

卷积的不变性

雷电
上海大学

2020 年 6 月 3 日

Contents

0.1	数学公式	2
0.1.1	傅里叶变换	2
0.1.2	矩阵的直积	2
0.2	线性系统叠加性原理	3
0.2.1	叠加性原理	3
0.3	不变系统与卷积运算	4
0.3.1	不变系统定义	4
0.3.2	卷积运算的平移不变性	5
0.3.3	脉冲响应函数与传递函数,傅里叶变换	6
0.3.4	成像	8
0.4	离散函数的卷积运算	9
0.5	卷积算符与守恒量	10
0.5.1	空间对称性与守恒量	10
0.5.2	平移算符	11
0.5.3	空间的均匀性及动量(波矢)守恒	13
0.5.4	卷积算符	14
0.5.5	卷积算符的本征值方程	15
0.5.6	卷积的成像性质	17
0.6	角谱理论的测距	23
0.6.1	角谱理论	23
0.6.2	几何光学近似成像	23
0.6.3	中心截面定理	24
0.7	卷积与费曼路径积分	25
0.7.1	最小作用量原理	25
0.7.2	费曼路径积分	26
0.8	平移不变的物理守恒量—波矢的测量	27
0.8.1	边缘检测的理解	27
0.8.2	线性不变系统作为滤波器	27
0.9	抽样定理	27
0.9.1	空间反射不变性与宇称守恒	27
0.10	卷积与规范场	28
0.10.1	规范场	28
0.10.2	格点规范理论	36
0.11	待看文献	36
0.12	卷积与散射	37

0.13 含时散射	52
0.14 相变与标度	52
0.15 局域态和无序态	54
0.15.1 量子混沌中由时间驱动的奇特相变	54
0.16 散射与态射	55
0.17 人工智能发展报告	56
0.18 卷积与量子信息物理	56
0.18.1 量子测量的纠缠退相干模型–von Neumann正交投影模型	56
0.18.2 波矢测量的卷积方法	57

0.1 数学公式

0.1.1 傅里叶变换

傅里叶-贝塞尔变换 极坐标系中的函数 $g(r, \theta)$ ，当它只是半径的函数时，傅里叶变换式 $G(\rho)$

$$g(r, \theta) = g_R(r) \quad (1)$$

$$G(\rho) \equiv \mathcal{F}\{g_R(r)\} = 2\pi \int_0^\infty r g_R(r) J_0(2\pi\rho r) dr \quad J_0 \text{ 是贝塞尔函数} \quad (2)$$

$$\rho = \sqrt{f_x^2 + f_y^2} \quad \text{极坐标表示的频率坐标} \quad (3)$$

0.1.2 矩阵的直积

<https://wenku.baidu.com/view/59eaa2aee53a580217fcfe22.html>

设 $A = (a_{ij}) \in C^{m \times n}, B = (b_{ij}) \in C^{p \times q}$

矩阵直积（Kronecker积，张量积）

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} a_{11}B & a_{12}B & \dots & a_{1n}B \\ a_{21}B & a_{22}B & \dots & a_{2n}B \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{m1}B & a_{m2}B & \dots & a_{mn}B \end{pmatrix} = (a_{ij}B) \in C^{mp \times nq}$$

例:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 1 & -1 \end{pmatrix}$$

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad B \otimes A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

直积的基本性质和定理

$$k(A \otimes B) = (kA) \otimes B = A \otimes (kB)$$

$$(A + B) \otimes C = A \otimes C + B \otimes C, \quad C \otimes (A + B) = C \otimes A + C \otimes B$$

$$(A \otimes B) \otimes C = A \otimes (B \otimes C)$$

$$(A \otimes B)(C \otimes D) = (AC) \otimes (BD)$$

$$\text{若二元复系数多项式函数为 } f(x, y) = \sum_{i,j=0}^{\ell} c_{ij} x^i y^j,$$

$$\text{则 } mn \text{ 阶矩阵 } f(A, B) = \sum_{i,j=0}^{\ell} c_{ij} A^i \otimes B^j, \text{ 其中 } A^0 = E_m, B^0 = E_n$$

若 A_{mm} 的特征值 $\lambda_1, \dots, \lambda_m$, B_{nn} 的特征值 μ_1, \dots, μ_n

则 mn 阶矩阵 $f(A, B)$ 的特征值 $f(\lambda_i, \mu_j)$, $(i = 1, \dots, m; j = 1, \dots, n)$

0.2 线性系统叠加性原理

0.2.1 叠加性原理

线性系统的最本质特征是系统满足叠加原理，它使得一个复杂系统可以用简单的“基元”来描述，并由此得到对系统更深刻的认识。寻找这个“基元”是研究复杂系统的首要工作。

显然许多系统，“点”就是一个简单的“基元”。物理学中，质点，点电荷电荷密度等都是典型的“点”概念。

点的数学表达式就是狄拉克 δ 函数

$$\delta(x, y) = \begin{cases} \infty & x=y=0 \\ 0 & \text{其他地方} \end{cases}$$

$$\iint_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \delta(x, y) dx dy = 1$$

δ 函数当然可以作为“基元”函数。

利用叠加原理，把一个复杂的输入，分解成许多较简单的输入，计算系统对每一个这样的“基元”函数的响应，再把单个响应叠加起来得到总得响应。

$$I(x, y) = \iint_{-\infty}^{\infty} I(\xi, \eta) \delta(x - \xi, y - \eta) d\xi d\eta$$

设系统变换是数学算符 $\hat{\Gamma}$,此算符作用在输入函数 $I(x, y)$ 上产生与之对应的输出函数 $O(x, y)$

$$\begin{aligned} O(x, y) &= \hat{\Gamma}\{I(x, y)\} \\ &= \iint_{-\infty}^{\infty} I(\xi, \eta) \hat{\Gamma}\{\delta(x - \xi, y - \eta)\} d\xi d\eta \end{aligned}$$

最后，我们用记号 K 表示系统在输入平面坐标 (ξ, η) 点上对 δ 函数激励，而在输出平面上的 (x, y) 点上的响应，即

$$K(x, y; \xi, \eta) \equiv \hat{\Gamma}\{\delta(x - \xi, y - \eta)\} \quad (4)$$

K 称为系统的脉冲响应或核函数，它表示了输入平面 (ξ, η) 点的单位脉冲，经过系统变换，在输出平面 (x, y) 的响应，现在就可以用以下简单的方程联系起来，于是系统的输入和输出，

$$O(x, y) = \iint_{-\infty}^{\infty} K(x, y; \xi, \eta) I(\xi, \eta) d\xi d\eta \quad (5)$$

这个基本表达式成为迭加积分，它表明了一个非常重要的事实，线性系统的性质完全由它对单位脉冲的响应表征。

应用到物理中的线性成像系统，这个结果具有有趣的物理解释，即只用确定物场中各点上 $(x - \xi, y - \eta)$ 的点光源的像 $\hat{\Gamma}\{\delta(x - \xi, y - \eta)\}$ ，就可以足以完备的描述各个成像元件的效应。

注意输入空间的一个固定点 (ξ, η) 的信号（单位脉冲信号）的像是一个用自变量 (x, y) 的输出空间函数（多个点序列） $K(x, y; \xi, \eta)$ 来描述。即点的相是一个面

为了完全确定输出，就必须知道系统对位于输入平面上所有可能的点上的脉冲的响应叠加。如果我们知道了系统的脉冲响应，就可以计算任何输入信号的输出（总输出信号可由各个经过脉冲响应叠加而求出）。

除了叠加原理，以上没有做任何假设，但这个脉冲响应函数 K 是二元的函数，与输入空间和输出空间两者的变量有关，所以确定系统的脉冲响应是困难的。

下面将看到，若假设这个系统是线性不变系统，

线性不变系统的脉冲响应具有相同的函数形式，只是一元的函数，且“基元”有更好的选择—傅里叶展开或傅里叶积分

0.3 不变系统与卷积运算

0.3.1 不变系统定义

不变系统定义 假若对线性系统输入 x ，对应输出 y ，即

$$x(t) \rightarrow y(t)$$

现在让输入信号沿时间轴平移 T ，若满足

$$x(t - T) \rightarrow y(t - T)$$

即输出信号除平移同样长度外其他不变，称这样的系统具有不变性（函数形式不变，输出信号的性质不变）。上述定义可推广到3维空间或高维空间。

对于 δ 基元函数 τ 时刻输入， t 时刻脉冲响应只依赖于时间差 $t - \tau$ ，称系统是时间不变的，由电阻电容和电感组成的电网络是时间不变的。

$$K(t; \tau) = K(t - \tau)$$

所以对于线性不变系统，系统的作用可以用统一的一元脉冲响应函数来表征，系统的分析得到大大简化！

一个空间脉冲在输入平面位移，线性系统的响应函数形式不变，只是产生了相应位移，这样的系统称为空间不变系统或位移不变系统。

只依赖于距离差称系统是空间不变的。

$$K(x, y; \xi, \eta) = K(x - \xi, y - \eta)$$

一个线性成像是空间不变的.当一个点光源在物场中移动, 点光源的像只改变位置而不改变它的函数形式,则此成像是空间不变的。

对于不变线性系统, 迭加积分(5) 特别简单.它是输入函数与系统响应的脉冲函数的卷积。

卷积是对两个函数的一种数学运算。设有2个函数 $K(t), I(t)$, 它们的卷积运算定义为

$$\begin{aligned} O(t) &\equiv (I * K)(t) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} I(\tau) K(t - \tau) d\tau \\ &= (K * I)(t) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} K(\tau) I(t - \tau) d\tau \quad \text{卷积可交换} \end{aligned}$$

对于二维

$$\begin{aligned} O(x, y) &\equiv (I * K)(x, y) \equiv \iint_{-\infty}^{\infty} I(\xi, \eta) K(x - \xi, y - \eta) d\xi d\eta \\ &= (K * I)(x, y) \equiv \iint_{-\infty}^{\infty} K(\xi, \eta) I(x - \xi, y - \eta) d\xi d\eta \quad \text{卷积可交换} \end{aligned}$$

0.3.2 卷积运算的平移不变性

前面我们已经给出线性空间不变性的系统输入与输出关系的数学描述就是卷积运算。即

设 I 移动 \mathbf{a} , K 移动 \mathbf{b} , 即:

$$\begin{aligned} I(x, y) &\rightarrow I'(x, y) = I(x + a_x, y + a_y) \quad , \quad I'(\mathbf{x}) = I(\mathbf{x} + \mathbf{a}) \\ K(x, y) &\rightarrow K'(x, y) = K(x + b_x, y + b_y) \quad , \quad K'(\mathbf{x}) = K(\mathbf{x} + \mathbf{b}) \end{aligned}$$

那么卷积的输出

$$\begin{aligned} O(x, y) &= \iint_{-\infty}^{\infty} K(\xi, \eta) I(x - \xi, y - \eta) d\xi d\eta \\ O'(x, y) &= \iint_{-\infty}^{\infty} K'(\xi, \eta) I'(x - \xi, y - \eta) d\xi d\eta \\ &= \iint_{-\infty}^{\infty} K(\xi + b_x, \eta + b_y) I(x + a_x - \xi, y + a_y - \eta) d\xi d\eta \\ &= \iint_{-\infty}^{\infty} K(\xi', \eta') I(x + a_y - \xi' + b_x, y + a_y - \eta' + b_y) d\xi' d\eta' \\ &= \iint_{-\infty}^{\infty} K(\xi', \eta') I((x + a_y + b_x) - \xi', (y + a_y + b_y) - \eta) d\xi' d\eta' \\ &= S(x + a_x + b_x, y + a_y + b_y) \\ O'(\mathbf{x}) &= O(\mathbf{x} + \mathbf{a} + \mathbf{b}) \end{aligned}$$

如果输入平移了 \mathbf{a} , 那么输出也平移 \mathbf{a} , 函数形式不变; 如果核函数平移 \mathbf{b} , 输出也平移 \mathbf{b} , 函数形式不变, 如果都平移, 输出也平移 $(\mathbf{a} + \mathbf{b})$, 函数形式不变! 特征不变, 不变性。

这正是动物视觉的模式！物体移动了，变换后的它的像点也同样移动，但特性不改变，不会因为见到的物体移动一下就变成了别的物体了。空间不变性表示了，体系从空间一个地方平移到另一个地方，其体系的特征并不依赖于它在空间的绝对位置，而只依赖于其内部坐标。

对于机器学习，比如对于图像分类问题，在各种变换下（猫的各种输入图像），经过变换后的输出需要具有不变的（猫）特征分布，所以卷积神经网络中的卷积运算就提供了其理论基础，卷积网络核函数K与输入的卷积计算保证了不变性，而K模拟了其视觉系统，寻找K就成为了图像识别的中心任务。

当处理时间序列数据时，这意味着通过卷积可以得到一个由输入中出现不同特征的時刻所组成的时间轴，如果我们把输入中的一个事件向后延时，在输出中仍然会有完全相同的表示，只是时间延后了。

卷积具有叠加性和不变性，所以卷积有广泛的物理意义。

比如对于一维卷积，时域的卷积可解释为：系统K在t时刻对输入I的响应S(t)像回音一样，是之前K作用于输入I的延续累积效应的叠加，即t时刻的响应S(t) 等于 当前时刻之前所有 τ 时刻输入 $I(t - \tau)$ 受系统 $K(\tau)$ 作用的叠加 $\int_0^t K(\tau)I(t - \tau)d\tau$

比如对于二维卷积，输入是物,输出就是像，卷积是具有不变性的线性成像系统。物和像是对偶的，所以物和像具有可交换，即若物在像的位置，那么像就会在物的位置。

0.3.3 脉冲响应函数与传递函数,傅里叶变换

线性不变系统的”基元” 有更好的选择-傅里叶展开或傅里叶积分

卷积定理

$\hat{\mathcal{F}}$ 是傅立叶算符，两函数的卷积傅立叶变换为各个函数傅立叶变换的相乘

$$\hat{\mathcal{F}}\{\mathbf{g}*\mathbf{h}\} = \hat{\mathcal{F}}\{\mathbf{g}\}\hat{\mathcal{F}}\{\mathbf{h}\}$$

所以，可同时从空域和频域两个角度研究信息在线性不变系统中传输的性质。

设 $O(x, y), K(x, y), I(x, y)$ 的傅立叶变换分别为 $\mathcal{O}(k_x, k_y), \mathcal{K}(k_x, k_y), \mathcal{I}(k_x, k_y)$,

$$\begin{aligned}\mathcal{O}(k_x, k_y) &= \iint_{-\infty}^{\infty} d\xi d\eta O(\xi, \eta) e^{-j(\xi k_x + \eta k_y)} \\ \mathcal{K}(k_x, k_y) &= \iint_{-\infty}^{\infty} d\xi d\eta K(\xi, \eta) e^{-j(\xi k_x + \eta k_y)} \\ \mathcal{I}(k_x, k_y) &= \iint_{-\infty}^{\infty} d\xi d\eta I(\xi, \eta) e^{-j(\xi k_x + \eta k_y)}\end{aligned}$$

那么根据卷积定理，

$$\mathcal{O}(k_x, k_y) = \mathcal{I}(k_x, k_y)\mathcal{K}(k_x, k_y) \quad (6)$$

对于线性不变系统，系统的输出等于系统的输入和系统脉冲响应的卷积，系统输出的频谱则等于系统的输入频谱和系统脉冲响应的傅里叶变换的乘积。

傅立叶变换表明函数 $I(x, y)$ 可以看成是很多不同频率的复指数函数的线性组合， $\mathcal{J}(k_x, k_y)$ 表示各种波矢(或频率)成分的权重，这种分解方法称为傅里叶分解。

输出的傅立叶展开

$$\begin{aligned} O(x, y) &= \iint_{-\infty}^{\infty} \mathcal{O}(k_x, k_y) e^{j(k_x x + k_y y)} dk_x dk_y \\ &= \iint_{-\infty}^{\infty} \mathcal{K}(k_x, k_y) \mathcal{J}(k_x, k_y) e^{j(k_x x + k_y y)} dk_x dk_y \end{aligned}$$

输入的傅立叶变换展开

$$I(x, y) = \iint_{-\infty}^{\infty} \mathcal{J}(k_x, k_y) e^{j(k_x x + k_y y)} dk_x dk_y$$

又输入经过不变系统 $\hat{\Gamma}$ 卷积输出

$$\begin{aligned} O(x, y) &= \hat{\Gamma}\{I(x, y)\} \\ &= \iint_{-\infty}^{\infty} \mathcal{J}(k_x, k_y) \hat{\Gamma}\{e^{j(k_x x + k_y y)}\} dk_x dk_y \end{aligned}$$

所以平面输入波经过不变系统 $\hat{\Gamma}$ 卷积输出

$$\hat{\Gamma}\{e^{j(k_x x + k_y y)}\} = \mathcal{K}(k_x, k_y) e^{j(k_x x + k_y y)} \quad (7)$$

对一维看得更清楚，若一维输入信号为调谐信号

$$I(t) = e^{j\omega t}$$

那么线性不变系统的响应为

$$O(t) = \mathcal{K}(\omega) e^{j\omega t}$$

结论：把输入函数分解为各种不同频率的复指数函数的线性组合，各个基元复指数函数通过线性不变系统，仍然还是同频率的复指数函数，但是可能产生与频率有关的幅值变化和相移，这些变化取决于与时间无关，也与时间差无关，只与频率 ω 有关的系统的传递函数 $\mathcal{K}(\omega)$ 。在线性时不变的物理系统中，频率是一个不变的性质，正弦信号（复指数函数）是线性时不变系统的特征函数，频率是特征值。

所以对于线性不变系统，输入可以分解成比 δ 函数更适合的基元函数-复指数函数。

对于线性不变系统，传递函数 $\mathcal{K}(\omega)$ 包含了系统的全部信息。于是可以通过 $\mathcal{K}(\omega)$ 。调节输入或测量输入。

能量是物质的性质，频率是信息的性质，量子物理认为，能量就是频率，也就是说物质和信息是刻画同一对象的不同表述，而能量和频率是刻画同一物理量的不同表述。

核函数函数

积分变换

$$F(s) = \int_a^b f(t) K(s, t) dt$$

可以理解为 $f(t)$ 向核函数 $K(s, t)$ 函数（核空间,基函数）的投影，傅里叶变换是一种核函数

$$K(\omega, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i\omega t}$$

它是线性不变系统的特征函数。

传递函数

通常将系统脉冲响应的傅里叶变换定义为系统的传递函数。当线性系统的输入和输出都用实值函数来表示是最方便的。调谐信号输入的实部和虚部都是相互独立的通过系统。所以若输入的是cos信号，则我们可以为其加上一个sin虚部以构成一个调谐信号，来确定对此调谐输入的响应，并去掉复值的虚部，这种间接方法因其能大大简化分析而经常被采用。即

我们首先将正弦型信号变换成调谐信号，在调谐情况下解题，再把得到的调谐输出变换回正弦信号。

我们将传递函数写成极坐标形式

$$\mathcal{K}(\omega) = A(\omega) e^{j\phi(\omega)}$$

$A(\omega)$ 是实函数，复指数项 $e^{j\phi(\omega)}$ 则是复平面内的单位向量，即幅值为1的复函数。

设输入为

$$I(t) = \cos(\omega t) = \text{Re}\{e^{j\omega t}\}$$

在传递函数的作用下，此调谐信号的输出为

$$\mathcal{K}(\omega) e^{j\omega t} = A(\omega) e^{j\phi(\omega)} e^{j\omega t} = A(\omega) e^{j(\omega t + \phi)}$$

所以得到最后的输出

$$\begin{aligned} O(t) &= \text{Re}\{A(\omega) e^{j(\omega t + \phi)}\} \\ &= A(\omega) \cos(\omega t + \phi) \end{aligned}$$

$A(\omega)$ 为增益因子，代表了系统对输入信号的放大或缩小倍数， $\phi(\omega)$ 为相位角，其唯一作用是将调谐输入信号的时间原点加以平移。

小结 我们已经导出了线性不变系统的3个重要性质：（1）调谐输入总是产生同频率的调谐输出。（2）系统的传递函数—一个仅依赖于频率的复值函数，包含了系统的全部信息。（3）传递函数对一信号输入只产生两种影响—幅值的变化和相位的平移。不变线性系统具有一套比一般线性系统更为细致得多的数学理论。正是由于有这样的一套理论，不变系统非常容易处理。

0.3.4 成像

平面物体用单色光照射，由于波动传播现象是线性的，我们总可以把场分布表示成叠加积分：

$$U_i(x_i, y_i) = \iint_{-\infty}^{\infty} h(x_i, y_i; x_0, y_0) U_0(x_0, y_0) dx_0 dy_0$$

只要确定脉冲响应函数 h ,就能完备描述成像系统性质
为了使像 U_i 尽可能和物 U_0 相似, 脉冲响应函数应接近狄拉克函数:

$$h(x_i, y_i; x_0, y_0) \cong K\delta(x_i \pm Mx_0, y_i \pm My_0)$$

其中 K 是复常数, M 是放大倍数, 正负号是为了允许倒立像。
在几何光学近似下的倒像:

$$U_i(x_i, y_i) = \frac{1}{M}U_0\left(-\frac{x_i}{M}, -\frac{y_i}{M}\right) \quad (8)$$

物距 $\frac{1}{d_0}$, 像距 $\frac{1}{d_i}$, 焦距 $\frac{1}{f}$, 满足关系透镜定律

$$\frac{1}{d_0} + \frac{1}{d_i} - \frac{1}{f} = 0 \quad (9)$$

几何光学当然是不精确的, 只有把衍射效应也考虑进去, 才能对物像关系有更全面的理解。

0.4 离散函数的卷积运算

对空间推广到无限。积分就是求和, 实际应用是离散函数, 那么离散化, i 时刻响应 $S(i)$, 输入 $I(i)$, 之前 m 时刻 $K(m)$. 离散化卷积计算公式为

$$O(i) = (K * I)(i) = \sum_m K(m)I(i - m) \quad (10)$$

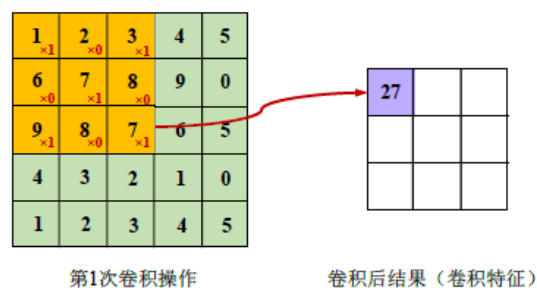
$$= (I * K)(i) = \sum_m I(m)K(i - m) \quad (11)$$

