

# 基于 VC++ 和 MATLAB 的氢原子 光谱数据处理系统

刘源 程衍富<sup>①</sup>

(中南民族大学电子信息工程学院 武汉市民院路 708 号 430074)

**摘要** 在氢原子光谱实验中,由色散规律求氢原子光谱波长的数据处理十分复杂。本文利用 3 次样条插值和误差随机化方法来进行数据处理。利用 VC++ 和 MATLAB 的混合编程,建立氢原子光谱数据处理系统。该系统充分发挥了 VC++ 在界面设计上的优势,同时利用 MATLAB 处理复杂数据和表达图像的能力,因此该系统结构合理、使用方便。

**关键词** 氢原子光谱; VC++ ; MATLAB; 数据处理系统

中图分类号: O433.4; TP311

文献标识码: B

文章编号: 1004-8138(2010)04-4520-06

## 1 引言

摄谱仪研究氢原子光谱是传统的光谱分析实验。这个实验一般要经过摄谱、暗室处理、测谱等过程。数据处理是以铁原子谱为参考谱,通过测量待测氢光谱左右两条相邻铁谱,并用线性内插法得到氢原子的光谱。这种实验方法费时较多,且对氢光谱全貌了解不直观。近年推出的氢原子光谱实验的改进<sup>[1]</sup>——即把摄谱改为用测微目镜读谱的方法,并用氦氖光谱作为参考谱线。这样既可以直观地观察氢原子光谱和氦氖谱的全貌,并且在氦氖谱中可以选择多条谱线作为参考谱以提高测量精确性和减少误差。考虑到摄谱仪棱镜的色散,测微目镜给出的位置与波长为非线性关系,因此线性插值会带来一定的误差。根据玻璃的色散规律找出读谱位置与波长的经验公式,然后再进行曲线拟合是一种常用的数据处理方法<sup>[2]</sup>。但是如果不考虑玻璃的色散规律,直接运用测得的波长与位置的关系寻求计算机程序处理,应该是一种更科学和方便的方法。

## 2 数据处理方法

在读谱法实验中,我们会得到氦氖谱波长和对应的测微目镜位置以及氢光谱的位置读数。如果不考虑色散规律,一种方法是通过回归分析把氦氖谱的波长与位置读数拟合为多项式,然后由氦氖光谱位置的读数求出氢原子的波长<sup>[3]</sup>。更方便的方法则是不求拟合函数直接得到待测光谱的波长,数学上的样条插值<sup>[4]</sup>提供了这种优秀方法。

样条插值法是用平滑曲线来对各数据点进行拟合的方法,它通过构造多项式来形成一条把所有数据点连接起来的平滑曲线。本实验的数据处理是利用 3 次样条插值来求待测氢光谱的值<sup>[5]</sup>,即在所取的氦氖谱两数据点间按 3 次多项式来拟合。3 次样条函数  $S(x)$  是分段给出且求解复杂,但功能强大的数学计算软件 MATLAB 可以帮助我们解决此问题,它用简单代码给出了 3 次样条函

① 联系人: 电话: (027) 61361368; E-mail: chengyf@mail.scuec.edu.cn

作者简介: 刘源(1989—),男,河南省南阳市人,本科在读,主要从事通信工程研究工作。

程衍富(1956—),男,湖北省天门市人,硕士,教授,主要从事物理教学及量子理论研究。

收稿日期: 2009-10-08; 接受日期: 2009-11-16

数(Spline)的插值,其作图功能还可方便地画出波长与位置的关系曲线。

实际上氢原子光谱实验中引起误差的原因十分复杂:首先由于氢氦谱不同波长谱线的宽窄不一致使得测量位置的确定带来误差;第二是测微目镜本身的仪器误差限;第三是由于先后测氢氦谱和氢光谱所放光源位置变动导致张角的改变。所以未定系统误差甚至大于可用数学分析得出的误差,因此本实验不必详细分析其各个主要误差来源。对未定系统误差的随机化处理是最好的实验设计与数据处理方法。即重复多次完整的测量过程,每次测量都用 3 次样条插值求出氢波长,然后用平均氢波长表示最后结果。比如 6 次测量结果如表 1 所示。

