Matrix transpose の謎
なぜ$(AB)^T = B^T A^T$なのか

Yamauchi, Hitoshi
Nichiyou kenkyu aikouka
Berlin, Germany

2009-5-24(Sun)

Contents

Abstract

Matrix の乗算の transpose は $(AB)^T = B^T A^T$ である．もちろん，これが定義と言われればそれまでだが，ここではなぜこうなのかを考察する．まずは vector の内積から $\left[\boldsymbol{u}^T \boldsymbol{v}\right]^T = \boldsymbol{v}\boldsymbol{u}^T$ が自然な定義と見えてくることを示す．そして Matrix を連立一次方程式という視点ではなく，むしろ変換という視点から見直すことによって，Matrix の乗算が実は内積を含んでいることを示す．これらと Vector が Matrix の特殊形であることから，$(AB)^T = B^T A^T$ の理由を理解することができるだろう．

1 Introduction

今回の話は行列の乗算の転置

$$(AB)^T = B^T A^T \tag{1}$$

についてである．私はこれをとても不思議に思った．私にとって転置は operator であり，この分配法則が不思議だったのである．たとえば，-1 をかけることを考えてみる．

$$(-1) \cdot (a + b) \quad = \quad (-1 \cdot a) + (-1 \cdot b)$$

ここでは a と b の位置の交換は起こっても良いが，通常は起こらない．つまり，$b\ a$ のような順にはならないのだ．しかし，転置の場合には，

$$(AB)^T = \underbrace{B^T A^T}_{AB\ \text{の順が}\ BA\ \text{になる}} \tag{2}$$

のである．どうしてこんなことが起こるのかということは，要素毎に比較をすると確かにこうでないといけないのであるがどうも納得いかなかったのである．しかし，最近読んだ本にこの説明があってなるほどと思ったのでここで紹介したい．

行列の乗算そのものを考察する前に，行列の特殊形であるベクトルの乗算の一種，ベクトルの内積から話を始めることにしよう．そしてその一般化として行列の乗算を考えることにする．単純なものの方が通常は理解しやすいので，単純なものをまず考えてそれを一般化するという方法である．

2 ベクトルの内積

二つのベクトル $(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v})$ を考えてみる．冗長な上に一般的な話をするのは面倒なので，教科書では省略されることも多いのであるが，ここでは要素を書いてみよう．要素を書く場合には

$$\boldsymbol{u} = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix} \tag{3}$$

として書いて一般的なベクトルを書く方が良いが，毎回こうするのは面倒なので，3 次元の場合を書いて，それから一般化のものを想像してもらうことにしよう．ここで今回の主役である transpose (転置) の ^{T} は行と列を入れ換えるという記号である．

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{u}^T &= \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{pmatrix}^T \\
&= \begin{pmatrix} u_1 & u_2 & u_3 \end{pmatrix} \qquad (4)
\end{aligned}
$$

さて，二つのベクトルの内積はご存知のこととしよう．内積 $(\boldsymbol{uv})$ は，

$$
\begin{aligned}
(\boldsymbol{uv}) &= \boldsymbol{u}^T \boldsymbol{v} \\
&= \begin{pmatrix} u_1 & u_2 & u_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix} \\
&= u_1v_1 + u_2v_2 + u_3v_3 \qquad (5)
\end{aligned}
$$

ここまでは良いであろう．ここで一歩進んでこの転置を考えてみよう．なぜ一歩進むかというと，この記事は転置についての記事なので転置について一歩進みたいからである．ではなぜ転置というものを使いたいかという疑問のある方もおられよう．しかしそれは私がこれを面白いと思うという感情を持っているからであって，数学的には説明できない．数学的な insight を上手く説明してくれる良い本はいくつもあり，それにつけ加えるものは私には何もない．しかし，どうしてこういうことに興味をもったのかという部分は私のものであり，これは書くことができる．多くの数学の本はその美しさを数学の中だけで取り出して見せようとする．これこそが数学の美であるのは賛成できるのだが，それはプライドの高い女王の美であり，近付くことは難しい．私はこの女王の美を身近なものとして理解したいので，女王に対する個人の感情を書くのである．しかし女王の美を身近なものにすることは一方でその美のほんの一面だけを見ることになることも多い，つまり他の面を見逃す，という危険性もある．

