格子上の逆散乱問題への数学からのアプローチ

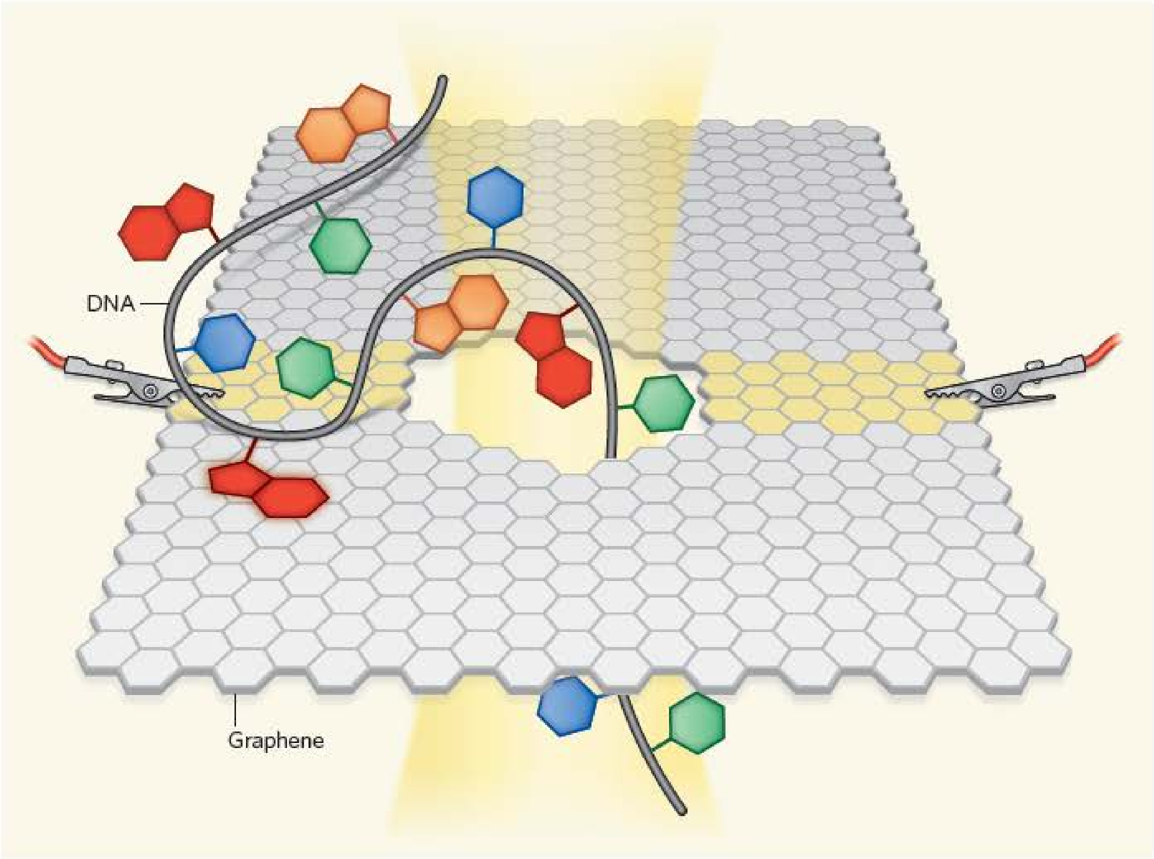
* 2014年11月11日　　連携サロン

* 筑波大学数理物質系数学域　　　　磯崎　洋

連携サロンって何？

* お互い知りあうのが目的なんで、そういうことを深く考えないのがいいんじゃないでしょうか？
* でもな、自分の専門外のことは自信がないから話しづらいよな。
* とんでもない。間違っていたら教えてもらえる絶好の機会ですよ。あやふやなことでもあえて話して、訂正してもらえたら大儲けですわ。
* 磨き上げた完成品よりも試作品を見せ合う場ということか。気楽に間違えることができる場というのもいいな。
* 毎回みんなが少しずつ儲かる、ということを目標にしたいんですが。

この絵はなんだろう？



今日のキーワード　これだけ分かれば満足です

* S行列って何？
* DN写像って何？
* 格子って何？

連続モデルと離散モデル

* 何故、格子上の問題に興味を持ったんですか？
* 現象を表わす基本は連続モデル（つまりは微分方程式）で、それを近似的に計算する便宜上、離散モデル（差分方程式）を考える、というようなイメージをずっと持っていたんですが・・・
* そう習うことが多いもんな
* だんだん、真実は連続と離散の中間にあるような気がし出しまして・・・
* 最小限、連続モデルと離散モデルの基本的なものは扱えるようになっていたい、というのが本音なんですが

そういう考え方はけっこうあるんです

* リーマン（幾何学）
* シュレーディンガー

* おととし Fields 研究所（Tronto）に行ったときに・・・
* 立派な名前ばっかり出してフェイントかけてるな。

波を記述するもの

* 波を書き表すときの基本は位相と振幅です。
* 位相・・・波の山や谷
* 振幅・・・波のうごく幅
* 式で書きますと
* 数式は最低限にしてほしいな

波を表す関数

$$e^{-it|k|^2+i\varphi(x,k)}\ a(x,k)$$

* x、kって何？
* x　は空間の点、k　は波の振動数と進行方向を表すベクトルです。
* 　$\varphi(x,k)$は位相を表す実数値関数、 $a(x,k)$ は振幅を表します。

* 空間って何をかんがえているの？
* あ、言い忘れました。手始めに連続モデルを考えることにして　3　次元空間を想像して下さい。また量子力学での波を想定しています。

特徴は？

* 具体的にはどんなもの？
* ここでは $\varphi(x,k)$ としては $x \cdot k$, $|x||k|$ のようなものを想像して下さい。これは波の山や谷が平面であったり、球面であったりする

平面波、　球面波

です。

では振幅は？

* 何故、さっきみたいな平面波や球面波を考えるの？
* いい質問です。たとえば空間の中に電子がポツンと一人だけいたらそれに対する波はさっきのような形になるとしていいんです。振幅の方の具体的な形はちょっとおいておきましょう。
* 電子にちょっかいを出したらどうなるの？
* 電子に秋波を送りますと…

摂動は振幅にあり

* ポテンシャルによる位置エネルギーがあったり、空間をゆがめたりしますとその影響は大体、振幅に現れます。
* どうやって分かるんですか？シュレーディンガー方程式を具体的に解くのは難しいんでしょう？
* ええ、そうなんですが、そこを可能にするのが数学です。ポテンシャルや空間のゆがみが有限の範囲に収まっていれば、シュレーディンガー方程式の解は無限遠では大体、前のようになります。
* ということは、波の位相は摂動がない場合と同じで、振幅に摂動の影響が現れるという訳か？

