2O06　フィルタ対角化法に用いるフィルタの設計法

○村上 弘

首都大学東京 数理情報科学専攻 (〒 192-0397 八王子市南大沢 1-1)

概要：実対称一般固有値問題へフィルタ対角化法を適用する際のフィルタ作用素の設計法を示す．レゾルベントの線形結合をフィルタの作用素として用いると，固有ベクトルに対する伝達関数は固有値の有理関数になる．フィルタ作用素はアナログ電気回路のフィルタ設計理論と数学的に類似の手法を用いて次のように構成する．まず指定区間を通過帯域とする理想的な帯域通過フィルタの伝達関数を有理関数で近似する．次にその有理関数を伝達関数とするレゾルベントの線形結合を構成しフィルタ作用素とする．この方法で，アナログ回路の 4 種類の典型的なフィルタであるバターワース，チェビシェフ，逆チェビシェフ，楕円にそれぞれ対応するフィルタ作用素が構成できる．4 種類で同じ設計基準を要求する場合，楕円フィルタ作用素が必要とする次数（レゾルベントの個数）が最も小さく，計算効率が良いことが示せる．

フィルタ対角化法：実対称定値一般固有値問題 $A\mathbf{v}{=}\lambda B\mathbf{v}$ （A，B が実対称で，B は正定値）の固有対を求める．指定された区間 $\mathcal{I}{=}[\alpha,\beta]$ の中に固有値がある固有対で張られた不変部分空間を $\mathcal{S}_\mathcal{I}$ とする．フィルタとして用いる線形演算子を，固有値が $\mathcal{I}$ に入る固有ベクトルは良く通過させるが，そうでないベクトルは強く阻止するように構成する．十分多くの B-正規直交なベクトルの組にそのような性質を持つフィルタを作用させると，$\mathcal{S}_\mathcal{I}$ を近似的に張るベクトルの組 V が得られる．V を計量 B で特異値分解する（$V=W\Sigma Q$ と分解，但し $W^TBW=I$，$Q^TQ=I$，Σ は対角行列で非負）．そうして，特異値の相対値が微小な閾値以下の特異ベクトルは除外する．除外されずに残った B-正規直交な特異ベクトルの組に部分空間法を適用すると，$\mathcal{I}$ の近傍に固有値を持つ固有対の近似が得られる．(以上のフィルタ対角化法で得られた近似固有対の精度は，レイリ逆反復あるいはリッツ同時逆反復の数回の適用で素早く改良できる.)

レゾルベントの線形結合型のフィルタ：次数 $2n$ のフィルタ演算子を $2n$ 個のレゾルベント（と恒等演算子 I）の線形結合 $\mathcal{F}=c_\infty I+\sum_{p=1}^{2n}c_pR(\lambda_p)$ とする．c_∞，c_p，λ_p，$p=1,2,\ldots,2n$ は複素数のパラメタで，$R(\lambda)\equiv(A{-}\lambda B)^{-1}B$ は一般化レゾルベントである．固有値問題の任意の固有対 $(\lambda^{(\nu)},\mathbf{v}^{(\nu)})$ に対して $R(\lambda)\mathbf{v}^{(\nu)}=\mathbf{v}^{(\nu)}\,\frac{1}{\lambda^{(\nu)}-\lambda}$ であるから，$\mathcal{F}\mathbf{v}^{(\nu)}=\mathbf{v}^{(\nu)}\,f(\lambda^{(\nu)})$ を得る．ここで $f(\lambda)\equiv c_\infty+\sum_{p=1}^{2n}\frac{c_p}{\lambda-\lambda_p}$ は，固有値 λ を持つ固有ベクトルをフィルタに通過させた場合の出力/入力の比で，フィルタの伝達関数である．

区間 $\mathcal{I}$ に対し，有理関数 $f(\lambda)$ の絶対値が，λ が区間内では適度な大きさ（1 付近）に，λ が区間から離れると非常に小さく（ほとんど 0 に）なるように，パラメタを調整する．この要求はアナログ電気回路の帯域通過フィルタの設計の場合と同じである．

