arXiv:2303.14041v1 [physics.ins-det] 24 Mar 2023

三轴谱仪的运动规划

Tobias Weber[a], *

[a] *Institut Laue-Langevin (ILL), 71 avenue des Martyrs, CS 20156, 38042 Grenoble Cedex 9, France*

摘要

我们介绍了免费开源软件*TAS-Paths*，这是一种新颖的系统，可为三轴谱仪的移动计算最优、无碰撞路径。该软件配备易于使用的图形用户界面，也可通过脚本操作并作为程序库使用。用户可在实验前规划并可视化仪器的运动，也可在测量过程中使用该软件避开障碍物。仪器路径在角度构型空间中计算，以确保与任何障碍物之间保持尽可能大的角距离。

1. 引言

自 Bertram Brockhouse 提出这一构想以来，中子三轴谱仪（TAS）已成为固体物理学研究中不可或缺的工具。世界各地的大型设施经常使用它们来探测晶体中的核激发或磁激发。

三轴谱仪的三个轴分别是单色器、样品和分析器轴。它们用于选择从中子传递到样品晶体的能量和动量。现代仪器控制软件[1, 2, 3] 允许用户使用倒易晶体坐标驱动分光仪，软件会在内部将这些坐标转换为仪器轴和样品晶体的旋转角度。由于从样品晶体坐标到仪器角度的转换并不简单 [4], ，用户无法立即判断某个坐标是否会导致仪器与屏蔽墙或仪器区域内放置的任何设备发生碰撞。控制软件本身通常只能识别最简单的预定义潜在碰撞情况，即允许每个电机除了行程开关设定的硬限位外，还可设置软限位。有关三轴谱仪工作原理的详情，请参阅 Shirane、Shapiro 和 Tranquada 编写的教科书 [5]。

自 COVID-19 疫情爆发以来，远程实验和自主实验都受到广泛关注。远程实验意味着用户不必再亲临仪器现场，而是通过远程控制软件操作仪器。自主实验则更进一步，由机器学习系统执行整个测量过程。虽然远程控制在中子设施中已十分普遍，但目前多个设施正在开展基于高斯过程的自主系统研究 [6, 7]。

这些新进展进一步拉大了用户与仪器之间的距离，并加剧了扫描或电机移动期间发生碰撞的可能性这一问题。迄今为止，即使是机器学习软件工具，也只考虑晶体坐标空间，而忽略了与仪器相关的任何细节；具体而言，它们没有考虑坐标如何转换为仪器坐标和轴角。

本软件旨在弥补这一空白，提供一种方法，用于计算仪器空间中的安全路径，即从一组仪器角度或晶体坐标到另一组的路径。过去已有研究尝试对三轴谱仪进行碰撞检测和有限的运动规划 [8], ，而我们的算法不止于直接进行网格搜索，而是基于沃罗诺伊图这一现代解析机器人运动规划方法。

*ORCID ID： https://orcid.org/0000-0002-7230-1932

Email address: tweber@ill.fr (Tobias Weber)

2. 软件设计

TAS-Paths 软件采用现代 *C++20* 编写，结构模块化，由核心库、脚本接口和图形用户界面（GUI）组成，以下小节将分别介绍这些部分。*TAS-Paths* 大量使用 *Boost* 库 [9]，并采用与我们的三轴软件套件 *Takin* [11]相同的数学库 [10]。

2.1. 核心库与算法

*TAS-Paths*核心模块的基础算法以*C++* 库的形式实现。该软件的主要功能包括：首先构建路线图，即仪器能够安全移动的所有可能路径所组成的网格；其次，从网格中选取一条从起点到目标位置的最优路径。该方法基于经典机器人运动规划中的收缩法（参见 [12], 第 7 章，第 163 和 304 页），适用于能够全面感知周围环境的机器人。之所以称为收缩法，是因为机器人会收缩至路线图上，沿路径网格移动，并在目标附近脱离路线图。下文将介绍所采用算法的简化版本。

