arXiv:2601.04479v1 [math.NA] 8 Jan 2026

极值特征子空间与正交归一极因子的近似

Ren-Cang Li*

2025年10月10日

摘要

本文研究矩阵分析中的两个极值问题。一个问题涉及如何近似厄米矩阵的最大特征值对应的特征子空间，另一个问题涉及如何近似一般矩阵的正交归一极因子。本文给出了近似质量的紧误差界。

关键词： 特征子空间；厄米矩阵；正交归一极因子；误差界**数学主题分类** 15A18, 15A42, 5B57, 65F15。

1 引言

本文研究两个矩阵极值问题，分别涉及厄米矩阵的最大特征值对应的特征子空间的近似，以及矩阵的正交归一极因子的近似。这两个问题都以某些矩阵迹近似的形式表述。第一个问题在矩阵分析中广为人知，而第二个问题则鲜为人知，直到最近才在 [9] 中出现。它们在斯蒂费尔流形上的优化中发挥了关键作用 [9],：相关问题的研究结果用于分析两个新近建立的框架的收敛性，这些框架用于求解由各类数据科学任务所产生的斯蒂费尔流形上最常见的优化问题。

具体而言，给定一个厄米矩阵 $H \in \mathbb{C}^{n\times n}$ 和一个正交归一矩阵 $P \in \mathbb{C}^{n\times k}$，我们的第一个问题是：如何根据 $\mathrm{tr}(P^{\mathrm{H}}HP)$ 与 H的 k 个最大特征值之和之间的差，界定 P 的列空间作为与 H的 k 个最大特征值对应的近似特征子空间时的误差。文献中已有一些关于这一问题的结果 [4, 定理 1], [17, 第 3], [8, 章定理 2.2]。我们的第二个问题是，通过用 $\mathrm{tr}(P^{\mathrm{H}}B)$ 近似矩阵 $B \in \mathbb{C}^{n\times k}$ 的迹范数（也称核范数），来分析近似其正交归一极因子时的误差，其中 $P \in \mathbb{C}^{n\times k}$ 是正交归一矩阵。据我们所知，这个问题首次出现在 [9]中。这两个问题本身都很有研究价值。

*德克萨斯大学阿灵顿分校数学系，美国德克萨斯州阿灵顿，邮编 76019-0408。电子邮箱：rcli@uta.edu。

本文其余部分安排如下。第 2 节介绍两个维数相同的子空间之间的典范角。第 3 节讨论如何近似厄米矩阵的极端特征子空间，第 4 节讨论如何通过近似高矩阵的核范数来近似其正交归一极因子。最后，第 5 节总结全文。

记号。我们采用矩阵分析中的常用记号。集合 $\mathbb{R}^{m\times n}$ 表示$m\times n$ 实矩阵，而 $\mathbb{R}^n=\mathbb{R}^{n\times 1}$ 和 $\mathbb{R}=\mathbb{R}^1$。类似地，$\mathbb{C}^{m\times n}$、$\mathbb{C}^n$和 $\mathbb{C}$ 表示复数域中的相应集合。大小为 n 的单位矩阵记作 I_n；若其大小可由上下文明确，则简记为 I。对于任意矩阵或向量 B，B^{T}和 B^{H} 分别表示 B的转置和共轭转置，而$\mathcal{R}$（B）表示由 B的列张成的列空间。（复）斯蒂费尔流形 $\mathrm{St}(k,\ n)$ 由所有具有标准正交列的 $P\in\mathbb{C}^{n\times k}$ 组成：

$$\mathrm{St}(k,n)=\{P\in\mathbb{C}^{n\times k}\ :\ P^{\mathrm{H}}P=I_k\}\subset\mathbb{C}^{n\times k}. \tag{1.1}$$

方阵 $A\succ 0$（分别为 $\succeq 0$）表示其为厄米正定（分别为半正定）；相应地，若 $-A\succ 0$（$\succeq 0$），则 $A\prec 0$（$\preceq 0$）。我们用 $\|B\|_2$表示矩阵2-范数（即 B的最大奇异值），用 $\|B\|_{\mathrm{F}}:=\sqrt{\mathrm{tr}(B^{\mathrm{H}}B)}$ 表示 Frobenius范数。其他记号将在首次出现时加以说明。