推广到二维的卷积计算:

$$O(i, j) = (K * I)(i, j) = \sum_n \sum_m K(m, n)I(i - m, j - n) \quad (12)$$

$$= (I * K)(i, j) = \sum_n \sum_m I(m, n)K(i - m, j - n) \quad (13)$$

求一个点 (i, j) 的值 $S(i, j)$, 要遍历 m, n 一切可能的值. 形象的表示, 核 K 是一个 $m \times n$ 的滑动窗格, 每计算一点 (i, j) 的卷积值需要遍历每个窗格与对应的输入逐元相乘并求和, 然后滑动窗格, 相同方法计算下一点的卷积值. 下图是采用“有效”模式的计算示意图



(a) 第一次卷积操作及得到的卷积特征。

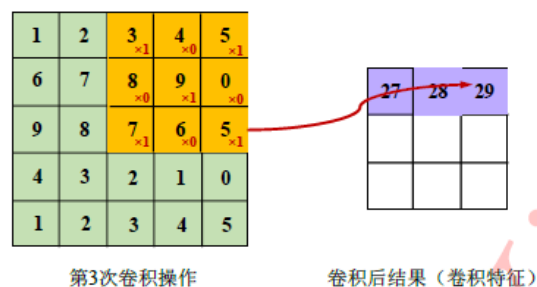


Figure 1: 卷积计算[496]

显然实际计算，是物空间到像空间的变换，所以公式14 也可表示为

$$O(i, j) = (K * I)(i, j) = \sum_n \sum_m K(m, n) I(i + m, j + n)$$

两种表达形式有差异，但计算结果是完全一样的。后者往往是相关函数的表示，即卷积中广泛的物理意义中还包括这样的物理意义：卷积表示了两个函数的相关性

I作为输入，**K**称为**核函数**（kernel function），也称过滤器。卷积的输出有时称为特征映射（feature map），即系统的输出S为核函数K与输入I的卷积操作。

或输入通过过滤器输出特征映射。

过滤器K中的权值就是卷积神经网络要寻找的参数，称为核参数。

0.5 卷积算符与守恒量

0.5.1 空间对称性与守恒量

卷积变换具有系统的不变性，这个不变性有对应的物理量表示吗？

物理知识告诉我们，不变性就是与具体操作或变换的无关性，意味着一种恒定不变的东西存在。[314]儿童7-8岁能认识到空间形状的守恒，9-10岁能认识到重量守恒，11-12岁能认识到长度守恒（长度一定的绳子无论怎么弯曲移动长度都不变）、面积或容积守恒或空间排列后的整体守恒。

在经典物理中，一个体系的物理量在运动过程中保持不变，这种力学量称为守恒量。在量子力学发展以后，人们认识到守恒定律与对称性紧密相关，与量子力学的叠加原理有深刻的联系。

有一种对称性或有一个不变量就有有一个守恒量，就有一个物理量来量度不变性，或就有一个物理定律的不变性。这种对应关系不下十几种，基本的守恒量与不变量的对应关系有：

能量守恒定律——时间平移不变性

动量守恒定律——空间平移不变性

角动量守恒定律——空间各向同性（空间转动对称性）

电荷守恒定律——规范变换对称性

。。。前3种代表着空间和时间的基本对称性，意味着，只要周围条件不变，我们在不同的地点和时间做同一物理实验将得到同样的结果，显示同样的规律。

平移不变的物理守恒量是波矢 \mathbf{k} 或动量.转动守恒量是角动量，时间不变的物理量是能量。

下面讨论满足线性不变性的卷积运算系统下的守恒量。

0.5.2 平移算符

为简单见，采用一维

定义平移算符 \hat{D}_x

$$\hat{D}_x(a)I(x) \equiv I(x+a)$$

可以证明满足上面关系的平移算符 \hat{D}_x 为

$$\hat{D}_x(a) = e^{a \frac{d}{dx}} \equiv e^{i\hat{k}a}$$

其中

$$\hat{k}_x \equiv -i \frac{d}{dx}$$

称为波矢算符

扩展到n维，定义空间平移算符

$$\hat{D}_x(\mathbf{a}) = e^{i\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{k}}} \quad (14)$$

其中

$$\hat{\mathbf{k}} = -i\nabla \quad (15)$$

$$\hat{\mathbf{k}}^+ = \hat{\mathbf{k}}$$

平移算符的性质

$$\hat{D}_x^{-1}(\mathbf{a}) = e^{-i\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{k}}} = \hat{D}_x^{+1}(\mathbf{a})$$

且又是线性的，所以 \hat{D}_x 是幺正的.

幺正变换下

- 算符本征值，本征函数不变
- 力学量 \hat{F} 经过平移变换

$$\hat{F} \rightarrow \hat{F}_D = \hat{D}_x(a)\hat{F}\hat{D}_x(a)^{-1}$$

- 内积不变

$$\langle \psi | \phi \rangle = \langle \psi_R | \phi_R \rangle$$

$$|\langle \psi(t_0) | \psi(t) \rangle|^2 = |\langle \psi_R(t_0) | \psi_R(t) \rangle|^2 = \omega_{fi} \quad (t_0 \rightarrow t) \text{ 的跃迁几率}$$

- 算符自轭性不变

定义算符

$$\hat{A}_k \equiv e^{ik\hat{x}}$$

并根据k,x的对易关系[36]p884

$$[\hat{k}_x, \hat{x}] = -i$$

$$[\hat{k}_x, \hat{A}_k] = k e^{ik\hat{x}} = k \hat{A}_k$$

设 $|k' \rangle, |k'' \rangle$ 分别是算符 \hat{k} 的波矢为 k', k'' 的本征态, 那么

$$\begin{aligned} k \langle k' | \hat{A}_k | k'' \rangle &= \langle k' | [\hat{k}_x, e^{ikx}] | k'' \rangle = \langle k' | (\hat{k}_x e^{ikx} - e^{ikx} \hat{k}_x) | k'' \rangle \\ &= (k' - k'') \langle k' | e^{ikx} | k'' \rangle = (k' - k'') \langle k' | \hat{A}_k | k'' \rangle \end{aligned}$$

所以

$$[k - (k' - k'')] \langle k' | \hat{A}_k | k'' \rangle = 0$$

上式表明, 矩阵元

$$\langle k' | \hat{A}_k | k'' \rangle = \begin{cases} 0, & \text{当 } k \neq (k' - k'') \\ \neq 0, & \text{当 } k = (k' - k'') \end{cases}$$

\hat{A}_k 的作用相当于使体系的波矢量改变k, 空间平移是连续变换, 波矢本征值本征态有无限多个, 不同的空间平移, 由波数k标志的 \hat{A}_k 来分类

任意算符可以用算符 \hat{A}_k 展开 (类似函数的傅里叶展开), 见后面

空间平移群

$$\hat{D}_x(\mathbf{a}) \equiv G$$

$$(\hat{D}_x(\mathbf{a}_1) \hat{D}_x(\mathbf{a}_2)) \hat{D}_x(\mathbf{a}_3) = \hat{D}_x(\mathbf{a}_1) (\hat{D}_x(\mathbf{a}_2) \hat{D}_x(\mathbf{a}_3)) = \hat{D}_x(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3)$$

所以是连续变换群, 是阿贝尔群. 可连续变换到 $\hat{D}_x(0)$ 所以是李群

平移算符是么正变换, 它是力学量吗? 或是厄米的吗?

因为

$$\begin{aligned} (\psi, \hat{D}(a)\phi) &\equiv \int \psi(x) e^{ia\hat{k}_x} \phi(x) dx = \int \psi(x) e^{a\frac{d}{dx}} \phi(x) dx \\ (\psi, \hat{D}(a)^+\phi) &\equiv \int \phi(x) e^{ia\hat{k}_x} \psi(x) dx \end{aligned}$$

简单看，设平移无穷小 $a \rightarrow \varepsilon$

$$\begin{aligned}
 (\psi, D(\hat{a})\phi) &= \int \psi^*(x) \left(1 + \varepsilon \frac{d}{dx}\right) \phi(x) dx \\
 &= \int \psi^*(x) \phi(x) dx + \int \psi^*(x) \varepsilon \frac{d\phi(x)}{dx} dx \\
 &= \int \psi^*(x) \phi(x) dx + \varepsilon \psi^*(x) \phi(x) \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int \varepsilon \phi(x) \frac{d\psi^*(x)}{dx} dx \\
 &= \int \psi^*(x) \phi(x) dx - \int \varepsilon \phi(x) \frac{d\psi^*(x)}{dx} dx \\
 (\psi, D(\hat{a})^+ \phi) &\equiv (D(\hat{a})\psi, \phi) \\
 &= \int \phi(x) \left(1 + \varepsilon \frac{d}{dx}\right)^* \psi^*(x) dx \\
 &= \int \phi(x) \psi^*(x) dx + \int \varepsilon \phi(x) \frac{d\psi^*(x)}{dx} dx
 \end{aligned}$$

所以平移算符不是厄米的，不是力学量

0.5.3 空间的均匀性及动量(波矢)守恒

下面找出与平移变换算符相联系的守恒量。

设初始时刻，体系处于 $\psi(0)$ 态，并且具有下面特殊性质

$$\hat{D}_x(a)\psi(0) = e^{jka}\psi(0)$$

如果体系具有平移不变性，那么以后任意时刻都有

$$\hat{D}_x(a)\psi(t) = e^{jka}\psi(t)$$

现在考虑无限小平移，即体系沿 x 方向平移一个无限小距离 ϵ

$$\begin{aligned}
 \hat{D}_x(\epsilon)\psi(x) &= \psi(x + \epsilon) \approx \psi(x) + \epsilon \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} = (1 + \epsilon \frac{\partial}{\partial x})\psi(x) = (1 - i\epsilon \hat{k}_x)\psi(x) \\
 &= e^{jk\epsilon}\psi(x) \approx (1 - i\epsilon k)\psi(x)
 \end{aligned}$$

所以

$$\hat{k}_x\psi(x) = k\psi(x)$$

k 就是刻画这种特殊状态(平移不变性)的守恒量, \hat{k} 就是平移变换不变性相联系的守恒量算符—波矢算符。扩展到3维

$\hat{\mathbf{k}}$ 是平移变换相联系的力学量波矢。对于三维空间平移变换具有不变性的体系，波矢是守恒的。即

力学量算符—波矢 \hat{k} 算符的波矢值 k 代表了具有空间不变性的体系的所处的状态的守恒量，这个特殊的状态即是波矢 k 标识的 \hat{k} 的本征态, 在坐标表象的表示:

$$|\mathbf{k}\rangle = \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$$

当然，具有平移不变性的体系并不表示所处的状态是在波矢的本征态，而是许多波矢本征态的叠加。

0.5.4 卷积算符

卷积运算

$$\begin{aligned}O(\mathbf{x}) &= \int_{\mathbf{a}} K(\mathbf{a}) I(\mathbf{x} - \mathbf{a}) d\mathbf{a} \\&= \int_{\mathbf{a}} K(\mathbf{a}) \hat{D}_{\mathbf{x}}(-\mathbf{a}) I(\mathbf{x}) d\mathbf{a} \\&= \left(\int_{\mathbf{a}} K(\mathbf{a}) \hat{D}_{\mathbf{x}}(-\mathbf{a}) d\mathbf{a} \right) I(\mathbf{x})\end{aligned}$$

令卷积算符

$$\begin{aligned}\hat{\Gamma} &\equiv \int_{\mathbf{a}} d\mathbf{a} K(\mathbf{a}) \hat{D}_{\mathbf{x}}(-\mathbf{a}) \\&= \int_{\mathbf{a}} d\mathbf{a} K(\mathbf{a}) e^{-j\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{k}}} \\&= \iint_{-\infty}^{\infty} d\xi d\eta K(\xi, \eta) e^{-j(\xi \hat{k}_x + \eta \hat{k}_y)}\end{aligned}$$

所以卷积算符恰好是卷积核的傅里叶变换

$$\begin{aligned}\hat{\Gamma} &= \mathcal{K}(\hat{k}_x, \hat{k}_y) \\&= \mathcal{K}(\hat{\mathbf{k}})\end{aligned}$$

卷积运算

$$O(\mathbf{x}) = \hat{\Gamma} I(\mathbf{x})$$

其中，对于空间平移不变性

$$\hat{\mathbf{k}} \equiv -j\nabla$$

或

$$\hat{\mathbf{p}} \equiv \hbar \hat{\mathbf{k}} \equiv -j\hbar \nabla$$

$\hat{\mathbf{k}}$ 或 $\hat{\mathbf{p}}$ 是空间平移不变的守恒量——波矢或动量

类似，对于时间的卷积：

$$\begin{aligned}\hat{\Gamma} &\equiv \int_{\tau} d\tau K(\tau) \hat{D}_t(-\tau) \\&= \int_{\tau} d\tau K(\tau) e^{-j\tau \cdot \hat{k}}\end{aligned}$$

时间的平移不变性

$$\hat{k} \equiv -j \frac{\partial}{\partial t}$$

若输入的是波函数，那么根据量子力学

$$\hat{H} \equiv -j\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

\hat{H} 是时间平移不变的守恒量——能量

总结：卷积操作:

$$O(\mathbf{x}) = \Gamma(\hat{\mathbf{k}})I(\mathbf{x}) = \Gamma(-j\nabla)I(\mathbf{x})$$

是在波矢空间表示的卷积算符 $\hat{\Gamma}(\hat{\mathbf{k}})$ 的作用，而卷积算符是过滤器K在波矢空间的傅里叶变换:

$$\Gamma(\hat{\mathbf{k}}) = \Gamma(-j\nabla) = \int_{\mathbf{x}} d\mathbf{x} K(\mathbf{x}) e^{-j\mathbf{x} \cdot \hat{\mathbf{k}}}$$

过滤器K:

$$K(\mathbf{x}) = \int_{\mathbf{k}} d\mathbf{k} \Gamma(\hat{\mathbf{k}}) e^{j\mathbf{x} \cdot \hat{\mathbf{k}}}$$

0.5.5 卷积算符的本征值方程

$$\begin{aligned} \hat{\Gamma}\{e^{j(k_x x + k_y y)}\} &= \iint_{-\infty}^{\infty} d\xi d\eta K(\xi, \eta) e^{-j(\xi \hat{k}_x + \eta \hat{k}_y)} e^{j(k_x x + k_y y)} \\ &= \iint_{-\infty}^{\infty} d\xi d\eta K(\xi, \eta) e^{-j(\xi k_x + \eta k_y)} e^{j(k_x x + k_y y)} \\ &= \mathcal{K}(k_x, k_y) e^{j(k_x x + k_y y)} \end{aligned}$$

与前面的结果相同。

卷积算符 $\hat{\Gamma}$ 的本征值方程

$$\begin{aligned} \hat{\Gamma}\{e^{j(k_x x + k_y y)}\} &\equiv \lambda e^{j(k_x x + k_y y)} \\ &= \mathcal{K}(k_x, k_y) e^{j(k_x x + k_y y)} \end{aligned}$$

总结：卷积算符 $\hat{\Gamma}$ 的本征态和本征值

$$\begin{aligned} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) &= e^{j\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \quad \text{本征函数} \\ \lambda_{\mathbf{k}} &= \int_{\mathbf{x}} d\mathbf{x} K(\mathbf{x}) e^{-j\mathbf{x} \cdot \mathbf{k}} \\ &\equiv \mathcal{K}(\mathbf{k}) \quad \text{本征值} \end{aligned}$$

卷积算符 $\hat{\Gamma}$ 和波矢算符 \hat{k} 有共同的的本征态：复指数函数，线性不变系统的本征函数，所以卷积算符 $\hat{\Gamma}$ 和波矢算符 \hat{k} 对易关系：

$$[\hat{\Gamma}, \hat{k}] = 0 \quad (16)$$

所以可以同时角化；卷积算符本征值是波矢的分布函数。但是波矢算符本征值是实数，而卷积算符本征值可以是复数，为了可观测必须为实数，这样就对核函数K有了一个限制。

$$\begin{aligned} \lambda_{\mathbf{k}} &= \int_{\mathbf{x}} d\mathbf{x} K(\mathbf{x}) e^{-j\mathbf{x} \cdot \mathbf{k}} \\ &= \int_{\mathbf{x}} d\mathbf{x} (K_+(\mathbf{x}) + iK_-(\mathbf{x})) (\cos(\mathbf{x} \cdot \mathbf{k}) - i\sin(\mathbf{x} \cdot \mathbf{k})) \\ &= \int_{\mathbf{x}} d\mathbf{x} (K_+(\mathbf{x}) \cos(\mathbf{x} \cdot \mathbf{k}) + K_-(\mathbf{x}) \sin(\mathbf{x} \cdot \mathbf{k}) + iK_-(\mathbf{x})) (\cos(\mathbf{x} \cdot \mathbf{k}) - iK_+(\mathbf{x}) \sin(\mathbf{x} \cdot \mathbf{k})) \\ \lambda_{\mathbf{k}} &= \int_{\mathbf{x}} d\mathbf{x} (K_+(\mathbf{x}) \cos(\mathbf{x} \cdot \mathbf{k}) + K_-(\mathbf{x}) \sin(\mathbf{x} \cdot \mathbf{k})) \\ 0 &= \int_{\mathbf{x}} d\mathbf{x} (K_-(\mathbf{x}) (\cos(\mathbf{x} \cdot \mathbf{k}) - K_+(\mathbf{x}) \sin(\mathbf{x} \cdot \mathbf{k}))) \end{aligned}$$

若取K全为实数，即 $K_- = 0$ ，那么

$$\begin{aligned}\lambda_{\mathbf{k}} &= \int_{\mathbf{x}} d\mathbf{x} (K_+(\mathbf{x}) \cos(\mathbf{x} \cdot \mathbf{k}) \\ 0 &= \int_{\mathbf{x}} d\mathbf{x} K_+(\mathbf{x}) \sin(\mathbf{x} \cdot \mathbf{k})\end{aligned}$$

卷积神经网络参数共享，或有限视野，可以看成K是实周期函数。设在区间 $[0, \ell]$,

$$\begin{aligned}K_+(x) &= \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos\left(\frac{n\pi(2x-\ell)}{\ell}\right) + b_n \sin\left(\frac{n\pi(2x-\ell)}{\ell}\right) \\ 0 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{a_0}{2} \sin(kx) + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \int_{-\infty}^{\infty} dx \cos\left(\frac{n\pi(2x-\ell)}{\ell}\right) \sin(kx) \\ &\quad + \sum_{n=1}^{\infty} b_n \int_{-\infty}^{\infty} dx \sin\left(\frac{n\pi(2x-\ell)}{\ell}\right) \sin(kx)\end{aligned}$$

要求 $b_n = 0$ 或者 $k = 0$,所以

$k \neq 0$ 的情况

$$K_+(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos\left(\frac{n\pi(2x-\ell)}{\ell}\right) \quad (17)$$

$$\lambda_k = \int dx K_+(x) \cos(kx) \quad (18)$$

$k = 0$ 的情况

$$K(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos\left(\frac{n\pi(2x-\ell)}{\ell}\right) + b_n \sin\left(\frac{n\pi(2x-\ell)}{\ell}\right) \quad (19)$$

$$\lambda_0 = \int dx K(x) = \int dx K_+(x) \quad (20)$$

总之，核函数是偶函数，核函数以及卷积算符的本征值：

$$\begin{aligned}
 \hat{\Gamma}\{e^{jkx}\} &= \lambda_k e^{jkx} \\
 K(x) &= \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos\left(\frac{n\pi(2x-\ell)}{\ell}\right) \\
 a_n &= \frac{1}{\ell} \int_0^{\ell} K(x) \cos\left(\frac{n\pi(2x-\ell)}{\ell}\right) dx \\
 \lambda_k &= \int dx K(x) \cos(kx) \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} a_n \int \cos\left(\frac{n\pi(2x-\ell)}{\ell}\right) \cos(kx) dx \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n}{4} \int [e^{-jn\pi} e^{j(\frac{2n\pi}{\ell}+k)x} + e^{-jn\pi} e^{j(\frac{2n\pi}{\ell}-k)x} \\
 &\quad + e^{jn\pi} e^{-j(\frac{2n\pi}{\ell}-k)x} + e^{jn\pi} e^{-j(\frac{2n\pi}{\ell}+k)x}] \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n}{2} \cos(n\pi) \left(\delta\left(\frac{2n\pi}{\ell} - k\right) + \delta\left(\frac{2n\pi}{\ell} + k\right) \right) \\
 k &= \frac{2n\pi}{\ell} \quad (n = \pm 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad k \text{ 是离散的} \\
 n &= \frac{k\ell}{2\pi} \\
 \lambda_k &= \frac{a_n}{2} \cos(n\pi) = (-1)^n \frac{a_n}{2}
 \end{aligned}$$

0.5.6 卷积的成像性质

输入波函数的傅里叶展开

$$\psi(\mathbf{x}) = \int d\mathbf{k} C(\mathbf{k}) e^{j\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$$

通过卷积的测量,几率幅是傅里叶展开的系数 $C(\mathbf{k})$, 测量值是 $\lambda_{\mathbf{k}}$,概率是输入波函数的傅里叶展开的系数的平方 $|C(\mathbf{k})|^2$,

对于输入波 $\psi(\mathbf{x}) = e^{j\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$, 如何测量其 \mathbf{k} ?

卷积的输出为:

$$\begin{aligned}
 \phi(x) &\equiv \hat{\Gamma} e^{j\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n}{2} \cos(n\pi) \left(\delta\left(\frac{2n\pi}{\ell} - k\right) + \delta\left(\frac{2n\pi}{\ell} + k\right) \right) e^{jkx}
 \end{aligned}$$

只有当满足下面条件的 k 才有输出不为0

$$k = \frac{2n\pi}{\ell} \quad (n = \pm 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (21)$$

即卷积对于输入波进行了选择, 只要满足21 式才能测到

现在分析入射波是图像

设单色光源系统把一个沿 z 方向传播的波投射在 xy 平面上, 此平面上的复场, 在 x,y 平面上二维傅立叶变换:

$$\begin{aligned}
 \psi(x, y, 0) &= \iint_{-\infty}^{\infty} A_0(k_x, k_y) e^{j(k_x \cdot x + k_y \cdot y)} dk_x dk_y \equiv I(x, y) \\
 A_0(k_x, k_y) &= \iint_{-\infty}^{\infty} \psi(x, y, 0) e^{-j(k_x \cdot x + k_y \cdot y)} dx dy
 \end{aligned}$$

复指数函数

$$e^{j(k_x \cdot x + k_y \cdot y)}$$

看成是以方向余弦

$$\alpha = \frac{k_x}{k}, \quad \beta = \frac{k_y}{k}, \quad \gamma = \sqrt{1 - \alpha^2 - \beta^2}$$

传播的,波矢 $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ 的平面波。复振幅为 $A_0(k_x, k_y)dk_x dk_y$

$A_0(k_x, k_y)$ 称为角谱.

