少数のレゾルベントの多項式型フィルタを用いた 一般固有値問題の解法

村上 弘^{1,a)}

概要:実対称定値一般固有値問題で固有値が指定区間にある固有対をフィルタ対角化法を用いて近似して 解くものとする.いま固有値問題に対応するレゾルベントを考えて、フィルタとしてシフトの異なる少数 のレゾルベントの線形結合の多項式を用いる.その多項式は設計を簡易にするためにチェビシェフ多項式 で表されるものに制限する.フィルタの設計は、レゾルベントのシフトの配置についての制約、フィルタ の特性についての要請やフィルタ処理に掛かる演算量を考慮して行う.

キーワード:フィルタ対角化、固有値問題、レゾルベント、多項式

1. はじめに

本報告は以前の HPC-162 での報告 [29] の記述に改訂を 加え,また付録の実験例の記述量を約半分にしたもので ある.

フィルタ対角化法 [3] により行列 $A \ge B$ が実対称で Bは正定値である一般固有値問題 $A\mathbf{v} = \lambda B\mathbf{v}$ の固有対で固 有値が指定した区間 [a, b] にあるものを近似して解くもの とする.フィルタは線形作用素で,固有値が [a, b] 近傍の固 有ベクトルは良く通過させるが,[a, b] から離れた固有ベク トルは強く減衰させる特性を持つようにうまく構成する.

1.1 レゾルベントの線形結合型フィルタ

フィルタの構成法として複素関数論の Cauchy の積分定 理から導かれる複素平面内の閉曲線に沿った線積分の離散 化近似に相当する方法がある([4][5] [6][7][8][10]). これは フィルタの作用を曲線上の積分の離散化点に対応するシフ ト ρ_j を持つ複数のレゾルベント $\mathcal{R}(\rho_j) \equiv (A - \rho_j B)^{-1}B$ の線形結合を用いて実現している.

別のアプローチとして,固有値 λ の固有ベクトル v に対 する伝達関数 $f(\lambda)$ の特性が,なるべく望ましいものとなる ように構成された線形作用素 Fをフィルタとして用いる方 法がある.いまフィルタの構成をレゾルベント(と恒等作 用素)の線形結合 $F = c_{\infty}I + \sum_{j} c_{j} \mathcal{R}(\rho_{j})$ (あるいはその 実部)に限れば,その伝達関数 $f(\lambda)$ は有理関数で無限遠で は有界で極に重複の無い有理関数になる.そこでそのよう

^{a)} mrkmhrsh@tmu.ac.jp

な性質を持つ有理関数であって理想的なフィルタの伝達特 性を近似するものを定めてやり([1][2]),それから伝達関数 $f(\lambda)$ を持つフィルタ Fを逆に構成すれば,各レゾルベン トのシフト ρ_j と線形結合の係数 c_j が決まる.こうして固 有値が区間 [a,b]にある固有ベクトルを抽出するのに良い 特性を持ったフィルタが設計できる([12][13][16][17][9]). たとえば構成を「楕円フィルタ」にすると、複素数をシフ トとするレゾルベントの8個から16個程度の線形結合の 実部として十分に特性の良いフィルタが得られる.しかも 求めたい固有対の固有値を含む区間は、固有値分布の任意 の位置に設定ができる(中間固有対用).

また,フィルタをシフトがすべて実数のレゾルベントの 線形結合で構成することにより,複素数を扱わずに実数だ けを用いて計算を行なう方法も考えられる([14][15][21]). しかしながらそのようなフィルタは,求めたい固有対の固 有値が固有値分布の端にある場合(下端固有対用)にだけ 安全に適用できるものであり,シフトに複素数を用いる場 合に比べて得られるフィルタの伝達特性も良くない.これ らの方法はシフトに実数だけを使うかそうでないかの違い はあるものの,フィルタはどちらの場合もレゾルベントの 線形結合であるから,複数のレゾルベントを用いることに なる.

1.2 レゾルベントと連立1次方程式

与えられたベクトルの組*V*に対するレゾルベント $\mathcal{R}(\rho)$ の作用は,係数行列が $C(\rho) = A - \rho B$ で右辺ベクトルの 組が *BV*の連立1次方程式を解いて実現する(行列 $C(\rho)$ はシフト ρ が実数ならば実対称であり,複素数ならば複素 対称である. $C(\rho)$ の非零要素の位置は行列AとBの非零

首都大学東京・数理情報科学専攻
 Department of Mathematics and Information Sciences, Tokyo Metropolitan University

要素の位置の合併になるから, *A* と *B* が疎であれば *C*(ρ) も疎行列になり, たとえば *A* と *B* が帯行列であれば *C*(ρ) も帯行列になる). いま係数 *C*(ρ) の連立 1 次方程式は直接 法で(行列分解を用いて)解くものとすれば, フィルタの 作用を実現するには少なくともフィルタの構成に使われて いるレゾルベントと同数だけの行列分解が必要である(連 立 1 次方程式を直接法ではなくて反復法で解く場合であっ ても,もしも前処理として行列の不完全分解を用いるので あれば, フィルタの構成に使われているレゾルベントと同 数だけの行列の不完全分解が必要になる).

シフト ρ が実数で、固有値分布の下限あるいは上限であ れば、行列 $C(\rho)$ は実対称定値になるので、 $C(\rho)$ を係数と する連立1次方程式はピボット交換なしの改訂コレスキ 法(modified Cholesky method)で安定に解けて、さらに $C(\rho)$ が帯行列ならば帯用に特化した解法が利用できる.

シフト ρ が複素数のときは、行列 $C(\rho)$ は正則で複素対称 ($C(\rho)^T = C(\rho)$)になるので、 $C(\rho)$ を係数とする連立 1 次方程式は複素対称性を用いた改訂コレスキ法を用いて 解ける.その際に、もしもピボット交換を行わない計算で は数値安定性について困難が生じたとすれば、 $C(\rho)$ の複 素対称性を利用せずに片側ピボット交換付きの複素数版の LU分解を行なうことが可能である(ただし必要な記憶量 と計算量はかなり増えてしまう).さらに $C(\rho)$ が帯行列の 場合には、帯用の改訂コレスキ法や片側ピボット交換付き のLU分解が利用できる).

1.3 レゾルベント1つの多項式型フィルタ

行列分解の数を最も少なくすることを狙って、レゾルベ ントを1つだけ用いて、レゾルベントのシフトが実数の場 合にはその作用の多項式で、シフトが複素数の場合にはそ の虚部の作用の多項式で、フィルタを構成する方法を試み てきた([20][18][19][22] [23][24][25][26] [27][11][28]). レゾ ルベントの作用を実現する連立1次方程式を直接法で解く ことを前提にするならば、レゾルベントを多数用いる方法 に比べて1つだけ用いる方法は、行列分解の数が多数では なくて1つだけになるので、行列分解に掛かる演算量を減 らせる利点がある.

いまフィルタ *F* を 1 つのレゾルベント $\mathcal{R}(\rho)$ から作られ る実作用素の実多項式とすれば、その伝達関数 $f(\lambda)$ は実有 理関数になる.そこで、必要な固有値の抽出に適した特性 を持つ伝達関数となるように実有理関数 $f(\lambda)$ を調整して 作り、その $f(\lambda)$ を伝達関数とするフィルタ *F* を構成する.

いま扱っている実対称定値の一般固有値問題の固有値は すべて実数なので、求めたい固有値の区間が固有値分布の 下端(上端)にある場合には、レゾルベントのシフトが実 数の場合には、シフトを固有値分布の下界(上界)に設定 することで固有値との一致や近接をあらかじめ避けること ができる.そうしてシフトが実数であればフィルタ対角化 法の計算はすべて実数とその演算だけで行なえる. 求めたい固有値の区間が固有値分布に対して一般的な位 置にある場合には、シフトを虚数に選ぶだけで固有値との 一致や近接をあらかじめ避けることができる。実ベクトル に対してシフトが互いに複素共役対であるレゾルベントを 作用させて得られる2つの複素ベクトルは、互いに複素共 役になることを用いれば、実作用素であるフィルタはシフ トが複素共役である片方(たとえば虚部が正のもの)のレ ゾルベントだけを用いて構成することができる。この場合 にも用いるレゾルベントは1つだけで済むので、対応する 連立1次方程式を直接法で解く場合は、係数行列の分解は 1つだけになる。

しかしレゾルベント1つの多項式で構成されたフィルタ には、特に(多項式が Chebyshev 多項式である)簡易型の 場合には難点がある.それは通過域での伝達関数の最大最 小比を小さくすることが難しいことである(シフトが実数 の場合の方が虚数の場合よりも難しい).この最大最小比 の値が大きければ(たとえば 3~6 桁)、近似固有ベクトル の精度の不均一さの程度も同程度となる可能性がある.こ の最大最小比は遷移域を広くとれば小さくできるが、遷移 域の広いフィルタは望ましいものではない.なぜならば遷 移域が広ければそこに入る固有値を持つ固有ベクトルの数 は増えて、フィルタで濾過した結果のベクトルの中に不要 な固有ベクトルが多く含まれてしまう.するとフィルタで 濾過したベクトルをそれだけ多く集めて分析する必要が生 じるからである.

1.4 関数合成による特性の改良

本報告では、レゾルベント1つの多項式である元のフィ ルタの伝達関数に対して、適切な有理関数を合成すること で、遷移域の幅が狭い(あるいは通過域に於ける最大最小 比が小さい)特性が改良された伝達関数が得られること、 そうしてその合成された伝達関数に対応するフィルタは少 数のレゾルベントの線形結合の多項式になることを示す.

しかし使用するレゾルベントの数は元の1つから少数 (2~3 個)に増えるので、レゾルベントに対応する連立1 次方程式を直接法を用いて解く場合には、行列分解を保持 するための記憶量と分解に掛かる演算量が(2~3倍に)増 える.そのことが特性が改良される利点と引き替えになる 不利な点である.

