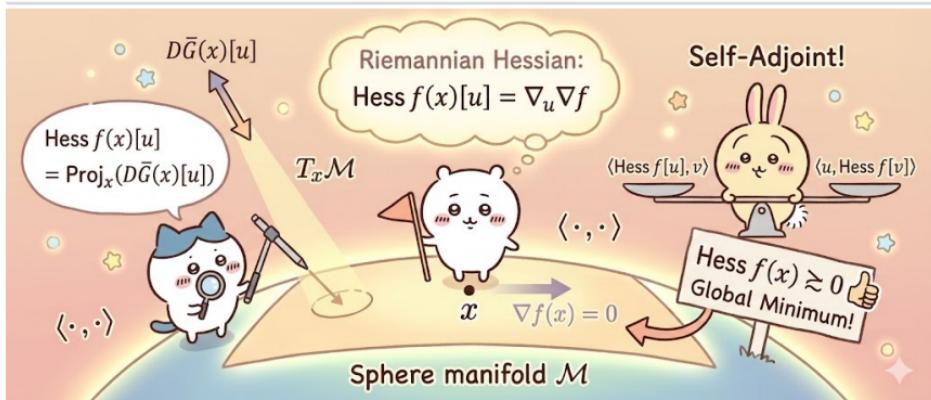


黎曼 Hessian 的定义

例子：球面上的二次型



1 黎曼 Hessian 的定义

在欧几里得空间优化中，Hessian 矩阵（二阶导数）对于分析临界点的性质（极大值, 极小值或鞍点）以及构造牛顿法等二阶优化算法至关重要。现在我们可以利用利用黎曼联络 ∇ 来定义一种流形上的二阶导数的概念，之后会学习用它来设计流形上的二阶优化算法。

定义 1: 黎曼 Hessian

设 $f : \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R}$ 是黎曼流形 \mathcal{M} 上的光滑函数， ∇ 是其黎曼联络。函数 f 在点 $x \in \mathcal{M}$ 处的黎曼 Hessian 是一个线性映射 $\text{Hess } f(x) : T_x \mathcal{M} \rightarrow T_x \mathcal{M}$ ，定义为

$$\text{Hess } f(x)[u] = \nabla_u \text{grad } f, \quad \forall u \in T_x \mathcal{M}.$$

等价地， $\text{Hess } f : \mathfrak{X}(\mathcal{M}) \rightarrow \mathfrak{X}(\mathcal{M})$ ， $\text{Hess } f[U] = \nabla_u \text{grad } f$.

黎曼 Hessian 的自伴随性保证了它拥有实特征值，这是研究凸性和极值判定的基础。这与欧氏空间中 Hessian 矩阵是对称矩阵这一事实是完全对应的。

命题 2: 黎曼 Hessian 的自伴随性

黎曼 Hessian 是自伴随的：

$$\langle \text{Hess } f(x)[u], v \rangle_x = \langle u, \text{Hess } f(x)[v] \rangle_x, \quad \forall x \in \mathcal{M}, u, v \in T_x \mathcal{M},$$

或者等价地，

$$\langle \text{Hess } f[U], V \rangle = \langle U, \text{Hess } f[V] \rangle.$$

证明. 用度量相容性，我们有

$$\begin{aligned} \langle \text{Hess } f[U], V \rangle &= \langle \nabla_U \text{grad } f, V \rangle \\ &= U \langle \text{grad } f, V \rangle - \langle \text{grad } f, \nabla_U V \rangle \\ &= U(Vf) - (\nabla_U V)f. \end{aligned}$$

同理, $\langle U, \text{Hess } f[V] \rangle = V(Uf) - (\nabla_V U)f.$

根据李括号的定义, 以及对称性, 我们有

$$\begin{aligned} &\langle \text{Hess } f[U], V \rangle - \langle U, \text{Hess } f[V] \rangle \\ &= U(Vf) - V(Uf) - (\nabla_U V)f + (\nabla_V U)f \\ &= [U, V]f - (\nabla_U V - \nabla_V U)f \\ &= 0. \end{aligned}$$

证明完毕。 □

直接计算黎曼 Hessian 可能比较繁琐, 但对于嵌入在欧几里得空间中的子流形, 我们可以利用正交投影算子得到一个更易于计算的公式。以下是上次笔记中命题 1 的推论。