图像是这些平面波的叠加。

它传播距离 z 后, 即一个与 xy 平面平行但距离 z 的平面上

$$\psi(x, y, z) = \iint_{-\infty}^{\infty} A(k_x, k_y, z) e^{j(k_x \cdot x + k_y \cdot y)} dk_x dk_y$$

$A(k_x, k_y, z)$ 与 $A_0(k_x, k_y)$ 的关系为

$$A(k_x, k_y, z) = A_0(k_x, k_y) e^{jk_z z} \quad (22)$$

其中波矢

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (23)$$

$$k_z = \sqrt{k^2 - (k_x^2 + k_y^2)} = k \sqrt{1 - \left(\frac{k_x}{k}\right)^2 - \left(\frac{k_y}{k}\right)^2} \quad (24)$$

$$= k \sqrt{1 - (\alpha^2 + \beta^2)} \quad (25)$$

这里 k_x, k_y 是图像的空间波矢, k 传播的光,其物理意义有两种结果

1. 若 $(k_x^2 + k_y^2) > k^2$ 或方向余弦 $\alpha^2 + \beta^2 > 1$

当传播一段距离 z 将指数衰减

$$A(k_x, k_y, z) = A(k_x, k_y, 0) e^{-\mu z}$$

衰减系数

$$\mu = k \sqrt{\left(\frac{k_x}{k}\right)^2 + \left(\frac{k_y}{k}\right)^2 - 1}$$

在极限情况 $\alpha^2 + \beta^2 = 1$, 相当于传播方向垂直与 z 轴, 对 z 轴这一方向的净能流没有贡献。

2. 若 $(k_x^2 + k_y^2) < k^2$

传播距离 z 只是改变了角谱分量的各个相位。

$$\phi(x, y, z) = k_z z$$

即传播一段距离 z 后, 只是改变了角谱分量的相对位相, 波矢空间 (k_x, k_y, k_z) 是半径为 $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ 的球面

因此传播现象可以看成是一个具有有限空间带宽的线性色散空间滤波器, 滤波器透过率在波矢平面上半径为:

$$B = \max(\sqrt{k_x^2 + k_y^2}) = k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (26)$$

在这个圆形带宽之内, 传递函数的模为1, 但引进了与波矢有关的相移。在这个圆形带宽之外则为0, 当 XY 平面波矢最大时, 色散最大, 当 k_x, k_y 趋于0, 色散消失。因此图像是限带函数, 在频率平面上半径为 B 的园之外没有频谱。

因此

$$\begin{aligned}
 \psi(x, y, z) &= \iint_B A_0(k_x, k_y) e^{j(k_x x + k_y y)} e^{ik_z z} dk_x dk_y \\
 &= \iint_B dk_x dk_y A_0(k_x, k_y) e^{j\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \\
 &= \iint_B A_0(k_x, k_y) e^{j(k_x x + k_y y)} e^{ik \sqrt{1 - (\frac{k_x}{k})^2 - (\frac{k_y}{k})^2} z} dk_x dk_y
 \end{aligned} \tag{27}$$

代表了x-y二维图像传播z后的复场分布。图像是XY带宽2B内的平面波的叠加。

图像的傅里叶变换的频率表征图像中灰度变化的剧烈程度，是灰度在平面空间上的梯度。如大面积的沙漠在图像中是一片灰度变化缓慢的区域，对应的频率很低，而地表属性变化剧烈的边缘区域在图像中是一片灰度变化剧烈的区域对应的频率很高。而图像的传播是频率低的衰减慢，频率高的衰减快。

所以若对任意平面上的复场分布做傅立叶分析，则各个傅立叶分量可以看作是沿不同方向传播的平面波。在任意其他点上的场振幅可以在考虑到这些平面的波传播到该点所经受的相移后，对各个平面波的贡献求和。即在z位置的xy平面的图像实际上是满足波矢130 的波133。波矢为 \mathbf{k} 粒子数为 A_0^2

卷积的输出为：

$$\begin{aligned}
 \phi(x, y, z) &\equiv \hat{\Gamma} \iint_B A_0(k_x, k_y) e^{j(k_x x + k_y y)} e^{ik \sqrt{1 - (\frac{k_x}{k})^2 - (\frac{k_y}{k})^2} z} dk_x dk_y \\
 &= \iint_B A_0(k_x, k_y) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n}{2} \cos(n\pi) \left(\delta\left(\frac{2n\pi}{\ell} - k\right) + \delta\left(\frac{2n\pi}{\ell} + k\right) \right) e^{jkx}
 \end{aligned}$$

卷积神经网络的池化对应求卷积作用后的求极大点 若输入是一个点

$$\psi(x) = \delta(x - a) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{jk(x-a)} dk$$

那么

$$\hat{\Gamma} \psi(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \lambda_k e^{-jka} e^{jkx} dk$$

对点的卷积的测量，本征值都相同，平均值都相同，但几率幅不同，即 x, x' 点之间的差别是几率幅因子 $e^{-jk(x-x')}$ ，这也是傅里叶的相移定理

对易关系

卷积算符 $\hat{\Gamma}$ 与波矢算符 \hat{k} 有共同的本征态，但本征值不同。

根据 \mathbf{k}, x 的对易关系

$$[x, \hat{k}_x] = i$$

有

$$[x, \mathcal{K}(\hat{\mathbf{k}})] = i \frac{\partial \mathcal{K}(\hat{\mathbf{k}})}{\partial \hat{k}_x} = \int_a a_x K(\mathbf{a}) e^{-i\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{k}}} d\mathbf{a} \neq 0$$

$$[\hat{k}_x, \mathcal{K}(\hat{\mathbf{k}})] = -i \frac{\partial \mathcal{K}(\hat{\mathbf{k}})}{\partial x} = 0$$

对易关系

$$[\hat{\mathbf{k}}, \hat{\Gamma}] \equiv \hat{\mathbf{k}} \mathcal{K}(\hat{\mathbf{k}}) - \mathcal{K}(\hat{\mathbf{k}}) \hat{\mathbf{k}} = 0$$

因为 $\hat{k}_x^+ = \hat{k}_x$ 是厄米的, 所以

$$(\hat{k}_x^n)^+ = \hat{k}_x^n$$

$\hat{\mathbf{k}}$ 是厄米算符, 但

$$\begin{aligned}\mathcal{K}(\hat{\mathbf{k}}) &\equiv \int_{\mathbf{a}} d\mathbf{a} K(\mathbf{a}) e^{-i\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{k}}} \\ &= \int_{\mathbf{a}} d\mathbf{a} K(\mathbf{a}) \sum_n \frac{1}{n!} (-i\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{k}})^n \\ &= \int_{\mathbf{a}} d\mathbf{a} K(\mathbf{a}) \sum_n \frac{(-i)^n}{n!} (\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{k}})^n \\ \mathcal{K}^+(\hat{\mathbf{k}}) &= \int_{\mathbf{a}} d\mathbf{a} K(\mathbf{a}) \sum_n \frac{(i)^n}{n!} (\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{k}})^n\end{aligned}$$

因为 $\mathcal{K}^+ \neq \mathcal{K}$ 所以 \mathcal{K} 不是厄米算符。

但任意一个算符可以分解为两个厄米算符

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{K}} &= \hat{\mathcal{K}}_+ + i\hat{\mathcal{K}}_- \\ \hat{\mathcal{K}}_+ &= \frac{1}{2}(\hat{\mathcal{K}} + \hat{\mathcal{K}}^+) \\ \hat{\mathcal{K}}_- &= \frac{1}{2i}(\hat{\mathcal{K}} - \hat{\mathcal{K}}^+)\end{aligned}$$

其中 $\hat{\mathcal{K}}_+, \hat{\mathcal{K}}_-$ 都是厄米的。有实数本征值

对易关系

$$\begin{aligned}[\hat{k}, \hat{\mathcal{K}}_+] &= 0 \\ [\hat{k}, \hat{\mathcal{K}}_-] &= 0\end{aligned}$$

$\hat{\mathcal{K}}_+, \hat{\mathcal{K}}_-$ 是力学量, 所以有实数本征值, 与 \hat{k} 有共同的本征态。于是描述体系的量子数有3个

$$k, K_-, K_+$$

求 \mathcal{K}_+ 的本征值和本征函数

$$\mathcal{K}(\hat{\mathbf{k}}) \equiv A(\hat{\mathbf{k}}) e^{j\phi(\hat{\mathbf{k}})}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{K}(\hat{\mathbf{k}}) &\equiv \int_{\mathbf{a}} d\mathbf{a} K(\mathbf{a}) e^{-i\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{k}}} \\ &= \int_{\mathbf{a}} d\mathbf{a} K(\mathbf{a}) (\cos(\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{k}}) - i \sin(\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{k}})) \\ \mathcal{K}_+ &= \int_{\mathbf{a}} d\mathbf{a} K(\mathbf{a}) \cos(\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{k}}) \\ \mathcal{K}_- &= - \int_{\mathbf{a}} d\mathbf{a} K(\mathbf{a}) \sin(\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{k}})\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{K}_+(\hat{k}_x)\psi(x) &= \lambda\psi(x) \\ \left(\int_a K(a) \cos(k_x a) da\right)\psi(x) &= \lambda\psi(x)\end{aligned}$$

因为 $[\mathcal{K}_+(\hat{k}_x), \hat{k}_x] = 0$ 对易，有共同的本征函数，本征值

$$\lambda_k = \int_a K(a) \cos(ka) da$$

$$\psi_k = e^{ikx}$$

于是卷积分实部和虚部

$$\begin{aligned} S(\mathbf{x}) &= (\hat{\mathcal{K}}_+ + i\hat{\mathcal{K}}_-)I(\mathbf{x}) \\ S_+(\mathbf{x}) &= \int_{\mathbf{a}} d\mathbf{a} K(\mathbf{a}) \cos(\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{k}}) I(\mathbf{x}) \\ &= \int_{\mathbf{a}} d\mathbf{a} K(\mathbf{a}) \sum_n \frac{(-1)^n}{2n!} (\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{k}})^{2n} I(\mathbf{x}) \\ S_-(\mathbf{x}) &= - \int_{\mathbf{a}} d\mathbf{a} K(\mathbf{a}) \sin(\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{k}}) I(\mathbf{x}) \\ S(\mathbf{x}) &= S_+(\mathbf{x}) + iS_-(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

若I, K为实函数。且采用边界条件 $I'(0) = I'(L) = 0$ 。所以I可以偶延拓到 $[-L, 0]$ 成为2L周期函数，可以按cos展开

$$\begin{aligned} I(x) &= \sum_{n=0}^{\infty} C(\mathbf{n}) \cos\left(\frac{\pi \mathbf{n} \cdot \mathbf{x}}{L}\right) \\ &= \sum_n C(\mathbf{n}) \cos\left(\frac{\pi \mathbf{n} \cdot \mathbf{x}}{L}\right) \\ &= \sum_n C(\mathbf{n}) \frac{1}{2} (e^{i\frac{\pi \mathbf{n} \cdot \mathbf{x}}{L}} + e^{-i\frac{\pi \mathbf{n} \cdot \mathbf{x}}{L}}) \\ C(0) &= \frac{1}{L} \int_0^L I(x) dx \\ C(n) &= \frac{2}{L} \int_0^L I(x) \cos\left(\frac{\pi \mathbf{n} \cdot \mathbf{x}}{L}\right) dx \end{aligned}$$

于是

$$\begin{aligned} S_+(\mathbf{x}) &= \int_{\mathbf{a}} K(\mathbf{a}) \cos(\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{k}}) \sum_n C(\mathbf{n}) \cos\left(\frac{\pi \mathbf{n} \cdot \mathbf{x}}{L}\right) d\mathbf{a} \\ &= \sum_{\mathbf{n}} \int_{\mathbf{a}} K(\mathbf{a}) C(\mathbf{n}) \cos\left(\mathbf{a} \cdot \frac{\mathbf{n}\pi}{L}\right) \cos\left(\frac{\pi \mathbf{n} \cdot \mathbf{x}}{L}\right) d\mathbf{a} \\ S_-(\mathbf{x}) &= - \int_{\mathbf{a}} d\mathbf{a} K(\mathbf{a}) \sin(\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{k}}) \sum_n C(\mathbf{n}) \cos\left(\frac{\pi \mathbf{n} \cdot \mathbf{x}}{L}\right) \\ &= -i \sum_{\mathbf{n}} \int_{\mathbf{a}} K(\mathbf{a}) C(\mathbf{n}) \sin\left(\mathbf{a} \cdot \frac{\mathbf{n}\pi}{L}\right) \sin\left(\frac{\pi \mathbf{n} \cdot \mathbf{x}}{L}\right) d\mathbf{a} \end{aligned}$$

S_+, S_- 两个态之间的关系。相当于旋转

$$\begin{pmatrix} s_+ \\ s_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\pi n a}{L}\right) & 0 \\ 0 & -i \sin\left(\frac{\pi n a}{L}\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\pi n x}{L}\right) \\ \sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right) \end{pmatrix}$$

$$S(x) = \begin{pmatrix} S_+ \\ S_- \end{pmatrix} = \sum_{\mathbf{n}} \int_{\mathbf{a}} d\mathbf{a} K(\mathbf{a}) C(\mathbf{n}) \begin{pmatrix} s_+ \\ s_- \end{pmatrix}$$

$$I(x) = \sum_{\mathbf{n}} C(\mathbf{n}) \begin{pmatrix} \cos(\frac{\pi n x}{L}) \\ \sin(\frac{\pi n x}{L}) \end{pmatrix}$$

卷积具有不变性，设其变换为算符 \hat{R} ,那么

$$|S\rangle \rightarrow |S_R\rangle = R|S\rangle$$

相应的

$$H(\hat{k}_x) \rightarrow H_R(\hat{k}_x) = R H(\hat{k}_x) R^{-1}$$

即在波矢表象中（波矢空间中），卷积

$$O(x) = H(\hat{k}_x) I(x) = H(\hat{k}_x) \left(\sum_k C_k \psi_k \right) = \sum_k \lambda_k C_k \psi_k$$

群SU(2),O3

$$\begin{aligned} I(x, y) &\rightarrow I'(x, y) = I(x + a_x, y + a_y) \quad , \quad I'(\mathbf{x}) = I(\mathbf{x} + \mathbf{a}) \\ K(x, y) &\rightarrow K'(x, y) = K(x + b_x, y + b_y) \quad , \quad K'(\mathbf{x}) = K(\mathbf{x} + \mathbf{b}) \\ S(\mathbf{x}) &\rightarrow S'(\mathbf{x}) = H(\hat{\mathbf{k}}) I(\mathbf{x} + \mathbf{a}) = H(\hat{\mathbf{k}}) D(\mathbf{a}) I(\mathbf{x}) \\ &= S(\mathbf{x} + \mathbf{a}) = D(\mathbf{a}) S(\mathbf{x}) = D(\mathbf{a}) H(\hat{\mathbf{k}}) I(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

$$[D(\mathbf{a}), H(\hat{\mathbf{k}})] = 0$$

平移算符是么正的，所以卷积算符也是么正的。

平移的守恒量是力学量波矢，波矢的本征态是

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}$$

对应的本征值是 \mathbf{k} . 在波矢表象下，输入

$$I(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}$$

其中

$$C_{\mathbf{k}} = \int I(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} d\mathbf{x}$$

于是卷积

$$\begin{aligned} S(\mathbf{x}) &= \int_{\mathbf{a}} K(\mathbf{a}) e^{-i\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{k}}} I(\mathbf{x}) d\mathbf{a} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \int_{\mathbf{a}} K(\mathbf{a}) C(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{a})} d\mathbf{a} \end{aligned}$$

$$\text{令 } \mathbf{a} = \mathbf{v}t$$

$$a_x = v \cos(\theta) t \quad a_y = v \sin(\theta) t$$

$$S(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}} \int_{\mathbf{a}} K(\mathbf{v}t) C(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{v}t)} t dt d\theta$$

这个物理意义是：波

0.6 角谱理论的测距

0.6.1 角谱理论

根据角谱理论, z 与 $z = 0$ 的光场 U 分布关系为

$$U(x, y, z) = \mathcal{F}^{-1}\{\mathcal{F}\{U(x, y, 0)\}e^{jKz}\}$$

$$\iint U(x, y, z)e^{-j(k_x \cdot x + k_y \cdot y)} dx dy = e^{jKz} \iint U(x, y, 0)e^{-j(k_x \cdot x + k_y \cdot y)} dx dy$$

其中 \mathcal{F} 是傅里叶变换符, λ 是波长

$$\mathcal{F} \equiv \iint_{-\infty}^{\infty} dx dy e^{-j(k_x x + k_y y)}$$

$$\mathcal{F}^{-1} \equiv \iint_{-\infty}^{\infty} dk_x dk_y e^{j(k_x x + k_y y)}$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$K = \sqrt{k^2 - (k_x^2 + k_y^2)} \quad \text{实数}$$

0.6.2 几何光学近似成像

物平面 U_0 在几何光学近似下的倒像是 (8) ,或

$$U_i(x_i, y_i) = \iint_{-\infty}^{\infty} h(x_i, y_i; x_0, y_0) U_0(x_0, y_0) dx_0 dy_0$$

$$h(x_i, y_i; x_0, y_0) = \delta(x_i + Mx_0, y_i + My_0)$$

其中 M 是放大倍数. 令 $x' = -Mx_0, y' = -My_0$

$$U_i(x_i, y_i) = \frac{1}{M} \iint_{-\infty}^{\infty} U_0\left(-\frac{x'}{M}, -\frac{y'}{M}\right) \delta(x_i - x', y_i - y') dx' dy'$$

$$= \frac{1}{M} \iint_{-\infty}^{\infty} U_0\left(-\frac{x_i}{M}, -\frac{y_i}{M}\right) \delta(x_i - x', y_i - y') dx' dy'$$

像和物共轭, 所以上式中 U_0 可以是像平面, 而 U 是物平面, 即根据照相, 求出物平面。然而, 物平面的距离是满足透镜定律的 (9) 的物距离, 不是真实物的距离, 所以需要使用角谱理论来实际测距, 由物平面得到实际物体波前重现。设双目波前

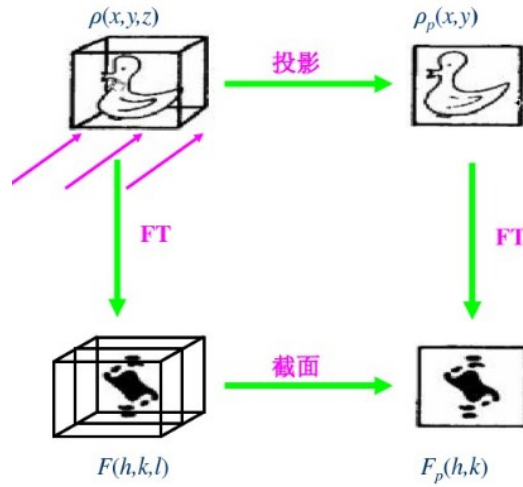
$$\mathbf{a}_l(x, y) = U_l(x, y)e^{jKz(x, y)} \equiv U_l(x, y)e^{j\phi_l(x, y)} \quad (28)$$

$$\mathbf{a}_r(x, y) = U_r(x, y)e^{jKz(x, y)} \equiv U_r(x, y)e^{j\phi_r(x, y)} \quad (29)$$

左右干涉, 则总的强度

$$I(x, y) = |\mathbf{a}_l(x, y)|^2 + |\mathbf{a}_r(x, y)|^2 + 2U_l(x, y)U_r(x, y)(\cos(\phi_l(x, y) - \phi_r(x, y)))$$

0.6.3 中心截面定理



傅立叶变换

$$F(k_x, k_y, k_z) = \iiint f(x, y, z) e^{-i(xk_x + yk_y + zk_z)} dx dy dz$$

$$F(k_x, k_y) = \iint f(x, y) e^{-i(xk_x + yk_y)} dx dy$$

中央截面定理

$$s_z(x, y) \equiv \int f(x, y, z) dz$$

$$S_z(k_x, k_y) \equiv \iint s_z(x, y) e^{-i(xk_x + yk_y)} dx dy$$

当 $k_z = 0$, 得到傅立叶空间中垂直于 z 轴的中央截面 $F(k_x, k_y, 0)$

$$\begin{aligned} F(k_x, k_y, 0) &= \iiint f(x, y, z) e^{-i(xk_x + yk_y + 0)} dx dy dz \\ &= \iint e^{-i(xk_x + yk_y)} dx dy \int f(x, y, z) dz \\ &= \iint s_z(x, y) e^{-i(xk_x + yk_y)} dx dy \\ &= S_z(k_x, k_y) \end{aligned}$$

物体投影结构的傅里叶变换与该物体三维傅里叶变换的一个中心截面等价

$$S_z(k_x, k_y) = F(k_x, k_y, 0)$$

中央截面定理的含义是一个函数沿某方向投影函数的傅立叶变换等于此函数的傅立叶变换通过原点且垂直于此投影方向的截面函数。因此电镜三维重构的理论基础是一个物体的三维投影像的傅立叶变换等于该物体三维傅立叶变换中与该投影方向垂直的, 通过原点的截面 (中央截面)。每一幅电子显微像是物体的二维投影像, 倾斜试样, 沿不同投影方向拍摄一系列电子显微像, 经傅立叶变换会得到一系列不同取向的截面, 当截面足够多时, 会得到傅立叶空间的三维信息, 再经傅立叶反变换便能得到物体的三维结构。这种方法可以在很广泛的范围内应用, 从无固定结构特征的细胞器和生物大分子复合物到大分子晶

体。即，如果收集足够多物体在各个方向的二维投影像，即可获得足够多傅里叶空间中的中心截面，将这些中心截面按其方向组合起来，即可获得物体三维傅里叶变换的近似值，将它作傅里叶逆变换，就得到物体的三维图像。

0.7 卷积与费曼路径积分

0.7.1 最小作用量原理

$$\begin{aligned}
 \text{作用量}S\text{的量纲} &= \text{能量} \cdot \text{时间} \\
 &= \text{力} \cdot \text{位移} \cdot \text{时间} \\
 &= \text{冲量} \cdot \text{位移} \\
 &= \text{质量} \cdot \text{加速度} \cdot \text{位移} \cdot \text{时间} \\
 &= \text{质量} \cdot \text{速度} \cdot \text{位移} \\
 &= \text{动量} \cdot \text{位移}
 \end{aligned}$$

[314]

几何光学的基本方程

选择光学的拉格朗日函数为

$$L(x, y; \dot{x}, \dot{y}, z) = n(x, y, z)(1 + \dot{x}^2 + \dot{y}^2)^{1/2} \quad (30)$$

n 为介质的折射率

那么最小作用量原理形式:

$$\delta \int_A^B L(x, y, \dot{x}, \dot{y}, z) dz = 0$$

可导出光学的拉格朗日方程及光线方程，求出光传播轨迹。

力学的基本定律

对于保守力场，从最小作用量原理:

$$\delta S = \delta \int L dt = \delta \int (T - V) dt \quad (31)$$

可导出拉格朗日方程.对于

$$L = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x)$$

的简单情况可导出牛顿定律。

相对论力学

选择拉格朗日函数

$$L = -mc^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} =$$

由最小作用量原理 $S = \int L dt$,可以导出。。。

流体力学的最小作用量原理

对于惯性参考系下的粘性流体，拉格朗日函数取： $L=...$

对于随地球以角速度旋转的粘性流体，拉格朗日函数取： $L=...$

就有最小作用量原理 $S = \int L dt = \min$

电磁学理论的最小作用量原理

整个体系的作用量S应该由三部分组成：

1. 自由粒子的作用量
2. 粒子与场作用的那部分作用量
3. 与粒子无关的场的作用量

不考虑场本身的作用量为

$$S_m = \int_1^2 (-mc^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \cdot \mathbf{v} - e\phi) dt$$

场自身的作用量

$$S_f = \frac{1}{8\pi} \iint (\mathbf{E}^2 - \mathbf{H}^2) dv dt = \frac{i}{16\pi c} \int F_{ik}^2 d\tau$$

总的作用量 $S = \sum S_m = S_f$

可以导出整个电磁学理论

由最小作用量原理建立热力学理论

从最小作用量原理建立量子力学

取拉格朗日密度

$$L = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \psi^* \cdot \nabla \psi - V(q) \psi^* \psi + \frac{i\hbar}{2} (\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t})$$

代入：

$$\delta \int L dx dy dz dt = 0$$

得含时的薛定谔方程

0.7.2 费曼路径积分

[543]在经典力学中，用坐标和动量来描述宏观粒子在某一时刻的状态.在时空坐标中，当粒子从时空点 $a(\mathbf{r}_1, t_1)$ ，到达时空点 $a(\mathbf{r}_1, t_1)$ ，时，a 与b 两点之间有许多通道，而宏观粒子只走使作用量S 取极小值的路径.

