**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации**

федеральное государственное автономное образовательное учреждение

высшего образования

**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ**

**ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Инженерная школа природных ресурсов

Направление подготовки Химическая технология

Отделение химической инженерии

**Интерполирование экспериментальных данных**

**Лабораторная работа по дисциплине «Углубленный курс информатики»**

Выполнил студент гр. 2Д91 А.В. Радионов

(Подпись)

\_\_\_\_\_ \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ 2020 г.

Отчет принят:

Преподаватель

Доцент ОХИ ИШПР, к.т.н. В.А. Чузлов

(Подпись)

\_\_\_\_\_ \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ 2020 г.

**Цель:** изучить и использовать для составления программ в Паскале интерполирование экспериментальных данных.

**Теоретическая часть.**

В инженерных расчетах часто требуется установить функцию f(x) для всех значений хотрезка [a, b], если известны ее значения в некотором конечном числе точек этого отрезка. Одним из способов приближения функции является интерполяция.

Задача *интерполяции* может возникнуть в практике инженера:

– при интерполировании табличных данных;

– при получении функциональной зависимости по экспериментальным данным, представленным в табличной форме;

– при замене сложной с вычислительной точки зрения функции более простой зависимостью;

– при дифференцировании и интегрировании.

Простейшим и часто используемым видом интерполяции является линейная интерполяция. Она состоит в том, что заданные точки xi, yiпри i = 0, 1, 2, ..., n соединяются прямолинейными отрезками и функцию f(x) можно приближенно представить ломаной с вершинами в данных точках.

Уравнения каждого отрезка ломаной в общем случае разные. Поскольку имеется n интервалов (xi – 1, xi), то для каждого из них в качестве уравнения интерполяционного многочлена используется уравнение прямой, проходящей через две точки.

Задача интерполирования заключается в том, чтобы построить такую интерполирующую функцию, которая бы проходила через все узлы интерполирования.

*Интерполяционный полином Лагранжа*

Это полином, минимальной степени, принимающий данные значения в данном наборе точек. Для *n+1* пар чисел (*x0, y0*), (*x1, y1*)…(*xn, yn*), где все *xi* различны, существует единственный полином *L(x)* степени *n*, для которого *L(xi)=yi*.

Формулу Лагранжа можно представить в виде

где *Li*(*x*) – множитель Лагранжа, x – текущая точка для интерполирования.

**Практическая часть.**

**Задание 1**

Используя интерполяционный полином Лагранжа определите значения переменной Y при следующих значениях переменной X:

1. X1 = 0.85
2. X2 = 1.27

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Х | 0.71 | 0.81 | 0.91 | 1.01 | 1.11 | 1.21 | 1.31 | 1.41 | 1.51 | 1.61 |
| У | 2.03 | 2.25 | 2.48 | 2.75 | 3.03 | 3.35 | 3.71 | 4.10 | 4.53 | 5.00 |

**Программная реализация:**

**program** lab\_11\_1;

**const**

n = 10;

**type**

arr = **array** [1..n] **of** real;

**var**

x, y: arr;

y1, y2: real;

i: integer;

f: text;

**function** lagrange(x, y: arr; x1: real): real;

**var**

i, j: integer;

p, sum: real;

**begin**

sum := 0;

**for** i := 1 **to** n **do**

**begin**

p := 1;

**for** j := 1 **to** n **do**

**begin**

**if** j <> i **then**

p := p \* (x1 - x[j]) / (x[i] - x[j])

**end**;

sum := sum + y[i] \* p;

**end**;

result := sum

**end**;

**begin**

assign(f, 'data.txt');

reset(f);

**for** i := 1 **to** n **do**

readln(f, x[i], y[i]);

y1 := lagrange(x, y, 0.85);

y2 := lagrange(x, y, 1.27);

writeln(y1);

writeln(y2);

close(f)

**end**.

**Ответ:**

2.3310298112

3.56235135488

**Задание 2**

Дана зависимость теплоемкости от температуры:

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| ***T*, К** | **100** | **200** | **300** | **400** | **500** | **600** |
| ***Cp*, Дж/(моль∙К)** | **6,95** | **7,05** | **7,17** | **7,25** | **7,46** | **7,69** |

С использованием формулы Лагранжа определить значение теплоемкости при изменении Т в интервале от 100 до 600 с шагом 50.

