

# フィルタ対角化法の帯域通過フィルタの最適化

村上 弘<sup>†1</sup>

実対称定値一般固有値問題の指定された区間に固有値が属する固有対だけを求める解法として、フィルタ対角化法がある。フィルタには固有値が指定区間の近傍に属する固有ベクトル成分だけを選択的に通過させる性質を持つ線形作用素を用いる。線形独立な十分多くのベクトルの組をフィルタに入力し、その出力から（指定区間の近傍に固有値を持つ固有ベクトル全体が張る）不変部分空間を近似する部分空間の基底ベクトルの組を構成する。この基底ベクトルの組に対して「部分空間法」を適用することで、指定区間の近傍に固有値を持つ固有対の近似対が得られる。

フィルタはレゾルベントの線形結合として構成し、固有ベクトル成分の固有値だけに依存するフィルタの帯域通過特性が望ましいものとなるように、複素パラメタであるシフト量と結合係数を決める。レゾルベントの線形結合型のフィルタの設計原理は、アナログ電子回路理論の周波数フィルタのものと数学的には類似で、同等の手法が使える。本論文では、アナログフィルタ設計の古典的理論に沿って、典型的なフィルタ設計の方法をフィルタ対角化法に直ちに適用できる形で示す。

## Optimization of Bandpass Filters for Eigensolver

HIROSHI MURAKAMI<sup>†1</sup>

The filter diagonalization method for a real symmetric definite generalized eigenproblem solves only those eigenpairs whose eigenvalues belong to the specified interval. The filter is a linear operator which has the property to pass only those eigenvectors whose eigenvalues belong to the neighbor of the specified interval. Sufficiently many linearly independent vectors as the inputs are filtered, then the set of basis vectors is constructed from the outputs of the filter which spans a subspace an approximation of the invariant subspace. (The invariant subspace is spanned by all those eigenvectors whose eigenvalues belong to the neighbor of the specified interval.) The subspace method is applied to this set of basis vectors to obtain the approximations of the eigenpairs whose eigenvalues belong to the neighbor of the specified interval.

The filter is constructed as a linear combination of the resolvents. The complex parameters the shifts and the coefficients of the resolvents are determined to give a good bandpass property of the filter which depends only on the eigenvalue of the eigenvector component. The design principle for the filter by the

linear combination of the resolvents is mathematically the same to that of the frequency filters in analog electronic circuit theory, therefore similar method is applicable. In this paper, following the classical theory of the analog filter designs, the design recipes for the typical filters are shown in the style immediately applicable to the filter diagonalization method.

### 1. フィルタ対角化法の原理

行列の実対称定値一般固有値問題  $A\mathbf{v} = \lambda B\mathbf{v}$  の固有対で、固有値が指定区間  $\mathcal{I} = [\alpha, \beta]$  に属しているものを求めるものとする。フィルタ  $\mathcal{F}$  は線形作用素で、固有値が  $\mathcal{I}$  に属している固有ベクトルは良く通過させるが、固有値が  $\mathcal{I}$  から離れている固有ベクトルは強く減衰させる性質（帯域通過特性）を持つようにうまく構成されているものとする。すると、任意の入力ベクトルをフィルタに通すとき、出力のベクトルは固有値が  $\mathcal{I}$  の近傍以外の固有ベクトルの成分を殆んど含まなくなり、 $\mathcal{I}$  近傍の固有値を持つ固有ベクトルの組で張られる次元の小さな線形部分空間へ近似的に射影される。

十分多くの（ランダムな）ベクトルの組を計量  $B$  で正規直交化して入力ベクトルの組とする。出力ベクトルの組に対して計量  $B$  による特異値分析を適用し、ある小さな閾値よりも相対比が小さい特異値を持つ特異ベクトルを取り除く。残った特異ベクトルの組に対して「部分空間法」を適用すると、固有値が区間  $\mathcal{I}$  の近傍にある固有対を近似する対が得られる。

以上のフィルタ対角化法により得られた近似固有対は、必要に応じて、例えば数回程度のレイリ逆反復もしくはリッツ同時逆反復の適用で、精度を改良する。

### 2. レゾルベントの線形結合によるフィルタ

いまの実対称定値一般固有値問題に対応する（一般化）レゾルベントを  $R(\lambda) \equiv (A - \lambda B)^{-1}B$  とする。フィルタは  $2n$  個のレゾルベント  $R(\lambda_p)$  の線形結合とする。（後の数学的な導出との関係でレゾルベント以外にも恒等演算子  $id$  の項を加えて定義しておく。） $\mathcal{F} \equiv c_\infty id + \sum_{p=1}^{2n} c_p R(\lambda_p)$ 。調整可能なパラメタは、整数値  $n$ 、分点  $\lambda_p$ 、 $p=1, 2, \dots, 2n$ 、係数  $c_p$ 、 $p=1, 2, \dots, 2n$ 、それと係数  $c_\infty$  である。係数や分点は一般に複素数値をとる。

固有対  $(\lambda^{(\nu)}, \mathbf{v}^{(\nu)})$  に対しては  $R(\lambda)\mathbf{v}^{(\nu)} = \mathbf{v}^{(\nu)} \cdot 1/(\lambda^{(\nu)} - \lambda)$  が成立するので、 $\mathcal{F}\mathbf{v}^{(\nu)} =$

<sup>†1</sup> 首都大学東京 数理情報科学専攻

Department of Mathematics and Information Sciences, Tokyo Metropolitan University

$v^{(\nu)} \cdot f(\lambda^{(\nu)})$  である。但し  $f(\lambda) \equiv c_\infty + \sum_{p=1}^{2n} c_p / (\lambda - \lambda_p)$  と置いた。有理関数  $f(\lambda)$  は固有値  $\lambda$  を持つ固有ベクトルに対する線形フィルタ  $\mathcal{F}$  の入力に対する出力の応答の比で、フィルタの「伝達関数」である（実対称定値一般固有値問題の場合は、固有値に縮重がある場合にも  $f(\lambda)$  は固有値だけで決まる関数になる）。

### 2.1 パラメタを決める指針

フィルタのパラメタは、指定された実区間  $\mathcal{I} = [\alpha, \beta]$  に対して、伝達関数の値の大きさ  $|f(\lambda)|$  が、 $\lambda$  が区間  $\mathcal{I}$  に属するときは 1 付近（大きくも小さくもない適度な範囲）、 $\lambda$  が区間  $\mathcal{I}$  からある程度離れたときは非常に小さい値（ほとんど零）、となるように決める。この指針は、アナログ電子回路での周波数による帯域通過（bandpass）フィルタに対するものと同様である。

