

学校编码: 10384

类号\_\_\_\_\_密级\_\_\_\_\_

学号: 19820091152560

UDC \_\_\_\_\_

厦 门 大 学

硕 士 学 位 论 文

基于 Web 的一维核磁共振数据处理软件开发

Web-based 1D NMR data processing software development

赵 越

指导教师姓名: 蔡淑惠 教 授

陈志伟 副教授

专 业 名 称: 无 线 电 物 理

论文提交日期: 2012 年 05 月

论文答辩时间: 2012 年 06 月

学位授予日期:

答辩委员会主席: \_\_\_\_\_

评 阅 人: \_\_\_\_\_

2012 年 06 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

厦门大学博硕士学位论文摘要库

## 摘要

核磁共振 ( Nuclear Magnetic Resonance , NMR ) 作为一种研究物质结构组成的先进技术 , 广泛应用于物理学、化学、生物学、医学、材料等领域。许多国家非常重视核磁共振技术 , 投入了大量的人力、物力推动核磁共振技术的发展。现已有很多著名的核磁共振仪器生产商。我国虽然已经可以研发低场强的核磁共振波谱仪 , 但大部分核磁共振仪器仍然依靠进口。核磁共振技术的日益发展与广泛应用 , 推动了相关的软件产业的发展。除了著名的核磁共振仪器生产商开发的配套软件外 , 还有很多第三方的核磁共振数据处理软件。这些软件功能强大 , 补充了配套软件无法比拟的功能。

近几年 , 随着 Web 2.0 的不断发展以及网络条件的不断改善 , 网络已经成为信息时代的主宰。各种服务器技术和 Web 前端技术的广泛使用 , 使得互联网上出现了各种各样的 Web 在线应用。Web 应用安全、简单、方便等诸多优点使 Web 化成为了软件发展的趋势 , 受到了开发者和使用者的青睐。目前 , 核磁共振数据处理软件大多为传统的桌面软件 , 而相关的 Web 应用很少见。

大数据量科学计算的 Web 化显示是本论文所开发的软件的基本功能 , 因此对目前常用的 Web 前端技术以及 Web 图表工具进行调研。通过各项测试 , 最终选用 JavaScript 作为本软件的主要前端研发语言。

本论文采用 JavaScript、AJAX、PHP 三种 Web 编程技术结合 jQuery、CasualJS 框架和 HTML5 canvas 开发了一款用于一维核磁共振数据处理的 Web 软件 , 实现了 FID 的上传与读取、谱图的显示、谱图的移动与缩放、快速傅里叶变换、相位校正、基线校正、定标、寻峰、积分、图像导出等功能。通过与安捷伦谱仪随机软件 VnmrJ 进行对比测试 , 验证了各项数据处理功能的正确有效性以及程序执行的高效性 , 完全满足一般的一维核磁共振数据处理。在智能手机和平板电脑移动设备的测试中 , 本软件的大部分功能均可正常运行 , 且效果较为理想 , 基本可以满足常规一维核磁共振数据的处理 , 为本软件向多平台发展奠定了良好的基础。

关键词 : 核磁共振 ; 数据处理 ; Web 应用 ; 软件

厦门大学博硕士学位论文摘要库



## Abstract

As an advanced technology of researching material structure and composition, nuclear magnetic resonance (NMR) is widely used in many fields such as physics, chemistry, biology, medicine and material. Many countries attach great importance to NMR technology, and put a lot of manpower and material resources to promote the development of NMR techniques. Now, there are many well-known NMR equipment manufacturers in the world. Although China has already developed low-field NMR spectrometer, but most of the NMR instruments still rely on imports. NMR technology is used more widely, and promotes the development of the software industry. In addition to the softwares developed by the NMR instrument manufacturers, there are many third-party NMR data processing softwares, which are very powerful and have more new features.

