数理解析研究所講究録
129巻 1971年 81-99



# 一般逆行列の数値アルゴリズム

日本アイ・ビー・エム　渋谷 政昭
慶大工，管理工学　篠崎 信雄
統計数理研究所　田辺 国士

## 1. 一般逆行列のアルゴリズム

$A$を$m \times n$，階数$r \leq \min(m, n)$の実数行列とする．次の4条件を満たし，$A$により一意に定まる$n \times m$実数行列$G$を$A$の Moore - Penrose 一般逆行列とよび，$A^{\dagger}$と書く．

(1.1)　$AGA = A$，　(1.2)　$GAG = G$，

(1.3)　$(AG)^T = AG$，　(1.4)　$(GA)^T = GA$．

(1.1)を満たすような$G$をすべて，単に一般逆行列とよぶ．他の3条件を必ずしも満たさないような$G$を求める問題もあるが，ここでは Moore - Penrose 一般逆行列の計算だけを問題とする．他の型の一般逆行列について，Moore - Penrose 一般逆行列の性質について，詳しくは Sibuya (1970) を見よ．必要な性質についてはそのときどきに触れる．

Moore - Penrose 一般逆行列を求めるアルゴリズムは次のように分類することができる．

I 直接法

- 分解
  - 最大階数行列への分解
  - 特異値分解
- 縁取り
- $A^TA$ の一般逆行列を用いる方法
- Pyle の勾配射影法
- Greville の逐次拡大法

II 反復法

先に結論を言えば，注目すべきものは比較的簡単な，最大階数行列への分解，縁取り，反復法である．

## 2. 最大階数行列への分解

いくつかの事実を準備のために述べておく．

1° $P, Q$ が直交行列ならば $(PAQ)^\dagger = Q^T A^\dagger P^T$．

2° $(A^T)^\dagger = (A^\dagger)^T$．

3° $A = BC$，$B: m \times r$，$C: r \times n$ ならば $A^\dagger = C^\dagger B^\dagger$．

4° 上の $B$, $C$ について $B^\dagger = (B^TB)^{-1}B^T$，$C^\dagger = C^T(CC^T)^{-1}$．

5° $\begin{bmatrix} A \\ 0 \end{bmatrix}^\dagger = [A^\dagger, 0]$，$[A, 0]^\dagger = \begin{bmatrix} A^\dagger \\ 0 \end{bmatrix}$

まず与えられた行列 $A$ を 3° の形に分解するのに 3 つの方

法が考えられる.

.1　ガウス消去法（LU分解）. 適当に行およびるりの入れ換えを行なう（要の選択）ことにより消去法で

(2.1)　$$A=LU$$

という形に分解できる. Lは「下台形」, Uは「上台形」である. Lの「対角」要素は1, 他の要素は絶対値が1より小さい. もしも「要の完全選択」を行なっているならばUの対角要素をとり出した

(2.2)　$$A=LDU$$

という変形も意味がある.

.2　ハウスホルダー変換. Aの左より直交行るりQを乗ずることにより

(2.3)　$$QA=V=\begin{bmatrix} U \\ O \end{bmatrix}$$ , Uは $n\times n$ 上台形.

と変形できる.

(2.4)　$$A^{\dagger}=V^{\dagger}Q=U^{\dagger}Q_n$$ , $Q_r$ は $Q$ の最初の $n$ 行.

2次元平面内での回転を繰り返すギヴンスの方法でも同じ変形ができるが計算量が増すからここでは考察の対象としない.

.3　グラム＝シュミットの直交化. $\mathcal{R}(A)$ の正規直交基底を $q_1,\cdots,q_n$ , $Q=[q_1,\cdots,q_n]$ とすると,

(2.5)　$$A=QU$$ , Uは $n\times n$ 上台形, $Q^TQ=I$.

