

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

فهرست مطالب

صفحه

عنوان

فهرست مطالب.....هشت

چکیده.....۱

فصل اول: مقدمه

۱-۱- مقدمه.....۲

فصل دوم: روش تقریبی وردشی

۱-۲- مقدمه.....۶

۲-۲- اصول وردشی.....۷

۲-۳- اصل وردشی در مکانیک کوانتومی.....۷

فصل سوم: معرفی توابع پایه ی بی اسپلین

۱-۳- مقدمه.....۱۱

۲-۳- درون یابی.....۱۲

۳-۳- بی اسپلین ها.....۱۳

۳-۴- بررسی ویژگی های محاسباتی دسته پایه های بی اسپلین در فیزیک.....۱۹

فصل چهارم: بررسی روش کلی حل مسائل

۱-۴- مقدمه.....۲۱

۲-۴- دیدگاه کلی.....۲۲

۳-۴- اتم هیدروژن در قفس کروی سخت.....۲۳

۴-۴- اتم هیدروژن در قفس بیضی وار.....۲۶

۴-۴-۱- دستگاه مختصات بیضی وار.....۲۶

۴-۴-۲- محاسبه ی هامیلتونی مسئله.....۲۸

۴-۴-۵- یون H_2^+ در قفس بیضی وار.....۳۴

فصل پنجم: بررسی جنبه‌های محاسباتی مسائل

- ۱-۵- مقدمه ۳۶
- ۲-۵- تشکیل ماتریس‌ها ۳۶
- ۳-۵- روش انتگرال گیری عددی گاوسی ۳۷
- ۴-۵- انتخاب گره‌ها و نقاط شبکه ۴۱
- ۵-۵- بررسی مسئله‌ی ویژه مقداری تعمیم یافته ۴۴

فصل ششم: بررسی نتایج

- ۱-۶- مقدمه ۴۸
- ۲-۶- بررسی نتایج مربوط به اتم هیدروژن در قفس کروی ۴۹
- ۳-۶- بررسی نتایج مربوط به اتم هیدروژن در قفس بیضی وار ۶۹
- ۴-۶- بررسی نتایج مربوط به یون H_2^+ در قفس بیضی وار ۸۵
- ۵-۶- نتیجه گیری و پیشنهادات ۹۷

- فهرست مراجع ۹۸

فصل اول

مقدمه

در سال ۱۹۲۵ با ورود نظریه‌ی مکانیک کوانتومی به دنیای علم، بسیاری از ابهامات موجود در مفاهیم تئوری و پدیده‌های تجربی برطرف گشت و تحولی اساسی در مسیر علم بوجود آمد. از جمله دستاوردهای این نظریه، موفقیت آن در زمینه‌ی توجیه موفق رفتار اتم‌ها بود. این نظریه قادر بود بر خلاف مدل‌های موجود در آن زمان، ویژگی‌های اتم‌ها را حتی در حالتی که تحت تأثیر پیوندهای مولکولی قرار دارند نیز، به خوبی توضیح دهد. اهمیت این امر با توجه به این مطلب که در جهان واقعیت نمی‌توان ذرات را کاملاً آزاد در نظر گرفت، روشن می‌گردد.

اتمی که تحت تأثیر نیروهای خارجی قرار گرفته باشد، رفتارش نسبت به حالتی که آزاد است، تغییر می‌کند. خواصی چون تغییر در اوربیتال‌های اتمی، ترازهای انرژی، پر شدن پوسته‌های الکترونی، قطبش پذیری خطی و غیرخطی، فوتیونش/جذب فوتونی و ساختار فوق ریز [۱]. بدیهی است که بررسی این تغییرات، توجه‌ی بسیاری از محققان علوم فیزیک و شیمی را به خود جلب نموده است.

در سال ۱۹۳۷ میشل^۱ و همکارانش [۲]، در حالی که تأثیر فشار بر اتم هیدروژن را مطالعه می‌نمودند، برای اولین بار به این فکر افتادند که برای ساده‌سازی حل مسئله، از مدل اتم در قفس استفاده نمایند. آن‌ها فرض کردند که هر اتم هیدروژن موجود در سیستم تحت فشار، درون کره‌ای حبس شده که ابعاد آن، متناسب با فشار کل وارد بر اتم مورد نظر باشد. با این فرض مفید آن‌ها توانستند مطالعه‌ی یک سیستم بس ذره‌ای (که شامل کل گاز هیدروژن تحت فشار بود) را با بررسی یک تک ذره به عنوان نماینده‌ی کل سیستم جایگزین نمایند. این الگو کمک زیادی به ساده‌سازی حل مسئله می‌نمود. اهمیت این مدل ساده برای بررسی سیستم‌های محدود شده، بعدها در زمینه‌های مختلف علمی آشکار گردید.

سیستم‌های کوانتومی محدود شده طی یک دهه‌ی اخیر، به طور چشمگیری مورد توجه قرار گرفته‌اند [۴، ۳، ۱]. این سیستم‌ها در فیزیک حالت جامد به خوبی شناخته شده‌اند. مواردی چون مطالعه‌ی چاه‌های کوانتومی، سیم‌های کوانتومی و نقاط کوانتومی [۵-۸]. نانوکریستال‌ها با توجه به ابعاد و رفتاری که از خود نشان می‌دهند، به عنوان نمونه‌ای واقعی از سیستم‌های کوانتومی محدود شده به شمار می‌آیند. در فیزیک اتمی مواردی چون اتم‌های محبوس شده در دام زئولیت، اتم‌هایی که در قفس‌های فولرن گیر افتاده‌اند و نانو حباب‌های تشکیل شده در اطراف ذرات خارجی در محیط هلیوم مایع تحت فشار بالا در دیواره‌های راکتورهای اتمی [۹-۱۶]، موارد خوبی از سیستم‌های کوانتومی محدود شده به شمار می‌آیند. مدل قفس همچنین برای طراحی قسمت‌های درونی سیاره‌های گول‌پیکر مشتری و زحل [۱۷]، به کار گرفته شده است. برای بررسی هر یک از این مسائل، شکل خاصی از مدل را متناسب با شرایط مسئله باید در نظر گرفت.