アナログ電子回路の周波数フィルタの設計は有理関数の複素関数論に基づいており、これらのフィルタの設計法は、その数学的な類似から実対称問題のフィルタ対角化のフィルタの設計法として転用が容易にできる。今回のフィルタ設計の数理的基礎の参考としては、文献 1) が極めて有用であった。

### 2.2 フィルタの設計

フィルタ設計によく使われる減衰率関数 (attenuation function)  $\mathcal{A}$  は、単に伝達関数  $f$  の逆数である： $\mathcal{A}(\lambda) \equiv 1/f(\lambda)$ 。  $f$  は有理関数なので  $\mathcal{A}$  も有理関数である。

いま、指定された区間  $\lambda \in [\alpha, \beta]$  と標準区間  $t \in [-1, 1]$  との間の線形変換  $\lambda = \mathcal{L}(t)$  を用いて  $f$  の引数  $\lambda$  を  $t$  に変更したものを  $g(t) = f(\lambda)$  と定義する。線形変換は  $\lambda = \mathcal{L}(t) \equiv (\beta + \alpha)/2 + (\beta - \alpha)/2 \cdot t = \lambda_C + w_P t$ ,  $t = (\lambda - \lambda_C)/w_P$  により与えられる。ここで  $\lambda_C$  と  $w_P$  はそれぞれ通過帯域 (passband) の中央値及び半幅である。今、有理関数である  $g(t)$  の複素数範囲での部分分数展開が次の形を持つとする： $g(t) = c_\infty + \sum_{p=1}^{2n} c_p / (t - t_p)$ 。そのとき、対応するレゾルベントの線形結合型のフィルタ作用素の表式は： $\mathcal{F} = c_\infty id + \sum_{p=1}^{2n} c_p R(\lambda_p)$  となる。但し  $\lambda_p = \mathcal{L}(t_p)$ 。

### 2.3 フィルタ特性の形状

フィルタの通過帯域を  $|\lambda - \lambda_C| \leq w_P$ , 阻止帯域を  $|\lambda - \lambda_C| \geq w_S$  とする。そのとき正規化座標は： $t \equiv (\lambda - \lambda_C)/w_P$  となる。通過域の中央から阻止帯域 (stopband) の端までの距離と通過帯域 (passband) の端までの距離との形状比を  $\mu = w_S/w_P (> 1)$  と定義する。正規化座標  $t$  で表すと、 $|t| \leq 1$  が通過帯域、 $|t| \geq \mu$  が阻止帯域、に対応する。さらに減衰率関数  $\mathcal{A}$  の値が、通過帯域では  $\mathcal{A}_{\max}$  以下、阻止帯域では  $\mathcal{A}_{\min}$  以上、となることを要求す

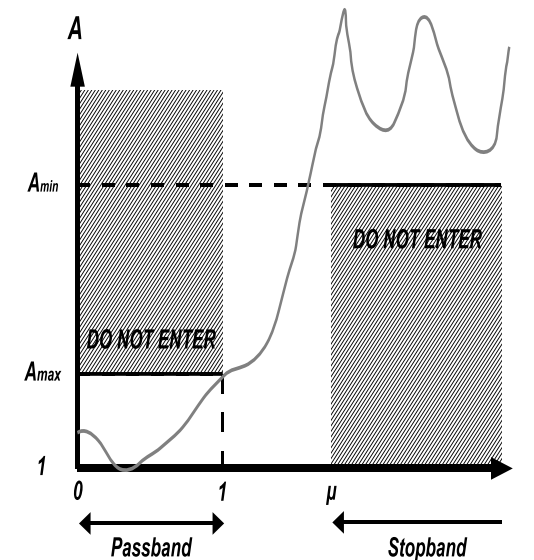


図 1 減衰率関数の形状パラメタ。

Fig.1 Shape parameters for attenuation function

る。これらのフィルタ特性の形状の概念を、横軸を正規化座標、縦軸を減衰率にとって描いたものを図 1 に示す。

議論の簡単化のため、 $\mathcal{A}$  は通過帯域に於いて実際に上限値  $\mathcal{A}_{\max}$  の値をとる（上限値が tight となっている）と仮定しておく。また、後で用いるために今ここで値  $L_{\min} \equiv \sqrt{(\mathcal{A}_{\min} - 1)/(\mathcal{A}_{\max} - 1)}$  を定義しておく。

#### 注 記

通信工学や電子回路の理論では、信号の伝達率や減衰率の大きさを表すのに、しばしば真値の代わりに、その常用対数値の 10 倍の値を dB (デシベル) という単位をつけて表記する。例えば二倍の減衰率は 3dB, 十倍の減衰率は 10dB, 百万倍の減衰率は 60dB と表す。

#### フィルタ特性の形状の選択に関する考察

$\mathcal{A}_{\max}$  が大きすぎると、通過帯域内の減衰率の一様性が悪くなり、得られる固有対の精度が不揃いになったり、極端な場合は必要な固有対が落ちて求まらないことも起こり得る。ま

た小さすぎると、次数  $n$  が増える。例えば  $A_{\max}$  を 3dB 程度にとることにする。

$A_{\min}$  は小さすぎると、不用な固有ベクトルの成分がフィルタで十分に除去されず、また特異値の相対閾値の設定が難しくなる。大きすぎると次数  $n$  が増す。浮動小数点演算の精度が  $D$  桁のとき、 $10D$  dB を超えた値を指定しても、丸め誤差により実現できないであろう。例えば倍精度演算では 150dB 程度とする（あるいはそれ以下 100dB などにする）。

$\mu (> 1)$  が大きすぎると、フィルタを通過する固有値の範囲が広がり、フィルタが作る部分空間の次元が増え、それに比例して入力ベクトルの個数を増す必要が出てくること、特異値分布の明瞭な境界が失われると思われる。1.1 かそれより小さな値が適当ではないだろうか。 $\mu$  を 1 に近づけると、次数  $n$  が増す（特に Butterworth フィルタでは急激で、Chebyshev フィルタは緩やかで、Elliptic フィルタは  $\mu$  を 1 に非常に近くしても  $n$  の増加は極めて緩やかである）。 $\mu$  を 1 に近づける場合の利点は、フィルタの透過帯域と阻止帯域の中間域に入る（不都合な）固有値の存在確率が減らせることであろう。中間域に固有値が存在しなければ、特異値分析は容易となり、フィルタ対角化法単独で得られる固有対の精度も高い。フィルタの生成する部分空間の次元数も真に必要な固有ベクトルの個数に近づく。そのため、必要な入力ベクトル、出力ベクトルの個数が減る。但し、必要な固有値の範囲が最初から正確に分かっていることは稀であろう。阻止帯域を通過帯域に著しく近接させると、端にある固有値は少しずれるとどちら側に入るかが変わることになる。