さて，話を戻して一歩進んで転置を考えることにしよう．

$$
(u_1v_1 + u_2v_2 + u_3v_3)^T = ? \qquad (6)
$$

内積は実はスカラ値であるので，転置をとっても変化しない．それでは，ベクトルの形であってもやはり転置をとっても同じ値になるべきである．つまり，

$$
\begin{aligned}
(\boldsymbol{uv})^T &= (u_1v_1 + u_2v_2 + u_3v_3)^T \\
&= (u_1v_1 + u_2v_2 + u_3v_3) \\
&= (\boldsymbol{uv}) \qquad (7)
\end{aligned}
$$

のはずである．

転置しても内積はスカラ値なので変化しないということをヒントに内積の転置に関してもう少し考えてみよう．

もし，転置に分配法則が成立するのであれば，

$$
\begin{aligned}
\left[\boldsymbol{u}^T \boldsymbol{v}\right]^T &= \left[\boldsymbol{u}^T\right]^T \left[\boldsymbol{v}\right]^T \\
&= \boldsymbol{u}\boldsymbol{v}^T \qquad (8)
\end{aligned}
$$

である．(ここで転置の転置は元に戻る $(\boldsymbol{u}^{T^T} = \boldsymbol{u})$ ことを用いた．) すると，

$$
\begin{aligned}
(\boldsymbol{uv})^T &= \left[\boldsymbol{u}^T \boldsymbol{v}\right]^T \\
&= \left[\begin{pmatrix} u_1 & u_2 & u_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix}\right]^T \\
&= \left[\begin{pmatrix} u_1 & u_2 & u_3 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix}^T\right] \\
&= \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 & v_2 & v_3 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} u_1v_1 & u_1v_2 & u_1v_3 \\ u_2v_1 & u_2v_2 & u_2v_3 \\ u_3v_1 & u_3v_2 & u_3v_3 \end{pmatrix} \\
&\neq (\boldsymbol{uv}) \qquad (9)
\end{aligned}
$$

であってスカラ値ですらなく，おかしいことになってしまう．(ベクトルの乗算が行列になるのはわからないという読者もいるかもしれない．式 9は Tensor 積という形であって，今回の話からそれてしまうので説明できないが，興味のある読者は調べてみると良いだろう．) 式 9 から，

$$
\left[\boldsymbol{u}^T \boldsymbol{v}\right]^T \neq \boldsymbol{u}^{T^T} \boldsymbol{v}^T \qquad (10)
$$

ということがわかる．

各ベクトルの転置である $\boldsymbol{u}^{T^T}$ と $\boldsymbol{v}^T$ を使ったものが同じになるためには，

$$
(\boldsymbol{uv})^T = \begin{pmatrix} v_1 & v_2 & v_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{pmatrix} \qquad (11)
$$

という形，つまり $\boldsymbol{u}$ と $\boldsymbol{v}$ の位置の入れかわりがあれば良い．これは，

$$
\begin{aligned}
(\boldsymbol{uv})^T &= \left[\boldsymbol{u}^T \boldsymbol{v}\right]^T \\
&\rightarrow \begin{pmatrix} v_1 & v_2 & v_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{pmatrix} \\
&= \boldsymbol{v}^T \boldsymbol{u} \\
&= (\boldsymbol{v}^{T^T} \boldsymbol{u}) \\
&= (\boldsymbol{vu}) \qquad (12)
\end{aligned}
$$

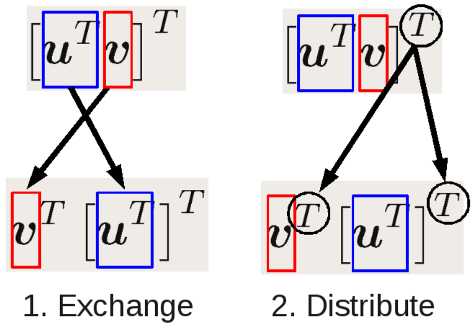

Figure 1: Anatomy of dot product vector transpose

ここで式 12 中の → を認めることができれば，結局，

$$
\begin{aligned}
\left[\boldsymbol{u}^T \boldsymbol{v}\right]^T &= \boldsymbol{v}^T \left[\boldsymbol{u}^T\right]^T \\
&= \boldsymbol{v}^T \boldsymbol{u} \qquad (13)
\end{aligned}
$$

