**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. 2Д93 Э.Ч. Жабанова

(Подпись)

21.05.2020 г.

Отчет принят:

Преподаватель

доцент ОХИ ИШПР, к.т.н. В.А. Чузлов

(Подпись)

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

Томск 2020 г.

**Цель работы:** изучить теорию, выполнить задания, составив программы для интерполирования экспериментальных данных.

**Теоретическая часть**

**Интерполя́ция**, **интерполи́рование** — в вычислительной математике способ нахождения промежуточных значений величины по имеющемуся дискретному набору известных значений. Термин «интерполяция» впервые употребил Джон Валлис в своём трактате «Арифметика бесконечных» (1656).

В функциональном анализе интерполяция линейных операторов представляет собой раздел, рассматривающий банаховы пространства как элементы некоторой категории.

Многим из тех, кто сталкивается с научными и инженерными расчётами, часто приходится оперировать наборами значений, полученных опытным путём или методом случайной выборки. Как правило, на основании этих наборов требуется построить функцию, на которую могли бы с высокой точностью попадать другие получаемые значения. Такая задача называется аппроксимацией. Интерполяцией называют такую разновидность аппроксимации, при которой кривая построенной функции проходит точно через имеющиеся точки данных.

Существует также близкая к интерполяции задача, которая заключается в аппроксимации какой-либо сложной функции другой, более простой функцией. Если некоторая функция слишком сложна для производительных вычислений, можно попытаться вычислить её значение в нескольких точках, а по ним построить, то есть интерполировать, более простую функцию. Разумеется, использование упрощенной функции не позволяет получить такие же точные результаты, какие давала бы первоначальная функция. Но в некоторых классах задач достигнутый выигрыш в простоте и скорости вычислений может перевесить получаемую погрешность в результатах.

Следует также упомянуть и совершенно другую разновидность математической интерполяции, известную под названием «интерполяция операторов». К классическим работам по интерполяции операторов относятся теорема Рисса — Торина и теорема Марцинкевича, являющиеся основой для множества других работ.

**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** lab11\_1;

**const**

n = 10;

**type**

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

**var**

x, y: arr;

x1, 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, 'lab11.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(y1:4:4, y2:10:4);

close(f)

**end**.

**Ответ:** 2.3310 3.5624

**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** lab11\_2;

**const**

n = 6;

**type**

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

**var**

x, y: arr;

x1, y1: real;

i, T: 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, 'laba112.txt');

reset(f);

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

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

T := 100;

**repeat**

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

writeln(T, y1:10:2);

T := T + 50;

**until** T > 600;

close(f)

**end**.

**Ответ:**

100 6.95

150 6.97

200 7.05

250 7.12

300 7.17

350 7.20

400 7.25

450 7.33

500 7.46

550 7.60

600 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 |
| Δ S, 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** lab11\_3;

**const**

n = 7;

**type**

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

**var**

x, y, z: arr;

x1, y1, T, y2, dG: 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, 'laba113.txt');

reset(f);

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

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

T := 150;

**repeat**

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

y2 := lagrange(x, z, T);

writeln(T, y1:10:4, y2:10:4);

dG:=y1-T\*(y2\*1e-3);

writeln('dG=',dG:4:4);

T:=T+100;

**until** T > 650;

close(f)

**end**.

**Ответ:**

150 -15.5758 21.0801

dG=-18.7378

250 -5.5829 22.3186

dG=-11.1625

350 2.3092 23.2834

dG=-5.8400

450 8.4078 24.0289

dG=-2.4052

550 17.8754 25.1957

dG=4.0178

650 30.9896 26.8058

dG=13.5659

**Вывод**

В ходе работы я изучила теорию, а также составила программы для интерполяции экспериментальных данных. Во втором задании был выполнен график сравнения исходных данных и данных интерполяции.