2 子空间间的典范角

为便于本文后续内容的展开，我们将介绍两个维数相同的子空间之间的典范角。

设 $\mathcal{X}=\mathcal{R}(X)$ 和 $\mathcal{Y}=\mathcal{R}(Y)$ 是 $\mathbb{C}^n$ 中两个 k 维子空间，其中 $X,Y\in\mathrm{St}(k,n)$。$\mathcal{X}$ 与 $\mathcal{Y}$之间的典范角 $\theta_1(\mathcal{X},\mathcal{Y})\ \geq\cdots\geq\theta_k(\mathcal{X},\mathcal{Y})$ 定义为[11]

$$0\leq\theta_i\equiv\theta_i(\mathcal{X},\mathcal{Y}):=\arccos\sigma_i(X^{\mathrm{H}}Y)\leq\frac{\pi}{2}\quad\text{for } 1\leq i\leq k,$$

a因此，$\mathcal{X}$ 与 $\mathcal{Y}$之间典范角的对角矩阵 is

$$\Theta(\mathcal{X},\mathcal{Y})=\mathrm{diag}(\theta_1,\ldots,\theta_k)\in\mathbb{C}^{k\times k}.$$

众所周知，

$$\mathrm{dist}_2(\mathcal{X},\mathcal{Y}):=\|\sin\Theta(\mathcal{X},\mathcal{Y})\|_2=\sin\theta_1, \tag{2.1}$$

$$\mathrm{dist}_{\mathrm{F}}(\mathcal{X},\mathcal{Y}):=\|\sin\Theta(\mathcal{X},\mathcal{Y})\|_{\mathrm{F}}=\Big[\sum_{i=1}^{k}\sin^2\theta_i\Big]^{1/2} \tag{2.2}$$

是 Grassmann流形 $\mathscr{G}_k(\mathbb{C}^n)$ [12, p.99]，$\mathbb{C}^n$ 中所有 k 维子空间的集合，并配备度量 $\mathrm{dist}_2(\cdot,\ \cdot)$ 或 $\mathrm{dist}_{\mathrm{F}}(\cdot,\ \cdot)$，这两种度量均为酉不变度量。

3 极值特征子空间

本节将研究厄米矩阵的顶端特征子空间的近似。我们将确立一个新结果，即下文 (3.1) 中的第一个不等式。为此，我们用 $\mathrm{eig}(H) = \{\lambda_i(H)\}_{i=1}^n$ 表示厄米矩阵 $H \in \mathbb{C}^{n\times n}$ 的特征值集合（按重数计），并按降序排列：

$$\lambda_1(H) \geq \lambda_2(H) \geq \cdots \geq \lambda_n(H).$$

下文定理 3.1 的实数版本是 [9, 引理 B.10]，二者唯一的区别在于：定理 3.1 中所有矩阵转置都替换为矩阵共轭转置。

定理 3.1. 设 $H \in \mathbb{C}^{n\times n}$ 为厄米矩阵，且 $P_* \in \mathrm{St}(k,n)$ 的列空间 $\mathcal{R}(P_*)$是 H 对应于其最大 k 个特征值的不变子空间。假设$\lambda_k(H) - \lambda_{k+1}(H) > 0$。给定 $P \in \mathrm{St}(k,n)$，令

$$\eta = \mathrm{tr}(P_*^{\mathrm{H}} H P_*) - \mathrm{tr}(P^{\mathrm{H}} H P), \quad \epsilon = \sqrt{\frac{\eta}{\lambda_k(H) - \lambda_{k+1}(H)}}.$$

则[1]

$$\frac{\|HP - P(P^{\mathrm{H}}HP)\|_{\mathrm{F}}}{\lambda_1(H) - \lambda_n(H)} \leq \|\sin\Theta(\mathcal{R}(P), \mathcal{R}(P_*))\|_{\mathrm{F}} \leq \epsilon. \tag{3.1}$$

证明。根据 Fan迹极小化原理，我们知道 $\eta \geq 0$ [1]。(3.1) 中的第二个不等式是 [4, 定理 1]，也可以由 [17,第 3] 章中的一些估计推导得出，并对 [8, 定理 2.2] 的证明稍作修改。下面只需证明 (3.1) 中的第一个不等式。将 P 展开为 $[P, P_\perp] \in \mathsf{St}(n,n)$。可得

$$[P, P_\perp]^{\mathrm{H}}\big(HP - P(P^{\mathrm{H}}HP)\big) = \begin{bmatrix} 0 \\ P_\perp^{\mathrm{H}} H P \end{bmatrix},$$

这意味着

$$\begin{aligned} \|HP - P(P^{\mathrm{H}}HP)\|_{\mathrm{F}} &= \big\|[P, P_\perp]^{\mathrm{H}}\big(HP - P(P^{\mathrm{H}}HP)\big)\big\|_{\mathrm{F}} \\ &= \|P_\perp^{\mathrm{H}} H P\|_{\mathrm{F}} \\ &= \|P_\perp^{\mathrm{H}}(H - \xi I)P\|_{\mathrm{F}}, \end{aligned} \tag{3.2}$$

