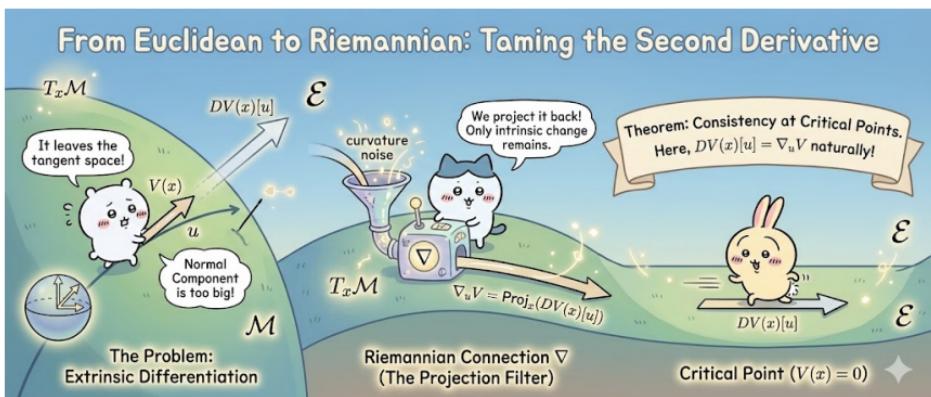


## 流形上向量场微分的动机

## 线性空间中的向量场微分

### 联络的定义

### 临界点处的联络一致性



## 1 流形上向量场微分的动机

我们已经学习了流形上光滑函数的一阶导数概念——黎曼梯度，并了解了如何利用它分析优化问题并设计一阶算法。然而，为了引入二阶优化算法（如黎曼牛顿法），我们需要对梯度向量场  $\text{grad } f$  再次求导。

假设  $Z$  是流形  $\mathcal{M}$  上的一个光滑向量场（例如  $\text{grad } f$ ）。在每一点  $x \in \mathcal{M}$ ，沿方向  $v \in T_x \mathcal{M}$  计算  $Z$  的微分：

$$DZ(x)[v] = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{Z(x + tv) - Z(x)}{t}.$$

这里存在一个关键问题：对于任意  $t > 0$ ，向量  $Z(x + tv) \in T_{x+tv}\mathcal{M}$  与  $Z(x) \in T_x\mathcal{M}$  分属于不同的切空间。在纯粹的流形框

架下，我们无法直接对它们进行减法运算。但若流形  $\mathcal{M}$  嵌入在线性空间  $\mathcal{E}$  中，我们可以将其视为  $\mathcal{E}$  中的向量进行计算。即便如此，该极限结果  $DZ(x)[v]$  通常不再属于  $x$  点的切空间  $T_x\mathcal{M}$ 。

### 例子 1: 球面上的二次型

考虑单位球面  $S^{d-1} \subset \mathbb{R}^d$ ，赋予其标准内积  $\langle u, v \rangle = u^\top v$ 。设  $A$  为  $d$  阶对称阵，定义函数  $f(x) = \frac{1}{2}x^\top Ax$ 。该函数的黎曼梯度为

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

通过光滑延拓  $\bar{V}(x) = Ax - (x^\top Ax)x$  到  $\mathbb{R}^d$ ，对于切向量  $u \in T_x S^{d-1}$ ，计算其微分可得

$$\begin{aligned} DV(x)[u] &= Au - (x^\top Ax)u - (u^\top Ax + x^\top Au)x \\ &= \text{Proj}_x(Au) - (x^\top Ax)u - (u^\top Ax)x, \end{aligned}$$

其中  $\text{Proj}_x(v) = v - (x^\top v)x$  是从  $\mathbb{R}^d$  到  $T_x S^{d-1}$  的正交投影。显然  $DV(x)[u]$  并不总是属于切空间  $T_x S^{d-1}$ ，因为当  $u^\top Ax \neq 0$  时，最后一项  $-(u^\top Ax)x \notin T_x S^{d-1}$ 。