これから

(2.6) $$A^{\dagger} = U^{\dagger}Q^{\dagger} = U^{\dagger}Q^{T}.$$

以上3つの方法により問題は最大階数をもつL，Uなどの行列の Moore－Penrose 逆行列を求めることに帰着する．以下では $r \times n$ $(r \leqq n)$ 行列Uについて考える．

.01　正則行列の逆行列による方法．前節の4°に従って

(2.7) $$U^{\dagger} = U^{T}(UU^{T})^{-1}$$

を計算する．$(UU^{T})^{-1}$ の計算には次の方法が考えられる．

.01a　$UU^{T}$ のコレスキー分解を $FF^{T}$ とすれば，

$$(UU^{T})^{-1} = (F^{-1})^{T}F^{-1}.$$

若干の技巧で平方根の計算を避けることもできる．

.01b　$n \times r$ 行列 $U^{T}$ を直交化して

(2.8) $$U^{T} = QR \quad , \quad R\text{は上3角行列}.$$

と分解すれば

(2.9) $$(UU^{T})^{-1} = (R^{T}R)^{-1} = R^{-1}(R^{-1})^{T}$$

.02　ハウスホルダー変換．

(2.10) $$PU^{T} = \begin{bmatrix} R \\ O \end{bmatrix} \quad , \quad R\text{は上3角行列}.$$

と分解すれば

(2.11) $$U^{\dagger} = P^{T}\begin{bmatrix} (R^{-1})^{T} \\ O \end{bmatrix} = (P_r)^{T}(R^{-1})^{T}$$

$P_r$ は $P$ の最初の $r$ 行

.03 グラム＝シュミットの直交化．$\mathcal{R}(U^T)$ の正規直交基底を $n_1, \cdots, n_r$，$N=[n_1, \cdots, n_r]$ として

(2.12) $$U^T = NR \quad , \quad R \text{ は上3角行列}$$

とすれば $N^\dagger = N^T$ であるから

(2.13) $$U^\dagger = N(R^{-1})^T$$

最大階数行列の一般逆行列を求める上の3方法により，与えられた課題は解けたが，その変形として

(2.14) $$U = [S, T] = S[I, G]$$

$$G = S^{-1}T \quad , \quad S \text{ は上3角行列，}$$

(2.15) $$U^\dagger = [I, G]^\dagger S^{-1}$$

によるものが考えられる．この変形は比較的簡単であるから $[I, G]^\dagger$ の計算が $U^\dagger$ の計算に比べて，それに見合うだけ減少すれば意味をもつ．

.04 正則行列の逆行列による方法．

(2.16) $$[I, G]^\dagger = \begin{bmatrix} I \\ G^T \end{bmatrix} [I + GG^T]^{-1}$$

$(I+GG^T)^{-1}$ の計算は前と同様にコレスキー分解 $(I+GG^T) = FF^T$ によりできる．

.05 ハウスホルダー変換．.02 と同様に

(2.16) $$P\begin{bmatrix} I \\ G^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix} \qquad R \text{ は上3角}$$

とすれば

$$[I, G]^{\dagger} = (P_r)^T (R^{-1})^T$$

となるが，今の場合 $(P_r)^T R = \begin{bmatrix} I \\ G^T \end{bmatrix}$ であるから，$P_r$ の最初の $r$ 列を $P_{rr}$ とすれば

(2.17) $$[I, G]^{\dagger} = (P_r)^T P_{rr}$$

となる．

.06 グラム＝シュミットの直交化．.03 と同様に

(2.18) $$\begin{bmatrix} I \\ G^T \end{bmatrix} = NR \quad ; \quad N^T N = I, \quad R \text{ 上三角}$$

と分解すれば

$$[I, G]^{\dagger} = N(R^{-1})^T$$

となるが今の場合，$N$ の最初の $r$ 行を $N_r$ とすれば $N_r R = I$ だから $N_r = R^{-1}$，したがって

(2.19) $$[I, G]^{\dagger} = N(N_r)^T.$$

何人かの著者が，.04 の方法とグラム＝シュミット直交化を結びつけ

$$I + GG^T = R^T R$$

$$[I, G]^{\dagger} = \begin{bmatrix} I \\ G^T \end{bmatrix} (I + GG^T)^{-1} = \begin{bmatrix} I \\ G^T \end{bmatrix} N_r N_r^T$$