表 1 氢氦谱波长和位置读数及氢波长位置读数

$\lambda$ (nm)	638.30	640.23	650.65	635.29	659.90	667.83	671.70	$x_H$
$x_1$ (mm)	3.062	3.195	3.928	4.110	4.572	5.073	5.319	4.330
$x_2$ (mm)	3.471	3.570	4.372	4.539	4.990	5.456	5.570	4.740
$x_3$ (mm)	4.285	4.433	5.130	5.368	5.806	6.314	6.569	5.585
$x_4$ (mm)	4.661	4.808	5.566	5.731	6.618	6.670	6.931	5.929
$x_5$ (mm)	5.692	5.834	6.568	6.752	7.200	7.702	7.945	6.968
$x_6$ (mm)	6.629	6.771	7.507	7.694	8.144	8.638	8.886	7.896

由 3 次样条插值可算出每次测量对应的氢波长  $y_{Hi}$ , 则

$$\overline{y_H} = \frac{1}{6} \sum_{i=1}^6 y_{Hi} \quad (1)$$

$$S = \frac{\sum (y_{Hi} - \overline{y_H})^2}{6 - 1} \quad (2)$$

$$\lambda_H = (\overline{y_H} \pm S) \text{nm} \quad (3)$$

由以上得到的氢波长可以计算里德伯常数及对应的相对误差。这里涉及多次重复测量,需要处理大量的测量数据,因此利用计算机编程即可减轻实验者烦琐重复的手工计算,也有利于数据处理的正确性。我们利用 VC++ 与 MATLAB 混合编程,设计出该实验的数据处理系统。该系统有一个友好的图形用户界面,操作该系统,用户不需任何专业的计算机数据处理知识即可轻松得到氢光谱的波长、标准偏差、里德伯常数等复杂的物理量和实验曲线。

### 3 数据处理系统

#### 3.1 VC++ 和 MATLAB 混合编程简介

VC++ 是微软推出的可视化集成开发环境,Microsoft 的基本类库 MFC 简化了 Windows 应用程序的开发。VC++ 代码基于面向对象的编程思想,有利于编程代码的重用,用 VC++ 能开发出代码效率高、执行速度快、界面友好、容易升级的程序。

MATLAB 是当前最为流行的科学计算软件,其科学计算功能的强大和开放式的开发思想使其成为当今最流行的、最优秀的科技应用软件之一。但 MATLAB 的用户界面设计不如 VC++ 方便,解释执行的运行环境使其开发的程序不能脱离 MATLAB 独立地进行发布,因此使用有较大的不方便之处。

MATLAB 与 VC++ 混合编程是将软件 MATLAB 的数学计算功能内嵌到 VC++ 环境中,利用 MATLAB 的数学计算功能和 VC++ 方便快捷的与数据库的连接功能以及良好的用户界面来开发相关的数据库分析软件。

目前,常用的 VC++ 和 MATLAB 混合编程的方法较多<sup>[6]</sup>。其中有的方法编写的程序仍不能脱离 MATLAB 环境,会带来使用的不方便;有的方法配置编译环境过于复杂。我们采取第三方控件 Mideva/Matcom 的方法,通过安装 Visual Matcom 工具条,提供 MATLAB 和 VC 直接集成的途

径, 它可快速集成 m 文件到 VC 工程中创建独立的 C/C++ 应用程序, 并且在调试过程中可以查看矩阵变量的值, 以及直接修改 m 源文件而不是修改生成的 C/C++ 文件。因此本系统的处理过程是: (1) 数据库的读写操作和可视化的人机交互界面用 VC++ 来实现; (2) 数据的复杂算法和图像用 MATLAB 语言编程实现; (3) 用 Matcom 将 MATLAB 源代码译成同等功能的 C++ 代码, 实现 VC++ 与 MATLAB 的混合编程; (4) 在 VC++ 中实现动态数据交换(DDE), 并利用 VC 中的可视化功能将结果以图表方式动态展示。