路径网格计算。 在运动规划中，三轴仪器可视为具有三个角自由度（DOF）的机械臂，分别对应单色器轴、样品轴和分析器轴，如图 1 所示。所有自由度都限制在同一个二维平面内。实验过程中只使用三个自由度中的两个，因为能量选择可以通过移动单色器轴或分析器轴来完成，同时将另一个轴保持在固定角度。这两个自由度对于工作在固定末态能量模式下的仪器通常是单色器轴和样品轴的角度，它们张成一个二维角度构型空间，仪器的位置在其中表示为一个点。图 1 所示仪器对应的构型空间见图 2。关于构型空间的一般信息，请参见 [12], 第 13.1 章，第 284 页及后续内容。

正是在这个二维角度构型空间中，通过多步方法构建路线图，即可能的无碰撞路径网格：

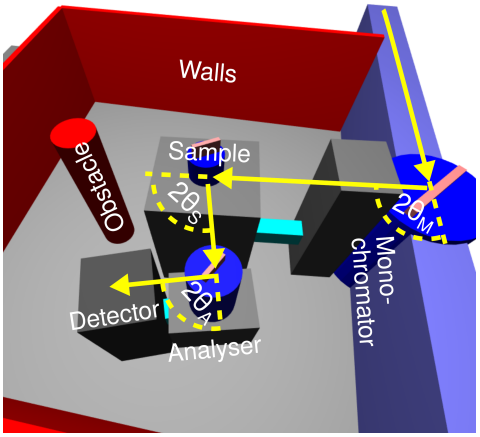

图 1：仪器空间。在典型实验中，三轴谱仪使用其轴的两个自由度：样品轴角 $2\theta_S$ 以及单色器轴角 $2\theta_M$ 或分析器轴角度 $2\theta_A$。此示例展示了仪器 *MIRA* [13] 和一个障碍物的简化模型。

- 第一步，软件在角度构型空间的网格上模拟仪器的位置，并标记仪器在移动路径上或与自身发生碰撞的区域，以及轴电机超出角度限位的区域。这样便将构型空间划分为允许和不允许仪器停留的区域，分别以蓝色和红色区域表示，如图 2 所示。

- 这两个区域边界的轮廓在第二步中重建，并用线段近似 l_i。

- 在算法的核心步骤中，线段 l_i 作为构建沃罗诺伊图 V的生成元。我们将可能的仪器路径网格计算为沃罗诺伊平分线 $B\left(l_i,\ l_j\right)$ 的集合，其中 V 满足 [14]:

$$B\left(l_i, l_j\right) = \left\{\alpha \in C \,|\, \|\alpha - l_i\| = \|\alpha - l_j\|\right\}, \quad (1)$$

其中，C 表示角度构型空间，$\|\cdot\|$ 表示角度范数。由于 l_i 和 l_j 是分隔禁行区域与允许区域的任意两条线段，因此这些角平分线给出了到最近障碍物的角距离相等的轨迹。它们在图 2 中以细白线表示，并构成路线图。

使用沃罗诺伊图可确保路径网格上每个点的角坐标与任何不允许的位置之间的角距离

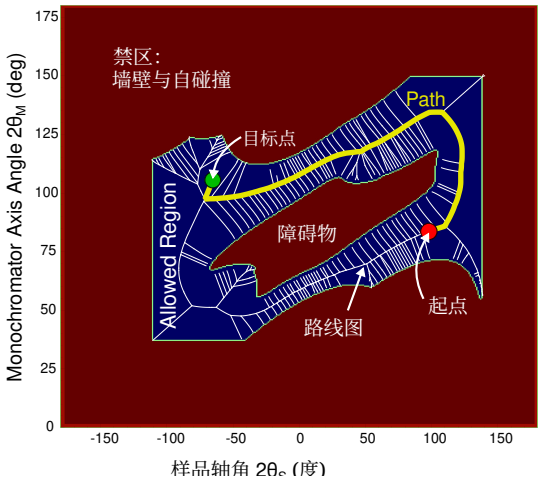

图 2：由样品轴角 $2\theta_S$ 和单色器轴角 $2\theta_M$构成的角度构型空间。红色区域表示会发生碰撞的禁区，蓝色区域表示仪器可以移动的区域。计算得到的路线图，即可能路径的网格，以细白线显示。从起始位置（红色圆圈）到目标位置（绿色圆圈）的一条具体路径以粗黄色线表示。该图对应于图 1 所示的仪器空间。

达到可能的最大值。沃罗诺伊图由两个受支持的后端库之一计算。用户可在此选择*Boost* 的多边形 [15, 9]和*CGAL* 的线段德劳内图[16, 17] 软件。为提高效率，核心库会将路径网格计算分配到多个执行线程上。