する方法を提唱しているが，もちろんこの式は (2.19) と同等であり，演算としてはむだをしている．

.01〜.03 と .04〜.06 を比較すると，だいたい分解してから消去するか，消去してから分解するかという違

いであり，大差はない．$A^\dagger$ の分解によるアルゴリズムとしては .1～.3 と .01～.06 を組み合わせた，だいたい18通りが考えられることになるが，これらから，精度，演算数，必要な記憶容量を考慮して選ぶことになる．諸経験によれば，消去法と「修正」グラム＝シュミット法による3，4のものが詳しい検討の対象として残るであろう．

## 3. 特異値分解

直交行列 $U$，$V$ を用いて

$$A = U^T \begin{bmatrix} \sigma_1 & & & \\ & \ddots & & O \\ O & & \sigma_r & \end{bmatrix} V \quad ; \quad \sigma_1, \cdots, \sigma_r > 0$$

と分解すれば

$$A^\dagger = V^T \begin{bmatrix} 1/\sigma_1 & & & \\ & \ddots & & O \\ O & & 1/\sigma_r & \end{bmatrix} U$$

である．この分解のために Golub 等が提案したのは次の方法である．

$A$ の左右からハウスホルダー変換と同様に鏡映行列を乗ずることにより

$$PAQ = \tilde{J} = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & O \\ & \alpha_2 & \beta_2 & \\ & & \ddots & \beta_{n-1} \\ O & & & \alpha_n \end{bmatrix}$$

と2対角化できる．$\tilde{J}$ から余分の 0 を除いた正方行列を $J$ とし，

$$K = \begin{bmatrix} O & J \\ J^T & O \end{bmatrix}$$

と定義すると，これは $\pm\sigma_i$，$i=1,\cdots,r$ と若干個の $0$ を固有値とし

$$\begin{bmatrix} 0 & J \\ J^T & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \pm\sigma\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$$

とすると，$x$，$y$ はそれぞれ $JJ^T$，$J^TJ$ の固有ベクトルである．Kの行列を置換して，

$$z_{2i} = x_i \quad , \quad z_{2i-1} = y_i$$

となるようにすると

$$\begin{bmatrix} 0 & \alpha_1 & & & & \\ \alpha_1 & 0 & \beta_1 & & & \\ & \beta_1 & 0 & \alpha_2 & & \\ & & \alpha_2 & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & & \alpha_n \\ & & & & \alpha_n & 0 \end{bmatrix} z = \pm\sigma z$$

と対称3対角行列の固有値問題に帰着し，これはQR法などにより解くことができる．

## 4. その他の方法

Aを $m\times n$ 階数 $r$ の実行列とする．

### 4.1 縁取りによる法．

$\mathcal{R}(A)^\perp$ の基底ベクトルがつくる $m\times(m-r)$ 行列を $V$，$\mathcal{R}(A^T)^\perp$ の基底ベクトルがつくる $n\times(n-r)$ 行列を $U$ とすると $m+n-r$ 次正方行列

$$B = \begin{bmatrix} A & V \\ U^T & O \end{bmatrix} \qquad \begin{aligned} A^TV &= O \ , \ \mathrm{rank}\, V = m-r \\ AU &= O \ , \ \mathrm{rank}\, U = n-r \end{aligned}$$

は正則で，

$$B^{-1} = \begin{bmatrix} A^\dagger & (U^T)^\dagger \\ V^\dagger & O \end{bmatrix}$$

である．正方にしなくとも

$$\begin{bmatrix} A \\ U^T \end{bmatrix}^{\dagger} = [\, A^{\dagger} , (U^T)^{\dagger} \,]$$

は最大階数行列の Moore-Penrose 一般逆行列であるから計算し易い．

たとえば V を計算する１つの方法は A の左から正則行列を乗じて

$$QA = \begin{bmatrix} Q_1 \\ Q_2 \end{bmatrix} A = \begin{bmatrix} A_1 \\ O \end{bmatrix} \qquad A_1 : r \times m \text{ 上台形}$$

と変形すれば $m \times (m-r)$ 行列 $Q_2{}^T$ を $V$ とすることができる． Germain-Bonne (1969), Hestenes (1958).