با گذشت زمان، مدل قفس پس از اعمال تغییراتی چون جابجا کردن مکان ذره از مرکز قفس، تغییر شکل قفس و نفوذپذیری یا عدم نفوذپذیری آن، کارایی زیادی پیدا نمود. اخیراً پژوهشگران موفق شده‌اند با سنتز شیمیایی کلوئیدی، نانوکریستال‌هایی با اشکال مختلف، از قبیل بیضی‌گون، میله، خدنگ، قطره و چهارپایه‌ای^۲ بسازند [۱۸-۲۰]. این امر توجه به شکل قفس را، علاوه بر اندازه‌ی آن، در مطالعات جدید گنجانده است. همچنین ذره‌ی حبس شده می‌تواند هر جایی داخل قفس واقع شود. موارد زیادی یافت شده که اتم میهمان خارج از مرکز قفس واقع شده، برای مثال در بخشنده‌های هیدروژن یا یون‌های بخشنده‌ای که خارج از مرکز چاه کوانتومی یا نقطه‌ی کوانتومی واقع شده‌اند [۲۱-۲۵].

برای بررسی سیستم‌های کوانتومی محدود شده، به دلیل عدم وجود راه حل تحلیلی دقیق، باید از روش‌های عددی استفاده نمائیم. یکی از انواع روش‌های عددی، استفاده از دسته پایه‌ها^۳ برای حل معادله‌ی شرودینگر می‌باشد. از جمله این دسته پایه‌ها می‌توان به توابع پایه‌ی بی‌اسپلاین^۴ اشاره نمود.

در سال‌های اخیر، یکی از مهم‌ترین پیشرفت‌ها در زمینه‌ی فیزیک محاسباتی اتمی و مولکولی، ورود دسته پایه‌های بی‌اسپلاین در محاسبه‌ی دینامیک و ساختار اتم‌ها و مولکول‌ها بوده است. بی‌اسپلاین‌ها از حدود ۶۰ سال پیش در ریاضیات محاسباتی راه یافته‌اند، ولی کاربرد آن‌ها در فیزیک از حدود سال ۱۹۹۰، هم‌زمان با ظهور رایانه‌های قدرتمند، رشد چشمگیری یافته است. با توجه به موارد متعدد استفاده از این توابع و نتایج مطلوبی که در هر مورد بدست آمده، می‌توان به کارایی بالای آن‌ها پی برد [۲۶].

در این پایان‌نامه ما ابتدا از توابع بی‌اسپلاین برای حل مسئله‌ی اتم هیدروژن در قفس کروی استفاده نمودیم. فرض کردیم هسته در مرکز کره به حالت سکون قرار گرفته باشد. با تشکیل ماتریس‌های هم‌پوشانی و هامیلتونی، و سپس حل مسئله‌ی ویژه مقاداری تعمیم یافته، ترازهای انرژی و توابع موج سیستم را برای مقادیر تکانه‌ی زاویه‌ای مختلف بدست آوردیم. نتایج نشان می‌دهد که اعمال محدودیت بر سیستم، باعث جابجایی ترازهای انرژی به سمت بالا می‌شود. همچنین با افزایش محدودیت، فشردگی تابع موج به سمت مرکز قفس بیشتر می‌گردد. با توجه به دقت نسبتاً خوب نتایج مربوط به مسئله‌ی اتم هیدروژن در قفس کروی و اطمینان از درستی روش کلی حل مسئله، در مرحله‌ی بعد به بررسی هم‌زمان دو مسئله‌ی اتم هیدروژن و یون H_2^+ در قفس بیضی‌وار پرداختیم. روش حل این دو مسئله تا حدود زیادی به یکدیگر شبیه است. برای اتم هیدروژن، فرض کردیم هسته در نقطه‌ی دلخواهی روی قطر بزرگ بیضی‌وار به حالت سکون قرار گرفته باشد. در مورد یون H_2^+ نیز، هسته‌ها به طور متقارن نسبت به مرکز بیضی‌وار، در نقاط دلخواهی روی قطر بزرگ آن به حالت سکون در نظر گرفته شده‌اند. این دو مسئله برای حالت $m=0$ بررسی شده‌اند (m عدد کوانتومی مربوط به مؤلفه‌ی سوم تکانه‌ی زاویه‌ای است). همان‌طور که مشاهده خواهیم نمود، با توجه به دو بعدی بودن، و قرارگیری هسته‌ها روی محور بزرگ بیضی‌وار و در فاصله‌ای دلخواه نسبت به مرکز قفس، این دو مسئله نسبت به حالت قبل پیچیده‌تر می‌شوند. ما سرانجام ترازهای انرژی و توابع موج را برای هر دو مسئله بدست آوردیم، ولی این نتایج از دقت خوبی برخوردار نبودند. دلیل اصلی این امر آن است که ما در این دو مسئله، با انتگرال‌هایی مواجه شدیم که مقدار دقیق آن‌ها به سادگی قابل محاسبه نبود. برای افزایش دقت نتایج، از راه‌کارهای مختلفی استفاده نمودیم که نسبتاً مؤثر بودند ولی موفق نشدیم به حد دقت مورد انتظار، دست پیدا کنیم. به نظر می‌رسد که با بهینه‌سازی روش انتگرال‌گیری، بتوان به نتایج مطلوبی دست یافت. مقایسه‌ی نتایج بدست آمده با سایر

نتایج موجود و بررسی همگرایی جواب‌ها، از جمله تدابیری است که برای سنجش صحت نتایج به کار گرفته شده است.

ما برای حل این مسائل از روش تقریبی وردشی استفاده نموده‌ایم، بنابراین فصل دوم به بیان مختصر این روش اختصاص یافته است. فصل سوم به معرفی توابع پایه‌ی بی‌اسپلاین می‌پردازد. بررسی کلی مسائل ذکر شده و روابطی که مورد استفاده قرار گرفته‌اند را می‌توان در فصل چهارم یافت. جزئیات مربوط به برخی از روش‌های محاسباتی عددی به کار گرفته شده، در فصل پنجم ذکر شده است. نتایج مسئله، بررسی و ارزیابی آن‌ها، در فصل ششم آمده است.