对于任意 $\xi \in \mathbb{C}$，因为 $P_{\mathrm{H}_\perp} P = 0$。但在下文中，我们将取 $\xi = [\lambda_1(H) + \lambda_n(H)]/2$。接下来，我们将 P_*展开为 $[P_*, P_{*\perp}] \in \mathsf{St}(n,n)$。由于 P_*的列空间是 H 对应于 H的最大 k 个特征值的不变子空间，因此我们有

$$H[P_*, P_{*\perp}] = [P_*, P_{*\perp}] \begin{bmatrix} P_*^{\mathrm{H}} H P_* & \\ & P_{*\perp}^{\mathrm{H}} H P_{*\perp} \end{bmatrix},$$

[1](3.1)中的第一个不等式实际上只要 $\mathcal{R}(P_*)$是H的 k维不变子空间就成立，正如其证明所示。第二个不等式则需要满足这样的条件： $\mathcal{R}(P_*)$与 H的 k 个最大特征值相关联。

and

$$P_\perp^{\mathrm{H}}(H-\xi I)P = P_\perp^{\mathrm{H}}[P_*, P_{*\perp}]\begin{bmatrix} P_*^{\mathrm{H}}(H-\xi I)P_* & \\ & P_{*\perp}^{\mathrm{H}}(H-\xi I)P_{*\perp}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}P_*^{\mathrm{H}}\\ P_{*\perp}^{\mathrm{H}}\end{bmatrix}P$$
$$= P_\perp^{\mathrm{H}}P_*P_*^{\mathrm{H}}(H-\xi I)P_*P_*^{\mathrm{H}}P + P_\perp^{\mathrm{H}}P_{*\perp}P_{*\perp}^{\mathrm{H}}(H-\xi I)P_{*\perp}P_{*\perp}^{\mathrm{H}}P. \qquad (3.3)$$

注意到

$$\|P_\perp^{\mathrm{H}}P_*\|_{\mathrm{F}} = \|P_{*\perp}^{\mathrm{H}}P\|_{\mathrm{F}} = \|\sin\Theta(\mathcal{R}(P),\mathcal{R}(P_*))\|_{\mathrm{F}},$$
$$\|P_*^{\mathrm{H}}P\|_2 \le 1, \qquad \|P_\perp^{\mathrm{H}}P_{*\perp}\|_2 \le 1,$$

并且，对于 $\xi = [\lambda_1(H)+\lambda_n(H)]/2$,

$$\|P_*^{\mathrm{H}}(H-\xi I)P_*\|_2 \le \|H-\xi I\|_2 = \frac{1}{2}[\lambda_1(H)-\lambda_n(H)],$$
$$\|P_{*\perp}^{\mathrm{H}}(H-\xi I)P_{*\perp}\|_2 \le \|H-\xi I\|_2 = \frac{1}{2}[\lambda_1(H)-\lambda_n(H)],$$

由 (3.3) 可得,

$$\|P_\perp^{\mathrm{H}}(H-\xi I)P\|_{\mathrm{F}} \le 2\|H-\xi I\|_2\|\sin\Theta(\mathcal{R}(P),\mathcal{R}(P_*))\|_{\mathrm{F}}$$
$$= [\lambda_1(H)-\lambda_n(H)]\|\sin\Theta(\mathcal{R}(P),\mathcal{R}(P_*))\|_{\mathrm{F}},$$

结合 (3.2)，这便得到 (3.1) 中的第一个不等式，正如预期。 □

4 正交归一极因子

本节将给出一个近似的误差界，该近似用于

$$\arg\max_{P\in\mathrm{St}(k,n)} \Re(\mathrm{tr}(P^{\mathrm{H}}B)), \qquad (4.1)$$

我们将证明它是 B 的一个正交归一极因子，其中 $B\in\mathbb{C}^{n\times k}$ 和 $k\le n$，且 $\Re(\cdot)$ 提取复数的实部。为简化记号，我们将 B 的奇异值记为 $\sigma_i(B)$，其中 $1\le i\le k$ 并按降序排列，即,

$$\sigma_1(B)\ge\sigma_1(B)\ge\cdots\sigma_k(B),$$

最小奇异值 $\sigma_{\min}(B) = \sigma_k(B)$，以及迹范数 $\|B\|_{\mathrm{tr}} = \sum_{i=1}^k \sigma_i(B)$（亦称核范数）。在后续证明中需要用到以下冯·诺伊曼迹不等式。