である．反対する理由がないのでこれは成立するとしよう．よく見ると，図 1 にあるように前後を入れ換えてそれぞれを転置したものになっている．

このような十分条件だけでは気に入らない方もいるかもしれないが，転置を一回使うことと 2 つのベクトルの組合せで同じ値になるのはこの組合せしかないと思うのでこれで十分であろう．

ここまできたら，あとは行列がベクトルの内積とどうかかわっているかがわかれば良い．話が見えたという読者もおられよう．

これは文献 [1] にあるものを補足した説明である．この本はこういうことを丁寧に書いてくれているのでおすすめである．Farin の本は難しいという印象があって手を出さなかったのだが，この本は易しく，読み易い．読んでいてとても楽しかった．

3 行列の乗算

私が習ったカリキュラムでは行列は最初，連立一次方程式として導入された．

$$
\begin{aligned}
y_1 &= a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n \\
y_2 &= a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n \\
\vdots &\;\;\vdots\;\;\vdots \\
y_n &= a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n \qquad (14)
\end{aligned}
$$

よく考えてみると，行列どうしの掛け算はこのような導入からは想像が難しい気がする．まず，この中に既に内積が隠されていることに気がつく人がどの位いるのであろうか．私はずっと後になるまで気がつかなかった．y_1 は $a_{[1\ldots n]1}$ と $x_{[1\ldots n]}$ の内積である．

$$
\begin{aligned}
y_1 &= a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n \\
&= \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \qquad (15)
\end{aligned}
$$

私の好みのもう一冊の本 [2] は，行列は座標変換の表現でもある，つまり変換であるという観点で行列に関して丁寧に説明している．この考えに基づけば，行列は座標を表現するベクトルを並べたものというふうに見ることができる．どのように考えようとも，これらは全て同じ行列であって，その形式的な演算などは常に同じである．

数学における強い考えば，この「形が同じならばそれは同じである」という考えである．これによって違うものの同じ側面を考え，一見違うものであるのに，その側面の同型性から，違うものがどのように振舞うかを予測するのである．人間には個性があり，まったく同じという人はまずありえないだろう．しかし，趣味の似た人というものはあり，その人達には共通の性質がある．もし，この趣味の似た人達があるものを買う傾向があるとすれば，同じ趣味を持つ人達は同じものを買う傾向があるかもしれない．そういう考えを押しすすめていくと，まったく違う国のまったく違う年代の人であっても同じものを買うかもしれないのだ．これが数学的な考えの基本にある．「まったく違うものの中に似た部分を探すこと」が数学の一面と言えると思う．ここでは連立一次方程式と座標変換の共通点である．

行列を座標を示すベクトルの組であると見た時，座標軸のベクトルを次のように書くことで表現できる．ここでは三次元のみを考えた．

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{a}_1 &= \begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ a_{31} \end{pmatrix} \\
\boldsymbol{a}_2 &= \begin{pmatrix} a_{12} \\ a_{22} \\ a_{32} \end{pmatrix} \\
\boldsymbol{a}_3 &= \begin{pmatrix} a_{13} \\ a_{23} \\ a_{33} \end{pmatrix} \qquad (16)
\end{aligned}
$$

ここで，行列 A を

$$
\begin{aligned}
A &= \begin{pmatrix} \boldsymbol{a}_1 & \boldsymbol{a}_2 & \boldsymbol{a}_3 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} a_{11} & a_{21} & a_{31} \\ a_{12} & a_{22} & a_{32} \\ a_{13} & a_{23} & a_{33} \end{pmatrix} \qquad (17)
\end{aligned}
$$

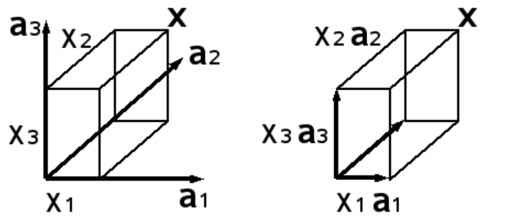

Figure 2: A three dimensional coordinate system

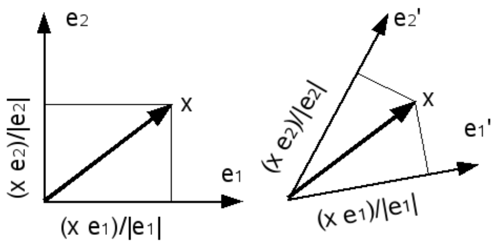

Figure 3: Coordinate system and projection. In any coordinate system, the coordinate value itself is given by projection = dot products.