فصل دوم

روش تقریبی وردشی

۲-۱- مقدمه

تعداد مسائلی که در فیزیک کوانتومی به طور دقیق قابل حل می‌باشند، با توجه به گستردگی و تنوع آن‌ها، نسبتاً محدود است. سیستم‌های ایده‌آلی چون ذره در چاه پتانسیل با کف صاف، سد پتانسیل تخت و یا نوسانگر هماهنگ ساده. روش حل این تعداد اندک از مسائل و نتایج حاصل از آن‌ها، الگوی مناسبی برای حالت‌های پیچیده‌تر به شمار می‌آید. در بررسی این مسائل، برای آنکه حل ساده و دقیقی داشته باشیم، حالت‌های ایده‌آل در نظر گرفته شده‌اند، در حالی که برای تحلیل یک سیستم فیزیکی واقعی، معمولاً با شرایط و روابط پیچیده‌تری روبرو هستیم. در این موارد امکان ارائه‌ی حل دقیقی برای سیستم مورد نظر وجود ندارد، بنابراین به روش‌های تقریبی روی می‌آوریم.

از جمله روش‌های تقریبی که در فیزیک کوانتومی مورد استفاده قرار می‌گیرد، روش اختلال است. این روش در شرایطی کاربرد دارد که مسئله‌ی مورد نظر ما به اندازه‌ی کافی به یکی از انواع مسائلی که به طور دقیق قابل حل است، نزدیک باشد. در این شرایط، تفاوت اندک بین دو سیستم به صورت یک اختلال در نظر گرفته می‌شود و با استفاده از روابط موجود برای سیستم‌های مختل شده، می‌توان مسئله را حل نمود.

استفاده از روش اختلال معمولاً به جواب‌های نسبتاً دقیقی منجر می‌گردد ولی گاهی با شرایطی روبرو می‌شویم که مسئله‌ی مورد نظر ما، شبیه به هیچ یک از مسائل حل شده نیست. در این گونه موارد از روشی با کارایی نسبتاً خوب، به نام روش وردشی استفاده می‌شود. در این فصل قصد داریم به بیان این روش بپردازیم.

۲-۲-۲- اصول وردشی

"اصول وردشی" تعیری کلی از قوانین فیزیکی ارائه می‌نمایند. گفته می‌شود اصول وردشی از عالی‌ترین فرمول‌سازی‌های ریاضیاتی هستند.

این بیان که یک سیستم فیزیکی به گونه‌ای نمایان می‌شود یا عمل می‌کند که برخی از توابع وابسته به آن، کمینه یا بیشینه باشند، اغلب نقطه‌ی شروع تحقیقات تئوری است و باعث یافتن روابط تقریبی بین عوامل فیزیکی می‌شود. مثلاً گفته می‌شود که بار الکتریکی در یک شبکه طوری توزیع می‌شود که انرژی تلف شده توسط گرمایش ژول، کمترین مقدار ممکن را داشته باشد. این یک توصیف ساده و سراسر از شار جریان الکتریکی است که یک تعداد از حالت‌های خاص را در بر می‌گیرد، بدون این که از هیچ گونه ریاضیات پیچیده‌ای استفاده نماید. بنابراین اصول وردشی، پدیده‌های فیزیکی را به صورت مسائل بهینه‌سازی نسبت به قیدها در می‌آورند. این اصول در شاخه‌های مختلف فیزیک حضور دارند [۲۷].

۲-۳-۲- اصل وردشی در مکانیک کوانتومی

در مکانیک کوانتومی یک حالت فیزیکی با یک بردار حالت، در یک فضای برداری نمایش داده می‌شود. دیراک این بردار را کت نامید. ما آن را با $|\alpha\rangle$ نشان می‌دهیم. به عنوان یک اصل موضوع، این کت حاوی تمام اطلاعات یک حالت فیزیکی است. یکی از اصول موضوعه‌ی فیزیک آن است که $|\alpha\rangle$ و $c|\alpha\rangle$ (در اینجا c عددی مختلط و غیر صفر است)، حالت فیزیکی مشابهی را نشان می‌دهند، به بیان دیگر در فضای برداری فقط جهت اهمیت دارد. در این فضای برداری، یک مشاهده‌پذیر نظیر مؤلفه‌های تکانه یا اسپین، می‌تواند با یک عملگر مانند A نشان داده شود. در حالت کلی یک عملگر از سمت چپ روی یک کت عمل می‌کند و نتیجه همچنان یک کت است.

$$A \cdot |a\rangle = a|a\rangle \quad (۲-۳-۱)$$

a در این رابطه عددی ثابت است. به طور کلی همواره $A|a\rangle$ برابر با حاصل ضرب یک ثابت در $|a\rangle$ نیست، مگر اینکه $|a\rangle$ ویژه کت A باشد. عددی که از تأثیر A روی یک ویژه کت بدست می‌آید، ویژه مقدار عملگر A متناظر با آن ویژه کت می‌باشد. حالت فیزیکی متناظر با یک ویژه کت، ویژه حالت نامیده می‌شود.

اگر فرض کنیم که ویژه‌کت‌های بهنجار عملگری هرمیتی مانند A ، یک مجموعه‌ی کامل را تشکیل می‌دهند، در این صورت می‌توان هر کت دلخواه و معلوم $|\alpha\rangle$ در فضای کت را بر حسب ویژه‌کت‌های A بسط داد.

$$|\alpha\rangle = \sum_a c_a |a\rangle \quad (2-3-2)$$

به بیان دیگر، از ویژه‌کت‌های A به عنوان ویژه‌کت‌های پایه استفاده می‌شود، درست به همان صورتی که از یک مجموعه بردارهای یک‌ه‌ی متعامد به عنوان بردارهای پایه‌ی فضای اقلیدسی استفاده می‌شود، ولی باید در نظر داشت که برای بسیاری از سیستم‌های فیزیکی، بعد فضای حالت بی‌نهایت قابل شمارش است.

حال اگر هامیلتونی H را به عنوان مشاهده‌پذیر در نظر بگیریم و ویژه‌حالت‌های H را با ψ_i نشان دهیم خواهیم داشت:

$$H|\psi_i\rangle = E_i|\psi_i\rangle \quad (3-3-2)$$

در این جا E_i ویژه مقدار انرژی متناظر با ویژه حالت ψ_i است. برای حالتی که مقدار انرژی حالت پایه E_0 را می‌خواهیم لازم است کت حالت پایه‌ی $|\psi_0\rangle$ را داشته باشیم:

$$H|\psi_0\rangle = E_0|\psi_0\rangle \quad (4-3-2)$$

در این حالت E_0 مقدار دقیق انرژی حالت پایه را می‌دهد.

