

学校编码: 10384

分类号 \_\_\_\_\_ 密级 \_\_\_\_\_

学 号: 33120121152657

UDC \_\_\_\_\_

厦 门 大 学

硕 士 学 位 论 文

基于 iOS 系统的移动核磁共振谱仪文件管理系统  
的设计与实现

Design and Implementation of Mobile NMR Spectrometer  
File Management System Based on iOS

傅伟强

指导教师姓名: 陈 忠 教 授

专 业 名 称: 电子与通信工程

论文提交日期: 2015 年 04 月

论文答辩时间: 2015 年 05 月

学位授予日期: 2015 年 06 月

答辩委员会主席: \_\_\_\_\_

评 阅 人: \_\_\_\_\_

2015 年 05 月

## 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

## 摘要

核磁共振技术是一种无伤的检测技术，由于其优良的特性，使之成为了众多领域内，如医学、生物学和化学等，最有效的研究手段之一，而这些领域都需要用到核磁共振谱仪文件管理系统来对实验数据文件进行管理。另一方面，随着移动技术的发展，移动设备在人们的日常生活中扮演着越来越重要的角色，出现了各式各样基于移动设备的应用软件来帮助人们更好地学习、工作和生活。然而，目前却没有一款基于移动设备的核磁共振谱仪文件管理系统来帮助研究人员管理数据实验文件，迫使研究人员只能依赖传统的个人电脑。

本文旨在运用 iPad 等移动终端的灵活、便携、处理能力强等特点，结合实验人员的需求，研发一款可运行于 iOS 系统上的核磁共振谱仪文件管理的系统，从而有效地推进核磁共振的研究与实验工作。与此同时，随着精密制造技术的不断成熟，人们在制造设备的精度上已经可以达到微纳米级别。为此，不少核磁共振谱仪厂商或科研团队都已经开始尝试小微型核磁共振谱仪设备的研制，该文件系统的研制对于小型和微型核磁共振谱仪的研发和推广应用具有较重要的实用价值。核磁共振谱仪文件与日常中常见的 doc、txt、pdf 等文件格式不同，它是由核磁共振仪器产生的特定格式的文件。常见的核磁共振谱仪文件格式有 Varian、Bruker、JEOL 等，研究人员需要借助专门的软件才可以运行、管理此类文件，为此需要一款专门用于管理核磁共振谱仪文件的系统。本文所述的系统主要针对于核磁共振实验文件的管理与分析，围绕核磁共振实验中所产生文件的格式，所需要的文件处理功能等方面内容进行研发。

本文基于 iOS 系统，以 Objective-C、C 语言作为软件的开发语言，采用富客户端模式、MVC 框架、CocoaHttpServer 框架、Dropbox 技术以及 iOS 原生的 UIKit 框架设计并实现了移动核磁共振谱仪文件管理系统。软件系统包括了文件系统模块、工作区模块和打印模块三个部分，其中文件系统模块实现了数据的传输与保存功能；工作区模块实现了数据操作的功能，如：添加工作区、删除工作区等功能；打印模块主要实现参数的设置与文件的打印等功能。

**关键词：** 核磁共振；文件管理系统；iOS；波谱仪

厦门大学博硕士论文摘要库

## Abstract

As a harmless detection technique, NMR(nuclear magnetic resonance) has been one of the most efficient research methods in various domains such as medicine, biology, chemistry because of its superb characteristics. In all those areas, file management software for NMR tends to be needed to handle multitudinous experimental data and documents. On the other hand, with the development of mobile technology, lots of mobile devices and terminals are playing a more and more increasingly significant role in not only humans' work but also their daily life. What's more, a variety of applications based on above gadgets are tremendously facilitating people's study, work and life. However, the lack of a FM (file management) program based on mobile equipments for NMR, which should help researchers to deal with lab data and files, has been forcing them to rely on some traditional and heavy PCs (personal computers).