## 3.2 构建过程

### 3.2.1 设计目标

建立基于 VC++ 的氢原子光谱实验数据处理窗口, 实现在窗口中输入数据, 控制计算流程, 输出计算结果。系统要求做到: (1) 输入框结构合理, 格式简单, 操作方便, 并能检查明显的数据错误; (2) 根据实验原理对输入数据进行处理; (3) 计算结果输出到对应的文本框中; (4) 根据不同组的测量数据在图形输出区域绘制 3 次样条函数曲线。

### 3.2.2 用 VC++ 建立数据输入模块

(1) 选择数据输入组数。在数据输入时用户首先选择测量组数, 我们设计可选择输入数据为 1—6 组的 VC++ 用户界面, 如图 1 所示。

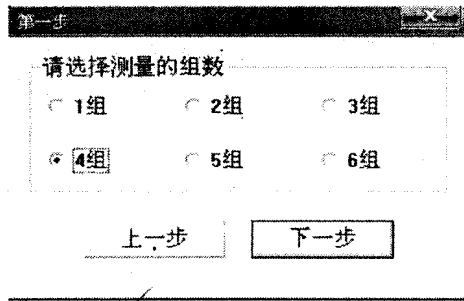


图 1 用户输入测量组数界面

VC++ 程序代码如下(以测量组数选 4 单选按钮为例):

```
void CStep1::OnRadio4()
{
    // TODO: Add your control notification handler code here
    m_radio= 4; // m_radio 是一个全局变量
}
```

(2) 输入氦氖光谱和氢光谱测量位置读数。VC++ 界面如图 2 所示。

VC++ 程序代码如下(以测量组数 1 为例)

```
m_HN1.GetWindowText(hn1); //将第一组的氦氖光谱位置读数字符串赋给 hn1 字符串
m_H1.GetWindowText(h1); //将第一组的氢光谱位置读数字符串赋给 h1 字符串
if(hn1.GetLength() < 41)
{
    MessageBox(“请输入第 1 组氦氖光谱插值”, “错误提示”);
    return;
}
```

组数	氦氖光谱位置 (中间用空格或者逗号隔开)	氢光谱位置
第一组	3.062 3.195 3.928 4.110 4.572 5.073 5.319	4.330
第二组	3.471 3.570 4.372 4.539 4.990 5.456 5.750	4.740
第三组	4.285 4.433 5.180 5.368 5.806 6.314 6.569	5.585
第四组	4.661 4.808 5.566 5.731 6.168 6.670 6.931	5.929
第五组		
第六组		

图 2 用户输入氦氖光谱的位置和氢光谱的位置界面

```
if(h1.GetLength( ) < 5)
```

```
{
```

```
    MessageBox( "请输入第 1 组氢光谱插值", "错误提示");
```

```
return;
```

```
}
```

以上代码实现了氦氖光谱位置的输入和用户可能出现的简单操作失误的错误提示。

### 3.2.3 建立 MATLAB 核心计算程序及调用模块

(1) 安装 MATcom, 然后运行 VC++, 并从菜单中选择 Tools→ Customize→ Add-ins and Macro Files, 选择 Browse, 改变文件类型为 Add-in(.dll), 选择%MATcom 安装路径%/bin/mvcide.dll 文件。此时在 VC++ 的开发环境中可以看到一个 Visual MATcom 工具条, 其中的第一个按钮就是将 M 文件添加到当前工程中。

