

Visual C#. NET 应用于快速分析计算

李萍¹, 唐帆², 王伟²

(1. 盐城工学院 信息工程学院, 江苏 盐城 224051; 2. 盐城工学院 化学与生物工程学院, 江苏 盐城 224051)

摘要:分析化学的一个发展趋势是将中心实验室变成手持的便携、快速的检测仪器, 又称做“Hand-held Lab-on-a-chip”。手持设备的研究, 除在分析检测方法中需要改进提高以外, 在数据处理方面也要达到快速、准确、直观的要求。提出通过便携设备的快速加标法和内标法处理数据, 以 Visual C#. NET 语言编写数据处理程序, 可达到快速检测设备的数据处理要求。

关键词: Visual C#. NET; 便携式设备; 数据处理

中图分类号: TP314 **文献标识码:** A **文章编号:** 1671-5322(2011)04-0069-04

随着制造技术的发展, 便携式检测仪迅速发展, 在生命分析、环境分析及食品安全等应用领域都有广泛的需求。便携式仪器可以认为是从一体化仪器演化而来的一种测试仪器。一体化仪器本身就是一个完整的测试系统, 包括数据采集显示、数据整理分析、打印数据报表以及出图、出具测试报告。可以说, 一体化仪器系统已经设计有数据采集系统、数据显示处理系统、打印机接口等, 用户在拥有了一体化仪器后, 相当于拥有了一个分析测试的小型工作站。通常的便携式仪器具有功能单一的特点, 但体积轻巧、携带方便, 基本上一个人可以手持或挎在身上进行操作^[1]。

为了保证得到准确的测量结果, 在使用便携式仪器过程中通常需要注意以下几点: (1) 注意经常性的校准和检测。同其它的分析检测仪器一样, 都是用相对比较的方法进行测定的, 因此容易产生误差。(2) 注意检测仪器的浓度测量范围。分析设备都有其固定的检测范围, 只有在其测定范围内完成测量, 才能保证仪器准确地进行测定。而长时间超出测定范围进行测量, 就可能对传感器造成永久性的破坏。(3) 注意各类传感器的寿命。在便携式仪器中, 通常有光传感器和电化学传感器, 相对来说电化学传感器的寿命短一些。因此, 要随时对传感器进行检测, 尽可能在传感器的有效期内使用。

Visual C#是 Visual Studio. NET 中引入的一种

新的编程语言^[2]。C#从 C 和 C++ 演变而来, 是一种简单、现代、类型安全和面向对象的语言。设计 C#是为了建立运行于 .NET 平台上的、范围广泛的企业级应用程序。用 Visual C#编写的代码被编译为托管代码, 这意味着它将受益于公共语言运行库的服务。这些服务包括: 语言互操作性、垃圾回收、增强的安全性以及改进的版本支持。

在 Visual Studio. NET 中, Visual C#完全得到项目模板、设计器、属性页、代码助理、对象模型和其他开发环境功能的支持。Visual C#编程的库是 .NET Framework。

1 分析方法及数据处理原理

分析化学中, 常用的方法通常有内标法和外标法。

内标法是色谱等分析中一种比较准确的定量方法, 尤其在无标准物对照时, 此方法更显其优越性。内标法是将一定重量的纯物质作为内标物加到一定量的被分析样品混合物中, 然后对含有内标物的样品进行色谱分析, 分别测定内标物和待测组分的峰面积(或峰高)及相对校正因子, 按照公式和方法即可求出被测组分在样品中的百分含量。

外标法是比较法的一种。与内标法相比, 外标法不是把标准物质加入到被测样品中, 而是在与被测样品相同的条件下单独测定, 把得到的色

收稿日期: 2011-11-24

作者简介: 李萍(1970-), 女, 江苏盐城人, 副教授, 硕士, 主要研究方向为计算机应用。

谱峰面积与被测组分的色谱峰面积进行比较求得被测组分的含量。外标物与被测组分同为一种物质,但要求它有一定的纯度,分析时外标物的浓度应与被测物浓度相接近,以利于定量分析的准确性。

本研究是基于阳极溶出伏安法,测量未知水样中的铅含量,世界卫生组织规定在饮用水中不超过 $10 \times 10^{-9} \text{ g/L}$ 的浓度^[3]。本课题组在便携式设备的定量方法上做过较为系统的研究^[4,5],本研究是分别以外标法中的标准加入法和内标法

