

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^+ と書く.

$$(1.1) \quad A G A = A, \quad (1.2) \quad G A G = G,$$

$$(1.3) \quad (A G)^T = A G, \quad (1.4) \quad (G A)^T = G A.$$

(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まどきに触れる.

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

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{分解} \\ \text{縁取り} \\ A^T A \text{ の一般逆行列を用いる方法} \\ \text{Pyle の勾配射影法} \\ \text{Greville の逐次拡大法} \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{最大階数行列への分解} \\ \text{特異値分解} \end{array}$$

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。

$$1^\circ P, Q \text{ が直交行列ならば } (PAQ)^T = Q^T A^T P^T.$$

$$2^\circ (A^T)^T = (A^T)^T.$$

$$3^\circ A = BC, \quad B: m \times n, \quad C: n \times n \text{ ならば } A^T = C^T B^T.$$

$$4^\circ \text{上の } B, C \text{ について } B^T = (B^T B)^{-1} B^T, \quad C^T = C^T (C C^T)^{-1}.$$

$$5^\circ \begin{bmatrix} A \\ 0 \end{bmatrix}^T = [A^T, 0], \quad [A, 0]^T = \begin{bmatrix} A^T \\ 0 \end{bmatrix}$$

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). 適当に行および列の入れ換えを行なう (要、選択) ことにより消去法で

$$(2.1) \quad A = LU$$

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, 他々の要素は絶対値が 1 より小さい. もしも「要、完全選択」を行なう, ているならば U の対角要素を取り出した

$$(2.2) \quad A = LDU$$

という変形もある.

・2 ハウスホルダー変換. A の左より直交行列 Q を乗ずることにより

$$(2.3) \quad QA = V = \begin{bmatrix} U \\ 0 \end{bmatrix}, \quad U \text{ は } n \times n \text{ 上台形}$$

と変形できる.

$$(2.4) \quad A^T = V^T Q = U^T Q_n, \quad Q_n \text{ は } Q \text{ の最初の } n \text{ 行}$$

2次元平面内での回転を繰り返すギウ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. $R(A)$ の正規直交基底を $q_1, \dots, q_n$, $Q = [q_1, \dots, q_n]$ とすると,

$$(2.5) \quad A = QU, \quad U \text{ は } n \times n \text{ 上台形}, Q^T Q = I.$$

これから

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

以上3の方法により問題は最大階数をもつ L , U との行列の Moore-Penrose 逆行列を求めることに帰着する。以下では $n \times n$ ($n \leq m$) 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,

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

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

.01a $U U^T$ のコレスキー分解を $F F^T$ とすれば,

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

若干の技巧で平方根の計算を避けることもできる.

.01b $n \times n$ 行列 U^T を直交化して

$$(2.8) \quad U^T = Q R, \quad R \text{ は上三角行列.}$$

と分解すれば

$$(2.9) \quad (U U^T)^{-1} = (R^T R)^{-1} = R^{-1} (R^{-1})^T$$

.02 ハウスホルダー変換.

$$(2.10) \quad P U^T = \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix}, \quad R \text{ は上三角行列.}$$

と分解すれば

$$(2.11) \quad U^\dagger = P^T \begin{bmatrix} (R^{-1})^T \\ 0 \end{bmatrix} = (P_r)^T (R^{-1})^T$$

P_r は P の最初の n 行

・03 グラム = シュミットの直交化. $Q(U^T)$ の正規直交基底を $n_1, \dots, n_n$, $N = [n_1, \dots, n_n]$ とし

$$(2.12) \quad U^T = NR, \quad R \text{ は 上三角行列}$$

とすれば $N^\dagger = N^T$ だから

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

最大階数行列・一般逆行列を求める上の方法により、与えられた課題は解けたか、その変形として

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

$$G = S^{-1}T, \quad S \text{ は 上三角行列,}$$

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

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。

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

$(I + GG^T)^{-1}$ 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

$$(2.16) \quad P \begin{bmatrix} I \\ G^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix} \quad R \text{ は 上三角}$$

とすれば

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

とあるが、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 行を P_{rr} とすれば

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

とある。

.06 グラム = ミュミット変換, .03 と同様に

$$(2.18) \quad \begin{bmatrix} I \\ G^T \end{bmatrix} = N R \quad ; \quad N^T N = I, \quad R \text{ は三角}$$

と分解すれば

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

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

$$(2.19) \quad [I, G]^T = N(N_r)^T$$

何人かの著者が、.04 の方法とグラム = ミュミット変換を結びつけ

$$I + G G^T = R^T R$$

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

な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、演算としてはむしろしている。

.01 ~ .03 と .04 ~ .06 を比較すると、たいて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

いてあり、大差はない。 A^T の分解によるアルゴリズムとして
 2 は .1 ~ .3 と .01 ~ .06 を組み合わせた、といった
 い 18 通りも考えられることにあるが、これらから、精度、
 演算数、必要メモリ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 = コミット法による 3、
 4 のものが詳しく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

$$A = U^T \begin{bmatrix} \sigma_1 & & 0 \\ & \sigma_n & \\ 0 & & \end{bmatrix} V \quad ; \quad \sigma_1, \dots, \sigma_n > 0$$

