# Pfaffian

## Pfaffian

$2n \times 2n$ の反対称行列 $A(A^{\mathrm{T}} = -A)$ に定義される以下の量を Pfaffian という.

$$\mathrm{Pf}(A) = \sum_{M} \mathrm{sgn}(M) \prod_{(i,j)\in M} a_{ij} \tag{1}$$

ここで $M$ は $\{1, \cdots, 2n\}$ の $n$ 個のペアへの分割

$$\{(i_1, j_1), \cdots, (i_n, j_n)\} \quad (i_1 < \cdots < i_n,\ i_1 < j_1, \cdots, i_n < j_n) \tag{2}$$

## Pfaffian の他の表し方

Pfaffian は以下の形に変形できる.

$$\mathrm{Pf}(A) = \frac{1}{2^n n!} \sum_{\sigma\in S_{2n}} \mathrm{sgn}(\sigma) \prod_{k=1}^{n} a_{\sigma(2k-1)\sigma(2k)} \tag{3}$$

wedge 積を用いて表す方法もある. まず以下のような $W(A)$ を定義する.

$$W(A) \coloneqq a_{ij} e^i \wedge e^j \tag{4}$$

これは縮約を取っていることに注意. このとき

$$\begin{aligned}
[W(A)]^n &= \sum_{\sigma\in S_{2n}} \prod_{k=1}^{2n} a_{\sigma(2k-1)\sigma(2k)} e^{\sigma(2k-1)} \wedge e^{\sigma(2k)} \\
&= \sum_{\sigma\in S_{2n}} \mathrm{sgn}(\sigma) \left[\prod_{k=1}^{2n} a_{\sigma(2k-1)\sigma(2k)}\right] e^1 \wedge \cdots \wedge e^{2n} \\
&= 2^n n! \mathrm{Pf}(A) e^1 \wedge \cdots \wedge e^{2n}
\end{aligned} \tag{5}$$

ここで, 反対称行列の行列式と Pfaffian の関係について述べる. $n$ 次の反対称行列 $A$ について, その固有方程式 $f(\lambda)$ は

$$
\begin{aligned}
f(\lambda) &= \det(\lambda I - A) = \det\left(\lambda I + A^{\mathrm{T}}\right) \\
&= \det(\lambda I + A) \\
&= (-1)^n f(-\lambda)
\end{aligned}
\tag{6}
$$

よって $n$ が $\begin{pmatrix}\text{偶数}\\\text{奇数}\end{pmatrix}$ のとき, $f(\lambda)$ は $\begin{pmatrix}\text{偶関数}\\\text{奇関数}\end{pmatrix}$ となる.

$n$ が奇数のときは $\det A = 0$ となり, $n$ が偶数のときは固有値は $\lambda, -\lambda$ のペアで現れる.

特に, $n$ が偶数の時について, 以下の関係が成り立つ.

**行列式と Pfaffian の関係**

$2n \times 2n$ の反対称行列 $A$ について

$$
\det A = [\mathrm{Pf}(A)]^2 \tag{7}
$$

**証明** (7) は $a_{ij}$ に関する有限次の多項式恒等式なので, $A$ が実反対称行列の場合について示せば十分である.

補題 A より, ある可逆行列 $S$ が存在し,

$$
S^{\mathrm{T}} A S = \begin{pmatrix}
0 & \lambda_1 & & & \\
-\lambda_1 & 0 & & & \\
& & \ddots & & \\
& & & 0 & \lambda_n \\
& & & -\lambda_n & 0
\end{pmatrix} (= \Lambda) \tag{8}
$$

$\Lambda$ について簡単な計算により

$$
\det \Lambda = (\lambda_1 \cdots \lambda_n)^2 \tag{9}
$$

$$
\mathrm{Pf}(\Lambda) = \lambda_1 \cdots \lambda_n \tag{10}
$$

さらに

$$
\det S^{\mathrm{T}} A S = \det S^{\mathrm{T}} \det A \det S = (\det S)^2 \det A \tag{11}
$$