中以锌为内标测量水中的未知浓度的铅。

标准加入法的测量方案如图 1 所示,先将样品测量一次,得到电信号 A_1 ,然后在未知浓度的样品中加入标准铅离子,使得溶液中的铅离子浓度增加 $10 \times 10^{-9} \text{ g/L}$;再测量加标后的水溶液,得到电信号 A_2 。根据铅离子的标准曲线获得的常数截距 a ,就计算出未知样品中的铅浓度 C ,计算公式如下:

$$C = \frac{A_1 - a}{A_2 - A_1} \cdot 10 \quad (1)$$

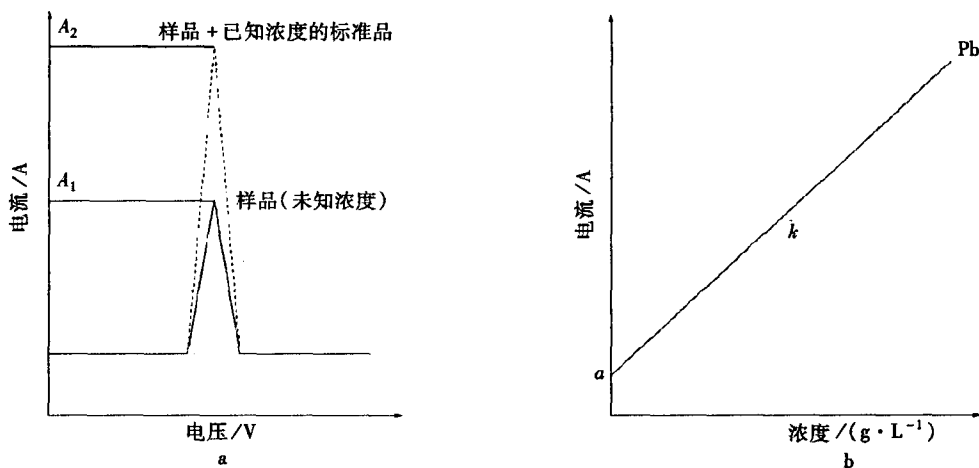


图 1 加标法测量铅含量的电信号及标准曲线示意图

Fig. 1 Schematic voltammogram and standard curve for Pb detection with standard addition method

内标法的测量方案如图 2 所示,在样品中加入内标物标准锌离子 $50 \times 10^{-9} \text{ g/L}$,进行电化学测量,得到锌的电信号为 A_0 ,铅的电信号为 A 。根据锌和铅离子的标准曲线获得的常数截距 a_0 和 a 以及斜率 k_0 和 k ,就可以计算出未知样品中的铅浓度 C ,计算公式如下:

$$C = \frac{A - a}{A_0 - a_0} \cdot \frac{k_0}{k} \cdot 50 \quad (2)$$

2 Visual C#. NET 程序设计与计算结果

按照数据处理和显示要求,Visual C#. NET 程序代码编写如下:

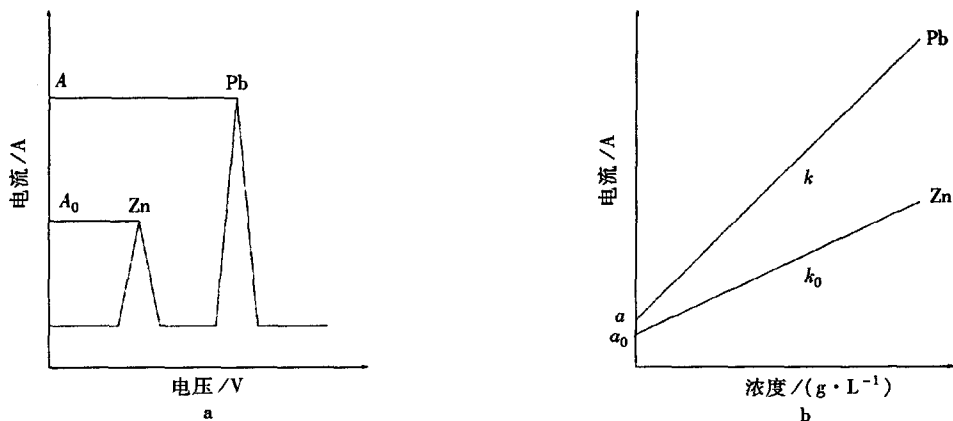


图 2 内标法测量铅含量的电信号及标准曲线示意图

Fig. 2 Schematic voltammogram and standard curve for Pb detection with internal standard method

```

private void button1_Click ( object sender,
EventArgs e)
{
double A1,A2,a;
double ppb;
double C;
A1 = Convert.ToDouble(textBox1.Text);
A2 = Convert.ToDouble(textBox2.Text);
a = Convert.ToDouble(textBox3.Text);
ppb = Convert.ToDouble(textBox4.Text);
C = (A2 - a) / (A1 - A2) * ppb;
textBox5.Text = Convert.ToString(C);
listBox1.Visible = false;
listBox1.BeginUpdate();
listBox1.Items.Add(C);
listBox1.EndUpdate();
}

private void button2_Click ( object sender,
EventArgs e)
{
textBox1.Text = "";
textBox2.Text = "";
textBox3.Text = "";
textBox4.Text = "";
textBox5.Text = "";
}

private void button3_Click ( object sender,
EventArgs e)
{
Application.Exit();
}

private void button4_Click ( object sender,
EventArgs e)
{
string[] S = new string[30];
int num,j;
listBox1.Visible = true;
num = Convert.ToInt16(textBox6.Text);
for (int i = 0; i < listBox1.Items.Count; i +
+ )