In recent years, with the development of Web 2.0 and the improvement of the network conditions, the network plays a very important role in the information age. The server technology and the Web front-end technology are used widely, and make a wide variety of Web applications on the Internet. The advantages of Web application such as security, simple, easy make the Web applications to become the trend of software development. Web applications are the best choice for users and developers. At present, most of the NMR data processing software is traditional desktop software and the NMR Web applications are rare. Large amount scientific computing data displays on Web is the basic features of the software in this thesis, so this thesis has researched and test several commonly used Web front-end technology and Web chart tools. JavaScript was finally selected as the front-end development language for the software.

The thesis used JavaScript, AJAX, and PHP Web programming technologies combined with jQuery, CasualJS frameworks and HTML5 canvas to develop the Web software for one-dimensional NMR data processing. It realized the FID upload and parsing, spectrum display, move and zoom, fast Fourier transform, phase correction, baseline correction, referencing, peak picking, integration, image export

and other functions. The comparison tests with VnmrJ verified the correct validity of the data processing function and efficiency of program execution, and fully meet the general one-dimensional NMR data processing. The thesis also tested the software on smart phone and tablet PC. Most of the functions of the software can work correctly. It has laid a good foundation for multi-platform development of the software.

Key words: NMR; Data Processing; Web Application; Software

厦门大学博硕士学位论文摘要库

# 目 录

<b>第一章 绪论 .....</b>	<b>1</b>
<b>1.1 引言 .....</b>	<b>1</b>
<b>1.2 核磁共振数据处理介绍 .....</b>	<b>2</b>
1.2.1 数据的输入与输出 .....	2
1.2.2 FID 处理 .....	2
1.2.3 傅里叶变换算法 .....	3
1.2.4 相位校正 .....	5
1.2.5 基线校正 .....	6
1.2.6 定标 .....	6
1.2.7 寻峰 .....	7
1.2.8 积分 .....	7
<b>1.3 现有核磁共振数据处理软件介绍 .....</b>	<b>7</b>
<b>1.4 软件 Web 化介绍 .....</b>	<b>11</b>
1.4.1 C/S 架构 .....	12
1.4.2 B/S 架构 .....	12
1.4.3 RIA 架构 .....	13
1.4.4 优秀 Web 软件介绍 .....	13
<b>1.5 论文选题与结构 .....</b>	<b>16</b>
<b>第二章 大数据量的 Web 化处理与动态显示 .....</b>	<b>19</b>
<b>2.1 五大主流前端技术介绍 .....</b>	<b>19</b>
2.1.1 JavaScript .....	19
2.1.2 Flash .....	20
2.1.3 Silverlight .....	20
2.1.4 Java Applet .....	21
2.1.5 WebGL .....	21
<b>2.2 性能测试 .....</b>	<b>22</b>
<b>2.3 JavaScript 和 Flash 最简化绘图性能测试 .....</b>	<b>25</b>

<b>第三章</b>	<b>Web 化一维核磁共振数据处理与显示</b>	<b>29</b>
3.1	前言	29
3.2	开发和实验环境	29
3.3	NMR 数据处理各功能的开发	32
3.3.1	文件上传	32
3.3.2	参数文件读取	32
3.3.3	FID 数据文件读取	33
3.3.4	坐标轴绘制	36
3.3.5	谱图的显示、移动及缩放	41
3.3.6	一维傅里叶变换的研究与实现	44
3.3.7	相位校正的研究与实现	45
3.3.8	基线校正的研究与实现	47
3.3.9	定标的研究与实现	48
3.3.10	寻峰的研究与实现	50
3.3.11	积分的研究与实现	53
3.3.12	鼠标图形操作的研究与实现	54
3.3.13	canvas 图层的实现	57
3.3.14	图像的导出	58
3.4	性能测试	58
3.4.1	一维谱运行效果测试	58
3.4.2	一维谱运行时间测试	62
3.4.3	移动平台运行效果简单测试	62
3.5	本章小结	66
<b>第四章</b>	<b>总结与展望</b>	<b>67</b>
	参考文献	69
	硕士研究生期间发表的论文	73
	致 谢	75