4．2　$A^{\dagger} = (A^TA)^-_m A^T$ による方法．（記号は Sibuya (1970) による．）

a.　$A^TA = LU$ を LU 分解とすると，$(A^TA)^-_m = U^{\dagger}L^-$ と表わせる．$L = \begin{bmatrix} R \\ S \end{bmatrix}$，R は下三角，とすると $L^-$ はたとえば $[R^{-1}\ O]$ とすることができる． Ben-Israel + Wersan (1963).

b. $\mathcal{R}(A^T)$ の直交基底を列ベクトルとする行列を B とすると $(A^TA)^{\dagger} = B(B^TA^TAB)^{-1}B^T$ である．B を求めるから $C^T = B^TA^T$ をもとめれば $A^{\dagger} = B(C^TC)^{-1}C^T$．　Glassey (1966).

4．3　Pyle の勾配射影法　$A^T$ のグラム＝シュミット直交化を　$A^T = QU = Q[R, S]$　R：上三角

とすれば

$$A_m^- = Q(UT)_m^- = Q(U_l^-)^T = Q[(R^{-1})^T, O]$$

これより $A^\dagger = A_m^- \Pi_A$ により $A^\dagger$ をもとめる．$\mathcal{R}(A)$ への正射影 $\Pi_A$ はたとえば，$A = PV$ を直交化とすれば，$\Pi_A = PP^T$. Pyle (1964).

4.4 Greville の逐次拡大法．

$$A_k = [A_{k-1}, a_k] \qquad k = 2, 3, \cdots, n$$

にたいして

$$A_k^\dagger = \begin{bmatrix} A_{k-1}^\dagger - d_k b_k^T \\ b_k^T \end{bmatrix}$$

$$d_k = A_{k-1}^\dagger a_k$$

$$b_k^T = \begin{cases} (a_k - A_{k-1} d_k)^\dagger & a_k - A_{k-1} d_k \neq 0 \text{ のとき,} \\ (1 + d_k^T d_k)^{-1} d_k^T A_{k-1}^\dagger & a_k - A_{k-1} d_k = 0 \text{ のとき.} \end{cases}$$

5. 反復法

Ben-Israel 等は一連の論文で反復法を論じているが，本質的なことは Ben-Israel + Cohen (1966) に集約されている．ここでは，彼の方法を Altman (1960) にならって任意の次数の収束をもつ反復法に拡張できることを示し，収束の早さについて「鋭い」上界を与え，数値計算上注意すべき若干のことについて述べる．

定義1. 次数 $p$ の hyper-power 法とは次のような行列の系列

$\{X_{p,k}\}_{k\in\mathbb{N}}$ を構成することである（$p\geqq 2$）：

$$(5.1)\quad \begin{cases} X_{p,0} = \alpha A^T \\ X_{p,k+1} = X_{p,k} + X_{p,k}R_{p,k} + X_{p,k}R_{p,k}^2 + \cdots + X_{p,k}R_{p,k}^{p-1} \\ R_{p,k} = I - AX_{p,k} \end{cases}$$

定理 1　(5.1) で生成される $\{X_{p,k}\}$ にたいして

$$A^\dagger - X_{p,k+1} = A^\dagger(A(A^\dagger - X_{p,k}))^p, \quad p\geqq 2,\ k=1,2,\cdots$$

証明　より一般的に $n\times m$ 行列 $Z$ が $\mathcal{R}(Z)\subset\mathcal{R}(A^T)$ ならば

$$(5.2)\quad A^\dagger(A(A^\dagger - Z))^p = A^\dagger - Z\sum_{i=0}^{p-1}R^i, \quad R = I - AZ$$

であることを証明する．$A^\dagger A = \Pi_{A^T}$, $AA^\dagger = \Pi_A$, $\Pi_{A^T}Z = Z\Pi_A = Z$, $\Pi_{A^T}A^\dagger = A^\dagger\Pi_A = A^\dagger$ なる事実を用いる．

