

全国轻化工类高等学校  
工业分析专业系列教材

光谱分析法

# 实验与习题

华东冶金学院 齐齐哈尔轻工学院 浙江工学院



重庆大学出版社

全国轻化工类高等学校工业分析专业系列教材

# 光谱分析法实验与习题

主 编 郭德济

副主编 刘瑞华

重庆大学出版社

## 内 容 提 要

本书是与已出版的《光化学分析法》主教材相配套的实验教材与习题集。全书分实验、习题两大部分。实验部分有目的要求、基本原理、仪器与试剂、实验步骤、数据处理和问题讨论。内容包括光谱分析法实验概述、原子发射光谱分析法、原子吸收及原子荧光光谱分析法、X射线荧光光谱分析法和分子荧光光谱分析法等五章,共34个实验。除第一章外,每章包含实验和典型仪器的使用方法。有的实验写上注意事项。习题也分上述五章,共有60道题并附有答案。

本书搜集的实验,涉及面颇广,有冶金、轻工、化工、食品、卫生、地质和环保等。选择实验除注意到基本训练外,还注意到典型性、代表性和先进性。基本上把主教材所涉及的分析方法的内容都包括在内。因而可供光谱分析工作的人员参考。

## 光谱分析法实验与习题

主 编 郭德济

副 主 编 刘瑞华

责任编辑 刘茂林

重庆大学出版社出版发行

新华书店经

重庆印制一厂印刷

开本: 850×1168 1/32 印张: 5.875 字数: 158 千

1993年6月第1版, 1993年6月第1次印刷

印数: 1—6,000

标准书号: ISBN 7-5624-0574-3 定价: 4.50元  
TQ·12

(川)新登字020号

# 编写说明

齐齐哈尔轻工学院发起并组织全国11所轻化工类高等学校共同编写的“全国轻化工类高等学校工业分析系列教材”，自1990年3月陆续出版以来，已使用2年，受到了全国轻化工类高等学校、专业相关的高等学校、科研单位及企事业相关专业的科技工作者的欢迎。为全面培养人才，为使读者获得本专业较全面的技能，能在社会实践中发挥独立分析问题和解决问题的能力，现编写了相应于主系列教材的配套系列教材——《色谱分析法实验与习题》、《波谱分析法实验与习题》、《光谱分析法实验与习题》、《电化学分析法实验与习题》及《分析仪器实验与维护》，该系列教材属建国以来本专业创编教材，已列入轻工业部高等学校“八五”教材规划。

齐齐哈尔轻工学院、北京化工学院、郑州轻工业学院、北京轻工业学院、大连轻工学院、沈阳化工学院、杭州大学、浙江工学院、上海工程技术大学纺织学院、华东冶金学院、成都大学参加该系列教材编写工作的同志，于1991年5月在齐齐哈尔轻工学院召开了第一次全体会议，讨论了该系列教材编写大纲、编写内容、编写计划以及编写分工，并确定了本系列教材编委会，各门教材主编、副主编；重庆大学出版社编辑在会上讲述了有关出版教材的要求。

该系列教材编委会组成如下：

主任委员：史景江

副主任委员：于世林 张绍衡 郭德济

委员：张达英 刘颐荣 李寅蔚 杨国樑 刘汉成

朱艳云 王儒富 蒋孔颐 高文秦 李国童

刘瑞华

会议经过充分讨论，确立该系列教材要贯彻与主系列配套精

神，以主教材内容为纲、以补充新内容为方向，突出新实验、新技术及新方法；每册字数限在15~20万范围内。实验课题覆盖面要宽，突出代表性，必选及任选题目由各院校根据本校实际情况酌定。

此后，1992年1月在北京化工学院又召开了该系列教材的主编会议，对全系列教材初稿进行了认真的审查和讨论，提出了修改意见；明确了统一编写格式和出版要求，并返还作者重新修改。于1992年4月完成了清稿，经主编统稿审定，是年下半年陆续送交出版社出版。

参加本系列教材编写的同志都具有丰富的教学经验，绝大多数教师为教授、副教授。参编教师认真负责，精诚团结，方完成此系列教材。但是，由于任务较重，合作院校较多，错误和不足在所难免，恳请读者批评、指正。

