

学校编码: 10384

分类号_____密级_____

学号: 23320091152826

UDC_____

厦 门 大 学

硕 士 学 位 论 文

**WxSPROM—一款有效模拟分子间和分子内多
量子相干 NMR/MRI 的软件**

**WxSPROM-an efficient software for NMR/MRI simulations
under inter-and intra-molecular multiple quantum
coherences**

于海燕

指导教师姓名: 蔡聪波 副教授

专 业 名 称: 信号与信息处理

论文提交日期: 2012 年 05 月

论文答辩时间: 2012 年 月

学位授予日期: 2012 年 月

答辩委员会主席: _____

评 阅 人: _____

2012 年 05 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

WxSPROM 是一款用于模拟核磁共振谱和磁共振成像的软件。依照经典-量子理论,结合积算符矩阵和非线性 Bloch 方程,该软件可以同时高效模拟经典理论和量子效应下的标量耦合、远程偶极耦合、扩散、化学位移、辐射阻尼、横向弛豫以及纵向弛豫等效应。这一款软件既提供了常用的脉冲序列库又支持用户建立个人独有的序列库,还支持在模拟中进行基于图形界面的复杂脉冲序列的设计,并在模拟中支持各种自定义形状的脉冲、梯度。在磁共振成像(MRI)方面,软件吸纳了当前流行的几种成像算法,分别对其实现。一种样品可以采用多种成像算法进行模拟实验,所有成像结果均存储于成像库中,可以对比寻找不同成像算法的优劣。它采用 Java 语言编码,放弃了传统的桌面开发模式,基于 Eclipse RCP 插件模式设计,可以提供良好的本地化用户体验和极强的可扩展性。基于插件体系中优秀的扩展与扩展点的机制,WxSPROM 还可以作为一个功能插件,与我们小组开发的 WxNMR 磁共振仪控制软件进行无缝连接,极大的拓展了后者的功能。除此之外,由于 GPU 与 CPU 在硬件构造上的不同,导致 GPU 逻辑控制的薄弱,而数据处理上却具备强大的并行运算能力。这与以往 CPU 的时间上的并行不同,GPU 能够实现真正的空间上的并行,可以大幅度提高运算的效率。受此启发,软件采用了独特的 CPU+GPU 混合编程模式,主程序由 CPU 控制而大量离散的数据处理则由 GPU 暂代。这一模式充分利用了 CPU 在逻辑控制上的优势和 GPU 强大的浮点数运算能力,大大提高了软件的性能。

关键词: NMR; MRI; 插件模式

厦门大学博硕士学位论文摘要库

Abstract

WxSPROM can be used to simulate nuclear magnetic resonance (NMR) spectra and magnetic resonance imaging (MRI). In accordance with the classical-quantum theory, combining the product operator matrix with the non-linear Bloch equations, the software can be used to simulate the classical and quantum effects such as, scalar coupling, long-rang dipolar coupling, diffusion, chemical shift, radiation damping, transverse relaxation and longitudinal relaxation efficiently. WxSPROM provides common pulse sequence library and support users to create individual unique pulse sequence library, in addition, supports the design of complex pulse sequence based on GUI and a variety of custom shapes for pulse/gradient in the simulation. For magnetic resonance imaging (MRI), WxSPROM admits several current popular imaging algorithms, coding respectively. A sample can be used a variety of imaging algorithms for the simulation experiments, all imaging results are stored in the MRI library, and can be compared, to find the pros and cons of the different imaging algorithms. The software, written in Java, abandon the traditional desktop development model, based on Eclipse RCP plug-in frame, can provide a good local user experience and has strong scalability. Because of the outstanding extension and extension point mechanism based on the plug-in system, WxSPROM can also serve as a functional plug-ins, seamlessly connected with WxNMR, which developed for magnetic resonance instrument by our team, greatly expanded the functions of latter. Besides, due to the different between GPU and CPU in the hardware configuration, resulting in a weak logic control of GPU, but in data processing it has powerful parallel computing power. Unlike the past time paraller on the CPU, the GPU achieves real sace parallel, it can significantly improve the efficiency of operations. Inspired by this, WxSPROM uses a unique CPU+GPU hybrid programming model, the main program is controlled by CPU, a large number of discrete data processing is dealt with by GPU. This model takes full advantage of the logic control on CPU and the powerful floating-point computing power on

GPU, greatly improving the performance of the software.

