

# 基于光腔衰荡光谱法的气体分子光谱吸收 线型拟合算法研究

邢素霞<sup>1</sup>, 陈思<sup>1</sup>, 郭瑞民<sup>2\*</sup>, 崔文超<sup>2</sup>, 董贺伟<sup>2</sup>

<sup>1</sup>北京工商大学计算机与信息工程学院, 北京 102488;

<sup>2</sup>中国计量科学研究院, 北京 100029

**摘要** 针对光腔衰荡光谱(CRDS)的吸收光谱曲线,利用 MATLAB 工具软件和最小二乘算法对常用的 6 种气体吸收光谱拟合算法(VP、GP、AVP、AGP、SDVP、SDAVP 算法)进行编程,并设计了参数设置、拟合结果显示等界面化窗口;通过 CRDS 采集已知浓度 CO<sub>2</sub> 气体的吸收光谱;采用 6 种算法对吸收光谱进行拟合实验,比较 6 种不同线型算法的拟合误差。拟合结果显示:拟合曲线和测量点几乎完全重合;AVP 算法拟合的平均残差最大,为  $3.1748 \times 10^{-3}$ , GP 及 AGP 算法的平均残差最小,为  $1.3212 \times 10^{-3}$ ,由此验证了 6 种线型算法在气体吸收光谱曲线拟合中的可行性;AVP 算法的运算时间最短,为 1.7516 s,SDAVP 的运算时间最长,为 389.682 s,GP 算法的运算时间小于 AGP 算法。综合考虑残差与运算时间后认为,GP 算法最适用于 CRDS 光谱线型的拟合。

**关键词** 光谱学; 气体光谱; 吸收线型; 拟合算法; 光腔衰荡光谱法

中图分类号 O561.3

文献标识码 A

doi: 10.3788/LOP56.193004

## Spectral Absorption Line-Shape Fitting Algorithm of Gaseous Molecule Based on Cavity Ring-Down Spectroscopy

Xing Suxia<sup>1</sup>, Chen Si<sup>1</sup>, Guo Ruimin<sup>2\*</sup>, Cui Wenchao<sup>2</sup>, Dong Hewei<sup>2</sup>

<sup>1</sup> School of Computer and Information Engineering, Beijing Technology and Business University, Beijing 102488, China;

<sup>2</sup> National Institute of Metrology, Beijing 100029, China

**Abstract** For the spectral absorption curve of cavity ring-down spectroscopy (CRDS), this study uses the MATLAB software and the least-squares algorithm to program six different line-shape fitting algorithms (VP, GP, AVP, AGP, SDVP, and SDAVP algorithms) commonly used for gas absorption spectroscopy and designs interface windows for the parameter setting and fitting result display. The absorption spectrum of the carbon dioxide gas with known concentration is obtained using CRDS. The six aforementioned algorithms are used to fit the absorption spectrum, and the fitting residuals of six different line-shape fitting algorithms are compared. The fitting results denote that the fitting curve is almost coincident with the measuring points. The average AVP residual is the largest, which is  $3.1748 \times 10^{-3}$ , whereas GP and AGP denote the minimum average residual of  $1.3212 \times 10^{-3}$ . This study verifies the feasibility of the six aforementioned line-shape fitting algorithms with respect to the fitting of gas absorption spectrum. The AVP's operation time is the shortest (*i. e.*, 1.7516 s), whereas the SDAVP's operation time is the longest (*i. e.*, 389.682 s). The GP's operation time is less than that of AGP. Therefore, the GP is most suitable for performing the CRDS spectral line-shape fitting with respect to the residuals and operation time.

**Key words** spectroscopy; gas spectrum; absorption line-shape; fitting algorithm; cavity ring-down spectroscopy

**OCIS codes** 300.1030; 260.3060; 260.3090

收稿日期: 2019-03-04; 修回日期: 2019-04-03; 录用日期: 2019-04-22

基金项目: 国家重点研发计划专项(2016YFF0200305)

\* E-mail: guorm@nim.ac.cn

## 1 引言

相对于原子,分子的能级结构更加复杂,其内部的能级跃迁包括电子跃迁、振动跃迁和旋转跃迁。分子在两个能级之间跃迁时,会吸收或者发射能量。理想情况下,该能量对应的谱线结构是一根没有宽度的线。但在实际情况下,由于分子热运动和分子间的碰撞等因素,吸收和发射谱线会发生展宽,具有一定的线型结构,分子线型是光谱领域研究的一个重要方向<sup>[1-6]</sup>。在气体领域,研究人员采用傅里叶变换光谱(FTS)<sup>[7]</sup>和光腔衰荡光谱(CRDS)<sup>[8-11]</sup>等技术来测量气体分子的吸收,然后选择合适的分子线型对测量数据进行拟合,得到吸收强度、谱线位置等参数。这些实验参数可以通过 HITRAN (High Resolution Transmission)数据库的理论计算结果进行验证<sup>[12]</sup>,并应用于大气监测<sup>[13]</sup>、气体光谱基准研究等领域。