\* \* \* \* \*

本书是配套系列教材的一种，第一章一至四节、第二章的实验八，第三章的实验八、十二、十三及附录3-2，第四章及一、二、四、五章的习题由华东冶金学院郭德济编写；第二章的实验四、五、十二及附录3-4、3-5，附表2-2-1、2-2-2，第三章实验四、五、六及第三章习题由齐齐哈尔轻工学院刘瑞华编写；第二章的实验七、九、十三，第三章实验一、二、三、七、九、十、十一及附录3-1，第五章由浙江工学院顾丽忠编写；第一章的第五节、第二章实验十一、十四及附录2-1、2-2、2-3由齐齐哈尔轻工学院杜一平编写；第二章的实验一、二、三、六、十、十五由齐齐哈尔轻工学院刘才编写。

# 目 录

|                                    |    |
|------------------------------------|----|
| <b>第一章 光谱分析法实验概述</b> .....         | 1  |
| 第一节 光谱分析法实验基本内容与目的要求 .....         | 1  |
| 第二节 光谱分析的仪器 .....                  | 2  |
| 第三节 光谱分析实验须知 .....                 | 3  |
| 第四节 光谱分析实验数据处理与表达 .....            | 4  |
| 第五节 计算机在光谱分析中的应用 .....             | 9  |
| <b>第二章 原子发射光谱分析法</b> .....         | 24 |
| 实验一 试样摄谱和感光板的暗室处理 .....            | 24 |
| 实验二 特种钢中杂质元素的光谱定性全分析 .....         | 33 |
| 实验三 纯铜中杂质元素的光谱定性分析 .....           | 34 |
| 实验四 纯铝中杂质元素的光谱定性全分析 .....          | 38 |
| 实验五 高纯石墨电极中痕量杂质元素的光谱定性分析 .....     | 40 |
| 实验六 金属镍催化剂中杂质元素光谱定性全分析 .....       | 42 |
| 实验七 矿物试样光谱定性半定量分析 .....            | 44 |
| 实验八 锡合金中铅和镉的光谱半定量分析——均称线对法 .....   | 48 |
| 实验九 乳剂特性曲线的绘制 .....                | 50 |
| 实验十 低合金钢中锰的光谱定量分析 .....            | 53 |
| 实验十一 直读光谱法测定铝合金中微量杂质元素 .....       | 56 |
| 实验十二 纯试剂中杂质元素的光谱定量分析——溶液干渣法 .....  | 58 |
| 实验十三 ICP-AES同时测定黄酒中钙、镁、铜、铁和锰 ..... | 61 |
| 实验十四 ICP-AES同时测定自来水中钙、镁和铁 .....    | 64 |
| 实验十五 火焰光度法测定土壤中水溶性钾和钠 .....        | 67 |
| 附录2-1 WP1型平面光栅摄谱仪结构及使用方法 .....     | 73 |
| 附录2-2 DV-4型真空光量计使用方法 .....         | 77 |
| 附录2-3 PSX程序扫描等离子体光谱仪使用方法 .....     | 83 |
| 附录2-4 8W型光谱投影仪 .....               | 89 |
| 附录2-5 9W型测微光度计 .....               | 91 |