S 行列登場

* そこで粒子（波）を無限の彼方から送ります。有限部分でのポテンシャルや空間のゆがみの影響をうけて再び無限の彼方に戻ってきます。その波の振幅の部分に注目します。

入射波の振幅 $\Rightarrow$ 反射波の振幅

という対応を考えればポテンシャルなどの影響が分かるでしょう。これを S 行列といいます。散乱行列ともいいます。

散乱の逆問題

* すると散乱の逆問題というのが出てきます。

S　行列を与えてポテンシャルや空間のゆがみを求めよ。

DN map とは

* Electric impedance tomography というものがあります。
* 電気伝導体に電気を流して表面の電圧と電流を測り、そのデータから内部の電気伝導度を求めようというものです。
* これは式で書きましょう

境界値問題

$$\nabla \cdot (\gamma \nabla u) = 0, \quad in \quad \Omega,$$

$$u = f, \quad on \quad S = \partial\Omega$$

$\gamma =$電気伝導度

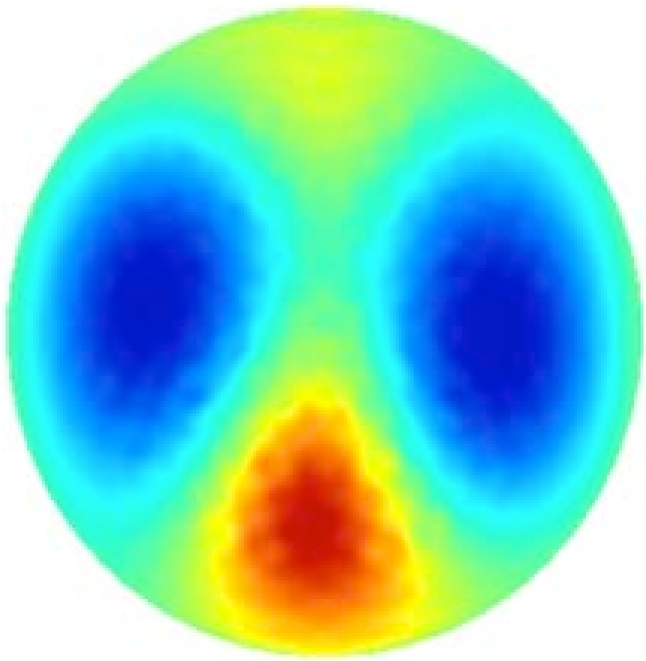
Dirichlet － Neumann 写像

$$DN\ \ map : f \to \gamma \frac{\partial u}{\partial n}$$

$$n = unit\ normal\ \ on\ \ S$$

電極を巻きつけています

実験用のモデルです



このように計測します

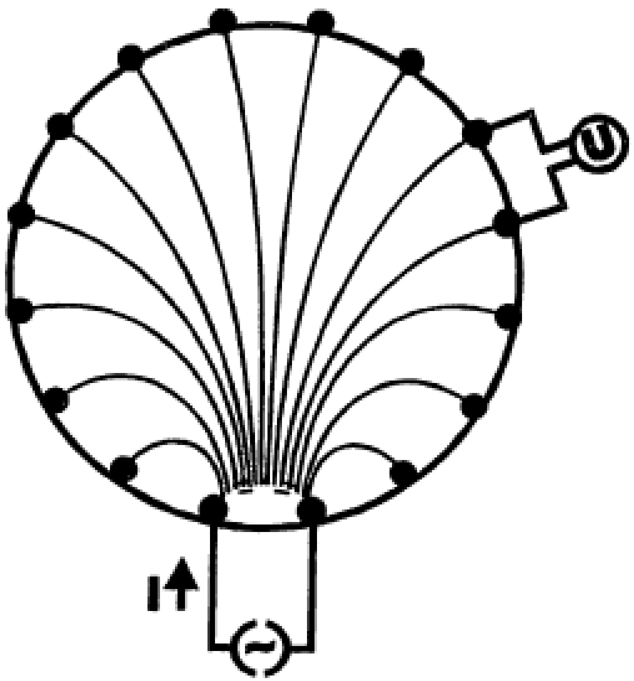


Figure 3.1. Principle of electrical impedance tomography according to the Sheffield method. Current (*I*) is injected sequentially in adjacent electrode pairs and the potential differences (*U*) are measured in the remaining electrode pairs. Image reconstruction is conducted along the equipotential lines (shown in figure) with filtered back-projection (courtesy of I. Frerichs).

境界値問題に対する逆問題

* DN　map　から電気伝導度が理論的には決まります。
* シュレーディンガー作用素に対しても同じことができます。
* したがってシュレーディンガー方程式の境界値問題を考えると　DN map からポテンシャルを理論上は計算できます。

逆散乱問題のスキーム

* 無限遠での振幅

$\Downarrow$

$\Downarrow$

* S行列

$\Downarrow$

* DN map

$\Downarrow$

* ポテンシャルの計算

S行列と DN map

* シュレーディンガー作用素に対するS行列から境界値問題に対するDN写像を計算できます。
* この部分は数学的にこみいっているので後でお話しします。
* したがってS行列からポテンシャルを計算することが理論上は可能です

* 「理論上」って強調してるけど
* この方法は実際の計算にはあまり向かないと思います。勿論、理論的にわかるだけでも大変なことなのですが。

離散化してみたら

* 上の手続きはかなり長いものです。したがって各ステップで離散化しても全体として consistent かどうかは保証のかぎりではありません。

* ところが離散化した方程式から出発すると、上と同じ議論が成立します。しかもそれはいろいろな格子上のシュレーディンガー作用素に対しても同じように成り立ちます。

離散化したら易しいの？難しいの？

* 普通は離散化すると連続モデルに比べて扱いやすくなると思われています。
* ところが離散モデルは連続モデルに負けず劣らず難しいところがあるんです。
* 何が難しいの？
* 微分、積分は強力な道具でいろいろな数学的テクニックが知られています。ところが差分、和分にはあまり使えるテクニックがないんです。
* 格子上のシュレーディンガー方程式の解も無限領域では実質、計算不可能です。その解の性質を調べるのは易しくないんです。