اگر ویژه‌کت‌های دقیق H را نداشته باشیم، از کت آزمایشی $|\bar{\psi}\rangle$ که سعی می‌شود تا حد امکان نظیر کت حالت پایه‌ی واقعی $|\psi_0\rangle$ باشد، برای پیدا کردن انرژی حالت پایه‌ی E_0 استفاده می‌نمائیم. مقدار انتظاری \bar{H} را به این صورت تعریف می‌کنیم:

$$\bar{H} = \frac{\langle \bar{\psi} | H | \bar{\psi} \rangle}{\langle \bar{\psi} | \bar{\psi} \rangle} \quad (5-3-2)$$

مخرج غیر یک، به این دلیل است که احتمال بهنجار نبودن $|\bar{\psi}\rangle$ نیز در نظر گرفته شده است. می‌خواهیم ثابت کنیم که:

$$\bar{H} \geq E_0 \quad (6-3-2)$$

این قضیه بدان معنی است که می‌توان با در نظر گرفتن انواع مختلف $|\bar{\psi}\rangle$ ، کران بالایی برای E_0 بدست آورد.

اثبات قضیه:

هر چند ویژه کت‌های هامیلتونی H را نمی‌دانیم، ولی می‌توان تصور کرد که $|\bar{\psi}\rangle$ به شکل زیر بسط داده می‌شود:

$$|\bar{\psi}\rangle = \sum_{i=0}^{\infty} |\psi_i\rangle \langle \psi_i | \bar{\psi}\rangle \quad (۷-۳-۲)$$

که در آن $|\psi_i\rangle$ ها، ویژه کت‌های دقیق H هستند.

با استفاده از $E_i = E_i + E_0 - E_0$ در محاسبه‌ی \bar{H} توسط رابطه‌ی (۵-۳-۲)، قضیه‌ی (۶-۳-۲) حاصل می‌شود.

$$\bar{H} = \frac{\sum_{i=0}^{\infty} |\langle \psi_i | \bar{\psi}\rangle|^2 E_i}{\sum_{i=0}^{\infty} |\langle \psi_i | \bar{\psi}\rangle|^2} = \frac{\sum_{i=0}^{\infty} |\langle \psi_i | \bar{\psi}\rangle|^2 (E_i - E_0)}{\sum_{i=0}^{\infty} |\langle \psi_i | \bar{\psi}\rangle|^2} + E_0 \geq E_0 \quad (۸-۳-۲)$$

در این مرحله از این واقعیت استفاده شده که $E_i - E_0$ لزوماً مثبت است. مشخص است که علامت تساوی زمانی برقرار می‌شود که $|\bar{\psi}\rangle$ ، دقیقاً بر $|\psi_0\rangle$ منطبق باشد، یعنی اگر همه‌ی ضرایب $\langle \psi_i | \bar{\psi}\rangle$ برای $i \neq 0$ ، صفر باشند.

این قضیه واقعاً قدرتمند است، زیرا \bar{H} کران بالایی برای انرژی حالت پایه می‌دهد. به علاوه یک کت آزمایشی نسبتاً نامرغوب می‌تواند تخمین نسبتاً خوبی از انرژی حالت پایه داشته باشد، زیرا اگر داشته باشیم:

$$\langle \psi_i | \bar{\psi}\rangle \sim O(\varepsilon) \quad \text{for: } i \neq 0 \quad (۹-۳-۲)$$

آنگاه از رابطه‌ی (۸-۳-۲)، داریم:

$$\bar{H} - E_0 \sim O(\varepsilon^2) \quad (۱۰-۳-۲)$$

یعنی اگر تفاوت کت آزمایشی و کت واقعی از مرتبه‌ی ε باشد، اختلاف انرژی حالت پایه‌ی بدست آمده با مقدار واقعی آن از مرتبه‌ی ε^2 خواهد بود.

برای حل مسائلی که در آن‌ها با بیش از یک تابع آزمون اولیه سروکار داریم، باید ابتدا توابع آزمون اولیه‌ی مناسب را برای دستگاه مورد نظرمان انتخاب کنیم، سپس با استفاده از توابع انتخابی آرایه‌ی هامیلتونی را تشکیل دهیم. اگر آرایه‌ی حاصل قطری بود، به این معنی است که پایه‌های انتخابی در واقع خود پایه‌های سیستم مورد نظرمان هستند، چون آرایه‌ی هر عملگری در پایه‌های خودش قطری است. اما اگر ماتریس حاصله قطری نبود، باید آن را قطری کنیم تا ویژه بردارها و ویژه مقدارهایش بدست آیند. کمترین ویژه مقداری که از این روش بدست می‌آید، حد بالای انرژی حالت پایه را می‌دهد. همچنین سایر اعداد به ترتیب مقدارشان می‌توانند تخمینی باشند از انرژی اولین

حالت‌های برانگیخته [۲۸ و ۲۹]. ما از این روش برای بدست آوردن ویژه مقادیر انرژی سیستم‌های محدود شده‌ی مورد نظرمان استفاده نموده‌ایم، بنابراین بحث‌های کاربردی‌تر مربوط به آن را در فصول بعد خواهیم آورد.

فصل سوم

معرفی توابع پایه‌ی بی‌اسپلاین

۳-۱- مقدمه

در جنگ جهانی دوم برای طراحی بدنه‌ی هواپیماها از نوار لاستیکی انعطاف‌پذیری به نام اسپلاین استفاده می‌نمودند. این روش قبلاً برای طراحی بدنه‌ی کشتی‌ها به کار گرفته می‌شد. روش کار به این صورت بود که وزنه‌هایی را در نقاط مورد نظر روی مدل قرار می‌دادند و سپس نوار اسپلاین را از آن‌ها می‌گذراندند. هر وزنه جهت‌گیری و کشش معینی به نوار اعمال می‌کرد. تراکم وزنه‌ها و نحوه‌ی چینش آن‌ها در طراحی مهم بود. سپس مقدار نیروی کشش اعمال شده بر هر قسمت از نوار و جهت‌گیری آن را مورد بررسی قرار می‌دادند. بدین ترتیب فشار وارد بر هر نقطه از بدنه‌ی سیستم، و واکنش آن را برای شرایط مختلف ارزیابی می‌نمودند. قالب ریاضی این مدل، توابع چند جمله‌ای قطعه‌ای^۱ روانی به نام اسپلاین‌ها هستند. اسپلاین‌ها به طور کلی، بیشتر برای درونیابی^۲ توابع مورد استفاده قرار می‌گیرند.

