

## 量热实验数据采集处理软件的自主开发与应用

赵泽华, 安孝彦, 徐金荣\*, 杨玲, 赵浩, 吴忠云\*

北京大学化学与分子工程学院, 化学基础国家级实验教学示范中心(北京大学), 北京 100871

**摘要:** 量热实验是物理化学实验课程中验证能量守恒定律和测定焓变的经典热力学实验。然而, 传统手动操作存在数据采集效率低、处理繁琐等问题。为此, 基于Python自主开发了具有图形界面的量热实验软件。集成数据采集、智能处理与可视化功能, 实现了溶解热与燃烧热实验的数字化改造。软件通过串口通信模块实时获取温差数据, 利用科学计算库自动完成雷诺校正与热力学计算, 并结合交互式界面直观呈现实验数据。实践表明, 该软件可缩短实验操作时长约30%, 释放的课时资源为实验教学创造了更多探究空间。其教学应用有效推动了实验教学从操作训练向热力学原理深度理解的转型, 并构建了“基础-进阶-创新”三级培养体系, 为高校实验教学数字化转型提供了可复制的技术路径。

**关键词:** Python; 量热实验; 数据采集; 雷诺校正; 溶解热; 燃烧热; 开源软件

中图分类号: G64; O6

## Independent Development and Application of Calorimetric Experiment Data Acquisition and Processing Software

Zehua Zhao, Xiaoyan An, Jinrong Xu\*, Ling Yang, Hao Zhao, Zhongyun Wu\*

National Demonstration Center for Experimental Chemistry Education (Peking University), College of Chemistry and Molecular Engineering, Peking University, Beijing 100871, China.

**Abstract:** Calorimetry experiments are classic thermodynamic investigations in physical chemistry laboratory courses, serving to verify the law of energy conservation and determine enthalpy changes. However, conventional manual operations are characterized by inefficient data acquisition and laborious processing procedures. To address these limitations, we developed a Python-based software featuring a graphical user interface (GUI) specifically designed for calorimetric experiments in undergraduate chemistry education. This software integrates comprehensive functionalities including real-time data acquisition, intelligent processing, and visualization capabilities, facilitating the digital transformation of both dissolution and combustion calorimetry experiments. The software acquires real-time temperature difference data via serial communication modules, executes Reynolds correction and thermodynamic calculations using scientific computing libraries, and displays experimental data in real-time through an interactive interface. Implementation results demonstrate that the software reduces experimental operation time by approximately 30% and frees up instructional time, creating more opportunities for in-depth exploration of thermodynamic principles. This innovation effectively shifts the instructional focus from basic operational training to deep understanding of thermodynamic principles, and establishes a “Foundation-Engagement-Innovation” three-tier training system, providing a replicable technical path for the digital transformation of experimental teaching in higher education institutions.

收稿: 2025-05-15; 录用: 2025-07-14; 网络发表: 2025-08-04

\*通讯作者, Emails: xujinrong@pku.edu.cn (徐金荣); wuzy@pku.edu.cn (吴忠云)

基金资助: 2021年度基础学科拔尖学生培养计划2.0研究重点课题(20211002)

**Key Words:** Python; Calorimetry experiment; Data acquisition; Reynolds correction; Heat of dissolution; Heat of combustion; Open-source software

量热实验是各高校物理化学实验课程中的热力学经典实验<sup>[1-4]</sup>, 其通过测量体系的温差-时间曲线, 结合雷诺校正减小环境对实验体系温度的影响, 再根据溶质或燃烧物的质量等参数进行热力学计算, 即可获得有关物理量数值。该实验不仅能验证能量守恒与焓变等基本原理, 更能培养学生实验设计与数据处理能力。然而, 传统实验方法存在局限性: 一方面, 手动数据采集的平均速度约为15秒/数据点, 每组实验采集约50个数据点, 记录速度限制了采集效率, 操作重复也易导致记录错误; 另一方面, 雷诺校正<sup>[5]</sup>依赖人工拟合基线并寻找使两条拟合直线与温差-时间曲线积分面积相等的交点, 难免存在主观误差, 多组雷诺校正计算过程重复且复杂。繁琐的数据记录和重复性处理工作不仅降低了实验效率, 更挤占了学生对实验原理深入思考和细节探究的宝贵时间。

