

X 射线单晶衍射仪远程控制系统消息通信系统^①

武佳颖¹, 于碧辉²

¹(中国科学院大学, 北京 100049)

²(中国科学院 沈阳计算技术研究所, 沈阳 110168)

摘要: 为突破现有的 X 射线单晶衍射仪操作与控制系统上位机直接控制下位机模式, 采用 RabbitMQ 企业级消息队列服务器作为控制通信服务器, 并以此为基础搭建 X 射线单晶衍射仪远程控制系统的消息通信平台, 实现对分布式各个子系统的远程操作与控制. 本文介绍了针对远程控制系统的消息通信系统进行设计, 初步测试表明在此通信系统上能够实现稳定精准的消息通信.

关键词: 单晶衍射仪; 远程控制系统; RabbitMQ

Communication System of X-Ray Single Crystal Diffraction Remote Control System

WU Jia-Ying¹, YU Bi-Hui²

¹(University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

²(Shenyang Institute of Computing Technology, Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110168, China)

Abstract: In order to break through the control mode of remote control system of X-ray single crystal diffraction, in which upper computer positive controls lower computer, the enterprise-class RabbitMQ message queue server is used to act as control communication server to build a messaging platform for X-ray single crystal diffraction remote control system. And we have achieved the remote operation and control among various distributed subsystems. The paper mainly introduces the design of the communication system for remote control system and the primary testing shows this communication architecture can realize stable and precise messaging.

Key words: X-ray single crystal diffraction; remote control system; RabbitMQ

X 射线单晶衍射仪工作的基本原理是将 X 射线(如 Cu 的 $K\alpha$ 辐射)射到一粒单晶体上会发生衍射, 单晶衍射仪可以提供分立的衍射点数据, 因此我们可以获得完整、精确的衍射信息, 基于衍射原理和数学计算, 我们可以获得准确的原子坐标等信息. 从而提供键长键角, 特别是手性绝对构型、分子构象等其它表征手段难以提供的精确信息^[1]. 在晶体结构解析的理论和方法方面, X 射线单晶衍射结构分析成为认识晶体物质微观结构的重要途径和权威方法, 其衍射方法在晶体学、矿物学、材料学以及结构化学、高分子化学等研究中成为不可缺少的实验手段^[2].

国内使用 X 射线单晶衍射仪已经有 30 多年的历史. 遗憾的是, 该仪器主要由美国安捷伦的 Agilent、德国

的 Bruker、STOE、Marresearch 以及日本理学 Rigaku 几家国外公司长期垄断, 至今没有国产化产品. 进口仪器不仅价格昂贵, 而且维护成本高、周期长, 大大制约我国在化学、材料、生物医药等相关行业的快速发展^[3]. 开发具有自主创新核心技术, 高稳定性、高灵敏度的 X 射线单晶衍射仪, 填补国内空白并实现产业化, 对我国 X 射线分析仪器的研发和产业化起引领作用. 与此同时, X 射线单晶衍射仪操作与控制系统作为与之紧密联系的核心软件, 更具有现实意义.

在 X 射线单晶衍射仪器控制领域, 趋势是控制更为准确方便和更人性化^[3], 总体是朝着全数字化的高精尖、网络化和小型化控制的方向发展的^[4]. 目前, 依托于国家重大专项的“X 射线单晶衍射仪”项目已经取

① 基金项目: 国家科技计划基金项目(2013YQ240511)

收稿时间: 2016-06-01; 收到修改稿时间: 2016-06-27 [doi:10.15888/j.cnki.csa.005600]

得了不错的成果,由中科院沈阳计算所承担的中英文版 X 射线单晶衍射仪操作与控制系统子项目的研发也进展到一定阶段,基本能够稳定高效的实现对 PLC 和底层硬件设备的操作与控制,能够收集到高质量的晶体衍射图像,但是由于解析数据的工作运行在 Linux 平台上,而操作与控制系统则运行在 Window 平台上,要实现两个系统的通信则存在一定的障碍.为了能够实现不同子系统的通信以及对增加 X 射线单晶衍射仪操作与控制系统的可拓展性,拟设计将原单机版控制系统设计为基于互联网的远程控制系统,利用消息中间件提供分布式应用程序之间的通信接口,最终实现业务功能的传输.