$p=2$ のとき (5.2) の左辺 $=$

$$\begin{aligned} A^\dagger(A(A^\dagger - Z))^2 &= (A^\dagger - Z)A(A^\dagger - Z) \\ &= A^\dagger - Z - Z(\Pi_A - AZ) \\ &= A^\dagger - Z - Z(I - AZ) = A^\dagger - Z(I+R) \end{aligned}$$

$p-1$ のとき成り立っているとすると

$$\begin{aligned} A^\dagger(A(A^\dagger - Z))^p &= (A^\dagger - Z\sum_{i=0}^{p-2}R^i)A(A^\dagger - Z) \\ &= A^\dagger - Z - \sum_{i=0}^{p-2} Z(I-AZ)^i(\Pi_A - AZ) \\ &= A^\dagger - Z - \sum_{i=0}^{p-2}(I - ZA)^i Z(I - AZ) \\ &= A^\dagger - \sum_{i=0}^{p-1} ZR^i \end{aligned}$$

系 1.

$$(5.2)\quad \begin{aligned} \|A^\dagger - X_{p,k}\| &\leqq \|A^\dagger\|\,\|AA^\dagger - \alpha AA^T\|^{p^k} \\ &= \frac{1}{\sigma_r}(1 - \alpha\sigma_r^2)^{p^k} \end{aligned}$$

ただし $\sigma_1 \geqq \cdots \geqq \sigma_r > 0$ は $A$ の特異値である．

系2　(5.2) の右辺を最小にする $\alpha$ は

(5.3)　$$\alpha_{opt} = 2/(\sigma_1^2+\sigma_r^2)$$

そのとき

(5.4)　$$\| A^{\dagger} - X_{p,k} \| \leq \frac{1}{\sigma_r}\left(\frac{\mathrm{cond}^2(A)-1}{\mathrm{cond}^2(A)+1}\right)^{p^k}$$

ただし $\mathrm{cond}(A) = \sigma_1/\sigma_r$.

定理2.　$0<\alpha<2/\|A\|^2$ ならば (5.1) で定義される系列は

$$\lim_{k\to\infty} X_{p,k} = A^{\dagger} \qquad \text{for any } p \geq 2$$

注意

同じ条件の下で　$\lim_{p\to\infty} X_{p,k} = A^{\dagger}$　for all $k=1,2,\cdots$

定義2.　線形反復法とは $\{Y_k\}$ を次のように構成することである：

(5.5)　$$\begin{cases} Y_0 = \alpha A^T \\ Y_{k+1} = Y_k + \alpha(I - Y_k A)A^T \end{cases}$$

この系列も定理2の条件を満たす $\alpha$ にたいして $A^{\dagger}$ に収束する.

定理3.　$\{X_{p,k}\}$ は次の意味で $\{Y_k\}$ の部分系列である.

(5.6)　$$X_{p,k} = Y_{p^k-1} \qquad k=0,1,2,\cdots \quad p=2,3,\cdots$$

定義3　正方行列の系列 $\{Z_{p,k}\}$ を

(5.7)　$$Z_{p,k} = AX_{p,k}$$

で定める. つまり

$$Z_0 = \alpha AA^T$$
$$Z_{p,k+1} = Z_{p,k} + Z_{p,k}(I - Z_{p,k}) + \cdots + Z_{p,k}(I-Z_{p,k})^{H}$$

定理4. $0<\alpha<2/\|A\|^2$ のとき $\lim_{k\to\infty} Z_{p,k}=\Pi_A$ for any $p\geq 2$.

系1. $0<\alpha<2/\|A\|^2$ のとき trace $Z_{p,k}\uparrow$ rank $A$ $p$: 偶数.

系2. $\sigma_2^{-2}<\alpha<2\sigma_1^{-2}$ のとき

trace $Z_{p,k}\downarrow$ rank $A$ $p$: 奇数.

