

核磁共振谱仪软件系统的设计与可靠性分析

陈源恩¹, 陈志伟², 曾文华^{1*}

(1. 厦门大学 软件学院, 福建省仿脑智能系统重点实验室,

2. 厦门大学 物理与机电工程学院, 福建省等离子体和核磁共振重点实验室, 福建 厦门 361005)

摘要: 核磁共振谱仪软件系统中应用了模块化设计方法, 详细讨论了软件系统的容错设计及整体容错模型, 并采用多线程的方式对软件进行了实现. 在测试期间对核磁共振谱仪软件系统进行可靠性分析, 结果表明, 软件系统可靠性符合设计要求.

关键词: 核磁共振; 软件容错; 可靠性; 模块化

中图分类号: TP 311

文献标识码: A

文章编号: 0438-0479(2010)06-0793-05

核磁共振(Nuclear magnetic resonance, NMR)是研究物质结构的重要手段, 它被广泛应用于物理、化学、生物、医学等方面. 运用核磁共振的原理, 世界上有几大公司都生产了 NMR 谱仪, 并且为配套自己的谱仪开发了相应的软件. 较著名的有 Bruker 公司的 TopSpin, Varian 公司的 VNMR, JEOL 公司的 Delta 等.

本文的 NMR 谱仪软件系统是国家科技支撑课题“300~500 MHz 核磁共振波谱仪的研制”配套的系统软件. 此软件以数据池为中心, 提供谱仪控制、实验设计、数据处理和系统管理等功能.

随着科学的发展, 波谱仪硬件的成熟, 对仪器控制软件的要求也复杂化^[1]. 由于数据的重要性, 就要求软件在与波谱仪通信的时候保证数据的精确; 波谱仪的工作时间常常要持续一段很长的时间, 这要求软件在这期间要可靠运行; 数据的底层传输, 与界面上的数据处理往往是分开的, 这要求软件在处理不同数据时不会相互串位. 所以 NMR 谱仪软件系统对可靠性、安全性的要求相当高. 为了保证在软件或硬件发生故障时, 系统仍能安全可靠的运行, 在软件设计中采用了容错设计^[2,3].

1 NMR 谱仪软件系统的模块组成

模块化的软件设计, 遵循可扩展性、简单性、高效性的原则, 可以较好地实现多任务多线程的功能, 并且

为后续的容错设计提供基础. NMR 谱仪软件系统的模块组成如图 1 所示.

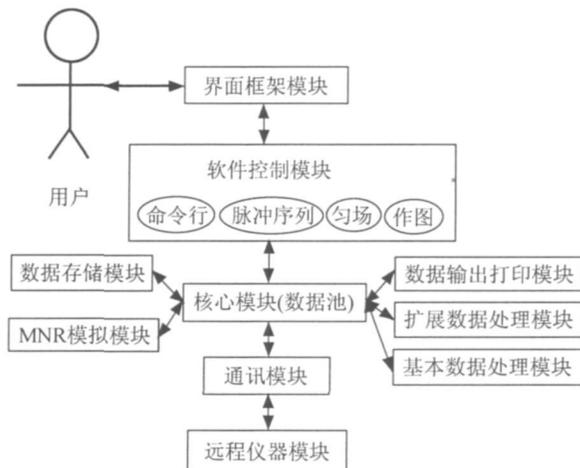


图 1 NMR 谱仪软件系统的模块组成

Fig. 1 Modules of software system for NMR spectrometer

1) 软件控制模块

包括命令行、脉冲序列、匀场 3 个子模块. 其中命令行负责所有的控制命令, 这些控制命令包括了软件的大部分功能. 如仪器状态检测与监控、仪器硬件参数设置, 通过通讯模块来实现仪器状态的传输与控制. 脉冲序列模块, 提供了足够函数功能来完成对仪器的一切可能的控制, 包括各种射频脉冲激发、梯度脉冲激发、信号采集、时间延时. 匀场模块, 具有自动匀场、自动锁场的功能.