(2) 编写 M 文件 chazhi.m

```
function yh= chazhi(x, xh)
y= [638.30 640.23 650.65 653.29 659.90 667.83 671.70]; %氦氖光谱波长
xi= x(1):0.001:x(7); %待插值点
yspline= interp1(x, y, xi, 'spline'); %三次样条插值
yh= interp1(x, y, xh, 'spline'); %计算氢波长
plot(x, y, '* ', xh, yh, 'o', xi, yspline, '- '); %画图
xlabel('mm'); %X 坐标标度
ylabel('nm'); %Y 坐标标度
title('三次样条函数曲线'); %图题
```

(3) 单击 Visual M atcom 工具条的第一个按钮, 将 M 文件加入到工程中去, 需要注意的是在用 chazhi 函数的 C++ 文件时要引用两个头文件 # include "matlib.h", # include "chazhi.h"。

### 3.2.4 测量结果的数据处理模块

用 VC++ 编写计算测量结果的数据处理程序, 假设进行了 4 组测量, 其主要代码如下:

```
initM(MATCOM_VERSION); //初始化 Matcom 库函数
```

```

CWnd * p= NULL;
p= (CWnd * ) GetDlgItem(IDC _PIC); //获得一个指向画图区域的指针
Mm plohandle= winaxes(p- > m _hWnd); //将 Static 的句柄赋给画图句柄
Mm Mhn4, Mh4, MHL4; //定义 Mm 型变量
Mh4= BR(H4); // 将氢插值 Double 型变量 H4 转换为 Mm 型变量
Mh4
Mhn4= ( BR(HN4[ 0]), HN4[ 1], HN4[ 2], HN4[ 3], HN4[ 4], HN4[ 5], HN4[ 6]);
//这里将氦氖插值数组的 Double 型变量转化为 Mm 型
MHL4= chazhi(Mhn4, Mh4);
//调用 插值函数, 得到 氢波长的 Mm 型变量 MHL4
HL4= MHL4.r(1, 1); //将 氢波长的 Mm 型变量转换 Double 型变量
h4.Format( "% . 3f", HL4); //将氢波长的 Double 型变量转换为 Cstring 型
m_ HNH4.SetWindowText(hl4); //输出氢波长
exit M (); //结束库函数的调用
HLA= (HL1+ HL2+ HL3+ HL4)/4; //计算平均波长 HLA
SSS= sqrt((pow(HL1- HLA, 2) + pow(HL2- HLA, 2) + pow(HL3- HLA, 2)
+ pow(HL4- HLA, 2))/4); //计算标准偏差 SSS
TTT= 1.59; //给出 T 分布因子
RRR= 3600000000/( 1.000285* HLA * 5); // 计算里德伯常数
WWW= abs((RRR- 10967758.306)/10967758.306) * 100; //计算相对误差
WC= SSS* TTT; //误差等于 标准偏差* T 分布因子