2. レゾルベント1つの多項式によるフィルタ

実対称定値一般固有値問題 $A\mathbf{v} = \lambda B\mathbf{v}$ の固有対 (λ, \mathbf{v}) の固有値はすべて実数であり、さらに固有ベクトル \mathbf{v} も実 にとれるのでそのようにとる. さらに固有ベクトルの全体 は全空間を張る *B*-正規直交系にとれる. この固有値問題 に対するシフト ρ のレゾルベント \mathcal{R} を以下の式 (1) で定義 する.

$$\mathcal{R}(\rho) \equiv (A - \rho B)^{-1} B \,. \tag{1}$$

そのとき固有対 (λ, v) に対して以下の式 (2) が成り立つ.

$$\mathcal{R}(\rho)\mathbf{v} = \frac{1}{\lambda - \rho} \,\mathbf{v} \,. \tag{2}$$

すると Q(x) が x の多項式なら以下の式 (3) が成り立つ.

$$Q(\mathcal{R}(\rho))\mathbf{v} = Q\left(\frac{1}{\lambda - \rho}\right)\mathbf{v}.$$
 (3)

いまフィルタ *F* がレゾルベント *R*(*ρ*) の多項式として以下 の式 (4) で書けたとする.

$$\mathcal{F} = Q(\mathcal{R}(\rho)) \,. \tag{4}$$

そのとき固有対 (λ , **v**) の固有ベクトル **v** に対するフィル タ *F* の作用は式 (5) で与えられ, $f(\lambda)$ は *F* の伝達関数で ある.

$$\mathcal{F}\mathbf{v} = f(\lambda)\mathbf{v}, \ f(\lambda) = Q\left(\frac{1}{\lambda - \rho}\right).$$
 (5)

いま固有値の指定区間 $\lambda \in [a, b]$ と標準区間 $t \in [0, 1]$ の 間の 1 次変換 $\lambda = a + (b - a)t$ により λ に対応する正規化 座標 t を定義する. そうして非負領域 $t \in [0, \infty)$ が定義域 で 2 つのパラメタ $\mu > 1$ と $\sigma > 0$ を持つ以下の式 (6) で表 される有理関数 x(t) を導入する.

$$x(t) \equiv \frac{\mu + \sigma}{t + \sigma} \,. \tag{6}$$

いまフィルタ \mathcal{F} の伝達関数 $f(\lambda)$ を正規化座標 t を用 いて表した有理関数 $g(t) = f(\lambda)$ が n 次多項式 P を 用いて g(t) = P(x(t)) と書けたとすると、そのとき $\ell = (b-a)(\mu + \sigma), \rho = a - (b-a)\sigma$ とおくと、 λ で 表わした伝達関数は $f(\lambda) = P(\ell/(\lambda - \rho))$ であり、フィル タは $\mathcal{F} = P(\ell \mathcal{R}(\rho))$ となる.

この場合のレゾルベントのシフト ρ は実数でa未満になる.シフトがどの固有値にも一致や近接しないことを保証 するために、aは最小固有値 λ_{\min} 以下であるとする、つ まりaは固有値分布の1つの下界であり、区間[a,b]が固 有値分布の下端を含むように設定されていると仮定する. そうしてx(t)が持つ2つのパラメタ σ と μ 、およびn次 多項式Pをうまく調整することで伝達関数g(t) = P(x(t))の特性を良いものにする.つまりg(t)に対応して構成され たフィルタFが固有値 λ が区間[a,b]にある固有ベクトル は良く伝達するが、固有値が区間[a,b]から離れた固有ベ クトルは強く阻止するようにする.

3. 伝達関数 *g*(*t*) と有理関数 *h*(*t*) の合成

いま正規化座標 t で表したフィルタ F の伝達関数 g(t) は 半無限区間 $[0,\infty)$ で定義された有界な実有理関数であると し、その定義域の通過域 (passband)、遷移域 (transitionband)、阻止域 (stopband) への区分けをそれぞれ [0,1], $(1,\mu), [\mu,\infty)$ (ただし $\mu > 1$)とする (図 1).そうして通 過域に於ける g(t) の最大値は 1 に規格化されていて、通過 域に於ける g(t) の最小値を g_p ,阻止域に於ける |g(t)|の上 限値を g_s とする (図 2).また g_p と g_s を伝達率の閾値と 呼ぶことにする。通過域に於ける伝達関数の最大最小比は $1/g_p$ である.



 図 1 固有値 λ の区間 [a,b] と正規化座標 t の関係と 通過域t∈[0,1], 遷移域t∈(1,µ), 阻止域t∈[µ,∞)



図2 伝達関数 g(t) の概形

3.1 有理関数 h(t) の合成

新しく導入する実有理関数 h(t) は $t \in [0,\infty)$ に於いて以下の 3 つの性質を満たすものとする.ただし $1 < \mu'$ であるとし、関数値としては $\pm \infty$ も含めて考える.

(1) h(t) は [0,1] を [0,1] 全体に写す(対応は1対1でなくて良い).

(2) h(t) は (1, μ') で単調増加で, h(1) = 1, h(μ') = μ.
(3) [μ',∞) に於いて常に |h(t)| ≥ μ.

このとき g(t) と h(t) の合成関数 g'(t) = g(h(t)) を定義 すると(注意:本稿ではダッシュは微分の意味では用いて いない), g'(t) も実有理関数であり, g'(t) の定義域 $[0,\infty)$ の通過域,遷移域,阻止域への区分けをそれぞれ [0,1], $(1,\mu')$, $[\mu',\infty)$ とすると, g(t) と g'(t) について両者の伝 達率の閾値は一致する,つまりそれぞれの通過域に於ける 伝達率の最小値は g_p で一致し,それぞれの阻止域に於け る伝達率の大きさの上限値も g_s で一致することがわかる. しかし遷移域の幅を与えるパラメタについては $\mu \ge \mu'$ で あって異なる.つまり伝達関数の形状パラメタの 3 つ組 は,元の伝達関数 g(t) では (μ, g_p, g_s) であり,合成で得ら れた伝達関数 g'(t) = g(h(t)) では (μ', g_p, g_s) である.関 もしも h(t) が偶関数であれば g'(t) も偶関数になるので, そのときには g'(t) の定義域は自然に実数全体に拡がり, g'(t) の通過域,遷移域,阻止域についてもそれぞれ原点 t = 0 に対して対称に拡がる.

本報告ではアナログ電気回路理論の典型フィルタの4種 類としてよく知られている「バターワース(Butterworth) 型」、「チェビシェフ(Chebyshev)型」、「逆チェビシェフ (inverse-Chebyshev)型」、「楕円(elliptic)型」の構成法 ([1][2])のうちで、楕円型を除いた3種類の各方法を模倣 する合成(B-合成、C-合成、I-合成)について考察を行なう ことにする.それらの合成で使用する k 次の有理関数 h(t) は、それぞれ以下の式(7)で与えられる.

$$h(t) = \begin{cases} t^{k} & (\text{B-}\widehat{\alpha}\overrightarrow{k}), \\ \frac{1+T_{k}(t)}{2} & (\text{C-}\widehat{\alpha}\overrightarrow{k}, \ k \ \overrightarrow{m}ambox{(ab)}, \\ \frac{1+T_{k}(2t-1)}{2} & (\text{C-}\widehat{\alpha}\overrightarrow{k}, \ k \ \overrightarrow{m}\overrightarrow{\alpha}\overrightarrow{m}), \\ \frac{1+T_{k}(\mu')}{1+T_{k}(\mu'/t)} & (\text{I-}\widehat{\alpha}\overrightarrow{k}). \end{cases}$$
(7)

ここで T_k は次数 k の第 1 種チェビシェフ多項式を表わす. 上記の有理関数 h(t) は次数 k が偶数のときにはみな偶関 数である. B-合成と C-合成の場合には h(t) は実際には多 項式であるが, I-合成の場合には多項式ではない有理関数 である. (注意:k = 2の場合には B-合成と C-合成はどち らも $h(t) = t^2$ で同じになる.)

伝達関数 g'(t) = g(h(t))から、フィルタ F'をレゾルベントの線形結合(の実部)の多項式 Pとして構成する.本報告ではフィルタは簡易型つまり n次多項式 Pがチェビシェフ多項式 T_n で表わされる場合に限定する.

B-合成, C-合成, I-合成の各場合には, 以下の式 (8) の ように μ は μ' を用いて表わすことができる.

$$\mu = \begin{cases} (\mu')^{k} & (B-合成), \\ \frac{1+T_{k}(\mu')}{2} & (C-合成, k \, \text{が偶数}), \\ \frac{1+T_{k}(2\mu'-1)}{2} & (C-合成, k \, \text{が奇数}), \\ \frac{1+T_{k}(\mu')}{2} & (I-合成). \end{cases}$$
(8)

あるいは逆に,以下の式 (9) のように μ' を μ を用いて表わ すことができる.

$$\mu' = \begin{cases} \mu^{1/k} & (B-合成), \\ \cosh\left(\frac{2}{k}\sinh^{-1}\sqrt{\mu-1}\right) & (C-合成, k \, \text{が偶数}), \\ \cosh^{2}\left(\frac{1}{k}\sinh^{-1}\sqrt{\mu-1}\right) & (C-合成, k \, \text{が奇数}), \\ \cosh\left(\frac{2}{k}\sinh^{-1}\sqrt{\mu-1}\right) & (I-合成). \end{cases}$$
(9)

式(8) または(9)からkが偶数の場合には µ または µ'を表

わす式は C-合成と I-合成で一致することがわかる.

B-合成とI-合成のどちらの場合も、 $k \ge 2$ の場合に、原 点付近で $h(t) = O(t^k)$ であることから、合成された伝達関 数g'(t) = g(h(t))は原点で(k-1)階までの導関数がすべ て零になり、原点に於いて高度な平坦性(いわゆるバター ワース特性)を有する.

3.2 簡易型の伝達関数と h(t) の合成

伝達関数 g(t) がレゾルベントの線形結合(の実部)の多 項式であって、その多項式がチェビシェフ多項式 T_n を用 いて書けるとき、本報告ではその伝達関数を簡易型という ことにする.

合成前の簡易型の伝達関数は以下の式(10)のようになる.

$$g(t) = g_{\rm s} T_n (2x(t) - 1), \ x(t) = \frac{\mu + \sigma}{t + \sigma}.$$
 (10)

この式が含むパラメタの組は (*n*, μ, σ) であり、本報告では それを標準パラメタの3つ組ということにする.

合成後の伝達関数 g'(t) = g(h(t)) は、以下の式 (11) で与 えられる.

$$g'(t) = g_{\rm s} T_n(2x'(t) - 1), \ x'(t) = \frac{\mu + \sigma}{h(t) + \sigma} \,. \tag{11}$$

閾値 g_s と g_p は標準パラメタの 3 つ組 (n, μ, σ) から以下の (12) の中の式を順に計算すれば求まる.

$$\begin{cases} g_{\rm s} \leftarrow 1 / \cosh\left(2n \sinh^{-1} \sqrt{\frac{\mu}{\sigma}}\right), \\ g_{\rm p} \leftarrow g_{\rm s} \cosh\left(2n \sinh^{-1} \sqrt{\frac{\mu-1}{\sigma+1}}\right). \end{cases}$$
(12)

合成を行なうと, 閾値 g_s と g_p を変えずに, μ と μ' の関係 に伴って遷移域の幅を $\mu - 1$ から $\mu' - 1$ に狭めることがで きる.

4. 合成された伝達関数からのフィルタの構成

合成された伝達関数 g'(t) = P(x'(t)) を持つフィルタ \mathcal{F}' は以下の手順で構成できる (P は多項式とする).

重複する極を持たない有理関数 x'(t) の表式 (13)

$$x'(t) = x(h(t)) = \frac{\mu + \sigma}{h(t) + \sigma}$$
(13)

から,その(重複極が無い場合の)部分分数分解の式(14) を求める(副節 4.1 参照).

$$x'(t) = c_{\infty} + \sum_{j=1}^{k} \frac{c_j}{t - t_j} \,. \tag{14}$$

すると x'(t) に対応する作用素 \mathcal{X}' は、以下の式 (15) によ り表わされた恒等作用素 $I \ge k$ 個のレゾルベントの線形結 合になる.ここで、規格化座標が t_j にシフト ρ_j が対応し ている.

$$\mathcal{X}' = c_{\infty}I + \sum_{j=1}^{k} \gamma_j \mathcal{R}(\rho_j) \,. \tag{15}$$

さらにいま扱っている実対称定値一般固有値問題では, *X'* は実線形作用素,つまり実ベクトルから実ベクトルへの作 用素であることから,複素対称性を利用すれば,実部をと る演算と組み合わせることで,レゾルベントの項としてた とえばシフトの虚部が非負のものだけを使う形に書き変え ることができる.それにより,B-合成,C-合成,I-合成の場 合には,たとえばシフトの虚部が正であるレゾルベントの 項を [*k*/2] 個,シフトが実数であるレゾルベントの項を*k* が奇数のときにだけ1個,それぞれ用いて書き表せる(副 節 4.2 参照).