2) 通讯模块

数据传输基于 TCP/IP 协议, 采用 Java NIO 技术实现. 模块定义了通讯传输数据结构, 并与核心模块相配合, 封装整个仪器的硬件特性, 实现谱仪硬件和计算

收稿日期: 2009-10-28

基金项目: 国家科技支撑计划项目(2006BAK03A22)

* 通讯作者: whzeng@xmu.edu.cn.

机软件之间沟通的桥梁,着重解决实时性、稳定性、容错性、抗干扰的问题。

3) 基本数据处理模块

实现了对一、二维 NMR 谱数据的处理和分析,包括快速傅里叶变换、加权、相位校正、基线校正、寻峰、峰积分、谱编辑、信噪比计算、弛豫时间拟合、对称化和投影等。

4) 界面框架模块

采用标准的菜单、键盘和鼠标操作,用户界面友好,具有较好的操作性和较高的智能性。整个软件界面框架采用 Eclipse 进行开发,主要有:菜单栏、工具栏、文件浏览器、脉冲序列库列表、硬件设置栏、图形输出设置按钮、命令行输入栏、作图区、操作控制区、简要信息输出栏。

5) 数据存储模块

存储采集的一、二维自由感应衰减原始信号及其快速傅里叶变换后的谱图数据,存储仪器设置参数文件、实验脉冲序列文件、数据图形化输出的各种图形文件、数据分析结果,存储采样、变换、计算过程中需要存储的各种临时数据文件。

6) 数据输出打印模块

创建、显示和打印输出散点图、折线图、颜色点阵图、等高线图、堆积图,以及文本、直线、箭头、圆、矩形等标注。

7) 扩展数据处理模块

提供各种格式数据的相互转换功能,支持多种谱仪文件格式的读取和转换。

8) 核心模块

核心模块在所有模块中处于核心地位,发挥数据中转作用,即把一个模块送来的数据经初步处理后发给另一模块。所有模块需要的数据结构都需要在核心模块中进行定义,包括数据通讯结构定义,数据传输包的头结构,控制信息结构定义,数据采集信息结构定义,状态检测信息结构定义。核心模块调度所有其它模块的线程,并提供所有模块间的数据和消息传递功能。

9) NMR 模拟模块

根据实验脉冲序列和自旋体系,模拟出一、二维 NMR 时间域或频率域数据,仿真 NMR 实验。

2 NMR 谱仪软件系统的容错设计

目前计算机各个应用领域中,不仅要求系统对硬件具有良好的容错性,同时也要具备软件容错的功能,以充分满足系统对实时性、可靠性的需求^[3]。NMR 谱

仪软件系统的模块开发,就是充分考虑了软件的高内聚低耦合问题,对每个关键模块都进行了容错设计,最终使得整个软件具有容错功能。

NMR 谱仪软件系统的基本实验过程如图 2 所示。

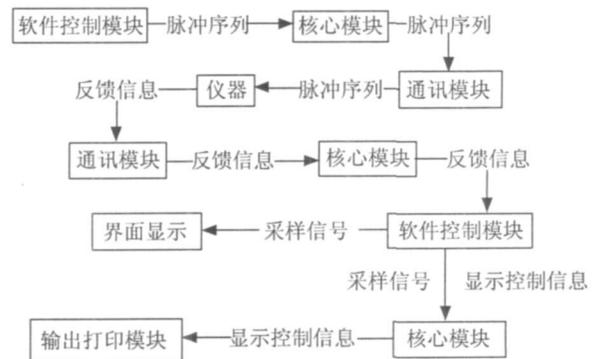


图 2 NMR 谱仪软件系统的基本实验过程

Fig. 2 Working flow of software system for NMR spectrometer

2.1 模块容错设计

1) 软件控制模块

软件控制模块由命令行、脉冲序列、匀场 3 个子模块组成。其中命令行子模块是独立线程,而其他 2 个子模块则挂在界面线程中运行。命令行子模块采用了模块重启的容错设计:在软件运行期间,命令行模块运行发现异常,则可以直接通过命令重新加载命令行模块;若命令行模块崩溃造成命令行功能无法使用,则可以通过界面按钮手动重启。脉冲序列、匀场 2 个子模块采用了备份模块方式:2 个子模块的功能均在命令行模块中做了备份,任一模块出现异常造成无法使用后,都可以在命令行模块中使用命令来调用功能。