と書く．図 2 にこのようにして作った座標系を示しておこう．ここで，ある点の座標 $\boldsymbol{x}$ は以下のようになる．

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x} &= \boldsymbol{a}_1 x_1 + \boldsymbol{a}_2 x_2 + \boldsymbol{a}_3 x_3 \\ &= \begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{12} \\ a_{13} \end{pmatrix} x_1 + \begin{pmatrix} a_{21} \\ a_{22} \\ a_{23} \end{pmatrix} x_2 + \\ & \quad \begin{pmatrix} a_{31} \\ a_{32} \\ a_{33} \end{pmatrix} x_3 \end{aligned} \tag{18}$$

ここで x_1, x_2, x_3 はそれぞれ $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$ 軸に沿った $\boldsymbol{x}$ を投影した長さである．ここで,「投影した」というのがでてきた．これは内積である．三次元でもまだ煩雑なので，二次元の図 3 で見てみよう．ある座標の値はそれぞれの内積となっている．座標変換はこの $\boldsymbol{x}$ 自体が座標軸の要素である．各座標がある座標に投影されることで変換が行なわれる．

そこで式 18 を内積が見える形に書き直すと，

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x} &= \boldsymbol{a}_1 x_1 + \boldsymbol{a}_2 x_2 + \boldsymbol{a}_3 x_3 \\ &= \begin{pmatrix} \boldsymbol{a}_1 & \boldsymbol{a}_2 & \boldsymbol{a}_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{19}$$

座標変換は図 4のように 2 つの座標系の関係を見るものである．三次元の場合 $\boldsymbol{x}$ だけでなく 3 つの $\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_3$ 軸があるので，

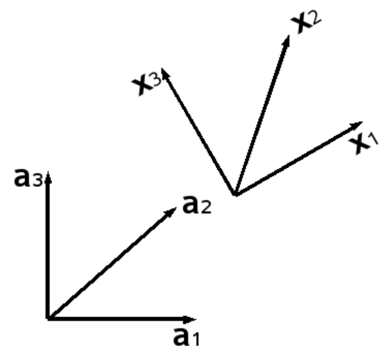

Figure 4: Two coordinate systems

$$\begin{aligned} & AX \\ &= \begin{pmatrix} \boldsymbol{a}_1 & \boldsymbol{a}_2 & \boldsymbol{a}_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \boldsymbol{x}_3 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} a_{11} & a_{21} & a_{31} \\ a_{12} & a_{22} & a_{32} \\ a_{13} & a_{23} & a_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{11} & x_{21} & x_{31} \\ x_{12} & x_{22} & x_{32} \\ x_{13} & x_{23} & x_{33} \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{20}$$

行列の掛け算と内積の関係が見えたであろうか．

4　行列の乗算と転置の関係

以上の議論から転置の話に戻ると，それぞれの内積を正しく計算するためには $(AB)^T = B^T A^T$ でなければならないことがわかると思う．

ここでは内積と Tensor の演算から転置がこの通りでないといけないという議論に持ってきたが，standard の証明の方が単純でわかりやすいという意見も聞いているので，それも示しておこう．

$$\begin{aligned} (B^T A^T)_{ij} &= (b^T)_{ik} (a^T)_{kj} \\ &= \sum_k b_{ki} a_{jk} \\ &= \sum_k a_{jk} b_{ki} \\ &= (AB)_{ji} \\ &= (AB)^T \end{aligned} \tag{21}$$

式 21 の理由はこの小文で示した．確かにこの証明は単純で美しい．単に私の場合には，最初にこれを見た時にはそれが読み切れなかったのである．式 21 の後ろにこれだけのものが隠れているというのは私にとって楽しいことであった．

Acknowledgments

Thanks to C. Rössl for explaining me about coordinate transformation. Thanks to L. Gruen-

schloss to make a suggestion to add the last proof.

References

[1] Gerald Farin Dianne Hansford. *Practical Linear Algebra; A Geometry Toolbox*. A K Peters, Ltd., 2005.

[2] 杉原厚吉. *グラフィックスの数理*. 共立出版, 1995.