伝達関数が g'(t) = P(x'(t)) となるフィルタ F' は作用素 \mathcal{X}' の多項式 P として以下の式 (16) により表わされる.

$$\mathcal{F}' = P(\mathcal{X}') \,. \tag{16}$$

特に簡易型のフィルタの場合には、 $g'(t) = g_s T_n(2x'(t) - 1)$ とするので、 $\mathcal{F}' = g_s T_n(2\mathcal{X}' - I)$ となる(副節 4.3 参照).

4.1 x'(t) の部分分数分解の構成

B-合成, C-合成, I-合成それぞれに用いる関数 *h*(*t*) は次 数 *k* の有理関数 (B-合成と C-合成では実際には *h*(*t*) は多 項式)である.それぞれの場合について,以下の式 (17) で 表わされる実有理関数から

$$x'(t) \equiv x(h(t)) = \frac{\mu + \sigma}{h(t) + \sigma}$$
(17)

以下の式 (18) で表わされる部分分数分解を構成する必要 がある.

$$x'(t) = c_{\infty} + \sum_{j=1}^{k} \frac{c_j}{t - t_j}.$$
 (18)

ここで c_{∞} は実数の係数であり、 $t_j \ge c_j$ 、j = 1, 2, ..., k は 複素数の極とその係数である.

4.1.1 B-合成の場合の x'(t) の部分分数分解

ここでは, B-合成の場合に対して部分分数分解 (18) を構成する.

複素数の範囲での k 個の極は t^k + σ = 0 を満たし,すべ て単純で,以下の式 (19) で与えられる.

$$t_j = \sigma^{1/k} \,\omega^{2j-1}, j=1,2,\dots,k, \ \omega \equiv \exp(\pi \sqrt{-1}/k).$$
(19)

そのうちで正の虚部を持つ極は添字が $j=1,2,...,\lfloor k/2 \rfloor$ のものである.実数の極は k が奇数のときに限りただ 1 つだけ存在して添字は j = (k + 1)/2で,値は負で $t_R \equiv t_{(k+1)/2} = -\sigma^{1/k}$ である.

B-合成の場合は h(t) が多項式なので部分分数分解の係数 c_{∞} は常に零である.そうして極の係数 c_j , $j = 1, 2, \ldots, k$ は以下の式 (20) で与えられる.

$$c_j = -\left(\frac{\mu+\sigma}{k\sigma}\right)t_j.$$
 (20)

kが奇数のときにだけ存在するただ 1 つの実数の極 $t_R \equiv t_{(k+1)/2}$ の係数は実数 $c_R \equiv c_{(k+1)/2}$ である.

4.1.2 C-合成の場合の x'(t) の部分分数分解

ここでは, C-合成の場合に対して部分分数分解 (18) を 構成する.

いま z を, k が奇数のときは z = 2t - 1 で, 偶数のとき は z = t で定義すれば $h(t) = (1 + T_k(z))/2$ とする. そう してまず x'(t) の極を求めるために, その分母が零になる 条件 $h(t) + \sigma = 0$ つまり方程式 $T_k(z) = -(1+2\sigma)$ を解く. いま $w \equiv 1 + 2\sigma$ (> 1) とおいて, $\alpha = (w + \sqrt{w^2 - 1})^{1/k}$ とすれば, 方程式の全ての複素数解 z は以下の式 (21) に より表わされ, 重複する解は無い.

$$z_{j} = \frac{\alpha + \alpha^{-1}}{2} \cos \frac{(2j-1)\pi}{k} + \sqrt{-1} \cdot \frac{\alpha - \alpha^{-1}}{2} \sin \frac{(2j-1)\pi}{k},$$

$$j = 1, 2, \dots, k.$$
(21)

求めた z_j から, k が奇数のときは $t_j = (1 + z_j)/2$, 偶 数のときは $t_j = z_j$ とすれば,有理関数 x'(t) の t につ いての極がすべて求まる.正の虚部を持つ極の添字は $j = 1, 2, ..., \lfloor k/2 \rfloor$ である.実数の極は k が奇数のときに 限りただ 1 つだけ存在して添字は j = (k+1)/2 で,値は $t_R = t_{(k+1)/2} = -\sinh^2 \{1/(2k) \cdot \cosh^{-1}(1+2\sigma)\}$ である.

実有理関数 x'(t) の極が求まったので、次に x'(t) の部分 分数分解 (18) の係数を求める.まず C-合成の場合の h(t)は多項式なので定数項 c_{∞} は零である.次に極 $t = t_j$ の係 数 c_j は以下の式 (22) により計算できる.

$$c_j = \lim_{t \to t_j} \{ (t - t_j) x'(t) \} = \frac{\mu + \sigma}{\frac{d}{dt} h(t)|_{t = t_j}} .$$
(22)

この式で $(d/dt)h(t)|_{t=t_j}$ の値は,公式 $(d/dz)T_m(z) = mU_{m-1}(z)$ を利用すれば求まる.ただし $U_m(z)$ は第 2種 Chebyshev 多項式であり,その値は以下の漸化式 (23)を用いて計算できる.

$$\begin{cases} U_0(z) = 1, \ U_1(z) = 2z, \\ U_m(z) = 2z U_{m-1}(z) - U_{m-2}(z) \ (m \ge 2). \end{cases}$$
(23)

すると $(d/dt)h(t)|_{t=t_j}$ の値は, k が偶数のときは $(k/2) U_{k-1}(t_j)$, k が奇数のときは $k U_{k-1}(2t_j-1)$ となる.

4.1.3 I-合成の場合の x'(t) の部分分数分解

ここでは, I-合成の場合に対して部分分数分解 (18) を構成する.

極は $h(t)+\sigma = 0$ の解 t であるから $T_k(\mu'/t) = -1-2\mu/\sigma$ である. そこでいま $w \equiv 1+2\mu/\sigma$, $\mu'/t = z$ とおくと, w > 1 であり, 解くべき z の方程式は $T_k(z) = -w$ で ある. すると C-合成の場合の極の計算と同様に,まず $\alpha = (w + \sqrt{w^2-1})^{1/k}$ とすると, (今度は z_j の虚部の符 号を逆にして)以下の式 (24) により, 複素数の範囲での x'(t)のすべての極 t_j , j=1, 2, ..., k が求まる.

$$\begin{cases} z_j = \frac{\alpha + \alpha^{-1}}{2} \cos \frac{(2j-1)\pi}{k} - \sqrt{-1} \cdot \frac{\alpha - \alpha^{-1}}{2} \sin \frac{(2j-1)\pi}{k} \\ t_j = \mu'/z_j, \quad j = 1, 2, \dots, k \end{cases}$$
(24)

虚部が正である極の添字は $j=1,2,...,\lfloor k/2 \rfloor$ である. 実数 の極は k が奇数の場合に限りただ 1 つだけ存在して,その 添字は j = (k+1)/2 であり,値は以下の式 (25) により与 えられる.

$$t_R = -\mu' / \cosh\left\{\frac{1}{k} \cosh^{-1}\left(1 + \frac{1 + T_k(\mu')}{\sigma}\right)\right\}.$$
 (25)

部分分数分解の定数項 c_{∞} は、h(t)が多項式でない有理 関数なので、I-合成の場合には一般には零ではなくて、kの 値に依って以下の式 (26) で与えられる.

$$c_{\infty} = \begin{cases} \frac{\mu + \sigma}{2\mu + \sigma} & (k \, \vec{n} \, \vec{n} \, \delta \, \sigma \, \beta \, \delta), \\ 1 & (k \, \vec{n} \, 4 \, \sigma \, \beta \, \delta \, \sigma \, \delta), \\ 0 & (\mathcal{E} \, n \, \mu \, \rho \, \sigma \, \delta \, \delta). \end{cases}$$
(26)

そうして各極 t_j の係数 c_j は (第 2 種 Chebyshev 多項式 $U_m(z)$ を用いて)以下の式 (27) で与えられることが示せる.

$$c_j = \frac{2\mu(\sigma+\mu) t_j^2}{\mu'\sigma^2 k U_{k-1}(\mu'/t_j)}.$$
 (27)

kが奇数のときに限り存在するただ1つだけの実数の極 $t_R \equiv t_{(k+1)/2}$ の係数は実数 $c_R \equiv c_{(k+1)/2}$ である.

4.2 x'(t) の部分分数分解に対応する作用素 X' の構成

B-合成, C-合成, I-合成それぞれに対する次数 k の有理 関数 h(t) について, x'(t) = x(h(t)) の部分分数分解 (18) を 構成できた. それぞれの場合に対して, 虚部が正の極は添 字が $j = 1, 2, ..., \lfloor k/2 \rfloor$ のものであり, 実数の極は k が奇 数のときに限りただ 1 つだけ存在して添字は j = (k+1)/2であり, 値は t_R と表した.

複素対称性を用いて部分分数分解の式 (18) を書き直して,実部をとる演算 Re を用いて虚部が非負の極の項だけが現れる形にすれば,以下の式 (28) が得られる.

$$x'(t) = \begin{cases} c_{\infty} + \sum_{j=1}^{k/2} \operatorname{Re}\left(\frac{2c_j}{t - t_j}\right) & (k \, t^{\beta} \text{dB} \mathfrak{Y}), \\ c_{\infty} + \frac{c_R}{t - t_R} + \sum_{j=1}^{(k-1)/2} \operatorname{Re}\left(\frac{2c_j}{t - t_j}\right) & (k \, t^{\beta} \tilde{\mathfrak{F}} \mathfrak{Y}). \end{cases}$$
(28)

すると実有理関数 x'(t) に対応する実線形作用素 X' は, k が偶数の場合には以下の式 (29) と (30) の組により, k が 奇数の場合には以下の式 (31) と (32) の組により, それぞ れ与えられる.