本文主要介绍了 X 射线单晶衍射仪远程控制系统的消息通信系统的设计,在此通信系统上能够实现稳定精准的消息通信.

1 系统概述

X 射线单晶衍射仪整个体系由单晶衍射仪硬件设备、操作与控制系统和数据处理子系统构成,操作与控制系统是连接单晶衍射仪硬件设备和数据处理子系统的枢纽,操作与控制系统提供友好的用户界面引导用户对硬件设备的操作和管理,同时操作与控制系统在一定的收集策略下获取衍射图像数据并存储,对其进行指定目标格式的预处理操作,提供给数据处理子系统,供其进行数据分析还原晶体结构.

各子系统间具体关系为: X 射线单晶衍射仪操作与控制系统通过 RJ45 接口与系统控制单元 PLC 进行连接,系统控制单元连接要监控的部件和传感器,通过 Modbus 通讯协议与 PLC 设备通信,利用 PLC 地址与 ModBus 地址的映射关系获取 PLC 相关的监控设备运行状态,也可以对相关设备进行参数设置,实现对 PLC 的操作与控制;操作与控制系统通过标准网络接口和 CCD 探测器连接,获取衍射图像数据,并进行简单的滤波、平滑、锐化等处理,调用数据预处理软件包的接口,对数据预处理,然后组织成标准文件存储,为数据处理子接口提供图像数据.三个子系统间的关系如图 1 所示.

X 射线单晶衍射仪操作与控制系统应用程序遵循层次化、模块化的设计和开发原则.采用三层架构模式,将系统分为硬件设备管理层、业务处理层、界面展示层.模块功能相对独立,模块之间采用接口通信,

模块完成相对独立的功能,多个模块合完成一系列功能,将系统分为系统配置模块、Modbus 通信模块、PLC 控制模块、CCD 控制模块、视频采集控制模块、策略管理模块、图像采集管理模块、界面显示组件等.各个模块根据所处理功能的不同分布在不同的系统层中,系统的结构层次如图 2 所示.

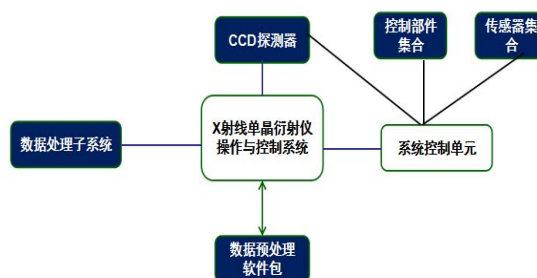


图 1 各子系统间的关系

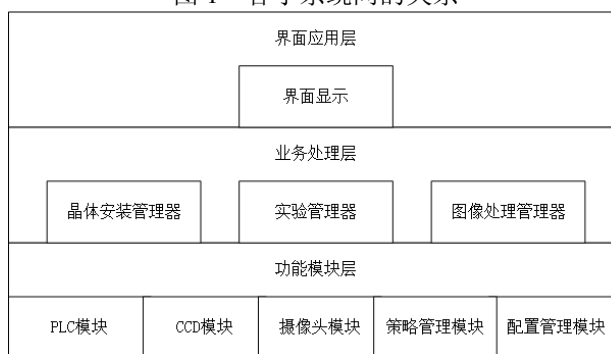


图 2 操作与控制系统模块结构图

功能模块层实现了对 PLC、CCD、摄像头等底层硬件的封装,中间业务层根据功能需求调用硬件设备管理层提供的接口,通过业务逻辑流程组合抽象成业务控制接口.界面展示层通过调用底层功能模块层接口以及中间业务层控制接口与 PLC 设备进行交互.

不同于现有的操作界面与控制逻辑在同一台机器上的 X 射线单晶衍射仪操作与控制系统, X 射线单晶衍射仪远程控制系统实现了对各个分布式子系统的远程操作与控制,将界面应用层与中间业务层彻底分离,突破传统的上位机控制下位机模式,改进为基于互联网的远程控制形式.系统的界面展示层被分离出来形成操作与控制系统的独立客户端,下层的硬件设备管理层及业务处理层则共同形成操作与控制系统的服务器端,用于为 X 射线单晶衍射仪远程操作与控制系统中各个功能系统提供控制服务,这样就形成一种标准的 C/S 结构的组织架构,大大拓展了系统的灵活性,