```

### 3. 2. 5 数据输出模块

VC++ 设计的数据输出界面如图 3 所示(代码略), 该输出界面美观, 结果一目了然。

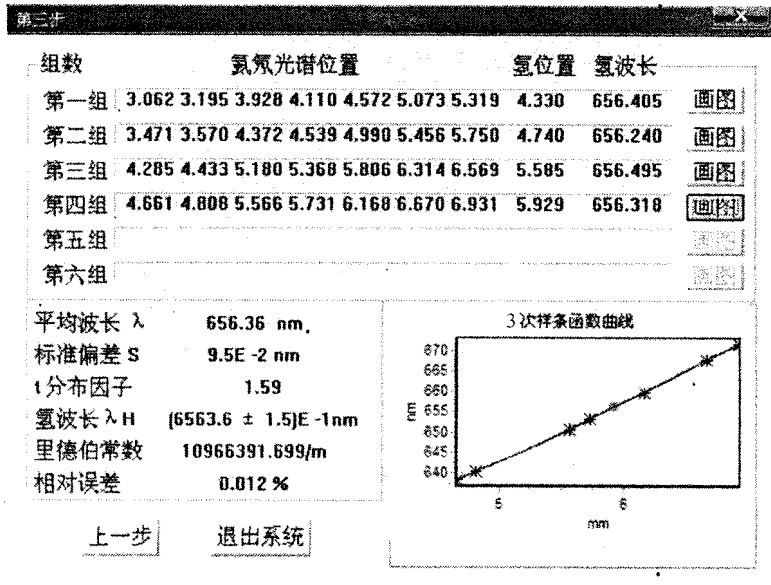


图 3 数据输出界面

### 3.3 系统的发布

VC++ 与 MATLAB 混合编程是调用 MATLAB 数学函数库和图形库中的函数, 所以需要附带 MATLAB 的这两个函数库才有可能在没有安装 MATLAB 的机器上运行。MATLAB 本身已经打包了这两个库的函数, 该文件是位于 MATLAB 安装目录中 `extern/lib/win32` 子目录中的 `mglaarchive.exe`, 运行该程序即可自动把需要的库函数解压到当前目录中, 然后把编译好的程序放到该目录中并且拷贝到未安装 MATLAB 的机器上, 程序就可脱离 MATLAB 环境而独立运行。在 VC++ 环境中的操作步骤如下: (1) 菜单 -> 组建 (build) -> 配置 (configuration), 移除 (remove) Win32 Debug; (2) 菜单 -> 工程 (project) -> 设置 (settings), 使用 MFC 作为静态链接库; (3) 菜单 -> 组建 (build) -> 全部重建 (rebuild all), 得到 release 文件夹, 将 Windows 中的系统文件 `v4501v.dll` 与 `ago4501.dll` 添加到文件夹中, 即得到程序的发行版本, 可以脱离 VC++ 和 MATLAB 环境运行。

## 4 结语

氢原子光谱实验是光谱分析中的基础实验, 本文对实验数据处理提出了 3 次样条插值及对未定系统误差作随机化处理。利用 VC++ 和 MATLAB 混合编程方法建立了数据处理系统。该系统用 MATLAB 来处理较复杂的计算过程和表达图形, 用 VC++ 编制友好的输入输出界面。通过 Matcom 控件, 使该系统可在脱离 MATLAB 的环境中使用, 因此该数据处理系统有较大的实际使用价值。

## 参考文献

- [1] 朱鹤年. 物理实验研究[M]. 北京: 清华大学出版社, 1994. 285—302.
- [2] 丁慎训, 张连芳. 物理实验教程[M]. 北京: 清华大学出版社, 2002. 313—318.
- [3] 程衍富. 基于回归分析方法的氢原子光谱数据处理[J]. 实验科学与技术, 2008, 6(4): 23—25.
- [4] 肖筱南, 赵来军, 党林立. 现代数值计算方法[M]. 北京: 北京大学出版社, 2003. 167—176.
- [5] 程衍富, 戴同庆, 潘林峰等. 由色散数据求氢波长的三次样条插值法和直线化拟合法[J]. 物理实验, 2009, 29(6): 32—34.
- [6] 李天昫, 葛临东. 综述 MATLAB 与 VC++ 的交互编程[J]. 计算机仿真, 2004, 21(9): 193—196.

# Data Processing System of the Hydrogen Atom Spectroscopy Based on VC++ and MATLAB

LIU Yuan CHENG Yan-Fu

(College of Electronic Information Engineering, South-Central University for Nationalities, Wuhan 430074, P. R. China)

**Abstract** It is very complex to process data of the hydrogen atom spectroscopy wavelength based on dispersion law in the experiments. A new data processing method by cubic spline interpolation and error random method was proposed. A data processing system has also been developed with VC++ and MATLAB. The system has a reasonable structure and easy to use, because the system has the advantages of the VC++ in the interface design and the MATLAB in dealing with complex data and image processing.

**Key words** Hydrogen Atom Spectroscopy; VC++ ; MATLAB; Data Processing System