複素対称性を利用することで X' を表すのに, k が偶数 のときにはシフトが虚数のレゾルベントを k/2 個用いて, k が奇数のときにはシフトが実数のレゾルベントを 1 個と シフトが虚数のレゾルベントを (k - 1)/2 個用いることに なる. 求めたい固有値の区間を $\lambda \in [a,b]$ とする.その位置 は任意で固有値分布の内側にあっても良い.線形変換 $\lambda = \frac{a+b}{2} + \left(\frac{b-a}{2}\right)t$ によりその区間を正規化座標で表 わした通過域 $t \in [-1,1]$ と対応させる.いま部分分数 分解の中の虚数の極 t_j とその係数 c_j の項に対しては $c_j/(t-t_j) = \ell_j/(\lambda - \rho_j)$ の関係がある.それらを組み合わ せると、レゾルベントの虚数のシフト ρ_j とその係数 ℓ_j は それぞれ以下の式 (29)により与えられる.

$$\rho_j \equiv \frac{a+b}{2} + \left(\frac{b-a}{2}\right) t_j, \ \ell_j \equiv \left(\frac{b-a}{2}\right) c_j.$$
(29)

そうして実線形作用素 X' は以下の式 (30) で与えられる.

$$\mathcal{X}' = c_{\infty}I + \sum_{j=1}^{k/2} \operatorname{Re}\{2\ell_j \mathcal{R}(\rho_j)\}.$$
 (30)

4.2.2 k が奇数の場合

求めたい下端の固有値を含む区間を $\lambda \in [a, b]$ とする. 線形変換 $\lambda = a + (b - a)t$ によりその区間と正規化座標で 表わした通過域 $t \in [0, 1]$ を対応させる.いま部分分数分 解の中の虚数の極 t_j とその係数 c_j の項に対しては、kが 偶数の場合と同様に $c_j/(t - t_j) = \ell_j/(\lambda - \rho_j)$ の関係があ る.すると、レゾルベントの虚数のシフト ρ_j とその係数 ℓ_j ,および実数の極 ρ_R とその実数係数 ℓ_R についても、そ れらは以下の式 (31)で与えられる.

$$\begin{cases} \rho_j \equiv a + (b-a)t_j, \ \ell_j \equiv (b-a)c_j, \\ \rho_R \equiv a + (b-a)t_R, \ \ell_R \equiv (b-a)c_R. \end{cases}$$
(31)

そうして実線形作用素 X'は、以下の式 (32) で与えられる.

$$\mathcal{X}' = c_{\infty}I + \ell_R \mathcal{R}(\rho_R) + \sum_{j=1}^{(k-1)/2} \operatorname{Re}\{2\ell_j \mathcal{R}(\rho_j)\}.$$
 (32)

4.3 合成を施された簡易型フィルタの作用の計算法

合成を施された簡易型のフィルタ *F*['] は以下の式 (33) で 与えられる.

$$\mathcal{F}' = g_{\rm s} T_n (2\mathcal{X}' - I) \,. \tag{33}$$

いま $\mathcal{Y}' \equiv 2\mathcal{X}' - I$ とおき、与えられた縦ベクトルの組 Vに対して $V^{(m)} \equiv T_m(\mathcal{Y}') V$ を定義すると、以下の 3 項漸 化式 (34) を用いて V から始めて $V^{(n)}$ が求まる.

$$\begin{cases} V^{(0)} = V, \\ V^{(1)} = \mathcal{Y}' V, \\ V^{(m)} = 2\mathcal{Y}' V^{(m-1)} - V^{(m-2)} \quad (m \ge 2 \mathcal{O} \ \ \ \ \). \end{cases}$$
(34)

するとフィルタ \mathcal{F}' のVに対する作用は、3 項漸化式を用いてVから $V^{(n)}$ を計算すれば以下の式 (35)で与えられる.

$$\mathcal{F}' V = g_{\rm s} V^{(n)} \tag{35}$$

合成前のフィルタ \mathcal{F} の伝達関数 g(t) は、n 次の Chebyshev 多項式を用いる簡易型の設計では $g(t) = g_{s}T_{n}(x(t))$, $x(t) = (\mu + \sigma)/(t + \sigma)$ で与えられる. この g(t) の式に含 まれるパラメタの組 (n, μ, σ) を「標準パラメタの 3 つ組」 と呼ぶことにする (係数の g_{s} は通過域での g(t) の最大値 が 1 という規格化条件、今の場合 g(0) = 1 から自然に決ま る). 他方でフィルタの伝達特性を特徴づける 3 つの形状 パラメタは μ , g_{p} , g_{s} である.

また、この伝達関数 $g(t) \ge k$ 次の有理関数 h(t) の関数 合成で得られる伝達関数は g'(t) = g(h(t)) であり、 $g(t) \ge g'(t)$ の両方で伝達率の閾値 $g_p \ge g_s$ は共通になるが、阻止 域の端を指定するパラメタ(あるいは遷移域の幅を決める パラメタ)は元の伝達関数 g(t) では μ であり、合成後の伝 達関数 g'(t) では μ' である(ただし $\mu = h(\mu')$ の関係があ る)、合成されたフィルタの伝達特性を特徴付ける 3 つの 形状パラメタは μ', g_p, g_s であり、これらの 3 つすべてあ るいはその一部をフィルタの設計に際して指定したい場合 がある.

そこで簡易型の伝達関数あるいはそれに合成を施したものについて,指定されたパラメタの組から伝達関数とそのフィルタを具体的に決定する方法を以下に記述する.ただし合成の種類(B-合成,C-合成,I-合成)とその有理関数 h(t)の次数 k は先に決めて設計を行うとする.

5.1 標準パラメタの3つ組 (n, μ, σ) を指定する場合

Chebyshev 多項式の次数 $n \geq n \geq y \neq \mu$ (> 1) と σ (> 0) の 3 つ, すなわち標準パラメタの 3 つ組 (n, μ, σ) を 指定する場合には,まず式 (12) を計算して $g_s \geq g_p$ の値を 求める.すると合成前の g(t) とその形状パラメタの 3 つ組 (μ, g_p, g_s) が決まる.

元の伝達関数 g(t) に h(t) を合成して得られる g'(t) = g(h(t)) は g(t) と閾値の値 g_s と g_s を共有するが, 遷移域の 幅に関係する μ' の値は関係 (9) を用いて μ から計算して 求める. すると合成された g'(t) の形状パラメタの 3 つ組 は (μ', g_p, g_s) である.

 μ と σ と 合成の種類と 合成の次数 k が決まれば x'(t) が 決まり、それから x'(t) の部分分数分解が決まり、それに 対応してレゾルベントの線形結合の実部を用いて表された 作用素 X'が決まり、それと Chebyshev 多項式の次数 n と g_s の値を用いて合成された伝達関数 g'(t) に対応するフィ ルタ $\mathcal{F}' = g_s T_n(2X' - I)$ が決まる.

5.2 3つ組 $(n, g_{\rm p}, g_{\rm s})$ を指定する場合

Chebyshev 多項式の次数 n と伝達関数の閾値 g_p , g_s を 指定する場合には,式 (12)の関係を逆に解いて μ と σ を 求める.それには以下の (36)の中の式を順に計算すれば よい.

$$\begin{cases}
w_1 \leftarrow \sinh\left(\frac{1}{2n}\cosh^{-1}\frac{1}{g_s}\right), \\
w_2 \leftarrow \sinh\left(\frac{1}{2n}\cosh^{-1}\frac{g_p}{g_s}\right), \\
\sigma \leftarrow \frac{1+w_2^2}{(w_1-w_2)(w_1+w_2)}, \\
\mu \leftarrow \sigma w_1^2.
\end{cases}$$
(36)

これにより,指定されたパラメタの3つ組 (n, g_p, g_s) から 標準パラメタの3つ組 (n, μ, σ) が決まるので,フィルタ \mathcal{F}' の構成法は前副節 (5.1)の「標準パラメタの3つ組 (n, μ, σ) を指定する場合」に帰着する.

5.3 形状パラメタの 3 つ組 $(\mu', g_{\rm p}, g_{\rm s})$ を指定する場合

合成されたフィルタ \mathcal{F}' の伝達関数 g'(t)の形状パラメタ の3つ組 ($\mu', g_{\rm p}, g_{\rm s}$)が指定された場合には、それから条件 を満たす標準パラメタの3つ組 (n, μ, σ)が決まれば、フィ ルタの具体的な構成は前々副節(5.1)の「標準パラメタの 3つ組 (n, μ, σ)を指定する場合」に帰着する.

しかしながら,形状パラメタの3つ組 (μ', g_p, g_s) が指定 されたときに,その3つを正確に与えるような標準パラメ タの3つ組 (n, μ, σ) を決めることは,次数 n は整数で連続 量ではないことから,一般には不可能である.そのためこ こでは形状パラメタの3つのうちの2つについては値を正 確に一致させるが,残りの1つの値については不等式によ る制約条件により指定することにする.

以下の 3 通りのそれぞれの場合について,標準パラメタ の 3 つ組 (*n*, μ, σ) を求める方法を以下に示す.

- (1) μ' と g_p は値で, g_s は上限値 G_s で指定
- (2) µ' と g_s は値で, g_p は下限値 G_p で指定
- (3) g_p と g_s は値で, µ' は上限値 M' で指定
- 5.3.1 $\mu' \geq g_p$ は値で、 g_s は上限値 G_s で指定する場合

この場合,次数nとしては条件 $g_s \leq G_s$ を満たせる最小のものを採用することにする. さらにnの上限値 n_{max} (たとえば 50)を適切に設定して,n = 1から始めて,以下の方法で探索を行なう.

まず式 (8) を用いて μ 'から計算して μ を求める.そう して,既に決まっている g_p と μ の値および探索中に仮定 する整数 n の値を用いて,以下の非線形方程式 (37) を解 いて σ の値を決める.

$$F(\sigma) \equiv \frac{\cosh\left(2n\sinh^{-1}\sqrt{\frac{\mu-1}{\sigma+1}}\right)}{\cosh\left(2n\sinh^{-1}\sqrt{\frac{\mu}{\sigma}}\right)} - g_{\rm p} = 0. \quad (37)$$

この非線形方程式 F(x) = 0 は適切に設定された x の非負 の初期区間 $[x_L, x_H]$ から 2 分法を用いて解くことができる (まず $F(0) = -g_p < 0$ である. そうして x を順次増大さ せてゆき (たとえば小さい正の値から始めて毎回 2 倍ずつ にする) そうして初めて $F(x) \ge 0$ が成り立つ x の値を見 つけたならその x の値を初期区間の上端 x_H とし, その直 前のまだ F(x) < 0 であった最後の x の値を初期区間の下 端 x_L にとればよい. あるいは簡単に $x_L = 0$ と設定する こともできる). そうして 2 分法により σ を求めたら,以 下の式 (38) を用いて, g_s の値を $n \ge \mu \ge \sigma$ から計算する.

$$g_{\rm s} \leftarrow 1 / \cosh\left(2n \sinh^{-1} \sqrt{\frac{\mu}{\sigma}}\right).$$
 (38)

このようにして求めた g_s の値が G_s 以下であれば条件を満 足できたことになるので探索を終了する.そうでなければ nの値を1つ増やして,nの値があらかじめ設定した上限 値を越えたら探索は失敗とするが,そうでなければ増やし たnについて上記の方法で繰り返し調べる.

5.3.2 μ'とg_sは値で,g_pは下限値G_pで指定する場合 ここでは次数 n として,指定された条件を満たすことの できる最小のものを採用することにする.さらに n の値の 上限値 n_{max} (例えば 50)をあらかじめ適切に決めておき, 条件を満たす標準パラメタの 3 つ組 (n,μ,σ)をその範囲の

nについてだけ探索することにする. まず式 (8) を用いて μ' から μ の値を計算で求める.そうして既に決まっている $g_{\rm s}$ と μ の値と探索でいま仮定している整数 n の値から,以下の (39)の中の 2 つの式を順に計算することにより σ と $g_{\rm p}$ の値を求める.その計算で得られた $g_{\rm p}$ の値が条件 $g_{\rm p} \ge G_{\rm p}$ を満たすような n の最小値を探索で求める.

$$\begin{pmatrix} \sigma & \leftarrow \mu / \sinh^2 \left(\frac{1}{2n} \cosh^{-1} \frac{1}{g_s} \right), \\
g_p & \leftarrow g_s \cosh \left(2n \sinh^{-1} \sqrt{\frac{\mu - 1}{1 + \sigma}} \right).
\end{cases}$$
(39)

最小値の探索法は、たとえば整数n & 1から始めて n_{\max} まで順に上昇させて行なうことができる. あるいはnについての 2 分法を用いて最初 1 と n_{\max} をそれぞれ上端と下端にして探索することもできる. なお、もしも $n = n_{\max}$ に於いて不等式 $g_p \ge G_p$ が満たせなければ、 n_{\max} 以下のnでは条件を満たすことはできない.