ما در این فصل ابتدا مطالبی راجع به درونیابی توابع خواهیم آورد. سپس کاربردها و ویژگی‌های توابع بی‌اسپلاین را ذکر می‌نمائیم و در آخرین بخش، به بیان کلی جایگاه این توابع در فیزیک محاسباتی خواهیم پرداخت.

1. Piecewise polynomial
2. interpolation

۳-۲- درونیابی

گاهی اوقات ما مقدار یک تابع $f(x)$ را در یک دسته از نقاط x_1, x_2, \dots, x_n (با $x_1 < x_2 < \dots < x_n$) می دانیم ولی شکل دقیق تابع را نداریم. این مقادیر معلوم، ممکن است توسط برخی اندازه گیری های فیزیکی، یا محاسبات عددی طولانی بدست آمده باشند. در این موارد اگر بخواهیم مقدار تابع را در نقطه ی دلخواه x (که بین x_1 و x_n واقع شده است) بدست آوریم، باید از طرح های درونیابی استفاده نماییم. طرح های درونیابی باید تابع مورد نظر را بین نقاط معلوم، توسط یکی از اشکال تابعی مورد قبول، مدل سازی نمایند. این اشکال باید آن قدر کلی باشند که بتوانند انواع مختلفی از توابع را تخمین بزنند. متداول ترین این توابع چندجمله ای ها هستند. توابع گویا^۳ (خارج قسمت چندجمله ای ها) نیز در این زمینه بسیار مفید می باشند. توابع مثلثاتی سینوسی و کسینوسی، درونیابی مثلثاتی و روش های فوریه ی وابسته به آن را ایجاد می نمایند [۳۰].

پیش از ظهور رایانه ها که محاسبات عددی با دست انجام می گرفت، برای درونیابی توابع از چندجمله ای ها استفاده می نمودند، چون کار کردن با آن ها ساده تر بود. درونیابی یک تابع نامشخص توسط چندجمله ای ها به این صورت است که اگر مقدار تابع را در n نقطه ی معین داشته باشیم:

$$(x_1, f(x_1)), (x_2, f(x_2)), \dots, (x_n, f(x_n))$$

می توان آن را با یک چندجمله ای درجه ی $n-1$ درونیابی نمود:

$$F(x) = a_0 + a_1x^1 + a_2x^2 + \dots + a_{n-1}x^{n-1} \quad (1-2-3)$$

در این حالت می توان مقدار تابع را در هر نقطه ی دلخواهی، با جایگذاری آن نقطه در رابطه ی درونیابی شده، بدست آورد. در رابطه ی فوق ضرایب a_i مجهول هستند که با جایگذاری نقاط معلوم، مقدار آن ها مشخص می شود.

این روش ساده ترین و ابتدائی ترین راه برای درونیابی توابع است که اشکالاتی نیز دارد. در ظاهر انتظار می رود که با افزایش درجه ی چندجمله ای تابع دقیق تری بدست آید، ولی در عمل افزایش درجه باعث ایجاد مشکلاتی چون بروز نوسانات نامطلوب در شکل تابع خواهد شد. اگر درجه ی چندجمله ای از حد معینی بیشتر شود، نه تنها دقت کار بالاتر نمی رود، بلکه کاهش نیز می یابد. از طرف دیگر هر چه دامنه ی تابع کوچک تر شود، دقت تابع درونیابی شده بیشتر می شود. بنابراین برای افزایش دقت، بازه ی اصلی $[a, b]$ را به زیر بازه های $[r_i, r_{i+1}]$ تقسیم نمودند، به طوری که:

$$a = r_1 < r_2 < \dots < r_n = b \quad (2-2-3)$$

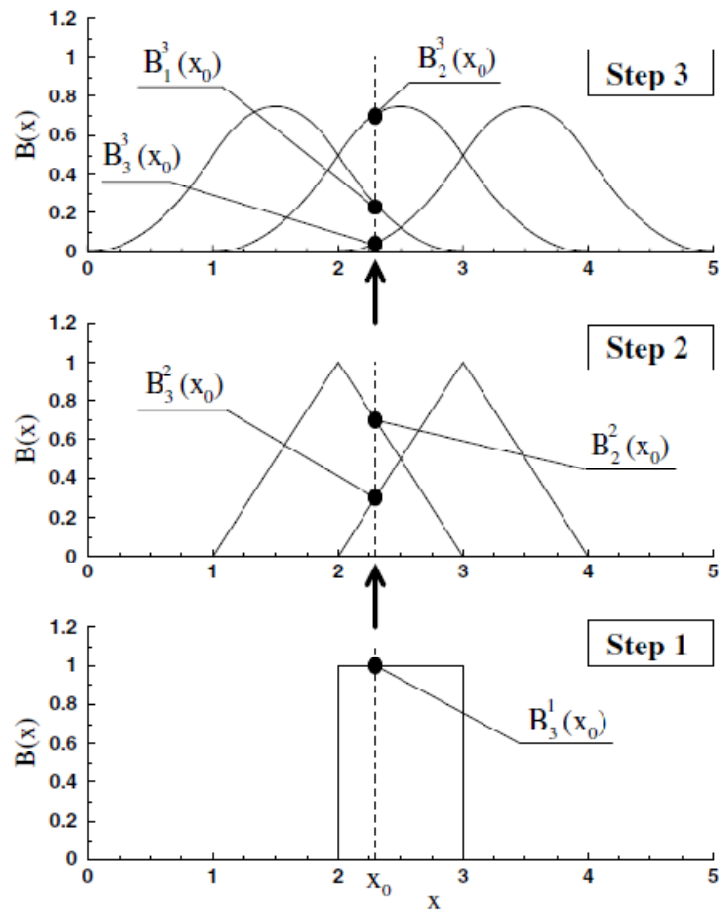
روی هر یک از این زیر بازه‌ها، یک چندجمله‌ای با درجه‌ای نسبتاً کم تعیین نمودند، به نحوی که هر زیر بازه مستقل از سایر زیر بازه‌ها باشد. این تکه‌های چندجمله‌ای با یکدیگر به طور روان ترکیب می‌شوند (یعنی تابع و چند تا از مشتقاتش در نقاط اتصال پیوستگی داشته باشند) و تابع اصلی را می‌سازند. یک چنین تابعی را اسپلاین می‌نامند. با روی کار آمدن رایانه‌ها استفاده از این توابع برای درونیابی، به جای چند جمله‌ای‌ها متداول گشت و اسپلاین‌ها اهمیت ویژه‌ای پیدا نمودند.

