也是满秩的。我们知道满秩矩阵作为子流形是开的, 则维数为 $m\times r$. 则矩阵其余位置的元素需要确定, 而矩阵秩为 r, 则其他位置构成的向量组（一共 $n-r$ 个 m 维向量，其构成了一个 $m\times(n-r)$ 的矩阵）只需要全部属于满秩矩阵对应向量构成的 r 维线性空间当中，于是维数应该是 $(n-r)\times r$ 个。于是这两部分加起来就是子流形的维数 $m\times r + (n-r)\times r = r(m+n-r)$.

注 8.11 注意，对于给定的秩 r，$\mathbb{R}_r^{m\times n}$ 中的矩阵可以有更便捷的选择，即奇异值分解：

$$X = U\Sigma V^\top, \quad U\in \mathrm{St}(m,r), \quad \Sigma = \begin{bmatrix}\sigma_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_r\end{bmatrix}, \quad V\in\mathrm{St}(n,r),$$

其中 $\sigma_1 \geq \cdots \geq \sigma_r > 0$ 是 X 的奇异值。为了唯一确定 X，只需在内存中存储 U,Σ,V。

8.3.2 切空间的形式

$\mathbb{R}_r^{m\times n}$ 在 X 处的切空间由 $\mathrm{D}h(X)$ 的核给出，其中 h 是如上构造的局部定义函数。但是这要求人们确定 X 的一个可逆子矩阵的位置。我们可以回到切空间的定义，我们通过在 $\mathbb{R}_r^{m\times n}$ 上显式构造光滑曲线来实现这一点。

给定如上的 $X = U\Sigma V^\top$，设

- 设 $U(t)$ 是 $\mathrm{St}(m,r)$ 上的一条光滑曲线，满足 $U(0)=U$；
- 设 $V(t)$ 是 $\mathrm{St}(n,r)$ 上的一条光滑曲线，满足 $V(0)=V$；
- 设 $\Sigma(t)$ 是 $r\times r$ 阶可逆矩阵集合（即 $\mathbb{R}_r^{r\times r}$, 是 $\mathbb{R}^{r\times r}$ 的一个开子流形）中的一条光滑曲线，满足 $\Sigma(0)=\Sigma$。

那么，$c(t)=U(t)\Sigma(t)V(t)^\top$ 是 $\mathbb{R}_r^{m\times n}$ 上的一条光滑曲线，且 $c(0)=X$。

注 8.12 这里虽然设设 $\Sigma(t)$ 是 $r\times r$ 阶可逆矩阵集合（这是 $\mathbb{R}^{r\times r}$ 的一个开子流形）中的一条光滑曲线，但是可以继续对 $\Sigma(t)$ 进行 SVD 分解，于是得到 $c(t)\in\mathbb{R}_r^{m\times n}$.

因此，X 处的一个切向量：

$$c'(0)=U'(0)\Sigma V^\top+U\Sigma'(0)V^\top+U\Sigma V'(0)^\top\in \mathrm{T}_X\mathbb{R}_r^{m\times n}.$$

而

- 对于任意 $\Omega\in\mathrm{Skew}(r)$ 和 $B\in\mathbb{R}^{(m-r)\times r}$，我们可以安排 $U(t)\in\mathrm{St}(m,r)$ 使得

$$U'(0)=U\Omega+U_\perp B,$$

  其中 $U_\perp$ 满足 $[U\ U_\perp]$ 是正交的。
- 对于任意 $\Omega'\in\mathrm{Skew}(r)$ 和 $C\in\mathbb{R}^{(n-r)\times r}$，我们可以安排 $V(t)\in\mathrm{St}(m,r)$ 使得

$$V'(0)=V\Omega'+V_\perp C,$$

  其中 $V_\perp$ 满足 $[V\ V_\perp]$ 是正交的。
- 由于 $\Sigma(t)$ 是 $\mathbb{R}^{r\times r}$ 的一个开子流形中的光滑曲线，我们可以安排 $\Sigma(t)$ 使得 $\Sigma'(0)$ 为任意矩阵 $A\in\mathbb{R}^{r\times r}$。