#### 2.4 フィルタ設計の手順

フィルタ設計の手順は以下ようになる。

- (1) フィルタ特性への要求事項として、三個の形状パラメタ  $A_{\max}$ ,  $A_{\min}$ ,  $\mu$  を与える。
- (2) 使用するフィルタの種別を Butterworth, Chebyshev, Inverse Chebyshev, Elliptic の中から選ぶ（上記フィルタの種別に対応して、実軸上で 1 以上の値をとる関数である減衰率関数  $A$  の具体的な関数形が、パラメタ  $n$ ,  $\epsilon$  を残して決まる。）
- (3) フィルタ特性の三個の形状パラメタから、 $|t| \leq 1$  のときには  $A \leq A_{\max}$ （この制約条件は tight と仮定した）、 $|t| \geq \mu$  のときには  $A \leq A_{\min}$  を満たすように  $A$  の持つパラメタ（典型的な 4 種のフィルタの場合は  $n$ ,  $\epsilon$ ）を決める。
- (4) 複素平面内での  $g(t) \equiv 1/A$  の  $g(t)$  の部分分数展開の極の位置とその係数を求める。（代表的な 4 種のフィルタ関数に関しては、極の位置とその係数は解析的な表式で計算できることを後で述べる。）
- (5) 得た部分分数展開の極とその係数に対応して、レゾルベント線形結合型のフィルタのレゾルベントの分点（シフト量）と結合係数が決まり、フィルタ対角化用のフィルタ

作用素が決定される。

#### 注 記

フィルタ作用素の表式では説明の数学的統一性のために、レゾルベント以外に恒等演算子の定数倍も付け加えたが、その係数  $c_\infty$  は伝達関数  $g$  の無限遠での値  $g(\infty) (\geq 0)$  に等しく、減衰率関数  $A$  が多項式である Butterworth, Chebyshev では恒等的に零になるが、減衰率関数が有理関数の Inverse Chebyshev や Elliptic の場合は  $n$  が偶数の場合には零だが、 $n$  が奇数の場合は零にならない。しかしもともと阻止帯域で伝達関数の値が小さくなるようにフィルタの形状を設定して  $g(\infty) \leq 1/A_{\min}$  を満たすので、通常的设计では無視できる大きさになっているはずである。そのため恒等演算子の定数倍の項を除いても、フィルタの機能としては実質的な違いはない（項を除くと、 $g(t)$  の値の下限値は 0 から小さい負の値  $-c_\infty (< 0)$  へとずれる。）

#### 注 意

フィルタ伝達関数  $g$  の極は、以下で見えるように減衰率関数  $A$  が正值（1+実関数の二乗の形）の形の場合には実数ではなくて、必ず複素共役の対として現われる。また、互いに複素共役である極の持つ係数も互いに複素共役になる。これにより、 $2n$  次のフィルタを実数ベクトル  $v$  に作用させる計算では、複素対称性を用いて  $2n$  個のレゾルベントの作用のうち半分の  $n$  個のレゾルベント（例えば分点の虚部が正）の作用だけを用いて計算できる：  

$$\sum_{p=1}^{2n} c_p R(\lambda_p) v = 2 \sum_{\text{Im} \lambda_q > 0} \text{Re} \{ c_q R(\lambda_q) v \} .$$

### 3. 代表的な 4 種のフィルタの実現

#### 3.1 Butterworth フィルタ

Butterworth フィルタの減衰率関数は  $t$  の次数  $2n$  の多項式で偶関数、 $n$  を自然数のパラメタ、 $\epsilon$  を実数パラメタとして  $A(\lambda) \equiv 1 + \epsilon^2 t^{2n}$  で表される関数形を持つ。このフィルタの伝達特性は通過帯域内部で最大の平坦性を持つ。

##### 3.1.1 Butterworth フィルタの次数の決定

関数の振舞を考慮すれば、フィルタ特性の形状の制約条件は  $A_{\max} = 1 + \epsilon^2$ ,  $A_{\min} \leq 1 + \epsilon^2 \mu^{2n}$  を満たす必要がある。すると、 $\epsilon^2 = A_{\max} - 1$ ,  $\mu^n \geq L_{\min}$  より、実数  $n_{\min} \equiv \ln(L_{\min}) / \ln(\mu)$  と置くと、 $n$  の値を  $n_{\min}$  より小さくない自然数にとれば良い。

##### 3.1.2 Butterworth フィルタの極とその係数

伝達関数  $g(t)$  の極 ( $A$  の零点) は  $t_p = (1/\epsilon^{1/n})(\cos \theta_p + \sqrt{-1} \sin \theta_p)$ , ここで、 $\theta_p \equiv (2p-1)\pi/(2n)$ ,  $p=1, 2, \dots, 2n$ . 極は複素平面上で円周上の  $2n$  等分点にあり、 $n$  組の

複素共役対になっている．添字  $p=1, 2, \dots, n$  の極は虚部が全て正である．極  $t_p$  の係数は  $c_p = -t_p/(2n)$  で，係数  $c_\infty$  は零．

### 3.2 Chebyshev フィルタ

Chebyshev フィルタの減衰率関数は  $t$  の次数  $2n$  の多項式で偶関数，自然数  $n$  以外に  $\epsilon$  を実数パラメータとして  $\mathcal{A}(\lambda) \equiv 1 + \epsilon^2 T_n^2(t)$  で表される関数形を持つ．この関数は通過帯域内での等リプル性を持つ．Chebyshev フィルタは（通過帯域にリプルを許したことにより）要求されたフィルタ特性の形状の制約を Butterworth フィルタよりも低い次数で実現できる．

#### 3.2.1 Chebyshev フィルタの次数の決定

関数の振舞を考慮すると，フィルタ特性の形状の制約は  $\mathcal{A}_{\max} = 1 + \epsilon^2$ ， $\mathcal{A}_{\min} \leq 1 + \epsilon^2 T_n^2(\mu)$ ．すると  $\epsilon^2 = \mathcal{A}_{\max} - 1$ ， $T_n(\mu) \geq L_{\min}$ ．これより実数  $n_{\min} \equiv \cosh^{-1}(L_{\min}) / \cosh^{-1}(\mu)$  と置くと，制約条件は  $n$  の値を  $n_{\min}$  よりも小さくない自然数にとれば満たせる．