|                                              |     |
|----------------------------------------------|-----|
| <b>第三章 原子吸收及原子荧光光谱分析法</b>                    | 101 |
| 实验一 火焰原子吸收光谱分析仪器最佳条件选择                       | 101 |
| 实验二 石墨炉原子吸收光谱分析仪器最佳条件选择                      | 104 |
| 实验三 原子吸收光谱分析检出限的测定                           | 108 |
| 实验四 火焰原子吸收光谱法测定矿物中的铜——工作曲线法                  | 109 |
| 实验五 火焰原子吸收光谱法测定铝合金中镁——标准加入法                  | 113 |
| 实验六 火焰原子吸收光谱法测定镁合金中锰——工作曲线法                  | 115 |
| 实验七 火焰原子吸收光谱法测定工业废水中铬(VI)<br>——阳离子表面活性剂的增感效应 | 117 |
| 实验八 火焰原子吸收光谱法测定人发中的锌                         | 119 |
| 实验九 石墨炉原子吸收光谱法测定汽油中微量铅                       | 121 |
| 实验十 石墨炉原子吸收光谱法测定牛奶中的微量铜                      | 124 |
| 实验十一 石墨炉原子吸收光谱法测定水中痕量镉                       | 126 |
| 实验十二 氢化物—原子吸收光谱法测定地面水中痕量硒                    | 128 |
| 实验十三 氢化物—原子荧光光谱法测定铁矿石中砷、锑                    | 130 |
| 附录3-1 WFX-1B型原子吸收分光光度计                       | 133 |
| 附录3-2 XDY-I型双道原子荧光光度计                        | 137 |
| <b>第四章 X射线荧光光谱分析法</b>                        | 150 |
| 实验一 X射线荧光光谱法测定炼钢炉渣中镁、铝、硅、钛、磷                 | 150 |
| 实验二 X射线荧光光谱法测定土壤中微量钒、钛                       | 151 |
| <b>第五章 分子荧光光谱分析法</b>                         | 155 |
| 实验一 蒽的荧光特性及其测定                               | 155 |
| 实验二 微量铋的荧光法测定                                | 157 |
| 实验三 同步荧光法同时测定荧光黄、罗丹明6G和罗丹明B                  | 159 |
| 实验四 痕量钴的化学发光法测定                              | 161 |
| 附录5-1 YF-1型荧光光度计                             | 164 |
| 附录5-2 930型荧光光度计                              | 166 |
| 附录5-3 日立850型荧光分光光度计                          | 168 |
| <b>习题</b>                                    | 170 |
| <b>参考文献</b>                                  | 180 |

# 第一章 光谱分析法实验概述

## 第一节 光谱分析法实验基本 内容与目的要求

光谱分析法范围很广。广义来说,利用光谱仪器测量待分析样品的吸收、发射或散射的电磁辐射的量,都属于光谱分析法的研究范畴。本书所指的光谱分析法实验是与主教材《光化学分析法》相配套。因而,所涉及的内容也是按主教材所讲述的四个方面的内容,即原子发射光谱分析(AES)、原子荧光光谱分析(AAS)和原子荧光光谱分析(AFS)、X射线荧光光谱分析(XFS)、分子荧光光谱分析(FS)。这四个方面内容按其测量是被样品吸收的辐射量或是测量辐射被样品吸收后,样品中的原子、离子或分子被激发发射的辐射量,又可分为吸收光谱分析和发射光谱分析两大类。据此,本书中除原子吸收光谱分析属于吸收光谱分析外,其余均属发射光谱分析。但原子吸收光谱分析与原子荧光光谱分析有很多类似的特点。因此,仍放在同一章中讨论。

光谱分析法实验的内容包括常用光谱分析方法的基本原理;光谱分析仪器的使用与维护;光谱分析实验的基本操作和仪器主要参数的最佳选择;各种光谱分析法的实际应用。

通过光谱分析法实验课程教学,使学生对常用光谱分析方法的基本原理有更深入理解,对常用光谱仪器的基本结构、特点和应用范围能较全面了解,掌握它们的基本实验方法和操作技术,学会典型仪器的使用方法,提高数据处理的能力,为今后从事这方面工作打下良好基础。

## 第二节 光谱分析的仪器

光谱分析的仪器种类繁多，而且随着科学技术的发展，对分析测试技术的要求越来越高。因此，对相应仪器的功能要求更高。为适应各种各样繁杂的分析测试任务，仪器的更新换代日新月异