5.3.3 $g_{
m p}$ と $g_{
m s}$ は値で、 μ' は上限値 \mathcal{M}' で指定する場合

この場合,次数 n として条件 $\mu' \leq M'$ を満たせる最小の ものを採用することにする.またさらに n の上限値 n_{max} を適切に設定して探索を行なう.

まず M'から関係 M = h(M')を用いて μ の上限値 Mを求める.そうして、既に決まっている g_p と g_s の値および探索中に仮定する整数 n の値を用いて、以前に挙げた式

(36) を順に計算して μ と σ の値を求める. このようにして 求めた μ の値が M 以下であれば条件を満たせたことにな るが、そうでなければnのより大きい値を調べる. 関数合 成により得られたフィルタの伝達関数を表すためには、nにこのようにして求めた μ と σ を並べた標準パラメタの 3 つ組 (n,μ,σ) が決まればそれで十分である. しかし必要が あれば式 (9) を用いることで、 μ から求めた μ' が上限 M'を越えていないかを確認できる.

6. おわりに

レゾルベント1つの多項式によるフィルタで、その多項 式として n 次の Chebyshev 多項式を用いた簡易型のフィ ルタは,阻止域に於ける伝達率の大きさの上限値 gs を小 さくすることは次数 n を増やせば容易だが、それと引き換 えに通過域に於ける伝達率の最大最小比 1/gn が増大する. この比が大きいと(たとえば大きさが 4~6 桁),得られる 近似解の精度がそれだけ不均等になる可能性があり好まし くない.特に簡易型の伝達関数を用いる場合は、gsを増加 させずに 1/gp を減少させるためには,遷移域の幅を決め るパラメタμの値を大きくする必要がある.しかし遷移域 の幅 μ-1が大きくなれば(通常は)それにより固有値が 遷移域にある不要な固有対の数が増える.不変部分空間の 基底の良い近似を構成するためには、フィルタで濾過する ベクトルの数は固有値が通過域または遷移域に含まれる固 有ベクトルの数よりも多くなければならないので,μが大 きいとそれだけ多くのベクトルをフィルタで濾過する処理 が必要になり、計算の手間が増えて実用性が低下する. 今 回の関数合成を用いる方法により遷移域の幅は狭くできる が、それと引き替えにフィルタを構成するレゾルベントの 数が増す. 今回取り上げた B-合成あるいは特に C-合成や I-合成では、たとえば複素シフトのレゾルベントを2つ用 いる k = 4 の場合は、それらの線形結合の実部の多項式の 形で構成されたフィルタは、遷移域の幅をかなり狭めて良 い特性を実現できている. 複素シフトのレゾルベントを3 つ用いるk = 6の場合にはさらに特性は良くなる. そうし て k が偶数の場合には、求めたい固有値の範囲を指定する 区間 [a, b] は固有値分布に対して任意の位置に設定できる ので中間固有対用である.ただし、用いるレゾルベントの 数に比例して連立1次方程式の係数行列の分解に費やす演 算量が増える. それでもフィルタを複素シフトのレゾルベ ント 8~16 個程度の線形結合で構成する場合に比べると, 必要な複素シフトのレゾルベントの数が 2~3 個になるの で, 行列分解に掛かる演算量を減らす目的には有効である.

本報告の付録に,中間固有対を求める場合の実験例を掲 げておく.これは HPC-162 の報告 [29] の付録の内容から 下端固有対を求める例を除いたものである.

参考文献

- Richard W. Daniels: Approximation Methods for Electronic Filter Design, McGraw-Hill, 1974.
- [2] Miroslav D. Lutovac, Dejan V. Tošić, Brian L. Evans: Filter Design for Signal Processing, §12.8, Prentice Hall, 2001.
- [3] Sivan Toledo and Eran Rabani: "Very Large Electronic Structure Calculations Using an Out-of-Core Filter-Diagonalization Method", J. Comput. Phys., Vol.180, No.1 (2002), pp.256–269.
- [4] Tetsuya Sakurai and Hiroshi Sugiura: "A Projection Method for Generalized Eigenvalue Problems Using Numerical Integration", J. Comput. Appl. Math., Vol.159 (2003), pp.119–128.
- [5] Tetsuya Sakurai and Hiroto Tadano: "CIRR: a Rayleigh-Ritz Type Method with Contour Integral for Generalized Eigenvalue Problems", *Hokkaido Math. J.*, Vol.36, No.4 (2007), pp.745–757.
- [6] Eric Polizzi: "A Density Matrix-based Algorithm for Solving Eigenvalue Problems", *Phys. Rev. B*, Vol.79, No.1 (2009), pp.115112(6pages).
- [7] Tsutomu Ikegami, Tetsuya Sakurai and Umpei Nagashima: "A Filter Diagonalization for Generalized Eigenvalue Problems Based on the Sakurai-Sugiura Projection Method", J. Compu. Appl. Math., Vol.233, No.8 (2010), pp.1927–1936.
- [8] Martin Galgon, Lukas Krämer and Brunno Lang: "The FEAST Algorithm for Large Eigenvalue Problems", PAMM. Proc. Appl. Math. Mech., Vol.11 (2011), pp.747–748.
- [9] Anthony P. Austin and Lloyd N. Trefethen: "Computing Eigenvalues of Real Symmetric Matrices with Rational Filters in Real Arithmetic", SIAM J. Sci. Comput, Vol.37, No.3 (2015), pp.A1365–A1387.
- [10] Stefan Güttel, Eric Polizzi, Ping Tak Peter Tang and Gautier Viaud: "Zolotarev Quadrature Rules and Load Balancing for the FEAST Eigensolver", SIAM J. Sci. Comput, Vol.37, No.4 (2015), pp.A2100-A2122.
- [11] Hiroshi Murakami: "Filter Diagonalization Method by Using a Polynomial of a Resolvent as the Filter for a Real Symmetric-Definite Generalized Eigenproblem", *in proceedings of EPASA2015*, Springer, LNCSE-117 (2018), pp.205–232.
- [12] 村上弘:固有値が指定された区間内にある固有対を解く ための対称固有値問題用のフィルタの設計, 情報処理学 会論文誌:コンピューティングシステム (ACS31), Vol.3, No.3 (2010), pp.1–21.
- [13] 村上弘:対称一般固有値問題のフィルタ作用素を用いた不 変部分空間の近似構成,情報処理学会論文誌:コンピュー ティングシステム (ACS35), Vol.4, No.4 (2011), pp.1–14.
- [14] 村上弘: レゾルベントを用いたフィルタによる固有値問題の解法について,情報処理学会研究報告, Vol.2012-HPC-133, No.22 (2012), pp.1–8.
- [15] 村上弘: 実対称定値一般固有値問題の最小側固有値を持つ 固有対に対する実数シフトのレゾルベントを組み合わせ たフィルタによる解法, 先進的計算基盤システムシンポジ ウム論文集 2012 (2012), pp.81–82.
- [16] 村上弘: Hermite 対称な定値一般固有値問題のフィルタ対 角化法について、情報処理学会研究報告, Vol.2012-HPC-134, No.1 (2012), pp.1–8.
- [17] 村上弘: レゾルベントの線形結合をフィルタに用いたエルミート定値一般固有値問題のフィルタ対角化法, 情報処理学会論文誌:コンピューティングシステム (ACS45), Vol.7, No.1 (2014), pp.57–72.
- [18] 村上弘: レゾルベントの多項式をフィルタとして用いる対

角化法について,情報処理学会研究報告, Vol.2014-HPC-146, No.13 (2014), pp.1-4.

- [19] 村上弘:実対称定値一般固有値問題に対するレゾルベントの多項式によるフィルタの構成法の検討,情報処理学会研究報告, Vol.2014-HPC-147, No.2 (2014), pp.1–10.
- [20] 村上弘:フィルタ対角化法について,日本応用数理学会 2014年度年会予稿集 (2014年8月), pp.329-330.
- [21] 村上弘:実数シフトのレゾルベントを組み合わせたフィ ルタによる実対称定値一般固有値問題の下端付近の固有 値を持つ固有対の解法, HPCS2015 シンポジウム論文集, Vol.2015 (2015), pp.38–51.
- [22] 村上弘: 一つのレゾルベントから構成されたフィルタを 用いた実対称定値一般固有値問題に対するフィルタ対角 化法の実験, 情報処理学会研究報告, Vol.2015-HPC-149, No.7 (2015), pp.1–16.
- [23] 村上弘: 実数シフトのレゾルベントの多項式をフィルタに 用いた実対称定値一般固有値問題の下端付近の固有値を 持つ固有対の解法, 日本応用数理学会 2015 年度年会予稿 集 (統合版) (2015), pp.442–443.
- [24] 村上弘:「固有値問題の解法に用いるレゾルベントの多項式 型のフィルタの設計」, **情報処理学会研究報告**, Vol.2016-HPC-153, No.38 (2016 年 3 月), pp.1–13.
- [25] 村上弘:「虚数シフトのレゾルベントの多項式の実部を フィルタに用いた実対称定値一般固有値問題の中間固有 対の解法」, HPCS2016 シンポジウム論文集 (ポスタ発表 論文) (2016 年 6 月), p.49(全 1 頁).
- [26] 村上弘:実対称定値一般固有値問題の最小側固有対を解 くための実数シフトのレゾルベントの多項式によるフィ ルタの簡易な設計法,情報処理学会研究報告集, Vol.2016-HPC-155, No.44 (2016), pp.1–27.
- [27] 村上弘:「レゾルベントの多項式をフィルタに用いた対称 定値一般固有値問題のフィルタ対角化法」,日本応用数理 学会 2016年度年会予稿集 (2016年9月)2頁分.
- [28] 村上弘:レゾルベントの多項式によるフィルタの伝達特性の調整,数理解析研究所講究録, No.2054(2017 年 10 月), pp.168–181.
- [29] 村上弘:「少数のレゾルベントから構成されたフィルタを 用いた対称定値一般固有値問題の解法」, 情報処理学会研 究報告,Vol.2017-HPC-162,No.21(2017 年 12 月),pp.1–34.

付 録

A.1 実験について

A.1.1 使用した計算機システムとプログラミング環境

CPUは Intel Corei7-5960X(8 コア,クロック 3.0GHz, L3 キャッシュ 20MiB, AVX2 拡張命令セット)で,Hyper-Thread 機能や Turbo-Boost 機能は BIOS のメニューでオ フにしてある. 主記憶は DDR4-2133MHz (PC4-17000)で クアドチャネル, 16GiB のモジュールを 8 個で主記憶の全 容量は 128GiB である. OS は CentOS 7 for x86_64 (64bit 版)である.