#### 3.2.2 Chebyshev フィルタの極とその係数

フィルタの極と係数は，Chebyshev 多項式の（複素）パラメータ  $\phi$  を用いた媒介変数表示  $T_n(t) = \cos(n\phi)$ ， $t = \cos \phi$  を利用すれば，解析的な式を用いて表せる． $g(t)$  の極  $t_p$  の計算式は： $t_p = \cosh \tau \cdot \cos \theta_p + \sqrt{-1} \sinh \tau \cdot \sin \theta_p$ ，但し  $\tau = (1/n) \sinh^{-1}(1/\epsilon)$ ， $\theta_p = (2p-1)\pi/(2n)$ ， $p=1, 2, \dots, 2n$ ．極は複素平面内の  $-1$  と  $1$  を焦点とする楕円の周上にあり， $n$  組の複素共役対になっている．虚部が正のものは添字  $p=1, 2, \dots, n$  に対応する．極の係数  $c_p$  は： $c_p = (-1/2)T_n(t_p)/T_n'(t_p) = (-1/2)T_n(t_p)/(nU_{n-1}(t_p))$ ．ここで  $U_k(x)$  は次数  $k$  の第二種 Chebyshev 多項式を表す．係数  $c_\infty$  は常に零である．

### 3.3 Inverse Chebyshev フィルタ

Inverse Chebyshev フィルタの減衰率関数は  $t$  の  $2n$  次の有理関数で偶関数，自然数  $n$  以外に  $\epsilon$  を実数パラメータとして  $\mathcal{A}(\lambda) \equiv 1 + \epsilon^2 \{T_n(\mu)/T_n(\mu/t)\}^2$  で表される関数形を持つ．

この関数型は，透過帯域内での伝達特性は Butterworth フィルタと同様に最大に平坦で，阻止帯域では  $\mathcal{A}$  の極小値が全て一致する等リプル特性を持つ．Inverse Chebyshev フィルタは（阻止帯域にリプルを許したことで）要求されたフィルタ特性の形状の制約を Butterworth フィルタよりも低い次数で実現できる．

#### 3.3.1 Inverse Chebyshev フィルタの次数の決定

関数の振舞を考慮すると，フィルタ特性の形状の制約は  $\mathcal{A}_{\max} = 1 + \epsilon^2$ ， $\mathcal{A}_{\min} \leq 1 + \epsilon^2 T_n^2(\mu)$  であるから， $\epsilon^2 = \mathcal{A}_{\max} - 1$ ， $T_n(\mu) \geq L_{\min}$ ．いま実数  $n_{\min} \equiv \cosh^{-1}(L_{\min}) / \cosh^{-1}(\mu)$  と置くと，制約条件は  $n$  の値を  $n_{\min}$  より小さくない自然数にとれば満たせる．（この Inverse Chebyshev フィルタに対する  $n_{\min}$  の式は Chebyshev フィルタに対するものと同様である．）

#### 3.3.2 Inverse Chebyshev フィルタの極とその係数

この場合にも Chebyshev の場合と同様に極とその係数は解析的な式を用いて表せる．いま， $1/c = \epsilon T_n(\mu)$ ， $\tau = (1/n) \sinh^{-1}(1/c)$ ， $\theta_p = (2p-1)\pi/(2n)$ ， $p=1, 2, \dots, 2n$  と定義する．すると  $g(t) = 1/\mathcal{A}(\lambda)$  の極は  $t_p = \mu/x_p$  と表される．ここで  $x_p = \cosh \tau \cdot \cos \theta_p - \sqrt{-1} \sinh \tau \cdot \sin \theta_p$  ( $g(t)$  の零点は  $z_j = \mu/\cos \theta_j$ ， $j=1, 2, \dots, 2n$  である．) 極の係数  $c_p$  は： $c_p = -\mu/(2x_p^2) T_n(x_p)/T_n'(x_p) = -\mu/(2x_p^2) T_n(x_p)/(nU_{n-1}(x_p))$  である．係数  $c_\infty$  は， $n$  が奇数のとき  $0$  で，偶数のとき  $1/(1 + (1/c)^2)$  となる．

### 3.4 Elliptic (Cauer) フィルタ

Elliptic フィルタの減衰率関数は  $t$  の  $2n$  次の有理関数で偶関数，自然数  $n$  以外に  $\epsilon$  を実数パラメータとして  $\mathcal{A}(\lambda) \equiv 1 + \epsilon^2 R_n^2(t)$  で表される関数形を持つ． $R_n$  は次数  $n$  の有理関数で，Jacobi の楕円関数  $\text{sn}$  を用いた以下の媒介変数  $u$  による表示を持つ： $R_n(t) = \text{sn}[K(L^{-1})(nu + \delta_n), L^{-1}]$ ， $t = \text{sn}[K(\mu^{-1})u, \mu^{-1}]$ ．ここで  $K(k)$  は第一種の完全楕円積分，記号  $\delta_n$  は  $n$  が奇数のとき  $0$ ，偶数のとき  $(-1)^{n/2}$  を表す．

この関数は，通過帯域で  $\mathcal{A}$  の極大値が全て一致する等リプル条件と，阻止帯域で  $\mathcal{A}$  の極小値が全て一致する等リプル条件を満たす．Elliptic フィルタは（通過帯域と阻止帯域の両方にリプルを許したことで）要求されたフィルタ特性の形状の制約を Chebyshev フィルタや Inverse Chebyshev フィルタよりも低い次数で実現できる．

#### 3.4.1 Elliptic フィルタの次数の決定

関数の振舞を考慮すると，フィルタ特性の形状の制約条件から  $\mathcal{A}_{\max} = 1 + \epsilon^2$ ， $\mathcal{A}_{\min} \leq 1 + \epsilon^2 R_n^2(\mu)$ ．これより  $\epsilon^2 = \mathcal{A}_{\max} - 1$ ， $R_n(\mu) \geq L_{\min}$  である．いま実数  $n_{\min} \equiv (K'(L_{\min}^{-1})/K(L_{\min}^{-1})) / (K'(\mu^{-1})/K(\mu^{-1}))$  と置く．但し， $K(k)$  は第一種の完全楕円積分を表し， $K'(k) \equiv K(\sqrt{1-k^2})$ ．すると制約条件は， $n$  の値を  $n_{\min}$  より小さくない自然数にとれば満たせる． $\mu$  と  $n$  の値から  $L$  の値は次式で計算できる： $L^{-1} = \mu^{-n} \prod_{j=1}^{\text{floor}(n/2)} \text{sn}^4[(2j-1)K(\mu^{-1})/n, \mu^{-1}]$ ．