线段沃罗诺伊图的使用源于我们将有效和无效构型空间边界量化为线段。一般而言，从解析角度看，这是对构型空间拓扑骨架 [18]的一种近似。关于沃罗诺伊图及其推广的更多信息，请参阅 [12]，第 7 章，第 147–171 页。

路径计算。为了计算路径，生成网格的沃罗诺伊节点和角平分线分别注册为加权图数据结构中的顶点和边。两个沃罗诺伊节点之间的角距离作为图中边的权重；计算距离函数时，我们还考虑轴电机的速度。这种距离函数的初步版本也曾作为我们一个关于仪器自主控制的配套项目的代价函数，该项目涉及仪器自主控制 [6]。起点和目标仪器角度之间的最短角距离通过应用迪杰斯特拉单源最短路径算法计算得出（见[19], 第 273—297 页）。该算法利用与边相关联的权重，求出图中一个源顶点到所有其他顶点的最短路径。在我们的示例中，计算出的最短路径在图 2 中以粗黄色线条表示。

到目前为止，该算法会在路线图上选择最短路径。不过，仍可能存在其他更安全的路径。为计算这些路径，我们可以选择引入额外的权重因子，具体取决于某个位置与下一个障碍物之间的距离，该距离通过两者之间的直接角距离计算。这些权重因子实际上充当一种势函数，将最优路径推离过于接近禁区的位置。这一思路类似于机器人运动规划中的经典势场法（见 [12], 第 305 页）：墙壁会产生排斥势，使机器人与其保持一定距离；而这里还额外要求仪器始终处于路线图上。

用户可以直接提供仪器起始位置和目标位置的各轴角度，也可以指定样品晶体坐标系的米勒指数。软件会使用同一套 UB 矩阵形式体系 [4] ，透明地完成两者之间的转换；仪器控制软件也广泛采用这种形式体系，例如*NICOS* [1], *SICS* [2], 或 *NOMAD* [3]。

外部绑定。核心$C++$ 库通过$SWIG$ 软件生成 $Python$ [20] 绑定，以提供本机接口[21] 。这样便可通过脚本计算仪器路径，并且例如可以直接用于基于$Python$的仪器控制软件，如$NICOS$ [1]。源代码发行包中提供了可重复使用的示例脚本，分别适用于三轴谱仪的固定末态能量模式和固定初态能量模式。

2.2. 图形用户界面

图形用户界面基于Qt 库及其$OpenGL$ 控件 [22]。它配备了一个三维编辑器，用户可以在其中放置障碍物，通过拖放鼠标移动仪器，并实时更改其属性（图 3）。我们使用几何基元对仪器和障碍物进行建模。这些基元可以

被视为实际复杂仪器细节的包络几何体，因此不会导致无效位置。

图形用户界面使用核心库计算和模拟路径网格，以及从仪器当前位置到目标位置的具体路径；目标位置也可以通过图形方式选定。角度构型空间中的计算过程和仪器运动通过 *QCus-tomPlot* 库 [23]进行可视化。计算路径可以导出为适用于多种仪器控制系统的电机命令。

3. 使用案例

除了将其纳入自主仪器控制项目这一主要目标外，该软件还有多种复杂程度不一的用例。最简单的情况下，它可用于在规划实验时计算可能发生碰撞的构型。更复杂的情形是将该软件与现有仪器控制系统结合起来，使仪器能够自动沿计算路径运动。下面将分别介绍这两种情形的示例。

3.1. 碰撞计算

实验过程中容易发生的一种碰撞，是由仪器电机通常以不同速度运动造成的。若向一台已靠近墙壁的仪器发出驱动命令，即使起始位置和目标位置本身都安全，也可能导致仪器撞上墙壁。图 4 展示了这种情况，该示例依据我们在仪器 *Thales* [24] 的一次实验中遇到的扫描位置建模。在 *Thales* 上，单色器轴的运动速度明显慢于样品轴。因此，若手动将仪器从图 4 中位置 (a)（扫描结束时的位置）移回中性位置 (b)，就会撞上墙壁，因为控制软件通常会同时移动所有轴。