区間 $\lambda\in[\alpha,\beta]$ を $t\in[-1,1]$ に移す線形変換 $\lambda=\mathcal{L}(t)=(1{-}t)\frac{\alpha}{2}{+}(1{+}t)\frac{\beta}{2}$ により，$g(t)=f(\lambda)$ を定義する．$g(t)$ の部分分数展開が $g(t)=c_\infty{+}\sum_{p=1}^{k}\frac{c_p}{t-t_p}$ であれば，対応するフィルタ作用素は $\mathcal{F}=c_\infty I{+}\sum_{p=1}^{k}c_pR(\lambda_p)$ となる．但し $\lambda_p=\mathcal{L}(t_p)$.（フィルタ設計の要請から $c_\infty=g(\infty)$ は通常は微小で，省略できる.）

伝達関数の逆数として減衰関数を定義する：$\mathcal{A}(t){\equiv}1/g(t)$．正規化座標 t で，$|t|{\le}1$ をフィルタの通過帯域 (passband)，$|t|{\ge}\mu>1$ を阻止帯域 (stopband) とする．中間領域を遷移帯域 (transitionband) という．フィルタの特性形状として，$\mathcal{A}$ の値は通過帯域で $\mathcal{A}_{\rm pass}$ 以下，阻止帯域で $\mathcal{A}_{\rm stop}$ 以上であることを要求する．

典型的フィルタの減衰関数：アナログ回路の 4 種類の典型的フィルタの減衰関数 $\mathcal{A}(t)$ は，次数 n の t の（偶関数あるいは奇関数の）有理関数の 2 乗に 1 を加えた形を持つ正値実関数で，t の偶関数である．[1][2][13]. **1) バターワース：** $\mathcal{A}(t)=1+\epsilon^2t^{2n}$. **2) チェビシェフ：** $\mathcal{A}(t)=1+\epsilon^2T_n^2(t)$. **3) 逆チェビシェフ：** $\mathcal{A}(t)=1+\epsilon^2\{T_n(\mu)/T_n(\mu/t)\}^2$. **4) 楕円：** $\mathcal{A}(t)=1+\epsilon^2R_n^2(t)$. $T_n(t)$ は n 次のチェビシェフ多項式を表す．$R_n(t)$ は n 次の有理関数で，n 次の楕円有理関数あるいはチェビシェフ有理関数と呼ばれ，Jacobi 楕円関数 sn を用いたパラメタ表示：$R_n(t)=\mathrm{sn}[K(1/L)(nx+\Delta_n),1/L]$，$t=\mathrm{sn}[K(1/\mu)x,1/\mu]$ を持つ．

但し，$K(k)$ は第一種完全楕円積分，記号 Δ_n は n が奇数なら 0，偶数なら $(-1)^{n/2}$ を表す．$R_n(t)$ の絶対値は通過帯域で 1 以下，阻止帯域では L 以上の値をとり，$R_n(\pm 1) = (-1)^n$，$R_n(\pm\mu) = (-1)^n L$．さらに性質 $R_n(\mu)/R_n(\mu/t) = R_n(t)$ を満たす．但し L は ϵ，μ，n から計算する．

チェビシェフは通過帯域に，逆チェビシェフは阻止帯域にそれぞれリプルを許すことで，同じ次数のバターワースよりも急峻な遷移特性を持つ．楕円は通過帯域と阻止域の両方にリプルを許すことで，同じ次数のチェビシェフや逆チェビシェフよりも急峻な遷移特性を持つ．

上記の 4 種類の中から減衰関数 $\mathcal{A}(t)$ の関数形を選び，フィルタ特性の形状として要求する組 $(\mathcal{A}_{\rm pass}, \mathcal{A}_{\rm stop}, \mu)$ を与えると，それを実現する ϵ の値と n の最小値が求まる．n の最小値の例を表 1 に示す（チェビシェフと逆チェビシェフの n の最小値は一致する）．n を決めれば要求を満たす t の関数 $\mathcal{A}(t)$ が具体的に決まる．