2) 通讯模块

通讯模块使用独立线程,并且服务器端与客户端使用同一线程。服务器端负责接收仪器数据,采用双网卡冗余热备份。两个网卡均与仪器连接并处于激活状态,软件启动时自动采用其中一个网卡的 IP 地址作为服务器端 IP,另一个网卡处于空闲状态。软件运行期间,通讯模块实时检测网络状况,当其中一个网卡发生故障,通讯模块自动切换到备份网卡,改用备份网卡的 IP 地址作为服务器端 IP,端口不变,并发送命令包通知仪器服务器端 IP 改变。客户端采用堆栈方式发送控制命令包给仪器。客户端不改变通讯模块的线程状态,只把要发送的命令包加入发送堆栈,由线程从堆栈中按先入先出的顺序读取命令包,并发送给仪器。当客户端发生异常时,受影响的只是某个发送的命令包,通讯

模块并不受影响,可以继续运行.

3) 界面框架模块

界面框架模块是与用户交互的关键模块,最为重要的就是保存用户的当前状态,所以在容错设计中采用复位的方式.复位的关键技术就是使用多线程实现数据与显示的分离,所以界面框架模块使用独立的界面线程,而数据则保存在核心模块中.当界面出现异常时,无论是部分界面异常,还是整个界面异常,都可以关闭当前异常界面并重新打开.由于界面上的显示信息是保存在核心模块中,只要核心模块正常,则可以恢复异常界面.

4) 核心模块

NMR 谱仪软件系统的核心就是数据,而核心模块就是专门负责管理底层数据.核心模块是整个软件的枢纽,其他模块的功能是建立在核心模块的数据基础上的.为了保证核心模块的正常运行,设计中采用了两种容错设计.一种是中断,当其他模块对核心模块进行读写时,核心模块一旦检测到读写异常就强制中断当前读写,恢复正常数据状态.另一种是锁机制,因为采用了多线程设计,所以会出现同一时间内对同一个数据进行更改的状况,造成数据的混乱.使用锁机制,就是在数据被某个模块修改时,数据自动上锁,禁止其他模块对其进行修改操作,直到进行修改的模块完成操作,解除锁状态,其他模块才可以对这个数据进行写操作.锁机制保证了底层数据的一致性.

2.2 整体容错设计

NMR 谱仪软件系统采用了多线程的方式,使各

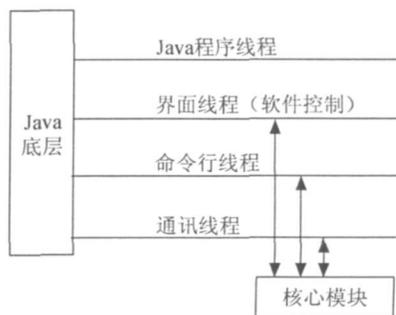


图 3 NMR 谱仪软件系统线程示意图

Fig. 3 Multithreading schema of software system for NMR spectrometer

个模块既相互独立,又可以相互交换数据.软件线程示意图如图 3 所示.

多线程的方式可以提高整个软件的容错性.根据图 2 的实验过程,采用多线程的方式可以有效地保证实验的顺利完成.在图 3 中,界面线程与用户直接交互,若界面线程死掉,则用户无法直接操作数据.但是命令行线程独立于界面线程,可以根据堆栈中的命令继续操作数据,使用户设置的实验过程可以继续.相应的,若命令行线程死掉,则用户可以使用界面继续操作.若通讯线程死掉,则当前实验无法完成,用户可以通过界面重启通讯线程,并重新开始实验,保证软件的持续运行.而单一线程则无法处理以上的错误,任一环节出错都会造成整个软件崩溃.

NMR 谱仪软件系统容错模型如图 4 所示.