```

```

S[i] = Convert.ToString(listBox1.Items
[i]);
listBox1.Items.Clear();
if (listBox1.Items.Count > num)
j = listBox1.Items.Count - num;
else
j = 0;
listBox1.BeginUpdate();
for (int i = 0; i < num; i + + )
{
listBox1.Items.Add(S[j+i]);
} listBox1.EndUpdate();
}

```

输入两组实验数据,计算结果的显示界面如图3所示。



图3 计算结果的显示界面

Fig.3 Display interface of results

加标法和内标法的两组实验数据的计算结果列于表1和表2中。结果显示,精确计算后的结果准确性优于近似状态的计算,因此,在实际应用中,可以通过可设置常数截距值 a 的调节来校准设备。

4 结论

运用 Visual C#. NET 编译的程序可以很合适应用在便携式设备中处理数据,达到便携式设备的快速准确分析的要求,在后续工作中,做好接口的研究及进一步智能化工作,将理论研究尽快转化为实用的智能产品。

表 1 加标法运用 Visual C#. NET 程序计算的结果及近似精确状态的结果比较

Table 1 The results calculated by Visual C#. NET and comparison of approximate and exact solutions with standard addition method

	样品实际含量/ ($10^{-9} \text{ g} \cdot \text{L}^{-1}$)	电信号值/ μA	计算含量/ ($10^{-9} \text{ g} \cdot \text{L}^{-1}$)	相对误差/ %
近似状态	10	$A_1 = 2.600, A_2 = 1.146$	7.9	21.0
$\alpha = 0$	50	$A_1 = 6.070, A_2 = 5.052$	49.6	-0.8
精确状态	10	$A_1 = 2.600, A_2 = 1.146$	9.0	10.0
$\alpha = -0.16726$	50	$A_1 = 6.070, A_2 = 5.052$	51.3	2.5

表 2 内标法运用 Visual C#. NET 程序计算的结果及近似精确状态的结果比较

Table 2 The results calculated by Visual C#. NET and comparison of approximate and exact solutions with internal standard method

	样品实际含量/ ($10^{-9} \text{ g} \cdot \text{L}^{-1}$)	电信号值/ μA	计算含量/ ($10^{-9} \text{ g} \cdot \text{L}^{-1}$)	相对误差/ %
近似状态	10	$A_1 = 0.872, A_0 = 7.440$	4.6	54.0
$\alpha = 0$	50	$A = 8.380, A_0 = 7.440$	43.8	12.4
精确状态	10	$A = 0.872, A_0 = 7.440$	9.5	5.0
$\alpha = -0.16726$	50	$A = 8.380, A_0 = 7.440$	47.1	5.8

参考文献:

- [1] Weagant S, Chen V, Karanassios V. Battery - operated, argon - hydrogen microplasma on hybrid, postage stamp - sized plastic - quartz chips for elemental analysis of liquid microsamples using a portable optical emission spectrometer[J]. Analytical and Bioanalytical Chemistry 2011, 401(9): 2 865 - 2 880.
- [2] Anderson T. Back in the studio [Visual Studio 2008 $\beta 2$][J]. Personal computer world 2007, 30(11): 148 - 149.
- [3] World Health Organization. Guidelines for Drinking - Water Quality[S]. WHO Press, Switzerland, 2006.
- [4] Wang W, Wu W Y, Wang W, et al. Tree - shaped paper strip for semiquantitative colorimetric detection of protein with self - calibration[J]. Journal of Chromatography A 2010, 1 217: 3 896 - 3 899.
- [5] Tan S N, Ge L, Wang W. Paper Disk on screen printed electrode for one - step sensing with an internal standard[J]. Analytical Chemistry, 2010, 82(21): 8 844 - 8 847.

Rapid data analysis based on Visual C#. NET

LI Ping¹, TANG Fan², WANG Wei²

(1. School of Information Engineering, Yancheng Institute of Technology, Yancheng Jiangsu 224051, China;
 (2. School of Chemical and Biological Engineering, Yancheng Institute of Technology, Yancheng Jiangsu 224051, China)

Abstract: Portable device is one of the hottest topics in analytical chemistry, and its goal is fabrication of hand - held lab - on - a - chip. Not only should analytical methods be improved in portable device, but also data analysis should be met the requirements of rapid, accurate and easy - operation. Based on our previous research of internal standard and standard addition method, we bring up an idea for applying Visual C#. NET on data analysis for portable device. The proposal shows the advantages of rapid, user - friend, and easiness.

Keywords: Visual C#. NET; portable device; data analysis

(责任编辑:范大和)