在量子力学中，费曼的观点是，粒子走各种路径的可能性都是存在的，对应a、b 两时空点之间的每条路径 $\mathbf{r}(t)$ 都有一概率波幅 $\psi(\mathbf{r}(t))$.对各路径均应等权地加以考虑.粒子从时空点a 出发到达时空点b 的概率波幅是连接a、b 两点之间所有路径的概率波幅之和 $\Sigma \psi(\mathbf{r}(t))$.概率波的相位与经典力学中作用量S 成正比，即

$$\psi(\mathbf{r}(t)) = e^{i \frac{S(\mathbf{r}(t))}{\hbar}} \quad (32)$$

0.8 平移不变的物理守恒量—波矢的测量

我们来看卷积是怎么检查边缘的例：检测图像边缘的核

0.8.1 边缘检测的理解

为简单见，采用矢量形式表示

$$\begin{aligned}O(\mathbf{x}) &= \int_{\xi} K(\xi) I(\mathbf{x} - \xi) d\xi \\&\approx \int_{\xi} K(\xi) (I(\mathbf{x}) - \xi \cdot \nabla I(\mathbf{x})) d\xi \quad (\text{泰勒级数在 } \mathbf{x} \text{ 点展开}) \\&= \left(\int_{\xi} K(\xi) d\xi \right) I(\mathbf{x}) - \left(\int_{\xi} K(\xi) \xi d\xi \right) \cdot \nabla I(\mathbf{x})\end{aligned}$$

设核函数是奇函数，那么第一项为0

$$O(\mathbf{x}) = - \left(\int_{\xi} \xi K(\xi) d\xi \right) \cdot \nabla I(\mathbf{x}) \propto \nabla I(\mathbf{x})$$

卷积的输出梯度大的信号强，即是输入图像的边缘信息

0.8.2 线性不变系统作为滤波器

系统级连（滤波器相连）

0.9 抽样定理

0.9.1 空间反射不变性与宇称守恒

设I空间反射,即:

$$I(x, y) \rightarrow I'(x, y) = I(-x, -y) \quad , \quad I'(\mathbf{x}) = I(-\mathbf{x})$$

那么

$$\begin{aligned}S(x, y) &= \iint_{-\infty}^{\infty} K(\xi, \eta) I(x - \xi, y - \eta) d\xi d\eta \\S'(x, y) &= \iint_{-\infty}^{\infty} K(\xi, \eta) I'(x - \xi, y - \eta) d\xi d\eta \\&= \iint_{-\infty}^{\infty} K(\xi, \eta) I(-x - \xi, -y - \eta) d\xi d\eta \\&= S(-x, -y) \\S'(\mathbf{x}) &= S(-\mathbf{x})\end{aligned}$$

设I空间反射a即:

$$\begin{aligned}I(x, y) &\rightarrow I'(x, y) = I(x + a_x, y + a_y) \quad , \quad I'(\mathbf{x}) = I(\mathbf{x} + \mathbf{a}) \\K(x, y) &\rightarrow K'(x, y) = K(x + b_x, y + b_y) \quad , \quad K'(\mathbf{x}) = K(\mathbf{x} + \mathbf{b})\end{aligned}$$

那么

$$\begin{aligned}
S(x, y) &= \iint_{-\infty}^{\infty} K(\xi, \eta) I(x - \xi, y - \eta) d\xi d\eta \\
S'(x, y) &= \iint_{-\infty}^{\infty} K'(\xi, \eta) I'(x - \xi, y - \eta) d\xi d\eta \\
&= \iint_{-\infty}^{\infty} K(\xi + b_x, \eta + b_y) I(x + a_x - \xi, y + a_y - \eta) d\xi d\eta \\
&= \iint_{-\infty}^{\infty} K(\xi', \eta') I(x + a_y - \xi' + b_x, y + a_y - \eta' + b_y) d\xi' d\eta' \\
&= \iint_{-\infty}^{\infty} K(\xi', \eta') I((x + a_y + b_x) - \xi', (y + a_y + b_y) - \eta') d\xi' d\eta' \\
&= S(x + a_x + b_x, y + a_y + b_y) \\
S'(\mathbf{x}) &= S(\mathbf{x} + \mathbf{a} + \mathbf{b})
\end{aligned}$$

0.10 卷积与规范场

[549] Quantum Field Theory (QFT) and Gauge theory 似乎在其他领域, 甚至生物学上也有效。利用QFT和Gauge理论数学框架的想法, 文献[550]已经用于模拟生物大脑和神经系统, 也用于设计和开发未来的DNN和AI系统。共同的是, 在自由能源原则方面, 有一些表述, 要强调的是, 正如大脑或神经系统的gauge理论模型一样, 最小自由能量的流形路径是弯曲的;因此, DNN 的设计应考虑在曲线流形上移动几何对象(如特征矢量和内核)的问题。如卷积神经网络(CN)中, 显示增强的卷积内核定义(例如, 使用约束和/或傅立叶变换)以考虑流形的重要性。文献[551]阐述了在具有d+1维的平面时空中的欧几里得QFT的对应关系和d+1维平面空间的统计力学解释。有趣的是, 文献[552]在机器学习和统计中已经利用了它来解决许多推理和学习问题。如果借助QFT/Gauge 理论, 可以将变分自由能量的最小化转换为曲线歧管上的路径积分问题, 那么在弯曲歧管上开发DNN 的通用设计模型是可能的? 特定应用的DNNs 设计通常利用直觉和经验方法。根据需要解决的具体问题, 提出了几种设计原则并采纳了。对称变换的等价变化是一种较为一般的设计原则, 它带来了DNN 解决方案的开发, 显示了卓越的性能水平。文献[553]显示了等差原则如何处理弯曲流形。我们已经提到, 在用Gauge理论方法建模生物神经系统时, 可以根据在弯曲流形上积分的路径来拟定最小化变异自由能量的问题。让我们更详细地分析这一方面: 在流形上设计卷积时, 作为特征矢量和核的几何对象应跨流形变换。这有一个主要后果: 流形曲率使几何对象路径相关, 迫使考虑不同的局域帧。局部帧之间的任何更改都是局域gauge变换, 由输入特征图和输出特征图之间过滤器实现。这是一个对称性破缺, 而我们正在寻找一个保持对称性的一般原则, 等差差作为设计标准。为了保持输出特征图的等差(在局部变换下), 必须在卷积内核中放置某些约束, 模拟Gauge场的效果, 见文献[554]。结论是, 我们需要升级卷积内核, 用能够考虑流形曲率变换的术语。

0.10.1 规范场

时空连续变换下的不变性

[545]

时空平移 指时空坐标的平移变换，定义为

$$x_\mu \rightarrow x'_\mu = x_\mu + a_\mu \quad (33)$$

$$\delta x_\mu \equiv x'_\mu - x_\mu \quad (34)$$

a_μ 是与 x_μ 无关的常数， $\mu = 0, 1, 2, 3$ 在这种变换下，场量 $\phi_\sigma(x)$ 也要发生相应变换， $\phi'_\sigma(x')$ 它由两重变换而成：作为 x 的函数，它随 x 变为 $\phi_\sigma(x')$ ，由于场本身的性质，它变换为 $\phi'_\sigma(x)$ ，(σ 是场的分量指标)，定义场的本征变换为

$$\delta\phi_\sigma(x) \equiv \phi'_\sigma(x) - \phi_\sigma(x) \quad (35)$$

$$\phi'_\sigma(x) = \phi_\sigma(x - a) = \phi_\sigma(x) - a_\mu \partial_\mu \phi_\sigma(x) \quad (a_\mu \text{ 是小量}) \quad (36)$$

$$\delta\phi_\sigma(x) = -a_\mu \partial_\mu \phi_\sigma(x) \quad (37)$$

平移不变性 时空是均匀的，用来描述物理规律的拉格朗日密度 L 在上述平移变换下是不变的，且在其他变换下也是不变的。 L 泛函形式一样， L 变换前后密度相同，当然对不同的变换 $\phi'_\sigma(x')$ 意义不同。平移不变性下：

$$L(\phi'_\sigma(x), \partial_\mu \phi'_\sigma(x)) - L(\phi_\sigma(x - a), \partial_\mu \phi_\sigma(x - a)) = 0 \quad (38)$$

可导出能量守恒，动量守恒。

诺特 Noether 定理早就指出了这种关系

规范理论的基本原理

[544] 诺特定理的实质在于，自然界中的每一个对称性，相应的都有一个守恒定律，而对于每一个守恒定律，则有一个对称性。在物理理论的拉格朗日表述形式中，该对称性就是拉格朗日函数的对称性，而且因为拉格朗日函数形式决定了要描述的体系的运动方程，所以这就意味着它是这些运动方程，也就是该物理理论本身的对称性。

诺特定理通常是以变分的形式表述的，变分法处理的是泛函的极值问题，所谓泛函是函数概念的推广。粗略地讲，函数和泛函的差别就在于自变量的不同，前者的自变量是一个个的数，而后者以一簇簇的函数作为自变量。物理上，描述自然规律的泛函通常称为作用量

作为诺特定理的一个结果，经典物理定律采用拉格朗日形式，而量子理论采用其特有的哈密顿形式。诺特定理把对称性跟守恒量联系起来了，非常有用。是指对于力学体系的每一个连续的对称变换，都有一个守恒量与之对应。对称变换是力学体系在某种变换下不变。

[544] 规范理论的基本原理：局域对称性，即自然界中的每一连续对称性都是局域对称性。我们通常考虑的变换都是整体的，在这种变换下的不变性与时空无关，称为“整体对称性”，另一方面，局域对称性指的是讨论中的物体或物理定律在一个“局部变换”下不变，不变性出自于下列事实，复场或波函数当

$$\psi(x) \rightarrow \psi'(x) = e^{-i\theta} \psi(x)$$

这称 $U(1)$ 整体变换，任何物理上的可观察量都涉及 ψ^*, ψ 的因子，因此相因子就抵消了。只要把 θ 取成是与 x 无关的一个常数，那末 ψ 的导数的抵消也同样起作用，它表达了一个对称性。

费曼说, 量子力学的奥妙在于, 用 ψ 刻画动力学规律, 而它不可观测, 可观测测量却是 ψ^2

变换后与变换前多出的 $e^{-i\theta}$ 若 θ 取为时空坐标 (x, y, z) 的任意函数时, 这种对称性就成为局域对称性, 如同圆柱体在其轴线的转动 θ 下不变 (整体对称性), 然而圆柱体切成N个薄片, 每个薄片转动 $\theta = \theta(x, y, z)$ 不同的角度下不变 (局域对称性), 具有更加丰富的对称性。

正如我们已看到的那样, 首先有诺特定理, 它表明对于每一守恒定律存在着一个与之相关的对称性, 反之亦然. 其次是上面提到过的下列事实: 局域对称性的要求导致一个决定得很好的具有特别性质的规范场, 第三就是我们发现用这样的方式决定的规范场必然包括了该规范场与相应的那个守恒量之间的相互作用. 因此我们就有了下列这个令人惊讶的事实: 对于每一个真实的守恒定律, 就有一个完整的规范理论(给定的守恒量是该规范场的源). 唯一的限制是该守恒量应与一个连续对称性相关。

现在引入局域对称性的思想. 在时空中的每一个不同的点作一个不同的变换, 这正好相应于允许 θ 为一个任意的函数 $\theta(x)$:

$$\psi(x) \rightarrow \psi'(x) = e^{-i\theta(x)}\psi(x) \quad (39)$$

$$\delta\psi(x) = \psi'(x) - \psi(x) = -i\theta(x)\psi(x) \quad (\theta \text{小量}) \quad (40)$$

$$\psi'(x) = (1 - i\theta(x))\psi(x) \quad (41)$$

这称U(1)局域变换或U(1)规范变换, 在这种局域变换下, 像 $\psi^*\psi$ 这一类的表达式的不变性是容易看出的, 但是对于涉及到包含 ψ 的导数的一些表达式来说, 不变性就失去了, 这是因为此时也会出现 θ 的导数. 于是

$$x_0 \equiv ct, \quad x_1 \equiv x, \quad x_2 \equiv y, \quad x_3 \equiv z \quad (42)$$

$$\partial_\mu \equiv \frac{\partial}{\partial x_\mu} \quad (43)$$

$$\delta[\partial_\mu\psi(x)] = \partial_\mu[\delta\psi(x)] = \partial_\mu[-i\theta(x)\psi(x)] \quad (44)$$

$$= -i\theta(x)\delta_\mu\psi(x) - i(\delta_\mu\theta(x))\psi(x) \quad (45)$$

物理规律的协变性指每一项都按同一方式变换. 45式的第一项具有标准形式, 而第二项涉及到 $\theta(x)$ 的导数, 为了取得局域对称性, 必须用某种方式除去. 为了使该对称性是局域的, 这就迫使我们引入一个规范场。

为此, 我们必须用"协变"导数 $D_\mu\psi$ 来代替通常的导数 $\partial_\mu\psi$, 并要求它的变换法则为下列标准形式

$$\delta[D_\mu\psi(x)] = -i\theta(x)D_\mu\psi(x) \quad (46)$$

$$D_\mu\psi(x) \rightarrow e^{i\theta(x)}D_\mu\psi(x) \quad (47)$$

这将使 $\psi^*D_\mu\psi(x)$ 这样的表达式在局域变换下不变. 我们如何来完成这一点呢? 我们可以简单地引入一个场 A_μ

$$D_\mu \equiv \partial_\mu + iA_\mu \quad (48)$$

而 A_μ 的变换法则满足:

$$\delta[D_\mu\psi(x)] = \delta[(\partial_\mu + iA_\mu)\psi(x)] = \delta[(\partial_\mu\psi(x)) + i\delta[A_\mu\psi(x)]] \quad (49)$$

$$= -i\theta(x)\delta_\mu\psi(x) - i(\delta_\mu\theta(x))\psi(x) + i(\delta A_\mu)\psi(x) + iA_\mu\delta\psi(x) \text{根据45} \quad (50)$$

$$= -i\theta(x)(\delta_\mu + iA_\mu)\psi(x) - i(\delta_\mu\theta(x))\psi(x) + i(\delta A_\mu)\psi(x) \text{根据40} \quad (51)$$

$$-i(\delta_\mu\theta(x))\psi(x) + i(\delta A_\mu)\psi(x) = 0 \quad (52)$$

$$\delta A_\mu(x) = \delta_\mu\theta(x) \quad (53)$$

$$A_\mu(x) \rightarrow A_\mu(x) + \delta_\mu\theta(x) \quad (54)$$

53式即是熟知的电磁势的规范变换, 这可以用更为熟悉的符号来写.

$$A_0 \equiv \phi \text{标势} \quad (55)$$

$$A_1 \equiv -A_x, \quad A_2 \equiv -A_y, \quad A_3 \equiv -A_z \quad (56)$$

$$\delta\phi = \dot{\theta} = \frac{\partial\theta}{\partial t} \quad (57)$$

$$\delta\mathbf{A} = -\nabla\theta \quad (58)$$

48称协变导数,对 ψ 求导的变换具有协变性:

$$\begin{aligned} (\partial_\mu + iA_\mu)\psi(x) &\rightarrow (\partial_\mu + iA_\mu + i\delta_\mu\theta(x))e^{-i\theta(x)}\psi(x) \\ &= e^{-i\theta(x)}(\partial_\mu + iA_\mu)\psi(x) \end{aligned}$$

至此我们已证明了什么结果? 我们从守恒定律(如电荷守恒定律) 以及与之相关的对称性出发, 随后(好像我们从未听到电磁场那样) 我们证明了为了使对称性是局域的, 这就迫使我们引入一个规范场, 而且证明了它只不过是我們所熟悉的电磁场. \mathbf{A} 是电磁场矢势。

当体系内的相互作用尚不清楚时, 我们可以从对称性和守恒定律去获得关于系统的根本特征的认识, 这正是规范场理论的基本思想.

如果我们想对我们的新规范场建立一个动力学理论,那末我们需要构造一个适当的拉格朗日密度 L (拉格朗日函数本身是 L 对空间的积分), 它是各个场及其偏导数的函数, 它既要是洛伦兹不变的, 又要是规范不变的.事实上, 拉格朗日密度必须显示出对它所产生的理论所要求有的所有对称性. 如果我们的规范场恰好与一个带电粒子场 ψ 相互作用, 那末我们就希望得到两个场方程, 一个是 ψ 的, 而另一个是 A_μ 的. 现在假定已经知道了在没有规范场下的 ψ 的拉格朗日密度, 其中当然包含了 ψ 的导数, 而为了求得规范不变性我们发现必须用规范协变导数 D_μ 来代替通常的偏导数,见48式. 于是, 现在的 L 就自动包含了一项与 A_μ , 和 ψ 有关的相互作用, 它恰恰表明了带电粒子是如何在给定的规范场 A_μ 中运动的.

lei:图像识别具有局域对称性, 由此出发, 为了使该对称性是局域的, 有两个场方程, 一个是 ψ 的, 而另一个是 A_μ 的, A_μ 就是电磁波. 从规范场理论去理解人类图像识别的机制。

lei:神经网络是与一个连续对称性相关。

电磁场协变性

物理规律的协变性指每一项都按同一方式变换

电磁场规范变换的协变性

令场强张量:

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu \quad (59)$$

因为 A_μ 在规范变换下的变化就是 θ 的时空梯度,所以作如下规范变换

$$A_\mu(x) \rightarrow A_\mu(x) + \partial_\mu \theta(x) \quad (60)$$

场强 $F_{\mu\nu}$ 不变.

$$\begin{aligned} \delta F_{\mu\nu} &= \partial_\mu \delta A_\nu - \partial_\nu \delta A_\mu \\ &= \partial_\mu \delta_\nu \theta(x) - \partial_\nu \delta_\mu \theta(x) \quad \text{根据53} \\ &= 0 \end{aligned}$$

$F_{\mu\nu}$ 就是电磁场场强。

lei:以下公式还没有统一校正

[546]电磁场 \mathbf{E}, \mathbf{B} 可以看成四维时空的四维张量,即爱因斯坦及闵可夫斯基(Minkowski)关系:

$$F_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & E_1 & E_2 & E_3 \\ -E_1 & 0 & -B_3 & B_2 \\ -E_2 & B_3 & 0 & -B_1 \\ -E_3 & -B_2 & B_1 & 0 \end{pmatrix} \quad (61)$$

麦克斯韦方程表达为:

$$\partial_\mu F_{\mu\nu} = j_\nu \quad (62)$$

其中 $j_\mu = (\mathbf{j}, \rho)$

[546], [547] 由于电磁场 $F_{\mu\nu}$ 才是可测量项,所以60是电磁场的对称性,叫规范变换。48是协变导数。因为 $|\psi|$ 才是可观察的,所以39是 ψ 场的对称性。运动方程对于60式和39式协变,即 $\psi(x), A_\mu$ 和 $e^{-i\theta(x)}\psi(x), A_\mu(x) + \partial_\mu \theta(x)$ 描述的是同一物理情况,即 $\psi(x), A_\mu$ 是一组解,那么 $e^{-i\theta(x)}\psi(x), A_\mu(x) + \partial_\mu \theta(x)$ 也是一组解。

换言之,电荷空间坐标的场 $\psi(x)$ 的相位 $\theta(x)$ 的局域变化,等效于出现一个附加的电磁场,与爱因斯坦引力理论类似,在那里,坐标系的变化导致出现附件的引力场。在这一原理上建立理论,用协变导数来构造运动方程是唯一可行的。

将这一原理推广到更加复杂的电荷空间(也称内禀空间),就产生了杨-米尔斯理论。

规范变换的协变性,运动方程中的每一项都相同规律变换

$F_{\mu\nu}$ 就是电磁场场强,具有测量的物理意义,但在经典电动力学中,矢势 \mathbf{A} 不具有真实测量意义,因为 $A_\mu(x)$ 和 $A'_\mu(x) = A_\mu(x) + \partial_\mu \theta$ 对应同一个电磁场,具有任意性。(但在量子力学中,矢势有真实的意义)。选一种规范约束条件使其唯一性,比如使用洛伦兹规范条件:

$$\partial_\mu A_\mu = 0 \quad (63)$$

矢势方程

$$\partial_\mu \partial_\mu A_\nu = -j_\nu \quad (64)$$

规范变换不变, $\psi^* \psi$ 几率密度不变, 代表了”荷”守恒, 从这里也看到规范不变性代表了电荷守恒:

$$\partial_\mu j_\mu = 0 \quad (65)$$

电磁场相对论时空变换的协变性

[396]在坐标变换下, 势A按四维矢量变换, 电磁场F按四维张量变换, 物理规律的协变性: 每一项都按同一方式变换

$$x'_\mu = a_{\mu\nu} x_\nu, \quad x'_\mu x'_\mu = x_\mu x_\mu \quad (\text{洛伦兹变换}) \quad (66)$$

$$\partial'_\mu = a_{\mu\nu} \partial_\nu \quad (67)$$

$$A'_\mu = a_{\mu\nu} A_\nu \quad (\text{与坐标有相同的变换关系}) \quad (68)$$

$$F'_{\mu\nu} = a_{\mu\lambda} a_{\nu\tau} F_{\lambda\tau} \quad (69)$$

厄米算符生成元

[544]量子理论的每一个厄密线性算子 \hat{A} 起着一个双重的作用: 它当然表示该理论中的一个动力学变量, 不过它也起着一类变换的生成元的作用, 即生成一个与之相关的对称变换, 且它是么正变换:

$$\psi \rightarrow \psi' = e^{-ig\hat{A}}\psi$$

其中 g 是任意常数。因此若 \hat{A} 是动量的 x 分量 p_x , 可以证明平移算符 \hat{D}_x 为

$$\hat{D}_x(g) = e^{-g \frac{d}{dx}} \equiv e^{-ig\hat{k}_x}$$

$$\psi'(x) = \hat{D}_x(g)\psi(x) = \psi(x-g)$$

其中

$$\hat{k}_x \equiv -i \frac{\partial}{\partial x}$$

称为波矢算符, 或动量算符 $p_x = \hbar k_x$

那么 ψ' 就表示与 ψ 在 x 方向差一个平移 g 的态。生成元 $e^{-ig\hat{k}_x}$ 对应一个平移对称性, 并与物理量 \hat{k}_x 相联系。

每一个连续变换族都能用这种方法生成, 因而唯一地与该理论中的一个物理变量相联系。若 \hat{A} 和 \hat{B} 这两个算符可对易, 那末我们就能就与这两个算符相关的变量和变换, 作出下列4种不同的陈述:

1. 由 \hat{A} 和 \hat{B} 生成的变换相互对易
2. 动力学变量A 在由 \hat{B} 生成的变换下不变, 即如果

$$\psi' = e^{-i\lambda\hat{B}}\psi$$

那么, A的期望值不会在上述变换下改变

$$\psi'^* \hat{A} \psi' = \psi^* \hat{A} \psi$$

3. 动力学变量B 在由 \hat{A} 生成的变换下不变,同上

4. 动力学变量A 和B 可以以任意精确度同时加以测量。

现在我们有兴趣的是例如说把 \hat{B} 取成为哈密顿算符 \hat{H} (这是与体系的总能量相关的算符)的那种情况. 由 \hat{H} 生成的变换是时间平移, 这就是H 出现在下列薛定谔方程中的原因:

$$i\hbar \frac{d\psi}{dt} = \hat{H}\psi$$

上式的积分形式为

$$\psi(t) = e^{-i\hat{H}t}\psi(0)$$

于是我们看到了为什么是能量算符决定了体系的动力学. 说动力学变量A 在由 \hat{H} 生成的变换下是不变的,等于说A 是一个运动常数,即它在任意态中的期待值在任意时间平移下不变, 另一方面, \hat{H} 在由 \hat{A} 生成的变换下不变这一说法, 等于说A 表示了动力学定律的一个对称性. 动力学变量A 是守恒的, 当且仅当该动力学定律在由 \hat{A} 生成的变换下是不变的.