针对上述问题, 现有改进方案主要有商品化全自动量热仪<sup>[6]</sup>和数据处理工具, 如Origin、Python。例如, 魏丰源<sup>[7]</sup>基于Origin提出雷诺校正图直接绘制法, 相对于手工作图和分段拟合法依赖人工判断关键点提高了数据处理准确性; 王强等<sup>[8]</sup>开发Python程序实现多组数据批处理; 赵明坚等<sup>[9]</sup>开发了在线采集系统增加了数据密度。然而, 全自动仪器存在“黑箱”及自动化程度过高不利于教学实践, 而现有编程方案缺乏数据的“采集→处理→计算”全流程整合, 且在处理和计算方法上仍需优化。

本研究基于Python开发了一款开源、跨平台的量热实验数据采集与处理软件。该软件集成串口通信(pySerial)、实时可视化(Tkinter、Matplotlib)与科学计算(NumPy、SciPy)模块, 支持Windows/macOS系统一键运行, 且在GitHub中开源分享。实验时仅需输入实验参数并按流程操作, 即可自动完成数据采集、雷诺校正与热力学计算。相较于传统手动操作, 实验操作时长缩短约30%, 数据处理效率大幅提升。该方案在保留教学实践深度的基础上, 通过编写开放源码的整合程序实现“采集→处理→计算”全流程透明化, 将抽象的补偿原理转化为直观的可视化交互。作为开源软件的使用者, 任何学生都有机会深入学习源代码、为其提供改进方案。这不仅加深了学生对实验原理的理解, 更为学生提供了探索和改进的机会, 有效培养了其计算思维与实践创新能力, 为信息技术与经典实验教学的深度融合提供了可推广的示范路径。

## 1 实验原理

### 1.1 溶解热的测定

溶解热实验利用电热补偿法, 测量硝酸钾溶解中的热效应<sup>[10]</sup>, 计算积分溶解热、微分溶解热、积分冲淡热、微分冲淡热。实验分为多次加样, 每次加样溶解后溶液温度会下降, 待温度稳定后对加热丝通电使溶液温度回升。各次加样的热效应与加热丝电阻、电流、通电时间等有如下关系:

$$Q = I^2 R t \Delta T / \Delta T' \quad (1)$$

式中,  $Q$ 为该次加样产生的热效应(J),  $I$ 、 $R$ 、 $t$ 分别为通过加热丝的电流(A)、加热丝的电阻( $\Omega$ )、加热时间(s),  $\Delta T$ 与 $\Delta T'$ 分别为加入溶质前后和通电加热前后的温差绝对值(K)。

获得多次累积加样的溶解热数据后可以计算相应的积分溶解热 $Q_s$ 。对 $Q_s$ 有如下经验公式:

$$Q_s = Q_s^0 \frac{an_0}{1 + an_0} \quad (2)$$

式中 $Q_s^0$ 为无限稀释体系的积分溶解热;  $a$ 为拟合系数, 反映了溶质与溶剂间相互作用的强弱;  $n_0$ 为溶剂的物质的量 $n_1$ 与溶质的物质的量 $n_2$ 之比。该式可以通过两侧取倒数转化为 $1/Q_s$ 与 $1/n_0$ 之间的线性关系。由此可以根据如下关系式分别计算从 $n_0'$ 冲淡至 $n_0''$ 的积分冲淡热:

$$Q_d = Q_s \Big|_{n_0'}^{n_0''} \quad (3)$$

微分冲淡热:

$$\left(\frac{\partial Q}{\partial n_1}\right)_{n_2} = \left(\frac{\partial Q_s}{\partial n_0}\right)_{n_2} = Q_s^0 \frac{a}{(1+an_0)^2} \quad (4)$$