在这种情况下，当仪器控制软件发出驱动命令时，*TAS-Paths* 核心库可以链接到仪器控制软件，并用作监测系统，在即将发生碰撞时发出警告。

3.2. 路径跟踪

除了单纯监测仪器控制系统驱动的位置外，*TAS-Paths* 还可以主动计算供控制软件使用的路径。我们在使用*MIRA* [13] 上的*NICOS* [1]控制系统时，成功进行了首次测试：我们让软件驱动仪器绕过一个障碍物。测试中，我们用一个垃圾桶代替障碍物。在实际实验中，这通常可能是氦气罐或氮气罐，也可能是专用于样品环境的设备；这些设备往往放置在靠近仪器臂的位置。实验视频可在线查看：https: //youtu.be/F0SAQp00he4。请注意，由于仪器移动较慢，为便于观看，视频播放速度已大幅加快。

测试结果表明，为了兼容*TAS-Paths*，必须调整仪器控制系统，使其适用于另一种电机控制方式。在正常运行中，控制系统会同时驱动所有电机，将其位置校正到十分之一度以内的精度，并在每个点之后关闭气垫。对于*TAS-Paths*，运动必须保持连续，同时让气垫一直开启。通常，只需在每个控制点之后将位置校正到度级范围内即可。

4. 结论

我们介绍了新颖的碰撞检测与运动规划系统 *TAS-Paths*。该软件能够为三轴谱仪寻找仪器路径，使其与实验空间中可能存在的任何障碍物之间的角距离最大。

由于目前自主实验过程中尚无自动安全系统来防止仪器发生碰撞，因此该软件将纳入我们规模更大的自主实验项目。我们已对该项目进行了初步测试 [6]，未来将向普通用户开放。之所以可行，是因为 *TAS-Paths* 在各方面都与我们现有的自主控制系统互为补充：*TAS-Paths* 以解析方式计算位置，只关注实验的仪器方面；自主控制软件则使用统计方法和启发式方法 [25] 来选择位置，只关注实验的物理方面。