综上以下所有速度都在 $\mathbb{R}_r^{m\times n}$ 在 X 处的切空间中：

$$\begin{aligned}c'(0)&=(U\Omega+U_\perp B)\Sigma V^\top+UAV^\top+U\Sigma(V\Omega'+V_\perp C)^\top\\&=U(\Omega\Sigma+A+\Sigma\Omega')V^\top+U_\perp B\Sigma V^\top+U(V_\perp C\Sigma^\top)^\top.\end{aligned}$$

由于 Σ 是可逆的，则形如

$$UMV^\top+U_pV^\top+UV_p^\top$$

的矩阵在 X 处都是切向量。(其中 $M\in\mathbb{R}^{r\times r}$ 是任意的，且 $U_p\in\mathbb{R}^{m\times r}$、$V_p\in\mathbb{R}^{n\times r}$ 满足 $U^\top U_p=V^\top V_p=0$) 对 U_p 和 V_p 的条件相当于 $2r^2$ 个线性约束，因此我们找到了 $T_X\mathbb{R}_r^{m\times n}$ 的一个线性子空间，其维数为 $r^2+mr+nr-2r^2=r(m+n-r)$。

于是切空间为：

$$T_X\mathbb{R}_r^{m\times n}=\{UMV^\top+U_pV^\top+UV_p^\top : M\in\mathbb{R}^{r\times r},U_p\in\mathbb{R}^{m\times r},V_p\in\mathbb{R}^{n\times r},且U^\top U_p=0,V^\top V_p=0\}.$$

注 8.13 切空间也可以按如下方式书写：

$$T_X\mathbb{R}_r^{m\times n}=\left\{\begin{bmatrix}U & U_\perp\end{bmatrix}\begin{bmatrix}A & B\\ C & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}V & V_\perp\end{bmatrix}^\top : A\in\mathbb{R}^{r\times r}, B\in\mathbb{R}^{r\times(n-r)}, C\in\mathbb{R}^{(m-r)\times r}\right\}.$$

这更明确地揭示了切空间的维数。

8.3.3 回缩算子

首先为 $\mathbb{R}^{m\times n}$ 赋予欧几里得度量：标准内积 $\langle U,V\rangle=\mathrm{Tr}(U^\top V)$，以及由它诱导的范数 $\|U\|=\sqrt{\langle U,U\rangle}$。构造收缩如下：

$$\mathrm{R}_X(H)=\mathrm{argmin}_{Y\in\mathbb{R}_r^{m\times n}}\|X+H-Y\|^2.$$

其中 $H\in T_X\mathbb{R}_r^{m\times n}$.

根据著名的 Eckart-Young-Mirsky 定理，当这个优化问题存在解时，其解由 $X+H$ 的截断到秩 r 的奇异值分解给出。

定理 8.1 (埃卡特-杨-米尔斯基 (ckart-Young-Mirsky) 定理) 设 $A\in\mathbb{C}^{m\times n}$ 是秩为 k 的矩阵，其奇异值分解（SVD）为 $A=U\Sigma V^H=\sum_{i=1}^r\sigma_i u_i v_i^H$，其中 $\sigma_1\geq\sigma_2\geq\cdots\geq\sigma_k>0$ 是 A 的正奇异值，$u_i\in\mathbb{C}^m$、$v_i\in\mathbb{C}^n$ 分别为左、右奇异向量。若 B 是任意秩不超过 r ($0\leq r<k$) 的矩阵（即 $B\in\mathbb{C}_r^{m\times n}$)，定义 A 的秩 r 截断奇异值分解为 $A_r=\sum_{i=1}^r\sigma_i u_i v_i^H$，则：

$$\min_{B\in\mathbb{C}_r^{m\times n}}\|A-B\|=\|A-A_r\|.$$

根据上述讨论，$X+H$ 可以如下表示

$$X+H=U(\Sigma+M)V^\top+U_pV^\top+UV_p^\top=\begin{bmatrix}U & U_p\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\Sigma+M & I_r\\ I_r & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}V & V_p\end{bmatrix}^\top.$$