Therefore, this paper aims at using traits mainly flexibility, portability, strong processing capacity of compact devices like iPad, coupled with research personnel's requirements, to develop a FM system for NMR that can be operated on iOS, which we hope will effectively promote research efforts in NMR. At the same time, With the development of the manufacturing technology, people already reach the level of micro/nano in producing equipment. Lots of NMR spectrometer manufacturers or research teams have begun to try to manufacture micro NMR spectrometer. The development of the file management system has a deep meaning for micro NMR spectrometer's manufacture. As is known, NMR Spectrometer files, specific ones produced by NMR apparatuses, are distinguished from those universal formats like doc, txt, pdf. Varian, Bruker, JEOL are common NMR file formats, but only with the aid of particular software can those files be conducted and managed. For this reason, people need a program specialized in operating NMR Spectrometer files. The system depicted and developed in this paper is primarily directed at analysis and management

of NMR Spectrometer files, and centered on specific NMR formats together with necessary functions of processing files.

Setting Objective-C and C language as developing languages, this paper has designed and implementation mobile NMR spectrometer file management system based on iOS by means of Rich Client mode, MVC framework, CocoaHttpServer framework, Dropbox technique and UIKit framework generated by iOS. The whole system consists of three parts: a file system module, a working area module and a printing module. The first component can help us transmit and save data while the working area module is responsible for processing existing data. For instance, in this part researchers could add or delete a working area or even create DEPT. The third module is chiefly used to set up parameters and then print out relative files.

**Key words:** nuclear magnetic resonance; file management system; iOS; Spectrometer

<b>第一章 绪论</b> .....	1
<b>1.1 研究背景与意义</b> .....	1
<b>1.2 国内外研究现状</b> .....	2
1.2.1 核磁共振相关软件.....	3
1.2.2 文件管理相关软件.....	7
<b>1.3 主要研究内容</b> .....	12
<b>1.4 论文组织结构</b> .....	13
<b>第二章 相关领域知识及相关技术介绍</b> .....	15
<b>2.1 相关领域知识</b> .....	15
2.1.1 核磁共振（NMR）.....	15
2.1.2 文件管理系统.....	17
2.1.3 移动互联网.....	18
2.1.4 移动核磁共振谱仪文件管理系统.....	21
<b>2.2 相关技术介绍</b> .....	21
2.2.1 iOS.....	21
2.2.2 MVC 架构.....	24
2.2.3 富客户端模式.....	24
2.2.4 Objective-C.....	24
2.2.5 Wi-Fi 技术.....	25
2.2.6 Dropbox.....	25
<b>2.3 本章小结</b> .....	25
<b>第三章 需求分析</b> .....	26
<b>3.1 可行性分析</b> .....	26
<b>3.2 业务流程分析</b> .....	28
<b>3.3 用户角色分析</b> .....	31



---

3.4 系统功能性需求分析.....	31
3.4.1 文件系统模块需求.....	31
3.4.2 工作区模块需求.....	32
3.4.3 打印模块需求.....	33
3.5 系统非功能性需求分析 .....	35
3.6 本章小结.....	37
<b>第四章 系统设计</b> .....	<b>38</b>
<b>4.1 系统概要设计</b> .....	<b>38</b>
4.1.1 系统整体架构设计 .....	38
4.1.2 系统功能模块设计 .....	41
<b>4.2 系统详细设计</b> .....	<b>43</b>
4.2.1 文件系统模块设计.....	44
4.2.2 工作区模块设计.....	46
4.2.3 打印模块设计.....	47
<b>4.3 数据库设计</b> .....	<b>50</b>
<b>4.4 本章小结</b> .....	<b>50</b>
<b>第五章 系统实现</b> .....	<b>52</b>
<b>5.1 系统实现环境</b> .....	<b>52</b>
5.1.1 硬件环境.....	52
5.1.2 软件环境.....	52
<b>5.2 系统主界面模块</b> .....	<b>53</b>
<b>5.3 文件系统模块</b> .....	<b>54</b>
5.3.1 功能实现.....	54
5.3.2 使用说明.....	54
<b>5.4 工作区模块</b> .....	<b>63</b>
5.4.1 功能实现.....	63
5.4.2 使用说明.....	63