引理 4.1 （冯·诺伊曼迹不等式 [14], [3, p.183]）。对于 $B,\ C\in\mathbb{C}^{n\times k}$，我们有 ve

$$|\mathrm{tr}(B^{\mathrm{H}}C)| \le \sum_{i=1}^k \sigma_i(B)\,\sigma_i(C).$$

$B \in \mathbb{C}^{n\times k}$的极分解指的是 $B = P\Lambda$，其中 $P \in \mathsf{St}(k,\ n)$且$0 \preceq \Lambda \in \mathbb{C}^{k\times k}$。已知 Λ是唯一的，且事实上 $\Lambda = (B^{\mathrm{H}}B)^{1/2}$ （ $B^{\mathrm{H}}B$的半正定平方根）；但正交归一极因子 P 唯一，当且仅当 $\mathsf{rank}(B) = k$ [2, 5, 6, 7]，此时 $P = B(B^{\mathrm{H}}B)^{-1/2}$。极分解可以通过瘦奇异值分解计算： $B = U\Sigma V_{\mathrm{H}}$，其中 $P = UV_{\mathrm{H}}$ 且 $\Lambda = V\Sigma V_{\mathrm{H}}$，其中$U \in \mathsf{St}(k,\ n)$，$V \in \mathsf{St}(k,\ k)$，且 $\Sigma = \mathsf{diag}(\sigma_1(B) \ldots, \sigma_k(B)) \in \mathbb{R}^{k\times k}$为对角矩阵，对角线上是奇异值。

下一个引理可能是众所周知的。例如，对于实数情形，其结论可由 [15] 在 [15, 引理 3.2]之前的讨论推出（另见 [9, 引理 B.11]，[10]）。我们在此给出证明，以使本文自成一体，也因为该引理是针对复数域陈述的。

引理 4.2。设 $B \in \mathbb{C}^{n\times k}$ 且 $k \le n$。

(a) $\Re(\mathsf{tr}(P^{\mathrm{H}}B)) \le \|B\|_{\mathrm{tr}}$对任意 $P \in \mathsf{St}(k,n)$;

(b) $\Re(\mathrm{tr}(P^{\mathrm{H}}B)) = \|B\|_{\mathrm{tr}}$其中 $P \in \mathrm{St}(k,n)$当且仅当 $B = P\Lambda$且 $\Lambda \succeq 0$，为一个极分解;

(c) 我们有

$$\max_{P\in\mathrm{St}(k,n)} \Re(\mathrm{tr}(P^{\mathrm{H}}B)) = \|B\|_{\mathrm{tr}}$$

且最优值 $\|B\|_{\mathrm{tr}}$ 由 $P = P_*$取得， $P = P_*$是 B的一个正交归一极因子。

证明。 (a) 是引理 4.1 的推论:

$$\Re(\mathrm{tr}(P^{\mathrm{H}}B)) \le |\,\mathrm{tr}(P^{\mathrm{H}}B)| \le \sum_{i=1}^{k} \sigma_i(P)\sigma_i(B) = \sum_{i=1}^{k} \sigma_i(B) = \|B\|_{\mathrm{tr}},$$

其中我们对 $1 \le i \le k$ 使用了 $\sigma_i(P) = 1$ 。

对于 (b)，如果 $B = P\Lambda$满足 $\Lambda \succeq 0$，那么 $\mathsf{tr}(P_{\mathrm{H}}B) = \mathsf{tr}(\Lambda) = \|B\|_{\mathrm{tr}}$。另一方面，如果 $\Re(\mathsf{tr}(P_{\mathrm{H}}B)) = \|B\|_{\mathrm{tr}}$，那么立即有 $0 \le \mathsf{tr}(P^{\mathrm{H}}B) \in \mathbb{R}$。设 $\mathsf{rank}(B) = r \le k$，并令 B 的瘦奇异值分解为

$$B = U\Sigma V^{\mathrm{H}} = U_1\Sigma_1 V_1^{\mathrm{H}},$$

其中 $U_1 \in \mathsf{St}(r,\ n)$， $V_1 \in \mathsf{St}(r,\ k)$，且 $\Sigma_1 = \mathsf{diag}(\sigma_1(B) \ldots, \sigma_r(B))$。记

$$\widehat{P} := PV \equiv [\widehat{\boldsymbol{p}}_1, \ldots, \widehat{\boldsymbol{p}}_k] \in \mathrm{St}(k,n), \quad U \equiv [\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_k],$$