正方格子

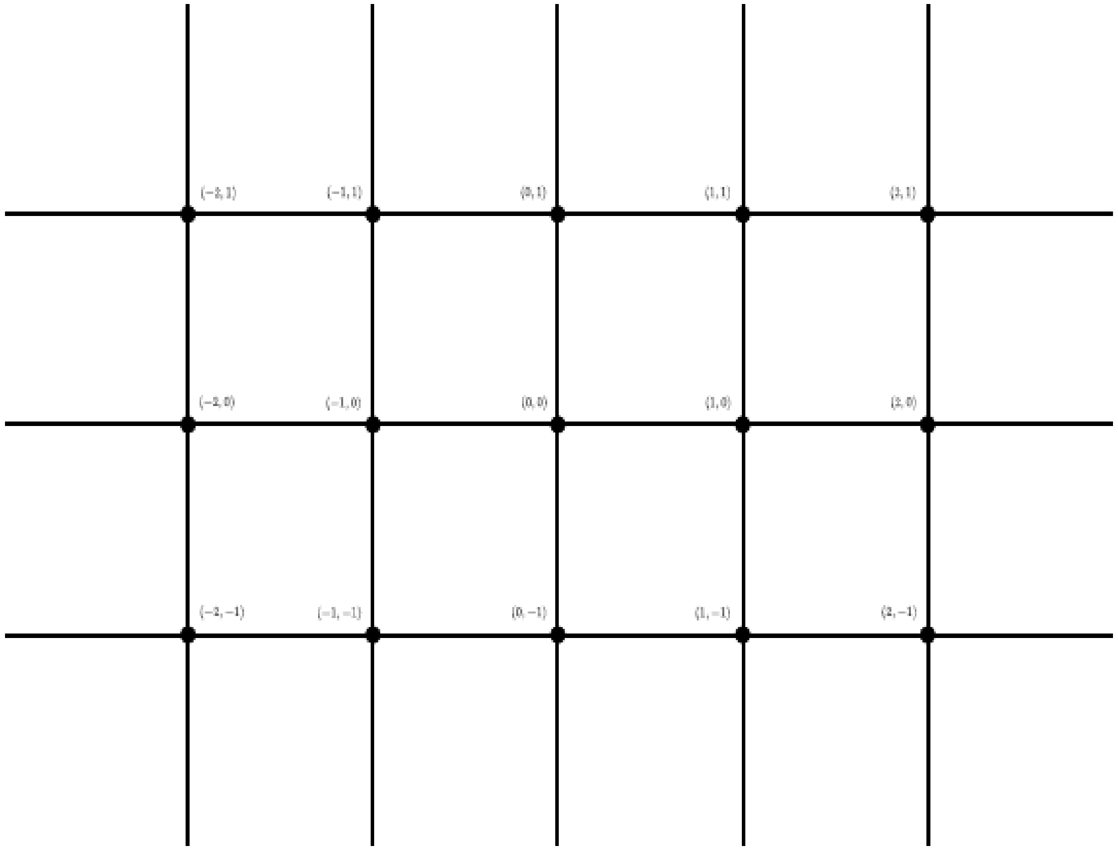


FIGURE 1. Square lattice

三角格子

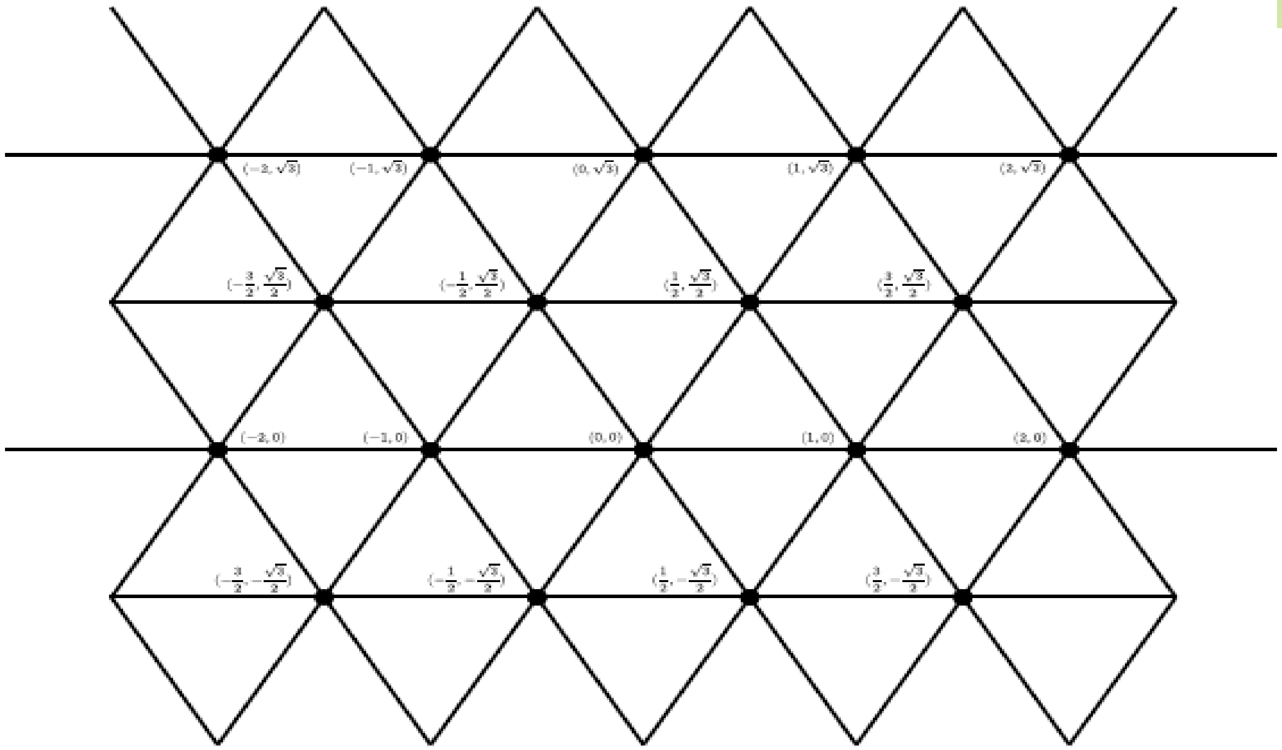