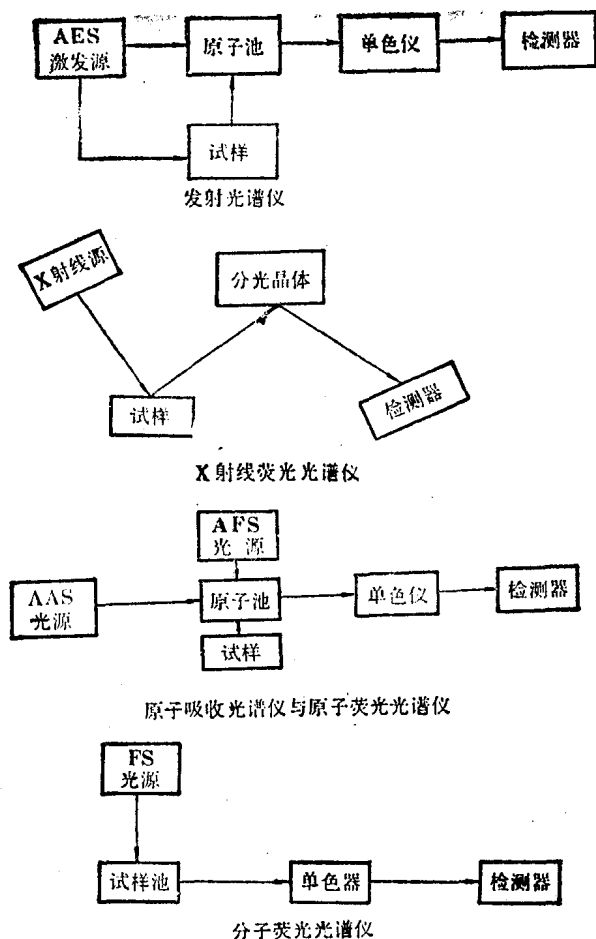


图1-2-1 各类光谱仪结构示意图

异。但无论如何更新，仪器结构的基本框架仍是大同小异的。图1-2-1列出了各类光谱仪结构的示意图。

上面五种光谱仪除分子荧光光谱仪外，其他四种光谱仪和它的分析法都有共同特点：从理论上讲，同属于原子光谱，其实质都是原子核外电子（外层或内层）的跃迁。从仪器上看，都是由光源、原子化器、单色仪和检测器（包括记录系统）四个部分组成。目前已有省略光学分光装置的能量色散仪且广泛应用于很多领域的定性定量分析。

分子荧光光谱分析与原子荧光光谱分析有根本的区别，它的实质是组成分子的原子中的电子激发跃迁。因而，吸收或激发是分子而不是原子。从仪器结构看与原子荧光光谱仪有许多相似之处，光源强度不是测量对象，因而要求光源与检测器不在一条直线上。所不同的是在原子荧光光谱分析中，要求将样品中待测元素先原子化，故此样品池是原子池，而分子荧光光谱分析，是直接将试样溶液放在样品池中，无需原子化就可测定。

如上所述，尽管它们之间有相同之处，但又有各自不同的特点，显示着明显的差异。它们彼此相辅相成，解决许许多多分析测试的问题。

### 第三节 光谱分析实验须知

光谱分析实验除了与其他实验有相同之处外，还有其本身的特点，它的实验离不开各种各样的光谱仪。光谱仪精密度高，价格昂贵，这就要求操作者实验前要认真预习实验教材，明确实验的目的要求、基本原理、实验方法与步骤，要详细阅读仪器使用说明书，实验时严守操作规程，保证实验安全、操作正确无误。

实验者要准备好记录本，在记录本上要拟定好实验方案和操作步骤，预先记录必要常数与计算公式。实验时认真记录实验数据，写实验报告时要忠实原始记录，不得涂改数据。

实验过程中要仔细观察实验现象，发现异常情况或遇到故障

应及时排除，实验者本人不能排除时，应立即报告指导教师或工作人员，及时采取措施。

在实验过程中，实验室应保持安静，保持实验场所清洁整齐。人人都应遵守实验室规则，养成良好的科学态度和实验习惯。使用的药品、试剂、水、电、气等都应本着节约原则，不得浪费。

实验结束后要按要求关好水、电、气各种开关。要把仪器各旋钮复位。打扫好室内卫生，结束工作经检查合格后，方可离开实验室。

实验完成后应按要求及时写出实验报告，报告中所列实验数据要符合有效数字的表示方式。各种数据与结论，表达要简明正确，符合逻辑、有条理性，还要附上应有的图表。

## 第四节 光谱分析实验数据处理与表达

### 一、测量值取舍

在进行一系列测量的过程中，得到一组数据，这组观测值大部分很接近，而个别值明显地离得很远，表面上看来它已经超出界限了。这个离群的观测值，也许是原来分布中的一个，也可能是由一些未发现的误差原因引起的。若是前者不能舍去，而后者应弃去。有几种数理统计方法可以判断测量值的有效性。例如：四倍平均偏差法，Q检验法和拉依达（Paūra）检验法等，现分别加以讨论。