プログラムは Fortran90 と OpenMP ディレクティブ を入れてコーディングをし、コンパイラは Intel Fortran v15.0.0 for x86_64 で、コンパイラのオプションに "-fast -openmp" を指定して OpenMP による 8 スレッド並列で 実行した.

A.1.2 計算の主要部

計算の主要部は、行列 X と Y を実あるいは複素の N 次 の縦ベクトル m 個を列方向に並べた $N \times m$ 行列とすると きに、与えられた X に対してレゾルベント $\mathcal{R}(\rho_j)$ を適用 した結果である $Y \leftarrow \mathcal{R}(\rho_j)X$ を求めるところである。今 回のフィルタは $\mathcal{F}' = g_s T_n(\mathcal{Y}')$ であり、 $\mathcal{Y}' \equiv 2\mathcal{X}' - I$ は 以下の式 (A.1) により表される実線形作用素(実ベクトル に対して実ベクトルを与える線形作用素)である。

$$\begin{cases} (2c_{\infty}-1)I + \sum_{j=1}^{k/2} \operatorname{Re}\{4\ell_{j}\mathcal{R}(\rho_{j})\} (k \, b^{*} \operatorname{偶数}), \\ (2c_{\infty}-1)I + 2\ell_{R}\mathcal{R}(\rho_{R}) + \sum_{j=1}^{(k-1)/2} \operatorname{Re}\{4\ell_{j}\mathcal{R}(\rho_{j})\} (k \, b^{*} \widehat{e}) \end{cases} \end{cases}$$
(A.1)

 $A \geq B \geq N$ 次の実対称行列としてシフトが ρ_j のレゾル ベントは $\mathcal{R}(\rho_j) \equiv (A - \rho_j B)^{-1} B$ なので, $C^{(j)} \equiv A - \rho_j B$ とすると, $Y^{(j)} \leftarrow \mathcal{R}(\rho_j) X$ の計算は, A jについて共通 な右辺 BX を持つ連立 1 次方程式 $C^{(j)}Y^{(j)} = BX \geq Y^{(j)}$ について解くことに帰着する.行列 $C^{(j)}$ は対称で,シフト ρ_j が実数であるか虚数であるかによって実行列あるいは複 素行列になるが,さらに以下の例題のように $A \geq B$ が帯 行列であれば $C^{(j)}$ も帯行列となる.

今回の実験に用いたプログラムは,簡単化のために係数 が実あるいは複素の帯対称行列である連立1次方程式を 帯の内部は実際には非常に疎であるが帯の内部を密であ るかのようにして扱い,領域分割法やブロック化手法など は用いずに,古典的な BLAS-2 レベルの帯用の改訂コレ スキ法で解いている.それを Fortran90 で記述したものに OpenMP の指示を挿入している.これは現段階での研究 の主な目的は,フィルタ対角化法の手法の数値的な性質の 検証であって,まだ使用する計算機システムの性能を高度 に絞り出す段階ではないからである.今回の各実験結果に 対して掲げた経過時間の測定値はそのような性格のもので ある.各種の計算機システム上で帯対称行列の連立1次方 程式を効率良く解く方法の研究はまた別の課題になる.

連立 1 次方程式 $C^{(j)}Y^{(j)} = BX$ を解くには,各 j に ついて共通の右辺ベクトルの組 BX を作るために,ま ず X に帯行列 B を乗じる処理 Z ← BX を行う.そ うして対称帯行列用の改訂コレスキ法による行列分解 $C^{(j)} \Rightarrow L^{(j)}D^{(j)}(L^{(j)})^T$ の処理と,その分解結果を用い て前進消去と後退代入を行なって $Y^{(j)}$ を求める処理 $Y^{(j)} \leftarrow (L^{(j)})^{-T} \{ (D^{(j)})^{-1}(L^{(j)})^{-1}Z \}$ が要る.複素版の 改訂コレスキ法は通常の実数版の算法中の数値と四則演算 をそのまま複素数のものに置き換えることで得られる.改 訂コレスキ分解の結果は残しておき繰り返し用いる. **注 1**

シフト ρ_j が実数で $C^{(j)}$ が実対称正定値の場合には,ピ ボット選択をしなくても(改訂)コレスキ法の計算は数値 安定であるが,シフト ρ_j が複素数で $C^{(j)}$ が複素対称であ る場合にはそのような保証は無い.そのため $C^{(j)}$ が複素対 称の場合に数値安定性を保証するために行列の対称性の利 用をやめて,片側ピボット選択を入れた帯行列用のLU分 解法を用いることができる.しかしそのようにするとLU分解の記憶量はピボット選択なしの(改訂)コレスキ法を 用いる場合に比べて(行選択により上帯幅は2倍にまで拡 がる可能性があるので)3倍になり,計算に用いる演算量 もかなり増えるので,今回の実験例では係数行列 $C^{(j)}$ が 複素対称の場合にはピボット選択なしの帯行列用の(複素 版の)改訂コレスキ法を用いている.

注2

今回の実験ではまず j について順次に行列 C^(j) の(改 (数).訂) コレスキ分解を作っておく.それから j について順次 に連立 1 次方程式 C^(j)Y^(j) = Z を解くのには既に作って おいた行列 C^(j) の分解結果を利用して前進消去と後退代 入を行って解 Y^(j) を求める.前進消去と後退代入の処理 の中では,m個のベクトルの組をまとめて計算することに より,マルチコア計算機の主記憶(共有メモリ)に置かれ た帯行列 C^(j) の分解で得た帯行列 L^(j) に対する記憶参照 の量を節約している.

A.1.3 例題の一般固有値問題について

実験の例題として用いた行列の実対称定値一般固有値問 題 $A\mathbf{v} = \lambda B\mathbf{v}$ は、辺の長さが π の辺が座標軸に沿った 3 次元立方体 $[0,\pi] \times [0,\pi] \times [0,\pi]$ の内部を領域とし、その境 界である表面に於いて零-ディリクレ条件を課したときの (符号を逆にした) 3 次元ラプラシアン – ∇^2 の固有値問題、 それを有限要素法で離散化近似して得られるものである.

用いた要素分割は立方体領域の各辺の方向をそれぞれ個 数 N₁ + 1, N₂ + 1, N₃ + 1 の等間隔の小区間に分割した もので、要素内での展開基底関数には各辺方向の3重線形 関数を用いた.この有限要素法の離散化で得られる行列*A* と*B*の次数は $N = N_1 N_2 N_3$ であり、($N_1 \le N_2 \le N_3$ で あるとして)行列の帯幅がなるべく小さくなるように基底 関数に適切に番号を付けると、各行列の(対角を含まない) 半帯幅(下帯幅)は $w_L = 1 + N_1 + N_1 N_2$ にできる.

今の場合に、辺に沿った3方向の1次元 FEM の展開基 底である区分線形関数はそれぞれ N_1 個、 N_2 個、 N_3 個あ り、3方向の区分線形関数に対してその頂上の位置の増加順 につけた順番をそれぞれ i_1 、 i_2 、 i_3 とする ($1 \le i_k \le N_k$, k = 1,2,3). 3次元 FEM の展開基底である3重線形関 数は各方向の展開基底の積なので3重添字 (i_1,i_2,i_3)に より指定できる.3重線形関数の3重添字に対しては $i_1 + N_1(i_2 - 1) + N_1N_2(i_3 - 1)$ の値により順番を付けて、 それに基づいて3次元 FEM の係数行列 A や B を組み立 てている.

そうして,固有値 λ が区間 [*a*,*b*] に含まれる固有対の近 似をフィルタ対角化法を適用して求めた.このテスト例題 の一般固有値問題の固有値は簡単な数式で表わせるので, 式の計算により厳密な値を容易に求めることができる.ま たそのことを用いて,固有値の厳密値を列挙して値順に並 べることで,固有値が区間 [*a*,*b*] にある固有対の正しい数 も求められる.

A.1.3.1 例題の固有値の厳密値を与える式

1 次元の区間 $[0,\pi]$ に於ける零-Dirichlet 境界条件の Laplacian (但し符号を逆にした $-\nabla^2$)を有限要素法で離 散化して得られる「行列の一般固有値問題」の固有値の全体 は,区間 $[0,\pi]$ をN+1等分して得られる幅 $h = \pi/(N+1)$ の小区間による分割の区分線形関数を基底とする場合に は, $\theta_k \equiv hk$ とおくと以下の式 (A.2) で与えられる.

$$E(N,k) = \frac{k^2 \left(\frac{\sin \theta_k}{\theta_k}\right)^2}{\frac{(1+\cos \theta_k)(2+\cos \theta_k)}{6}}, \ k = 1, 2, \dots, N.$$
(A.2)

そうして 3 次元立方体領域 $[0, \pi] \times [0, \pi] \times [0, \pi]$ の各座標軸 方向の区間をそれぞれ N_1+1 , N_2+1 , N_3+1 に等分割して 各方向の 1 次元の基底の直積型の基底関数(3 重線形関数) を用いた場合の有限要素法では, $k_i=1,2,\ldots,N_i$ とすると き (k_1,k_2,k_3) で識別される 3 次元 Laplacian $(-\nabla^2)$ の固 有値 $E((N_1,N_2,N_3),(k_1,k_2,k_3))$ の値は 1 次元の場合の固 有値の和の形で, 数式 $E(N_1,k_1) + E(N_2,k_2) + E(N_3,k_3)$ により与えられる.

A.1.4 フィルタ対角化法の概要

フィルタ対角化法では,まず最初に m 個のランダムな ベクトルの組 ($N \times m$ 行列)を乱数で生成して,それらを B-正規直交化して m 個のベクトルの組 X を作る.そうし て区間 [a,b]を通過域とするフィルタを X に作用させて m個のベクトルの組 $Y \leftarrow FX$ を作る. この X と Y をもとにして,使用したフィルタの伝達特 性も考慮に入れて,元の一般固有値問題のある「不変部分 空間」を近似する空間の基底を Y の列の適切な線形結合と して構成する [13].その「不変部分空間」は,区間 [a, b] の ある適切な近傍に入る固有値を持つ固有ベクトルの全体で 張られるものである.その「不変部分空間」の近似空間の 基底に Rayleigh-Ritz 法を適用して得られた Ritz 対を元の 一般固有値問題の近似対として採用する.得られた近似対 については(近似対に改良を加える場合はその後に),近似 固有値を検査して指定区間 [a, b] にないものについては棄 却することができる.

A.1.5 近似対の品質の評価方法

得られた近似固有対 (λ, v) に対する残差の定義は

$$\mathbf{r} \equiv (A - \lambda B)\mathbf{v} \tag{A.3}$$

であり, 残差の B-1-ノルムの定義を

$$\Delta \equiv \sqrt{\mathbf{r}^T B^{-1} \mathbf{r}} \tag{A.4}$$

とする.ただし固有対の固有ベクトル v はあらかじめ *B*-正 規化がされているものとする(つまり v^T Bv = 1 である).

残差 **r** の B^{-1} -ノルムの値 Δ の計算を行なうには,行列 B のコレスキ分解あるいは改訂コレスキ分解が全体で1度 だけ必要になる.そうしてコレスキ分解 $B = LL^T$ の場合 は $\Delta = ||L^{-1}\mathbf{r}||_2$ であり,改訂コレスキ分解 $B = LDL^T$ の 場合は $\Delta = \sqrt{(L^{-1}\mathbf{r})^T D^{-1}(L^{-1}\mathbf{r})}$ である.