微分溶解热:

$$\left(\frac{\partial Q}{\partial n_2}\right)_{n_1} = Q_s - \left(\frac{\partial Q}{\partial n_1}\right)_{n_2} n_0 = Q_s^0 \frac{a^2 n_0^2}{(1+an_0)^2} \quad (5)$$

## 1.2 燃烧热的测定

燃烧热实验利用氧弹式热量计,以苯甲酸为标准物质,测定蔗糖的燃烧热。物质的恒容燃烧热和量热计常数有如下关系:

$$-Q_v G - \Sigma q = (W + DC_{\text{水}}) \Delta T \quad (6)$$

式中 $Q_v$ 为苯甲酸的恒容燃烧热( $\text{J}\cdot\text{g}^{-1}$ ), $G$ 为苯甲酸的质量( $\text{g}$ ), $\Sigma q$ 为其他物质燃烧产生的热量的校正正值,如固定待燃烧物质时所需的镍丝和棉线, $W$ 为量热计常数, $D$ 为氧弹式热量计桶中水的质量( $\text{g}$ ), $C_{\text{水}}$ 为水的比热容( $\text{J}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ ), $\Delta T$ 为由于燃烧使体系温度升高的数值( $\text{K}$ )。实验中,先以已知燃烧热的苯甲酸代入上式,计算出量热计常数 $W$ ,进而计算未知的蔗糖燃烧热。

## 1.3 雷诺校正

在热化学实验中,体系与环境之间存在热传导、辐射等形式的热交换,搅拌等操作也会引入部分热量。不进行实验时,实验体系与环境温差小而稳定,体系和环境间能量交换速率稳定。在燃烧热实验的反应期和溶解热实验的溶解期,温差变化较大,交换热量的速率随时间变化,因此实验中常采用作图或经验公式的方法消除其影响。使用面积判别的雷诺校正方法即是其中一种。如图1所示,作前期和后期较平稳区间的切线,然后作一条垂线与切线延长线相交于C、D两点,使其与反应区曲线的交点E满足 $S_{ACE} = S_{BDE}$ ,C、D两点的温差即为校正后体系内部反应期或溶解期导致体系温度变化的数值,垂线CD的横坐标 $t_0$ 为雷诺校正点。

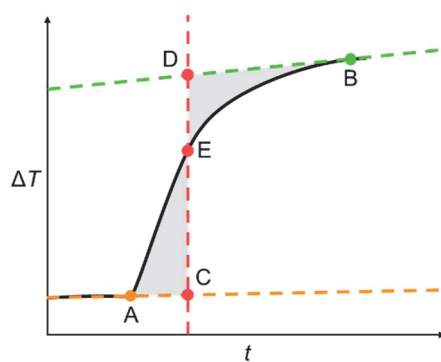


图1 雷诺校正示意图

数据处理软件在计算中将积分方程化简为二次方程。将温差-时间曲线记为 $T(t)$ ,温度变化前后的温差-时间拟合直线分别记为 $l_1(t)$ 和 $l_2(t)$ ,那么雷诺校正点 $t_0$ 的数学定义为:

$$\int_{t_1}^{t_0} (T(t) - l_1(t)) dt = \int_{t_0}^{t_2} (l_2(t) - T(t)) dt \quad (7)$$

其中 $t_1$ 和 $t_2$ 分别为温度变化的起点和终点。将上式移项可得:

$$\int_{t_1}^{t_0} l_1(t) dt + \int_{t_0}^{t_2} l_2(t) dt = \int_{t_1}^{t_0} T(t) dt + \int_{t_0}^{t_2} T(t) dt = \int_{t_1}^{t_2} T(t) dt \quad (8)$$