FIGURE 2. Triangular lattice

六角格子

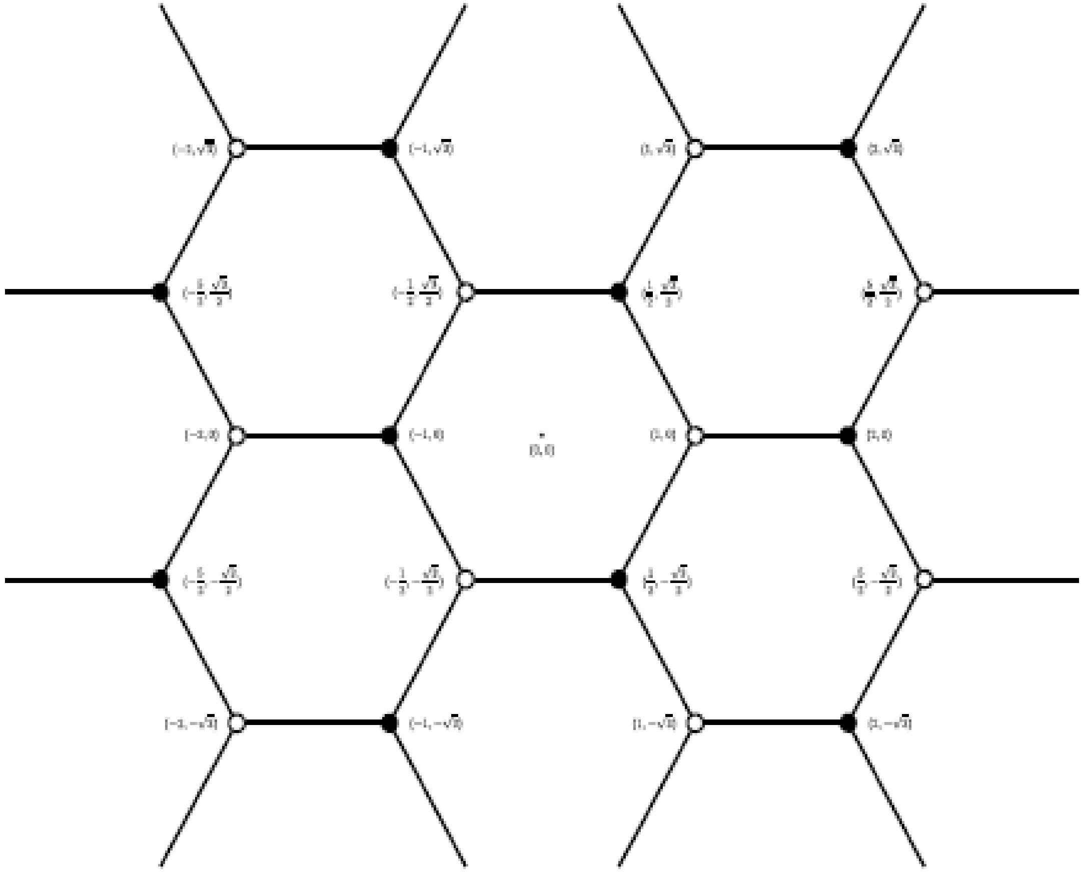


FIGURE 3. Hexagonal lattice

カゴメ格子