#### 3.4.2 Elliptic フィルタの極とその係数

Jacobi の楕円関数を用いた媒介変数表示を使うと， $g(t) = 1/\mathcal{A}$  の極  $t_p$  とその係数  $c_p$  は解析的な式で表わせて，次の計算手順で求められる．まず  $b \equiv F(\tan^{-1}(\epsilon^{-1}), \sqrt{1-L^{-2}})$  を計算する．ここで  $F(\phi, k) \equiv \int_0^\phi (1-k^2 \sin^2 x)^{-1/2} dx$  は第一種の楕円積分を表す．次に  $\tau \equiv (b/n)K(\mu^{-1})/K(L^{-1})$ ， $\theta_p = (2p+1 - \text{mod}(n, 2))K(\mu^{-1})/n$ ．すると極の値は， $t_p = \text{sn}(\theta_p + \sqrt{-1}\tau, \mu^{-1})$ ， $p=1, 2, \dots, 2n$ ．（注意：この表式では正の虚部を持つ極と対応する添字は  $p=1, 2, \dots, n$  にはならない．巡回的にずらせば良い．詳細省略）

極の係数は  $c_p = \zeta \sqrt{-1} \cdot \text{cn}(\theta_p + \sqrt{-1}\tau, \mu^{-1}) \text{dn}(\theta_p + \sqrt{-1}\tau, \mu^{-1})$  . ここで  $\zeta = \{-1/(2n)\} K(\mu^{-1})/K(L^{-1}) \sqrt{\epsilon^2/\{(1+\epsilon^2)(\epsilon^2+L^{-2})\}}$  . 係数  $c_\infty$  の値は  $n$  が奇数のときは 0 , 偶数のときは  $1/(1+\epsilon^2 L^2)$  である .

引数が複素数の楕円関数  $\text{sn}$  ,  $\text{cn}$  ,  $\text{dn}$  の値は引数が実数の楕円関数  $\text{sn}$  ,  $\text{cn}$  ,  $\text{dn}$  の値を組合せた式で計算できる . 第一種の完全楕円積分  $K(k)$  や第一種の楕円積分  $F(\phi, k)$  , Jacobi の楕円関数  $\text{sn}(x, k)$  ,  $\text{cn}(x, k)$  ,  $\text{dn}(x, k)$  の計算には , 数学ライブラリ関数を用いることができる . その際に , 関数定義が異なっていたり ,  $k$  の代わりに  $k^2$  の値を引数とする実装がされている場合がある . また , ライブラリの実装によっては , 引数  $k$  の極端な値である 0 , 1 の付近で関数値の精度が十分出せないものなどがあり , 注意や検討が必要である .

#### 4. 代表的な 4 種のフィルタの比較

##### 4.1 減衰率関数のグラフの例

図 2 は , 代表的な 4 種類のフィルタに対して , フィルタ特性の形状パラメタとして  $A_{\max}=10\text{dB}$  ,  $A_{\min}=100\text{dB}$  ,  $\mu=1.3$  を指定し , 必要最小の  $n$  の値を決めて , 得られた減衰率関数  $A$  をプロットしたものである . 4 種類のフィルタを定義する減衰率関数は全て正規化座標  $t$  の偶関数でグラフは左右対称となるから ,  $t \geq 0$  の側だけをプロットした . 左上が Butterworth ( $n=40$ ) , 右上が Chebyshev ( $n=15$ ) , 左下が Inverse Chebyshev ( $n=15$ ) , 右下が Elliptic ( $n=9$ ) である . グラフの様子を理解し易いように , 透過帯域での上限値  $A_{\max}$  の値を  $10\text{dB}$  ,  $\mu$  の値も  $1.3$  といずれも実際の使用で想定する値よりも大きくした .

##### 4.2 フィルタ形状の要求を実現する $n$ の最小値の比較

図 1 中の四個の表はそれぞれフィルタの特性の形状への三個の要求パラメタのうち  $A_{\max}$  ,  $A_{\min}$  の二個だけを指定している ( 左上が  $A_{\max}=3\text{dB}$  ,  $A_{\min}=150\text{dB}$  の場合 , 右上が  $A_{\max}=3\text{dB}$  ,  $A_{\min}=100\text{dB}$  の場合 , 左下が  $A_{\max}=3\text{dB}$  ,  $A_{\min}=80\text{dB}$  の場合 , 右下が  $A_{\max}=1\text{dB}$  ,  $A_{\min}=80\text{dB}$  の場合である . ) 横軸には残り一個の要求パラメタ  $\mu$  の値を , 縦軸には三個の要求パラメタから決まる自然数  $n$  の最小値をプロットした . Inverse Chebyshev の場合は Chebyshev と  $n$  の最小値が同一なので省略した . 表の数値から Butterworth よりも Chebyshev が (あるいは Inverse Chebyshev が) より低い次数で同じ要求を実現できること , さらに Chebyshev よりも Elliptic がさらに低い次数で同じ要求を実現できることが分かる . 次数の違いは  $\mu$  が 1 に近い程極端になる ( 後で漸近挙動について述べる ) .

図 3 の四枚あるグラフは先程の図 1 の四個の表にそれぞれ対応していて , それぞれフィルタの特性の形状への三個の要求パラメタのうち  $A_{\max}$  ,  $A_{\min}$  の二個だけを指定している .