此时积分方程中只有一条曲线需要使用数值方法计算一次定积分,而其他直线的定积分可以直接由公式得出,最终只需求解二次方程,大大提高了计算速度。

## 2 软件设计与实现

### 2.1 数据采集

本软件通过串口通信协议与SWC-IID型精密数字温度温差仪实现自动化数据采集。针对设备通信特点(波特率1200、十六进制),开发了串口自动匹配功能,使用pySerial、getComPorts函数可智能识别有效端口并建立稳定连接。数据解析过程中,依据7帧通信协议(起始帧、机器码、符号帧及4帧数字数据)使用pySerial库编写了温差计算函数derive\_Delta\_T,结合Python内置的time库,串口匹配成功后即实时采集温差-时间序列数据。并将Python第三方库pySerial重新打包在EasySerial类中,实现了串口状态的全流程控制(启闭、复用与异常中断保护),确保数据采集的连续性与可靠性。

### 2.2 数据处理

数据处理模块基于Python第三方库NumPy和SciPy开发。使用数据采集模块得到的数据以固定顺序存储在csv格式的文件中,基于NumPy库,读取实验参数和温差-时间数据点。再使用SciPy的BSpline对温差-时间曲线进行平滑连线、结合半自动选择的拟合直线范围进行积分,得到雷诺校正后的 $\Delta T$ 。根据实验参数,如溶解热实验中的溶质质量、摩尔质量、电流、电阻等,和校正后的 $\Delta T$ ,计算可得溶解热或燃烧热。计算结果以固定格式存储在另一个csv文件中,使用matplotlib库完成绘图。

数据处理采用分阶段自动化策略:在导入数据时,软件将基于滑动时间窗口标准差算法,自动识别温差-时间曲线中30-40 s范围的稳定平台期,替代人工基线选择;计算雷诺校正点时,基于B样条算法对原始温差-时间曲线进行平滑拟合,便于灵活地计算曲线积分;随后通过数值积分计算积分面积平衡点,实现 $\Delta T$ 的客观校正;最终基于溶解热或燃烧热的实验参数与校正后 $\Delta T$ ,自动计算溶解热或燃烧热,并输出结构化数据文件与可视化图表。全程采用科学计算库优化算法效率,计算结果同步给出统计误差,确保数据处理的准确性。

### 2.3 可视化与人机交互

在数据采集集中,软件使用matplotlib实时绘制温差-时间曲线;数据处理时,自动生成美观的可视化绘图,可直接插入实验报告。基于Python内置的图形界面库Tkinter编写了软件GUI(Graphical User Interface),使得学生在实验中能够快速上手操作、直接观察实验数据变化,在实验后的数据处理中调整温度平台范围时也可以实时获得拟合直线的信息。与使用Origin进行数据处理相比,使用软件无需在每次线性拟合时均生成新的数据表,使处理过程更简洁直观。在完成软件构建后,使用PyInstaller,为Windows和macOS操作系统分别打包,保证每一位学生在无需安装Python环境的情况下都能即开即用。

### 2.4 软件优化

在实现自动化采集、智能化处理和可视化的基础上,软件进一步优化了操作便捷性、容错机制与安全性,使其真正适用于复杂的实验教学环境。

#### 2.4.1 操作便捷性优化

(1) 快捷键支持:软件中为多数常用功能绑定了快捷键。例如,保存计算结果和图片时,可使用Ctrl+S一键保存。在实验过程和数据处理中,快捷键的使用能够加快操作速度,缩短处理时间。

(2) 框计算:实验参数输入框支持实时计算,便于快速计算绝对温标、摩尔质量等。如输入“273.15+25.00”后回车,输入框将自动显示结果为“298.15”。

(3) 内置常数:实验中涉及的常数,如水在不同温度下的热容、密度等,均已基于CRC Handbook进行三阶插值后导入软件中,与实验数据中的温度绑定,无需手动查询。

#### 2.4.2 容错机制与安全性优化

(1) 完善的异常捕获机制:针对测试阶段发现的各类潜在风险,如串口意外插拔、信号丢失、关键实验参数缺失等,软件设计了全面的错误捕获与处理逻辑。这有效避免了因意外操作或外部环境变化导致的程序崩溃、无响应等问题,保障了软件的长期稳定运行。