及び補題 B より

$$\mathrm{Pf}(S^{\mathrm{T}}AS) = (\det S)\mathrm{Pf}(A) \tag{12}$$

これらから

$$(\det S)^2 \det A = \det \Lambda = [\mathrm{Pf}(\Lambda)]^2 = (\det S)^2[\mathrm{Pf}(A)]^2 \tag{13}$$

$\det S \neq 0$ より

$$\det A = [\mathrm{Pf}(A)]^2 \tag{14}$$

□

**補題 A**

$2n \times 2n$ の実反対称行列 $A$ についてある直交行列 $S$ が存在し,

$$S^{\mathrm{T}}AS = \begin{pmatrix} 0 & \lambda_1 & & & \\ -\lambda_1 & 0 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & 0 & \lambda_n \\ & & & -\lambda_n & 0 \end{pmatrix} \tag{15}$$

**証明**

$$B := A^{\mathrm{T}}A = -A^2 \tag{16}$$

とおくと, $B$ は半正定値実対称行列

B の固有値 $\mu > 0$ について, $\mu$ に対応する固有空間 $U_\mu$ を考える.

$U_\mu$ 上の実単位ベクトル $x$ について

$$Bx = \mu x \tag{17}$$

ここで以下のような $y$ を定める

$$y = \frac{Ax}{\sqrt{\mu}} \tag{18}$$

このとき

$$\|y\|^2 = \frac{1}{\mu} x^{\mathrm{T}} A^{\mathrm{T}} A x = \frac{1}{\mu} x^{\mathrm{T}} B x = 1 \tag{19}$$

$$By = -\frac{1}{\sqrt{\mu}} A^3 x = \frac{1}{\sqrt{\mu}} ABx = \sqrt{\mu} Ax = \mu y \tag{20}$$

となり, $y$ も $U_\mu$ 上の実単位ベクトルである. さらに,

$$Ay = \frac{A^2 x}{\sqrt{\mu}} = -\frac{Bx}{\sqrt{\mu}} = -\sqrt{\mu} x \tag{21}$$

となる. 以下より, $x, y$ は直行する

$$x^{\mathrm{T}} y = x^{\mathrm{T}} A x = -y^{\mathrm{T}} x = 0 \tag{22}$$

固有空間 $U_\mu$ の正規直交基底

$U_\mu$ は以下のような正規直交基底 $\left\{x_{\mu 1}, \cdots, x_{\mu n_\mu}, y_{\mu 1}, \cdots, y_{\mu n_\mu}\right\}$ で表せる.

$$Ax_{\mu i} = \sqrt{\mu} y_{\mu i}, \quad Ay_{\mu i} = -\sqrt{\mu} x_{\mu i} \tag{23}$$

これは以下のように構成できる.

$U_\mu$ から実単位ベクトル $x_{\mu 1}$ をとり, $y = \frac{Ax_{\mu 1}}{\sqrt{\mu}}$ と定める.
$\rightarrow \cdots$
$\rightarrow \{x_{\mu 1}, \cdots, x_{\mu i}, y_{\mu 1}, \cdots, y_{\mu i}\}$ と直行する実単位ベクトル $x_{\mu(i+1)}$ をとり, $y = \frac{Ax_{\mu(i+1)}}{\sqrt{\mu}}$ と定める.
$\rightarrow \cdots$
このとき, $i < j$ について, 定義より $x_{\mu j}$ は $x_{\mu i}, y_{\mu i}$ と直交するので

$$x_{\mu i}^{\mathrm{T}} x_{\mu j} = 0 \tag{24}$$

$$x_{\mu i}^{\mathrm{T}} y_{\mu j} = x_{\mu i}^{\mathrm{T}} A x_{\mu j} = -y_{\mu i}^{\mathrm{T}} x_{\mu j} = 0 \tag{25}$$

$$y_{\mu i}^{\mathrm{T}} x_{\mu j} = 0 \tag{26}$$

$$y_{\mu i}^{\mathrm{T}} y_{\mu j} = x_{\mu i}^{\mathrm{T}} B x_{\mu j} = \mu x_{\mu i}^{\mathrm{T}} x_{\mu j} = 0 \tag{27}$$

つまり, $\left\{x_{\mu 1}, \cdots, x_{\mu n_\mu}, y_{\mu 1}, \cdots, y_{\mu n_\mu}\right\}$ は正規直交基底をなす.

