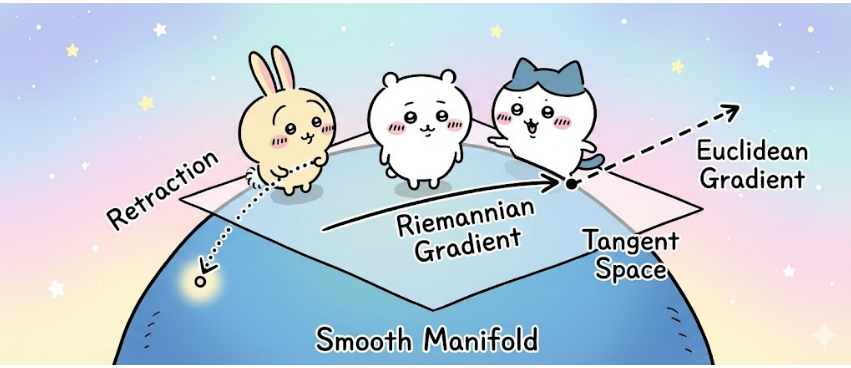
流形优化：从平坦到弯曲

北极甜虾（南半球版）

2026.1.7

Manifold Optimization Notes

流形优化介绍 | 核心工具介绍



1 流形优化介绍：光滑流形与光滑函数

在传统的优化学习中，我们习惯于在欧几里得空间（如 $\mathbb{R}^d$）里通过寻找“最速下降方向”来极小化函数 $f : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ 。但在流形优化中，我们的目标变成了：

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

其中 $\mathcal{M}$ 是一个**光滑流形（Smooth Manifold）**，$f : \mathcal{M} \to \mathbb{R}$ 是一个**光滑函数（Smooth Function）**。

这里我们有两个问题：什么是光滑流形？什么又是流形上的光滑函数？

在这一节笔记中，我们先非正式地介绍一下它们的直观理解：

什么是光滑流形 ($\mathcal{M}$)? 从非正式的角度来看，一个光滑流形就是一个在局部看起来像欧几里得空间，且整体上“没有尖角、没有断裂、没有自交”的几何对象。

- **“流形”的含义（局部平坦性）:** 一组可以通过某种“顺滑”的方式拼接在一起的局部平坦区域。
  - 想象一只在巨大球面上爬行的蚂蚁。虽然球面整体是弯曲的，但对蚂蚁来说，它脚下的那一小块区域，看起来和感觉起来都像是一个平坦的平面。
- **“光滑”的含义（可微性）:** 在数学上，“光滑”意味着我们可以对它进行求导（微积分）。
  - **球面是光滑的:** 无论在哪个位置，表面都是圆润平整的。
  - **立方体的表面就不是光滑的:** 虽然它大部分地方是平的，但在边角处存在“尖点”。

什么是光滑函数 ($f : \mathcal{M} \to \mathbb{R}$)? 既然流形本身是光滑的，那么定义在上面的函数 f 也需要满足类似的“光滑性”。一个函数是光滑的，直观上意味着当你沿着流形表面的任何轨迹移动时，函数值 $f(x)$ 的变化都是连续且渐进的，不会出现跳跃（不连续），也不会出现突然的转折（导数不连续）。深度类比:

- 如果流形 $\mathcal{M}$ 是地球的表面，而函数 $f(x)$ 代表该点的海拔高度: 如果地面是平缓起伏的山丘，那么 f 就是光滑的。
- 如果地面突然出现了一个垂直的悬崖，或者一个无限尖的尖峰，那么这个高度函数在这些地方就不再光滑。

2 流形优化的核心工具

光滑流形 $\mathcal{M}$ 最典型的例子就是 $\mathbb{R}^d$ 中的单位球面

$$S^{d-1} = \{x \in \mathbb{R}^d : x^\top x = 1\},$$

它也是 $\mathbb{R}^d$ 的一个嵌入子流形。

现在我们想象在一个二维球面 S^2 上行走的蚂蚁，我们有两种视角去看待它的运动：

- **外在视角：** 对于观察者来说，蚂蚁在一个受限的曲面上运动，它的坐标受到严格约束（比如 $x^\top x = 1$）。
- **内在视角：** 对于蚂蚁来说，它觉得这个世界是“无约束”的，它只是在它的世界里行走，并没有意识到第三维的存在。

考虑在 $\mathbb{R}^d$ 空间中优化一个函数 f，如果当前点 x_k 在一个单位球面上，我们按照传统的梯度下降走一步：

$$x_{k+1} = x_k - \alpha \nabla f(x_k).$$

你觉得这个新的点 x_{k+1} 还会留在球面上吗？

显然，直觉告诉我们，如果我们站在一个球面上不顾地面的弧度，执意朝着前方水平地迈出一大步，我们的脚会悬在空中，离开地面，因为地面在我们的脚下弯曲下沉了。

因此我们需要重新思考“步子该往哪迈”这个问题。这就引入了**切空间 (Tangent Space)** 的概念，流形 $\mathcal{M}$ 在 x 的切空间通常记为 $T_x\mathcal{M}$。我们可以把它想象成：虽然整个球是弯曲的，但在落脚的那一个点 x，我们可以铺设一块极小的、平坦的切平面。

如果想让这一步走得尽量贴近球面，我们应该使用整个 Euclidean 梯度 $\nabla f(x_k)$，还是只保留它在切平面上的分量？

显然是后者。将梯度投影到切空间，能确保我们选择的方向在这一瞬间是顺着曲面走的，而不是直接穿过曲面或者飞向太空。这个投影后的向量被称为**黎曼梯度（Riemannian Gradient）**，记作 $\operatorname{grad} f(x)$. 它是切空间中能让函数值下降最快的方向。因此我们可以把梯度下降修正为：

$$x_{k+1} = x_k - \alpha \operatorname{grad} f(x_k).$$

虽然黎曼梯度给了我们一个绝佳的行走方向，但正如我们之前讨论的，如果沿着这个平坦的方向走一段距离 α，我们还是会稍微脱离球面。为了回到球面上，最简单的办法是什么？

如果我们想让 x_{k+1} 回到球面上，最简单的办法就是沿着这条把它"收缩"到球面上，也就是把它的模长归一化：

$$x'_{k+1} = \frac{x_{k+1}}{\|x_{k+1}\|_2} = \frac{x_k - \alpha \operatorname{grad} f(x_k)}{\|x_k - \alpha \operatorname{grad} f(x_k)\|_2}$$

这么做的话，我们得到的点 x'_{k+1} 就是在球面上的点了。

我们把这个"收缩"的操作推广到任意的光滑流形 $\mathcal{M}$ 上，就引入了一个关键的概念叫做**收缩映射（Retraction）**，记作 $R_x : T_x\mathcal{M} \to \mathcal{M}$，它的作用是将切空间 $T_x\mathcal{M}$ 中的向量"安全地"映射回流形 $\mathcal{M}$ 上。在球面上,R_x 可以定义为

$$R_x(v) = \frac{x+v}{\|x+v\|_2}.$$

加上收缩映射，我们就得到了黎曼梯度下降法：

$$x_{k+1} = R_{x_k}(-\alpha \operatorname{grad} f(x_k)).$$

现在，我们总结之后会详细学习的三个核心的工具：

工具	**作用**	**几何直觉**
切空间	局部的线性化	曲面上某点附近的"平坦的空间"
黎曼梯度	定义曲面上的最速下降方向	传统梯度在切空间上的投影
收缩映射	确保移动后落在流形上	把空间中的点收缩到曲面上

参考文献

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