A robbanáshatár-görbe közelítése, spline-ok

Munkánkban az izoterm és izobár robbanáshatár-görbékhez egyparaméteres síkgörbék interpolációs közelítésére volt szükség. A síkbeli paraméteres görbék közelítéséhez általában nem csak a függvény egy pontsorozata áll rendelkezésre, hanem gyakran ismertek a differenciálhatóságra illetve közvetlenül a deriváltakra vonatkozó feltételek is. A robbanáshatár-görbék közelítésénél kiindulhattunk abból, hogy a közelítendő függvény sima, görbülete folytonos valamint a kezdő és végpontokban ismert vagy az érintő egyenes iránya, vagy az érintő kör görbülete. Az irodalom szerint a fenti szokásos feltételeket legjobban a spline-függvények elégítik ki [3, 4]. Az alábbiakban megadjuk a spline-függvények általános, valamint a munkánk során alkalmazott speciális spline-ok definícióját.

Harmadfokú egyváltozós spline-függvények

Adott az Splinepont1.jpg pontsorozat, továbbá kezdő és végpontfeltételként a kezdő és a végpontokban az illeszkedő görbének a meredeksége: m1 és mn. Harmadfokú egyváltozós interpoláló spline-függvénynek nevezzük azt a teljes [x1, xn] intervallumon kétszer folytonosan differenciálható függvényt, melyre teljesülnek az alábbiak:

Spline1.jpg (1)

Az (1) összefüggéshez hasonlóan megadható a harmadfokú spline a második deriváltakra (görbületre) vonatkozó kezdő és végpont-feltételekkel is.

Harmadfokú, paraméteres spline görbék

Az Splinepont2.jpg pontsorozatot, ahol az *x*1, *x*2, …, *x*n sorozatra nem szükséges, hogy a szigorú monotonitás teljesüljön, leggyakrabban az *s* ívhossz szerint paraméterezik, ahol

Spline2.jpg (2)

A (2) összefüggésből látható, hogy az *si* sorozat szigorúan monoton növekvő. A paraméteres spline-t vektorként adják meg, úgy, hogy a megfelelő – érintőre vagy görbületre vonatkozó – kezdő és végpont-feltételekkel mind az *(si*,*xi)* abszcissza sorozatra, mind az *(si*,*yi)* ordináta sorozatra az előzőek szerinti kétszer folytonosan deriválható, szakaszonként harmadfokú függvényt illesztenek.

Előnye a paraméteres görbéknek az *f(x)* alakú függvény görbékkel szemben, hogy az *xi* abszcissza értékeknek nem kell szigorúan monoton sorozatot alkotniuk. Így a paraméteres görbékkel akár hurkok, spirálok, vagy tetszőleges C'' síkgörbék is leírhatók.

A harmadfokú, paraméteres spline síkgörbe pontjainak számításához gyakran használják az úgynevezett spline-tartópontokon alapuló DeCasteljau algoritmust, melyet a 3. ábra szemléltet.

3. ábra: Az s=1/3 paraméter-értékhez tartozó spline-pont szerkesztése

A 3. ábra *P0, P1, P2, P3* pontjai a spline-tartópontok, melyek közül az első és az utolsó a spline-görbére illeszkedik. A két középső pont csupán azokhoz a segéd-szakaszokhoz szükséges, amelyek megfelelő (s) arányú osztópontjai 3 lépésben meghatározzák a spline görbe azon pontját, amely az adott s paraméter értékhez tartozik.