NMR 谱仪软件系统的正常运行是建立在每个模

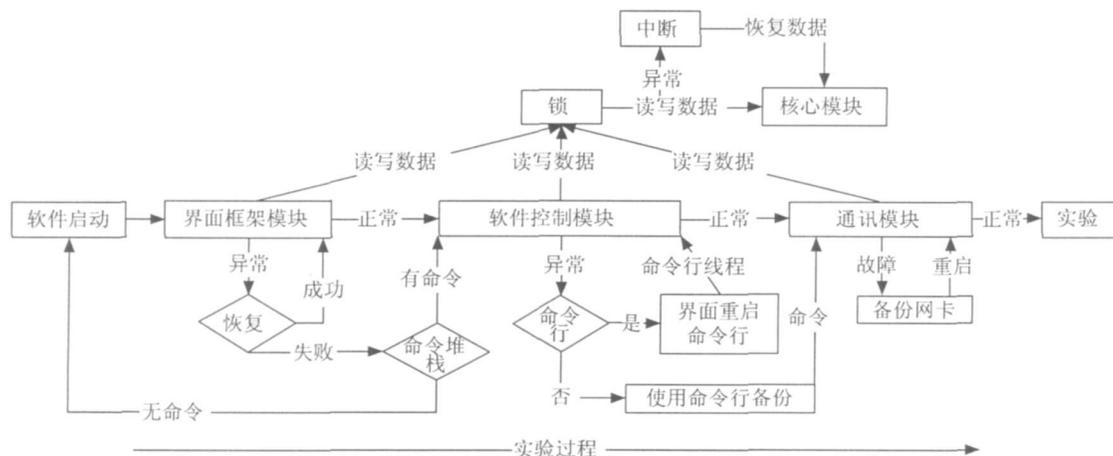


图 4 NMR 谱仪软件系统容错模型

Fig. 4 Fault-tolerant model of software system for NMR spectrometer

块正常运行的基础上的,当每个模块都正常运行时,软件整体就处于正常状态.每个模块的容错设计,增加了模块的可靠性,进而增加了整个软件的可靠性.

3 NMR 谱仪软件系统的可靠性分析

NMR 谱仪软件系统使用模块化的设计,并且由于多线程的特殊性,其可靠性与一般的软件有所不同,软件模块间既有并联关系又有串联关系^[4].

假设 n 为模块的个数, R_i 表示第 i 个模块的可靠性,串联系统的可靠性 R 可以用公式(1)计算:

$$R_{串} = \prod_{i=1}^n R_i. \quad (1)$$

并联系统的可靠性 R 可以用公式(2)计算:

$$R_{并} = 1 - \prod_{i=1}^n (1 - R_i). \quad (2)$$

软件的主要模块个数 n 已知为 4, 设各个模块的可靠性如下:核心模块为 R_1 , 界面框架模块为 R_2 , 软件控制模块为 R_3 , 通讯模块为 R_4 . 结合公式(1)、(2), 得到整个软件的可靠性 R 的计算公式:

$$R_{整} = (1 - (1 - R_2)(1 - R_3))R_1R_4. \quad (3)$$

对于每个模块的可靠性计算^[5,6], 可以引入系统平均无故障时间(MTBF)和平均维修时间(MTBR)的概念,用 T 表示模块运行总时间, T_j 表示模块运行第 j 次出错的失效时间, n 表示出错的总次数,则可得到

$$R_i = \frac{MTBF}{MTBF + MTBR} = \frac{\frac{T - \sum_{j=1}^n T_j}{n}}{\frac{T - \sum_{j=1}^n T_j}{n} + \frac{\sum_{j=1}^n T_j}{n}} = \frac{T - \sum_{j=1}^n T_j}{T}. \quad (4)$$

NMR 谱仪软件系统的 4 个模块经过 5 个阶段,每个阶段 7 d、168 h 测试运行,每个阶段之后修复一次系统 bug,可靠性统计如表 1 所示.