さて以上の議論により，任意の次数の収束をもつ反復法を構成できるが，計算量から考えて $p$ をいくらに選ぶべきであろうか．行列の乗算を1回実行するのに必要な計算量を単位とすると，$p$ 次の ~~収束~~ 反復法では $p$ 単位の計算で $\propto \rho^{p^k}$, $\rho=(1-\alpha\sigma_r^2)$ の精度を得る．したがって $p^{1/p}$ を最大にする $p=3$ がもっとも好ましく $p=2,4$ がそれに次ぐことになる．

Euler の等式を用いると，$p=2^n$ にたいしては

(5.8) $$X_{2^n,k+1}=X_{2^n,k}(I+R)(I+R^2)\cdots(I+R^{2^{n-1}})$$

を用いる反復法が考えられる．計算量は $2n=2\log_2 p$ 単位となるが，計算量あたりの精度は $n$ によらず一定である．元の方法と比較すると $p=4\ (n=2)$, $p=2\ (n=1)$ のときの精度と (5.8) によるものとは同一である．したがって $p=3$ は (5.8) の方式を考慮しても最良である．

定理4，系1，系2 から次のような方針が考えられる．$p=2$ で $A^\dagger$ の粗い値を求め $\sigma_r$ を推定する．これを利用して $\{X_{3,k}\}$ を計算すると同時に $\{Z_{2,k}\}$, $\{Z_{3,k}\}$ をも計算す

る．trace $Z_{3,k}$ − trace $Z_{2,k}$ が減少する限り反復を継続する．この差が1より小さくならなければ計算はアキラメである．

著者の1人は Kaczmarz 過程が $A_m^-$ （$A^+$ ではなく）の計算に有効であることを示したが（Tanabe，1969），さらに有力な加速法を工夫することにより，特に粗な大型行列の一般逆行列計算に役立つ方法として完成しつつある．

## 6．試験行列

一般逆行列のアルゴリズムを試験するために，特異値分解から逆に，与えられた特異値をもつ行列を構成することにした．この方法だと (1) 少数のパラメータの入力ですむ．(2) 生成される行列の要素を整数とすることにより原行列における乱れを無くせる．(3) いろいろな条件の行列を容易に指定できる．(4) だいたい同じ位の大きさの要素を生成するので平衡化の議論を避けられる：Aの特異値は $\sigma_1\sqrt{\underset{mn}{\cancel{m}}(n-1)}$, $\sigma_2\sqrt{m(n-1)(n-2)}$, ....

$$A = UDV^T \quad : \quad m \times n \qquad m = 2^{\mu}$$

$$U = \left[\begin{array}{cc:cc} 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 \\ \hdashline -1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & - & 1 \end{array}\right]$$

実験計画法でいわゆる $2^{\mu}$ 型直交配列．

$$V^T = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & -(n-1) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \iddots & \\ 1 & 1 & -2 & & 0 \\ 1 & -1 & & & \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \qquad D = \begin{bmatrix} \sigma_1 & & 0 \\ & \ddots \sigma_n & \\ 0 & & \end{bmatrix}$$

直接法の文献:

Ben-Israel, A., and Wersan, S.J. (1963), An elimination method for computing the generalized inverse of an arbitrary complex matrix, JACM, Vol. 10, 532-537.

$A^{\dagger} = (A^TA)^{-}_{m} A^T$ の公式に基いている. $A^TA$ の LU分解から1つの $(A^TA)^{-}_{m}$ をもとめている.

Germain-Bonne, G. (1969), Calcul de pseudo-inverses, R.I.R.O., 3$^{e}$ année, NR-2/1969, 3-14.

Aに縁取りをして正則な行列とし, その逆行列の一部として $A^{\dagger}$ をもとめる.

Glassey, C.R. (1966), An orthogonalization method of computing the generalized inverse of a matrix, Op. Res. Center, Univ. California, Berkeley, ORC 66-10 (AD633061).

$\mathcal{R}(A^T)$ の直交基底を列ベクトルとする行列をBとするとき $(A^TA)^{\dagger} = B(B^TA^TAB)^{-1}B^T$ なることと $A^{\dagger} = (A^TA)^{\dagger}A^T$ による.