本文针对于 CRDS 实验测得的气体分子实验数据进行线型拟合。常见的分子吸收线型包括高斯线型和洛伦兹线型。在极低压条件下,通常使用高斯线型来描述分子因热运动导致的多普勒展宽;而在高压条件下,则使用洛伦兹线型描述分子之间因相互碰撞而导致的谱线展宽。通常情况下,压强无法达到极限强度,因此需要同时考虑这两种效应,使用两种线型的卷积,即 VP (Voigt profile)算法。当分子之间的碰撞导致分子速度发生变化时,会出现狄克压窄(Dicke narrowing)效应<sup>[14]</sup>,多普勒线宽有变窄的趋势。在这种情况下,通常采用 GP (Galatry profile)和 NGP (Nelkin-Ghatak profile)线型算法描述气体分子的吸收谱线<sup>[1,15]</sup>。但当考虑到分子运动对气体线型碰撞参数的影响时,通常会使用 SDVP (speed-dependent VP)等与分子运动速度相关的吸收线型算法。当分子间相互碰撞的持续时间有限导致分子线型不对称时,需要采用 AVP (asymmetric VP)、AGP (asymmetric GP)、SDAVP (speed-dependent AVP)等线型算法对测量数据进行拟合处理。目前,国内外对高斯线型以及洛伦兹线型的算法研究已比较成熟,但对本文所讨论的线型还没有进行深入研究,仅停留在简单的理论研究上,且没有在算法上实现具体的拟合过程。本文主要对 VP、GP、AVP、AGP、SDVP、SDAVP 这 6 种线型算法进行拟合,采用 MATLAB 中的最小二乘法曲线函数(Lsqcurvefit)研究这 6 种线型的算法;并采用编制的算法程序对实验测量数据进行拟合,通过分析拟合曲线与实验测量点的重合程度以及残差的大小验证拟合算法的有效性。

## 2 气体吸收线型与参数

本研究涉及的 6 种气体吸收线型分别为 VP、GP、AVP、AGP、SDVP 和 SDAVP 算法。下面将着重介绍这 6 种线型的公式、参数及适用条件。

### 2.1 VP 线型算法

VP 线型算法是分子吸收光谱数据处理中最常用的一种线型,能同时考虑多普勒展宽和碰撞展宽效应。假设分子是自由运动的,忽略因碰撞导致的分子速度的变化(即忽略狄克压窄效应)。VP 算法的标准线型函数可表示为<sup>[4,5]</sup>

$$I_{VP}(u) = \frac{1}{\pi} \int_0^{+\infty} d\tau \exp\left(iu\tau - id\tau - g\tau - \frac{\tau^2}{4}\right), \quad (1)$$

式中: $u = (\omega - \omega_0)/\omega_D$ ,  $\omega_D = k \sqrt{2k_B T/m}$ ,  $\omega$  为角频率,  $\omega_0$  为没有扰动的跃迁角频率,  $\omega_D$  为多普勒宽度,  $k$  为波数,  $k_B$  为玻尔兹曼常数,  $T$  为温度,  $m$  为分子质量;  $d = \Delta/\omega_D$ ,  $\Delta$  为谱线偏移;  $g = \Gamma/\omega_D$ ,  $\Gamma$  为碰撞线宽;  $\tau = \omega_D t$ ,  $t$  为时间。

### 2.2 AVP 线型算法

分子之间发生碰撞时,其相互作用时间是有限的,这种有限的碰撞时间会导致分子吸收线型呈现非对称分布。在 VP 算法的基础上,当考虑到色散不对称时,即为 AVP 算法,其标准线型函数可表示为<sup>[4]</sup>

$$I_{AVP}(u) = \frac{1}{\pi} \int_0^{+\infty} d\tau \cdot \exp\left(-\xi - i\beta + iu\tau - id\tau - g\tau - \frac{\tau^2}{4}\right), \quad (2)$$