B-正規化された近似対の残差に対する B^{-1} -ノルムの値 は,標準固有値問題 $A\mathbf{x} = \lambda \mathbf{x}$ に対する Wilkinson の固有 値の誤差限界 $||\mathbf{r}||_2$ を定値一般固有値問題 $A\mathbf{x} = \lambda B\mathbf{x}$ に対 して単純に拡張したものであることが示せる.ただし近似 対のベクトルの誤差が大きければ固有値の誤差評価として は過大になる.また行列 *B* の条件数が大きいと評価が悪 くなる.

付記:

今回の実験例には取り入れていないが,近似対 (λ, v) に 対して B⁻¹-ノルムの値 Δ を計算する代わりに,以下の式 (A.5) で与えられる残差 r の相対的な大きさ Θ を (ベクト ルのノルム ||・|| にたとえば 2-ノルムを用いて)計算する 方が,近似対の品質評価の方法としては (行列 B の分解や 分解の結果を用いた前進消去・後退代入が不要なので)計 算量や記憶の参照量が少なく容易である.しかも複数の固 有対に対する Θ の値をまとめて計算すれば,行列 A と B の記憶全体を参照する回数はそれぞれ 1 回ずつで済む.

$$\Theta = \frac{||A\mathbf{v} - \lambda B\mathbf{v}||}{||\lambda B\mathbf{v}||} = \frac{||\mathbf{r}||}{||\lambda B\mathbf{v}||}.$$
 (A.5)

A.1.6 各計算実験の結果のグラフについて

各計算実験の結果については、4 枚組のグラフを縦に並 べて示している. • 最上段のグラフは、上述の $X \ge Y$ から作った m 次の (対称)行列 $\beta = X^T BY$ の固有値の分布を減少順に 並べて、その順位を横軸にとり、 β の固有値の大きさ (絶対値)の対数を縦軸にとって(値が正なら赤色の 点、負なら青色の点で)プロットしたものである。 阻止域に於けるフィルタの伝達率の上限値を g_s と し、計算に用いた倍精度計算のマシンイプシロンを $\epsilon_{MAC} = 2.22 \times 10^{-16}$ とするとき、 g_s の 10 倍の値と ϵ_{MAC} の 100 倍の値の大きい方の値を β の固有値に対 する閾値として設定したので、グラフ中のその位置に 黒い水平線を描いている。

βの固有値に閾値を下回るものがなければ,フィルタ で濾過したベクトルの数 *m* はまだ十分ではないこと を示す.

• 上から 2 段目のグラフは, m 次の実対称行列 $\alpha = Y^T BY$ により, m 次の一般固有値問題 $\alpha \mathbf{u} = \phi \beta \mathbf{u} \, \delta \epsilon$ 考えて, その m 次の一般固有値問題に対して, β の固 有空間を固有値の絶対値の小さい部分を切断して解い て得られた固有値 ϕ , その分布を減少順に, 横軸に順 位をとり, 縦軸に大きさ $|\phi|$ の対数をとって (ϕ の値 が正なら赤色の点, 負なら青色の点で) プロットした ものである. この ϕ の値は Y で張られる空間に含ま れる元の固有値問題の固有対 (λ , \mathbf{v}) のベクトルのフィ ルタによる伝達率 $f(\lambda)$ の近似値である.

グラフに描いた黒い水平線は,通過域での伝達率の最 小値 g_p よりも下側にあって φ の値分布の中で比較的 広い空隙のある最初の場所であり,φ の閾値として採 用された値を示すものである.

- 上から3段目のグラフは、フィルタ対角化で得られた 近似対について、横軸にはその固有値をとり縦軸には 固有値の厳密値との差の大きさを対数でとってプロッ トしたものである。
- 上から4段目のグラフは、フィルタ対角化で得られた 近似対について、横軸にはその固有値をとり縦軸には 残差の B⁻¹-ノルムの値を対数をとってプロットした ものである。

A.2 実験:中間固有対を求めてみた例

本論文で述べた Chebyshev 多項式を多項式として用いる簡易構成型のフィルタ Fを, B-合成, C-合成, I-合成のそれぞれに対応する有理関数 h(t) を合成したフィルタ F'を用いて一般固有値問題 A**v** = λB **v** の近似固有対をフィルタ対角化法により求める実験を行なう. チェビシェフ多項式の次数を n, 合成に用いる有理関数の次数を k とする.

有限要素法の離散化の要素分割の方式は $(N_1, N_2, N_3) =$ (50, 60, 70) で、それにより生じる一般固有値問題の係数行 列 $A \ge B$ の次数は N = 210,000、下帯幅は $w_L = 3,051$ である.

合成されたフィルタ F'の3つの形状パラメターに対す

る条件の指定は $\mu' = 1.5$, $g_p = 10^{-2}$, $g_s \le G_s = 10^{-15}$ と 3 種類の合成についてすべて共通にした.

求めたい固有対の固有値の範囲を [*a*, *b*] = [100, 110] に設 定して,次数 *k* が偶数の場合だけについて実験を行なった. この問題の固有対で固有値が区間 [100, 110] にあるものの 数は 68 である.

フィルタにより濾過するランダムなベクトルの数をm = 120とした.

注記:正規化座標 t によるフィルタの通過域と遷 移域を併せた領域 $t \in [-\mu', \mu'] = [-1.5, 1.5]$ と対 応する固有値の区間は今の場合は $\lambda \in [97.5, 112.5]$ であり、その区間に固有値が含まれる固有対の数 は 107 である.

A.2.1 B-合成の場合

表 A・1 に B-合成で,合成用の関数 h(t) の次数 k が偶数 4,5,6の各場合について,条件を満たすフィルタを実現す る最小の次数 n とパラメタ μ と σ の値,および上限 10^{-15} を満たす g_s の実際の値を示す(μ' と g_p についてはそれぞ れ指定された値 1.5 と 10^{-2} になる).次数 k が 2 の場合に は(n が 50 以下の範囲では)条件を満たすフィルタを得る ことはできなかった.

表 A·1 実験(B-合成):パラメタの値

k	n	μ	σ	$g_{ m s}$
4	27	5.063	10.26	8.85×10^{-16}
6	12	11.39	2.464	3.76×10^{-16}
8	9	25.63	1.573	7.18×10^{-17}

指定された条件を満たすように構成された次数 k が偶数 4, 6, 8 の 3 通りの伝達関数 g'(t) について,その大きさの グラフ(偶関数の対称性から右半分だけ)を図 A・1 に示 す.これらの伝達関数を持つフィルタを B-合成の場合の 実験に用いた.



図 A·1 実験(B-合成):伝達関数の大きさ |g'(t)|(右半分)

フィルタ対角化法では、フィルタを m 個のベクトルに適

情報処理学会研究報告

IPSJ SIG Technical Report

用する処理を行なう部分が,計算量と計算時間の主要部分 である.**表**A·2にB-合成で,*h*(*t*)の次数*k*が偶数4,6, 8の各場合について,合成前の簡易型構成のChebyshev多 項式の次数*n*,合成されたフィルタを用いて*m*個のベクト ルの組を濾過するために掛かった全経過時間(行列分解に 掛かる経過時間を含む),およびそれに含まれている(必要 なレゾルベントをすべて構成するための)行列分解全体に 掛かった全経過時間をそれぞれ示す.

k が 4, 6, 8 の各場合に対してそれぞれ半分の 2 個, 3 個, 4 個の *N* 次の複素対称帯行列の対称分 解を(複素版の改訂コレスキ分解を用いて)行な う必要がある。

注記

表 A·2 から、もしも同じプログラムコードを用いて複素 シフトのレゾルベントをたとえば 8 個使ってそれらの線形 結合をフィルタとして用いる計算を行なうとすれば、それ ら 8 個の行列分解を行なうだけでも既に 2,400 秒程度が掛 かることになり、それよりも、これら k が 4,6,8 の場合 のフィルタ適用全体に掛かる時間の方が短くて済むことが わかる.ただし得られる結果の数値的な精度の面や、レゾ ルベントを多く使うと特性の鋭い遷移域の狭いフィルタを 作れて濾過するべきベクトルの数 m を絞り込めるなどい ろいろ考慮すべき点があるので、時間だけで単純に比較す ることはできない.

表 A·2 実験(B-合成):フィルタ適用の経過時間(秒)

k	n	フィルタ適用全体	行列分解全体
4	27	1,582	612
6	12	1,537	919
8	9	1,829	1,225

- k = 4 の場合の実験結果を 4 枚組の図 A·2~図 A·4 に示す.
- 1 枚目の β の固有値分布のグラフから, 閾値以下の 固有値が多数あることから, 濾過したベクトルの数 m = 120 は十分であることがわかる.
- 固有値の厳密値が分かる例題なので描けるのであるが、3枚目のグラフからは、固有値の絶対誤差が3×10⁻¹³程度以下で、有効精度が14.5桁程度以上あることがわかる。
- 4枚目の残差の B⁻¹-ノルムのグラフから,残差のノルムは固有値の区間 [100,110] の中央付近では 3×10⁻¹⁰
 程度で,区間の両端付近では 3×10⁻⁸ になっている.
- k = 6 の場合の実験結果を 4 枚組の図 A·6~図 A·8 に示す。
- 1 枚目の β の固有値分布のグラフから, 濾過したベ クトルの数 m = 120 は十分であることがわかる.
- 3枚目のグラフからは、固有値の絶対誤差が 3×10⁻¹³
 程度以下で、有効精度が 14.5 桁程度以上あることが わかる.

- 4枚目の残差の B⁻¹-ノルムのグラフから、残差のノ ルムは固有値の区間 [100,110] の中央付近では 10⁻¹⁰ 程度で、区間の両端付近では 10⁻⁸ になっている。
- k = 8の場合の実験結果を4枚組の図 A·10~図 A·12 に示す.
- 1 枚目の β の固有値分布のグラフから, 濾過したベ クトルの数 m = 120 は十分であることがわかる.
- 3枚目のグラフからは、固有値の絶対誤差が 3×10⁻¹³
 程度以下で、有効精度が 14.5 桁程度以上あることが わかる.
- 4枚目の残差の B⁻¹-ノルムのグラフから,残差のノルムは固有値の区間 [100,110] の中央付近では 3×10⁻¹¹程度で,区間の両端付近では 10⁻⁹ になっている.





図 A·12 実験(B-合成, k=8):固有値の絶対誤差(区間 [100, 110])



図 A·13 実験(B-合成, k=8):残差の B⁻¹-ノルム(区間 [100, 110])

合成用の関数 h(t) の次数 k のそれぞれに対して, 横軸 に近似対の固有値をとり, 縦軸に固有値の真の値からの 絶対誤差の大きさの対数をとってプロットしたグラフを 図 A·14 に示す. グラフから固有値の絶対誤差はどれも 3×10^{-13} 程度であり,有効精度が 14.5 桁程度であること がわかる.また同様に次数 k のそれぞれに対して,横軸に 近似対の固有値をとり,縦軸に近似対の残差の B^{-1} -ノル ムの対数をとってプロットしたグラフを図 A·15 に示す. 次数 k が 4, 6, 8 と増えるにつれて残差が 3 分の 1 ずつ程 度に減少する傾向を示している.



