

学校编码: 10384  
学号: 33320141152824

分类号\_\_\_\_\_密级\_\_\_\_\_  
UDC\_\_\_\_\_

厦 门 大 学

硕 士 学 位 论 文

基于 Eclipse 的核磁共振谱数据处理软件的  
实现

An Implementation of Data Processing Software for NMR  
spectrum based on Eclipse

刘云龙

指导教师姓名: 陈志伟 副教授  
专业名称: 电子与通信工程  
论文提交日期: 2017 年 5 月  
论文答辩时间: 2017 年 5 月  
学位授予日期: 2017 年 月

答辩委员会主席: \_\_\_\_\_

评 阅 人: \_\_\_\_\_

2017 年 5 月

厦门大学博硕士学位论文摘要库

## 厦门大学学位论文原创性声明

本人呈交的学位论文是本人在导师指导下,独立完成的研究成果。本人在论文写作中参考其他个人或集体已经发表的研究成果,均在文中以适当方式明确标明,并符合法律规范和《厦门大学研究生学术活动规范(试行)》。

另外,该学位论文为( )课题(组)的研究成果,获得( )课题(组)经费或实验室的资助,在( )实验室完成。(请在以上括号内填写课题或课题组负责人或实验室名称,未有此项声明内容的,可以不作特别声明。)

声明人(签名):

年 月 日

厦门大学博硕士学位论文摘要库

# 厦门大学学位论文著作权使用声明

本人同意厦门大学根据《中华人民共和国学位条例暂行实施办法》等规定保留和使用此学位论文，并向主管部门或其指定机构送交学位论文（包括纸质版和电子版），允许学位论文进入厦门大学图书馆及其数据库被查阅、借阅。本人同意厦门大学将学位论文加入全国博士、硕士学位论文共建单位数据库进行检索，将学位论文的标题和摘要汇编出版，采用影印、缩印或者其它方式合理复制学位论文。

本学位论文属于：

1. 经厦门大学保密委员会审查核定的保密学位论文，于 年 月 日解密，解密后适用上述授权。

2. 不保密，适用上述授权。

（请在以上相应括号内打“√”或填上相应内容。保密学位论文应是已经厦门大学保密委员会审定过的学位论文，未经厦门大学保密委员会审定的学位论文均为公开学位论文。此声明栏不填写的，默认为公开学位论文，均适用上述授权。）

声明人（签名）：

年 月 日

# 目录

中文摘要 .....	i
Abstract.....	iii
<b>第一章 绪论 .....</b>	<b>1</b>
1.1 研究背景 .....	1
1.2 研究目的 .....	2
1.3 常见的磁共振数据处理软件 .....	2
1.3.1 Bruker TopSpin.....	3
1.3.2 Aglient VnmrJ.....	4
1.3.3 JEOL Delta.....	5
1.3.4 MestReNova.....	6
1.3.5 SpinStudio.....	7
1.3.6 WXNMR.....	8
1.3.7 其他谱数据处理软件.....	9
1.4 研究内容与论文结构安排 .....	12
<b>第二章 软件需求分析 .....</b>	<b>15</b>
2.1 需求概述 .....	15
2.2 界面需求分析 .....	15
2.3 功能需求分析 .....	16
2.3.1 数据输入输出.....	16
2.3.2 数据显示.....	17
2.3.3 数据处理.....	17
2.3.4 数据分析.....	18
2.3.5 其他功能.....	18
2.4 本章小结 .....	18
<b>第三章 软件概要设计 .....</b>	<b>19</b>
3.1 技术选型 .....	19
3.1.1 开发语言与平台.....	19

3.1.2 GEF.....	20
3.1.3 HDF5.....	21
<b>3.2 数据处理与分析的架构设计 .....</b>	<b>23</b>
<b>3.3 插件体系结构设计 .....</b>	<b>25</b>
<b>3.4 核心功能设计 .....</b>	<b>27</b>
3.4.1 数据中心设计.....	27
3.4.2 处理算法结构设计.....	28
3.4.3 谱图编辑区设计.....	31
3.4.4 峰与积分列表设计.....	32
3.3.5 一维阵列数据管理设计.....	33
3.4.6 谱图打印设计.....	33
<b>3.5 本章小结 .....</b>	<b>35</b>
<b>第四章 数据处理核心算法 .....</b>	<b>37</b>
<b>4.1 FID 预处理算法.....</b>	<b>37</b>
<b>4.2 谱数据处理算法 .....</b>	<b>41</b>
<b>4.3 谱数据分析算法 .....</b>	<b>42</b>
<b>4.4 本章小结 .....</b>	<b>44</b>
<b>第五章 软件系统实现 .....</b>	<b>45</b>
<b>5.1 软件系统概览 .....</b>	<b>45</b>
<b>5.2 用户管理 .....</b>	<b>47</b>
<b>5.3 数据管理 .....</b>	<b>49</b>
<b>5.4 谱图显示 .....</b>	<b>53</b>
5.4.1 一维非阵列谱图显示.....	53
5.4.2 一维阵列谱图显示.....	55
5.4.3 二维谱图显示.....	56
<b>5.5 数据处理 .....</b>	<b>59</b>
5.5.1 FID 预处理.....	59
5.5.2 谱数据处理.....	64
5.5.3 谱数据分析.....	68