于是 $X+H$ 的秩至多为 $2r$。如果直接用 SVD 分解则需要 $\mathcal{O}(mnr)$ 的计算量，而一般来说 m,n 要远大于 r. 可以按照下面的方法减少计算量：

$$\begin{aligned}X+H=&\begin{bmatrix}U & U_p\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\Sigma+M & I_r\\ I_r & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}V & V_p\end{bmatrix}^\top\\ =&Q_UR_U\begin{bmatrix}\Sigma+M & I_r\\ I_r & 0\end{bmatrix}R_V^\top Q_V^\top\\ =&Q_UU_1\Sigma_1V_1^\top Q_V^\top\\ \approx&Q_U\tilde{U}_1\tilde{\Sigma}_1\tilde{V}_1^\top Q_V^\top\\ =&(Q_U\tilde{U})\tilde{\Sigma}(Q_V\tilde{V})^\top\end{aligned}$$

其中

- 第二个等号是对左右两个矩阵做 QR 分解，$Q_U \in \mathrm{St}(m, 2r)$，$Q_V \in \mathrm{St}(n, 2r)$，且 $R_U, R_V \in \mathbb{R}^{2r\times 2r}$ 为上三角矩阵（假设 $2r \le m, n$；否则见注 8.14），**这一步使用施密特正交化需要** $8(m+n)r$ **的计算量**;
- 第三个等号是对 $R_U \begin{bmatrix} \Sigma + M & I_r \\ I_r & 0 \end{bmatrix} R_V^\top$ 做 SVD 分解，且奇异值按从大到小排列，**需要** r^3 **的计算量**;
- 最后一步将上述 SVD 分解截断到 r, **需要** $4(m+n)r$ **的计算量**。

于是

$$\mathrm{R}_X(H) = (Q_U\tilde{U})\tilde{\Sigma}(Q_V\tilde{V})^\top.$$

注 8.14 在上述讨论中，有几点需要特别说明:

- 根据 ckart-Young-Mirsky 定理, 如果想对 $X+H$ 做秩 r 截断, 则需要 $\mathrm{rank}(X+H) \ge r$, 这一点其实不一定保证，于是在使用这个收缩算子的时候需要格外小心；
- 不过由于，$\forall H \in T_X\mathbb{R}_r^{m\times n}$, 对于充分小的 $t > 0$, 有 $\mathrm{rank}(X+tH) \ge r$ 于是可以用上述方式得到收缩算子。
- 在实际计算中, 确实需要通过回溯的方式得到一个合适的步长, 使得 $\mathrm{rank}(X+tH) \ge r$，而每一步都要知道他的秩，这时候用上述方式可以有效的节约计算成本。
- $\mathbb{R}_r^{m\times n}$ 并非凸集, 因此, 这个回缩算子不一定有唯一解, 例如矩阵的第 r 个与第 $r+1$ 个奇异值均为正数且相等时;
- 上面的讨论中，如果 $2r > m$ 或 n，怎么办？比如说 $2r > m$ 则只需要让 $Q_U \in \mathrm{St}(m, m)$,$R_U \in \mathbb{R}^{m\times 2r}$ 为上三角矩阵, 最后的截断部分 $\tilde{U} \in \mathrm{St}(m, r)$.

容易验证 $\mathrm{R}_X(0) = X$，且根据文献 [Projection-like Retractions on Matrix Manifolds,SIAM,2012] 的 Lem4 可知 $\mathrm{DR}_X(0) = Id$.