其中 $\widehat{\boldsymbol{p}}_i$ 和 $\boldsymbol{u}_i$ 是单位列向量。我们有

$$\Re(\mathrm{tr}(P^{\mathrm{H}}B)) = \Re(\mathrm{tr}(P^{\mathrm{H}}U\Sigma V^{\mathrm{H}})) = \Re(\mathrm{tr}([V^{\mathrm{H}}P^{\mathrm{H}}U]\Sigma)) = \sum_{i=1}^{r} \Re(\widehat{\boldsymbol{p}}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_i)\sigma_i(B),$$

yielding $\sum_{i=1}^{r}[1 - \Re(\widehat{\boldsymbol{p}}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_i)]\sigma_i(B) = 0$ 由 $\Re(\mathsf{tr}(P^{\mathrm{H}}B)) = \|B\|_{\mathrm{tr}} = \sum_{i=1}^{r}\sigma_i(B)$。因此 e

$$\Re(\widehat{\boldsymbol{p}}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_i) = 1 \quad \text{for } 1 \le i \le r$$

因为 $1-\Re(\widehat{\boldsymbol{p}}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_i)\geq 0$ 且 $\sigma_i(B)>0$ 对于 $1\leq i\leq r$。根据柯西-施瓦茨不等式取等号的条件:

$$1=\Re(\widehat{\boldsymbol{p}}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_i)\leq\|\widehat{\boldsymbol{p}}_i\|_2\|\boldsymbol{u}_i\|_2=1,$$

由此可得，对于 $1\leq i\leq r$，$\widehat{\boldsymbol{p}}_i=\boldsymbol{u}_i$。接下来可以写成 $P=[U_1,P_2]$，其中 $P_2\in\mathbb{C}^{n\times(k-r)}$。最后得到

$$P=\widehat{P}V^{\mathrm{H}}=U_1V_1^{\mathrm{H}}+\widehat{P}_2V_2^{\mathrm{H}}\in\mathrm{St}(k,n)$$

其中 $P(V_1\Sigma_1V_{\mathrm{H}1})=U_1\Sigma_1V_{\mathrm{H}_1}=B$，这是 B 的一个极分解，正如所要证明的。条目（c）是条目（a）和条目（b）的推论。 □

引理 4.2 表明，$\Re(\mathrm{tr}(P^{\mathrm{H}}B))$ 始终不超过 $\|B\|_{\mathrm{tr}}$，且上界 $\|B\|_{\mathrm{tr}}$ 可由 P_* 的任意正交归一极因子达到；此外，在 $P\in\mathrm{St}(k,\ n)$ 上使 $\Re(\mathrm{tr}(P^{\mathrm{H}}B))$ 取得最大值的任意矩阵，也是 B 的一个正交归一极因子。可以设想，$\Re(\mathrm{tr}(P^{\mathrm{H}}B))$ 越接近上界，P 就越接近 B 的一个正交归一极因子。下一个引理的结果将对最后这一论述作出定量刻画。

定理 4.1。设 $B\in\mathbb{C}^{n\times k}$，并且 秩$(B)=k$。设 P_* 为 B的唯一正交归一极因子。给定 $P\in\mathrm{St}(k,n)$，令

$$\eta=\|B\|_{\mathrm{tr}}-\Re(\mathrm{tr}(P^{\mathrm{H}}B)),\quad \epsilon=\sqrt{\frac{2\eta}{\sigma_{\min}(B)}}. \tag{4.2}$$

(a) 我们有[2]

$$\frac{\|B-P(P^{\mathrm{H}}B)\|_{\mathrm{F}}}{\|B\|_2}\leq\|\sin\Theta(\mathcal{R}(P),\mathcal{R}(P_*))\|_{\mathrm{F}}\leq\epsilon\,; \tag{4.3}$$

(b) 若 $P^{\mathrm{H}}B\succ 0$，则

$$\|P-P_*\|_{\mathrm{F}}\leq\left(1+\frac{2\|B\|_2}{\sigma_{\min}(B)+\sigma_{\min}(P^{\mathrm{H}}B)}\right)\epsilon\,; \tag{4.4}$$

(c) 若 $\mathcal{R}(P)=\mathcal{R}(P_*)$，此时 正弦 $\Theta(\mathcal{R}(P)\ \mathcal{R}(P_*))=0$，则

$$\|P-P_*\|_{\mathrm{F}}\leq\epsilon\,. \tag{4.5}$$

证明。令 θ_i 为子空间 $\mathcal{R}(P)$ 与 $\mathcal{R}(P_*)$ 之间的典范角，其中 $\pi/2\geq\theta_1\geq\cdots\geq\theta_k\geq 0$。那么 $P^{\mathrm{H}}P_*\in\mathbb{C}^{k\times k}$ 的奇异值为 $\cos\theta_i$，其中$1\leq i\leq k$。令 $B=P_*\Lambda$为 B的极分解。我们有 $P^{\mathrm{H}}B=P_{\mathrm{H}}P_*\Lambda$，因此

$$\|B\|_{\mathrm{tr}}-\eta=\Re(\mathrm{tr}(P^{\mathrm{H}}B))=\Re(\mathrm{tr}([P^{\mathrm{H}}P_*]\Lambda))\leq\sum_{i=1}^{k}\sigma_i(B)\cos\theta_{k-i+1} \tag{4.6}$$