(2) 数据安全与自动备份:为应对极低概率的系统崩溃或学生疏忽,例如忘记点击“开始记录”,

软件在第一次接收到有效信号时，会自动在后台创建并维护一个临时文件。该文件实时记录所有原始数据及关键操作(如加热、停止加热)的时间戳，确保在意外情况下，实验数据能得到最大限度的保留与恢复。

(3) 严密的操作流程锁定：根据实验操作的实际，软件设置了精密的按钮控制逻辑。例如，记录溶解热数据时，点击“开始记录”后，必须依次点击“开始加热”“停止加热”，才能点击“停止记录”，引导学生完成实验。同时，在点击“开始记录”后，软件将自动禁用主界面的关闭按钮，只有在任务管理器中才能强行关闭，避免误操作导致的数据采集中断。

## 2.5 实验应用

教学应用时，提供了软件操作说明文档和操作视频，使学生能够快速掌握使用方法。软件的图形界面包括四个部分：数据采集、溶解热计算、燃烧热计算、溶解热拟合。可以覆盖量热实验中所有的数据采集与处理内容。每个界面包括的功能分区见表1。

表1 软件分区介绍

分区名	功能
控制区	控制当前界面、切换界面
实时读数(数据) <sup>a</sup>	展示数据采集读数或数据文件内容
实验参数	输入/展示记录的实验参数，可修改
系统信息	即时反馈操作结果，默认展示操作说明
实时绘图(绘图) <sup>b</sup>	绘制温差-时间曲线或溶解热拟合曲线
拟合范围 <sup>c</sup>	输入/展示参与雷诺校正的数据点范围

<sup>a</sup>在溶解热拟合界面展示处理后的数据；在其余界面展示原始数据；<sup>b</sup>在溶解热拟合界面展示处理后的静态图片；在其余界面展示拟拟合变化的实时图片；<sup>c</sup>只在溶解热计算和燃烧热计算界面出现，用于雷诺校正

以溶解热实验数据处理界面为例展示如图2所示。

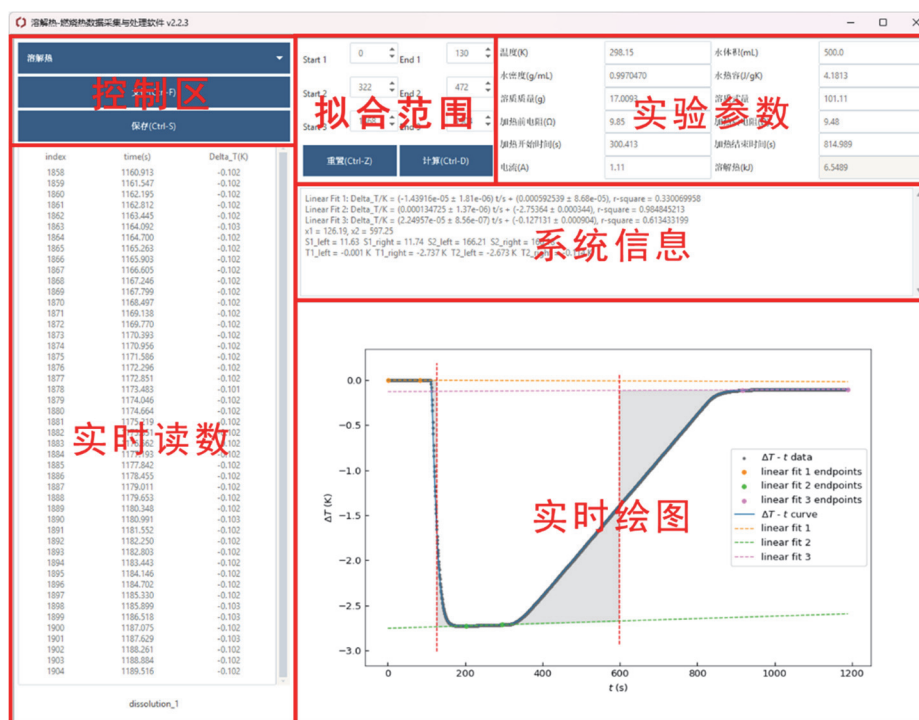


图2 溶解热计算界面

主要操作步骤是：

- (1) 点击“文件”导入数据文件；
- (2) 软件自动读取实验参数，可进行修改；
- (3) 软件自动选取拟合范围，也可手动调整更合适的值；
- (4) 点击“计算”进行雷诺校正和溶解热计算；
- (5) 点击“保存”将图片和数据存储至与原数据文件同目录下。