也使得不同的操作系统能够通过网络互联实现对操作与控制系统的服务器的访问。

综合考虑 X 射线单晶衍射仪操作与控制系统的业务特点和各个功能实体间交互信息的内容特点, 选择使用消息队列实现 X 射线单晶衍射仪远程控制系统中的消息通信功能, 使用 AMQP 协议标准作为信息承载标准。选择 RabbitMQ 企业级消息队列服务器作为控制通信服务器, 以此为基础搭建 X 射线单晶衍射仪远程控制系统中的消息通信平台, 在此通信平台基础上可以灵活构建并扩展 X 射线单晶衍射仪操作与控制系统的业务功能。

2 消息通信系统的设计

2.1 分布式结构设计

AMQP 是应用层协议的一个开放标准, 为面向消息的中间件而设计, RabbitMQ 是 AMQP 协议的一个开源实现, 链接客户端与服务器的链路是根据消息队列的状态与属性实现信息在 RabbitMQ 服务器上的存储与转发, 它有两个核心——交换器(Exchange)与队列(Queue)通过消息的绑定与转发机制实现信息通信^[2,8]。RabbitMQ 支持多个完全不同的终端消费, 能够实现数据在多种不同的进程或系统间传递, 很好地实现分布式应用的松耦合和异步调用^[6]。X 射线单晶衍射仪远程控制系统实现的就是这样一个小型分布式系统, 客户端不仅可以利用现有的界面资源将整个系统体现为 C/S 架构, 甚至可以开发网页版客户端形成一种 B/S 和 C/S 共存的模式。数据处理子系统也作为一种类型的客户端, 用于向服务器发送接收图像数据的请求。在 X 射线单晶衍射仪远程控制系统中, 客户端与服务端都是一个 AMQP 终端实体, 通过自定义的 XSI 协议完成业务的执行, 单晶衍射仪远程控制系统消息通信系统结构如图 3 所示。

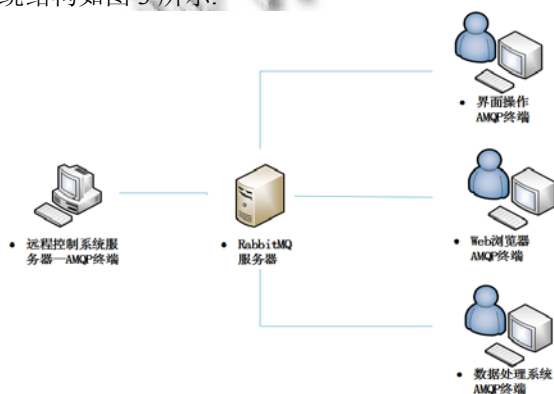


图3 远程控制系统消息通信系统结构图

2.2 终端间的通信

在 X 射线单晶衍射仪远程控制系统中, 自定义 XSI 协议标准由 AMQP 标准承载并传递, 即 XSI 协议内容将放入由 AMQP 标准定义消息体中作为消息内容进行传递。以下约定 X 射线单晶衍射仪远程控制系统服务器端为 XRaySCDServer。

XSI 协议是使用结构体方式定义的, 事件、命令、即时消息都将定义为结构体。在 XSI 协议的发送和接收过程中需要将结构体对象与字符数组进行转换。发送消息时先将构造好的 XSI 结构体对象转换成字符数组, 再将该字符数组作为 AMQP 协议标准定义的消息的消息体内容发送出去。接收消息时先将 AMQP 协议标准定义的消息的消息体内容以字符数组的形式取出, 再将该字符数组按照指定的结构体类型转换为结构体对象。

2.3 消息通信业务功能分析

2.3.1 XRaySCDServer 状态的发布与接收

XRaySCDServer 负责复杂的 PLC 设备管理和业务处理等功能的实现。客户终端应用程序需要获取到其有权限获取的 PLC 设备的相关状态信息以及 XRaySCDServer 的相关状态信息, XRaySCDServer 负责将这些状态实时的推送给终端应用程序。终端应用程序在接收到状态信息后再经过处理转换为终端状态、用户界面显示等内容。

XRaySCDServer 状态分为:

- ① 用户请求的操作执行状况信息。
- ② XRaySCDServer 的相关状态信息。

2.3.2 控制命令的发布与接收

终端应用程序通过向 XRaySCDServer 发送功能指令完成对下位机的控制与管理。这类功能指令就是服务器提供的业务服务接口, XRaySCDServer 在接收到控制命令后将根据控制命令的类型和参数完成相关功能处理。