[2]第二个不等式 (4.3) 的证明实际上是通过证明 $\|\sin\frac{1}{2}\Theta(\mathcal{R}(P)\ \mathcal{R}(P_*))\|_{\mathrm{F}}\leq\frac{1}{2}\epsilon$得出的，这个结论更强。此外，由于此处 $\mathcal{R}(P_*)$ 与 $\mathcal{R}(B)$ 相同，因此可以将其替换为 $\mathcal{R}(B)$。

由引理 4.1 得出。注意到 $\|B\|_{\mathrm{tr}} = \sum_{i=1}^{k} \sigma_i(B)$，由 (4.6) 可得

$$\eta \geq \sum_{i=1}^{k} \sigma_i(B)\big[1 - \cos\theta_{k-i+1}\big] = \sum_{i=1}^{k} \sigma_i(B)\big[2\sin^2(\theta_{k-i+1}/2)\big] \tag{4.7}$$

$$\geq \sum_{i=1}^{k} \sigma_i(B) \cdot \frac{1}{2}\sin^2\theta_{k-i+1} \tag{4.8}$$

$$\geq \frac{1}{2}\sigma_{\min}(B)\|\sin\Theta(\mathcal{R}(P),\mathcal{R}(P_*))\|_{\mathrm{F}}^2,$$

从而得到（4.3）中的第二个不等式，其中我们用到了

$$\sin\theta \leq 2\sin\frac{\theta}{2} = \frac{\sin\theta}{\cos(\theta/2)} \leq \sqrt{2}\sin\theta \quad \text{for} \quad 0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}.$$

现在，我们将 P展开为 $[P, P_\perp] \in \mathsf{St}(n,n)$。我们得到

$$[P, P_\perp]^{\mathrm{H}}\big(B - P(P^{\mathrm{H}}B)\big) = \begin{bmatrix} 0 \\ P_\perp^{\mathrm{H}}B \end{bmatrix},$$

这意味着

$$\|B - P(P^{\mathrm{H}}B)\|_{\mathrm{F}} = \big\|[P, P_\perp]^{\mathrm{H}}\big(B - P(P^{\mathrm{H}}B)\big)\big\|_{\mathrm{F}} = \|P_\perp^{\mathrm{H}}B\|_{\mathrm{F}}. \tag{4.9}$$

由 CS分解 [11] 可知， $P_\perp^{\mathrm{H}}P_* \in \mathbb{C}^{k\times(n-k)}$的奇异值为 $1 \leq i \leq k$对应的 $\sin\ \theta_i$，其中可能还包含一些额外的零值。我们有 $P_\perp^{\mathrm{H}}B = P_\perp^{\mathrm{H}}P_*\Lambda$，因此

$$\|P_\perp^{\mathrm{H}}B\|_{\mathrm{F}} = \|P_\perp^{\mathrm{H}}P_*\Lambda\|_{\mathrm{F}} \leq \|P_\perp^{\mathrm{H}}P_*\|_{\mathrm{F}}\|B\|_2 = \|B\|_2\|\sin\Theta(\mathcal{R}(P),\mathcal{R}(P_*))\|_{\mathrm{F}},$$

结合（4.9），可得（4.3）中的第一个不等式。

接下来，我们证明（4.4）。证明方法借鉴了 [18, 引理 4.1]和 [13,第 3.1]节。现在假设 $P^{\mathrm{H}}B \succ 0$。按照 [18, 引理 4.1], 的证明，我们可以得出存在 $Q \in \mathsf{St}(k,k)$，使得 $\widetilde{P} = P_*Q^{\mathrm{H}}$ 满足

$$\|P_* - \widetilde{P}\|_{\mathrm{F}}^2 = \sum_{i=1}^{k} 4\sin^2\frac{\theta_i}{2} \leq \frac{2\eta}{\sigma_{\min}(B)}, \tag{4.10}$$

其中最后一个不等式用到了（4.8）。注意到 $P^{\mathrm{H}}B = I_k \cdot (P_{\mathrm{H}}B)$和 $\widetilde{P}_{\mathrm{H}}B = Q \cdot (P_{\mathrm{H}_*}\ B)$是两个极分解后，我们采用 [13, 第 3.1] 节中的论证，由 [6,定理 1],

$$\|I_k - Q\|_{\mathrm{F}} \leq \frac{2}{\sigma_{\min}(B) + \sigma_{\min}(P^{\mathrm{H}}B)}\|P^{\mathrm{H}}B - \widetilde{P}^{\mathrm{H}}B\|_{\mathrm{F}}$$

$$\leq \frac{2\|B\|_2}{\sigma_{\min}(B) + \sigma_{\min}(P^{\mathrm{H}}B)}\|P - \widetilde{P}\|_{\mathrm{F}}\,, \tag{4.11}$$