采用0.5 秒/次高频采样较传统手动记录(15–30 秒/次)有效解决了温度曲线插值失真问题。如图3给出了同一次溶解热实验中用手动记录和自动记录方式的实验数据绘制得到的温差–时间曲线。手动记录(如图3a)在温度平缓区(0–105 s)拟合时出现不合理凸起，且在温度剧烈下降区(105–200 s)数据点不足；而自动记录(图3b)则采集到足够的的数据点，使曲线拟合更加准确合理。软件与Origin软件同时对图3b原始数据处理结果一致，验证了算法的可靠性。

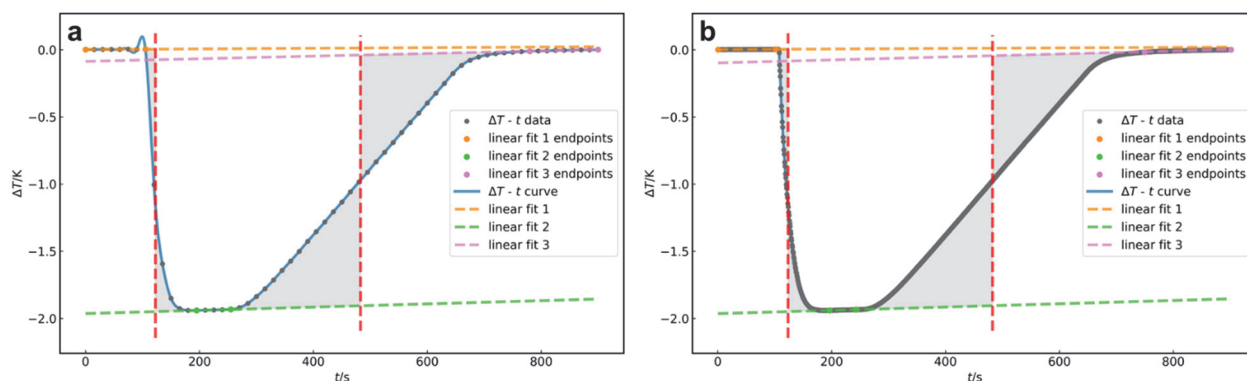


图3 手动记录(a)与自动记录(b)的温差–时间曲线示例

同时使用手动记录和自动记录完成溶解热实验的6次测量，进行溶解热曲线拟合，拟合结果见表2。二者结果接近，自动记录使得 $r^2$ 由0.989上升至0.995，精密度更优。

表2 手动记录和自动记录的拟合结果

组别	$Q_s^0/(\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$	$a$	$r^2$
手动记录	$36.77 \pm 0.12$	$0.2232 \pm 0.0124$	0.989
自动记录	$36.91 \pm 0.08$	$0.2190 \pm 0.0081$	0.995

### 3 实验教学效果

#### 3.1 实验效率提升驱动教学模式创新

本软件在北京大学物理化学实验课程中应用，实验效率从三方面得到提升：模块化设计通过参数自动校验、数据实时采集、可视化雷诺校正及数据表导出等功能，减少了实验失误率；流程优化通过统筹安排实验，软件测量期间可进行下一个样品的称量、压片等准备工作，也减少了同组排队等待时间，整体操作时长缩短约30%；高频率数据采集提升了数据质量，为深度探究实验奠定了数据基础。