Key Words: NMR; MRI; plug-in frame

厦门大学博硕士学位论文摘要库

目 录

第一章 绪论	1
1.1 核磁共振	1
1.2 磁共振成像	2
1.3 多量子相干及应用	3
1.4 数值模拟	6
1.5 并行计算在模拟中的应用	7
1.6 本文工作	7
第二章 插件体系	9
2.1 引言	9
2.2 插件技术概述	9
2.3 富客户端平台历史及现状	13
2.4 Eclipse RCP	14
第三章 并行计算	23
3.1 引言	23
3.2 并行计算	23
3.3 GPU 并行计算原理	24
第四章 软件设计	35
4.1 系统设计	35
4.2 详细设计	36
4.3 GUI 设计	39
4.4 软件并行化设计	48
4.5 软件实现	51
第五章 软件性能测试	54
5.1 理论基础	54
5.2 异构模型在模拟中的应用	56

5.3 性能测试	61
第六章小结与展望	72
6.1 小结	72
6.2 展望	72
参考文献.....	74
致 谢.....	77

厦门大学博硕士学位论文摘要库

Contents

Chapter 1 Perface	1
1.1 Nuclear Magnetic Resonance	1
1.2 Magnetic Resonance Imaging	2
1.3 Multiple quantun coherence and Application	3
1.4 Numerical Simulation	6
1.5 Parallel Computing in Numerical Simulation	7
1.6 The Work of Paper	7
Chapter 2 Plug-in System	9
2.1 Introduction	9
2.2 Overview of the Plug-in Technology	9
2.3 History and Current Status of the RCP	13
2.4 Eclipse RCP	14
Chapter 3 Parallel Computing	23
3.1 Introduction	23
3.2 Parallel Computing	23
3.3 Principles of GPU Parallel Computing	24
Chapter 4 Software Design	35
4.1 System Design	35
4.2 Detailed Design	36
4.3 GUI Design	39
4.4 Software Parallel Design	48
4.5 Software Implementation	51
Chapter 5 Software Performance Testing	54
5.1 Theoretical Basis	54
5.2 Application of Heterogeneous in Numerical Simulation	56
5.3 Performance Testing	61

Chapter 6 Conclusions and Outlook 72

6.1 Conclusions 72

6.2 Outlook 72

Reference 74

Acknowledge 77

厦门大学博硕士论文摘要库

第一章 绪论

核磁共振具有精确性, 选择性以及无创性等特点, 基于这些独特优势, 使之广泛应用于各个领域, 并展现出了极强的生命力和广阔的发展前景。然而很多情况下, 实际的实验条件却不会那么理想, 化学环境复杂多变, 均匀稳定磁场难以获取及控制都会使得实际的实验难以达到理想效果, 这个问题通常要通过多次重复性实验来解决, 对人力物力都会产生大量的浪费。核磁共振 (NMR) 和磁共振成像 (MRI) 的实验结果往往会很复杂, 多次实验结果的分析需要耗费大量的精力。此时数值模拟的作用就得以凸显。随着当前信息技术的快速发展, 利用计算机辅助研究已经成为目前最为快捷有效的方式。针对这种情况设计开发一款方便有效的模拟软件就成为一项必须的工作。

我们小组曾承担了“十一五”国家科技支撑计划项目“300MHz-500MHz 核磁共振波谱仪的研制”的部分工作, 并在该计划项目中负责开发了相应的谱仪控制软件 WxNMR。WxNMR 软件既有控制自主研发的 500MHz 谱仪进行各种复杂脉冲序列实验的能力, 又具备强大的数据处理功能。本文的主要工作就是开发了一款用于包含多量子相干 NMR 和 MRI 的模拟软件-WxSPROM, 它可以作为 WxNMR 软件的一个功能模块, 与 WxNMR 软件进行无缝连接, 并利用共同的脉冲序列同步进行实验和模拟仿真。通过模拟仿真可以指导我们在实际实验过程选取正确的试验参数获取最优结果, 节省时间, 减少人力与物力的消耗。为了解决 NMR 实验的数据处理过程中存在的数据量大、耗费时间长、效率低的问题, 该软件在进行大量数据的重复性计算时采用 GPU 来代替 CPU, 充分发挥 GPU 在大量浮点数并行运算上的优势, 大量节省数据处理过程中花费的时间, 提高效率。