5.6 谱图打印 .....	76
5.7 本章小结 .....	79
<b>第六章 总结与展望 .....</b>	<b>81</b>
6.1 总结 .....	81
6.2 展望 .....	81
参考文献 .....	83
研究成果 .....	87
致谢 .....	89

厦门大学博硕士学位论文摘要库



# CONTENTS

<b>Chinese Abstract</b> .....	<b>i</b>
<b>English Abstract</b> .....	<b>iii</b>
<b>Chapter 1 Preface</b> .....	<b>1</b>
<b>1.1 Research background</b> .....	<b>1</b>
<b>1.2 Research purposes</b> .....	<b>2</b>
<b>1.3 Common NMR data processing software</b> .....	<b>2</b>
1.3.1 Bruker TopSpin.....	3
1.3.2 Aglient VnmrJ.....	4
1.3.3 JEOL Delta.....	5
1.3.4 MestReNova.....	6
1.3.5 SpinStudio.....	7
1.3.6 WxNMR.....	8
1.3.7 Otherdata processing softwares.....	9
<b>1.4 Content and Structure of this thesis</b> .....	<b>12</b>
<b>Chapter 2 Requirements analysis of software system</b> .....	<b>15</b>
<b>2.1 Requirements overview</b> .....	<b>15</b>
<b>2.2 Requirements analysis of UI</b> .....	<b>15</b>
<b>2.3 Requirements analysis of some features</b> .....	<b>16</b>
2.3.1 Data input and output.....	16
2.3.2 Data Display.....	17
2.3.3 Data processing.....	17
2.3.4 Data analysis .....	18
2.3.5 Others.....	18
<b>2.4 Conclusions</b> .....	<b>18</b>
<b>Chapter 3 Summary of software design</b> .....	<b>19</b>
<b>3.1 Technical selections</b> .....	<b>19</b>
3.1.1 Development language and platform .....	19

3.1.2 GEF.....	20
3.1.3 HDF5.....	21
<b>3.2 Design of Data Processing and Analysis .....</b>	<b>23</b>
<b>3.3 Plugin architecture design.....</b>	<b>25</b>
<b>3.4 Core function design .....</b>	<b>27</b>
3.4.1 Design of data center.....	27
3.4.2 Design of processing algorithm structure.....	28
3.4.3 Design of spectral editing area.....	31
3.4.4 Design of peak and integral list.....	32
3.4.5 Design of 1D array data management.....	33
3.4.6 Design of spectral printing.....	33
<b>3.5 Conclusions.....</b>	<b>35</b>
<b>Chapter 4 Core algorithms of data processing .....</b>	<b>37</b>
<b>4.1 FID preprocessing algorithms .....</b>	<b>37</b>
<b>4.2 Spectral data processing algorithms .....</b>	<b>41</b>
<b>4.3 Spectral data analysis algorithms.....</b>	<b>42</b>
<b>4.4 Conclusions.....</b>	<b>44</b>
<b>Chapter 5 Implementation of software system .....</b>	<b>45</b>
<b>5.1 Overview .....</b>	<b>45</b>
<b>5.2 User Management .....</b>	<b>47</b>
<b>5.3 Data Management.....</b>	<b>49</b>
<b>5.4 Spectrum display.....</b>	<b>53</b>
5.4.1 1D non-array spectrum display .....	53
5.4.2 1D array spectrum display .....	55
5.4.3 2D spectrum display.....	56
<b>5.5 Data processing .....</b>	<b>59</b>
5.5.1 FID preprocessing.....	59
5.5.2 Spectral data processing.....	64
5.5.3 Spectral data analysis .....	68

5.6 Spectrum printing.....	76
5.7 Conclusions.....	79
<b>Chapter 6 Summary and prospect .....</b>	<b>81</b>
6.1 Summary.....	81
6.2 Prospect.....	81
<b>References .....</b>	<b>83</b>
<b>Publications .....</b>	<b>87</b>
<b>Acknowledgements .....</b>	<b>89</b>