杨振宁规范场论

现在39 规范变换的相因子由函数推广为矩阵或算符.因为算符的非对易性, 将与电磁场的情况很大的不同. $U(1)$ 群是一个阿贝尔群, $U(1)$ 规范场又称为阿贝尔规范场. 杨振宁把它推广到了一般的非阿贝尔群.

[544]在每一种情况中, 正是对称性的数学结构决定了规范场的结构以及相互作用的形式. 这些对称性群按照其结构有各自的名称, 因此我们说 $U(1)$ 是电磁理论的简单相对称性群. [544]我想用定性的方式来描述一下当我们对这些非交换的(“非阿贝尔的”)对称性群之一应用规范原理时,会产生些什么. 同位旋的情况是一个历史上的例子,而且这是能考虑到的最简单的情况, 虽然也应当强调一下对任意非阿贝尔对称性群都有同样的数学形式,而且只要作不大的修改.

使用的对称性群称为 $SU(3)$,它有8 个算符 \hat{T}_α .

有这些对称性群的共同特征是, 算符组合 \hat{T}_α 在对易关系下是封闭的,也即对易子恰好总是这些算符 \hat{T}_α 本身的一个线性组合. 因此我们有

$$[\hat{T}_\alpha, \hat{T}_\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{T}_\gamma \quad (70)$$

在同位旋情况中, $\epsilon_{\alpha\beta\gamma} = 0, \pm 1$, 而且正好是角动量型的对易关系式.

推广40式, 对波函数的对称性变换为

$$\psi' = (1 - ig\theta_\alpha T_\alpha)\psi \quad (71)$$

$$\delta\psi = -ig\theta_\alpha T_\alpha\psi \quad (72)$$

g 是任意常数, 现在有3 个任意的无穷小参数 θ_α 来描写该变换, θ, \mathbf{T} 分别是3分量矢量和矩阵.

与前面的一样, 加上局域对称性这一条件, 意味着我们允许 θ_α 是 x 的一个任意矢量值函数,且使得

$$\delta\psi(x) = -ig\theta_\alpha(x)T_\alpha\psi(x) \quad (73)$$

与40 式极为类似.我们再一次发现, 尽管不包含导数的那些项不会造成问题, 但是正如45 式所示, ψ 的导数有一个与 θ 的导数有关的附加项. 为了消除这

些项, 再次需用协变导数 D_μ 来代替通常导数 ∂_μ , 而用其变换法则 D_μ 是有一正比于 $\partial_\mu\theta(x)$ 的项的一个新的场来定义的.即协变导数的标准形式和导数对称变换为

$$D_\mu\psi \equiv (\partial_\mu + ig\mathbf{B}_\mu \cdot \mathbf{T})\psi \quad (74)$$

$$\delta(D_\mu\psi) = -ig\theta_\alpha T_\alpha(D_\mu\psi) \quad (75)$$

式中的**新场** $\mathbf{B}_\mu(x)$ 是关于洛伦兹变换的一个**矢量**. 因为矩阵 T_α 并不对易, 我们发现这一变换法则要比电磁势 A_μ 的变换法则53 复杂得多:

$$\delta\mathbf{B}_\mu = \partial_\mu\boldsymbol{\theta} - g\boldsymbol{\theta} \times \mathbf{B}_\mu \quad (76)$$

式76右边的第二项在电磁场情况中是没有的,它以这种方式与非阿贝尔规范场的所有有趣而又奇特的特性联系在一起. 这是一个矢量在转动下发生的变化标准表达式, 它反映了新场的矢量特性. 而且它也反映了该规范场 \mathbf{B} 的量子必须载荷同位旋这一事实. 这与不载荷电荷的光子场(电磁场的规范场 \mathbf{A})的情况不同.新的量子彼此以非线性的方式相互作用, 正如, 如果光子带电荷的话, 它们彼此也会非线性地相互作用那样.

更仔细地考虑一下这种类似性可能会有帮助的.如果光子是带电的, 那末它们彼此会通过电磁场相互作用, 用量子场论的语言来说, 即通过交换虚光子来相互作用.尽管没有其他带电粒子存在, 光子也不会是自由的. 想象这种情况的另一种途径是借助于经典电磁场方程: 哪里电磁场的强度不为零, 哪里就会有非零的电荷密度和电流密度, 而且场本身的动力学行为将以一种复杂的非线性方式受到这些电荷密度和电流密度的影响. 电磁场的许多通常的性质, 尤其是波动解的线性叠加便将丧失殆尽.

当然光子并不荷电, 但是这里的规范场 \mathbf{B} 量子却荷电了, 这指的是它们载荷同位旋, 而且类似于电荷的情况, 同位旋是 \mathbf{B} 场本身的**源**. 虽然最后一段中的叙述也许不适用于电磁场的情况了但是它几乎能确切地适用于 \mathbf{B} 场.除了这种自相互作用之外, \mathbf{B} 场的每一个同位旋分量的场方程都与电磁场的场方程完全相同.

现在让我们仍遵循电磁情况的逻辑思路来完成对 \mathbf{B} 场的描述.先请回忆一下分量 \mathbf{B}_μ 是类似于电磁势 $A_\mu(x)$ 的, 因此需要构造电场和磁场的类比.协变形式的场强 $\mathbf{f}_{\mu\nu}$ 同 \mathbf{B}_μ 本身一样, 具有同位旋矢量的特性

$$\mathbf{f}_{\mu\nu} = \partial_\nu\mathbf{B}_\mu - \partial_\mu\mathbf{B}_\nu - g\mathbf{B}_\mu \times \mathbf{B}_\nu \quad (77)$$

它一共有9 个分量.

如同电磁场那样, 最后的几步是要构造拉格朗日密度以及 \mathbf{B} 场的场方程. 因为前者必须是洛伦兹不变和规范不变的,由此导出的场方程像62式一样具有下列形式:

$$D_\nu\mathbf{f}^{\mu\nu} = \mathbf{j}^\mu \quad (78)$$

这里的 \mathbf{j}^μ 是与存在的其他粒子有关的同位旋流密度:

$$\mathbf{j}^\mu = g\psi^*\gamma^\mu\mathbf{T}\psi \quad (79)$$

因为 \mathbf{f} 本身是一个同位旋向量,且 **场** \mathbf{f} 的**协变导数** D_ν 不再等价于通常的导数 ∂_ν , 其运算法则是

$$D_\nu\mathbf{f}^{\mu\nu} = \partial_\nu\mathbf{f}^{\mu\nu} + g\mathbf{B}_\nu \times \mathbf{f}^{\mu\nu} \quad (80)$$

上述化为

$$\partial_\nu \mathbf{f}^{\mu\nu} = \mathbf{j}^\mu - g\mathbf{B}_\nu \times \mathbf{f}^{\mu\nu} \quad (81)$$

上式左边的4维散度是自动为零的,所以我们看到的右边表示了一个由 \mathbf{B} 场本身贡献的完整守恒同位旋流.

指出下面这一点是重要的: 我们已经发展起来的这个结构在数学家看来是有深刻的几何特征的, 这个几何特征出现在纤维丛这一数学理论中, 它呈现的空间是某种乘积空间, 在其中在时空的每一点 x 上都粘着一个(元素为 $\psi(x)$ 的)局部向量空间. 每一条细线都对应于在点 x 处的一个局域向量空间, 而把它们集合在一起所形成的乘积空间就是该相伴纤维丛. 从一点 x 到邻近点的移动, 要求我们在这两个相邻的局部向量空间之间定义一个“联络”, 这就给出了我们在48式和74式中引入过的协变导数, 协变导数不能对易这一事实表明了在这一扩张了的时空中有某种“曲率”, 而正是量 $\mathbf{f}^{\mu\nu}$ 给出了对这一曲率的精确表示. 看来非常清楚的是, 这一几何结构奇妙而又出乎意料地维护了爱因斯坦的把自然界中的所有有力用统一的几何图像来描述的观点.

借助于同位旋作为守恒量(它是规范场 \mathbf{B} 的源)的这个例子, 我们完成了对非阿贝尔规范场推理过程的概述. 在该理论创建时, 同位旋是起到这一作用的仅有的合理候选者, 当时的普遍看法是, 尽管这一思想是优美的, 但该理论的初建时, 人们就看到了规范量子的质量及重整化是两个主要的问题. 数十年过去了, 一系列复杂的发展出现了, 人们才搞清楚如何来克服这些困难, 而非阿贝尔规范场也因之被认为是对自然界的基本相互作用的一种可接受的描述了.

量子场论讲义V34.00.00

前面我们已经给出线性空间不变性的系统输入与输出关系的数学描述就是卷积运算, 即

$$\begin{aligned} O(t) &\equiv (I * K)(t) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} I(\tau) K(t - \tau) d\tau \\ &= (K * I)(t) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} K(\tau) I(t - \tau) d\tau \quad \text{卷积可交换} \end{aligned}$$

0.10.2 格点规范理论

格点规范理论 (lattice gauge theory) 是处理量子场论的非微扰方法之一. 它是K.威耳孙在1974年建立的, 其本质是用有限的格点(点阵)的量替代连续时空中的场.

0.11 待看文献

<https://baike.baidu.com/item/规范场/4879575?fr=aladdin>
<https://baike.baidu.com/item/格点规范理论/16507594?fr=aladdin>
规范场_R.米尔斯
力学中美妙数学定理之诺特定理
许良-最小作用量
在工科物理中引入费曼路径积分理论

应用费曼路径积分方法研究处理综合的短程势系统
从经典描述提取量子信息费曼路径积分简介
用薛定谔方程和路径积分方法研究中子双缝衍射
物质波多缝干涉的定量分析
简明量子力学
基于量子双缝干涉实验的神经网络模型
量子力学与路径积分-[美]费曼-科学出版社-1986/量子力学与路径积分
《量子光学》郭光灿版

关于特征值问题的规范变换
规范变换生成元的构成
Towards a Quantum Field Theory for Optical Artificial Intelligence
Group Equivariant Convolutional Networks
Why equivariance is better than premature invariance
Observation of replica symmetry breaking in disordered nonlinear wave propagation
入射粒子_规范场和几何位相_邱荣
长时相干效应与分形布朗运动_王克钢
自由电磁场理论的量子规范变换和生成元判据_孙为民
规范势分解与拓扑流理论及其在拓扑绝缘体研究中的应用_朱温
规范场论中的拓扑相位_马凯
关于拓扑物理的量子模拟研究_罗希望

%原始
understanding_l4_based_dictionary_learning_interpretation_stability_and_rob\\
geometric_analysis_of_nonconvex_optimization_landscapes_for_overcomplete_le.pdf\\

Hybrid Quantum-Classical Neural Network for Generating Quantum States\\

0.12 卷积与散射

卷积神经网络解释卷积核为过滤器，但是过滤什么？保留什么？显然卷积核的选择是最重要的，卷积块主要负责网络捕获的大部分抽象，这个组件是最不理解的处理块，因为它需要最重的学习。

显然不同的问题的特征不同，选择的核函数不同。傅里叶变换是不变系统的核函数，所以卷积神经网络与傅里叶变换最相关。但是神经网络作为一个物理系统，所以如同透镜，这种变换的实现应该是一个物理过程，且必然会有它的物理约束，比如傅里叶变换的频谱是有限个数的。

下面我们从物理上来解释。

我们将卷积计算建立在量子物理的散射模型上。【69P536】由散射理论，系统哈密顿量不含时间，入射波射向靶（神经元），位置 \mathbf{r}' 处的波函数 ψ 为：

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'} - \int G(\mathbf{r}' - \mathbf{r})U(\mathbf{r})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})d\mathbf{r} \quad (82)$$

这是积分方程，积分是在整个空间进行，第一项是输入波，第二项是散射波。第二项的物理意义很清楚， U 为相互作用势函数，在 \mathbf{r} 点附近 $d\mathbf{r}$ 范围发生势散射，形成强度为 $U(\mathbf{r})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ 的散射点源，这个点源按出射Green函数传播到观测屏 \mathbf{r}' 点，

在一级近似下，入射波矢为 \mathbf{k} ，出射波为

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'} - \int G(\mathbf{r}' - \mathbf{r})U(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}d\mathbf{r}$$

从波矢 \mathbf{k} 态跃迁到 \mathbf{k}' 态。Green函数为：

$$G(\mathbf{r}', \mathbf{r}) = \frac{e^{ik'|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|}}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|} \quad (83)$$

其中

$$\mathbf{k}' = \frac{k\mathbf{r}'}{|\mathbf{r}'|}$$

为出射波波矢

这些点的散射叠加成为散射概率振幅 ψ_{sc} 。

$$\psi_{sc}(\mathbf{r}') = \int G(\mathbf{r}' - \mathbf{r})U(\mathbf{r})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})d\mathbf{r}$$

设系统变换是数学算符 Γ ，此算符作用在输入函数 $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ 上产生与之对应的输出函数 $\psi_{sc}(\mathbf{r}')$

$$\begin{aligned} \psi_{sc}(\mathbf{r}') &= \Gamma\{\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\Gamma\{\delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r})\}d\mathbf{r} \end{aligned}$$

定义脉冲响应函数

$$H(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \equiv \Gamma\{\delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r})\} = G(\mathbf{r}' - \mathbf{r})U(\mathbf{r}) \quad (84)$$

变换坐标，令

$$\mathbf{r}' - \mathbf{r} = \mathbf{R}$$

如果势场 U 具有周期性特征

$$U(\mathbf{r}_l - \mathbf{R}) = U(-\mathbf{R}) \quad (85)$$

$$\mathbf{r}_l = l_1\mathbf{a}_1 + l_2\mathbf{a}_2 + l_3\mathbf{a}_3 \quad l_1, l_2, l_3 \text{ 整数} \quad (86)$$

$\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 是原胞基矢。

且观测点位于格矢上 $\mathbf{r}' = \mathbf{r}_l$ ，那么核函数(脉冲响应函数)

$$H(\mathbf{r}_l, \mathbf{r}) = G(\mathbf{R})U(\mathbf{r}_l - \mathbf{R}) = G(\mathbf{R})U(-\mathbf{R}) = H(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}) = H(\mathbf{R})$$

即这种变换 Γ 只与输入信号位置与输出信号位置之间的距离有关，与绝对位置无关，具有不变性。这时的散射波

$$\psi_{sc}(\mathbf{r}_l) = \int H(\mathbf{R})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_l - \mathbf{R})d\mathbf{R} \quad (87)$$

$$= \int \frac{e^{ik'|\mathbf{R}|}}{|\mathbf{R}|} U(-\mathbf{R})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_l - \mathbf{R})d\mathbf{R} \quad (88)$$

是核函数H与输入波的卷积

$$\psi_{sc}(\mathbf{r}_l) = (H * \psi_{\mathbf{k}})(\mathbf{r}_l) \quad (89)$$

因此具有不变性。其中核函数H

$$H(\mathbf{R}) = \frac{e^{ik'|\mathbf{R}|}}{|\mathbf{R}|} U(-\mathbf{R})$$

势场具有周期性是晶体,但实际生物神经系统可以认为是玻璃态而非晶体态,即短程有序长程无序,为了满足(82)需要的条件

$$U(\mathbf{R} \rightarrow \pm\infty) = 0$$

及其考虑到短程有序长程无序所以假设

$$U(\mathbf{R}) = \begin{cases} V(\mathbf{R}), & (R \leq N\Omega \text{ 有限个原胞内}) \\ 0, & (R > N\Omega \text{ 有限个原胞外}) \end{cases} \quad (90)$$

这里 $V(\mathbf{R})$ 是正点阵的周期函数,可按倒格子矢展开

$$V(\mathbf{R} + \mathbf{r}_l) = V(\mathbf{R}) \quad (91)$$

$$V(\mathbf{R}) = \sum_{\mathbf{K}_h} \mathcal{V}(\mathbf{K}_h) e^{i\mathbf{K}_h \cdot \mathbf{R}} \quad (92)$$

$$\mathbf{K}_h = h_1 \mathbf{b}_1 + h_2 \mathbf{b}_2 + h_3 \mathbf{b}_3 \quad (h_1, h_2, h_3 \text{ 整数}) \quad (93)$$

$$\mathbf{r}_l \cdot \mathbf{K}_h = 2\pi n \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (94)$$

\mathbf{r}_l 是正格子矢, \mathbf{K}_h 是倒格子矢

这样卷积核为

$$H(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = H(\mathbf{R}) = \begin{cases} \frac{e^{ik'|\mathbf{R}|}}{|\mathbf{R}|} V(-\mathbf{R}), & (R \leq N\Omega) \\ 0, & (R > N\Omega) \end{cases} \quad (95)$$

这样卷积核核是一个有限大小,相当于视觉系统的有限的视野。其中

$$\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r} = k' r'$$

\mathbf{k}', \mathbf{r}' 同方向。

卷积核做傅里叶变换

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{k'}(\mathbf{k}) &= \int H(\mathbf{R}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} d\mathbf{R} \\ &= \int_{N\Omega} \frac{e^{ik'|\mathbf{R}|}}{|\mathbf{R}|} V(-\mathbf{R}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} d\mathbf{R} \end{aligned}$$

取 \mathbf{k} 的方向为z,且假设V只是R的函数

$$V(-\mathbf{R}) \equiv V(R, \theta, \phi) = v(R)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{k'}(\mathbf{k}) &= \int_{N\Omega} \frac{e^{ik'|\mathbf{R}|}}{|\mathbf{R}|} V(-\mathbf{R}) e^{-ikR \cos \theta} R^2 \sin \theta dR d\theta d\phi \\ &= 2\pi \int_0^a \frac{e^{ik'|\mathbf{R}|}}{|\mathbf{R}|} v(R) R^2 \int_0^\pi e^{-ikR \cos \theta} \sin \theta dR d\theta \\ &= 2\pi \int_0^a \frac{e^{ik'|\mathbf{R}|}}{|\mathbf{R}|} v(R) R^2 \cdot 2 \frac{\sin(kR)}{kR} dR \\ &= \frac{4\pi}{k} \int_0^a e^{ik'R} v(R) \sin(kR) dR \end{aligned}$$

根据7 入射波矢为 \mathbf{k} 的波 $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ 在位于格矢上 $\mathbf{r}' = \mathbf{r}_l$ 的散射波 \mathbf{k}' 的几率幅

$$\psi_{sc}(\mathbf{r}_l) = \int H(\mathbf{R})e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_l-\mathbf{R})}d\mathbf{R} \quad (96)$$

$$= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_l} \int_{N\Omega} \frac{e^{ik'|\mathbf{R}|}}{|\mathbf{R}|} V(-\mathbf{R})e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}d\mathbf{R} \quad (97)$$

$$= \frac{4\pi}{k} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_l} \int_0^a e^{ik'R} v(R) \sin(kR) dR \quad (98)$$

$$= \mathcal{H}_{k'}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_l} \quad (99)$$

其中

$$\psi_{sc}(\mathbf{r}_l) \equiv C(\mathbf{k}, \mathbf{k}') e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_l} \quad (100)$$

$$\mathcal{H}_{k'}(\mathbf{k}) = C(\mathbf{k}, \mathbf{k}') e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}_l} \quad (101)$$

$$\mathbf{k}' - \mathbf{k} = n\mathbf{K}_h \quad (102)$$

$$\mathcal{H}_{k'}(\mathbf{k}) = C(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \quad (103)$$

正好是网格细胞基于矢量的编码,在 $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + n\mathbf{K}_h$ 的格矢处都激活

假设是弹性散射

$$k = k' \quad (104)$$

$$\mathcal{H}(k) = \frac{4\pi}{k} \int_0^a e^{ik'R} V(R) \sin(kR) dR \quad (105)$$

$$\mathcal{H}_{k'}(\mathbf{k}) = \mathcal{H}(k) \quad (106)$$

$$2k \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) = nK_h \quad (\theta \text{ 是 } \mathbf{k}, \mathbf{k}' \text{ 之间的夹角}) \quad (107)$$

注意 \mathbf{k}' 是作为参数, 所以

$$\mathcal{H}_{\mathbf{k}'}(\mathbf{k}) = \mathcal{H}(k) \delta(|\mathbf{k}'| - |\mathbf{k}|) \quad (108)$$

$$= \mathcal{H}(k) \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{K}_h) \quad (109)$$