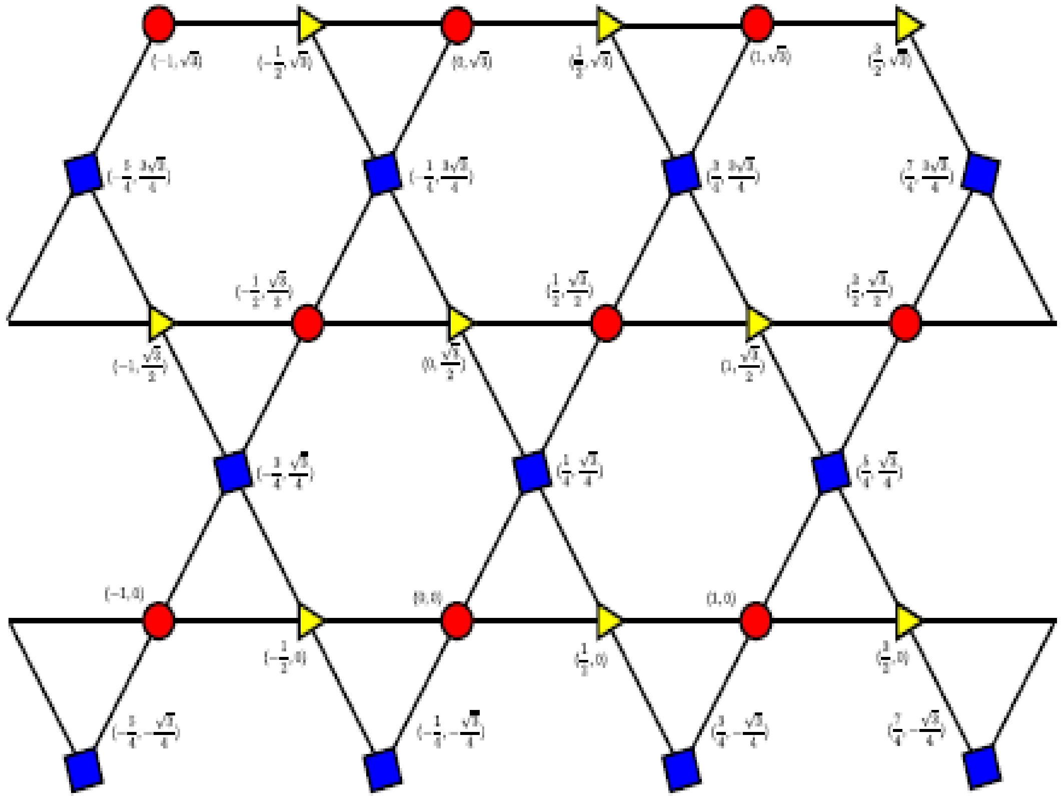
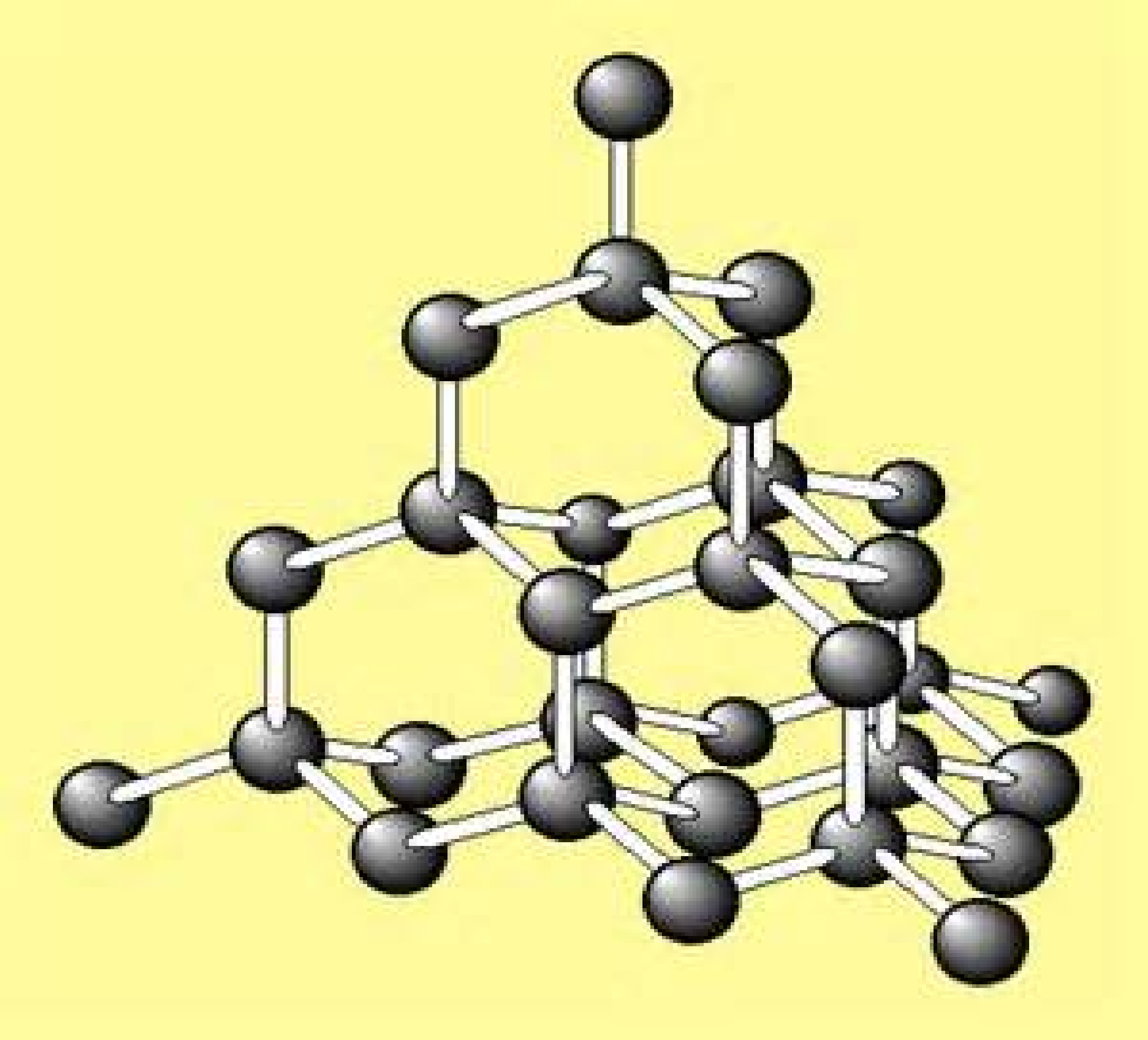
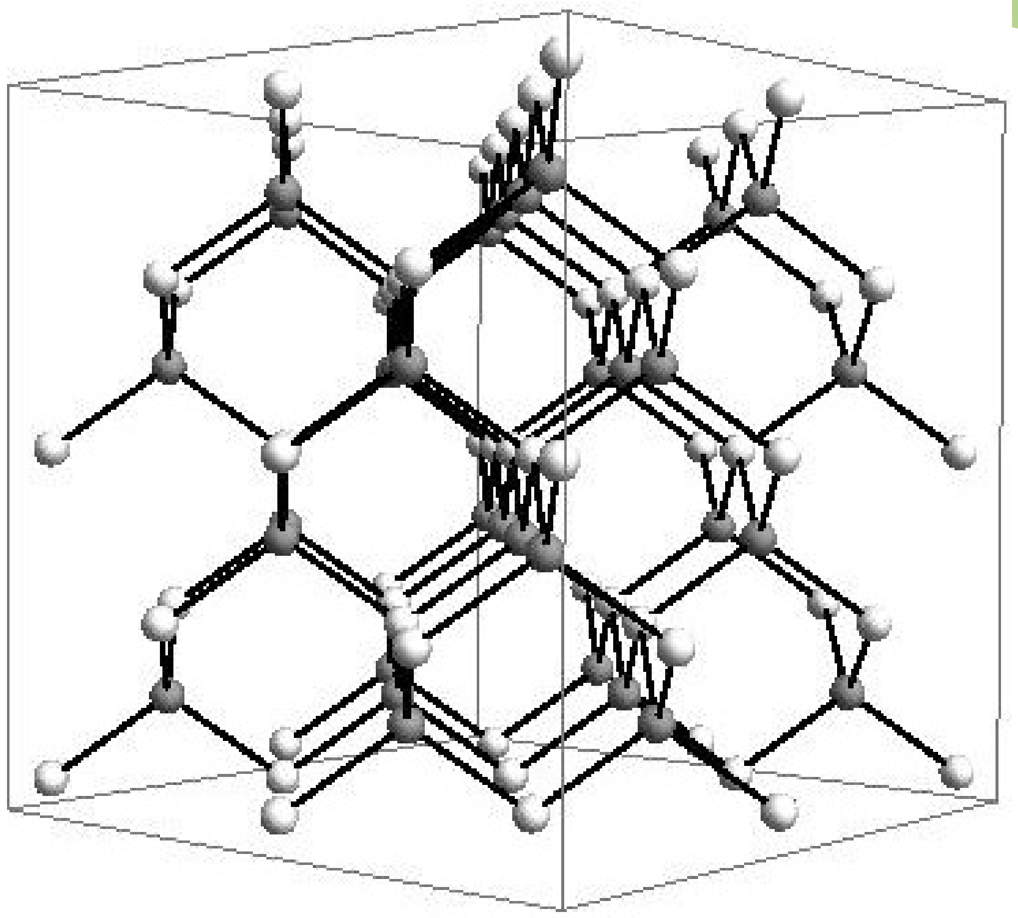