式中: $\xi$  为描述线强度碰撞大小的参数;  $\beta$  为描述碰撞不对称性大小的参数。

相比 VP 算法, AVP 算法多了  $(-\xi - i\beta)$  项,参数  $\xi$ 、 $\beta$  均与碰撞持续时间有关。

### 2.3 SDVP 线型算法

分子之间发生碰撞时,不考虑分子运动速度的改变,只考虑碰撞和多普勒展宽的相关性,以及碰撞参数和分子速度之间的依赖关系时,采用 SDVP 算法描述分子的吸收光谱。SDVP 算法的标准线型函数可表示为<sup>[4]</sup>

$$I_{SDVP}(u) = \frac{2}{\pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-x^2) \cdot \left\{ \arctan\left[\frac{u - d B_s(x; \alpha) + x}{g B_w(x; \alpha)}\right] + \frac{i}{2} \cdot \ln\left\{1 + \left[\frac{u - d B_s(x; \alpha) + x}{g B_w(x; \alpha)}\right]^2\right\} \right\} dx, \quad (3)$$

式中: $B_s(x; \alpha)$ 和  $B_w(x; \alpha)$ 为依赖于速度的无量纲

函数;  $B_S(x; \alpha) = \frac{\Delta(xv_{m_E})}{\Delta}$ ,  $\Delta$  为碰撞谱线偏移,  $\Delta(xv_{m_E})$  为碰撞偏移对分子速度的依赖关系;  $B_W(x; \alpha) = \frac{\Gamma(xv_{m_E})}{\Gamma}$ ,  $\Gamma$  为碰撞线宽,  $\Gamma(xv_{m_E})$  为碰撞线宽对分子速度的依赖关系,  $v_{m_E}$  为吸收气体粒子的最可几速度;  $\alpha = \frac{m_P}{m_E}$ ,  $m_P$  为无吸收混合气体的分子质量,  $m_E$  为吸收气体粒子的质量;  $x$  为吸收气体粒子的约化速度。

### 2.4 SDAVP 线型算法

SDAVP 算法在 SDVP 算法的基础上, 考虑到碰撞时间这一有限性因素, 即碰撞导致的分布为非对称性, 其标准线型函数可表示为<sup>[4]</sup>

$$I_{SDAVP}(u) = \frac{2}{\pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp(-x^2) x \cdot \exp[-\xi B_D(x; \alpha) - i\beta B_A(x; \alpha)] \times G, \quad (4)$$

其中,

$$G = \arctan\left[\frac{u - d B_S(x; \alpha) + x}{g B_W(x; \alpha)}\right] + \frac{i}{2} \ln\left\{1 + \left[\frac{u - d B_S(x; \alpha) + x}{g B_W(x; \alpha)}\right]^2\right\}, \quad (5)$$

式中:  $B_D(x; \alpha)$  和  $B_A(x; \alpha)$  为依赖于速度的无量纲函数,  $B_D(x; \alpha) = \frac{\xi(xv_{m_E})}{\xi}$ ,  $B_A(x; \alpha) = \frac{\beta(xv_{m_E})}{\beta}$ 。

### 2.5 GP 线型算法

GP 算法是一种基于分子间的软碰撞而发展的一种模型, 用来描述分子间的低速高频碰撞。此种模型可以忽略单次碰撞引起的速度变化, 但不能忽略多次碰撞累积的速度变化。GP 算法的标准线型函数可表示为<sup>[4]</sup>

$$I_{GP}(u) = \frac{1}{\pi} \int_0^{+\infty} \exp\left\{iu\tau - id\tau - g\tau - \frac{1}{2z_s^2}\right. \\ \left. [z_s\tau - 1 + \exp(-2z_s\tau)]\right\} d\tau, \quad (6)$$

式中:  $z_s$  为拟合参数, 与  $z$  具有相同的量纲,  $z = \frac{v}{\omega_D}$ ,  $v$  为引起速度变化的碰撞频率。

### 2.6 AGP 线型算法

AGP 线型算法在 GP 线型算法的基础上考虑到分子碰撞时间的有限性, 导致线型分布不对称, 其标准线型函数表示为<sup>[4]</sup>

$$I_{AGP}(u) = \frac{1}{\pi} \int_0^{+\infty} d\tau \exp\left\{-\xi - i\beta + iu\tau - id\tau - \right. \\ \left. g\tau - \frac{1}{2z_s^2} [z_s\tau - 1 + \exp(-2z_s\tau)]\right\}. \quad (7)$$

## 3 吸收线型算法的研究方案

本研究采用 C 语言框架进行算法设计<sup>[16]</sup>, 并利用 MATLAB 实现程序界面化。界面化设计主要包括两部分: 图形用户界面(GUI)部分和函数拟合程序部分。