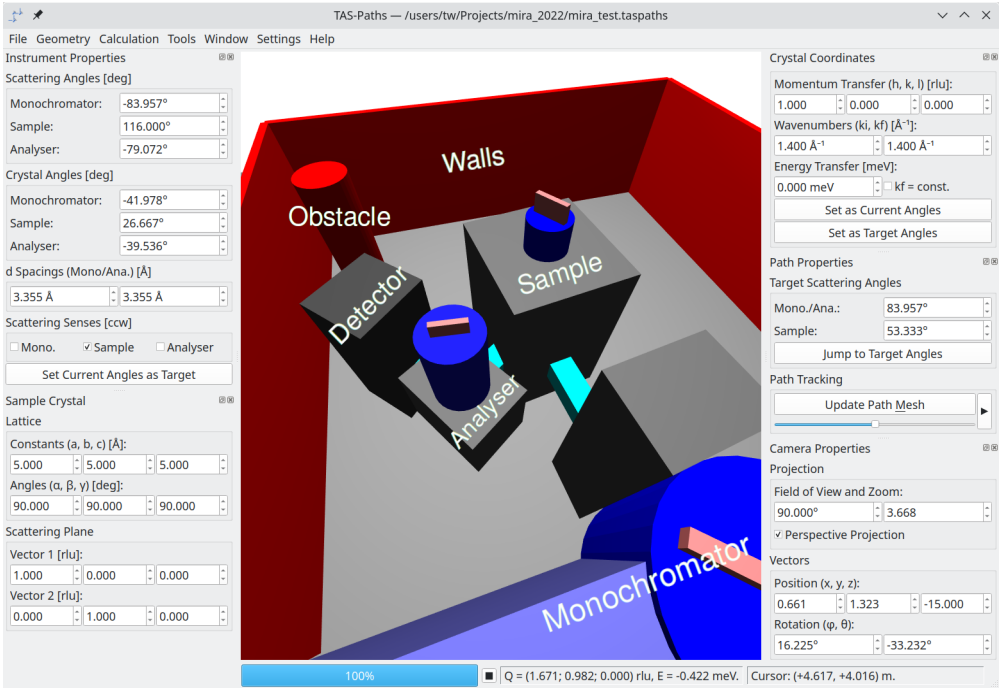

图3：主窗口。图形用户界面提供了一个三维编辑器，可轻松在仪器空间中添加障碍物，并通过鼠标拖放移动所有组件。系统会模拟并可视化沿计算路径的仪器运动。

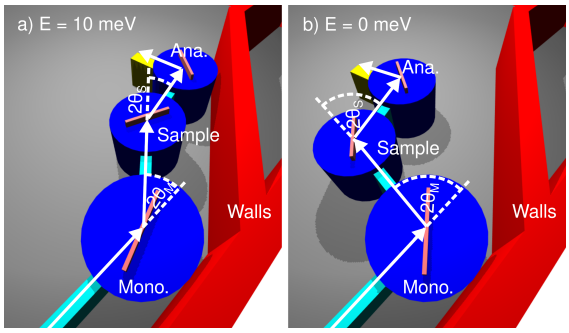

图4：如果没有运动规划，将靠近墙壁的位置（a）处的仪器（例如在扫描结束时）移回中性位置（b），那么当单色器轴的移动速度慢于样品轴时，仪器可能会撞上墙壁。

除了用于自主实验外，*TAS-Paths* 软件还可让用户在实验规划期间模拟并可视化仪器的运动。这有助于在开始任何测量之前避免危险情况。该软件已在仪器的典型使用场景中成功通过测试，也已成功用于模拟分光仪绕过障碍物移动。

未来的开发方向可能包括使用RGBZ相机自动确定仪器空间中的障碍物，以及使用外部完整的仪器CAD模型取代简化几何模型。

致谢

首先，我要感谢马丽红博士和Christian Icking教授，他们在我的论文工作 [26] 中指导了这个项目，并就项目本身及计算几何的一般问题与我进行了许多讨论。我还要感谢Ga´etan Fine，感谢他将 *TAS-Paths* 集成到*NO-MAD* 仪器控制系统 [3] 中，并参与测试版测试。此外，感谢Robert Georgii在 *MIRA* [13] 调试测试中给予的支持，感谢Martin B¨ohm和Paul Steffens与我讨论相关问题，也感谢Paolo Mutti和St´ephane Rols对项目的支持。感谢Alain Filhol帮助将软件上架*App Store*。

源代码

TAS-Paths 统一发布仓库位于 https://github.com/ILLGrenoble/taspaths,

其开发仓库位于 https://code.ill.fr/scientific-software/ takin/paths。该软件的 DOI 为 10.5281/zen- odo.4625649。