と分解すれば

$$A^T = V^T \begin{bmatrix} 1/\sigma_1 & & 0 \\ & 1/\sigma_n & \\ 0 & & \end{bmatrix} U$$

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

$$PAQ = \tilde{J} = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & 0 \\ & \alpha_2 & \beta_2 & \\ & & \ddots & \beta_{n-1} \\ 0 & & & \alpha_n \end{bmatrix}$$

と 2 対角化できる。 $\tilde{J}$ から余分の 0 を除いた正対角行列を J
 とし、

$$K = \begin{bmatrix} 0 & J \\ J^T & 0 \end{bmatrix}$$

と定義すると, これは $\pm \sigma_i$, $i=1, \dots, n$ 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,

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

とするとようにすると

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

と対称な対角行列の固有値問題に帰着し, これは $\mathbb{Q}, \mathbb{R}$ 域で解くことができる.

4. その他の方法

A を $m \times n$ 階数 r の実行列とすると.

4.1 縁取りによる法. $\mathcal{R}(A)^\perp$ の基底ベクトルがなつくる $m \times (m-r)$ 行列を V , $\mathcal{R}(A^T)^\perp$ の基底ベクトルがなつくる $n \times (n-r)$ 行列を U とすると $m+n-r$ 次正行行列

$$B = \begin{bmatrix} A & V \\ U^T & 0 \end{bmatrix} \quad \begin{aligned} A^T V &= 0, \text{ rank } V = m-r \\ AU &= 0, \text{ rank } U = n-r \end{aligned}$$

は正則で, $B^{-1} = \begin{bmatrix} A^\dagger & (U^T)^\dagger \\ V^T & 0 \end{bmatrix}$

である。正方にしなくては

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

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

$$QA = \begin{bmatrix} Q_1 \\ Q_2 \end{bmatrix} A = \begin{bmatrix} A_1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad A_1: n \times m \text{ 上三角}$$

と変形すれば $m \times (m-n)$ 行列 Q_2^T を V とすることが出来る。Germain-Bonne (1969), Hestenes (1958)。

4.2 $A^+ = (A^T A)^{-1}_m A^T$ による方法。(記号は Sibuya (1970) による。)

a. $A^T A = LU$ を LU 分解とすると, $(A^T A)^{-1}_m = U^+ L^{-1}$ と表わせる。 $L = \begin{bmatrix} R \\ S \end{bmatrix}$, R は下三角, とすると L^{-1} はたとえば $[R^{-1} \ 0]$ とすることが出来る。Ben-Israel + Wersan (1963)。

b. $R(A^T)$ の直交基底を列ベクトルとする行列を B とすると

$(A^T A)^+ = B(B^T A^T A B)^{-1} B^T$ である。 B を求めるから $C^T = B^T A^T$ を求めれば $A^+ = B(C^T C)^{-1} C^T$ 。Glassey (1966)。

4.3 Pyle の勾配射影法 A^+ のグラム = ミット直交化を

$$A^+ = QU = Q[R, S] \quad R: \text{上三角}$$

とすれば

$$A_m^- = Q(U^T)^- = Q(U^-)^T = Q[(R^{-1})^T, 0]$$

これより $A^\dagger = A_m^- \Pi_A$ により $A^\dagger$ を求める. $\mathcal{R}(A)$ の正射影 Π_A はたとえど, $A = PV$ を適宜とすれば, $\Pi_A = PPT$. Pyle (1964).

4.4 Greville の逐次補正法.

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

に於いて

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

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

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

5. 反復法

Ben-Israel 等は一連の論文で反復法を論じているが, 本質的なのは Ben-Israel + Cohen (1966) に集約されている. ここでは, 彼の方法を Altman (1960) により, 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

$\{X_{p,k}\}_{k \in \mathbb{N}}$ を構成するべくある ($p \geq 2$):

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

定理 1 (5.1) で生成される $\{X_{p,k}\}$ に関する

$$A^T - X_{p,k+1} = A^T (A(A^T - X_{p,k}))^p, \quad p \geq 2, k=1, 2, \dots$$

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

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

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

$p=2$ のとき (5.2) の左辺 =

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

$p-1$ のとき成り立つと仮定すると

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

系 1.

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

ここで $\sigma_1 \geq \cdots \geq \sigma_n > 0$ は A の特異値である.