### 3.1 图形用户界面设计

该部分是内部程序的图形化界面, 主要包括数据文件的读取、拟合参数的初始化设置、吸收线型的选择、计算结果的显示与输出<sup>[17]</sup>, 设计流程图如图 1 所示。数据导入部分用于打开待拟合文件所在的存储目录, 并读取数据。界面中可以设置的参数包括测量时气体的温度、压强、所测气体吸收峰对应的线强度以及对应线型的拟合参数, 比如  $\Delta$ 、 $\xi$  和  $\beta$  等。线型选择部分用于选择拟合所需的吸收线型, 分别为 VP、AVP、SDVP、SDAVP、GP 和 AGP 算法, 每种线型分别对应程序内部的一个子程序。结果显示部分用于显示程序运行结束后得到的各项计算结果, 包括线型参数的拟合值、实验数据拟合曲线以及残差的图形化显示、测量样本中吸收气体对应的气压和浓度。可以通过输出部分选择文件目录, 将计算结果存储为指定格式的文件, 如 txt 或 csv 等。不同线型函数所需拟合参数的数量不同, 所需的拟合时间也不相同。

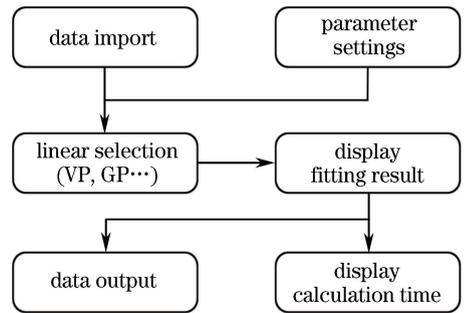


图 1 图形用户界面设计流程图

Fig. 1 Flow chart of graphical user interface design

### 3.2 拟合函数的实现及误差的分析处理

拟合算法程序包括 1 个主程序和 6 个子程序。程序设计流程图如图 2 所示。主程序的部分软件代码用于实现 GUI 的各种功能, 包括子程序调用、数据处理、逻辑判断以及拟合运算<sup>[18]</sup>等。

子程序相对比较独立, 分别是 6 种线型函数的软件代码。这 6 个子程序需要对高维矩阵的每个元素进行操作, 涉及的计算量较大。为了提高计算效率, 将 6 个子程序编译为 MEX 格式的文件<sup>[16, 19]</sup>。MEX 是 MATLAB 和 C/ Fortran 语言的接口, 可以

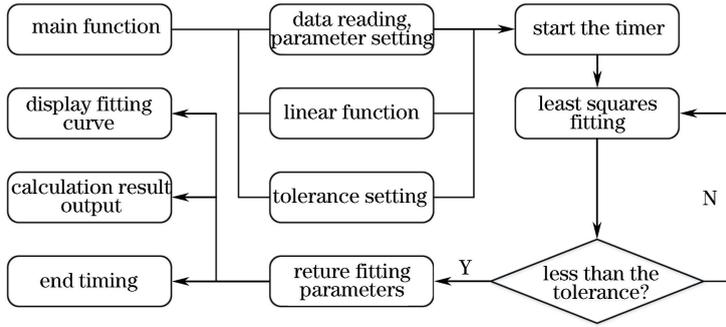


图 2 程序设计流程图

Fig. 2 Flow chart of program design

将 C 语言或者 Fortran 语言程序编译为可被 MATLAB 调用的函数,以提高大型运算的计算效率。

调用 MATLAB 拟合优化工具箱<sup>[20]</sup>中的最小二乘拟合函数(Lsqcurvefit)对 6 种线型进行拟合运算<sup>[21-22]</sup>。Lsqcurvefit 函数参数包括线型函数、拟合参数初始值、测量数据和拟合容差等。在迭代计算中,当实际容差小于设定值时,该函数返回线型函数的参数拟合值。

为了便于比较各线型函数的拟合速度,从拟合开始时计时,拟合完成时结束计时,并在 GUI 上显示所选线型函数的拟合时间。主程序调用绘图函数在 GUI 上绘制拟合曲线和残差曲线,显示计算结果,并将结果输出到指定的文件夹中保存。

### 4 程序算法验证与讨论

为验证 6 种线型拟合方法的可行性,对已知浓度的 CO<sub>2</sub> 气体的吸收光谱进行线型拟合测试。首先在 CRDS 光腔中注入已知浓度的 CO<sub>2</sub> 气体,然后连接近红外激光光源。激光通过半导体光放大器(SOA)对功率进行放大后耦合进入光腔,之后经由光腔入射到光腔另一侧的光电探测器上,光电探测器受入射激光的激发后产生电流信号,电流信号通过电路转化为电压信号并输出,该电压信号触发数据采集模块进行数据的采集和存储,从而完成吸收光谱数据的采集过程。