---

5.5 打印模块.....	67
5.5.1 实现功能.....	67
5.5.2 使用说明.....	67
5.6 本章小结.....	78
<b>第六章 系统测试.....</b>	<b>79</b>
6.1 术语定义与说明.....	79
6.2 系统测试环境.....	79
6.3 功能测试.....	79
6.3.1 文件系统模块.....	79
6.3.2 工作区模块.....	80
6.3.3 打印区模块.....	80
6.3.4 小结.....	81
6.4 本章小结.....	81
<b>第七章 总结与展望.....</b>	<b>82</b>
7.1 总结.....	82
7.2 展望.....	83
<b>参考文献.....</b>	<b>84</b>
<b>攻读硕士学位期间取得的成果.....</b>	<b>87</b>
<b>致谢.....</b>	<b>88</b>

## Contents

<b>Chapter 1 Introduction</b> .....	1
<b>1.1 Research Background and Significance</b> .....	1
<b>1.2 Domestic and Foreign Research Situation</b> .....	2
1.2.1 NMR Software .....	3
1.2.2 File Management Software .....	7
<b>1.3 Main Research Contents</b> .....	12
<b>1.4 Thesis Structure</b> .....	13
<b>Chapter 2 Introduction to Related Knowledge and Technology</b> .....	15
<b>2.1 Introduction to Related Knowledge</b> .....	15
2.1.1 NMR .....	15
2.1.2 File Management .....	17
2.1.3 Mobile Internet .....	18
2.1.4 Mobile NMR Spectrometer File Management System .....	21
<b>2.2 Introduction to Related Technology</b> .....	21
2.2.1 iOS .....	21
2.2.2 MVC Framework .....	24
2.2.3 Rich Client Mode .....	24
2.2.4 Objective-C .....	24
2.2.5 Wi-Fi .....	25
2.2.6 Dropbox .....	25
<b>2.3 Summary</b> .....	25
<b>Chapter 3 Requirements Analysis</b> .....	26
<b>3.1 Feasibility Analysis</b> .....	26
<b>3.2 Business Process Analysis</b> .....	28
<b>3.3 User Roles Analysis</b> .....	31
<b>3.4 System Functional Requirements Analysis</b> .....	31
3.4.1 Requirements of File System Module .....	31

---

3.4.2 Requirements of Working Area Module .....	32
3.4.3 Requirements of Printing Module.....	33
<b>3.5 Non-System Functional Requirements Analysis .....</b>	<b>35</b>
<b>3.6 Summary.....</b>	<b>37</b>
<b>Chapter 4 System Design.....</b>	<b>38</b>
<b>4.1 System Brief Design .....</b>	<b>38</b>
4.1.1 System Architecture .....	38
4.1.2 System Function Module Design.....	41
<b>4.2 System Detailed Design.....</b>	<b>43</b>
4.2.1 Design of File System Module.....	44
4.2.2 Design of Working Area Module .....	46
4.2.2 Design of Printing Module.....	47
<b>4.3 Design of Database .....</b>	<b>50</b>
<b>4.4 Summary.....</b>	<b>50</b>
<b>Chapter 5 System Implementation.....</b>	<b>52</b>
<b>5.1 System Implementation Environment .....</b>	<b>52</b>
5.1.1 Hardware Configuration .....	52
5.1.2 Software Configuration.....	52
<b>5.2 System Main Interface Module.....</b>	<b>53</b>
<b>5.3 File System Module.....</b>	<b>54</b>
5.3.1 Function Implementation .....	54
5.3.2 Usage Introduction.....	54
<b>5.4 Working Area Module .....</b>	<b>63</b>
5.4.1 Function Implementation .....	63
5.4.2 Usage Introduction.....	63
<b>5.5 Printing Module .....</b>	<b>67</b>
5.5.1 Function Implementation .....	67
5.5.2 Usage Introduction.....	67
<b>5.6 Summary.....</b>	<b>78</b>