把表 1 的数据代入公式(4)计算得

$$R_1 = (168 \times 5 - (8 + 6 + 7.5 + 6.5 + 2)) / (168 \times 5) = 0.964;$$

$$R_2 = 0.919;$$

$$R_3 = 0.929;$$

$$R_4 = 0.991.$$

NMR 谱仪软件系统在测试期间的可靠性指标是工作 35 d(5 个阶段总和),实验的基本完成率要达到 95%,即可靠度 $R \geq 0.95$. 把上列计算结果带入公式

表 1 168 h 测试运行的可靠性统计

Tab. 1 Reliability statistics of software system after 168 hours test running

模块	每个阶段失效时间/h				
	1	2	3	4	5
核心模块	8.0	6.0	7.5	6.5	2.0
界面模块	20.0	15.0	10.5	14.0	8.5
控制模块	16.5	13.0	12.5	10.0	8.0
通讯模块	3.0	1.5	2.5	0.0	0.5

(3) 计算得:

$$R_{整} = (1 - (1 - 0.919) \times (1 - 0.929)) \times 0.964 \times 0.991 = 0.950.$$

根据计算结果,NMR 谱仪软件系统在测试期间基本达到指标的要求.从结果中可以看出,界面框架模块和软件控制模块的可靠性都没有达到指标的要求,而通过并联的方式,虽然单独模块的可靠性没有变化,但是却大幅度地提高了以 2 个模块为整体的可靠性,进而使软件整体的可靠性达标.

4 结 论

本文讨论了 NMR 谱仪软件系统中的各个模块及各模块采用的各种容错和可靠性设计方法.其中每个模块都需要单独线程,通讯模块可能需要更多独立线程,所有模块均需经核心模块中转信息,这就需要把通讯模块尽量地做在一个线程上,并且对核心模块的性能要求比较苛刻.

而脉冲序列的执行对时间的实时性要求最高,需以降低可使用序列的灵活性为代价把整个脉冲序列作为一个整体一次性进行传输.

由于所有模块均线程独立,线程间的数据传递、控制、同步、数据保护等将会比较复杂.

本文对软件中采用的多线程设计方法和恢复块设计方法进行容错设计后,对应用软件可靠性进行了分析,给出了相应的评价模型及算法,经对 NMR 谱仪软件系统的可靠性分析可以看出,采用冗余设计可以有效地提高软件的可靠性.

与 TopSpin、VNMR 等知名软件相比,本文的 NMR 谱仪软件系统在软件功能的数量及软件的成熟性上还需要进一步的提高.但 NMR 谱仪软件系统通过借鉴知名软件,实现了自身的跨平台,采用了可配置

的命令功能,并且实现了人性化的操作.尤其是软件的可靠性设计及其开放性,使软件具有进一步提高的可能.

参考文献:

- [1] Li G Y, Jiang Y, Yan X L, et al. Digital nuclear magnetic resonance spectrometer[J]. Rev Sci Instrument, 2001, 72(12): 4460-4463.
- [2] 周娜琴, 张友生. 基于软件体系结构的可靠性分析[J]. 计

算机工程与应用, 2008, 44(3): 68-71.

- [3] 周卫东, 郝燕玲. 冗余组合导航系统的软件设计及可靠性分析[J]. 计算机工程, 2007, 33(2): 236-238.
- [4] 徐巍, 刘文超, 钟飞. 测控系统软件的可靠性分析[J]. 计算机与现代化, 2005(2): 6-9.
- [5] 杨丽红. 软件测试与可靠性研究[D]. 成都: 四川大学, 2006.
- [6] 孙勇. 软件可靠性模型应用研究[D]. 南京: 东南大学, 2004.

The Design and Reliability Analysis of Nuclear Magnetic Resonance Instrument Control Software

CHEN Yuan en¹, CHEN Zhi wei², ZENG Wen hua^{1*}

(1. Fujian Key Laboratory of the Brain-like Intelligent Systems, Software School, Xiamen University,

2. Fujian Key Laboratory of Plasma and Magnetic Resonance, School of Physics and Mechanical & Electrical Engineering, Xiamen University, Xiamen 361005 China)

Abstract: This paper proposes the design method of modularization of the software system for nuclear magnetic resonance (NMR) spectrometer. The fault tolerant design of the key modules of this software system was discussed in detail and a total fault tolerant model was introduced. To construct the modules and achieve the fault tolerant goal, the software system was implemented in the multithreading mode. The data of reliability were collected and analyzed after a long time test running, from which the software system to meet the reliable requirements was concluded.

Key words: NMR; fault tolerant software; reliability; modularization