#### 1. 四倍平均偏差法

〈1〉除可疑值外，求出测定的平均值 $\bar{x}$ 和平均偏差 $d$ 。

〈2〉当可疑值与 $\bar{x}$ 之差大于 $4d$ 时，可疑值应弃去。

例1 某分析工作者对样品中某成分分析，得到以下结果：

(1) 90.3%，(2) 90.3%，(3) 90.4%，(4) 90.4%，(5) 90.3%，(6) 91.0%。问第6个结果有效吗？

解 计算5个结果的平均值： $\bar{x}=90.34$ ，

计算5个结果的平均偏差： $d = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})}{5} = 0.048$ ;

可疑值与 $\bar{x}$ 之差： $91.0 - 90.34 = 0.66$ ;

结果判断： $0.66 > 4 \times 0.048$ ，此结果应弃去。

## 2. Q检验法

<1> 求出包括可疑值在内的一组测量值极差 $R$ ;

<2> 计算可疑值与紧邻值之差;

<3> 将可疑值与紧邻值之差除以极差 $R$ 即为 $Q$

$$Q = \frac{|x_{\text{可疑}} - x_{\text{紧邻}}|}{R} \quad (1-4-1)$$

<4> 查 $Q$ 值表，若计算 $Q$ 值大于表中查得 $Q_{90}$ （或 $Q_{95}$ 值），则可疑值舍去，其置信度是90%（或95%）。

表1-4-1 取舍测量值的 $Q$ 表

| 测定次数<br>置信区间 | 3    | 4    | 5    | 6    | 7    | 8    | 9    | 10   |
|--------------|------|------|------|------|------|------|------|------|
| $Q_{90}$     | 0.94 | 0.76 | 0.64 | 0.58 | 0.51 | 0.47 | 0.44 | 0.41 |
| $Q_{95}$     | 1.53 | 1.05 | 0.86 | 0.76 | 0.69 | 0.64 | 0.60 | 0.58 |

仍以例1进行计算:

计算6个结果平均值  $\bar{x} = 90.45$ ;

计算极差 $R = |x_{\text{最大}} - x_{\text{最小}}|$ ;  $R = 91.0 - 90.3 = 0.7$ ;

计算可疑值与平均值之差的绝对值与极差的比值

$$Q = \frac{|91.0 - 90.45|}{0.7} = 0.79$$

从表中查 $Q_{95}(n=6)$ 其值0.76，由于 $0.79 > 0.76$ 应弃去。

## 3. 拉依达 (Paūta) 检验法

<1> 计算包括可疑值在内的平均值 $\bar{x}$ ;

<2> 计算包括可疑值在内的单一测定值的标准偏差 $S$ ;

$$S = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n-1}} \quad (1-4-2)$$

〈3〉 计算可疑值与平均值之差的绝对值  $D$

$$D = |x_{\text{可疑}} - \bar{x}| \quad (1-4-3)$$

〈4〉 将计算得的  $D$  值与  $S$  比较, 在测定次数  $n > 10$  时, 如  $D > 3S$  则该可疑数据弃去, 如测定次数较少 ( $n < 10$ ) 则可改为  $D > 2S$  时将该可疑数据弃去, 它的缺点也和  $4d$  规则一样, 如测量次数较少, 则偏差较大的可疑值无法舍去。

例2 有一组分析测试数据: 0.108; 0.109; 0.111; 0.113; 0.115; 0.118; 0.121; 0.122; 0.125; 0.128; 0.147; 问其中偏差较大的0.147这一数据是否应舍去?

解 计算包括可疑值在内的平均值  $\bar{x}$  和标准偏差  $S$ :

$$\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^{11} x_i}{11} = 0.120, S = 0.0111,$$

计算  $D = 0.147 - 0.120 = 0.027$ ;

将  $D$  与  $3S$  比较:  $3S = 3 \times 0.0111 = 0.0333$ ;

$D < 3S$  这可疑值不应舍去。

当测量次数较少情况下, 对于偏差较大的可疑值无法舍去, 这正说明此法的缺点。

## 二、分析结果的表达

### 1. 列表法

列表法表达数据, 具有直观、简明的特点, 也便于相互之间比较优劣。光谱法实验的原始数据, 一般均采用列表法记录, 与其他方法进行比较也常用此法。

所列的表要标明表名。表名既要简明又要能完整地表达表中各项的含义。记录的数据应符合有效数字的规定, 并使数字的小数点对齐, 便于数据的比较分析。例如: 火焰原子吸收法测定硫酸锌试剂中铅时, 表面活性剂的增感效应。用列表法说明表面活