厦门大学博硕士学位论文摘要库

厦门大学博硕士学位论文摘要库

**作者姓名：**刘云龙

**论文题目：**基于 Eclipse 的核磁共振谱数据处理软件的实现

**作者简介：**刘云龙，男，1991 年 12 月出生，2014 年 9 月师从厦门大学陈志伟副教授，于年月获硕士学位。

## 中文摘要

核磁共振技术由于能在对生物样品无损的条件下，研究生物大分子、某些活性组织等的分子结构、动态过程与生物功能的关系，使得从 1945 被发现开始，就受到了广泛关注。在科学家们的积极研究推动下，核磁共振已经在化学、医药、生物等诸多领域发挥了巨大作用。在进行核磁共振研究时，好的仪器设备与软件支持对研究人员来说也相当重要。考虑到当前国内核磁共振软件的产品成熟度太低的现状，有必要研发一款迭代升级简单、功能完善、处理流畅的核磁共振谱数据处理软件。

本文提出了一种基于 Eclipse 插件技术的核磁共振谱数据处理软件的实现。Eclipse 是当前比较流行的集成开发环境，其插件化的体系结构是 Eclipse 的最大特色。本软件采用 Eclipse 插件技术，结合 GEF 框架，利用 MVC 的架构方式进行研发。这使得开发人员能更加专注于业务逻辑，快速开发，也使软件的扩展性、易维护性、健壮性有了很大的提高。

本软件目前实现了用户管理、多种数据格式的输入输出、谱图的处理、谱图打印等功能。用户管理增加了用户数据的安全性，多种数据格式输入输出的支持能够适配其他谱仪采集到的数据，谱图打印的模板设计能够更好的支持用户谱图输出个性化的需求。为了提升用户体验，在一些设计上充分考虑用户习惯，并添加了一些快捷操作。本软件采用的新的文件存储格式以及谱图打印都是本软件的特色。

本文首先进行了需求分析，需求的明确是软件开发的基础。然后根据需求，针对技术选型、架构设计、核心功能设计等方面做了介绍。对于一款数据处理软件，处理算法是必不可少的，本文也介绍了相关的数据处理核心算法。最后通过具体的谱数据处理流程展示了本软件对处理操作的实现结果。

**关键词：**核磁共振；数据处理；数据分析；谱图打印；软件开发

厦门大学博硕士学位论文摘要库

# **An Implementation of Data Processing Software for NMR spectrum based on Eclipse**

## **Abstract**

Since the NMR technique can research the relationship dynamics and biological function of the molecular structure of biological macromolecules, and some active organizations, under the conditions of destructive biological samples, so that from the beginning of 1945 was discovered, it received widespread attention. With the active research of scientists, nuclear magnetic resonance has played a significant role in many fields such as chemistry, medicine and biology. During NMR studies, good equipment and software support for researchers is also very important. At present taking into account the domestic nuclear magnetic resonance software products are not yet mature, it is necessary to develop a iterative upgrade simple, functional, smooth processing of nuclear magnetic resonance data processing software.

This paper presents a realization of the data processing software for nuclear magnetic resonance spectroscopy based on Eclipse plug-in technology. Eclipse is the most popular integrated development environment, and its plug-in architecture is the biggest feature of Eclipse. The software was developed based on Eclipse plug-in technology, combined with the GEF framework and MVC architecture. The implementation allows developers to develop rapidly, focusing more on business logic, and also makes the software scalability, easy maintenance, robustness greatly improved.

The software currently implements user management, a variety of data format input and output, spectrum processing, spectrum printing and other functions. The user management increases the security of user data. The support for input and output of various data formats can be adapted to the data sampled by other spectrometers. The template design of the spectrum printing can better support the personalized needs of user spectrum output. In order to enhance the user experience, the software was designed to fully consider the user habits, and added some shortcuts. The software has some characteristics, such as the new file storage format and spectrum printing.

The clear requirements are the basis of software development,so the article first carried out the demand analysis.And then according to the requirements,the paper introduces the technical selection, architecture design, the core function design and so on.For the data processing software, the processing algorithm is essential, so this article also describes the relevant data processing core algorithm.Finally, the article shows the implementation results of the software by the specific spectrum data processing.

**Key words:** NMR;data processing; data analysis; spectrum printing; software development

厦门大学博硕士学位论文摘要库



Degree papers are in the "[Xiamen University Electronic Theses and Dissertations Database](#)". Full texts are available in the following ways:

1. If your library is a CALIS member libraries, please log on <http://etd.calis.edu.cn/> and submit requests online, or consult the interlibrary loan department in your library.
2. For users of non-CALIS member libraries, please mail to [etd@xmu.edu.cn](mailto:etd@xmu.edu.cn) for delivery details.

厦门大学博硕士论文摘要库