波矢为 \mathbf{k} , 振幅为 $A_0(\mathbf{k})$, 通过神经网络受到散射, 跃迁为波矢 \mathbf{k}' 在格点 \mathbf{r}_l 处为

$$\psi_{sc}(\mathbf{r}_l) = \frac{4\pi}{k} A_0(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_l} \int_0^a e^{ik'R} V(R) \sin(kR) dR \quad (110)$$

$$= \mathcal{H}_{k'}(\mathbf{k}) A_0(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_l} \quad (111)$$

$$= \mathcal{H}(k) A_0(\mathbf{k}) \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{K}_h) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_l} \quad (112)$$

这样的物理图像是: 波矢为 $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k\sqrt{1 - (\frac{k_x}{k})^2 - (\frac{k_y}{k})^2})$, 复振幅为 $A_0 dk_x dk_y$, 在 $z=0$ 的 xy 平面通过神经网络受到散射, 跃迁为波矢 \mathbf{k}' 在格点 \mathbf{r}_l 处的几率幅为

$$\psi_{sc}(\mathbf{r}_l) dk_x dk_y = \frac{4\pi}{k} A_0(k_x, k_y) dk_x dk_y e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_l} \int_0^a e^{ik'R} V(R) \sin(kR) dR$$

$$= \mathcal{H}(k) A_0(k_x, k_y) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_l} dk_x dk_y$$

在格点 \mathbf{r}_l 处的波矢 \mathbf{k}' 的几率幅为

$$\psi_{sc}(\mathbf{r}_l) = \int_B \mathcal{H}_{k'}(\mathbf{k}) A_0(k_x, k_y) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_l} dk_x dk_y \quad (113)$$

$$= \int_B \mathcal{H}(k) \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - n\mathbf{K}_h) A_0(k_x, k_y) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_l} dk_x dk_y \quad (114)$$

考虑一级 $n = 1$, 设出射 \mathbf{k}' 沿方向 \overrightarrow{CP} , 长度 $CP = \frac{2\pi}{\lambda}$, P是倒格子空间的一点 (C不一定是倒格子空间的一点), 以C为中心, 以CP为半径所作的球就是反射球。若球面上有一个倒格点O, 则 \overrightarrow{CO} 就是对反射 $\psi_{sc}(\mathbf{r}_l)$ 有贡献的 \mathbf{k} 矢量, 此时的倒格矢 $\mathbf{K}_h = \overrightarrow{OP}$, 一级反射, \overrightarrow{OP} 之间没有倒格矢, 若二级的 ($n = 2$), 则这中间还有一个倒格矢。

对于单晶满足这样的条件的倒格点很少, 然而多晶则会很多。

设 $k'_z = 0$

[hkl]平面指数 (Miller指数) :

总结: 图像通过神经网络受到散射后格点上的光场是图像的傅立叶变换!, 格点上坐标空间上的散射极大点位置

$$\mathbf{r}_l = x_l \mathbf{e}_x + y_l \mathbf{e}_y + z_l \mathbf{e}_z$$

对应于图像的空间波矢值

$$\begin{aligned} \mathbf{k} &= k \frac{\mathbf{r}_l}{|\mathbf{r}_l|} = \frac{2\pi}{\lambda} \frac{x_l}{r_l} \mathbf{e}_x + \frac{y_l}{r_l} \mathbf{e}_y + \frac{z_l}{r_l} \mathbf{e}_z \\ \mathbf{k} &= k_x \mathbf{e}_x + k_y \mathbf{e}_y + k_z \mathbf{e}_z \\ k_x &= \frac{2\pi}{\lambda r_l} x_l \\ k_y &= \frac{2\pi}{\lambda r_l} y_l \\ k_z &= \frac{2\pi}{\lambda r_l} z_l, \quad \frac{z_l}{r_l} = \frac{k_z \lambda}{2\pi} = \sqrt{1 - \left(\frac{k_x}{k}\right)^2 - \left(\frac{k_y}{k}\right)^2} \end{aligned}$$

设

$$\begin{aligned} \lambda &= 6e^{-6}(m) \quad \text{光波长} \\ k &= 1e^6(1/m) \\ k_y &= 0 \\ k_z &= \sqrt{k^2 - k_x^2} \end{aligned}$$

若

$$L = 6e^{-2}(m) \quad \text{图片宽度}$$

则

$$\begin{aligned} \min(k_x) &= \frac{2\pi}{L} = 1e^2, \quad \max(k_x) = \frac{2\pi}{L/100} = 1e^4 \\ \frac{z_l}{r_l} &= \sqrt{1 - \left(\frac{k_x}{k}\right)^2} = \sqrt{1 - \left(\frac{x_l}{r_l}\right)^2} \\ \frac{\min(x_l)}{r_l} &= \frac{\min(k_x)}{k} \approx 1.6e^{-5} \\ \frac{\max(x_l)}{r_l} &= \frac{\max(k_x)}{k} \approx 1.6e^{-3} \\ z_l &\approx r_l \end{aligned}$$

因为

$$\begin{aligned}\frac{x_l}{r_l} &< 1 \\ \frac{z_l}{r_l} &\approx 1 - \frac{1}{2}\left(\frac{x_l}{r_l}\right)^2\end{aligned}$$

所以

$$\begin{aligned}\frac{\max(k_x)}{k} &= 1 \\ \max(k_x) &= k = 1e^6 \\ \frac{\max(x_l)}{r_l} &= 1 \\ \min(L) &= \lambda \quad \text{神经元间距} \\ \max(x_l) &= r_l \\ \min(z_l) &= 0 \\ \max(z_l) &= r_l\end{aligned}$$

$$\psi_{sc}(x_l, y_l) = \int_B \mathcal{H}_{k'}(\mathbf{k}) A_0(k_x, k_y) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_l} dk_x dk_y \quad (115)$$

$$= \int_B \mathcal{H}(k) \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) A_0(k_x, k_y) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_l} dk_x dk_y \quad (116)$$

$$= \mathcal{H}(k) \delta(k'_z - k_z) A_0(k'_x, k'_y) e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_l} \quad (117)$$

$$= \mathcal{H}(k) A_0(k_x, k_y) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_l}, \quad ((k_x^2 + k_y^2) < (\frac{2\pi}{\lambda})^2) \quad (118)$$

光强

$$\psi_{sc}^2(\mathbf{r}_l) = |\mathcal{H}(k) A_0(k_x, k_y)|^2, \quad ((k_x^2 + k_y^2) < (\frac{2\pi}{\lambda})^2) \quad (119)$$

=====

显然，坐标 (x_l, y_l) 处的光场的振幅和位相，由输入的波矢为 (k_x, k_y) 的傅里叶分量的振幅和相位决定。

图像 $I(x, y)$, 通过神经网络受到散射, 在格点 \mathbf{r}_l 处为

$$\begin{aligned}
\psi_{sc}(x_l, y_l, z_l) &= \iint dk_x dk_y \mathcal{K}(\mathbf{k}) A_0(k_x, k_y) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_l} \\
&= \iint dk_x dk_y \mathcal{K}(\mathbf{k}) \iint \psi(x, y, 0) e^{-i(k_x \cdot x + k_y \cdot y)} dx dy e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_l} \\
&= \iint dx dy \psi(x, y, 0) \iint dk_x dk_y \mathcal{K}(\mathbf{k}) e^{i(k_x \cdot (x_l - x) + k_y \cdot (y_l - y) + k_z \cdot z_l)} \\
&= \iint dx dy \psi(x, y, 0) \iint dk_x dk_y \int d\mathbf{r}' K(\mathbf{r}') e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}'} e^{i(k_x \cdot (x_l - x) + k_y \cdot (y_l - y) + k_z \cdot z_l)} \\
&= \iint dx dy \psi(x, y, 0) \int d\mathbf{r}' K(\mathbf{r}') \delta(x_l - x - x') \delta(y_l - y - y') e^{-ik_z z'} e^{ik_z z_l} \\
&= \iint dx dy \psi(x, y, 0) \int dz' K(x_l - x, y_l - y, z') e^{ik_z \cdot (z_l - z')} \\
&= \int K(x_l - x, y_l - y, 0 - z) e^{ik_z \cdot (z_l - z)} \psi(x, y, 0) dx dy dz \\
&= \int \left(\int K(x_l - x, y_l - y, 0 - z) \psi(x, y, 0) dx dy \right) e^{ik_z \cdot (z_l - z)} dz \\
&= \int K(x_l - x, y_l - y, 0 - z) e^{ik_z \cdot z_l} \psi(x, y, z) dx dy dz
\end{aligned}$$

令

$$H(x, y) = \iint dk_x dk_y \mathcal{K}(\mathbf{k}) e^{i(k_x \cdot (x_l - x) + k_y \cdot (y_l - y))}$$

光强为

$$\psi_{sc}^2(\mathbf{r}_l) \sim \begin{cases} A_0^2(k_x, k_y) \mathcal{V}^2(\mathbf{k}' - \mathbf{k}), & (\mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{K}_h) \\ 0, & (\mathbf{k}' - \mathbf{k} \neq \mathbf{K}_h) \end{cases} \quad (120)$$

$$\psi_{sc}(\mathbf{r}_l) = \int_{N\Omega} K(\mathbf{R}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_l - \mathbf{R}) d\mathbf{R} \quad (121)$$

积分是在有限个原胞内, 设 N 个原胞, 分别以 N 个格点 \mathbf{r}_n 为原点积分, 然后累加

$$\mathbf{R} = \mathbf{r}_n + \boldsymbol{\rho}$$

$|\mathbf{R}|$ 很小

$$\begin{aligned}
\mathcal{K}(\mathbf{k}) &= \sum_n \int_{\Omega} \frac{e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{R}}}{|\mathbf{R}|} V(-\mathbf{R}) d\mathbf{R} \\
&= \sum_n \int_{\Omega} \frac{e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot (\mathbf{r}_n + \boldsymbol{\rho})}}{|\mathbf{r}_n + \boldsymbol{\rho}|} V(-\boldsymbol{\rho}) d\boldsymbol{\rho} \\
\mathcal{K}(\mathbf{k}) &= \sum_n \int_{\Omega} \sum_{\mathbf{K}_h} \frac{e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{K}_h) \cdot (\mathbf{r}_n + \boldsymbol{\rho})}}{|\mathbf{r}_n + \boldsymbol{\rho}|} \mathcal{V}(\mathbf{K}_h) d\boldsymbol{\rho} \\
&= \sum_n \sum_{\mathbf{K}_h} \mathcal{V}(\mathbf{K}_h) e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{K}_h) \cdot \mathbf{r}_n} \int_{\Omega} \frac{e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{K}_h) \cdot \boldsymbol{\rho}}}{|\mathbf{r}_n + \boldsymbol{\rho}|} d\boldsymbol{\rho}
\end{aligned}$$

做近似

$$\begin{aligned}
R &= \sqrt{r^2 + r'^2 - 2\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}'} \\
&= r'(1 + (\frac{r}{r'})^2 - 2\frac{\mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}}{r'^2})^{1/2} \\
&= r'(1 - 2\frac{\mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}}{r'^2})^{1/2} + O[(\frac{r'}{r})^2]r' \\
&\cong r'(1 - \frac{\mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}}{r'^2}) \\
k'|\mathbf{r}' - \mathbf{r}| &\cong k'r'(1 - \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}'}{r'^2}) \\
&= k'r' - \mathbf{k}' \cdot \mathbf{r} \\
&= \mathbf{k}' \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r}) = \mathbf{k}' \cdot \mathbf{R} \\
r &\gg \lambda \\
k &\gg \frac{1}{r}
\end{aligned}$$

卷积核做傅里叶变换

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}(\mathbf{k}) &= \int K(\mathbf{R})e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} d\mathbf{R} \\
&= \int_{N\Omega} \frac{e^{ik'|\mathbf{R}|}}{|\mathbf{R}|} V(-\mathbf{R})e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} d\mathbf{R} \\
&= \int_{N\Omega} \frac{e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{R}}}{|\mathbf{R}|} \sum_{K_h} \mathcal{V}(\mathbf{K}_h) e^{-i\mathbf{K}_h \cdot (\mathbf{R})} d\mathbf{R} \\
&= \int_{N\Omega} \sum_{K_h} \frac{e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{K}_h) \cdot \mathbf{R}}}{|\mathbf{R}|} \mathcal{V}(\mathbf{K}_h) d\mathbf{R}
\end{aligned}$$

积分是在有限个原胞内，设 N 个原胞,分别以 N 个格点 \mathbf{r}_n 为原点积分,然后累加

$$\begin{aligned}
\mathbf{R} &= \mathbf{r}_n + \boldsymbol{\rho} \\
\mathcal{H}(\mathbf{k}) &= \sum_n \int_{\Omega} \frac{e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{R}}}{|\mathbf{R}|} V(-\mathbf{R}) d\mathbf{R} \\
&= \sum_n \int_{\Omega} \frac{e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot (\mathbf{r}_n + \boldsymbol{\rho})}}{|\mathbf{r}_n + \boldsymbol{\rho}|} V(-\boldsymbol{\rho}) d\boldsymbol{\rho} \\
\mathcal{H}(\mathbf{k}) &= \sum_n \int_{\Omega} \sum_{K_h} \frac{e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{K}_h) \cdot (\mathbf{r}_n + \boldsymbol{\rho})}}{|\mathbf{r}_n + \boldsymbol{\rho}|} \mathcal{V}(\mathbf{K}_h) d\boldsymbol{\rho} \\
&= \sum_n \sum_{K_h} \mathcal{V}(\mathbf{K}_h) e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{K}_h) \cdot \mathbf{r}_n} \int_{\Omega} \frac{e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{K}_h) \cdot \boldsymbol{\rho}}}{|\mathbf{r}_n + \boldsymbol{\rho}|} d\boldsymbol{\rho}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{r}_n &\gg \boldsymbol{\rho} \\
\mathcal{H}(\mathbf{k}) &\approx \sum_n \int_{\Omega} \frac{e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot(\mathbf{r}_n+\boldsymbol{\rho})}}{|\mathbf{r}_n|} V(-\boldsymbol{\rho}) d\boldsymbol{\rho} \\
&= \sum_n \int_{\Omega} \sum_{\mathbf{K}_h} \mathcal{V}(\mathbf{K}_h) \frac{e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k}-\mathbf{K}_h)\cdot(\mathbf{r}_n+\boldsymbol{\rho})}}{|\mathbf{r}_n|} d\boldsymbol{\rho} \\
&= \sum_n \sum_{\mathbf{K}_h} \mathcal{V}(\mathbf{K}_h) \frac{e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k}-\mathbf{K}_h)\cdot\mathbf{r}_n}}{|\mathbf{r}_n|} \delta_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}, \mathbf{K}_h} \\
&= \sum_n \frac{\mathcal{V}(\mathbf{k}'-\mathbf{k})}{|\mathbf{r}_n|}
\end{aligned}$$

根据7 位于格矢上 $\mathbf{r}' = \mathbf{r}_l$ 的入射波矢为 k 的波 $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ 散射波 k' 的几率幅

$$\psi_{sc}(\mathbf{r}_l) = \hat{\Gamma}\{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_l}\} \quad (122)$$

$$= \mathcal{H}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_l} \quad (123)$$

积分是在有限个原胞内, 设 N 个原胞, 分别以 N 个格点 \mathbf{r}_n 为原点积分, 然后累加

$$\begin{aligned}
\mathbf{R} &= \mathbf{r}_n + \boldsymbol{\rho} \\
\mathbf{r}_n &\gg \boldsymbol{\rho} \\
\mathcal{H}(\mathbf{k}) &= \int_{N\Omega} \frac{e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}}}{|\mathbf{R}|} V(-\mathbf{R}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} d\mathbf{R} \\
&= \int_{N\Omega} \frac{e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{R}}}{|\mathbf{R}|} V(-\boldsymbol{\rho}) d\mathbf{R} \\
\mathcal{H}(\mathbf{k}) &= \int_{N\Omega} \frac{e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{R}}}{|\mathbf{R}|} \sum_{\mathbf{K}_h} \mathcal{V}(\mathbf{K}_h) e^{-i\mathbf{K}_h\cdot(\mathbf{R})} d\mathbf{R} \\
&= \sum_n \int_{\Omega} \sum_{\mathbf{K}_h} \mathcal{V}(\mathbf{K}_h) \frac{e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k}-\mathbf{K}_h)\cdot\mathbf{R}}}{|\mathbf{R}|} d\mathbf{R} \\
&= \sum_n \sum_{\mathbf{K}_h} \mathcal{V}(\mathbf{K}_h) \int_{\Omega} \frac{e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k}-\mathbf{K}_h)\cdot(\mathbf{r}_n+\boldsymbol{\rho})}}{|\mathbf{r}_n+\boldsymbol{\rho}|} d\boldsymbol{\rho} \\
&\cong \sum_n \sum_{\mathbf{K}_h} \mathcal{V}(\mathbf{K}_h) \frac{e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k}-\mathbf{K}_h)\cdot\mathbf{r}_n}}{|\mathbf{r}_n|} \int_{\Omega} e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k}-\mathbf{K}_h)\cdot\boldsymbol{\rho}} d\boldsymbol{\rho} \\
&= \sum_n \sum_{\mathbf{K}_h} \mathcal{V}(\mathbf{K}_h) \frac{e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k}-\mathbf{K}_h)\cdot\mathbf{r}_n}}{|\mathbf{r}_n|} \delta_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}, \mathbf{K}_h} \\
&= \begin{cases} \sum_n \frac{\mathcal{V}(\mathbf{k}'-\mathbf{k})}{|\mathbf{r}_n|}, & (\mathbf{k}'-\mathbf{k} = \mathbf{K}_h) \\ 0, & (\mathbf{k}'-\mathbf{k} \neq \mathbf{K}_h) \end{cases}
\end{aligned}$$

入射波矢为 k, k' 的散射波在格点 \mathbf{r}_l 处的几率幅, 只有入射波 \mathbf{k} 与出射波 \mathbf{k}' 之差为倒格矢时才有散射, 散射强度正比于周期势的傅里叶 $(\mathbf{k}'-\mathbf{k})$ 分量. 散射满足的条件

$$\mathbf{k}' - \mathbf{k} = n\mathbf{K}_h \quad (n \text{ 为整数})$$

假设是弹性散射,散射后的波矢 \mathbf{k}' , 能量守恒 $|\mathbf{k}|^2 = |\mathbf{k}'|^2 = k^2$, 设晶面为 (h_1, h_2, h_3) 的倒格矢量为 \mathbf{K}_h ,则

$$\mathbf{k}' - \mathbf{k} = n\mathbf{K}_h \quad (n \text{ 为整数}) \quad (124)$$

$$|\mathbf{k}'| = |\mathbf{k}| = \frac{2\pi}{\lambda} = |n\mathbf{K}_h| = \frac{2\pi n}{d_{h_1 h_2 h_3}} \quad (125)$$

$$\mathbf{k}' - \mathbf{k} = (k'_x - k_x)\mathbf{e}_x + (k'_y - k_y)\mathbf{e}_y + (k'_z - k_z)\mathbf{e}_z = \mathbf{K}_h \quad (126)$$

$$|\mathbf{k}'|^2 = |\mathbf{k} + \mathbf{K}_h|^2 = |\mathbf{k}|^2 \quad (127)$$

$$\mathbf{K}_h \cdot (\mathbf{k} + \frac{1}{2}\mathbf{K}_h) = 0 \quad (128)$$

$$\mathbf{K}_h \cdot (\mathbf{k}' - \frac{1}{2}\mathbf{K}_h) = 0 \quad (129)$$

输入经过不变系统 $\hat{\Gamma}$ 卷积输出

$$\begin{aligned} \psi_{sc}(\mathbf{r}_l) &= \hat{\Gamma}\{\psi^0(\mathbf{r}_l)\} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{A}(\mathbf{k}) \hat{\Gamma}\{e^{j\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}\} d\mathbf{k} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{A}(\mathbf{k}) \mathcal{K}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_l} d\mathbf{k} \\ &= \begin{cases} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_l} \mathcal{A}(\mathbf{k}) \mathcal{V}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \sum_n \frac{1}{|\mathbf{r}_n|}, & (\mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{K}_h) \\ 0, & (\mathbf{k}' - \mathbf{k} \neq \mathbf{K}_h) \end{cases} \end{aligned}$$

现在分析入射波是图像

设单色光源系统把一个沿z方向传播的波投射在xy平面上, 此平面上的复场, 在x,y平面上二维傅立叶变换:

$$\begin{aligned} \psi(x, y, 0) &= \iint A_0(k_x, k_y) e^{j(k_x \cdot x + k_y \cdot y)} dk_x dk_y \equiv I(x, y) \\ A_0(k_x, k_y) &= \iint \psi(x, y, 0) e^{-j(k_x \cdot x + k_y \cdot y)} dx dy \end{aligned}$$

$A_0(k_x, k_y)$ 称为角谱

传播距离z后, 即一个与xy平面平行但距离z的平面上

$$\begin{aligned} \psi(x, y, z) &= \iint_{\mathbf{k}} A(k_x, k_y, z) e^{j(k_x \cdot x + k_y \cdot y)} dk_x dk_y \\ A(k_x, k_y, z) &= A_0(k_x, k_y) e^{jk_z z} \end{aligned}$$

其中波矢

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (130)$$

$$k_z = \sqrt{k^2 - (k_x^2 + k_y^2)} = k \sqrt{1 - \left(\frac{k_x}{k}\right)^2 - \left(\frac{k_y}{k}\right)^2} \quad (131)$$

$$= k \sqrt{1 - (\alpha^2 + \beta^2)} \quad (132)$$

因此

$$\begin{aligned} \psi(x, y, z) &= e^{ik_z z} \int_{k_x} \int_{k_y} A_0(k_x, k_y) e^{j(k_x x + k_y y)} dk_x dk_y \\ &= \int_{k_x} \int_{k_y} dk_x dk_y A_0(k_x, k_y) e^{j\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \\ &= I(x, y) e^{ik_z z} \end{aligned} \quad (133)$$

所以若对任意平面上的复场分布做傅立叶分析，则各个傅立叶分量可以看作是沿不同方向传播的平面波。在任意其他点上的场振幅可以在考虑到这些平面的波传播到该点所经受的相移后，对各个平面波的贡献求和。即在z位置的xy平面的图像实际上是满足波矢130 的波133。波矢为 \mathbf{k} 粒子数为 A_0^2