۳-۳- بی اسپلاین‌ها

بی اسپلاین‌ها نوع خاصی از توابع چند جمله‌ای قطعه‌ای هستند که به طور رسمی برای اولین بار در ریاضیات، توسط شوئنبرگ^۴ در سال ۱۹۴۶ معرفی شدند [۳۱]. نام بی اسپلاین نیز در سال ۱۹۶۷، توسط همین نویسنده برای این توابع به کار برده شد [۳۲]. حرف بی، برای پایه^۵ است که شوئنبرگ از آن استفاده نمود. بی اسپلاین‌ها، پایه‌های فضا را تشکیل می‌دهند. آن‌ها اسپلاین‌هایی با حداقل زیربری^۶ هستند و بنابراین جایگزیدگی بسیار بالایی دارند. یک بی اسپلاین $B_i(x)$ توسط مرتبه‌ی $k > 0$ و یک دسته از $k+1$ گره^۷ $\{t_i, \dots, t_{i+k}\}$ تعیین می‌شود، به طوری که $t_i < t_{i+k}$. در واقع گره‌ها همان نقاط اتصال تکه‌های چندجمله‌ای هستند که در بخش قبل به آن اشاره شد. ویژگی‌های این توابع که بیشتر آن‌ها در شکل (۳-۱) نیز آشکار است، به صورت زیر می‌باشد:

- (۱) $B_i(x)$ یک تابع چندجمله‌ای قطعه‌ای از مرتبه‌ی k ، روی بازه‌ی $[t_i, t_{i+k}]$ است.
- (۲) نیازی نیست گره‌ها هم فاصله باشند و شکل $B(x)$ با تغییر گره‌ها به طور روان تغییر می‌کند.
- (۳) روی هر بازه‌ی (t_i, t_{i+k}) دقیقاً k بی اسپلاین غیر صفر وجود دارد.
- (۴) بی اسپلاین‌ها به صورت $\sum_i B_i(x) = 1$ روی بازه‌ی $[t_k, t_n]$ ، نرمال شده‌اند (n تعداد توابع پایه‌ی بی اسپلاین است).
- (۵) به طور کلی برای تقریب توابع بهتر است که از بی اسپلاین‌هایی با مرتبه‌ی بالا استفاده شود. با توجه به پایداری عددی^۸ و خطای گرد کردن، معمولاً مرتبه از ۷ تا ۱۰ در نظر گرفته می‌شود.

4. Shoenberg
 5. Basis
 6. Minimal support
 7. Knot sequence
 8. Numerical stability



شکل (۱-۳) ارزیابی پایه‌های بی‌اسپلاین تا مرتبه‌ی ۳ به طور بازگشتی با رشته گرهی $\{0, 1, 2, 3, 4, 5\}$ که در محدوده‌ی $2 < x < 3$ غیر صفر هستند. هر دسته توسط مجموعه‌ی قبل از خود، با به کارگیری رابطه‌ی بازگشتی (۱-۳-۳) بدست آمده است. مشاهده می‌شود که در هر نقطه‌ی دلخواه x ، می‌توان k بی‌اسپلاین غیر صفر بدست آورد که جمع تمامی آن‌ها با یکدیگر در آن نقطه، برابر با یک می‌شود.

(۶) بی اسپلاین ها توسط رابطه‌ی بازگشتی بور^۹ به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$B_{i,k}(r) = \frac{r - t_i}{t_{i+k-1} - t_i} B_{i,k-1}(r) + \frac{t_{i+k} - r}{t_{i+k} - t_{i+1}} B_{i+1,k-1}(r) \quad (1-3-3)$$

$$B_{i,1}(r) = \begin{cases} 1 & ; \text{for } t_i \leq r < t_{i+1} \\ 0 & ; \text{otherwise} \end{cases} \quad (2-3-3)$$

در این رابطه، k مرتبه‌ی بی اسپلاین (درجه بعلاوه‌ی یک) است، t_i ها گره‌ها هستند، و r متغیر تابع است. با توجه به رابطه، وابستگی مقدار بی اسپلاین‌ها به مرتبه و مقادیر گره‌ها، کاملاً مشخص است. شکل (۱-۳) استفاده از رابطه‌ی بازگشتی بور را نشان می‌دهد. در این شکل نماد $B_i^k(x_0)$ بیانگر تابع پایه‌ی بی اسپلاین i ام مرتبه‌ی k در نقطه‌ی x_0 می‌باشد. مشاهده می‌شود که با افزایش مرتبه‌ی بی اسپلاین، بر روانی تابع افزوده می‌شود.

(۷) گره‌ها نقاطی هستند که به طور یکنواخت یا غیریکنواخت و غیر کاهشی، روی بازه‌ی خاصی در امتداد محور r توزیع شده‌اند، به طوری که:

$$t_1 \leq t_2 \leq t_3 \leq \dots \leq t_{n+k}$$

n تعداد توابع پایه‌ی بی اسپلاین است.

(۸) اگر تعداد گره‌ها m باشد و تعداد توابع پایه‌ی مرتبه‌ی k ، n باشد، رابطه‌ی $m=n+k$ بین این اعداد برقرار خواهد بود.

(۹) $B_{i,k}(r)$ یک چندجمله‌ای از درجه‌ی $k-1$ است که فقط در بازه‌ی $t_i \leq r < t_{i+k}$ غیر صفر می‌باشد. این ویژگی جایگزیدگی بالای بی اسپلاین‌ها را نشان می‌دهد. به طور کلی هر نوع تغییری در توزیع سایر گره‌ها، اثری روی مقدار این تابع نخواهد داشت.