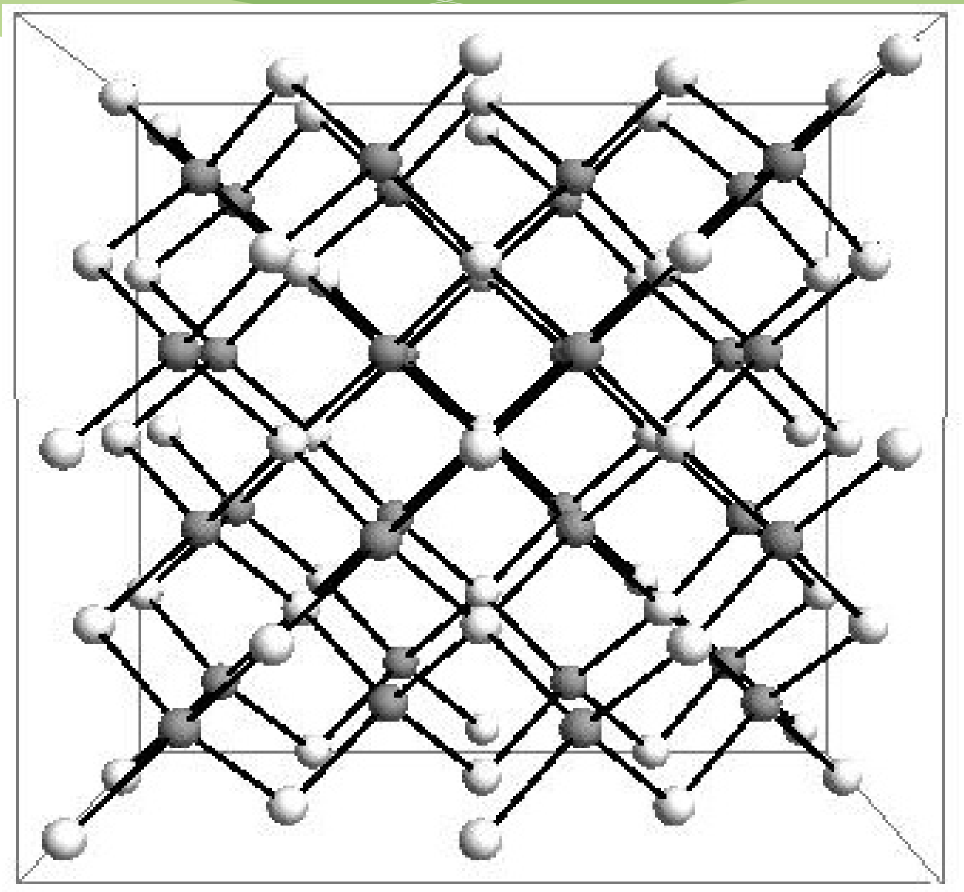
FIGURE 4. Kagome lattice

ダイヤモンド格子（六角格子の3次元版）



ダイヤモンド格子を別の角度から見ますと





Subdivision

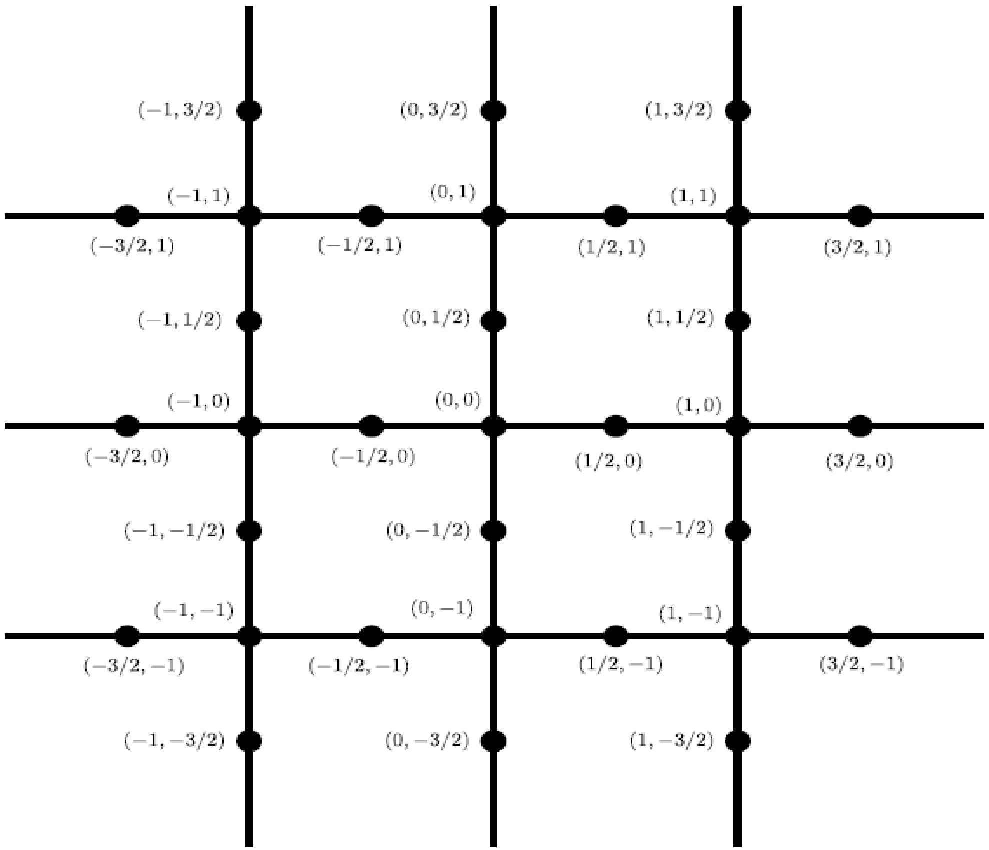


FIGURE 5. Subdivision of 2-dimensional square lattice

$3-$dimensional ladder

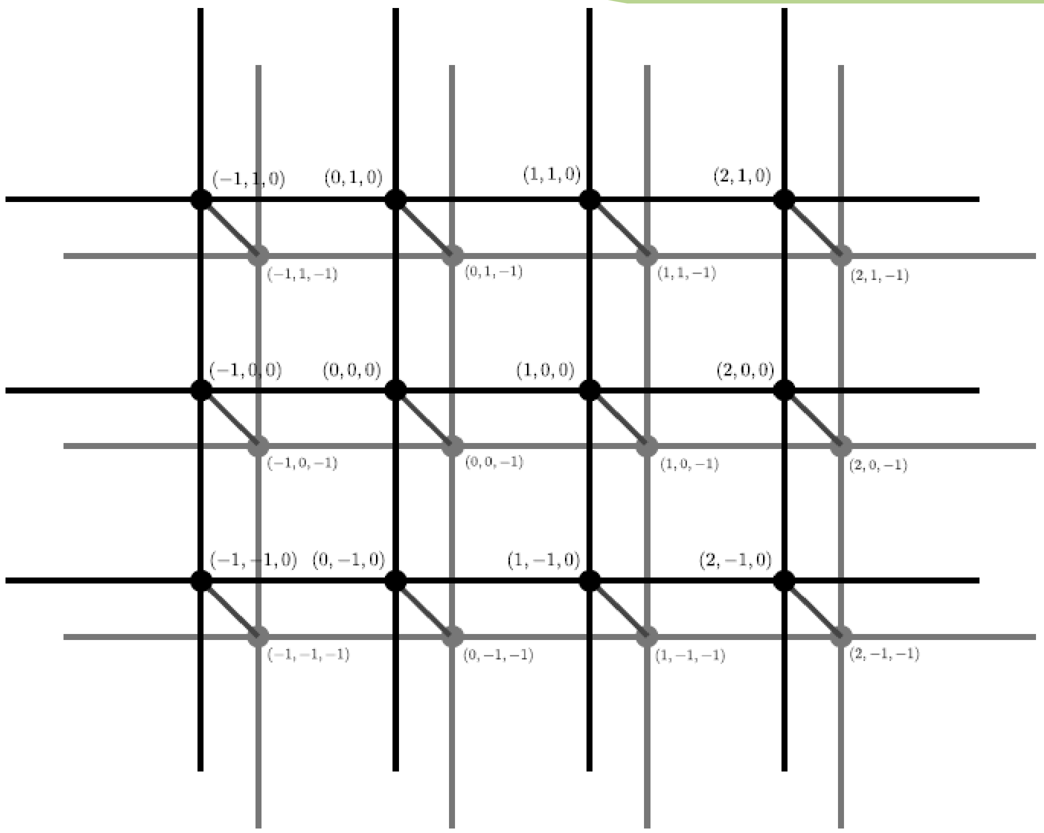


FIGURE 7. 3-dim. ladder

グラファイト

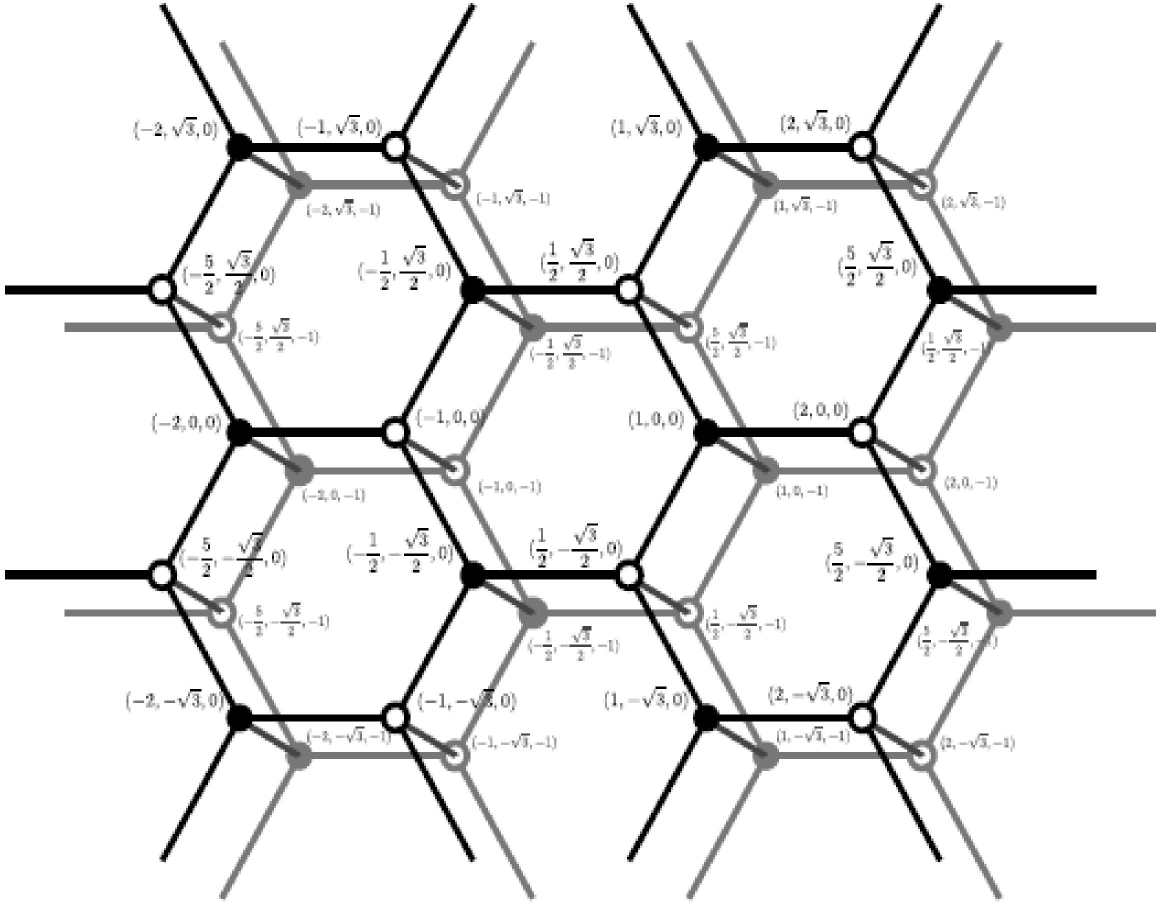


FIGURE 9. Graphite

格子上のラプラシアンとは

* まず1次元の微分を差分化しましょう
* 現在の位置の右側の点との差分から左側の点との差分をひきますと

隣接点での値の平均値

＝　ラプラシアン

隣接点て何？

* 格子を考えるときには普通は一番近い点です。
* 時には遠くの点も隣接点とすることがあります。
* あるいは各点から一本辺を出してそこに点をつけることもあります（pendant)
* そんなことして何が面白いの？
* ラプラシアンの連続スペクトルに隙間ができることがあります。これは電子がエネルギーによって動いたり、動かなかったりすることですから意味があります。