---

<b>Chapter 6 System Test</b> .....	79
<b>6.1 Definition of Terms</b> .....	79
<b>6.2 Environment Test</b> .....	79
<b>6.3 Function Test</b> .....	79
6.3.1 File System Module.....	79
6.3.2 Working Area Module.....	80
6.3.3 Printing Module.....	80
6.3.4 Conclusion.....	81
<b>6.4 Summary</b> .....	81
<b>Chapter 7 Conclusion and Future Work</b> .....	82
<b>7.1 Conclusion</b> .....	82
<b>7.2 Future Work</b> .....	83
<b>References</b> .....	84
<b>Appendix</b> .....	87
<b>Acknowledgements</b> .....	88

## 第一章 绪论

### 1.1 研究背景与意义



图 1.1 移动端设备与微型核磁共振谱仪设备

核磁共振技术<sup>[1]</sup>由于其无伤检测的特性，广受人们的追捧。该技术在众多的领域，如化学、生物学和医学等领域中都得到了使用，是最为有效的研究方法之一。在这些领域中，实验研究人员在完成实验后需要对大量实验数据进行整理与收集，而这就需要相应的文件管理系统来对核磁共振实验文件进行管理。随着大规模集成电路技术<sup>[2]</sup>、计算机技术<sup>[3]</sup>等技术的长足性发展，移动终端设备<sup>[4]</sup>的运算处理能力相比 80 年代有了质的飞跃，原本在移动终端上无法实现的运算功能在技术的革新上得以实现。由于其相对 PC<sup>[5]</sup>机而言，它更为灵巧、便携等特点，使之越来越受到人们的青睐与广泛的应用。人们利用移动终端来聊天、上网、工作等，它已成为了人们日常生活中必不可少的一部分。移动终端如 iPad<sup>[6]</sup>，由于其处理能力强、便携、灵活等特点，也开始受到了科研单位的重视。人们开始在 iPad 上研发各种有助于科研进展的软件来帮助提高工作效率，并取得了显著的成效。由此可见，基于 iPad 等移动终端的软件研发对科研工作的推进有着重要意义。然而，在移动终端设备上却没有专门用于管理核磁共振数据文件的软件，研究人员们只能依赖传统的个人电脑。

移动终端设备灵巧与便携使得实验人员不再拘泥于电脑桌前，可在任何地方查阅、处理实验数据，由此给他们的实验工作带来了极大的便利。本文旨在结合 iPad 等移动终端便携、灵巧、处理能力强的特点，研发一款可运行于 iOS<sup>[7]</sup>系统

上的核磁共振谱仪文件管理系统，其目的在于推进核磁共振的实验工作。移动核磁共振谱仪文件管理系统是一款基于 iOS 系统且结合移动互联网技术的专门用于核磁共振谱仪文件管理的软件。它针对核磁共振谱仪文件具有的特定文件格式，如 Varian、Bruker、JEOL 等格式的文件，结合研究人员对文件管理的使用习惯对其进行管理与分析，填补了移动端上缺乏运行并管理核磁共振谱仪文件的空缺。与此同时，随着精密制造技术的不断成熟，人们在加工制造上的精度上已经达到了微纳米级别。为此，众多的核磁共振谱仪制造厂商和科研团队都开始尝试研制微小型的核磁共振谱仪设备。此时，若仍依赖于传统的台式电脑作为磁共振设备的控制端将显得过于笨拙，研制移动端上的核磁共振文件管理系统将对研制移动端上的磁共振管理系统起到一定的借鉴意义，它对小型和微型核磁共振谱仪的研发和推广应用具有较重要的实用价值。