(۱۰) یک تابع دلخواه $f(r)$ را می‌توان به شکل زیر بر حسب پایه‌های بی اسپلاین بسط داد:

$$f(r) = \sum_i c_i B_{i,k}(r) \quad (3-3-3)$$

در اینجا c_i ها ضرایب بسط هستند و $B_{i,k}(r)$ ها نقش توابع وزن را دارند.

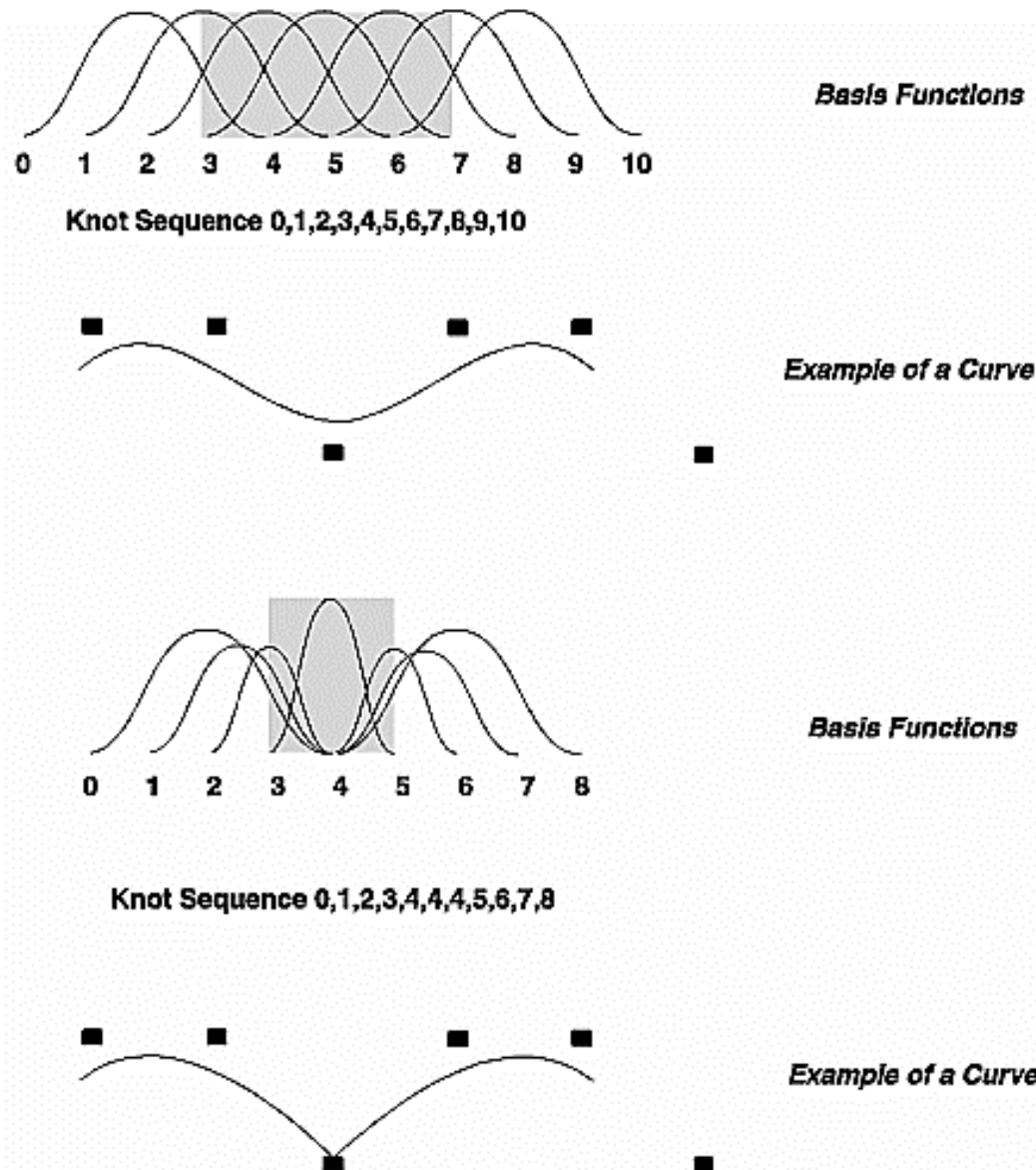
یکی از مزایای بی اسپلاین‌ها آن است که برای چینش گره‌ها آزادی عمل زیادی داریم. گره‌ها می‌توانند در فواصل مختلفی نسبت به یکدیگر واقع شوند و حتی می‌توانند روی یکدیگر قرار بگیرند. البته با قرار گرفتن هر گره روی گره‌ی مجاور خود، درجه‌ی پیوستگی تابع اسپلاین در آن نقطه، یک واحد کاهش می‌یابد (شکل (۲-۳)).

- پیوستگی تابع در هر نقطه برابر است با $c^{k-(s+1)}$ ، s تعداد گره‌هایی است که در نقطه‌ی مورد نظر روی یکدیگر واقع شده‌اند.
- C^0 بیانگر حالتی است که در آن تعدد گره‌ها^۱ به اندازه‌ی درجه‌ی بی‌اسپلین باشد. در این حالت تنها خود تابع در نقطه‌ی مورد نظر پیوسته است و تمامی مشتقاتش در آن نقطه ناپیوسته هستند. به همین صورت می‌توان گفت C^1 حالتی را نشان می‌دهد که در آن تابع و مشتق اول آن پیوسته هستند.
- با روی هم قرار دادن گره‌ها در یک نقطه، می‌توان تعداد توابع پایه را در آن نقطه افزایش داد.
- اگر تعدد گره‌ها در یک نقطه به اندازه‌ی مرتبه‌ی توابع بی‌اسپلین باشد، پیوستگی خود تابع نیز در آن نقطه از بین می‌رود و تابع قطع خواهد شد.