这样的图像或波，波矢为 \mathbf{k} ,振幅为 A_0 ，通过神经网络受到散射，跃迁为波矢 \mathbf{k}' 在格点 \mathbf{r}_l 处为

$$\begin{aligned}\psi_{sc}(\mathbf{r}_l) &= \begin{cases} e^{i(k_x x_l + k_y y_l + k_z z_l)} A_0(k_x, k_y) \mathcal{V}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \sum_n \frac{1}{|\mathbf{r}_n|}, & (\mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{K}_h) \\ 0, & (\mathbf{k}' - \mathbf{k} \neq \mathbf{K}_h) \end{cases} \\ &= \begin{cases} e^{i(k'_x x_l + k'_y y_l + k'_z z_l)} A_0(k_x, k_y) \mathcal{V}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \sum_n \frac{1}{|\mathbf{r}_n|}, & (\mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{K}_h) \\ 0, & (\mathbf{k}' - \mathbf{k} \neq \mathbf{K}_h) \end{cases}\end{aligned}$$

根据142 振幅为 A_0 的波矢 \mathbf{k} ,跃迁为波矢 \mathbf{k}' 在格点 \mathbf{r}_l 处的几率幅为

$$\psi_{sc}(\mathbf{r}_l) = \sum_n \frac{e^{ik' \cdot (\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_n)}}{|\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_n|} \int_{\Omega} V(\boldsymbol{\rho}) e^{-i\mathbf{k}' \cdot \boldsymbol{\rho}} A_0(k_x, k_y) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_n + \boldsymbol{\rho})} d\boldsymbol{\rho} \quad (134)$$

$$= \sum_n \frac{e^{ik' \cdot \mathbf{r}_l + i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}_n}}{|\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_n|} A_0(k_x, k_y) \int_{\Omega} V(\boldsymbol{\rho}) e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \boldsymbol{\rho}} d\boldsymbol{\rho} \quad (135)$$

$$= \sum_n \frac{e^{ik' \cdot \mathbf{r}_l + i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}_n}}{|\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_n|} A_0(k_x, k_y) \sum_{\mathbf{K}_h} \mathcal{V}(\mathbf{K}_h) \delta_{\mathbf{k}' - \mathbf{k}, \mathbf{K}_h} \quad (136)$$

$$= \begin{cases} e^{ik' \cdot \mathbf{r}_l} A_0(k_x, k_y) \mathcal{V}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \sum_n \frac{1}{|\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_n|}, & (\mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{K}) \\ 0, & (\mathbf{k}' - \mathbf{k} \neq \mathbf{K}) \end{cases} \quad (137)$$

那么,当输入平移 \mathbf{a}

$$\begin{aligned}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &\rightarrow \psi'_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{a}) \\ \psi'_{sc}(\mathbf{r}') &= \int \frac{e^{ik' \cdot |\mathbf{R}|}}{|\mathbf{R}|} U(\mathbf{r}' - \mathbf{R}) \psi'_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}' - \mathbf{R}) d\mathbf{R} \\ &= \int \frac{e^{ik' \cdot |\mathbf{R}|}}{|\mathbf{R}|} U(\mathbf{r}' - \mathbf{R}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{a} + \mathbf{r}' - \mathbf{R}) d\mathbf{R}\end{aligned}$$

如果 \mathbf{a} 为格矢，那么

$$\begin{aligned}\psi'_{sc}(\mathbf{r}') &= \int \frac{e^{ik' \cdot |\mathbf{R}|}}{|\mathbf{R}|} U(\mathbf{r}' - \mathbf{R}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{a} + \mathbf{r}' - \mathbf{R}) d\mathbf{R} \\ &= \int \frac{e^{ik' \cdot |\mathbf{R}|}}{|\mathbf{R}|} U(\mathbf{a} + \mathbf{r}' - \mathbf{R}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{a} + \mathbf{r}' - \mathbf{R}) d\mathbf{R} \\ &= \psi_{sc}(\mathbf{r}' + \mathbf{a})\end{aligned}$$

这时散射具有平移对称性! 对格矢

$$\mathbf{a} = l_1 \mathbf{a}_1 + l_2 \mathbf{a}_2 + l_3 \mathbf{a}_3 \quad (l_1, l_2, l_3 \text{ 整数})$$

的一切操作具有平移不变性

散射波是核函数与输入的卷积,散射波在格点 \mathbf{r}_l 处的几率幅为

$$\psi_{sc}(\mathbf{r}_l) = \int K(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}') \psi^0(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (138)$$

$$= \int_{N\Omega} \frac{e^{ik'|\mathbf{r}_l - \mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}_l - \mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}^0(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (139)$$

$$= \int K(\mathbf{R}) \psi_{\mathbf{k}}^0(\mathbf{r}_l - \mathbf{R}) d\mathbf{R} \quad (140)$$

$$= \int_{N\Omega} \frac{e^{ik'|\mathbf{R}|}}{|\mathbf{R}|} V(-\mathbf{R}) \psi_{\mathbf{k}}^0(\mathbf{r}_l - \mathbf{R}) d\mathbf{R} \quad (141)$$

势场具有周期性导致波矢不再是连续的了,而是具有分立谱。

积分是在有限个原胞内, 设 N 个原胞, 分别以 N 个格点 \mathbf{r}_n 为原点积分, 然后累加

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r}_n + \boldsymbol{\rho} \quad (\boldsymbol{\rho} \text{ 很小})$$

$$\psi_{sc}(\mathbf{r}_l) = \sum_n \int_{\Omega} \frac{e^{ik'|\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_n - \boldsymbol{\rho}|}}{|\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_n - \boldsymbol{\rho}|} V(\boldsymbol{\rho}) \psi_{\mathbf{k}}^0(\mathbf{r}_n + \boldsymbol{\rho}) d\boldsymbol{\rho}$$

$$\psi_{\mathbf{k}}^0 = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$$

$$\begin{aligned} \psi_{sc}(\mathbf{r}_l) &= \sum_n \int_{\Omega} \frac{e^{ik'|\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_n - \boldsymbol{\rho}|}}{|\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_n - \boldsymbol{\rho}|} V(\boldsymbol{\rho}) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_n + \boldsymbol{\rho})} d\boldsymbol{\rho} \\ &\cong \sum_n \int_{\Omega} \frac{e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_l - i\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{r}_n + \boldsymbol{\rho})}}{|\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_n|} V(\boldsymbol{\rho}) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_n + \boldsymbol{\rho})} d\boldsymbol{\rho} \end{aligned}$$

因为

$$\begin{aligned} |\mathbf{r}_l| &\gg |\mathbf{r}'| \\ ik'|\mathbf{r}_l - \mathbf{r}'| &= ik'(|\mathbf{r}_l| - \frac{\mathbf{r}_l \cdot \mathbf{r}'}{|\mathbf{r}_l|}) = ik'|\mathbf{r}_l| - i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}' \\ &= i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_l - i\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{r}_n + \boldsymbol{\rho}) \end{aligned}$$

那么

$$\psi_{sc}(\mathbf{r}_l) = \sum_n \frac{e^{i\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_n)}}{|\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_n|} \int_{\Omega} V(\boldsymbol{\rho}) e^{-i\mathbf{k}' \cdot \boldsymbol{\rho}} \psi_{\mathbf{k}}^0(\mathbf{r}_n + \boldsymbol{\rho}) d\boldsymbol{\rho} \quad (142)$$

入射波矢为 k 的波 $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ 散射波 k' 的几率幅

$$\begin{aligned}
\psi_{sc}(\mathbf{r}_l) &= \sum_n \frac{e^{i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{r}_l-\mathbf{r}_n)}}{|\mathbf{r}_l-\mathbf{r}_n|} \int_{\Omega} V(\boldsymbol{\rho}) e^{-i\mathbf{k}'\cdot\boldsymbol{\rho}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_n+\boldsymbol{\rho})} d\boldsymbol{\rho} \\
&= \sum_n \frac{e^{i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{r}_l-\mathbf{r}_n)}}{|\mathbf{r}_l-\mathbf{r}_n|} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_n} \int_{\Omega} V(\boldsymbol{\rho}) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\boldsymbol{\rho}} d\boldsymbol{\rho} \\
&= \sum_n \frac{e^{i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{r}_l-\mathbf{r}_n)}}{|\mathbf{r}_l-\mathbf{r}_n|} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_n} \int_{\Omega} \sum_{K_h} \mathcal{V}(\mathbf{K}_h) e^{i\mathbf{K}_h+i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\boldsymbol{\rho}} d\boldsymbol{\rho} \\
&= \sum_n \frac{e^{i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{r}_l-\mathbf{r}_n)}}{|\mathbf{r}_l-\mathbf{r}_n|} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_n} \sum_{K_h} \mathcal{V}(\mathbf{K}_h) \delta_{\mathbf{k}'-\mathbf{k},\mathbf{K}_h} \\
&= e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_l} \sum_n \frac{e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}_n}}{|\mathbf{r}_l-\mathbf{r}_n|} \sum_{K_h} \mathcal{V}(\mathbf{K}_h) \delta_{\mathbf{k}'-\mathbf{k},\mathbf{K}_h} \\
&= \begin{cases} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_l} \sum_n \frac{\mathcal{V}(\mathbf{k}'-\mathbf{k})}{|\mathbf{r}_l-\mathbf{r}_n|}, & (\mathbf{k}'-\mathbf{k}=\mathbf{K}) \\ 0, & (\mathbf{k}'-\mathbf{k}\neq\mathbf{K}) \end{cases}
\end{aligned}$$

取 $n=1, \mathbf{r}_n=0$, 则

$$\psi_{sc}(\mathbf{r}_l) = \begin{cases} \frac{e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_l}}{|\mathbf{r}_l|} \mathcal{V}(\mathbf{k}'-\mathbf{k}), & (\mathbf{k}'-\mathbf{k}=\mathbf{K}) \\ 0, & (\mathbf{k}'-\mathbf{k}\neq\mathbf{K}) \end{cases} \quad (143)$$

总结：图像通过神经网络受到散射后格点上的光场是图像的傅立叶变换！，格点上坐标空间上的散射极大点位置

$$\mathbf{r}_l = x_l \mathbf{e}_x + y_l \mathbf{e}_y + z_l \mathbf{e}_z$$

对应于图像的空间波矢值

$$\begin{aligned}
\mathbf{k}' &= k \frac{\mathbf{r}_l}{|\mathbf{r}_l|} = \frac{2\pi}{\lambda} \frac{x_l}{r_l} \mathbf{e}_x + \frac{y_l}{r_l} \mathbf{e}_y + \frac{z_l}{r_l} \mathbf{e}_z \\
\mathbf{k}' &= k'_x \mathbf{e}_x + k'_y \mathbf{e}_y + k'_z \mathbf{e}_z \\
k'_x &= \frac{2\pi}{\lambda r_l} x_l, \quad k'_y = \frac{2\pi}{\lambda r_l} y_l, \quad k'_z = \frac{2\pi}{\lambda r_l} z_l
\end{aligned}$$

令

光强为

$$\psi_{sc}^2(\mathbf{r}_l) = \begin{cases} \frac{1}{|\mathbf{r}_l|^2} N^2 A_0^2(k_x, k_y) \mathcal{V}^2(\mathbf{k}'-\mathbf{k}), & (\mathbf{k}'-\mathbf{k}=\mathbf{K}) \\ 0, & (\mathbf{k}'-\mathbf{k}\neq\mathbf{K}) \end{cases} \quad (144)$$

$$\psi_k(\mathbf{r}) = A_0(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - A_0(\mathbf{k}) \int G(\mathbf{r}-\mathbf{r}') U(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'} d\mathbf{r}'$$

$A_0 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ 是输入谐波分量，所以以下计算 A_0 因子可以暂不考虑。

\mathbf{k} 方向为 z 方向, \mathbf{k}' 为 \mathbf{e}_r 方向, $\mathbf{e}_r, \mathbf{e}_z$ 之间的夹角 θ 为散射角

$$k'|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| + \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}' = k\mathbf{e}_r \cdot \mathbf{r} - k\mathbf{e}_r \cdot \mathbf{r}' + k\mathbf{e}_z \cdot \mathbf{r}'$$

$$\text{令: } \mathbf{K} \equiv \mathbf{k}' - \mathbf{k} = k\mathbf{e}_r - k\mathbf{e}_z$$

$$|\mathbf{K}| = 2k \sin \frac{\theta}{2}$$

$$k'|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| + \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}' = kr - \mathbf{K} \cdot \mathbf{r}'$$

$$\begin{aligned} \psi_k(\mathbf{r}) &= e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} - \int \frac{e^{ik'|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} U(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}'} d\mathbf{r}' \\ &= e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} - \int \frac{e^{ikr - i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}'}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} U(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \end{aligned}$$

并设 $r' \ll r$,所以

$$\begin{aligned} \psi_k(\mathbf{r}) &= e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} - \frac{e^{ikr}}{r} \int e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}'} U(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \\ &= e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} - \frac{e^{ikr}}{r} \int_{\mathbf{a}} e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}'} \sum_{\mathbf{K}_h} \mathcal{V}(\mathbf{K}_h) e^{i\mathbf{K}_h \cdot \mathbf{r}'} d\mathbf{r}' \\ &= e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} - \frac{e^{ikr}}{r} \sum_{\mathbf{K}_h} \mathcal{V}(\mathbf{K}_h) \int_{\mathbf{a}} e^{i(\mathbf{K}_h - \mathbf{K}) \cdot \mathbf{r}'} d\mathbf{r}' \end{aligned}$$

散射极大点

$$\begin{aligned} \mathbf{K} &= \mathbf{K}_h \\ \mathbf{k}' &= \mathbf{k} + \mathbf{K}_h \\ |\mathbf{K}| = 2k \sin \frac{\theta}{2} &= |\mathbf{K}_h| = nd_{h_1 h_2 h_3} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} d\mathbf{r}' &= r'^2 \sin \theta' dr' d\theta' d\phi' \\ \psi_k(\mathbf{r}) &= e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} - \frac{e^{ikr}}{r} \sum_{\mathbf{K}_h} \mathcal{V}(\mathbf{K}_h) \int_0^a dr' \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \frac{e^{ikr}}{r} e^{i(\mathbf{K}_h - \mathbf{K}) \cdot \mathbf{r}'} r'^2 \sin(\theta) \\ &= e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} - \frac{e^{ikr}}{r} U \int_0^a dr' \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi e^{-iKr' \cos \theta} r'^2 \sin(\theta) \\ &= e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} - \frac{e^{ikr}}{r} U 2\pi \int_0^a r'^2 dr' \int_0^\pi d\theta e^{-iKr' \cos \theta} \sin \theta \\ &= e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \frac{e^{ikr}}{r} U 2\pi \frac{2}{K} \int_0^a r' dr' \sin(Kr') \\ &= e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \frac{e^{ikr}}{r} U \frac{4\pi}{K} \int_0^a r' \sin(Kr') dr' \end{aligned}$$

—————

$$\mathbf{R} = \mathbf{r}_n + \boldsymbol{\rho}$$

$$\psi_{sc}(\mathbf{r}_l) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_l} \sum_{\mathbf{K}_h} \mathcal{V}(\mathbf{K}_h) \sum_n \int_{\Omega} \frac{e^{ik'|\mathbf{r}_n + \boldsymbol{\rho}|}}{|\mathbf{r}_n + \boldsymbol{\rho}|} e^{-i(\mathbf{k} + \mathbf{K}_h) \cdot (\mathbf{r}_n + \boldsymbol{\rho})} d\boldsymbol{\rho}$$

$$\psi_{sc}(\mathbf{r}_l) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_l} \sum_{\mathbf{K}_h} \mathcal{V}(\mathbf{K}_h) \sum_n e^{-i(\mathbf{k} + \mathbf{K}_h) \cdot \mathbf{r}_n} \int_{\Omega} \frac{e^{ik'|\mathbf{r}_n + \boldsymbol{\rho}|}}{|\mathbf{r}_n + \boldsymbol{\rho}|} e^{-i(\mathbf{k} + \mathbf{K}_h) \cdot \boldsymbol{\rho}} d\boldsymbol{\rho}$$

设

$$|\mathbf{r}_n| \gg |\boldsymbol{\rho}|$$

那么

$$\begin{aligned} ik'|\mathbf{r}_n + \boldsymbol{\rho}| &= ik(r_n + \frac{\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\rho}}{r}) = ik'r_n + i\mathbf{k}' \cdot \boldsymbol{\rho} \\ \psi_{sc}(\mathbf{r}_l) &= e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_l} \sum_{\mathbf{K}_h} \mathcal{V}(\mathbf{K}_h) \sum_n e^{-i(\mathbf{k} + \mathbf{K}_h) \cdot \mathbf{r}_n} \frac{e^{ik'r_n}}{r_n} \int_{\Omega} e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{K}_h) \cdot \boldsymbol{\rho}} d\boldsymbol{\rho} \end{aligned}$$

\mathbf{k} 方向为z轴方向, \mathbf{R} 为极轴, \mathbf{k}' 为 \mathbf{R} 方向, \mathbf{R}, \mathbf{e}_z 之间的夹角 θ , 假设是弹性散射, 散射后的波矢 \mathbf{k}' , 能量守恒 $|\mathbf{k}|^2 = |\mathbf{k}'|^2 = k^2$,

$$\begin{aligned} ik'|\mathbf{R}| &= ik'R = i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R} \\ i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R} &= ikR \cos \theta \\ ik'|\mathbf{R}| - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R} - i\mathbf{K}_h \cdot \mathbf{R} &= i(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{K}_h) \cdot \mathbf{R} \\ \psi_{sc}(\mathbf{r}_l) &= e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_l} \sum_{\mathbf{K}_h} \mathcal{V}(\mathbf{K}_h) \int_{N\Omega} \frac{e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{K}_h) \cdot \mathbf{R}}}{|\mathbf{R}|} d\mathbf{R} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} d\mathbf{R} &= R^2 \sin \theta dR d\theta d\phi \\ \psi_{sc}(\mathbf{r}_l) &= e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_l} \sum_{\mathbf{K}_h} \mathcal{V}(\mathbf{K}_h) \int_{N\Omega} e^{ik'|\mathbf{R}|} e^{-i(\mathbf{k} + \mathbf{K}_h) \cdot \mathbf{R}} R \sin \theta dR d\theta d\phi \\ &= e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_l} \sum_{\mathbf{K}_h} \mathcal{V}(\mathbf{K}_h) \int_{N\Omega} dR e^{ik'|\mathbf{R}|} e^{-i\mathbf{K}_h \cdot \mathbf{R}} R 2\pi \int_0^\pi e^{-ikR \cos \theta} \sin \theta d\theta \\ &= e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_l} \sum_{\mathbf{K}_h} \mathcal{V}(\mathbf{K}_h) \int_{N\Omega} dR e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{K}_h) \cdot \mathbf{R}} R 4\pi \frac{\sin(kR)}{kR} \\ &= e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_l} \sum_{\mathbf{K}_h} \mathcal{V}(\mathbf{K}_h) \int_{N\Omega} dR e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{K}_h) \cdot \mathbf{R}} 4\pi \frac{\sin(kR)}{k} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} d\mathbf{r}' &= r'^2 \sin \theta' dr' d\theta' d\phi' \\ \psi_k(\mathbf{r}) &\approx e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} - \int_0^a dr' \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \frac{e^{ikr}}{r} e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}'} U r'^2 \sin(\theta) \\ &= e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} - \frac{e^{ikr}}{r} U \int_0^a dr' \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi e^{-iK r' \cos \theta} r'^2 \sin(\theta) \\ &= e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} - \frac{e^{ikr}}{r} U 2\pi \int_0^a r'^2 dr' \int_0^\pi d\theta e^{-iK r' \cos \theta} \sin \theta \\ &= e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \frac{e^{ikr}}{r} U 2\pi \frac{2}{K} \int_0^a r' dr' \sin(Kr') \\ &= e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \frac{e^{ikr}}{r} U \frac{4\pi}{K} \int_0^a r' \sin(Kr') dr' \end{aligned}$$

散射极大点

$$\begin{aligned} \mathbf{K} &= \mathbf{K}_h \\ \mathbf{k}' &= \mathbf{k} + \mathbf{K}_h \end{aligned}$$

令卷积核为

$$K(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')U(\mathbf{r}') \quad (145)$$

如果势函数 $U(\mathbf{r}')$ 与 \mathbf{r}' 无关的常数, 那么系统具有空间不变性

令

$$U(\mathbf{r}') = \begin{cases} U, & (r' \leq a) \\ 0, & (r' > a) \end{cases} \quad (146)$$

即核是一个有限大小, 相当于视觉系统的有限的视野。这样卷积核

$$K(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \begin{cases} G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')U, & (r' \leq a) \\ 0, & (r' > a) \end{cases} \quad (147)$$

散射出射波:

$$\begin{aligned} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} - \int K(\mathbf{r} - \mathbf{r}')e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}'} d\mathbf{r}' \\ &= e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} - \int_0^a dr' \int_0^\pi d\theta' \int_0^{2\pi} d\phi' \frac{e^{ik'|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} U e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}'} r'^2 \sin(\theta') \end{aligned}$$

\mathbf{k} 方向为z方向, \mathbf{k}' 为 \mathbf{e}_r 方向, $\mathbf{e}_r, \mathbf{e}_z$ 之间的夹角 θ 为散射角

$$\begin{aligned} k'|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| + \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}' &= k\mathbf{e}_r \cdot \mathbf{r} - k\mathbf{e}_r \cdot \mathbf{r}' + k\mathbf{e}_z \cdot \mathbf{r}' \\ \text{令: } \mathbf{K} &\equiv \mathbf{k}' - \mathbf{k} = k\mathbf{e}_r - k\mathbf{e}_z \\ |\mathbf{K}| &= 2k \sin \frac{\theta}{2} \\ k'|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| + \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}' &= kr - \mathbf{K} \cdot \mathbf{r}' \\ d\mathbf{r}' &= r'^2 \sin \theta' dr' d\theta' d\phi' \end{aligned}$$

并设 $r' \ll r$,所以

$$\begin{aligned} \psi_k(\mathbf{r}) &\approx e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} - \int_0^a dr' \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \frac{e^{ikr}}{r} e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}'} U r'^2 \sin(\theta) \\ &= e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} - \frac{e^{ikr}}{r} U \int_0^a dr' \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi e^{-iKr' \cos \theta} r'^2 \sin(\theta) \\ &= e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} - \frac{e^{ikr}}{r} U 2\pi \int_0^a r'^2 dr' \int_0^\pi d\theta e^{-iKr' \cos \theta} \sin \theta \\ &= e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \frac{e^{ikr}}{r} U 2\pi \frac{2}{K} \int_0^a r' dr' \sin(Kr') \\ &= e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \frac{e^{ikr}}{r} U \frac{4\pi}{K} \int_0^a r' \sin(Kr') dr' \end{aligned}$$

0.13 含时散射

采用含时量子散射理论研究hs2反应的动力学性质

0.14 相变与标度

傅里叶变换的相似性定理:

$$\mathcal{F}\{\mathbf{g}(ax, by)\} = \frac{1}{|ab|} \mathbf{G}\left(\frac{f_x}{a}, \frac{f_y}{b}\right)$$

