

Pfaffian

Pfaffian

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

$$\text{Pf}(A) = \sum_M \text{sgn}(M) \prod_{(i,j) \in M} a_{ij} \quad (1)$$

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

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

Pfaffian の他の表し方

Pfaffian は以下の形に変形できる.

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

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.

$$W(A) := a_{ij} e^i \wedge e^j \quad (4)$$

これは縮約を取っていることに注意. このとき

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

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

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

よって n が $\begin{pmatrix} \text{偶数} \\ \text{奇数} \end{pmatrix}$ のときは、 $f(\lambda)$ 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

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

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、

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

Λ について簡単な計算により

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

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

さらに

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

及び補題 B より

$$\text{Pf}(S^T A S) = (\det S) \text{Pf}(A) \quad (12)$$

これらから

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

$\det S \neq 0$ より

$$\det A = [\text{Pf}(A)]^2 \quad (14)$$

□

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,

$$S^T A S = \begin{pmatrix} 0 & \lambda_1 & & \\ -\lambda_1 & 0 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 0 & \lambda_n \\ & & & -\lambda_n & 0 \end{pmatrix} \quad (15)$$

証明

$$B := A^T A = -A^2 \quad (16)$$

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, μ に対応する固有空間 U_μ を考える.

U_μ 上の実単位ベクトル x について

$$Bx = \mu x \quad (17)$$

ここで以下のような y を定める

$$y = \frac{Ax}{\sqrt{\mu}} \quad (18)$$

このとき

$$\|y\|^2 = \frac{1}{\mu} x^T A^T A x = \frac{1}{\mu} x^T B x = 1 \quad (19)$$

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

となり, y も U_μ 上の実単位ベクトルである. さらに,

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

となる. 以下より, x, y は直行する

$$x^T y = x^T A x = -y^T x = 0 \quad (22)$$

固有空間 U_μ の正規直交基底 —

U_μ は以下のようないくつかの正規直交基底 $\{x_{\mu 1}, \dots, x_{\mu n_\mu}, y_{\mu 1}, \dots, y_{\mu n_\mu}\}$ で表せる.

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

これは以下のように構成できる.

U_μ 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.

$\rightarrow \dots$

$\rightarrow \{x_{\mu 1}, \dots, x_{\mu i}, y_{\mu 1}, \dots, y_{\mu i}\}$ 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.

$\rightarrow \dots$

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

$$x_{\mu i}^T x_{\mu j} = 0 \quad (24)$$

$$x_{\mu i}^T y_{\mu j} = x_{\mu i}^T A x_{\mu j} = -y_{\mu i}^T x_{\mu j} = 0 \quad (25)$$

$$y_{\mu i}^T x_{\mu j} = 0 \quad (26)$$

$$y_{\mu i}^T y_{\mu j} = x_{\mu i}^T B x_{\mu j} = \mu x_{\mu i}^T x_{\mu j} = 0 \quad (27)$$

つまり, $\{x_{\mu 1}, \dots, x_{\mu n_\mu}, y_{\mu 1}, \dots, y_{\mu n_\mu}\}$ 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 $\{z_1, \dots, z_l\}$ を構成すると、

$$Bz_i = 0 \quad (28)$$

より

$$\|Az_i\|^2 = z_i^T B z_i = 0 \quad (29)$$

より

$$Az_i = 0 \quad (30)$$

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 $x_1, \dots, x_m, y_1, \dots, y_m$ とし、 $(2m + l = 2n)$ 直交行列

$$S := (x_1, y_1, \dots, x_m, y_m, z_1, \dots, z_l) \quad (31)$$

を定めると

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

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

補題 B

$2n \times 2n$ の反対称行列 A 及び可逆行列 S について

$$\text{Pf}(S^T A S) = (\det S) \text{Pf}(A) \quad (33)$$

証明

$$\Lambda := S^T A S \quad (34)$$

について、

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

よって

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

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,

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

これと

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

から,

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

よって

$$\text{Pf}(\Lambda) = (\det S) \text{Pf}(A) \quad (40)$$

□

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

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

であり, wedge 積を用いると

$$f^i = a_{ij} e^i \quad (42)$$

なる基底変換をした際に

$$f^1 \wedge \cdots \wedge f^n = (\det A) e^1 \wedge \cdots \wedge e^n \quad (43)$$

となる