实验效率提升释放的课时资源驱动了教学模式创新，推动教学重心从操作训练转向热力学原理探究(如理解测量原理及雷诺校正效应)，研究对象从标准样品拓展至其他材料(如食品油脂、生物质燃料、其他溶解吸热材料)，实验范式从固定流程升级为方案迭代优化(改变测量参数、测量方式)，系统性提升了学生的科学思维能力。

### 3.2 分层培养体系赋能学生多元发展

本项目以实验教学数字化改革为契机,构建了“基础-进阶-创新”三级培养体系。对于全体学生,课时再分配使其在课上深度投入探究性学习;对于开发团队学生,通过需求分析、系统设计、编码实现和测试优化全周期开发实践,将化学原理转化为可执行代码,系统提升了跨学科问题解决能力和团队协作能力;对于有深入学习需求的学生, GitHub开源平台<sup>[11]</sup>提供代码研习和功能扩展机会,不仅激发了创新意识,其成功案例更带动了学生自发组织团队开发其他实验如蔗糖水解实验的数字化项目。这种阶梯式培养模式既满足学生个性化发展需求,其实施路径也为其他院校提供了可借鉴的改革范式。

## 4 结语

本研究开发了开源的量热实验软件,采用高频数据采集、滑动窗口平台期自动识别和二次方程优化雷诺校正等,显著提升了实验效率。在2023–2024学年本校物理化学实验课程中,该软件成功应用于燃烧热和溶解热实验教学实践,取得了显著的教学改革效果。教学实践证明,软件驱动的数字化改革不仅实现了实验流程的技术优化,还为教学范式的变革提供了空间。通过将繁琐的数据记录与处理过程自动化,教师得以重新设计课程内容架构,从传统的操作技能训练转向热力学理论的探索,学生的学习体验从被动的流程执行转为主动的科学探究。“基础-进阶-创新”三级培养体系的构建使不同层次的学生都能在数字化实验教学环境中找到适合自己的学习路径,既保证了基础教学目标的达成,又为拔尖学生提供了创新实践平台。更为重要的是,学生团队的开源开发模式打破了传统实验教学中学生作为知识接受者的单一角色,使其成为教学工具的共同创造者,这种角色转换有效激发了学生的主观能动性和创新潜能。本研究为高等学校实验教学数字化转型提供了一个完整的解决方案,其技术路径、实施策略和评价体系均具有良好的可推广性,对推动信息技术与实验教学的深度融合、培养新时代复合型创新人才具有重要价值。

**致谢:** 感谢2020级陈硕航同学为雷诺校正点计算优化提出的建议。

### 参 考 文 献

- [1] 北京大学化学学院物理化学实验教学组. 物理化学实验. 北京: 北京大学出版社, 2002: 32–40.
- [2] 复旦大学. 物理化学实验. 第4版. 上海: 高等教育出版社, 2024: 25–32.
- [3] 张来英, 解晨鹏, 蒋展, 罗浩轩, 徐晓明, 吴平平, 韩国彬, 夏文生, 袁汝明. 化工高等教育, **2022**, *39* (4), 80.
- [4] 肖厚贞, 王明玉, 刘用, 劳邦盛, 卢凌彬, 庾名槐. 大学化学, **2023**, *39* (2), 7.
- [5] 沈海云, 邵松雪. 广东化工, **2021**, *48* (19), 282.
- [6] 刘雪梅, 王文珍. 物理化学实验. 北京: 化学工业出版社, 2024: 37–48.
- [7] 魏丰源. 大学化学, **2019**, *34* (7), 105.
- [8] 王强, 刘佳节, 黄雪莉, 买买提江·依米提, 黄河, 张迎霜. 化学工程与装备, **2024**, No. 2, 128.
- [9] 赵明坚, 王国平, 王永尧, 钱文霞, 雷群芳, 方文军. 化学教育(中英文), **2022**, *43* (6), 60.
- [10] 高成地, 张潇, 朱蕊欣, 黄海燕, 朱婵. 化工设计通讯, **2025**, *51* (2), 101.
- [11] Dissolution-Combustion. [2025-04-06]. <https://github.com/Zhao-Zehua/Dissolution-Combustion>