Исходные данные считать из файла. Результаты вывести в файл. Построить график в Excel по исходным данным и результатам интерполяции.

**Программная реализация:**

**program** lab\_11\_2;

**const**

n = 6;

**type**

arr = **array** [1..n] **of** real;

**var**

x, y: arr;

y1, y2: real;

i: integer;

f, g: text;

**function** lagrange(x, y: arr; x1: real): real;

**var**

i, j: integer;

p, sum: real;

**begin**

sum := 0;

**for** i := 1 **to** n **do**

**begin**

p := 1;

**for** j := 1 **to** n **do**

**begin**

**if** j <> i **then**

p := p \* (x1 - x[j]) / (x[i] - x[j])

**end**;

sum := sum + y[i] \* p;

**end**;

result := sum

**end**;

**begin**

assign(f, 'data1.txt');

reset(f);

**for** i := 1 **to** n **do**

readln(f, x[i], y[i]);

close(f);

assign(g, 'ответы.txt');

rewrite(g);

**for** i := 1 **to** n **do**

**begin**

y1 := lagrange(x, y, x[i]);

**if** x[i] + 50 <= 600 **then** y2 := lagrange(x, y, x[i] + 50);

writeln(g, y1);

**if** x[i] + 50 <= 600 **then** writeln(g, y2);

**end**;

close(g);

**end**.

**Ответ:**

6.95

6.9708203125

7.05

7.1226171875

7.17

7.2037890625

7.25

7.3330859375

7.46

7.6042578125

7.69

**Задание 3**

Дана табличная зависимость энтальпии и энтропии от температуры:

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **Т, К** | **100** | **200** | **300** | **400** | **500** | **600** | **700** |
| **ΔН, кДж/моль** | -20.52 | -10.5 | -1.25 | 5.32 | 12.39 | 24.67 | 32.48 |
| **ΔS, Дж/моль** | 20.48 | 21.71 | 22.85 | 23.65 | 24.52 | 26.03 | 27.00 |

Определите значение свободной энергии Гиббса (ΔG, кДж/моль) при изменении температуры в интервале от 150 до 650 К с шагом 100.

Для определения значений ΔН и ΔS при данных температурах используйте полином Лагранжа.

**Программная реализация:**

**program** lab\_11\_3;

**const**

n = 6;

**type**

arr = **array** [1..n] **of** real;

**var**

x, y, z: arr;

g, y1, z1: real;

i: integer;

f: text;

**function** lagrange(x, y: arr; x1: real): real;

**var**

i, j: integer;

p, sum: real;

**begin**

sum := 0;

**for** i := 1 **to** n **do**

**begin**

p := 1;

**for** j := 1 **to** n **do**

**begin**

**if** j <> i **then**

p := p \* (x1 - x[j]) / (x[i] - x[j])

**end**;

sum := sum + y[i] \* p;

**end**;

result := sum

**end**;

**begin**

assign(f, 'data2.txt');

reset(f);

**for** i := 1 **to** n **do**

readln(f, x[i], y[i], z[i]);

close(f);

**for** i := 1 **to** n **do**

**begin**

y1 := lagrange(x, y, x[i] + 50);

z1 := lagrange(x, z, x[i] + 50);

g := y1 - (x[i] + 50) \* z1 \* 0.001;

writeln(x[i] + 50, g:13:2);

**end**;

**end**.

**Ответ:**

150 -18.99

250 -11.08

350 -5.90

450 -2.33

550 3.78

650 16.15

**Выводы:**

В ходе работы мною изучено интерполирование экспериментальных данных. Это отработано на практике – написаны программы на языке Pascal, а также построен график в Excel по исходным данным и результатам интерполяции.