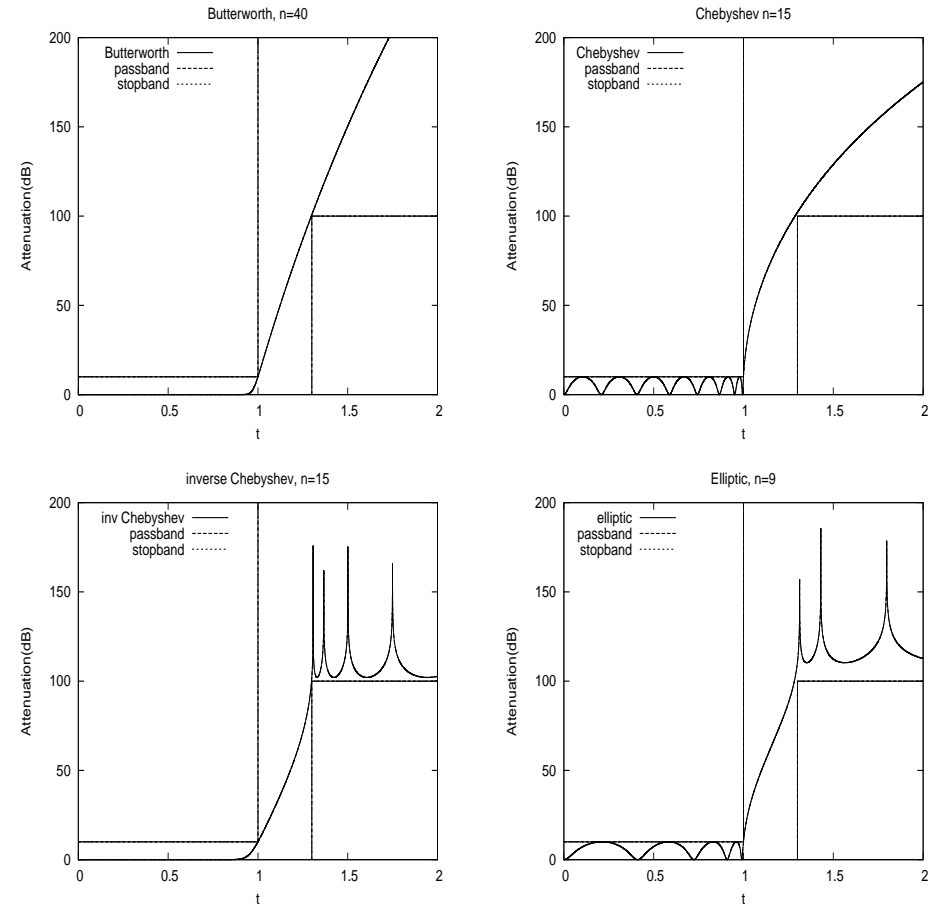


図 2 減衰率関数  $A$  のグラフの例 .  
Fig. 2 Sample Graphs of Attenuation Functions.  
( $A_{\max}=10\text{dB}$  ,  $A_{\min}=100\text{dB}$  ,  $\mu=1.3$ .)

表 1 フィルタ形状の要求を実現可能な  $n$  の最小値 .  
Table 1 Minimum  $n$  for the filter shape requirements.

$A_{\max}=3\text{dB}, A_{\min}=150\text{dB}$				$A_{\max}=3\text{dB}, A_{\min}=100\text{dB}$			
$\mu$	$n_{\min}$			$\mu$	$n_{\min}$		
	Butter	Cheb	Elliptic		Butter	Cheb	Elliptic
1.001	17281	402	35	1.001	11522	274	24
1.003	5766	232	30	1.003	3845	158	21
1.005	3463	180	28	1.005	2309	123	20
1.01	1736	128	26	1.01	1158	87	18
1.03	585	74	22	1.03	390	50	15
1.05	355	58	20	1.05	237	39	14
1.1	182	41	17	1.1	121	28	12
1.2	95	29	15	1.2	64	20	10
1.3	66	24	13	1.3	44	17	9
1.5	43	19	12	1.5	29	13	8

$A_{\max}=3\text{dB}, A_{\min}=80\text{dB}$				$A_{\max}=1\text{dB}, A_{\min}=80\text{dB}$			
$\mu$	$n_{\min}$			$\mu$	$n_{\min}$		
	Butter	Cheb	Elliptic		Butter	Cheb	Elliptic
1.001	9218	222	20	1.001	9891	237	21
1.003	3076	128	17	1.003	3301	137	19
1.005	1848	100	16	1.005	1983	106	17
1.01	926	71	15	1.01	994	75	16
1.03	312	41	13	1.03	335	44	13
1.05	189	32	11	1.05	203	34	12
1.1	97	23	10	1.1	104	24	11
1.2	51	16	9	1.2	55	17	9
1.3	36	14	8	1.3	38	14	8
1.5	23	11	7	1.5	25	11	7

(左上が  $A_{\max}=3\text{dB}, A_{\min}=150\text{dB}$  の場合, 右上が  $A_{\max}=3\text{dB}, A_{\min}=100\text{dB}$  の場合, 左下が  $A_{\max}=3\text{dB}, A_{\min}=80\text{dB}$  の場合, 右下が  $A_{\max}=1\text{dB}, A_{\min}=80\text{dB}$  の場合である.)  
 グラフの横軸は残り一個の要求パラメタ  $\mu$  から 1 を引いた値 ( $\mu - 1$ ) を, グラフの縦軸は三個の要求パラメタから決まる自然数  $n$  の最小値である. 両軸とも対数プロットにしてある. Inverse Chebyshev の場合の  $n$  の最小値は Chebyshev の場合と同一なので省略した. 各グラフの曲線は上から Butterworth, Chebyshev, Elliptic である. Butterworth よりも Chebyshev が (あるいは Inverse Chebyshev が) 低い次数で同じ要求を実現できること, Elliptic が Chebyshev よりも更に低い次数で同じ要求を実現できることが分かる. 次数の違いは  $\mu$  が 1 に近づく程極端になる.

#### 4.3 フィルタの極の分布の例

フィルタのタイプ Butterworth, Chebyshev, Inverse Chebyshev, Elliptic のそれぞれの場合について, 同じフィルタ特性の形状への要求 ( $A_{\max}=3\text{dB}, A_{\min}=100\text{dB}, \mu=1.1$ ) を満たす次数最低のフィルタの伝達関数  $g(t)$  の複素平面上の極の分布をプロットした例を図 4 に示す. フィルタの種類は図の左上が Butterworth, 右上が Chebyshev, 左下が Inverse Chebyshev, 右下が Elliptic である.

#### 4.4 フィルタ次数の漸近近似式

フィルタの弁別能力を表す形状比  $\mu$  が 1 の付近 (あるいは  $\ln(\mu)$  が 0 付近) に於いて, フィルタ特性の形状の要求条件を満たすための必要最小次数  $n$  の下限値  $n_{\min}$  の漸近近似を以下に示す. これにより, 同等のフィルタ特性を実現するための  $n$  の値 (それはフィルタ作用を実現するために必要なレゾルベントの個数である) が Butterworth フィルタよりも Chebyshev フィルタ (あるいは Inverse Chebyshev フィルタ) では少なくとも済むこと, また Elliptic フィルタでは更に少ないことが理解できる.