推论 3: 嵌入子流形的黎曼 Hessian

设 \mathcal{M} 是 \mathcal{E} 的黎曼子流形, 对于一个光滑函数 $f : \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R}$, 如果 \bar{G} 是黎曼梯度场 $\text{grad } f$ 在 \mathcal{E} 的光滑延拓, 那么

$$\text{Hess } f(x)[u] = \text{Proj}_x(D\bar{G}(x)[u]), \quad \forall x \in \mathcal{M}, u, v \in T_x \mathcal{M}.$$

2 例子: 球面上的二次型

例子 4: 球面上的二次型

考虑函数 $\bar{f}(x) = \frac{1}{2}x^\top Ax$ ($A \in \mathbb{R}^{d \times d}$ 是对称矩阵), 以及它在作为 \mathbb{R}^d 的黎曼子流形的单位球面 S^{d-1} 上的限制 $f = \bar{f}|_{S^{d-1}}$. 首先, 我们已经确定了 \bar{f} 的欧几里得梯度和 f 的黎曼梯度:

$$\text{grad } \bar{f}(x) = Ax,$$

$$\text{grad } f(x) = \text{Proj}_x(\text{grad } \bar{f}(x)) = (I_d - xx^\top)Ax = Ax - (x^\top Ax)x$$

为了计算黎曼 Hessian, 我们需要黎曼梯度场 $\text{grad } f$ 在环境空间中的一个光滑延拓 \bar{G} . 通常情况下, 黎曼梯度的表达式本身就提供了一个自然的选择, 即令

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

根据乘积法则, \bar{G} 在 x 点处沿切向量 u 方向的微分为

$$D\bar{G}(x)[u] = Au - (u^\top Ax + x^\top Au)x - (x^\top Ax)u$$

最后, 将该结果正交投影到 x 点处的切空间即可得到黎曼 Hessian (仅定义在切空间 $T_x S^{d-1}$ 上, 而非整个 \mathbb{R}^d 空间):

$$\begin{aligned} \text{Hess } f(x)[u] &= \text{Proj}_x(D\bar{G}(x)[u]) \\ &= \text{Proj}_x(Au) - (x^\top Ax)u \\ &= Au - (x^\top Au)x - (x^\top Ax)u. \end{aligned}$$

命题 5: 球面二次型的全局极小值判定, Exercise 5.18

延续例子 4, 考虑 $f(x) = \frac{1}{2}x^\top Ax$ 在单位球面 S^{d-1} 上的限制, 其中 A 是对称矩阵。证明: 如果 x 满足 $\text{grad } f(x) = 0$ 且 $\text{Hess } f(x) \succeq 0$ (半正定), 则 x 是 f 在球面上的一个全局极小值点。即证明 x 是 A 的最小特征值对应的特征向量。

证明. 根据例子 4, 球面上的黎曼梯度为

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

当 $\text{grad } f(x) = 0$ 时, 有 $Ax = (x^\top Ax)x$. 令 $\lambda = x^\top Ax$, 则该式变为 $Ax = \lambda x$. 由于 $x \in S^{d-1}$, 这表明 x 是 A 的一个单位特征向量, 其对应的特征值为 λ . 此时函数值为 $f(x) = \frac{1}{2}\lambda$.

同样根据例子 4, 对于任何切向量 $u \in T_x S^{d-1}$ (即满足 $x^\top u = 0$), 黎曼 Hessian 作用于 u 的结果为

$$\text{Hess } f(x)[u] = Au - (x^\top Au)x - (x^\top Ax)u.$$

计算其二次型:

$$\begin{aligned} \langle u, \text{Hess } f(x)[u] \rangle &= u^\top (Au - (x^\top Au)x - \lambda u) \\ &= u^\top Au - (x^\top Au)(u^\top x) - \lambda u^\top u. \end{aligned}$$

由于 u 是切向量, 满足 $u^\top x = 0$, 因此中间项消失, 得到

$$\langle u, \text{Hess } f(x)[u] \rangle = u^\top Au - \lambda \|u\|^2.$$

题目给定条件 $\text{Hess } f(x) \succeq 0$, 这意味着对于所有满足 $u \perp x$ 的 $u \neq 0$, 都有

$$u^\top Au \geq \lambda \|u\|^2 \implies \frac{u^\top Au}{u^\top u} \geq \lambda.$$

设 A 的特征值为 $\lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_d$. 根据 Rayleigh 商的性质, λ 必须等于最小特征值 λ_1 . 即 x 是最小特征值对应的特征向量, 对应的函数值 $f(x) = \frac{1}{2}\lambda_1$ 是 f 在球面上的全局最小值。□

参考文献

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