Goldstein, M.J. (1968), Solving systems of linear equations by using the generalized inverse, USL Report No. 874, U.S. Navy Underwater Sound Laboratory, (AD 667727).

Rust+Burrus+Schneeberger (1966) のアルゴリズムによる FORTRAN プログラムを載せている.

Golub, G.H., and Kahan, W. (1965), Calculating the singular values and pseudo-inverse of a matrix, SIAM J. Numer. Anal., Ser. B, Vol. 2 No. 2, 205-224.

特異値分解をもとめて Moore-Penrose を得る方法を提唱している. 階数決定の問題も詳しく論じている.

Golub, G.H. (1967), Least squares, singular values and matrix approximations, Technical Report No. CS73,
Businger, P. (1967), An algol procedure for computing the singular value decomposition, Technical Report No. CS73.

特異値分解をもとめる詳しいアルゴリズムと, そのALGOLプログラム.

Golub, G.H., and Reinsch, C. (1970), Singular value decomposition and least squares solution, Numer. Math., Vol. 14, 403-420.

Golub, Businger (1967) とほぼ同じ内容を公刊したもの.

Greville, T.N.E. (1960), Some applications of the pseudo inverse of a matrix, SIAM Rev., Vol. 2, 15-22.

m×n 行列の MOORE-PENROSE 逆行列を求めるのに, m×1 行列より出発して, m×2, m×3, … と逐次に拡大する方法を述べる.

Hestenes, M.R. (1958), Inversion of matrices by biorthogonalization and related results, J. SIAM, Vol. 6, 51-90.

列ベクトルがすべて1次独立となるように Aに行ベクトルを縁取りし, この最大階数行列の Moore-Penrose 一般逆行列の一部として Aの Moore-Penrose 一般逆行列を求める.

Kublanovskaya, V.N. (1966), Evaluation of a generalized inverse matrix and projector, USSR Comp. Math. and Math. Phys., 179-188.(英語訳)

直交変換と正則行列の逆転 (.21) で後段では直交化を用いる方法と, LU 分解と正則行列の逆転 (.11) の2方法.

Noble, B. (1966), A method for computing the generalized inverse of a matrix, SIAM J. Numer. Anal., Vol.3, 582-584.

だいたい LU分解と正則行列の逆行列計算に帰着させる方法 (.14) の説明であるが, 数値アルゴリズムとして完全でない.

Penrose, R. (1955), A generalized inverse for matrices, Proc. Camb. Phil. Soc., Vol. 51, 406-413.

$(A^*A)$ の固有値分解 $UDU^*$ により $A^\dagger=(A^*A)^\dagger A^*$ $= UD^\dagger U^*A^*$ となることを述べている. 数値アルゴリズム, としては不完全

Penrose, R. (1956), On best approximate solutions of linear matrix equations, Proc. Camb. Phil. Soc., Vol. 52, 17-19.

(1) $A = \begin{bmatrix} N \\ P \end{bmatrix} N^{-1} [N\ Q]$ ならば $A^{\dagger} = \begin{bmatrix} N^* \\ Q^* \end{bmatrix} [NN^* + QQ^*]^{-1} N [N^*N + P^*P]^{-1} \cdot [N^*\ P^*]$ (2) $A^{\dagger} = (A^*A)^{-}_{m} A^*$ の2方法を述べている．数値アルゴリズムとしては完全でない．

Peters, G., and Wilkinson, J.H. (1970), The least squares problem and pseudo-inverses, The Computer Journal, Vol. 13, 309-316.

分解による Moore-Penrose 一般逆行列の計算について，消去法，直交変換，直交化の3つについて述べているが，詳しい変種の分類・検討までは行なっていない．

Pyle, L.D. (1964), Generalized inverse computations using the gradient projection method, JACM, Vol. 11, 422-428.