1.1 核磁共振

核磁共振 (Nuclear Magnetic Resonance, NMR) 它通常是指具有磁矩的原子核在高强度外部磁场的作用下, 吸收一定频率的电磁辐射, 由低能态跃迁到高能态的一种物理现象。由此可知, NMR 其实是原子核、外部磁场和外加射频场共同作用的结果。人类对于这三者最初的认知始于上个世纪三十年代, 由物理学

家伊西多·拉比发现的，处于某一磁场中的原子核会沿着磁场的方向呈现出正向或者反向的平行排列，如果在此时向其施加无线电波，则原子核的自旋方向就会发生翻转。在这一现象的启发下，1946 年美国的科学家布洛赫和珀塞尔将核电荷数为奇数的原子核放置于磁场中，然后向其施加不同频率的射频场，在某一特定的频率下，处于磁场中的原子核会吸收射频场的能量，这就是人们对于核磁共振现象最初的认识，也由此正式开启了人们对于核磁共振现象的研究。

核磁共振现象产生的前提是需要一个具有磁矩的原子核。我们习惯用自旋量子数来表示原子核的自旋运动情况，只有当自旋量子数不为零时，即能够自旋的核，才会产生循环的电流，形成磁场具有磁矩。而这样的原子核位于磁感应强度不为零的外部磁场中时，除了其固有的自旋运动之外还会绕着外部磁场的方向运动，此时它的运动轨迹会呈现出螺旋线的形状，类似于陀螺的运动方式，物理学上将这种现象称之为拉莫尔进动。此时的原子核就具备一定的自旋进动频率，为它的跃迁做了必要的准备。我们知道不同的能级上所具备的能量是不同的，要完成跃迁就必须打破原有的平衡，原子核本身的能量是不足以完成的，要实现跃迁只能通过外加射频场来提供额外的能量。根据物理学原理，只有当外加射频场的频率与原子核自旋进动的频率相同时，原子核才能够有效的吸收射频场的能量，为能级跃迁提供助力，这样就会形成一个核磁共振信号。到目前为止，比较常用的大多是自旋量子数为 $1/2$ 的原子核，如 ^1H 、 ^3H 、 ^{13}C 、 ^{15}N 、 ^{19}F 、 ^{31}P 等。

核磁共振现象因其独特的形成过程使之具备许多先天的优势，如精确度大，无损伤等。因此该现象一经发现便迅速引起了各领域专家学者的重视，对它的研究如火如荼的进行着。化学家们发现，当原子核位于不同的分子中时，由于它们所处的化学环境的不同，周围的磁场也会发生变化，即，分子结构会对原子核周围磁场产生的影响，由此发展出了核磁共振谱，用来解析分子的结构。这就是根据核磁共振信号分析物质结构的基础。随着时间的日渐推移，核磁共振谱技术不断的发展，各种新的研究成果相继出现，到今天 NMR 已经作为一种崭新而有效的谱学方法出现在各个领域，在实际的应用中起着越来越重要的作用。

1.2 磁共振成像

自从核磁共振现象被发现至今，因它所具备的独特优势而被应用于各个领域。医学家们认为可以充分利用水分子中的氢原子产生的核磁共振现象来获取人体

中水分子分布的信息，据此来精确绘制人体内部的结构。根据该理论，1969 年马迪安博士尝试通过测量核磁共振的弛豫时间来区分小鼠体内的癌细胞和正常组织细胞获得了成功。在该技术的启发下，美国物理学家保罗·劳特伯尔于 1973 年提出了一种新的基于核磁共振现象的成像技术，称之为 MRI (Magnetic Resonance Imaging, 磁共振成像)。他应用该技术成功的绘制出了一个活体蛤蜊的内部结构图，开创了 MRI 活体应用的先河。自此之后，越来越多的专家和学者将关注的目光投向这里，MRI 技术日趋成熟，应用的范围也越来越广泛，到了 20 世纪 80 年代初，作为医学新技术的磁共振成像已经越来越为公众所熟悉，甚至成为一项常规的医学检测手段，广泛应用于多种病症的检测与治疗。因此深入研究 NMR 及 MRI 的相关内容是一项十分重要且有意义的工作。