現在はどんな研究が多いか

* 格子上のラプラシアンのスペクトルは区間(あるいはその有限和)になる
* 固有値の計算
* 磁場を付加する

格子上の波

* 散乱を考えるということは、格子上の粒子の作る波の遠方での様子を計算したいんですね？

* そうです。連続モデルのときと同じように 位相と振幅が分かって（本当はなかなか大変なのですが）、S 行列が定義できます。

* 格子の場合の摂動って何ですか？

* 第一に考えたいのはポテンシャルです。

* ですが格子が崩れたり、辺に重みがついたりしたものも考えたいのです。格子の歪みです。

波を計算するからくりは

* 格子上の粒子の運動を記述する重要なからくりは、粒子の運動量の空間の中のフェルミ面と呼ばれる曲面です。
* このフェルミ面の曲率が０になると、粒子の運動が計算しずらくなるんですが、曲率０ということがよくあるんです。
* またフェルミ面が複雑に交差することもあります。
* この辺は代数や幾何も関連した数学として難しい部分です。

離散モデルでの境界値問題って何？

* 離散モデルでのラプラシアンの境界値問題というのは、勿論有限次元での一次方程式の問題です。
* 格子というよりもむしろ有限グラフ上の問題として考えられてきたのだろうと思います。
* 辺の重みって何ですか？
* Resistor network の問題というのがありますが、各辺ごとに電気抵抗が違った定数になっているラプラシアンと思えばいいです。