本研究对多组数据进行采集拟合测试,如

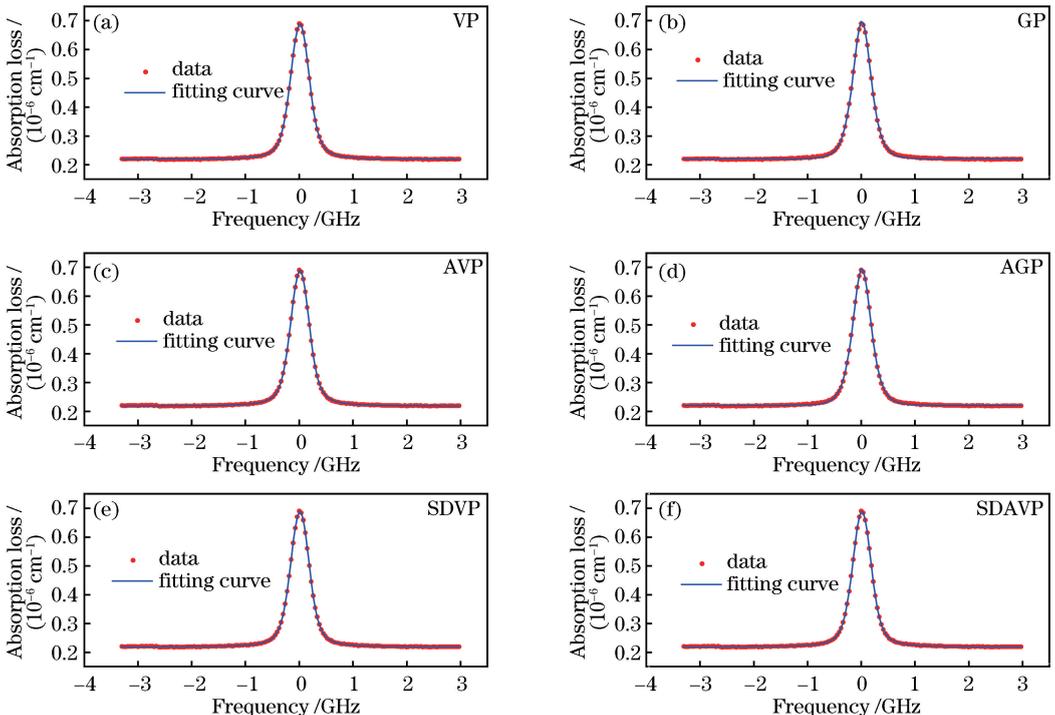


图 3 6 种线型对第 1 组数据的拟合结果

Fig. 3 Fitting results of six line-shapes for first group data

图 3(a)和图 3(b)给出其中的两组数据。在曲线拟合中,CO<sub>2</sub>吸收线位置在 6351.6401 cm<sup>-1</sup>处的吸收峰对应的线型强度为 8.443 × 10<sup>-24</sup> cm<sup>-1</sup>/(molecule · cm<sup>-2</sup>),通过 HITRAN2016 数据库<sup>[12]</sup>查找获取两组数据的测量气体温度分别为 29.228 °C 和 30 °C,压强分别为 2714.80 Pa 和 5869.98 Pa。根据本研究设计的 6 种线型拟合程序,对测量数据预处理后进行拟合,6 个线型的拟合结果如图 3 和图 4 所示,其中横坐标是频率,单位为 GHz,纵坐标是吸收损耗,单位是 10<sup>-6</sup> cm<sup>-1</sup>。图

中的离散点为测量数据,连续曲线是根据拟合参数和线型函数绘制的拟合曲线。从图 3~4 中可以看到,实验测量点和拟合曲线几乎完全重合,说明本研究介绍的 6 种光谱线型均能够精确地对实验数据进行拟合。

对 6 种线型拟合后的残差进行计算,结果如图 5~6 所示。通过两组数据均可以看出,这 6 种线型的残差总体较小,且在零轴上下小范围内波动,整体趋势相对平缓,说明这 6 种线型对气体吸收光谱的拟合均较为准确。