$g(t)$ の部分分数展開は，まず $g(t)$ の極 t_p を $\mathcal{A}(t)$ の零点として求める．次に $g(t)$ の極の係数 c_p は $\mathcal{A}(t)$ の導関数の逆数の $t = t_p$ での値として計算する．定数項 c_∞ の値は $1/\mathcal{A}(\infty)$ である．上記 4 種類の典型的フィルタに対しては，極とその係数は全て解析的な式で計算ができる [13][2]．フィルタ作用素は，求めた $g(t)$ の部分分数展開に対応するレゾルベントの線形結合として決まる．実ベクトルへの次数 $2n$ のフィルタの作用は，複素対称性を用いて半分の n 個のレゾルベントの作用だけを用いて計算できる．

表 1: フィルタ特性を実現する n の最小値：$\mathcal{A}_{\rm pass}$=3dB，$\mathcal{A}_{\rm stop}$=150dB

μ	バターワース	チェビシェフ	楕円
1.001	17281	402	35
1.003	5766	232	30
1.005	3463	180	28
1.01	1736	128	26
1.03	585	74	22
1.05	355	58	20
1.1	182	41	17

参 考 文 献

[1] Daniels,R.W.:*Approximation Methods for Electronic Filter Design*, McGraw-Hill (1974).

[2] Lutovac,M.D., Tošić,D.Y. and Evans,B.L.:*Filter Design for Signal Processing*, Prentice Hall (2001).

[3] Toledo,S. and Rabani,E.: Very Large Electronic Structure Calculations Using an Out-of-Core Filter-Diagonalization Method, *J. Comput. Physics*, Vol.180, pp.256–269 (2002).

[4] Sakurai,T. and Sugiura,H: A projection method for generalized eigenvalue problems using numerical integration, J.Comp.Appl.Math., Vol.159, pp.119–128 (2003).

[5] Zhou,Y., Saad,Y., Tiago,M.L. and Chelikowsky,J.R.: Self-Consistent-Field Calculations using Chebyshev Filtered Subspace Iteration, J.Comput.Phys. Vol.219, No.1, pp.172–184 (2006).

[6] 村上 弘: 行列の対称定値一般固有値問題の固有値フィルタと部分空間法による解法, HPCS2007 シンポジウム論文集, IPSJ Symposium Series, Vol.2007, No.1, p.61 (2007).

[7] Murakami,H.: The Filter Diagonalization Method by the Shifted Inverses, ICCM2007, Conference Abstracts, p.126 (April,2007). Proceeding paper in CD-ROM (28pages, file name p126_G7-8_proc.pdf).

[8] 村上 弘: 対称定値一般固有値問題のフィルタ部分空間法による固有対の近似解法, 日本コンピュータ化学会 2007 年春季年会, 於東京工業大学 (2007 年 5 月 25 日), 講演発表 (番号 2 O 06). 同年会講演予稿集に要旨 2 頁分が掲載.

[9] 村上 弘: 帯対称定値一般固有値問題のフィルタ対角化法の実験, 情報処理学会研究報告 2007-HPC-110(6), pp.31–36 (2007 年 6 月).

[10] 村上 弘: レゾルベントの線形結合によるフィルタ対角化法, 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム, Vol.49, No.SIG2(ACS21), pp.66–87 (2008 年 3 月).

[11] Polizzi,E.: Density-matrix-based algorithm for solving eigenvalue problems, Phys.Rev.B, vol.79, pp.115112–115118 (2009).

[12] Ikegami,T., Tadano,H., Umeda,H. and Sakurai,T.: Hierarchical parallel algorithm to solve large generalized eigenproblems, HPCS2010 論文集, pp.107–114 (2010 年 1 月).

[13] 村上 弘: フィルタ対角化法の帯域通過フィルタの最適化, 情報処理学会研究報告 2010-HPC-124(3), (2010 年 2 月).