因此

$$\|P-P_*\|_{\mathrm{F}} \le \|P-\widetilde{P}\|_{\mathrm{F}} + \|\widetilde{P}-P_*\|_{\mathrm{F}} = \|P-\widetilde{P}\|_{\mathrm{F}} + \|I-Q\|_{\mathrm{F}},$$

结合（4.10）和（4.11），即可得到（4.4）。我们也可以将（4.3）中的第二个不等式与 [13, 定理 3.1] 结合起来，对 $\|P-P_*\|_{\mathrm{F}}$给出一个界，但这样得到的界会比（4.4）右侧大 $\sqrt{2}$倍。

现在考虑条目（c），其中 $\mathcal{R}(P) = \mathcal{R}(P_*)$。于是，对于某个 $W \in \mathrm{St}(k,\ k)$，有 $P = P_*W$。回顾一下，$B = P_*\Lambda$ 是 B的极分解，因此 $\Lambda \succ 0$，且其特征值就是 B的奇异值。设 $\Lambda = Q\Gamma Q^{\mathrm{H}}$ 是 Λ的特征分解，其中 $Q \in \mathrm{St}(k,\ k)$，且 $\Gamma = \mathrm{diag}(\sigma_1(B)\ldots,\sigma_k(B))$。令 $Q^{\mathrm{H}}WQ = [w_{ij}] \in \mathrm{St}(k,\ k)$。我们知道，对于 $1 \le i \le k$，有 $|w_{ii}| \le 1$。由（4.6）还可得

$$\begin{aligned}\eta &= \mathrm{tr}(\Lambda) - \Re(\mathrm{tr}(W^{\mathrm{H}}\Lambda)) \\ &= \mathrm{tr}(Q\Gamma Q^{\mathrm{H}}) - \Re(\mathrm{tr}(W^{\mathrm{H}}Q\Gamma Q^{\mathrm{H}})) \\ &= \mathrm{tr}(\Gamma) - \Re(\mathrm{tr}(Q^{\mathrm{H}}W^{\mathrm{H}}Q\Gamma)),\end{aligned}$$

从而得到

$$\eta = \sum_{i=1}^{k}[1-\Re(w_{ii})]\sigma_i(B) \ge \sigma_{\min}(B)\sum_{i=1}^{k}[1-\Re(w_{ii})],$$

$$\sum_{i=1}^{k}[1-\Re(w_{ii})] \le \frac{\eta}{\sigma_{\min}(B)} = \frac{1}{2}\epsilon^2. \tag{4.12}$$

我们有 $\|P-P_*\|_{\mathrm{F}}^2 = \|W-I\|_{\mathrm{F}}^2 = \|Q^{\mathrm{H}}(W-I)Q\|_{\mathrm{F}}^2 = \|Q^{\mathrm{H}}WQ-I\|_{\mathrm{F}}^2$，因此

$$\begin{aligned}\|P-P_*\|_{\mathrm{F}}^2 &= \sum_{i=1}^{k}|w_{ii}-1|^2 + \sum_{i=1}^{k}\sum_{j\ne i}|w_{ij}|^2 \\ &= \sum_{i=1}^{k}|w_{ii}-1|^2 + \sum_{i=1}^{k}(1-|w_{ii}|^2) \\ &= 2\sum_{i=1}^{k}[1-\Re(w_{ii})] \le \epsilon^2, \qquad (\text{by (4.12)})\end{aligned}$$

正如所要证明的。 □

$P(P_{\mathrm{H}}B) = (PP_{\mathrm{H}})B$和 $\Theta(\mathcal{R}(P)\ \mathcal{R}(P_*))$ 关于替换 $PQ \leftarrow P$对任意 $Q \in \mathrm{St}(k,k)$ 都是不变的。因此，式（4.3）中的 ϵ可以替换为使 $\Re(\mathrm{tr}([PQ]^{\mathrm{H}}B))$ 在 $Q \in \mathrm{St}(k,k)$ 上达到最大值的那个。注意到 [10, 16]

$$\max_{Q\in\mathrm{St}(k,k)} \Re(\mathrm{tr}([PQ]^{\mathrm{H}}B)) = \|P^{\mathrm{H}}B\|_{\mathrm{tr}}$$