## 1.2 国内外研究现状

早在 20 世纪 80 至 90 年代间，国外就出现了有关核磁共振相关的软件，但它们大多偏重于对实验数据的处理，对文件管理方面却不够重视，且早期的核磁共振软件大部分都是基于 Windows 系统或者 Mac 系统的，因为此时移动终端各方面性能均较差。就文件管理系统而言，大部分都是针对于常用文件格式的，如 doc、txt、pdf 等。而核磁共振谱仪文件的格式与常见的文件格式不同，它们有特定的文件格式，且它们的格式取决于所使用的核磁共振仪器。常见的核磁共振谱仪文件格式有 Varian、Bruker、JEOL 等，它们需要专门的软件或是进行文件格式的转换才可以打开运行。由此，常见的文件管理系统并不能满足核磁共振谱仪文件管理的需求。本文主要针对这一空白，探索研发出一款基于 iOS 系统的核磁共振谱仪文件管理系统，该系统既能克服普通文件管理系统针对于核磁共振谱仪文件的不兼容性，又能结合核磁共振实验人员的使用习惯，优化软件界面和操作流程。以下将就现阶段国内外常见的核磁共振相关软件以及文件管理系统进行相应介绍。

## 1.2.1 核磁共振相关软件

### 1. MestRe-C

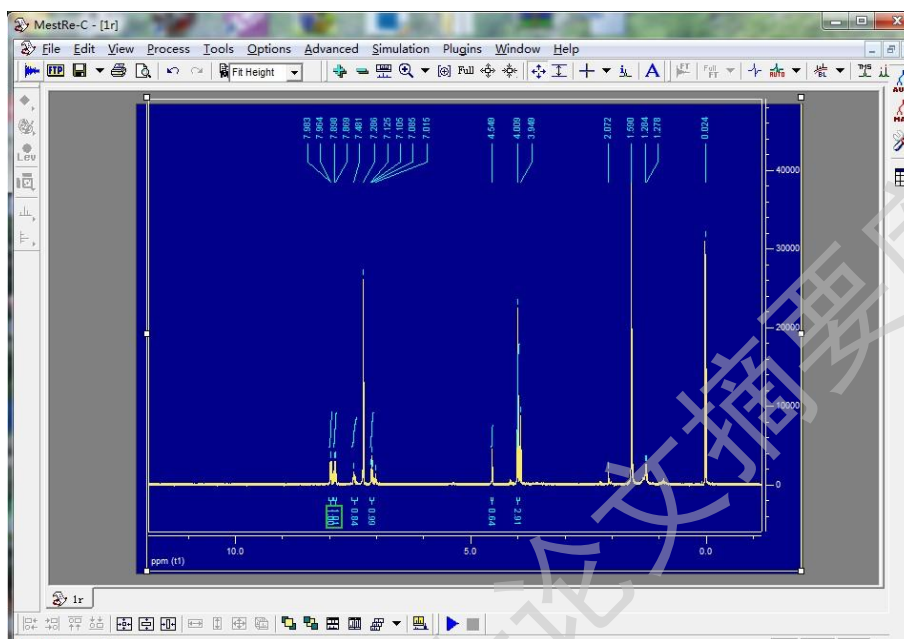


图 1.2 MestRe-C 软件用户界面

MestRe-C (Magnetic Resonance Companion) 软件，是一款基于 Windows 平台的核磁共振数据处理软件，它在数据处理、可视化和分析高分辨率的核磁共振实验数据等方面提供了较为高效方便的操作，并且结合了很好的鲁棒性及友好的图形化接口，该软件充分利用了 Windows 平台的内在功能与灵活性，对于核磁共振实验数据，它提供了多种不同的存储格式和所有常见的处理、显示和作图的功能，并添加了更为先进的数据处理技术<sup>[8]</sup>。其界面如图 1.2 所示。

### 2. MNova

MNova (核磁共振数据处理、分析和预测软件)，它是由 Mestre 实验室研制的，提供了处理、分析和预测核磁共振数据的方法，所处理的数据主要是针对中、小型原子经过化学处理之后的一维与二维谱。其最大的优势在于它是一个跨平台的软件，可以在 Windows、Mac OS 和各种 Linux 分支系统上运行，给许多使用多系统的实验室带来了福音，避免了因为不同系统间数据结构、格式不同而带来的不便<sup>[9]</sup>。其界面如下图所示：



Degree papers are in the “[Xiamen University Electronic Theses and Dissertations Database](#)”.

Fulltexts 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.