##### 4.4.1 Butterworth フィルタの場合:

$$\mu \rightarrow 1 \text{ のとき } \ln \mu \approx \mu - 1 \text{ であるので, } n_{\min} = \ln(L_{\min}) / \ln(\mu) \approx \ln(L_{\min}) / (\mu - 1).$$

##### 4.4.2 Chebyshev フィルタあるいは Inverse Chebyshev フィルタの場合

$\mu \rightarrow 1$  のとき,  $\cosh^{-1} \mu \approx \sqrt{2(\mu-1)}$  である.  $L_{\min}$  は値が非常に大きいので  $\cosh^{-1} L_{\min} \approx \ln(2L_{\min})$  である. すると  $n_{\min} = \cosh^{-1}(L_{\min}) / \cosh^{-1}(\mu) \approx \ln(2L_{\min}) / \sqrt{2(\mu-1)}$ .

##### 4.4.3 Elliptic フィルタの場合:

$K(k)$  の定義は  $\int_0^{\pi/2} \frac{d\theta}{\sqrt{1-k^2 \sin^2 \theta}}$ . いま  $k \ll 1$  であるとき, 楕円積分に関する数学公式が

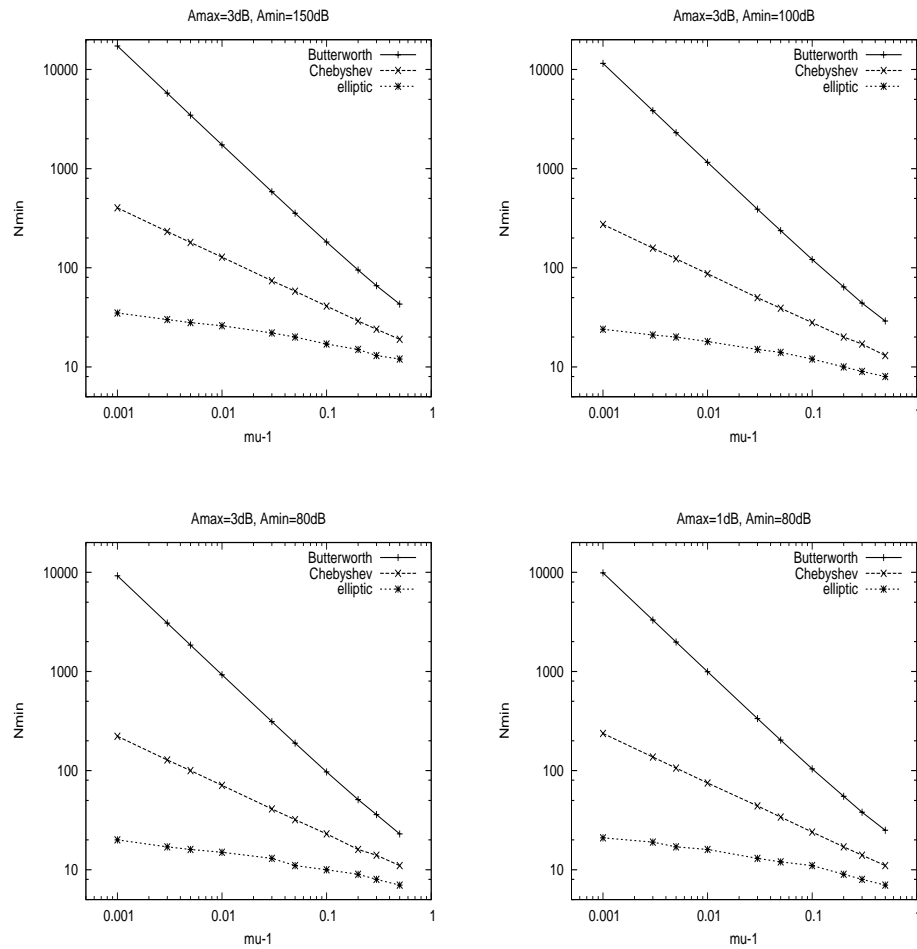


図 3 フィルタ形状の要求を実現可能な  $n$  の最小値のグラフ。  
 Fig. 3 Graphs of minimum  $n$  for the filter shape requirements.

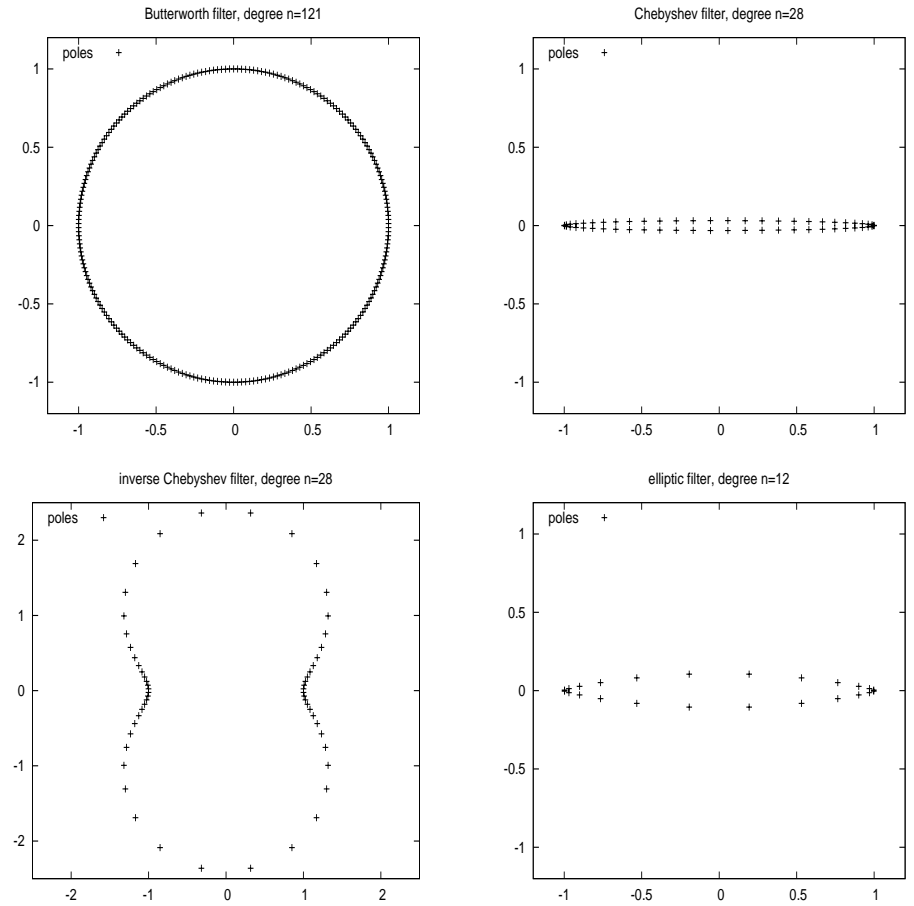


図 4 複素平面上のフィルタの極の位置のプロットの例。  
 Fig. 4 Sample Plots of Complex Poles of Filters.  
 ( $A_{\max}=3\text{dB}$ ,  $A_{\min}=100\text{dB}$ ,  $\mu = 1.1$ .)