这一现象的本质在于外在空间中的向量场微分，同时耦合了两部分的信息：

- **向量场在流形上的变化(切向分量):**  $\text{Proj}_x(Au) - (x^\top Ax)u$
- **流形本身的弯曲(法向分量):**  $-(u^\top Ax)x$

因此，我们需要对向量场定义一种新的导数（联络），能够过滤掉由外在空间引起的法向分量，从而只保留在流形表面上观测到的内在变化。

## 2 线性空间中向量场微分

为了更好地理解流形的情况，先回顾线性空间  $\mathcal{E}$ 。在线性空间中，每一点  $x$  的切空间  $T_x\mathcal{E}$  都与  $\mathcal{E}$  自身重合（即  $T_x\mathcal{E} \cong \mathcal{E}$ ）。

这带来了一个极大的便利：我们可以将定义在不同点  $x, y$  处的向量  $Z(x)$  和  $Z(y)$  直接相减。如果我们取  $\mathcal{E}$  的一组固定基底  $\{e_1, \dots, e_n\}$ ，向量场可以写成

$$Z(x) = \sum Z_i(x)e_i.$$

其导数只需对分量求导：

$$DZ(x)[v] = \sum (DZ_i(x)[v])e_i.$$

之所以成立，是因为基底  $\{e_i\}$  在整个空间中是不变的。但在流形上，不存在这种全局且始终保持切向的固定基底。切空间  $T_x\mathcal{M}$  随着  $x$  的移动而在  $\mathcal{E}$  中发生旋转。

## 3 联络的定义

为了在不依赖外在空间坐标系的情况下定义导数，数学上引入了**联络 (Connection)** 的概念。我们首先给出联络的抽象公理化定义，它规定了一个算子若要被称为“导数”必须满足的代数性质。我们用  $\mathfrak{X}(\mathcal{M})$  表示  $\mathcal{M}$  上的所有光滑向量场。

### 定义 2: 联络 (Connection) 的公理化定义

一个流形  $\mathcal{M}$  上的**联络**是一个算子

$$\nabla : T\mathcal{M} \times \mathfrak{X}(\mathcal{M}) \rightarrow T\mathcal{M}, \quad (u, V) \mapsto \nabla_u V$$

使得  $\nabla_u V \in T_x\mathcal{M}$  对于所有  $u \in T_x\mathcal{M}$  均成立，并且对于任意的  $U, V, W \in \mathfrak{X}(\mathcal{M})$ ,  $u, w \in T_x\mathcal{M}$ ,  $a, b \in \mathbb{R}$  以及光滑函数  $f \in C^\infty(\mathcal{M})$ ，满足以下四个性质：

- 光滑性:** 定义  $(\nabla_u V)(x) := \nabla_{u(x)} V$  那么  $\nabla_u V \in \mathfrak{X}(\mathcal{M})$ .
- 对  $u$  的线性:**  $\nabla_{au+bw} V = a\nabla_u V + b\nabla_w V$ 。
- 对  $V$  的线性:**  $\nabla_u(aV + bW) = a\nabla_u V + b\nabla_u W$ 。
- 莱布尼茨法则:**  $\nabla_u(fV) = Df(x)[u]V(x) + f(x)\nabla_u V$ 。

对于嵌入在欧几里得空间  $\mathcal{E}$  中的流形，我们可以通过“投影”的方式构造一个自然的联络。下面的命题证明了这种构造的合法性。

### 命题 3: 嵌入子流形上的黎曼联络

对于嵌入子流形  $\mathcal{M} \subset \mathcal{E}$ ，定义算子  $\nabla$  如下：对于  $x \in \mathcal{M}$ ,  $u \in T_x \mathcal{M}$  和光滑向量场  $V \in \mathfrak{X}(\mathcal{M})$ ，有

$$\nabla_u V = \text{Proj}_x(DV(x)[u]), \quad (1)$$

其中  $\text{Proj}_x : \mathcal{E} \rightarrow T_x \mathcal{M}$  是正交投影算子。则该算子  $\nabla$  满足联络的所有公理。