8.3.4 计算黎曼梯度

下面我们想来计算黎曼梯度，根据定理 4.3，我们先考虑 $\mathbb{R}_r^{m\times n}$ 的正交投影算子。

综上，$X = U\Sigma V^\top$ 的切空间有两种形式：

$$T_X\mathbb{R}_r^{m\times n} = \{UMV^\top + U_pV^\top + UV_p^\top : M \in \mathbb{R}^{r\times r}, U_p \in \mathbb{R}^{m\times r}, V_p \in \mathbb{R}^{n\times r}, \text{且} U^\top U_p = 0, V^\top V_p = 0\}.$$

$$T_X\mathbb{R}_r^{m\times n} = \left\{ \begin{bmatrix} U & U_\perp \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A & B \\ C & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V & V_\perp \end{bmatrix}^\top : A \in \mathbb{R}^{r\times r}, B \in \mathbb{R}^{r\times(m-r)}, C \in \mathbb{R}^{(n-r)\times r} \right\}.$$

则可以验证在 $X = U\Sigma V^\top$ 处的法空间为：

$$\mathrm{N}_X\mathbb{R}_r^{m\times n} = \left\{ U_\perp W V_\perp^\top : W \in \mathbb{R}^{(m-r)\times(n-r)} \right\}.$$

于是 $Z\in\mathbb{R}^{m\times n}$ 到 $T_X\mathbb{R}_r^{m\times n}$ 的正交投影满足：存在某个 W，使得

$$Z=\mathrm{Proj}_X(Z)+U_\perp W V_\perp^\top,$$

我们分两种方式推导正交投影算子，其实这两种方式殊途同归，不过第二种方法是我的想法，感觉更加直观。

(1) 我们使用**切空间的第一种形式**，即存在满足 $U^\top U_p=V^\top V_p=0$ 的 M,U_p,V_p，使得

$$\mathrm{Proj}_X(Z)=UMV^\top+U_pV^\top+UV_p^\top,$$

则

$$Z=UMV^\top+U_pV^\top+UV_p^\top+U_\perp WV_\perp^\top.$$

定义 $P_U=UU^\top$，$P_V=VV^\top$，$P_U^\perp=I_m-P_U$ 以及 $P_V^\perp=I_n-P_V$，于是

$$P_UZP_V=UMV^\top,\quad P_U^\perp ZP_V=U_pV^\top,\quad \text{且}\quad P_UZP_V^\perp=UV_p^\top.$$

因此，

$$\begin{aligned}\mathrm{Proj}_X(Z)&=P_UZP_V+P_U^\perp ZP_V+P_UZP_V^\perp\\&=U(U^\top ZV)V^\top+(I_m-UU^\top)ZVV^\top+UU^\top Z(I_n-VV^\top).\end{aligned}$$

这是 X 处的切向量，其中 $M=U^\top ZV,\quad U_p=ZV-UM,$ 且$V_p=Z^\top U-VM^\top.$

(2) 我们使用**切空间的第二种形式**，即 $\exists A\in\mathbb{R}^{r\times r},B\in\mathbb{R}^{r\times(m-r)},C\in\mathbb{R}^{(n-r)\times r}$, 使得

$$\mathrm{Proj}_X(Z)=\begin{bmatrix}U & U_\perp\end{bmatrix}\begin{bmatrix}A & B\\ C & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}V & V_\perp\end{bmatrix}^\top,$$

则

$$\begin{aligned}Z&=\begin{bmatrix}U & U_\perp\end{bmatrix}\begin{bmatrix}A & B\\ C & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}V & V_\perp\end{bmatrix}^\top+\begin{bmatrix}U & U_\perp\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0 & 0\\ 0 & W\end{bmatrix}\begin{bmatrix}V & V_\perp\end{bmatrix}^\top\\&=\begin{bmatrix}U & U_\perp\end{bmatrix}\begin{bmatrix}A & B\\ C & W\end{bmatrix}\begin{bmatrix}V & V_\perp\end{bmatrix}^\top\end{aligned}$$

