

Pracownia metod numerycznych w chemii, ćwiczenie nr 2.

Celem ćwiczenia jest zapoznanie się z interpolacją wielomianową.

Ćwiczenia

1. Korzystając z interpolacji metodą Lagrange'a, wyprowadź wzór na poprowadzenie prostej przez w punkty a następnie paraboli przez 3 punkty, których współrzędne są podane niżej:

Dla prostej:

$$x_1 = -1.0 \quad y_1 = 4.0$$

$$x_2 = 2.0 \quad y_2 = 1.0$$

Dla paraboli:

$$x_1 = -1.0 \quad y_1 = 0.0$$

$$x_2 = 1.0 \quad y_2 = 0.0$$

$$x_3 = 2.0 \quad y_3 = 1.0$$

Przygotować 2 pliki danych: prosta.dat, zawierający pierwszy i parabola.dat zawierający drugi zestaw punktów.

2. Narysować wykresy odpowiadające tym punktom programem gnuplot, stosując polecenia:

```
plot "prosta.dat" w linesp  
plot "parabola.dat" w linesp
```

Parabola powinna być mocno "połamana".

3. Zaprogramować w programie gnuplot wyprowadzone wielomiany interpolacyjne (odpowiednio dla pierwszego i drugiego zestawu punktów). Składnia jest podobna do fortranowskiej, np. żeby zdefiniować funkcję $f(x) = (x - 1)/(x - a)$ gdzie a jest stałą a następnie ją wykreślić dla a=-1 w przedziale [0-3] piszemy:

```
f(x,a)=(x-1)/(x-a)  
plot [0:3] f(x,-1)
```

albo prościej:

```
a=-1  
f(x)=(x-1)/(x-a)  
plot [0:3] f(x)
```

4. Narysować wykresy wielomianów interpolacyjnych z naniesionymi punktami odpowiednio z plików `prosta.dat` i `parabola.dat`. Przykładowo, jeżeli $w(x)$ będzie wielomianem interpolującym `parabola.dat` piszemy w gnuplocie:

```
plot "parabola.dat",w(x)
```

5. Powtórzyć postępowanie wykorzystując metodę interpolacji Newtona.
6. Napisać program wykonujący interpolację Lagrange'a wielomianem n -tego stopnia dla $n+1$ punktów. Skopiować z katalogu `/big/staff/adam/NUM/Cw2` pliki `gauss.dat` i `gauss10.dat` zawierające punkty policzone dla funkcji Gaussa

$$f(x) = \exp(-x^2/2)$$

w przedziale odpowiednio $[-1,1]$ i $[-3,3]$ i przeprowadzić dla nich interpolację. Wyniki wykreślić programem `gnuplot`.

Ocena ćwiczenia nr 2 z metod numerycznych:

Podaj swoją ocenę następujących aspektów ćwiczenia w skali 0 – 5:

Aspekt	Twoja ocena
Atrakcyjność tematu	
Precyzja sformułowania instrukcji	
Komunikatywność prowadzącego	
Możliwość zrealizowania w przewidzianym czasie	

Jeżeli masz inne uwagi, wpisz je poniżej.

Ocena ćwiczenia nr 2 z metod numerycznych:

Podaj swoją ocenę następujących aspektów ćwiczenia w skali 0 – 5:

Aspekt	Twoja ocena
Atrakcyjność tematu	
Precyzja sformułowania instrukcji	
Komunikatywność prowadzącego	
Możliwość zrealizowania w przewidzianym czasie	

Jeżeli masz inne uwagi, wpisz je poniżej.

Ocena ćwiczenia nr 2 z metod numerycznych:

Podaj swoją ocenę następujących aspektów ćwiczenia w skali 0 – 5:

Aspekt	Twoja ocena
Atrakcyjność tematu	
Precyzja sformułowania instrukcji	
Komunikatywność prowadzącego	
Możliwość zrealizowania w przewidzianym czasie	

Jeżeli masz inne uwagi, wpisz je poniżej.