参考文献

[1] G. Brandl, E. Faulhaber, C. Felder, J. Kr¨uger, A. Lenz, B. Pedersen, NICOS，即网络化仪器控制系统（2010—2023）。网址 https://nicos-controls.org[2] H. Heer, M. Konnecke, D. Maden, 《SINQ仪器控制软件系统》，《物理学B: 凝聚态》241–243（1997）124–126，国际中子散射会议论文集。doi: 10.1016/S0921-4526(97)00528-0。[3] P. Mutti, F. C´ecillon, A. Elaazzouzi, Y. L. Goc, J. Lo- catelli, H. Ortiz, J. Ratel, 《NOMAD——不只是一个简单的定序器》，载于: ICALEPCS 2011会议论文集，法国格勒诺布尔，2011年，第808–811页。[4] M. D. Lumsden, J. L. Robertson, M. Yethiraj, 《非弹性中子散射实验中的UB矩阵实现》，《应用晶体学杂志》38（3）（2005）405–411。doi:10.1107/S0021889805004875。[5] G. Shirane, S. M. Shapiro, J. M. Tranquada, 《使用三轴谱仪进行中子散射: 基本技术》，剑桥大学出版社，英国剑桥，2002年。[6] M. M. Noack, P. H. Zwart, D. M. Ushizima, M. Fukuto, K. G. Yager, K. C. Elbert, C. B. Murray, A. Stein, G. S. Doerk, E. H. R. Tsai, R. Li, G. Freychet, M. Zh- ernenkov, H.-Y. N. Holman, S. Lee, L. Chen, E. Roten- berg, T. Weber, Y. L. Goc, M. B¨ohm, P. Steffens, P. Mutti, J. A. Sethian, 《用于大型同步辐射和中子设施自主数据采集的高斯过程》，《自然综述: 物理学》3（2021）685–697。doi:10.1038/s42254-021-00345-y。[7] M. T. Parente, G. Brandl, C. Franz, U. Stuhr, M. Ganeva, A. Schneidewind, 《利用对数高斯过程主动学习的人工智能辅助中子光谱学》，预印本，见 arXiv: 2209.00980（2023）。arXiv:2209.00980。网址 https://arxiv.org/abs/2209.00980[8] Q. Muhlbauer, K. Hradil, 《三轴谱仪的碰撞监测与预防》，载于: 2006年IEEE控制应用国际会议论文集，德国慕尼黑，2006年10月4—6日，2006年，第1795–1800页。doi:10.1109/CACSD-CCA-ISIC.2006.4776913。[9] 多位作者，Boost C++ 库（2004—2023）。网址 https://www.boost.org[10] T. Weber，tlibs——物理数学C++ 模板库（2012 2023 doi:10.5281/zenodo. —）。5717779[11]。T. Weber, 《“Takin: 用于实验规划、可视化和数据分析的开源软件”的2.0版更新》，（PII: S2352711016300152），《SoftwareX》14（2021）100667。doi:10.1016/j.softx.2021.100667。[12] M. de Berg, O. Cheong, M. van Kreveld, M. Overmars, 《计算几何: 算法与应用》，第三版，施普林格出版社（柏林海德堡），德国，2008年。doi:10.1007/978-3-540-77974-2。[13] R. Georgii, T. Weber, G. Brandl, M. Skoulatos, M. Janoschek, S. M¨uhlbauer, C. Pfleiderer, P. B¨oni, FRM II的多用途三轴谱仪MIRA, 《核仪器与方法物理研究A辑: 加速器、谱仪、探测器及相关设备》881（2018）60–64。doi:10.1016/j.nima.2017.09.063。[14] C. Icking, R. Klein, L. Ma, S. Nickel, A. Weißler, 《不同距离函数的角平分线》，《离散应用数学》109（1）（2001）139–161，第14届欧洲计算几何研讨会。doi: 10.1016/S0166-218X(00)00238-9。[15] A. Sydorchuk，Boost Polygon 沃罗诺伊扩展，Boost C++ 库 [9] 的一部分（2010—2013）。网址 https://www.boost.org/doc/libs/1_76_0/libs/polygon/doc/voronoi_main.htm[16] M. I. Karavelas, 《CGAL中的沃罗诺伊图》，载于: I. Z. Emiris, M. I. Karavelas, L. Palios（编），第22届欧洲计算几何研讨会（EWCG'06）论文集，希腊德尔斐，2006年，第229–232页。网址 http://users.math.uoc.gr/~mkaravel/files/papers/vda-ewcg06.pdf[17] 多位作者，C++ 计算几何算法库（CGAL）（1995—2023）。网址 https://www.cgal.org[18] P. Golland, W. Eric, L. Grimson, 《固定拓扑骨架》，载于: IEEE计算机视觉与模式识别会议论文集。CVPR 2000（编号PR 00662 1, 2000, 10 17 doi:10.1109/ ），卷, CVPR.2000.855792第—页。[19]J. Erickson, 《算法》，第1版，自行出版，2019年。网址 http://jeffe.cs.illinois.edu/teaching/algorithms/[20] G. van Rossum, J. Fred L. Drake, 《Python语言参考手册》，Network Theory Ltd.，2011年。[21] SWIG开发者, 《简化包装器与接口生成器》（SWIG）（1995—2023）。网址 http://www.swig.org[22] 2023The Qt Company，Qt（）。网址 https://www.qt.io[23] E. Eichhammer, QCustomPlot（2011—2023）。网址 https://www.qcustomplot.com[24] M. Bohm, P. Steffens, J. Kulda, M. Klicpera, S. Roux, P. Courtois, P. Svoboda, J. Saroun, V. Sechovsky, 《ThALES——面向强关联电子系统的三轴低能谱学》，《中子新闻》26（3）（2015）18–21。doi:10.1080/10448632.2015.1057050。[25] M. M. Noack, K. G. Reyes, 《高斯过程驱动自主实验的数学细节》，《MRS公报》48 2023 1 11 doi:10.1557/ （）–。s43577-023-00478-8[26] T. Weber, 《三轴谱仪的路径规划》，哈根远程大学（FUH），数学与计算机科学学院，合作系统教研组，德国哈根（2021年）。