证明. 显然  $\nabla_u V \in T_x \mathcal{M}$  对于所有  $u \in T_x \mathcal{M}$  均成立。光滑性也是显然。我们验证线性性质与莱布尼茨法则：

- 对  $u$  的线性:** 由于微分算子  $DV(x)[\cdot]$  和投影算子  $\text{Proj}_x$  都是线性的，故性质 2 成立。
- 对  $V$  的线性:** 由于  $D(aV + bW) = aDV + bDW$  且投影算子是线性的，故性质 3 成立。

- 莱布尼茨法则：根据乘积导数法则，有

$$D(fV)(x)[u] = Df(x)[u]V(x) + f(x)DV(x)[u].$$

对等式两边作用投影算子  $\text{Proj}_x$ ：

$$\nabla_u(fV) = \text{Proj}_x(Df(x)[u]V(x)) + \text{Proj}_x(f(x)DV(x)[u]).$$

由于  $V(x) \in T_x\mathcal{M}$ , 正交投影不改变切向量, 即  $\text{Proj}_x(V(x)) = V(x)$ , 同时  $f(x)$  是标量, 可以移出投影算子:

$$\begin{aligned}\nabla_u(fV) &= Df(x)[u]V(x) + f(x)\text{Proj}_x(DV(x)[u]) \\ &= Df(x)[u]V(x) + f(x)\nabla_u V.\end{aligned}$$

因此公式(1)定义了一个联络。 □

## 4 临界点处的联络一致性

以下定理告诉我们, 虽然流形整体是弯曲的, 但在梯度为零的点处, 局部的二阶特性表现得如同平坦的欧几里得空间一样友好且一致。

### 定理 4: 临界点处的联络一致性

设  $\mathcal{M}$  为带有任意联络  $\nabla$  的流形。给定光滑向量场  $V \in \mathfrak{X}(\mathcal{M})$ , 若在某点  $x \in \mathcal{M}$  满足  $V(x) = 0$ , 则对于任意  $u \in T_x\mathcal{M}$ :

$$\nabla_u V = DV(x)[u]$$

这意味着外在微分  $DV(x)[u]$  自动落在切空间  $T_x\mathcal{M}$  内。

证明需要用到局部框架, 这里我们跳过, 想要了解证明的可以参考书上给出的, 现在我们主要来理解这个定理的用处。

以球面上的二次型为例，注意到在例子 1 中，我们计算得到  $V(x) = Ax - (x^\top Ax)x$ . 对于任何切向量  $u \in T_x S^{d-1}$ ，由于  $u^\top x = 0$ ，我们有：

$$u^\top V(x) = u^\top Ax - (x^\top Ax)(u^\top x) = u^\top Ax.$$

所以法向分量  $-(u^\top Ax)x$  可以写为  $-(u^\top V(x))x$ 。因此得到：

$$DV(x)[u] = \underbrace{\text{Proj}_x(Au) - (x^\top Ax)u}_{\text{切向部分}} - \underbrace{(u^\top V(x))x}_{\text{法向部分}}$$

当  $x$  是临界点时， $V(x) = 0$  导致法向分量直接归零。此时，普通的欧几里得导数本身就是切向量。

### 注解 5: 临界点处 Hessian 的唯一性

在黎曼优化中，定义 Hessian 通常依赖于联络的选择。

- 在非临界点，不同的联络  $\nabla$  会给出不同的二阶导数结果。
- 但在临界点 ( $\text{grad } f(x) = 0$ )，命题 4 保证了所有联络给出的 Hessian 矩阵是完全相同的。

这意味着在收敛点附近，二阶分析（判定极小值、极大值或鞍点）是鲁棒的，不依赖于具体的几何工具选择。

## 参考文献

[Bou23] Nicolas Boumal. *An introduction to optimization on smooth manifolds*. Cambridge University Press, 2023.