# CONTENTS

<b>Chapter 1 Preface .....</b>	<b>1</b>
<b>1.1 Introduction.....</b>	<b>1</b>
<b>1.2 NMR Data processing.....</b>	<b>2</b>
1.2.1 Data input and output .....	2
1.2.2 FID processing .....	2
1.2.3 Fourier transform.....	3
1.2.4 Phase correction .....	5
1.2.5 Baseline correction.....	6
1.2.6 Referencing .....	6
1.2.7 Peak picking .....	7
1.2.8 Integration .....	7
<b>1.3 NMR softwares in the world .....</b>	<b>7</b>
<b>1.4 Web software.....</b>	<b>11</b>
1.4.1 C/S architecture .....	12
1.4.2 B/S architecture.....	12
1.4.3 RIA architecture .....	13
1.4.4 Introduction of excellent Web softwares.....	13
<b>1.5 Thesis structure.....</b>	<b>16</b>
<b>Chapter 2 Large amount of data processing and dynamic display on the Web .....</b>	<b>19</b>
<b>2.1 Introduction of five major front-end technology .....</b>	<b>19</b>
2.1.1 JavaScript .....	19
2.1.2 Flash .....	20
2.1.3 Silverlight.....	20
2.1.4 Java Applet.....	21
2.1.5 WebGL.....	21
<b>2.2 Performance test .....</b>	<b>22</b>

<b>2.3</b>	<b>JavaScript and Flash simply drawing performance test.....</b>	<b>25</b>
<b>Chapter 3</b>	<b>1D NMR data processing and display on the Web.....</b>	<b>29</b>
<b>3.1</b>	<b>Introduction.....</b>	<b>29</b>
<b>3.2</b>	<b>Development and experimental environment .....</b>	<b>29</b>
<b>3.3</b>	<b>The development of NMR data processing functions.....</b>	<b>32</b>
3.3.1	File upload.....	32
3.3.2	Parameter file reading .....	32
3.3.3	FID data file reading .....	33
3.3.4	Axis drawing .....	36
3.3.5	Spectrum display, move and zoom.....	41
3.3.6	1D Fourier transform.....	44
3.3.7	Phase correction .....	45
3.3.8	Baseline correction.....	47
3.3.9	Referencing .....	48
3.3.10	Peak picking.....	50
3.3.11	Integration .....	53
3.3.12	Mouse graphics operations.....	54
3.3.13	Canvas layers.....	57
3.3.14	Image export.....	58
<b>3.4</b>	<b>Performance test .....</b>	<b>58</b>
3.4.1	1D NMR spectrum runing effect test .....	58
3.4.2	1D NMR spectrum runing time test .....	62
3.4.3	Simple test on mobile platforms.....	62
<b>3.5</b>	<b>Summary.....</b>	<b>66</b>
<b>Chapter 4</b>	<b>Summary and prospects.....</b>	<b>67</b>
<b>References</b>	.....	<b>69</b>
<b>Publications</b>	.....	<b>73</b>
<b>Acknowledgements</b>	.....	<b>75</b>

# 第一章 绪论

## 1.1 引言

核磁共振 ( Nuclear Magnetic Resonance , NMR ) 是指具有磁矩的原子核在外磁场的作用下自旋能级发生塞曼分裂, 共振吸收某一定频率的射频辐射的物理过程<sup>[1]</sup>。早期的核磁共振主要集中于氢谱, 这是因为  $^1\text{H}$  原子在自然界丰度极高, 可以产生很强的核磁共振信号, 容易被检测出来。随着核磁共振技术的不断发展, 核磁共振仪器可以在很短的时间内发出不同频率的射频, 从而可以对样品进行重复扫描, 将微弱的核磁共振信号从背景噪音中区分出来, 这使得人们可以收集  $^{13}\text{C}$  核磁共振信号<sup>[2]</sup>。特别是傅里叶变换技术的发展, 极大的推动了核磁共振技术的进步。自从实现了脉冲傅里叶变换核磁共振技术, 使原来需要 5 ~ 10 分钟实现扫描过程获得全谱的连续波法, 缩短为仅 1 ~ 2 秒钟。再配合累加技术, 使傅里叶变换法的检出灵敏度大为提高, 不仅大大减少试剂的使用量, 而且也轻松解决了以前某些核例如  $^{13}\text{C}$ 、 $^{15}\text{N}$  等无法或很难得到共振谱的问题, 从而拓展了核磁共振的研究范围<sup>[3]</sup>。核磁共振的研究领域从早期对核结构和性质的研究, 例如核磁矩、电四极矩、核自旋等, 后逐步发展成可以应用于分子组成与结构分析、生物组织与结构分析、病理分析、医疗诊断、无损检测等。如今, 核磁共振技术已作为重要的谱学工具被广泛地应用于物理学、化学、生物学、医学、地质学、材料学、食品、军事等众多领域。