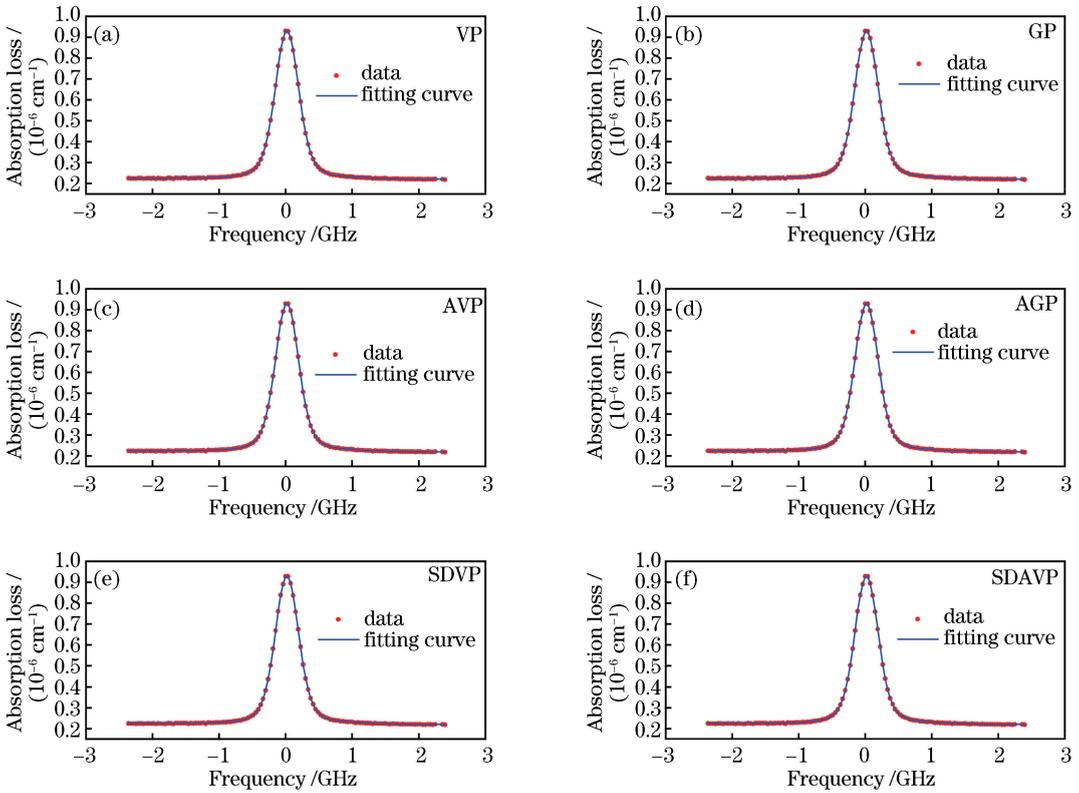


图 4 6 种线型对第 2 组数据的拟合结果

Fig. 4 Fitting results of six line-shapes for second group data

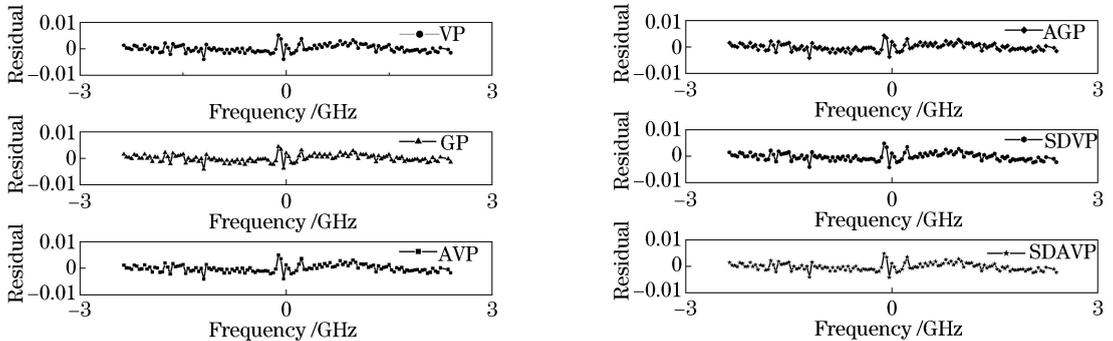


图 5 6 种线型对第 1 组数据的拟合残差分析图

Fig. 5 Fitting residual analyses of six line-shapes for first group data

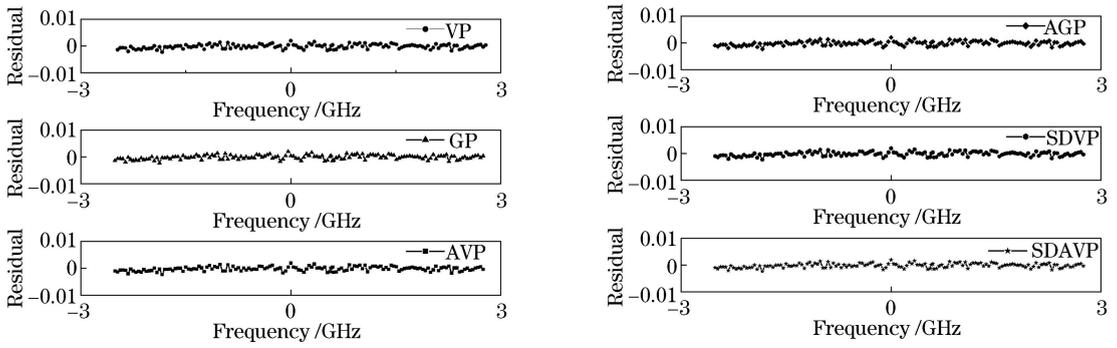


图6 6种线型对第2组数据的拟合残差分析图

Fig. 6 Fitting residual analyses of six line-shapes for second group data

为了验证实验的稳健性,本研究对多组数据进行了重复计算,分析发现,结果均接近,因此取各个数据的平均值进行具体分析。从表1可以看出,本实验中平均残差最大的线型是AVP算法,平均残差最小的线型是GP算法及AGP算法。由于残差均在千分之五以内,因此这6种线型的拟

合均符合精度要求,由此验证了6种线型拟合方法在气体拟合曲线中的可行性。6种线型拟合算法按照运算时间由短到长排列的顺序为AVP、VP、GP、AGP、SDVP、SDAVP算法。基于拟合残差与运算时间综合考虑,认为GP线型算法拟合最为理想。

表1 6种线型的拟合结果

Table 1 Fitting results of six line-shap fitting algorithms

Line-shape fitting algorithm	VP	AVP	GP	AGP	SDVP	SDAVP
Maximum residual / $10^{-3}$	5.0515	5.0515	4.4458	4.4458	5.0532	5.0588
Minimum residual	$3.2530 \times 10^{-7}$	$2.9246 \times 10^{-3}$	$7.4884 \times 10^{-6}$	$7.4883 \times 10^{-6}$	$2.3590 \times 10^{-6}$	$1.7472 \times 10^{-6}$
Average residual / $10^{-3}$	1.3568	3.1748	1.3212	1.3212	1.3564	1.35686
Computing time/s	2.5746	1.7516	17.8795	18.3199	207.5350	389.6820