$A^{\dagger} = A^{-}_{m} \Pi_A$ による．$A^T = QU = Q[R, S]$，R上3角，をシュミットの直交化とすれば $A^{-}_{m} = Q[(R^{-1})^T, O]$．

Rust, B., Burrus, W.R., and Schneeberger, C. (1966), A simple algorithm for computing the generalized inverse of a matrix, C. ACM, Vol. 9, 381-387.

直交化を用いる .36 の方法について述べている．部分的にムダがあり，記載されている FORTRAN プログラムも完全でない．Goldstein (1968) 参照．

Tewarson, R.P. (1967), A direct method for generalized matrix inversion, SIAM J. Numer. Anal., Vol. 4, 499-507.

消去法とグラム＝シュミット直交化による (.16) に近い方法について述べている

Tewarson, R.P. (1968), A computational method for evaluating generalized inverses, The Computer Journal, Vol. 10, 411-413.

消去法とハウスホルダー変換による (.15) に近い方法について述べている．

Tewarson, R.P. (1969), On computing generalized inverses, Computing, Vol. 4, 139-151.

ハウスホルダー変換消去，ハウスホルダー変換を行う.25の方法について述べる. .22とも比較している.

## 反復法の文献：

Altman, M. (1960), An optimum cubically convergent iterative method of inverting a linear bounded operator in Hilbert space, Pacific J. Math., 10, 1107-1113.

Hilbert空間における線形有界作用素の反復法による逆作用素の求め方. $A$の逆を $X_{k+1} = X_k(I + T_n + T_n^2 + \cdots + T_n^{p-1})$, $T_n = I - AX_n$ によりもとめることの議論.

Ben-Israel, A. (1965), An iterative method for computing the generalized inverse of an arbitrary matrix, Math. Comp., 19, 452-455.

$X_{k+1} = X_k(2\Pi_A - AX_k)$ なる反復法の収束条件.
証明は誤っている.

Ben-Israel, A. (1966), A note on an iterative method for generalized inversion of matrices, Math. Comp., 20, 439-440.

反復法 $X_0 = \alpha A^*$, $X_{k+1} = X_k(2I - AX_k)$ の提案と，その収束の証明.

Ben-Israel, A. and Charnes, A. (1963), Contributions to the theory of generalized inverses, J. SIAM, 11, 667-699.

$A^\dagger$ の $AA^*$ の級数による表示： $A^\dagger = \alpha \sum_{p=0}^{\infty} A^*(I - \alpha AA^*)^p$
これと同等な数列は $X_0 = \alpha A^*$, $X_{k+1} = X_k + \alpha(I - X_k A)A^*$.

Ben-Israel, A. and Cohen, D. (1966), On iterative computation of generalized inverses and associated projections, J. SIAM Numer. Anal., 3, 410-419.

反復法 $X_0 = \alpha A^*$, $X_{k+1} = X_k(2I - AX_k)$ の収束の早さの検討, $\Pi_A$ に収束する反復法 $Z_0 = \alpha AA^*$, $Z_{k+1} = 2Z_k - Z_k^2$ の提案.

Decell, H.P., Jr. and Kahng, S.W. (1966), An iterative method for computing the generalized inverse of a matrix, NASA TN D-3464.

Ben-Israel の反復法. $X_{k+1} = X_k(2I - AX_k)$ の証明の試み. Ben-Israel (1965) の誤りを再び犯している.

Tanabe, K. (1969), Projection method for solving singular system of linear equation and its applications, Res. Memo no. 30, Inst. Statist. Math.

カチマーヅ (Kaczmarz) 法による一般逆行列 $A_m^-$ の計算の提案

綜合的な解説：

Korganoff, A. and Pavel-Parvu, M. (1967), Elément de Théorie des Matrices Carrées et Rectangles en Analyse Numérique, Méthodes de Calcul Numérique, tome 2, Dunod.

第1部 行列のベクトル空間とノルム環, pp. 1-161, 第2部 長方形行列の逆, pp. 165-441. そのうち 第2.4章 pp. 321-427 が計算法に割かれている.

Sibuya, M. (1970), Subclasses of generalized inverses of matrices, Ann. Inst. Statist. Math., 22, 543-556.