性剂SDS对铅吸光度的影响。见表1-4-2。

表1-4-2 表面活性剂SDS对Pb吸光度的影响

| <div style="display: inline-block; transform: rotate(-45deg);">                     吸光度A<br/>溶液条件                 </div> | Pb <sup>2+</sup> 的浓度μg/ml |       |       |       |       |       |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------|-------|-------|-------|-------|-------|
|                                                                                                                          | 0.00                      | 0.50  | 1.00  | 2.00  | 3.00  | 4.00  |
| 不加SDS                                                                                                                    | 0.001                     | 0.010 | 0.022 | 0.041 | 0.061 | 0.087 |
| 在50ml溶液<br>中加0.25%SDS4ml                                                                                                 | 0.001                     | 0.015 | 0.027 | 0.056 | 0.081 | 0.109 |

从表中明显看出加SDS使Pb的吸光度增加。

## 2. 图解法

图解法就是把实验测得的数据之间的相互关系以图形直观地加以表达。在现有的许多光谱测量仪器中使用荧光屏直接显示测量图形，或用记录仪记录测量图形，利用这些图形就可直接或间接求得分析结果。在光谱分析中最常用的图解法有以下两种。

〈1〉工作曲线法是利用变量间定量关系来制作工作曲线的。以自变量浓度为横坐标，因变量即各测定方法相应的物理量为纵坐标，绘制工作曲线。对于待测的未知物的浓度，可在与绘制工作曲线相同的条件下所测得的物理量值，再从工作曲线上查得。这种方法在原子吸收光谱分析、原子荧光光谱分析、分子荧光光谱分析等都有应用。

光谱分析法绝大多数都是相对的分析方法，在分析试样时，要求先用标准物质绘制工作曲线，才能测定试样中待测物的含量。由于每个实验点均带有误差，那末根据这些实验点绘制的工作曲线是否直线呢？这常用相关系数来评定。呈直线的工作曲线可用(1-4-4)式表示

$$y = a + bx \quad (1-4-4)$$

其中 $a$ 为截距， $b$ 是斜率。各实验点可表示为 $(x_1, y_1)$ ； $(x_2, y_2)$ …… $(x_i, y_i)$ ；…… $(x_n, y_n)$ ； $\bar{x}$ 代表 $x$ 的平均值， $\bar{y}$ 代表

$y$ 的平均值,  $(\bar{x}, \bar{y})$ 可看成各实验点的重心。相关系数 $r$

$$r = \frac{\sum_i \{(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})\}}{\left\{ \left[ \sum_i (x_i - \bar{x})^2 \right] \left[ \sum_i (y_i - \bar{y})^2 \right] \right\}^{1/2}} \quad (1-4-5)$$

已知 $r$ 值在 $-1 \leq r \leq +1$ 范围内。 $r$ 为负值时,表示 $y$ 与 $x$ 之间为负相关,即斜率为负值; $r$ 为正值时表示 $y$ 与 $x$ 之间为正相关,即斜率为正值; $r$ 等于零时,则表示 $y$ 与 $x$ 之间没有线性关系。

应当注意,在计算 $r$ 值时,应保留分析数据的有效数字,不能随意舍入,否则将使计算得的 $r$ 值不正确。表示工作曲线的相关系数,它的有效数字至少应取3位,最好取4位,有的工作曲线在坐标纸上有明显弯曲,但由于有效数字的舍入,计算得相关系数可达0.99,如将小数点全略去,则计算结果相关系数 $r$ 为1。

〈2〉曲线外推法 光谱分析法中,当试样溶液的基体成分与标准溶液相差较悬殊时,常用未知试样连续加入标准溶液,测得相应方法的物理量变化,用外推作图求得结果。如在原子吸收光谱分析中标准加入法就是其中一例。

在采用外推作图法中,应注意到工作曲线要通过原点,否则不能采用外推作图法。另外,它只能消除基体干扰,而不能消除背景干扰。有关这方面的讨论在主教材已有论述,这里不再赘述。