## 5 结 论

通过MATLAB工具编制了气体吸收光谱研究中常用的VP、GP、AVP、AGP、SDVP和SDAVP拟合算法,拟合算法的GUI用于数据读取、参数设置和初始化、结果显示与输出。内部程序包括主程序与线型函数相关的6个子程序,为了提高运行效率,将子程序编译为MEX文件。最后,将6种拟合线型应用到CRDS实验中,对已知浓度的CO<sub>2</sub>气体的吸收光谱进行拟合。结果表明,这6种线型算法对气体分子的拟合均相对准确,GP算法的平均残差最小,运算时间最短,更适合该组实验数据的拟合。这种将6种拟合算法同时实现并研究其在CRDS中的应用,在国内尚不多见,对CRDS在气体分子拟合中的进一步研究具有一定的参考价值。

## 参 考 文 献

- [1] Galatry L. Simultaneous effect of Doppler and foreign gas broadening on spectral lines [J]. Physical Review, 1961, 122(4): 1218-1223.
- [2] Berman P R. Speed-dependent collisional width and

shift parameters in spectral profiles [J]. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 1972, 12(9): 1331-1342.

- [3] Ciuryło R, Szudy J. Speed-dependent pressure broadening and shift in the soft collision approximation [J]. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 1997, 57(3): 411-423.
- [4] Ciuryło R. Shapes of pressure- and Doppler-broadened spectral lines in the core and near wings [J]. Physical Review A, 1998, 58(2): 1029-1039.
- [5] Yin Z Q, Wu C, Gong W Y, et al. Voigt profile function and its maximum [J]. Acta Physica Sinica, 2013, 62(12): 123301.  
尹增谦, 武臣, 宫琬钰, 等. Voigt线型函数及其最大值的研究[J]. 物理学报, 2013, 62(12): 123301
- [6] Liu M H, Dong Z R, Xin G F, et al. Discrimination method of Raman spectral peaks based on Voigt function fitting [J]. Chinese Journal of Lasers, 2017, 44(5): 0511003.  
刘铭晖, 董作人, 辛国锋, 等. 基于Voigt函数拟合的拉曼光谱谱峰判别方法[J]. 中国激光, 2017, 44(5): 0511003.