ら,  $K(k) \approx \pi/2 + O(k^2)$ ,  $q(k) \equiv \exp(-\pi K'(k)/K(k)) = k^2/16 + O(k^4)$ . また  $k \rightarrow 1$  の時に,  $\lim_{k \rightarrow 1} \{K(k) - (1/2) \ln(16/(1-k^2))\} = 0$  が成立する. 結局,  $\mu \rightarrow 1$  に対する  $n_{\min}$  の漸近近似式として次のものを得た:  $n_{\min} = (K'(L_{\min})/K(L_{\min})) / (K'(\mu^{-1})/K(\mu^{-1})) \approx (2/\pi^2) \ln(4L_{\min}) \ln(8/\ln \mu)$ . 数値的に試してみると, この近似式は正確な値に極めて近い.

#### 4.4.4 近似式のまとめ

今,  $x \equiv 1/(\mu-1)$  と置くと,  $\mu \rightarrow 1$  のとき  $x \rightarrow \infty$  で,  $n_{\min}$  の漸近的な振舞いは, Butterworth の場合:  $n_{\min} \approx \ln(L_{\min})x$ , Chebyshev あるいは Inverse Chebyshev の場合:  $n_{\min} \approx \ln(2L_{\min})\sqrt{x/2}$ , Elliptic の場合:  $n_{\min} \approx (2/\pi^2) \ln(4L_{\min}) \ln(8x)$ , となり,  $n_{\min}$  が  $\mu$  が 1 に近づくときの振舞いの違いが良く分かる. 但しこれらは  $\mu$  が 1 に近いときの漸近近似式で, 正確な値を表すものではないことはもちろんである.

### 5. 特異値の切断に用いる相対閾値の考察

現在用いている対称定値一般固有値問題用のフィルタ対角化法では, 十分多くのランダムなベクトルの組を計量  $B$  で正規直交化して, それを入力ベクトルの組としてフィルタを作用させる. そうして得られた出力のベクトルの組に対して, 計量  $B$  による特異値分析を行う. その後丸め誤差の拡大を抑えるために, 相対的に非常に小さい特異値を持つ特異ベクトルを取り除く処理「切断」を加える.

切断後に残った特異ベクトルに含まれている丸め誤差の拡大率は相対閾値を  $\varepsilon_{\text{SVD}}$  に設定した場合,  $\varepsilon_{\text{SVD}}^{-1}$  程度になる. 計量  $B$  で正規直交な乱数ベクトルを入力とした場合には, 入力ベクトルの組に含まれる各固有ベクトルの含有量は統計的な確率分布を伴う変数で, フィルタの出力ベクトルの組に含まれる固有ベクトルの含有量も確率分布を持った量になる.

不要な固有成分の除去にフィルタを用いる趣旨からは, 特異値の相対比較による切断に用いる小さい値を持つ閾値を  $r \equiv A_{\max}/A_{\min}$  よりも小さく設定することは無意味である. 閾値として適切な値は例えば  $r^{2/3}$  と  $r^{1/3}$  の間の辺りであろう.

丸め誤差を伴う数値計算の場合には,  $A_{\min}$  として実現可能な値は計算精度から制限を受ける. 計算に用いる浮動小数点数のマシンイプシロンを  $\epsilon_M$  とするとき, 実際の計算でフィルタを適用した場合の減衰率は  $\epsilon_M^{-1}$  より大きいことは期待できない. このことから切断の閾値として適切な値は計算精度にも関係することがわかる.

フィルタ対角化の算法に不都合な状況は, 乱数で生成された入力ベクトルの組に必要な固有ベクトルの成分がごく僅かしか含まれない場合である. 高精度演算 (例えば倍精度よりも四倍精度) では相対閾値を極めて小さい値に設定できるので, 必要な固有成分が特異値

の切断に伴って欠落する場合の起きる確率を極めて小さくできるであろう. このような統計分布するデータに対する算法の振る舞いに対する理論的な考察が必要であろう.

### 参考文献

- 1) Daniels, R.W.: *Approximation Methods for Electronic Filter Design*, McGraw-Hill(1974).
- 2) Thompson, W.J.: *Atlas for Computing Mathematical Functions*, Chap.17: Elliptic Integrals and Elliptic functions, Wiley-Interscience(1997).
- 3) Chen, R. and Gui, H.: A general and efficient filter-diagonalization method without time propagation, *J.Chem.Phys.*, Vol.105, pp.1311-1317(1996).
- 4) Mandelshtam, V.A. and Taylor, H.S.: A low-storage filter diagonalization method for quantum eigenenergy calculation or for spectral analysis of time signals, *J.Chem.Phys.*, Vol.106, pp.5085-5090(1996).
- 5) 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).
- 6) 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).
- 7) 村上 弘: 逆反復法による固有値フィルタの構成と部分空間法, 日本応用数学会「行列・固有値問題の解法とその応用」研究部会第2回研究会講演(2006年11月).
- 8) 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).
- 9) 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).
- 10) 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).
- 11) 村上 弘: シフト付き逆を組み合わせたフィルタによる固有値問題解法, NAS2007 講演予稿集, pp.85-88(2007年6月).
- 12) 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).
- 13) 村上 弘: 非対称な固有値問題へのフィルタ対角化法, 情報処理学会研究報告 2008-HPC-115(1), pp.1-6(2008年5月).
- 14) Murakami, H.: Application of Filter Diagonalization Method to Numerical Solution of Algebraic Equations, Proceedings of SNC2009, pp.95-104(Aug, 2009).
- 15) 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).
- 16) Murakami, H.: Filter Diagonalization Method by Resolvents for Symmetric Eigenproblems, HPCS2010 論文集, p.54(2010年1月).