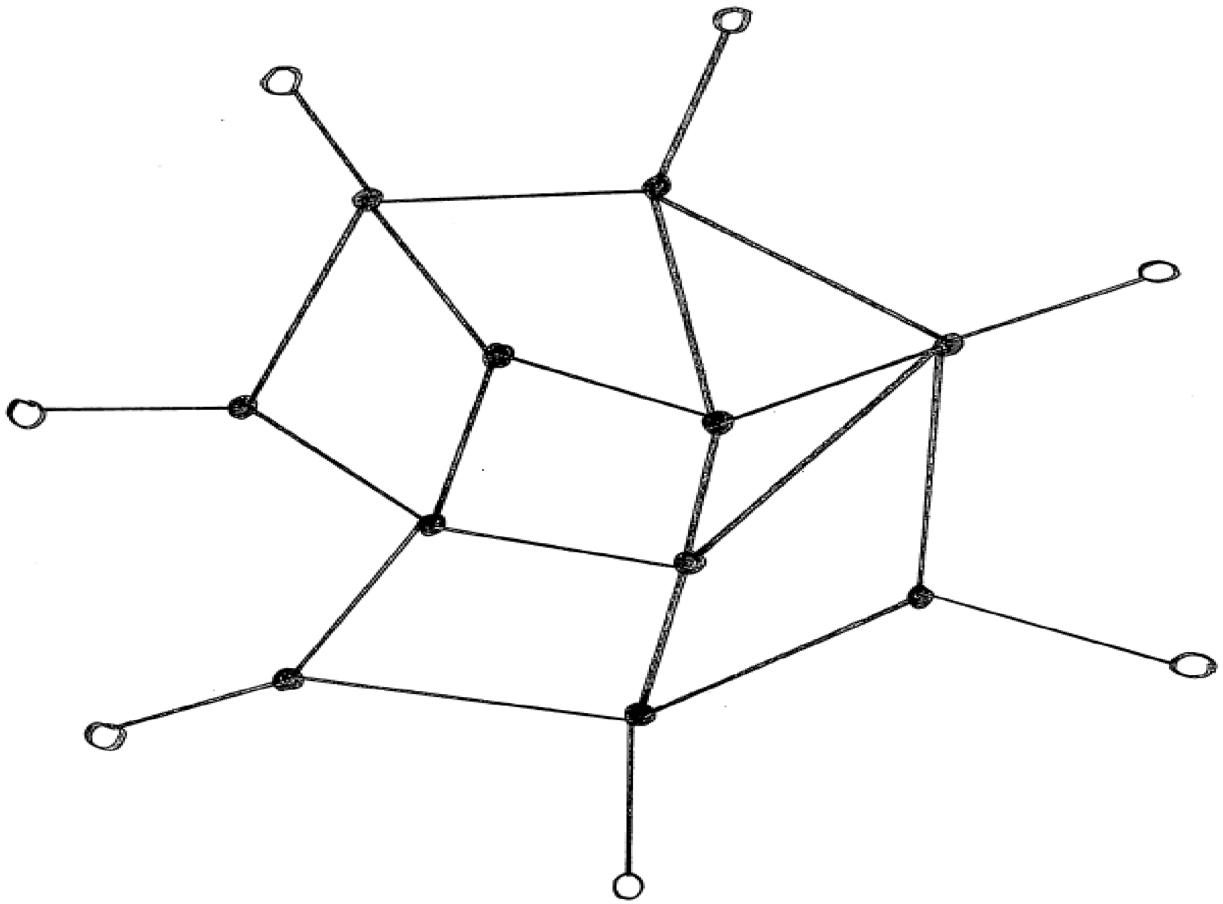
Resistor network のラプラシアン

$$(\Delta_{disc} f)(P) = \sum_{Q \approx P} \gamma(e) f(Q)$$

$$e = (P, Q) = edge\ \ with\ \ ends\ \ P\ \ and\ \ Q$$

$\gamma(e)$ = 辺 e の抵抗

Network problem



S行列とDNmap

* すると有限グラフ上でのDN mapというのもあるんですね？
* そうです。いろいろな配線がつながっていて、端の部分での電流と電圧が分かるときに、内部の電気抵抗を求める問題と思って下さい。
* すると、格子上でのS行列から有限グラフ上でのDN mapを求める方法があればいいんですね。
* そうです。それは連続モデルのときと同じようにして出来るんです。

格子上で問題の利点は？

* 連続モデルの場合と違って、すべて本質的に有限次元での代数方程式になっています。

* またポテンシャルを計算するアルゴリズムもあります。

* ただ、実際に計算可能かどうかは分かりません。DN map からの計算はいいんでしょうが、S 行列と DN map の部分が分かりません。

どんな数学を使うの？

* でも、さっき、離散になったらあまり道具がないといってたでしょう。どうやって考えるんですか？

* 格子上の点での関数が与えられたら、それをフーリエ係数と思って立方体（トーラス）上の関数を作ります。これは連続的な変数を持つ関数ですから微分や積分ができます。

* それだけなら普通じゃない？

* そうなんですが $\sum_n a_n e^{in\cdot x}$ というフーリエ級数が与えられたとします

と $z_j = e^{ix_j}$ とおけば、これは

$$\sum_n a_n z^n, \quad z^n = z_1^{n_1} \cdots z_d^{n_d}$$

という多変数の多項式、或いはべき級数を考えることになります。そこで

代数幾何や多変数函数論の知識を少し使います。もちろん実変数の関数と

して偏微分方程式や関数解析の知識も使います。

Multiple lattice structure

$$v_1, \cdots, v_d \;=\; basis\ in\ R^d$$

$$L \;=\; \left\{ \sum_{j=1}^{d} n_j v_j \;;\; n_j \in Z \right\}$$

$$p_i - p_j \notin L,\;\; i \neq j$$

$$\bigcup_{j=1}^{s} \{ p_j + L \}$$

格子の数学

* s　個の合同な格子からなる
* 波動関数は s 個の数列　$c_j(n),\ n \in Z^d$　を並べたもの

$$u_j(x) = (2\pi)^{-d/2} \sum_{n \in Z^d} e^{-in\cdot x} c_j(n)$$

によって

$$u(x) = (u_1(x), \cdots, u_s(x)), \quad x \in (0, 2\pi) \times \cdots \times (0, 2\pi)$$

を考える

格子上の Hamiltonian

$$Hu = \left(H_{ij}(x)\right)u(x)$$

- $H_{ij}(x)$ は三角関数
- $H(x)$ は $S \times S$ Hermite 行列
- $H(x)$ の固有値を $\lambda_1(x), \cdots, \lambda_s(x)$ として

$\lambda_j(x) = E$ が Fermi 面

六角格子の Hamiltonian

$$-\frac{1}{3}\begin{pmatrix} 0 & 1+e^{ix_1}+e^{ix_2} \\ 1+e^{-ix_1}+e^{-ix_2} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_1(x) \\ u_2(x) \end{pmatrix}$$

S行列とDN写像

* S行列からDN写像を求めるstepを正方格子の場合に説明します。
* まず格子全体を有限部分 Ω_{int} とその外側の外部領域 Ω_{ext} に分けます。
* ポテンシャルは外部領域では 0 であるとしておきます。
* 外部領域でヘルムホルツ方程式を解きます。

外部境界値問題

$$(-\Delta_{disc} - \lambda) u_{ext} = 0, \quad in \quad \Omega_{ext},$$

$$u_{ext} = f, \quad on \quad S = \partial\Omega_{ext}$$

$$Far - field \quad pattern \quad (|n| \to \infty)$$

$$u_{ext}^{(\pm)}(n) \approx e^{\pm i\varphi(n,\lambda)} a_{\pm}(\lambda, n/|n|)(\Gamma^{(\pm)}(\lambda) f)(n/|n|)$$

Linear equation between S matrix and DN map

$$A_{ext}(\lambda) - A(\lambda) = \Gamma^{(+)}(\lambda) M(\lambda) \Gamma^{(-)}(\lambda)$$

$$M(\lambda)^{-1} = \Lambda(\lambda) + \text{known operators}$$

$$\Lambda(\lambda) = DN \ \ map \ \ on \ \ \Omega_{\text{int}}$$

$$A(\lambda) = 1 - S(\lambda), \ \ S(\lambda) = S - matrix$$

$$A_{ext}(\lambda) = known \ \ operator$$

格子上のシュレーディンガー方程式を解く

* 上のような式を出すために、格子上のシュレーディンガー方程式の連続スペクトルを記述する固有関数の完全系を求め、それらの無限遠での挙動を計算します。ただし具体的には解けません。無限遠での漸近形が分かるだけです。

* 要するにシュレーディンガー方程式の解の無限遠での性質を詳しく調べることが重要です。

Thank you for your attentions

* 格子上の散乱問題の研究は始まったばかりです。連携サロンと同様に

  いろいろ教えていただければ幸いです。