并且，Q的任意正交归一极因子 $P^{\mathrm{H}}B$都是一个极大化子，且 $[PQ]^{\mathrm{H}}B = Q^{\mathrm{H}}(P_{\mathrm{H}}B) \succeq 0$，因此我们得到以下推论。

推论 4.1。 设 $B \in \mathbb{C}^{n\times k}$，并且满足秩$(B) = k$。设 P_* 是 B的唯一正交归一极因子。(4.3)中的不等式成立，其中

$$\eta = \|B\|_{\mathrm{tr}} - \|P^{\mathrm{H}}B\|_{\mathrm{tr}}, \quad \epsilon = \sqrt{\frac{2\eta}{\sigma_{\min}(B)}}, \tag{4.2$'$}$$

并且如果还满足 秩$(P^{\mathrm{H}}B) = k$，则

$$\|PQ - P_*\|_{\mathrm{F}} \leq \left(1 + \frac{2\|B\|_2}{\sigma_{\min}(B) + \sigma_{\min}(P^{\mathrm{H}}B)}\right)\epsilon\,, \tag{4.4$'$}$$

其中 Q 是 $P^{\mathrm{H}}B$的正交归一极因子。

5 结束语

本文研究了两个矩阵极值问题，分别涉及厄米矩阵的特征值问题和一般矩阵的极分解。这两个问题都表述为最大化某些矩阵迹函数。相关结果已用于 [9]，以分析针对斯蒂费尔流形上最常见优化问题的两种新近建立的数值解框架的收敛性。一个显著区别在于，[9] 中的表述是在实数域上，而本文则是在复数域上。因此会出现一些细微之处。例如，在本文的多个地方，我们必须使用 $\Re(\cdot)$来提取复数的实部。

致谢

本研究部分获得了美国国家科学基金会 DMS-2407692 项目的资助。

参考文献

[1] Ky Fan。关于 Weyl 关于线性变换特征值的定理。I。美国国家科学院院刊，35(11)：652–655页，1949年。[2] Nicholas J. Higham。矩阵函数：理论与计算。SIAM，美国宾夕法尼亚州费城，2008年。[3] R. A. Horn 和 C. R. Johnson。矩阵分析专题。剑桥大学出版社，剑桥，1991年。[4] J. Kovaˇc-Striko 和 K. Veseli´c。关于 Hermitian 矩阵谱的一些评论。线性代数及其应用，145：221–229，1991年。[5] Ren-Cang Li。广义极分解的一个扰动界。*BIT*，33：304–308，1993年。[6] Ren-Cang Li。酉极因子的新扰动界。*SIAM J. Matrix Anal.Appl.*，16：327–332，1995年。[7] Ren-Cang Li。酉极因子的相对扰动界。*BIT*，37：67–75，1997年。

[8] Ren-Cang Li。通过优化瑞利商提高计算特征向量的精度。*BIT*，44(3)：585–593，2004年。[9] Ren-Cang Li。斯蒂费尔流形优化的 NEPv 方法理论，2023年5月。arXiv:2305.00091，2024年4月修订。较短版本（64页）在线发表于*Found. Comput. Math.*（2024年10月）。[10] Ding Lu 和 Ren-Cang Li。局部酉不变化 NEPv 与 SCF 收敛分析。*Math. Comp.*，93(349)：2291–2329，2024年。[11] G. W. Stewart 和 Ji-Guang Sun。矩阵扰动理论。Academic Press，波士顿，1990年。[12] Ji-Guang Sun。矩阵扰动分析。研究生教材（中央研究院）。科学出版社，北京，第2版，2001年11月。中文。[13] Zhongming Teng 和 Ren-Cang Li。子空间正交归一基矩阵的变分。*Numer. Alg., Contr. Optim.*，15(2)：444–458，2025年1月。[14] 约翰·冯·诺伊曼。一些矩阵不等式与矩阵空间的度量化。*Tomck. Univ.Rev.*，1：286–300，1937年。[15] Li Wang、Lei-Hong Zhang 和 Ren-Cang Li。耦合迹和最大化及其应用。*Numer. Math.*，152：587–629，2022年。doi.org/10.1007/s00211-022-01322-y。[16]Li Wang、Lei-Hong Zhang 和 Ren-Cang Li。迹比优化及其在多视图学习中的应用。*Math.Program.*，201：97–131，2023年。doi.org/10.1007/s10107-022-01900-w。[17] Hans F. Weinberger。特征值近似的变分方法，《*CBMS-NSF Regional Conference Series in Applied Mathematics*》第15卷。SIAM，费城，1974年。[18] Lei-Hong Zhang 和 Ren-Cang Li。斯蒂费尔流形上迹比之和的最大化，II：计算。中国科学：数学，58(7)：1549–1566，2015年。