随着核磁共振技术的日益发展与广泛应用, 极大地促进了核磁共振仪器和相关软件的发展。在仪器方面, 有着许多的著名谱仪生产商, 例如美国的 Varian ( 现已被美国的安捷伦公司收购 ) 公司、德国的 Bruker 公司、日本的 JEOL 公司等, 国内也有一些低场强核磁共振波谱仪的生产商, 例如上海纽迈电子科技有限公司、上海寰彤科教设备有限公司等。仪器性能的不不断提高也使得相关软件的功能越来越强大, 除了生产商捆绑的一些核磁共振数据处理软件外, 很多软件生产商也开发出第三方核磁共振数据处理软件, 这些软件功能强大, 而且补充了一些捆绑软件所无法比拟的功能。

近年来, 计算机网络技术迅速发展, 服务器技术和 Web 前端技术的广泛使用, 使得互联网上出现了各种各样的 Web 在线应用。Web 应用软件的安全、简单、方便、快捷等诸多优点使 Web 化成为软件发展的趋势。目前的核磁共振数据处理软件大多为桌面软件, 每款软件对运行环境的要求都不太一致, 而 Web 化应用可以很好的解决这一问题, 除了跨操作系统外, 甚至可以在平板电脑和智能手机上运行。本文采用 JavaScript、PHP、AJAX 三种技术实现了基于 Web 的一维核磁共振数据处理软件, 在网页浏览器上处理核磁共振数据。

## 1.2 核磁共振数据处理介绍

核磁共振仪器采集到的数据为自由感应衰减信号 (Free Induction Decay, FID) 数据。自由感应衰减信号是核磁共振与磁共振成像 (Magnetic Resonance Imaging, MRI) 中最简单的信号形式。原子核受到核磁共振谱仪或磁共振成像仪的射频线圈所发出的射频脉冲的激发而偏离平衡态, 在恢复平衡态的过程中产生自由感应衰减信号。原子核从激发的状态恢复到平衡态的过程叫弛豫过程, 在这一过程中以一定的速率采样收集到离散 FID 信号。而仅仅靠 FID 信号无法对物质进行分析, 因此必须对这些离散 FID 信号进行一系列的处理才可得到所需信息。本论文所研发的是基于 Web 的一维 NMR 数据处理软件, 所有的操作均在一个网页上完成。该软件主要面向具有 NMR 理论背景的科研人员, 所提供的数据处理功能完全可以满足一般的一维 NMR 数据处理。

### 1.2.1 数据的输入与输出

目前核磁共振输入数据有很多种格式, 例如 Varian、Bruker、ASCII、JCAMP 以及自定义格式等, 每种格式都是特定的数据存放方式。对于软件来讲, 一般采用加载外部文件的方式将数据读取到软件中, 经过一系列的数据处理, 将目标数据输出。输出的格式也有很多种, 有数据格式的, 例如 ASCII、JCAMP、自定义格式等, 也有图片文档格式的, 例如 PDF、BMP、GIF、JPG、PNG、TIF 等。

### 1.2.2 FID 处理



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.

厦门大学博硕士学位论文摘要库