$B$ の固有値 0 の固有空間 $U_0$ については, $U_0$ に正規直交基底 $\{z_1, \cdots, z_l\}$ を構成すると,

$$Bz_i = 0 \tag{28}$$

より

$$\|Az_i\|^2 = z_i^{\mathrm{T}} B z_i = 0 \tag{29}$$

より

$$Az_i = 0 \tag{30}$$

$B$ は Hermite なので, 異なる固有値の固有空間は直交する. よって, $B$ のうち非 0 の固有空間の正規直交基底を集めて $x_1, \cdots, x_m, y_1, \cdots, y_m$ とし, $(2m + l = 2n)$ 直交行列

$$S := (x_1, y_1, \cdots x_m, y_m, z_1, \cdots, z_l) \tag{31}$$

を定めると

$$S^{\mathrm{T}} A S = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{\mu_1} & & & \\ -\sqrt{\mu_1} & 0 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & 0 & \sqrt{\mu_n} \\ & & & -\sqrt{\mu_n} & 0 \end{pmatrix} \tag{32}$$

ここで, $\mu_{2m+1}, \cdots, \mu_{2n} = 0$. □

**補題 B**

$2n \times 2n$ の反対称行列 $A$ 及び可逆行列 $S$ について

$$\mathrm{Pf}(S^{\mathrm{T}} A S) = (\det S)\mathrm{Pf}(A) \tag{33}$$

**証明**

$$\Lambda := S^{\mathrm{T}} A S \tag{34}$$

について,

$$\Lambda_{ij} = (S^{\mathrm{T}})_{ik} a_{kl} S_{lj} = a_{kl} S_{ki} S_{lj} \tag{35}$$

よって

$$
\begin{aligned}
W(\Lambda) &= \Lambda_{ij} e^i \wedge e^j = a_{kl} S_{ki} S_{lj} e^i \wedge e^j \\
&= a_{kl} f^k \wedge f^l
\end{aligned}
\tag{36}
$$

これは $e^i$ から $f^i := S_{ij} e^j$ への基底変換と考えることができ,

$$
[W(\Lambda)]^n = 2^n n! \mathrm{Pf}(A) f^1 \wedge \cdots \wedge f^{2n} \tag{37}
$$

これと

$$
f^1 \wedge \cdots \wedge f^{2n} = (\det S) e^1 \wedge \cdots \wedge e^{2n} \tag{38}
$$

から,

$$
\begin{aligned}
[W(\Lambda)]^n &= 2^n n! \mathrm{Pf}(\Lambda) e^1 \wedge \cdots \wedge e^{2n} \\
&= 2^n n! \mathrm{Pf}(A) (\det S) e^1 \wedge \cdots \wedge e^{2n}
\end{aligned}
\tag{39}
$$

よって

$$
\mathrm{Pf}(\Lambda) = (\det S) \mathrm{Pf}(A) \tag{40}
$$

□

**行列式の wedge 積を用いた表し方**

$n \times n$ の行列 $A$ の行列式は

$$
\det A = \sum_{\sigma \in S_n} \mathrm{sgn}(\sigma) \prod a_{i\sigma(i)} \tag{41}
$$

であり, wedge 積を用いると

$$
f^i = a_{ij} e^i \tag{42}
$$

なる基底変換をした際に

$$
f^1 \wedge \cdots \wedge f^n = (\det A) e^1 \wedge \cdots \wedge e^n \tag{43}
$$

となる