我们的目的是想要得到 $\mathrm{Proj}_X(Z)$，那其实只需要 A,B,C 即可，于是有

$$\begin{bmatrix}U & U_\perp\end{bmatrix}^\top Z\begin{bmatrix}V & V_\perp\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}A & B\\ C & W\end{bmatrix}$$

- 想得到 A, 只要：

$$U^\top ZV=\begin{bmatrix}I_r & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}U & U_\perp\end{bmatrix}^\top Z\begin{bmatrix}V & V_\perp\end{bmatrix}\begin{bmatrix}I_r\\ 0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}I_r & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}A & B\\ C & W\end{bmatrix}\begin{bmatrix}I_r\\ 0\end{bmatrix}=A,$$

- 想得到 B, 只要：

$$U^\top Z V_\perp = \begin{bmatrix} I_r & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U & U_\perp \end{bmatrix}^\top Z \begin{bmatrix} V & V_\perp \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ I_{n-r} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A & B \\ C & W \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ I_{n-r} \end{bmatrix} = B,$$

- 想得到 C, 只要：

$$U_\perp^\top Z V = \begin{bmatrix} 0 & I_{m-r} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U & U_\perp \end{bmatrix}^\top Z \begin{bmatrix} V & V_\perp \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_r \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & I_{m-r} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A & B \\ C & W \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_r \\ 0 \end{bmatrix} = C,$$

- 想得到 W, 只要：

$$U_\perp^\top Z V_\perp = \begin{bmatrix} 0 & I_{m-r} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U & U_\perp \end{bmatrix}^\top Z \begin{bmatrix} V & V_\perp \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ I_{n-r} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & I_{m-r} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A & B \\ C & W \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ I_{n-r} \end{bmatrix} = W,$$

于是

$$\begin{aligned} \mathrm{Proj}_X(Z) &= \begin{bmatrix} U & U_\perp \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A & B \\ C & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V & V_\perp \end{bmatrix}^\top \\ &= UAV^\top + UBV_\perp^\top + U_\perp C V^\top \\ &= UU^\top Z V V^\top + UU^\top Z V_\perp V_\perp^\top + U_\perp U_\perp^\top Z V V^\top \\ &= P_U Z P_V + P_U Z P_V^\perp + P_U^\perp Z P_V, \end{aligned}$$

其中，$P_U = UU^\top$，$P_V = VV^\top$，$P_U^\perp = I_m - P_U$，$P_V^\perp = I_n - P_V$. 还有一种表达方式是先得到法空间的投影，再用 Z 减去这个投影，法空间的投影为

$$U_\perp W V_\perp^\top = U_\perp U_\perp^\top Z V_\perp V_\perp^\top = P_U^\perp Z P_V^\perp$$

于是

$$\mathrm{Proj}_X(Z) = Z - P_U^\perp Z P_V^\perp.$$

综上，对于光滑函数 $f : \mathbb{R}_r^{m\times n} \to \mathbb{R}$，若其有光滑延拓 $\bar{f}$ 到 $\mathbb{R}^{m\times n}$ 中 $\mathbb{R}_r^{m\times n}$ 的一个邻域，根据定理 4.3，f 的黎曼梯度为：

$$\begin{aligned} \mathrm{grad} f(X) &= \mathrm{Proj}_X(\mathrm{grad} \bar{f}(X)) \\ &= P_U \mathrm{grad} \bar{f}(X) P_V + P_U \mathrm{grad} \bar{f}(X) P_V^\perp + P_U^\perp \mathrm{grad} \bar{f}(X) P_V \\ &= \mathrm{grad} \bar{f}(X) - P_U^\perp \mathrm{grad} \bar{f}(X) P_V^\perp \end{aligned}$$

其中，$P_U = UU^\top$，$P_V = VV^\top$，$P_U^\perp = I_m - P_U$，$P_V^\perp = I_n - P_V$.