- [7] Boone C D, Nassar R, Walker K A, *et al.* Retrievals for the atmospheric chemistry experiment Fourier-transform spectrometer [J]. *Applied Optics*, 2005, 44(33): 7218-7231.
- [8] Cao K, Zhang G C, Guo R M, *et al.* Measurement technology of gas composition based on cavity ring down spectroscopy [J]. *Measurement Technique*, 2017(8): 7-11.  
曹珂, 张桂春, 郭瑞民, 等. 基于光腔衰荡光谱的气体成份量测量技术[J]. *计量技术*, 2017(8): 7-11.
- [9] Chen B, Zhou Z Y, Kang P, *et al.* Trace carbon monoxide detection with a cavity ring-down spectrometer [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2015, 35(4): 971-974.  
陈兵, 周泽义, 康鹏, 等. 光腔衰荡光谱方法探测痕量一氧化碳气体[J]. *光谱学与光谱分析*, 2015, 35(4): 971-974.
- [10] Tan Y, Wang J, Tao L G, *et al.* Precise parameters of molecular absorption lines from cavity ring-down spectroscopy [J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2018, 45(9): 0911002.  
谈艳, 王进, 陶雷刚, 等. 光腔衰荡光谱方法测量分子的高精密谱线参数[J]. *中国激光*, 2018, 45(9): 0911002.
- [11] Wang D, Hu R Z, Xie P H, *et al.* Measurement of nitrogen pentoxide in nocturnal atmospheric based on cavity ring-down spectroscopy [J]. *Acta Optica Sinica*, 2017, 37(9): 0901001.  
王丹, 胡仁志, 谢品华, 等. 基于腔衰荡光谱技术测量夜间大气中五氧化二氮[J]. *光学学报*, 2017, 37(9): 0901001.
- [12] Gordon I E, Rothman L S, Tan Y, *et al.* HITRAN2016: Part I. Line lists for H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>, O<sub>3</sub>, N<sub>2</sub>O, CO, CH<sub>4</sub>, and O<sub>2</sub> [C]//72nd International Symposium on Molecular Spectroscopy, June 19-23, 2017, University of Illinois, Urbana-Champaign, Illinois, USA. [S.l.: s. n.], 2017.
- [13] Crisp D, Atlas R M, Breon F M, *et al.* The orbiting carbon observatory (OCO) mission [J]. *Advances in Space Research*, 2004, 34(4): 700-709.
- [14] Dicke R H. The effect of collisions upon the Doppler width of spectral lines [J]. *Physical Review*, 1953, 89(2): 472-473.
- [15] Nelkin M, Ghatak A. Simple binary collision model for van Hove's  $G_s(r, t)$  [J]. *Physical Review*, 1964, 135(1A): A4-A9.
- [16] Zou Y M. Mixed programming of MATLAB and C language [J]. *Automation in Petro-Chemical Industry*, 2000, 36(2): 51-53.  
邹益民. MATLAB与C语言的混合编程[J]. *石油化工自动化*, 2000, 36(2): 51-53.
- [17] Zong J B, Duan L Y, Wang Y, *et al.* Research and realization of method for making software based on MATLAB GUI [J]. *Electronic Design Engineering*, 2010, 18(7): 54-56.  
宗节保, 段柳云, 王莹, 等. 基于MATLAB GUI软件制作方法的研究与实现[J]. *电子设计工程*, 2010, 18(7): 54-56.
- [18] Yang Y S. Curve fitting based on Matlab and the application on test data [J]. *Computer and Information Technology*, 2009, 17(2): 34-36.  
杨云升. Matlab曲线拟合及其在试验数据处理中的应用[J]. *电脑与信息技术*, 2009, 17(2): 34-36.
- [19] Xie L P, Long Z Q, Xie H B. Performance optimization of Matlab software through mex files [J]. *Computer Applications*, 2001, 21(9): 101-102.  
谢莉萍, 龙志强, 谢海斌. 运用 mex 文件优化 Matlab 软件性能[J]. *计算机应用*, 2001, 21(9): 101-102.
- [20] Hu Q W. Curve fitting by curve fitting toolbox of MATLAB [J]. *Computer Knowledge and Technology*, 2010, 6(21): 5822-5823.  
胡庆婉. 使用 MATLAB 曲线拟合工具箱做曲线拟合[J]. *电脑知识与技术*, 2010, 6(21): 5822-5823.
- [21] Tang J D. Nonlinear curve fitting based on MATLAB [J]. *Computer and Modernization*, 2008(6): 15-19.  
唐家德. 基于 MATLAB 的非线性曲线拟合[J]. *计算机与现代化*, 2008(6): 15-19.
- [22] Chen G, Ren Z L, Sun H Z. Curve fitting in least-square method and its realization with Matlab [J]. *Ordnance Industry Automation*, 2005, 24(3): 107-108.  
陈光, 任志良, 孙海柱. 最小二乘曲线拟合及 Matlab 实现[J]. *兵工自动化*, 2005, 24(3): 107-108.