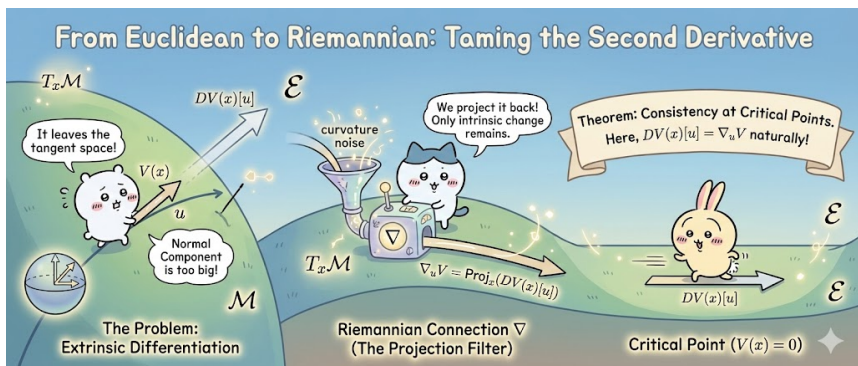


流形上向量场微分的动机

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：

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

这之所以成立，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 $f \in \mathcal{C}^\infty(\mathcal{M})$ ，满足以下四个性质：

1. **光滑性:** 定义 $(\nabla_u V)(x) := \nabla_{u(x)} V$ 那么 $\nabla_u V \in \mathfrak{X}(\mathcal{M})$.
2. **对 u 的线性:** $\nabla_{au+bw} V = a\nabla_u V + b\nabla_w V$.
3. **对 V 的线性:** $\nabla_u (aV + bW) = a\nabla_u V + b\nabla_u W$.
4. **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 ∇ 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 ∇ 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 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 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 ∇ 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已经是切向量。

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 ∇ 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.