8.4 其他特殊流形

8.4.1 例子 1

$$\mathcal{M} = \{U \in \mathbb{R}^{m\times n} \mid U^\top U\mathbf{1}_m = \mathbf{1}_m, \mathrm{Tr}(UU^\top) = k\}$$

也是一个嵌入子流形，事实上我们可以将约束写成如下的形式：

$$\begin{aligned}
\mathcal{M} &= \{U \in \mathbb{R}^{m\times n} \mid U^\top U\mathbf{1}_m = \mathbf{1}_m, \mathrm{Tr}(UU^\top) = k\} \\
&= \{U \in \mathbb{R}^{m\times n} \mid e_i U^\top U\mathbf{1}_m = 1\ (i = 1,\dots,m),\ \mathrm{Tr}(UU^\top) = k\} \\
&= \{U \in \mathbb{R}^{m\times n} \mid \mathrm{Tr}(e_i U^\top U\mathbf{1}_m) = 1\ (i = 1,\dots,m),\ \mathrm{Tr}(UU^\top) = k\} \\
&= \{U \in \mathbb{R}^{m\times n} \mid \mathrm{Tr}(\mathbf{1}_m^\top e_i U^\top U) = 1\ (i = 1,\dots,m),\ \mathrm{Tr}(I_m UU^\top) = k\} \\
&= \{U \in \mathbb{R}^{m\times n} \mid \mathrm{Tr}(e_i^\top \mathbf{1}_m U^\top U) = 1\ (i = 1,\dots,m),\ \mathrm{Tr}(I_m UU^\top) = k\} \\
&= \{U \in \mathbb{R}^{m\times n} \mid \mathrm{Tr}((e_i^\top \mathbf{1}_m + \mathbf{1}_m^\top e_i)U^\top U) = 1\ (i = 1,\dots,m),\ \mathrm{Tr}(I_m UU^\top) = k\} \\
&= \{U \in \mathbb{R}^{m\times n} \mid \left\langle (e_i^\top \mathbf{1}_m + \mathbf{1}_m^\top e_i), U^\top U\right\rangle = 1\ (i = 1,\dots,m),\ \left\langle I_m, UU^\top\right\rangle = k\}
\end{aligned}$$

令 $A_0 = I_m, A_i = e_i^\top \mathbf{1}_m + \mathbf{1}_m^\top e_i (i = 1,\dots,m)$, 于是 A_i 均为对称矩阵.

对于 $\forall\, U \in \mathcal{M}$, 可以构造局部定义函数 h, 则 $\mathcal{M} = \{U \in \mathbb{R}^{m\times n} \mid h(U) = 0\}$

$$\begin{aligned}
h : \mathbb{R}^{m\times n} &\to \mathbb{R}^{m+1} \\
Y &\to \left(\left\langle A_0, YY^\top\right\rangle - k, \left\langle A_1, YY^\top\right\rangle - 1, \dots, \left\langle A_m, YY^\top\right\rangle - 1\right)\top,
\end{aligned}$$

显然 h 光滑，且由于

$$\begin{aligned}
\mathrm{D}h(U)[V]_i &= \lim_{t\to 0} \frac{\left\langle A_i, (U+tV)(U+tV)^\top\right\rangle - \left\langle A_i, UU^\top\right\rangle}{t} \\
&= \left\langle A_i, VU^\top + UV^\top\right\rangle \\
&= \mathrm{Tr}(A_i^\top VU^\top) + \mathrm{Tr}(A_i^\top UV^\top) \\
&= \mathrm{Tr}(A_i UV^\top) + \mathrm{Tr}(A_i UV^\top) \\
&= 2\mathrm{Tr}(A_i UV^\top) = 2\left\langle A_i U, V\right\rangle
\end{aligned}$$

