**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 С.Э. Забанова

(Подпись)

\_\_\_22\_\_ \_\_\_\_май\_\_\_\_\_ 2020 г.

Отчет принят:

Преподаватель

доцент ОХИ ИШПР, к.т.н. В.А. Чузлов

(Подпись)

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

Томск 2020 г.

**Цель работы:** Научиться составлять программы для интерполирования экспериментальных данных.

**Теоретическая часть**

***Интерполяция***  (от лат. *interpolation*– изменение, переделка) – это приближенное или точное нахождение какой-либо величины по известным отдельным значениям этой величины, т.е. восстановление (точное или приближенное) функции (см. выше) по ее нескольким известным значениям.

Задача интерполирования заключается в том, чтобы построить такую интерполирующую функцию, которая бы проходила через все узлы 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** LB\_11\_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, '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(y1:4:4, 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** LB\_11\_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, 'LB\_112.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** LB\_11\_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, 'LB\_113.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

**Выводы**

В ходе работы была изучена теория и составлены программы для интерполяции экспериментальных данных.