ユニタリー行列に対する双直交行列を用いた分解

1　依頼内容

U を $U(N)$ ないし $SU(N)$ の $N \times N$ 複素行列とします。このとき、次のような分解が可能であるように思えます。

$$U = ADB, \tag{1}$$

ただし A, B は $SO(N)$ の実回転行列、D は $\exp(i\mathrm{diag}(\phi_1, \phi_2, ..., \phi_N))$ となるような複素対角行列で、U が $SU(N)$ のときは ϕ_i の総和は 0 とします。$A, D, B \in U(N)$ or $SU(N)$ なのは明らかなのでこれらの積も $U(N)$ or $SU(N)$ になります。自由度を数えると A, B については $N(N-1)/2$、D については N or $N-1$ で、合わせて N^2 or N^2-1 で、数合わせの上ではこれでよいように見えます。

(1) このような分解は常に可能か、可能なら A,B の符号を除いて一意か？

(2) このような分解をするには、実際にどんな計算をすればよいのか？です。

2　質問 (1), (2) への回答

(1)：この分解は可能です [1]．$\phi_1, \cdots, \phi_N(-\pi/2 < \phi_i \leq \pi/2)$ に縮退がない限り，A,B の符号を除いて一意です．(ただし，$\phi_1, \cdots, \phi_N$ の並び順を決めていない場合には，$\phi_1, \cdots, \phi_N$ を並び替える自由度が A, B に残ります．決めていると符号を除いて一意．)

(2)：次の手続きで数値的に用意できます．

行列演算を数値的に実行する LAPACK などを用いて [2]，$U^T U$ を対角化，

$$B(U^T U)B^T = \exp\{i\,\mathrm{diag}(\theta_1, \theta_2, \cdots, \theta_N)\}, \tag{2}$$

します．対角化に使われる行列 B は実直交に取れ，これが分解 (1) の B を与えます．

---

[1] ただし，(1) $U(N)$ 群では，$\det(B) = 1$ に取ったときに $\det(A) = -1$ になる可能性 ($A \notin SO(N)$) もあるように思います．(2) $SU(N)$ 群では，一般に $\sum_i \phi_i = 2\pi\times$ (整数) となり，必ずしも $\sum_i \phi_i = 0$ でないと思います．

[2] 例えば，一般行列用の対角化ルーチンを用い，B が実直交になるように後処理すれば良さそうです．

また，分解 (1) の ϕ_i は，

$$\phi_i = \theta_i/2, \qquad (-\pi < \theta \le \pi), \tag{3}$$

で与えられます．A は

$$A = UB^T D^{-1}, \tag{4}$$

で与えられます．

3　分解の証明

証明には，素粒子標準模型の小林-益川行列の双ユニタリー行列による対角化と同じテクニックを用います．$U(N)$ の場合の証明は以下の通りです．

任意のユニタリー行列 $U \in U(N)$ は適当なエルミート行列 H を用いて $U = \mathrm{e}^{iH}$ と書けます．[3] 一方，$U^T U$ は対称行列かつユニタリー行列なので，実対称行列 S を用いて，[4]

$$U^T U = \mathrm{e}^{iS}, \tag{5}$$

と表せます．実対称行列 S は実直交行列 B を用いて

$$BSB^T = \mathrm{diag}(\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_N), \tag{6}$$

(α_i は実数) と対角化でき，これを (5) 式に適用すると

$$B(U^T U)B^T = \exp\{i\,\mathrm{diag}(\theta_1, \theta_2, \cdots, \theta_N)\}, \tag{7}$$

となります (ただし，$-\pi < \theta \le \pi$).

ここで，(7) を用いて $U^T U$ 行列の平方根 $\sqrt{U^T U}$ を

$$\sqrt{U^T U} = B^T \left(\exp\{i\,\mathrm{diag}(\phi_1, \phi_2, \cdots, \phi_N)\}\right) B, \tag{8}$$

と定義します．この平方根もユニタリー行列です．ただし，

$$\phi_i = \theta_i/2, \quad (-\pi/2 < \phi_i \le \pi/2), \tag{9}$$

です．この定義より，

$$\left(\sqrt{U^T U}\right)^2 = U^T U \tag{10}$$

$$\left(\sqrt{U^T U}\right)^{-1} \times \left(\sqrt{U^T U}\right) = 1 \tag{11}$$

がわかります．$\left(\sqrt{U^T U}\right)^{-1}$ は (8) 式の $\phi_i \to -\phi_i$ としたものです．

[3] エルミート共役 (†) は，複素共役 (∗) と転置 (T) を同時に取ったもの，$H = H^\dagger = H^{*T}$.
[4] $S^\dagger = S = S^T$ より，S は実対称．

さて，問題のユニタリー行列 U は，次で定義される実直交行列 O [5]，

$$O \equiv U * \left(\sqrt{U^T U}\right)^{-1}, \tag{14}$$

を用いて，

$$U = O * \sqrt{U^T U}, \tag{15}$$

と分解できます．(8) 式を用いつつ，実直交行列 $A \equiv OB^T$ と置くと，分解

$$U = ADB, \tag{16}$$

を得ます．ただし，$D = \exp\{i\,\mathrm{diag}(\phi_1, \phi_2, \cdots, \phi_N)\}$ です．

[分解の一意性]:

D の一意性については，分解 (16) から出発し，再度 $U^T U$ を取ってみれば明らかです．D^2 は (7) 式の真ん中の式になり，$\phi_1, \cdots, \phi_N$ に縮退がなく，並び方を固定している限り一意であることがわかります．

一方，A, B の一意性は次のように示せます．異なる A', B' を用いて，分解 (16) ができたとします．記号を簡単にするために，A', B' と A, B の違いを $A' = AX$, $B' = Y^T B$ と置いておきます．すると，

$$D^{-1} X D = Y, \tag{17}$$

を得ます．この式を成分表示すると，

$$Y_{ij} = X_{ij} \mathrm{e}^{-i(\phi_i - \phi_j)}, \tag{18}$$

となります．$-\pi/2 < \phi_i \leq \pi/2$，かつ，$\phi_i$ に縮退がなければ，非対角成分 $X_{ij} = 0 (i \neq j)$ でなければ，X, Y が実である事実と矛盾します．非対角成分がゼロの X, Y は，対角に ± 1 の何れかを取り，これより，A, B は符号を除いて一意であることがわかります．

5

$$O^\dagger O = 1 \tag{12}$$

$$O^T O = \left(\sqrt{U^T U}\right)^{-1} (U^T U) * \left(\sqrt{U^T U}\right)^{-1} = 1. \tag{13}$$