其中第四个等号使用了 A_i 是对称矩阵，这也是为什么我们在写等价约束形式的时候，要将原来的约束写成 $\left\langle (e_i^\top 1_m + 1_m^\top e_i), U^\top U\right\rangle = 1$. 于是

$$\mathrm{D}h(U)[V] = 2\begin{bmatrix} \langle A_0 U, V\rangle \\ \langle A_1 U, V\rangle \\ \cdots \\ \langle A_m U, V\rangle \end{bmatrix}$$

则

$$\begin{aligned}
\mathrm{rank}(\mathrm{D}A(U)) &= m\times n - \dim(\ker(\mathrm{D}A(U))) \\
&= mn - \dim(\mathrm{span}\{A_0U, A_1U, \dots, A_mU\}^\perp) \\
&= \mathrm{rank}\{A_0U, A_1U, \dots, A_mU\}
\end{aligned}$$

而可证 $A_0U, A_1U, \ldots, A_mU$ 线性无关，则 $\operatorname{rank}(\mathrm{D}A(U)) = m+1$.

于是根据上述讨论 h 构成了局部定义函数，于是 $\mathcal{M}$ 是 $\mathbb{R}^{m\times n}$ 的嵌入子流形，且 $\dim\mathcal{M} = m+1$.

注 8.15 $A_0U, A_1U, \ldots, A_mU$ 线性无关的证明：

$$\begin{aligned}
\left\|\sum y_iA_iU\right\|_F^2 &= \|(\mathbf{1}_my^\top + y\mathbf{1}_m^\top + y_0I)U\|_F^2 \\
&= \|(\mathbf{1}_my^\top + y\mathbf{1}_m^\top)U\|_F^2 + 2\langle(\mathbf{1}_my^\top + y\mathbf{1}_m^\top)U, y_0U\rangle + y_0^2\|U\|_F^2 \\
&= [ny^\top(I+UU^\top)y + 2(\mathbf{1}_m^\top y)^2] + 4y_0(\mathbf{1}_m^\top y) + y_0^2K \\
&\geq [2(\mathbf{1}_m^\top y)^2 + 4y_0(\mathbf{1}_m^\top y) + y_0^2] + n\|y\|^2 + (K-1)y_0^2 \\
&= (2\mathbf{1}_m^\top y + y_0)^2 + n\|y\|^2 + (K-1)y_0^2 \\
&\geq \|y\|^2 + y_0^2,
\end{aligned}$$

第三行是因为 $\langle(\mathbf{1}_my^\top + y\mathbf{1}_m^\top)U, U\rangle = 2\langle y, UU^\top\mathbf{1}_m\rangle = 2(y^\top\mathbf{1}_m)$ 且

$$\begin{aligned}
\|(\mathbf{1}_my^\top + y\mathbf{1}_m^\top)U\|_F^2 &= \operatorname{tr}[(\mathbf{1}_my^\top + y\mathbf{1}_m^\top)UU^\top(\mathbf{1}_my^\top + y\mathbf{1}_m^\top)] \\
&= \operatorname{tr}[\mathbf{1}_my^\top UU^\top y\mathbf{1}_m^\top + y\mathbf{1}_m^\top UU^\top\mathbf{1}_my^\top + 2\cdot\mathbf{1}_my^\top UU^\top\mathbf{1}_my^\top] \\
&= \operatorname{tr}[\mathbf{1}_my^\top UU^\top y\mathbf{1}_m^\top + y\mathbf{1}_m^\top\mathbf{1}_my^\top + 2\cdot\mathbf{1}_my^\top\mathbf{1}_my^\top] \\
&= ny^\top UUy + ny^\top y + 2(\mathbf{1}_m^\top y)^2.
\end{aligned}$$

因此 $\sum y_iA_iU = 0 \iff y_i = 0\ (i = 0, 1, \ldots, m)$, 于是 $A_0U, A_1U, \ldots, A_mU$ 线性无关。