### 3、分析结果的数值表达

分析报告要给出多次分析结果的平均值、精密度和准确度。注意数值所表示的准确度应与测量仪表,分析方法的精密度相一致,数据的处理也应遵循有效数字规定。在光谱分析中测量用的仪表可读得的有效数字,往往最多只有3位。因此,光谱分析结果的有效数字一般都只有3位。即使称样量时使用5位有效数字的分析天平,但由于最后测量所用仪器仪表的读数只有3位,故分析结果的有效数字仍只有3位。

一项测定完成之后,除报告平均值外,应报告这一平均值的偏差。偏差大小是衡量精密度高低的尺度。在多数场合偏差值取一位有效数字,只有在多次测定时,才取两位有效数字。如果,

用已知含量的标样来验证分析方法的可靠性时，应该用绝对误差表示，即测定值减去真实值的结果来表示。或用相对误差表示，即用测量值与真实值之差再与真实值的比值来表示。

## 第五节 计算机在光谱分析中的应用

随着计算机，特别是微型计算机的普及，它在分析化学中的应用日益广泛，已发展成为一个非常广阔而且相当活跃的领域。比如分析中的数值计算，统计计算，实验条件预测，模拟实验，分析化学数据库以及专家系统等方面都要借助于计算机。而在分析仪器与计算机联用技术中计算机所显示出的重要作用更是有目共睹。本节提纲挈领地介绍一些在光谱分析中应用较多的数值计算方法和光谱仪器与计算机的联用技术。文中的计算机程序均用BASIC语言编写，并已在Apple-Ⅱ微机上运行通过。

### 一、计算机在数据处理中的应用

在分析中，直接测量到的往往是大量的数据，且一般都是一组离散数据，如在不同条件下测量某量，条件用 $x_i$ 表示，测量量为 $y_i$ ，得到一组离散数据 $(x_i, y_i)$ 。为了从中获得有用的信息，探求一些规律（如条件优化等），要经过适当的数据处理。处理离散数据常用的作法就是将各离散点（称为节点）连接起来，得到一个图形，从图中找出一些重要结论。插值和拟合是经常用的数值计算方法。

#### 1. 插值

插值指在有限的实验数据点之间根据某些规律计算出更多的点，这个点称为插值点，连接这些插值点得到一条光滑的反映一定规律性的曲线，这条曲线通过每个节点和插值点。

插值方法有线性插值，拉格朗日一元全节点插值，一元三节点插值以及样条函数插值等。

(1) 线性插值 线性插值是最简单的插值方法。将相邻的两节点连为直线，在此区间的插值点就在该直线上。如相邻节点分

别为  $(x_i, y_i)$  和  $(x_{i+1}, y_{i+1})$ ，则该区间内  $x$  对应的  $y$  值为

$$y = y_i + \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} (x - x_i) \quad (1-5-1)$$

点  $(x, y)$  就是插值点。这种插值方法就是线性插值。

(2) 拉格朗日一元全节点插值 这是常用的一种插值方法。

设  $y=f(x)$  为理想的完全反映测试数据点的函数，（但事实上这个函数是无法得到的，）我们用各节点数据  $(x_0, y_0)$ ,  $(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$ ，通过下式计算出函数  $y=g(x)$ ，用  $y=g(x)$  近似代替  $y=f(x)$ 。

$$y = g(x) = \sum_{i=0}^n \left( y_i \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \right) \quad (1-5-2)$$

点  $(x, y)$  就是插值点。

从数学知识中可知， $y=g(x)$  通过全部节点，而且每一个插值点的计算都使用全部的节点数据，也就是说，插值受全部节点的影响。这种插值法就是拉格朗日一元全节点插值。

拉格朗日一元全节点插值计算程序如下：

```
10 REM LAGRANGE-AP
```

```
20 INPUT "N="; N
```

```
30 DIM X(N), Y(N)
```

```
40 FOR I=0 TO N-1
```

```
50 READ X(I), Y(I)
```

```
60 NEXT I
```

```
70 INPUT "M="; M
```

```
80 DIM A(M), B(M)
```

```
90 FOR I=0 TO M-1
```

```
100 READ A(I)
```

```
110 NEXT I
```

```
120 FOR K=0 TO M-1
```

```
130 B(K)=0
```