図 A·14 実験(B-合成):各 k に対する固有値の絶対誤差(区間 [100, 110])



図 A·15 実験(B-合成):各 k に対する近似対の残差の B⁻¹-ノル ム(区間 [100, 110])

A.2.2 C-合成の場合

表 A·3 に C-合成で、合成用の関数 h(t) の次数 k が偶数 4、6、8 の各場合について、条件を満たすフィルタを実現す る最小の次数 $n \geq n$ ラメタ $\mu \geq \sigma$ の値、および上限 10^{-15} を満たす g_s の実際の値を示す ($\mu' \geq g_p$ についてはそれぞ れ指定された値 1.5 $\geq 10^{-2}$ になる). 次数 k が 2 の場合に は (n が 50 以下の範囲では)条件を満たすフィルタを得る ことはできなかった.

表 A·3 実験 (C-合成): パラメタの値

k	n	μ	σ	$g_{ m s}$
4	12	12.25	2.439	1.52×10^{-16}
6	6	81.00	0.8763	7.58×10^{-16}
8	5	552.25	0.6624	4.84×10^{-18}

指定された条件を満たすように構成された次数 k が偶数 4, 6, 8の3通りの伝達関数 g'(t) について,その大きさの グラフ(偶関数の対称性から右半分だけ)を図 A·16 に示 す.これらの伝達関数を持つフィルタを C-合成の場合の 実験に用いた.



図 A·16 実験(C-合成):伝達関数の大きさ |g'(t)|(右半分)

フィルタ対角化法では, m 個のベクトルの組にフィルタ を適用する処理を行なう部分が, 計算量と計算時間の主要 部分である. **表** A・4 に C-合成で, h(t) の次数 k が偶数 4, 6, 8 の各場合について, 合成前の簡易型構成の Chebyshev 多項式の次数 n, 合成されたフィルタを用いて m 個のベク トルの組を濾過するために掛かった全経過時間(行列分解 に掛かる経過時間を含む), およびそれに含まれている(必 要なレゾルベントをすべて構成するための)行列分解全体 に掛かった全経過時間をそれぞれ示す.

*k*が4,6,8の各場合に対してそれぞれ半分の2 個,3個,4個の*N*次の複素対称帯行列の対称分 解を(複素版の改訂コレスキ分解を用いて)行な う必要がある.

 k = 4の場合の実験結果を4枚組の図 A·17~図 A·19 に示す。

表 A·4 実験(C-合成):フィルタ適用の経過時間(秒)

k	n	フィルタ適用全体	行列分解全体
4	12	1,044	613
6	6	1,228	919
8	5	1,560	1,225

- 1 枚目の β の固有値分布のグラフから, 濾過したベ クトルの数 m = 120 は十分であることがわかる.
- 3枚目の固有値の絶対誤差のグラフからは、絶対誤差が3×10⁻¹³以下で、固有値の有効精度が14.5桁程度であることがわかる。
- 4 枚目の残差のノルムのグラフからは、残差のノルムが区間 [100,110] で 3×10⁻¹¹~3×10⁻⁹ の範囲で振動しているが、これは C-合成の伝達関数の通過域 [-1,1] での振動や伝達率の最大最小比 1/g_p = 10² と傾向が一致している。
- k = 6 の場合の実験結果を 4 枚組の図 A·21~図 A·23
 に示す.
- 1 枚目の β の固有値分布のグラフから, 濾過したベ クトルの数 m = 120 は十分であることがわかる.
- 3枚目の固有値の絶対誤差のグラフからは、絶対誤差が3×10⁻¹³以下で、固有値の有効精度が14.5桁程度であることがわかる。
- 4 枚目の残差のノルムのグラフからは、残差のノルムが区間 [100,110] で 10⁻¹¹~10⁻⁹の範囲で振動しているが、これは C-合成の伝達関数の通過域 [-1,1] での振動や伝達率の最大最小比 1/g_p = 10² と傾向が一致している。
- k = 8の場合の実験結果を4枚組の図 A·25~図 A·27 に示す。
- 1 枚目の β の固有値分布のグラフから, 濾過したベ クトルの数 m = 120 は十分であることがわかる.
- 3枚目の固有値の絶対誤差のグラフからは、絶対誤差が3×10⁻¹³以下で、固有値の有効精度が14.5 桁程度であることがわかる.
- 4枚目の残差のノルムのグラフからは、残差のノルムが区間 [100,110] で 3×10⁻¹²~10⁻⁹の範囲で振動しているが、これは C-合成の伝達関数の通過域 [-1,1]での振動や伝達率の最大最小比 1/g_p = 10² と傾向が一致している。



図 A·20 実験(C-合成, k=4):残差の B⁻¹-ノルム(区間 [100, 110])



図 A·23 実験 (C-合成, k=6): 固有値の絶対誤差 (区間 [100, 110])



図 A·24 実験(C-合成, k=6):残差の B⁻¹-ノルム(区間 [100, 110])



図 A·27 実験 (C-合成, k=8): 固有値の絶対誤差 (区間 [100, 110])



図 A·28 実験 (C-合成, k=8): 残差の B⁻¹-ノルム (区間 [100, 110])

合成用の関数 h(t) の次数 k のそれぞれに対して, 横軸 に近似対の固有値をとり, 縦軸に固有値の真の値からの 絶対誤差の大きさの対数をとってプロットしたグラフを 図 A·29 に示す. グラフから固有値の絶対誤差はどれも 10^{-13} 程度であり, 有効精度が 15 桁程度であることがわか る.また同様に次数 k のそれぞれに対して, 横軸に近似対 の固有値をとり, 縦軸に近似対の残差の B^{-1} -ノルムの対 数をとってプロットしたグラフを図 A·30 に示す. グラフ から残差のノルムの振舞いとフィルタの伝達関数 g'(t) の 通過域 $t \in [-1,1]$ での振舞いに類似性が見られる.



図 A·29 実験(C-合成):各 k に対する固有値の絶対誤差(区間 [100,110])



図 A·30 実験(C-合成):各 k に対する近似対の残差の B⁻¹-ノル ム (区間 [100, 110])

A.2.3 I-合成の場合

表 A・5 に I-合成で、合成用の関数 h(t) の次数 k が偶数 4、6、8 の各場合について、条件を満たすフィルタを実現す る最小の次数 n とパラメタ μ と σ の値、および上限 10^{-15} を満たす $g_{\rm s}$ の実際の値を示す (μ' と $g_{\rm p}$ についてはそれぞ れ指定された値 1.5 と 10^{-2} になる). 次数 k が 2 の場合に は (n が 50 以下の範囲では)条件を満たすフィルタは得ら れなかった.

表 Δ.5 宝駘(L合成):パラン	く々の値

k	n	μ	σ	$g_{ m s}$
4	12	12.25	2.439	1.52×10^{-16}
6	6	81.00	0.8763	7.58×10^{-16}
8	5	552.25	0.6624	4.84×10^{-18}

指定された条件を満たすように構成された次数 k が偶数 4, 6, 8 の 3 通りの伝達関数 g'(t) について,その大きさの グラフ(偶関数の対称性から右半分だけ)を図 A·31 に示 す.これらの伝達関数を持つフィルタを I-合成の場合の実 験に用いた.



図 A·31 実験(I-合成):伝達関数の大きさ |g'(t)|(右半分)

フィルタ対角化法では,フィルタを m 個のベクトルに 適用する処理を行なう部分が,計算量と計算時間の主要部 分である. **表 A**·6 に I-合成で, h(t) の次数 k が偶数 4, 6, 8 の各場合について,合成前の簡易型構成の Chebyshev 多 項式の次数 n,合成されたフィルタを用いて m 個のベクト ルの組を濾過するために掛かった全経過時間(行列分解に 掛かる経過時間を含む),およびそれに含まれている(必要 なレゾルベントをすべて構成するための)行列分解全体に 掛かった全経過時間をそれぞれ示す.

*k*が4,6,8の各場合に対してそれぞれ半分の2 個,3個,4個の*N*次の複素対称帯行列の対称分 解を(複素版の改訂コレスキ分解を用いて)行な う必要がある.

 k = 4の場合の実験結果を4枚組の図 A·32~図 A·34 に示す。

表 A·6 実験(I-合成):フィルタ適用の経過時間(秒)

k	n	フィルタ適用全体	行列分解全体
4	12	1,044	613
6	6	1,228	919
8	5	1,561	1,226

- 1 枚目の β の固有値分布のグラフから, 濾過したベクトルの数 m = 120 は十分であることがわかる.
- 3枚目の固有値の絶対誤差のグラフからは、絶対誤差が 3×10⁻¹³ 以下で、固有値の有効精度が 14.5 桁程度であることがわかる.
- 4枚目の残差の B^{-1} -ノルムのグラフから,残差のノル ムは固有値の区間 [100,110] の中央付近では 3×10^{-10} 程度で,区間の両端付近では 10^{-8} になっている.こ れは伝達関数 g'(t) の通過域 $t \in [-1,1]$ での伝達率が 中央で 1 で,原点から離れると単調に減少して区間 の両端で 10^{-2} となっていることと傾向が一致する.
- k = 6 の場合の実験結果を 4 枚組の図 A·36~図 A·38
 に示す.
- 1 枚目の β の固有値分布のグラフから,濾過したベクトルの数 m = 120 は十分であることがわかる.
- 3枚目の固有値の絶対誤差のグラフからは、絶対誤差が3×10⁻¹³以下で、固有値の有効精度が14.5 桁程度であることがわかる。
- 4 枚目の残差の B⁻¹-ノルムのグラフから,残差のノ ルムは固有値の区間 [100,110] の中央付近では 10⁻¹⁰ 程度で,区間の両端付近では 3×10⁻⁸ になっている.
- k = 8の場合の実験結果を4枚組の図 A·40~図 A·42 に示す。
- 1 枚目の β の固有値分布のグラフから、濾過したベクトルの数 m = 120 は十分であることがわかる.
- 3枚目の固有値の絶対誤差のグラフからは、絶対誤差が3×10⁻¹³以下で、固有値の有効精度が14.5 桁程度であることがわかる。
- 4枚目の残差の B⁻¹-ノルムのグラフから,残差のノルムは固有値の区間 [100,110] の中央付近では 3×10⁻¹²
 程度で,区間の両端付近では 3×10⁻¹⁰ になっている.





図 A·43 実験 (I-合成, k=8):残差の B⁻¹-ノルム (区間 [100, 110])

合成用の関数 h(t) の次数 k のそれぞれに対して, 横軸 に近似対の固有値をとり, 縦軸に固有値の真の値からの 絶対誤差の大きさの対数をとってプロットしたグラフを 図 A・44 に示す. グラフから固有値の絶対誤差はどれも 3×10⁻¹³ 程度であり, 有効精度が 14.5 桁程度であること がわかる. また同様に次数 k のそれぞれに対して, 横軸に 近似対の固有値をとり, 縦軸に近似対の残差の B⁻¹-ノル ムの対数をとってプロットしたグラフを図 A・45 に示す.



図 A·44 実験(I-合成): 各 k に対する固有値の絶対誤差(区間 [100,110])



図 A·45 実験(I-合成):各 k に対する近似対の残差の B⁻¹-ノルム (区間 [100, 110])