系 2 (5.2) の右辺を最小にする α は

$$(5.3) \quad \alpha_{\text{opt}} = 2 / (\sigma_1^2 + \sigma_n^2)$$

このとき

$$(5.4) \quad \|A^T - X_{p,k}\| \leq \frac{1}{\sigma_n} \left(\frac{\text{cond}^2(A) - 1}{\text{cond}^2(A) + 1} \right)^{p^k}$$

$$\text{where } \text{cond}(A) = \sigma_1 / \sigma_n.$$

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

系列は

$$\lim_{k \rightarrow \infty} X_{p,k} = A^T \quad \text{for any } p \geq 2$$

注意

同じ条件の下で $\lim_{p \rightarrow \infty} X_{p,k} = A^T$ for all $k=1, 2, \dots$

定義 2. 矩形反復法とは $\{Y_k\}$ を次のように構成するこ

とである:

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

この系列も定理 2 の条件を満たす α によりして A^T 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。

$$(5.6) \quad X_{p,k} = Y_{p^k-1} \quad \begin{array}{l} k=0, 1, 2, \dots \\ p=2, 3, \dots \end{array}$$

定義 3. 正定行列の系列 $\{Z_{p,k}\}$ を

$$(5.7) \quad Z_{p,k} = A X_{p,k}$$

で定める。つまり

$$\begin{aligned} Z_0 &= \alpha A A^T \\ Z_{p,k+1} &= Z_{p,k} + Z_{p,k} (I - Z_{p,k}) + \dots + Z_{p,k} (I - Z_{p,k})^H \end{aligned}$$

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

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

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

$\text{trace } Z_{p,k} \downarrow \text{rank } A$ 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 $\propto \rho^k$, $\rho = (1 - \alpha \sigma_1^2)$ の精度を得る. したがって $p^{1/4}$ を最大にする $p=3$ か, もっとも好ましく $p=2, 4$ かそれに次ぐことになる.

Euler の等式を用いると, $p=2^n$ に関するしては

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

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. え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^T の粗い値を求め σ_1 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. $\text{trace } Z_{3,k} - \text{trace } Z_{2,k}$ 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ッラマである.

著者の1人は Kaczmarz 逆関数 A_m^- (A^T における) の計算に有効であることを示した (Tanabe, 1969), さらに有力な加速法を工夫することにより, 特に相対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づける.

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 累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) たいたい同じ位の大きさの要素を生成するの2平衡化の議論を避けられる: A の特異値は $\sigma_1 \sqrt{\frac{m(n-1)}{mn}}, \sigma_2 \sqrt{\frac{m(n-1)(n-2)}{mn}}, \dots$

$$A = UDV^T \quad m \times n \quad m = 2^M$$

$$U = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \quad \begin{array}{l} \text{実験計画法でいわゆる } 2^M \text{ 型直交} \\ \text{配列.} \end{array}$$

$$V^T = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \dots & -(n-1) \\ & 1 & 1 & \dots & 0 \\ & & 1 & \dots & 0 \\ & & & \ddots & 0 \\ & & & & 1 \end{bmatrix} \quad D = \begin{bmatrix} \sigma_1 & & & 0 \\ & \ddots & & \\ & & \sigma_n & \\ 0 & & & 0 \end{bmatrix}$$

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.

$A^\dagger = (A^T A)^{-1} A^T$ の公式に基づいている。 $A^T A$ の LU 分解から $(A^T A)^{-1}$ を求めている。

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 $A^\dagger$ を求める。

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).

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

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

Rust + Burrus + Schneebenger (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.

特異値分解を求めて 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.

特異値分解を求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。

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

$m \times n$ 行列の MOORE-PENROSE 逆行列を求めるのに, $m \times 1$

行列より出発して, $m \times 2, m \times 3, \dots$ 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 に列ベクトルを附加し, 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. (英訳)

直交変換と正則行列の逆転 (.21) で後段では直交変換を用いる方法と, 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.

本稿の 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 $A^+ = \begin{bmatrix} N^+ \\ 0 \end{bmatrix} [N N^+ + Q Q^+]^{-1} N [N^+ N + P^+ P]^{-1} \cdot [N^+ P^+]$ (2) $A^+ = (A^* A)^{-1} A^*$ の2方法を述べている。数値アルゴリズムとして完全でない。

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、新しい変種の分類・検討については行っていない。

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

$A^+ = A_m^+ \Pi_A$ による。 $A^+ = Q U = Q [R, S]$, R は3角, S は2ユニットの直交化とすれば $A_m^+ = Q [(R^{-1})^T, 0]$.

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。部分的に欠けがあり、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, 列変換, 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 $X_{k+1} = X_k (I + T_k + T_k^2 + \dots + T_k^k)$,
 $T_k = I - AX_k$ により求めることの議論.

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

$X_{k+1} = X_k (2I - AX_k)$ なる反復法. 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 の AA^* の函数による表示: $A^\dagger = \alpha \sum_{p=0}^{\infty} A^* (I - \alpha AA^*)^p$
これと同等な数式は $X_0 = \alpha A^*$, $X_{k+1} = X_k + \alpha (I - X_k A) A^*$.

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,

ΠA 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.

カチマニツ (Kaczmarz) 法による一般逆行列 A_m の計算の提案

総合的な解説:

Koraganoff, 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.