磁共振成像实际上是断层成像中的一种，是以 NMR 技术为基础的。人体中存在大量的水分，在不同的组织中会有不同的含量及存在形式，MRI 检测就是通过检验这些水中的氢元素的 NMR，取得水成分的具体信息，进而确定相关的组织器官的结构信息。磁共振成像依靠的是人体中正常存在的氢元素，并不需要注射任何放射性同位素，因此对人体不会造成任何的伤害。磁共振图像可以提供很多种物理特性参数，如质子密度，纵向弛豫时间 T1，横向弛豫时间 T2，扩散系数，磁化系数和化学位移等，从中可以得到更加丰富的信息。除此之外，相对于其他的成像技术，MRI 技术还具备以下的优点：

- (1) MRI 对人体没有电离辐射损伤；
- (2) MRI 能够获得原生的三维断面成像，不需要进行图像重建就可以获得多方位的图像；
- (3) 对软组织结构进行检查时，结果更为清晰；
- (4) 可以多序列成像，提供多种图像类型，为明确病变性质提供更加丰富的影像信息，利于病情的诊断。

基于以上的种种优势，MRI 技术已经成为目前应用最为广泛的医学成像方式之一。

1.3 多量子相干及应用

分子间多量子相干 (intermolecular Multiple-Quantum Coherence, iMQC) 的现象最初是由于高极化 (高浓度) 核自旋体系中的异常信号而被发现的。有学者

在进行高极化（高浓度）核自旋体系中的 NMR 实验中发现，实验结果出现了一些难以理解的信号，这些信号具有多量子相干的属性，能够在二维核磁共振谱的间接检测维产生新的信号峰^[1]。这些峰用常规 NMR 理论是无法解释的。针对这一现象美国的 Princeton 大学 Warren 等人进行了深入研究，他们认为在高极化核自旋体系中，经典理论中应用的高温近似理论并不适用，而且在各向异性条件下，液体分子间的偶极-偶极相互作用是不可忽略的^[2]。基于这样的基本假设，他们提出了分子间多量子相干的概念。学者对此分别从经典的偶极退磁场理论和纯量子理论两个方面进行研究，实验证实采用这两种不同形式的理论来解释是完全等价的，这为 iMQC 的研究确认了理论基础。分子间多量子相干是来自于自旋体系中存在的分子间的远程偶极耦合作用所产生的远程偶极场效应，两种理论分别从不同的途径进行了解释，因此在实际的应用过程中两种方式各有优劣。应用经典的偶极退磁场理论进行描述时，是将远程偶极场看作是对每一个核自旋所受的外界磁场的一种修正^[3]。采用这种方式可以非常直观的了解偶极效应的物理起源，但是由于在自旋体系中存在远程偶极场效应，因此要解 Bloch 微分方程就变得十分复杂，而且如果自旋体系中存在标量 J 耦合时，该方法往往会无能为力。如果采用量子理论则可以很方便的设计脉冲序列，进行实验结果的预测也十分便捷。可是它在常见的弛豫、扩散等效应的处理上却不尽如人意。综合考虑这两种方法各自的优势与劣势，在具体的实践过程中我们小组将它们结合在一起，提出了“量子-经典”方法^[2]，充分发挥各自的优势，而避开了它们本身的缺陷，利用积算符矩阵的方法将标量耦合引入到常规的 Bloch 方程中^[2]。通过实践证明，这种方式十分有效，基于这种方法的模拟软件 SPROM 也已经于 2008 年获得发表^[4]，并且在数篇 SCI 的权威论文中获得应用^[4]。

iMQC 信号来自于偶极相互作用，因此具有以下三个特殊的性质：

(1) iMQC 信号与偶极相关距离 dc 有关，偶极相关距离是可以在实验中人为进行控制的量。因此通过获得某一个 dc 或者某一段 dc 范围的信号,就可以研究比典型的 MRI 所能分辨的血管尺寸还小的微结构^[5]。

(2) iMQC 与常规的单量子相干或分子内多量子相干的弛豫和扩散行为有着截然不同的形成过程，因而表现出不同的特性。它能够获得在常规磁共振成像 (MRI)中所不能获得的有用信息,在成像的对比度机理方面也不同于常规的 MRI。

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 for delivery details.

厦门大学博硕士论文摘要库