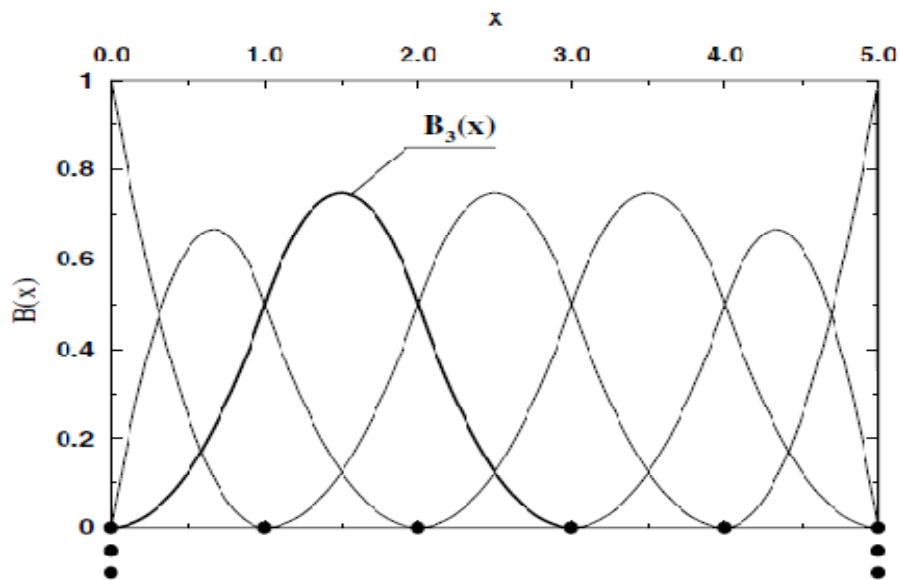
هر بی‌اسپلین به طور یکتا، توسط مرتبه و بردار گره‌هایش قابل تعیین است. شکل (۳-۳) دسته‌ی کامل بی‌اسپلین‌های مرتبه‌ی سه در بازه‌ی $[0,5]$ را نشان می‌دهد. در این شکل پایه‌ی $B_3(x)$ به طور مشخصی نشان داده شده است. همان‌طوری که انتظار داریم، مشاهده می‌شود که این پایه تنها روی بازه‌ی $[u_3, u_{3+3=6}]$ غیر صفر است. همچنین در ابتدا و انتهای بازه، به دلیل قرار گرفتن سه گره بر روی هم پیوستگی تابع و مشتقات آن کاملاً از بین رفته، و تابع قطع شده است (مرتبه‌ی پایه‌ها سه است).

شکل (۳-۴) مثلث بازگشتی بور را نشان می‌دهد. از روی این شکل می‌توان قلمرو هر پایه با مرتبه‌ی معین را، روی گره‌ها تشخیص داد. بالعکس می‌توان برای هر بازه‌ی گره‌ی توابعی را یافت که بر روی آن بازه، مقدار غیر صفر دارند.

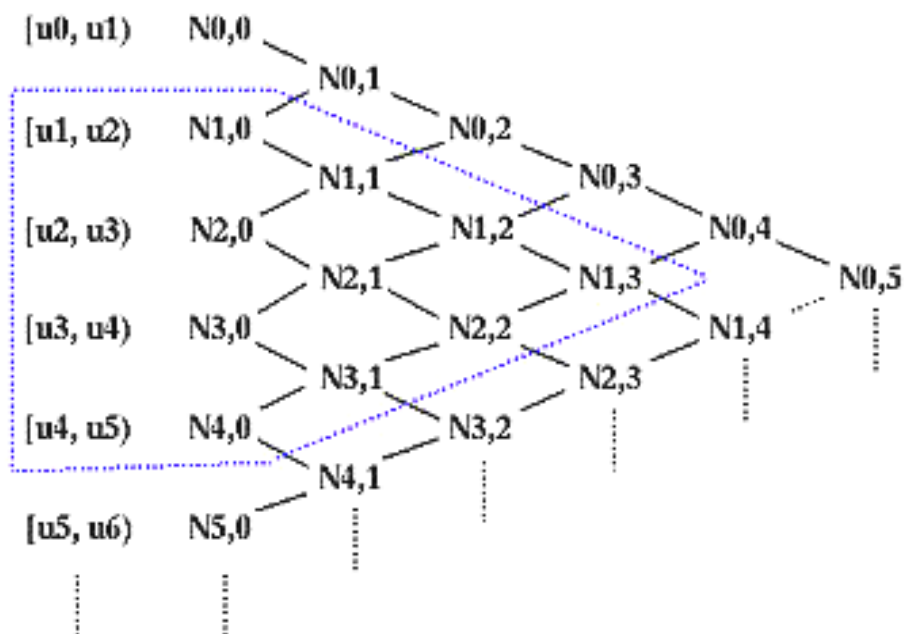
توابع بی‌اسپلین با ویژگی‌های ذکر شده، قابلیت‌های فراوانی دارند که با گذشت زمان همواره بر کاربردهای این توابع در زمینه‌های مختلف علمی و فنی افزوده شده است. امروزه بی‌اسپلین‌ها به طور گسترده‌ای در نقشه‌کشی، طراحی هواپیماها، ساخت فیلم و انیمیشن، عکاسی، گرافیک کامپیوتری و حل انواع مختلف مسائل علمی به کار گرفته می‌شوند.



شکل (۲-۳) استفاده از تکنیک تعدد گره‌ها. (از بالا به پایین) شکل اول توابع پایه‌ی بی‌اسپلاین مرتبه‌ی ۴ را نشان می‌دهد که با رشته‌ی گرهی یکنواخت $\{0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10\}$ ، با یکدیگر ترکیب شده‌اند و منحنی شکل دوم را تشکیل داده‌اند. شکل سوم همان توابع پایه را نشان می‌دهد که این بار تعدد گرهی سه‌تایی در نقطه‌ی ۴ دارند و از ترکیب این پایه‌ها منحنی شکل چهارم تشکیل می‌شود. با مقایسه‌ی شکل‌های دوم و چهارم و توجه به نقطه‌ی تیز تشکیل شده در منحنی آخر، می‌توان به برخی از ویژگی‌های تکنیک تعدد گره‌ها پی برد.



شکل (۳-۳) دسته‌ی کامل بی‌اسپلاین‌های مرتبه‌ی ۳، با رشته‌ی گره‌ی $\{0, 0, 0, 1, 2, 3, 4, 5, 5, 5\}$. گره‌ها با دایره‌های توپر نشان داده شده‌اند.



شکل (۳-۴) مثلث بازگشتی بور. u_i ها نشان دهنده‌ی گره‌ها هستند. توابع بی‌اسپلاین با N_{ij} نشان داده شده‌اند. اندیس اول شماره‌ی هر پایه را مشخص می‌کند و اندیس دوم بیانگر درجه‌ی آن است.