空域中坐标 (x, y) 的”伸展”导致频域中坐标 $(f_x f_y)$ 的压缩和频谱幅度的变化。

设变换算符由下式定义

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_A\{\mathbf{g}\} &= \frac{1}{a} \iint_{-\infty}^{\infty} \mathbf{g}(\xi, \eta) e^{-j \frac{2\pi}{a} (f_x \xi + f_y \eta)} d\xi d\eta \\ \mathcal{F}_B\{\mathbf{g}\} &= \frac{1}{b} \iint_{-\infty}^{\infty} \mathbf{g}(\xi, \eta) e^{-j \frac{2\pi}{b} (x \xi + y \eta)} d\xi d\eta\end{aligned}$$

那么

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_B\{\mathcal{F}_A\{\mathbf{g}(x, y)\}\} &= \frac{1}{b} \iint_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{a} \iint_{-\infty}^{\infty} \mathbf{g}(\xi', \eta') e^{-j \frac{2\pi}{a} (\xi \xi' + \eta \eta')} d\xi' d\eta' e^{-j \frac{2\pi}{b} (x \xi + y \eta)} d\xi d\eta \\ &= \frac{1}{ab} \iint_{-\infty}^{\infty} d\xi' d\eta' \mathbf{g}(\xi', \eta') \iint_{-\infty}^{\infty} d\xi d\eta e^{-j(\frac{2\pi x}{b} + \frac{2\pi \xi'}{a})\xi} e^{-j(\frac{2\pi y}{b} + \frac{2\pi \eta'}{a})\eta} \\ &= \frac{1}{ab} \iint_{-\infty}^{\infty} d\xi' d\eta' \mathbf{g}(\xi', \eta') \delta(\frac{x}{b} + \frac{\xi'}{a}) \delta(\frac{y}{b} + \frac{\eta'}{a}) \\ &= \frac{1}{ab} a^2 \mathbf{g}(a(-\frac{x}{b}), a(-\frac{y}{b})) \\ &= \frac{a}{b} \mathbf{g}(-\frac{a}{b}x, -\frac{a}{b}y)\end{aligned}$$

当 $a = b$

$$\mathcal{F}_B\{\mathcal{F}_A\{\mathbf{g}\}\} = \mathbf{g}(-x, -y)$$

对物的两次傅立叶变换得到的像是物的反射(倒立)，四次傅立叶变换得到与源物相同像。当 $a > b$ 像是放大的像，当 $a < b$ 像是缩小的像，

标度理论 随着系统与临界点的距离发生改变，热力学函数将改变它们的尺度，但不改变它们的函数形式，标度理论的概念用数学语言表述即，**热力学函数是系统到临界点距离的齐次函数**。威尔逊方法的基础是将临界点附近描述系统的有效哈密顿量加以系统的再标定，当系统的相关长度在临界点附近增大时，它反复地将短程关联效应分掉，以保证哈密顿量的函数形式不变。这就给出了在不同长度标度下有效耦合常数间的非线性递推关系。临界点正好对应着这些递推关系中的不动点。产生递推关系的转移矩阵的本征值（在不动点附近线性化）可用临界指数表示，求出本征值后，问题就解决了。

齐次函数 现在考虑两个变量的广义齐次函数 $g(x, y)$ ，这类函数总可以写成如下形式：

$$g(\lambda^p x, \lambda^q y) = \lambda g(x, y)$$

它由两个参数 p, q 来表征，把 $g(x, y)$ 写成另一种形式更便利，令 $\lambda = y^{-\frac{1}{q}}$ ，有

$$g(x, y) = y^{-\frac{1}{q}} g(\frac{x}{y^{-\frac{p}{q}}}, 1)$$

齐次函数 $g(x, y)$ 除了公因子 $y^{-\frac{1}{q}}$ 以外，只通过比值 $\frac{x}{y^{-\frac{p}{q}}}$ 的形式依赖 x, y

Parseval定理

$$\iint_{-\infty}^{\infty} |\mathbf{g}(x, y)|^2 dx dy = \iint_{-\infty}^{\infty} |\mathbf{G}(f_x, f_y)|^2 df_x df_y$$

空域与频域中总几率守恒，能量守恒

傅里叶变换也是在进行标度变换。所以可以用相变的标度理论描述？

Kadanoff 的标度理论是格点自旋S,用大团格点S'代替，自由能不变。（S'是S的某种平均）

假设， $|\mathbf{g}(x, y)|^2$ 两次傅里叶变换不变，

对比，两次傅里叶变换是在进行标度变换

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_B\{\mathcal{F}_A\{\mathbf{g}(x, y)\}\} &= \frac{a}{b}\mathbf{g}\left(-\frac{a}{b}x, -\frac{a}{b}y\right) \\ \mathcal{F}_B\{\mathcal{F}_A\{\mathbf{g}\left(-\frac{b}{a}x, -\frac{b}{a}y\right)\}\} &= \frac{a}{b}\mathbf{g}(x, y)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\lambda &= \frac{a}{b} \\ p &= -1 \\ q &= -1\end{aligned}$$

0.15 局域态和有序态

自从P.W.Anderson介绍了他的范例模型[2]以来，量子无序已经进行了近60年的深入研究，该模型描述了无序介质的量子物理（在某种程度上是粗糙的，但在数学上可处理）。模型的主要预测是空间中存在指数局域本征态，与标准的晶体的非局域布洛赫本征态形成鲜明对比。在三维（3d）中，该模型预测了非局域的（金属）和局域（绝缘体）相之间存在二阶量子相变，称为安德森金属-绝缘体相变，这是本研究的主要主题。

0.15.1 量子混沌中由时间驱动的奇特相变

[511] The kicked rotor 是哈密顿经典和量子混沌的一个典范。这个简单系统的经典版本显示了丰富的动态行为，这使得它很好地适应量子混沌的研究。令人惊讶的是，在量子版本中，在动量空间中经典的混沌扩散完全被抑制，导致动量空间中的指数局域化，称为动力学局域化，这强烈地引起安德森局域化。事实上，已经证明the kicked rotor哈密顿量到一维安德森哈密顿量存在数学映射。因此，The kicked rotor（踢转转子）可以用来量子模拟安德森物理。量子模拟的最初想法似乎是由费曼提出的。

踢转转子（The kicked rotor）是由一个被约束在一个圆周轨道上运动的粒子形成的，在该轨道上施加恒定力的周期性（周期T1）增量脉冲（踢kicks）。由于沿着轨道的力的分量只影响粒子的运动，所以有哈密顿量

$$H_{kr} = \frac{L^2}{2} + K \cos \theta \sum_{n \in \mathbb{Z}} \delta(t - n) \quad (148)$$

式中， (l, θ) 是对应于角动量和粒子角位置的共轭变量，我们使用惯性动量为1的单位，周期T1的时间单位， $k \cos \theta$ 是施加在每个踢脚处的扭矩。相应的

哈密顿方程可以很容易地在一个周期内积分，从而为每个 $t=n\tau$ 给出频闪图，称为标准图：

$$\begin{aligned}\theta_{n+1} &= \theta_n + L_n \\ L_{n+1} &= L_n + K \sin \theta_{n+1}\end{aligned}$$

对量子踢转转子（qkr）的第一次数值研究产生了一个令人惊讶的结果：在 $k > 5$ 的各态历经的状态下，在动量空间中观察到经典的扩散，但随后观察到动能 $L^2/2$ 恒定值饱和。同时，观察到动量分布从高斯变为指数 $\exp(-m/\xi)$ ，这暗示了与安德森局部化的关系。这种现象是称为“动力局部化”，即动量空间的局部化。（lel:残存连接？）

Graham等人首先建议使用冷原子来观察动力学局部化。在这种情况下，原子将辐射视为正弦机械势（称为光学势或偶极势），影响其质心运动。如果辐射是周期性脉冲（ $T_1 \sim 30 \mu s$ ），脉冲非常短，则相应的哈密顿量为

$$H_{akr} = \frac{p^2}{2\mu} + K \cos x \sum_n \delta(t - n\tau) \quad (149)$$

由于光学势的空间周期性，准正电子是一个运动常数。因此，仅对由 $2\hbar K_L$ 分隔的动量分量进行踢，因此，从定义明确的动量 p_0 开始，在值 $(m + \beta)2\hbar K_L$ 处产生离散的动量分布，其中 $m \in \mathbb{Z}$ 和 β 是 p_0 的小数部分。这种“展开的”踢转转子与哈密顿量148所描述的“标准”转子之间的主要区别是准正电子族的存在。每个准正电子族映射到特定的具有给定无序的安德森特征向量。这在许多情况下非常有用，因为在相应的Anderson模型中，对Quasimomentum的平均值（也就是说，从初始状态开始，其宽度与Brillouin区域宽度 $2\hbar K_L$ 相当）等于平均过无序。然而，在其他情况下，这种平均值可以隐藏有趣的效果。通常，冷原子（即，在磁光阱中冷却的原子）的动量分布填充了一些布里渊区，但超冷原子（例如，玻色-爱因斯坦凝聚体）的动量分布只能是布里渊区的一小部分。一般来说，原子间的相互作用可以忽略不计，如果不是从一开始，在几次撞击之后，由于在动量空间中的扩散，空间密度会很快稀释。实验观测到的动量分布如图3所示。

我们对qkr的实验实现由一个质量为 m 的原子组成，在很短的时间内，以时间间隔 τ 周期性地施加一维正弦势的一系列短脉冲（踢）。利用两个独立的反向传播激光束形成的波长为 kL 的远失谐激光驻波（sw），实现了电位的测量。对于 T_1 ，脉冲可被视为狄拉克函数，因此描述原子运动的哈密顿量为：

$$\hat{H}(t) = \frac{\hat{p}^2}{2} + K \cos(\hat{x} - a(t)) \sum_n \delta(t - n\tau) \quad (150)$$

Anderson 模型

0.16 散射与态射

散射对应态射，所以可以用范畴论描述

复数的意义

虚数单位 i ，如果结合 $i^2 = -1$ 来看，几何上 i 实际代表了旋转，实轴上的点 a 乘上 i 等于将该点旋转到了纵轴上，再乘一次 i 又转到了实轴上，相当于把点 a 旋转了180度，由此可见， i 代表了逆时针方向90度的旋转。这里顺便再说说卷积，

卷积作为一个数学概念，卷积对数学带来的影响是深刻而巨大的，它不仅促使积分方程理论的产生，也给代数带来了重要影响。

作为物理世界的“结构”，时间序列信号可以通过在频谱空间的处理解谱。也就是说， $t-\omega$ 的共轭。同理（物理世界的“结构”），空间序列排列信号可以通过在波数空间的处理解谱。这样说法太抽象，显微镜的原理就是这样的机制。所谓的物理世界的“结构”是指 $x-k(p)$ 的共轭性。这个共轭性在量子力学里通过 h 作用量子的耦合，为人们演出了极为精彩的微观物质世界，也成了今天半导体产业的基石。 $t-\omega$ ， $x-p$ 的共轭性，不单是物理的结构，同时也是数学的结构。

因此，看到一台仪器，它工作的数学模型一定是卷积形式。如何在现实中实现数学上的卷积就是仪器学。这个仪器的最高级就是数码计算机的“图像（信号）处理”了。比如X射线的衍射，实际上是晶体中分子（原子）排列的 $k(p)$ 分布图。通过计算机解析这个衍射图就可以得到分子的结构。井市中所说的“分子生物学”，说白了就是通过X光衍射解析蛋白质的（巨）大分子结构。

将 $h(t)$ 平移一个时间量 τ 成为 $h(t-\tau)$ ，乘在 τ 处的函数值 $f(\tau)$ ，取遍所有 τ ，将乘积累积起来，就得到卷积的结果。后一种解释其实是最老的解释：叠加原理。

0.17 人工智能发展报告

[548]人工智能发展报告光费马路径（Fermat path）理论.

0.18 卷积与量子信息物理

0.18.1 量子测量的纠缠退相干模型—von Neumann正交投影模型

[557]为了测量量子系统可观测量 A ，要建立“测量哈密顿量 H_i ”。通过它接通了被测子系统的可观测量 A 和测量仪器的指示器量 X 。在 A - X 之间建立起的这种耦合，在可观测量 A 本征态和指示器的可区分态之间产生了量子纠缠。正是这种量子纠缠，使我们能够通过测量指示器变数 x 制备力学量 A 数值 a_i 的本征态。

设初始时刻子系统处于 \hat{A} 的一个叠加态 $|\varphi\rangle = \sum_i c_i |a_i\rangle$ ，而指示器波包有关变量的状态为 $|\psi(x)\rangle$ 。合成的大系统处于尚未纠缠的可分离态

$$|\varphi\rangle \otimes |\psi(x)\rangle = \sum_i c_i |a_i\rangle \otimes |\psi(x)\rangle$$

由于 H_i 中 \hat{A} 和（影响指示器位置的） \hat{P} 耦合

$$H_i = \lambda \hat{A} \hat{P}$$

在 t 时刻后，这个量子态将从可分离态演化成为纠缠态

$$U(t) \sum_i c_i |a_i\rangle \otimes |\psi(x)\rangle = \sum_i c_i |a_i\rangle \otimes |\psi(x - \lambda a_i t)\rangle$$

$$x_i = x - \lambda a_i t$$

这是因为 $U(t)$ 先作用到 $|a_i\rangle$ 态上, 取出本征值后, 成为对仪器态的一个平移算符, 将其变数平移。这就造成了量子纠缠, 使 \hat{X} 和 \hat{A} 的测量值 x 和 a 关联起来。如果对位置变量 x 的观测精度足以分辨全部本征值 a , 那就实现了: 通过测量导致可区分态坍缩并测到 x_i , 再导致被测态向相应本征态的关联坍缩, 最后得到相应本征态 $|a_i\rangle$ 和相关数值 a_i

例: 电子自旋的测量, 测量1/2自旋粒子的 σ_z 。粒子磁矩 $\mu\sigma$, 让它沿 x 轴飞行并通过沿 z 轴的非均匀的磁场 $B_z = \lambda z$, 它和磁场之间的耦合项—“测量哈密顿量”为

$$H' = -\lambda\mu z\sigma_z$$

这里是可观测测量 σ_z 和位置 z 相互耦合。由于 H' 中含 z , 不同 z 值处附加能数值不同, 这产生一个力

$$\hat{F} = -\frac{\partial H}{\partial z} = \lambda\mu\sigma_z$$

力沿 z 轴。这个力在 z 方向给电子以冲量 $\hat{P}_z = \hat{F}t$, 使它偏转产生 z 方向的位移, 这就是说, 耦合作用使指示器(z 方向的位置)偏转。通过观察粒子向 z 轴正向、反向的偏转距离 $\ell \approx \frac{\langle \hat{F} \rangle}{m} t^2$, (正交)投影出粒子自旋态 $|+z\rangle$ 或 $|-z\rangle$ 。

因为

$$U(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\lambda\mu z\sigma_z t} = e^{\frac{i}{\hbar}tz\hat{F}} = e^{\frac{i}{\hbar}z\hat{P}_z}$$

所以

$$\begin{aligned} & e^{\frac{i}{\hbar}z\hat{P}_z}((\alpha|+\rangle + \beta|-\rangle) \otimes |0\rangle) \\ &= (\alpha|+\rangle \otimes e^{\frac{i}{\hbar}\ell\hat{P}_z}|0\rangle + \beta|-\rangle \otimes e^{-\frac{i}{\hbar}\ell\hat{P}_z}|0\rangle) \\ &= \alpha|+\rangle \otimes |\ell\rangle + \beta|-\rangle \otimes |-\ell\rangle \end{aligned}$$

这里已将力产生位移的作用转化为以动量算符作为生成元的平移算符。

所以卷积计算就是一种量子测量。

0.18.2 波矢测量的卷积方法

设初始时刻待测的图像信号(光子态矢量) $I(x)$, 处于波矢 \hat{k} 的一个叠加态

$$|I(x)\rangle = \sum_k c_k |a_k\rangle$$

神经网络系统测量仪器设初始时刻为 $H(x)$, 合成的大系统处于尚未纠缠的可分离态

$$|\psi(0)\rangle = |I\rangle \otimes |H(x)\rangle$$

演化算符 $U(t)$

$$\begin{aligned} U(t) &= e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \\ |\psi(t)\rangle &= U(t)|\psi(0)\rangle \\ &= e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} |I(x)\rangle \otimes |H(x)\rangle \\ &= e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \sum_k c_k |a_k\rangle \otimes |H(x)\rangle \end{aligned}$$

投影算符

$$\hat{P}(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| = e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}|\psi(0)\rangle\langle\psi(0)|e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}$$

其中H为“测量哈密顿量”，通过它接通粒子的可观测量和神经网络仪器指示器,演化为纠缠态，在k-x间建立了耦合，即进行测量在可观测量k的本征态和仪器指示器的可区分态之间产生了量子纠缠态 $|\psi(t)\rangle$

测量哈密顿量 H_j 中，可观测量k与神经网络H(x)耦合,其相互作用可以看着是动量为k的输入波与神经网络神经元的散射，动量跃迁到k'，并使神经元位移x'。

=====

设初始时刻神经网络系统

$$|\varphi(0)\rangle = \varphi_1(x_1)\dots\varphi_2(x_n)\dots\varphi_j(x_N)$$

其中 $\varphi_i(x_m)$ 是单粒子态，因为神经网络系统它们是近独立神经元组成，因此可以用单粒子态描写，且各粒子是可分辨的，无相互作用，可以用单粒子波函数来构成系统波函数[558]，而输入状态为 $|I(x)\rangle$ 。合成的大系统处于尚未纠缠的可分离态

$$|\psi(0)\rangle = |\varphi(0)\rangle \otimes |I(x)\rangle = \varphi_1(x_1)\dots\varphi_2(x_n)\dots\varphi_j(x_N) \otimes |I(x)\rangle$$

演化算符 $U(t)$

$$\begin{aligned} U(t) &= e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \\ |\psi(t)\rangle &= U(t)|\psi(0)\rangle \\ &= e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \varphi_1(x_1)\dots\varphi_2(x_n)\dots\varphi_j(x_N) \otimes |I(x)\rangle \end{aligned}$$

投影算符

$$\hat{P}(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| = e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}|\psi(0)\rangle\langle\psi(0)|e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}$$

其中H为“测量哈密顿量”，通过它接通神经网络系统的可观测量和输入信号演化为纠缠态，或进行测量产生量子纠缠态 $|\psi(t)\rangle$

因为神经网络系统它们是近独立神经元组成，因此可以用单粒子态 $\varphi(x)$ 描写，且各粒子是可分辨的，无相互作用，任意j粒子，在 \hat{k} 表象中

$$\varphi(x_j) = \sum_k c(k)e^{ik_jx_j}$$

测量哈密顿量 H_j 中，可观测量p与信号I(x)耦合,其相互作用可以看着是输入信号I(x)受神经网络神经元的散射，

$$\begin{aligned} \frac{dp_j}{dt} &= -\frac{\partial H_j}{\partial x_j} \\ \hat{p}_j &= -\frac{\partial \hat{H}_j}{\partial x_j}t \end{aligned}$$

进行测量产生量子纠缠态

$$\begin{aligned} U(t)|\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})\rangle \otimes |I(x)\rangle &= e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}(u_{k_1}(x_1)u_{k_2}(x_2)\dots u_{k_N}(x_N) \otimes |I(x)\rangle) \\ &\equiv \int h(\xi)I(x-\xi)d\xi \end{aligned}$$

卷积层的功能是对输入数据进行特征提取，其内部包含多个卷积核，组成卷积核的每个元素都对应一个权重系数和一个偏差量（bias vector），类似于一个前馈神经网络的神经元（neuron）。卷积层内每个神经元都与前一层中位置接近的区域的多个神经元相连，区域的大小取决于卷积核的大小，在文献中被称为“感受野（receptive field）”，其含义可类比视觉皮层细胞的感受野^[2]。卷积核在工作时，会有规律地扫过输入特征，在感受野内对输入特征做矩阵元素乘法求和并叠加偏差量^[1]：

$$\mathbf{Z}^{l+1}(i, j) = [\mathbf{Z}^l \otimes \mathbf{w}^{l+1}](i, j) + \mathbf{b} = \sum_{k=1}^{K_l} \sum_{x=1}^f \sum_{y=1}^f [\mathbf{Z}_k^l(s_0 i + x, s_0 j + y) \mathbf{w}_k^{l+1}(x, y)] + \mathbf{b}$$

$$(i, j) \in \{0, 1, \dots, L_{l+1}\} \quad L_{l+1} = \frac{L_l + 2p - f}{s_0} + 1$$

式中的求和部分等价于求解一次交叉相关（cross-correlation）。 \mathbf{b} 为偏差量， \mathbf{Z}^l 和 \mathbf{Z}^{l+1} 表示第 $l + 1$ 层的卷积输入和输出，也被称为特征图（feature map）， L_{l+1} 为 \mathbf{Z}_{l+1} 的尺寸，这里假设特征图长宽相同。 $\mathbf{Z}(i, j)$ 对应特征图的像素， K 为特征图的通道数， f 、 s_0 和 p 是卷积层参数，对应卷积核大小、卷积步长（stride）和填充（padding）层数^[1]。

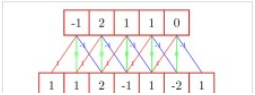


Figure 2: 卷积神经网络

其中 $\varphi_i(x_m)$ 是单粒子态，因为神经网络系统它们是近独立神经元组成，因此可以用单粒子态描写，且各粒子是可分辨的，无相互作用，可以用单粒子波函数来构成系统波函数[558] 处于 \hat{k} 态 $u_k(x) = e^{ikx}$ 整个神经网络的波函数为

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = u_{k_1}(x_1)u_{k_2}(x_2)...u_{k_N}(x_N)$$

其中 $k_1, k_2, ..$ 代表单粒子的波矢量。

平均值

$$\langle u_{k_1}(x_1)u_{k_2}(x_2)...u_{k_N}(x_N) \otimes I(x) | e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} | (u_{k_1}(x_1)u_{k_2}(x_2)...u_{k_N}(x_N) \otimes I(x)) \rangle \equiv \int h(\xi)I(x-\xi)d\xi$$

或

$$U(t) = e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} = e^{i(x_1\hat{k}_1+...+x_N\hat{k}_N)}$$

所以

$$U(t)|\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})\rangle \otimes |I(x)\rangle = u_{k_1}(x_1)u_{k_2}(x_2)...u_{k_N}(x_N) \otimes e^{i(x_1\hat{k}_1+...+x_N\hat{k}_N)}I(x)$$

$$=$$

$$e^{ix'\hat{k}}\sum_k c_k|e^{ikx}\rangle \otimes |K(X)\rangle = \sum_k c_k|e^{ixk}\rangle \otimes e^{ix\hat{k}}|K(X)\rangle = \sum_k c_k|e^{ixk}\rangle \otimes |K(X-x)\rangle$$

百科<https://baike.baidu.com/item/卷积神经网络>