2.3.3 即时消息的发布与接收

X 射线单晶衍射仪远程控制系统内的各个功能实体间需要进行文本消息的实时交互。文本消息的发送者可以是服务器也可以是任意的终端应用程序, 接收者是任意的终端应用程序。

即时消息按照接收者范围的不同分为:

- ① 终端消息, 发送给指定的终端应用程序。
- ② 广播消息, 发送给所有终端应用程序。

2.4 消息类型分析及设计

经过对消息通信业务功能的分析可以将消息分为事件、命令、即时消息三种类型。命令是由客户端应用程序发送的、由远程控制系统接收的信息，发送命令是对远程控制系统服务器提供的业务服务接口的调用。事件是由 X 射线单晶衍射仪远程控制系统服务器发送的、由客户端应用程序接收的信息，事件主要携带的内容是对相应命令的执行响应和控制服务器的相关状态信息。即时消息是由终端应用程序或者控制系统服务器发送的、由终端应用程序接收的信息。即时消息的内容是文本。

2.5 消息队列服务器设计

选择 RabbitMQ 企业级消息队列服务器作为 X 射线单晶衍射仪远程控制系统的消息通信系统服务器。需要按照对消息通信系统业务功能的分析对 RabbitMQ 消息队列服务器进行相关配置，同时 AMQP 终端实体也需要按照业务功能定义实现相关的消息接收功能。

2.5.1 虚拟主机(vHost)

首先需要在 RabbitMQ 消息队列服务器上建立数字广播系统消息通信业务的专用虚拟主机，虚拟主机相关参数如表 1 所示。

表 1 虚拟主机参数配置表

参数名称	参数值
Name	XSI_MQ

2.5.2 用户(User)

根据控制系统的系统构架需要在消息通信系统启动前配置多个消息队列终端账号，消息队列终端账号将提供给所有业务操作消息队列终端、数据分析系统消息队列终端以及服务器的消息队列终端使用。

终端账号命名规则如下：

业务操作终端 C.XX。其中 XX 为登陆者的注册姓名，如：C.user01。

数据分析系统终端 D.XX。其中 XX 为登陆者的注册姓名，如：D.user02。

默认情况下配置消息队列终端账号如表 2 所示。

表 2 消息队列终端账号配置表

终端	账号	密码
服务器消息队列终端	servermqclient	XSI123456
业务操作消息队列终端 user01	C.user01	XSICuser01
业务操作消息队列终端 XX	C.XX	XSICXX

数据分析消息队列终端 user02	D.user02	XSIDuser02
数据分析消息队列终端 XX	D.XX	XSIDXX

2.5.3 交换机(Exchange)

消息队列服务器的交换机将与控制系统中业务功能所需要的通信消息业务种类相对应。在消息队列服务器上配置相关交换机，交换机参数如表 3 所示。

表 3 交换机参数表

交换机名称	交换机类型
Event.Server	Fanout
Event.Client	Topic
IM.Client	Direct
IM.BC	Fanout
S.Action	Topic

2.6 消息队列终端设计

2.6.1 队列(Queue)

消息队列服务器不建立永久型的消息队列，消息队列将由消息队列终端临时创建。建立临时消息队列而不是永久型消息队列主要考虑以下几点：

- 1) 服务器接收的命令具有实时性，即不处理过期命令。
- 2) 终端应用程序接收的事件具有实时性，即不处理过期的事件。
- 3) 终端应用程序接收的即时消息具有实时性，即不处理过期的即时消息^[8]。

综上所述，无论消息接收者是服务器还是终端应用程序都不需要将消息存储到队列中，所以使用时才创建队列是可以满足功能需求的。

另外，如果使用永久型消息队列就必然会出现消息队列中保留着未被及时消费掉的消息，这种消息长期积累将占用消息队列服务器的资源而造成不必要的浪费^[7]。

服务器和终端应用程序的 AMQP 终端实体在与消息队列服务器建立连接后需要建立自己的临时消息队列，终端应用程序 AMQP 终端实体的消息队列名称的命名规则如下：

Client.Action.用户名，用户名同终端账号，一般根据终端类型分别将业务操作终端和数据分析终端命名为 C.XX, D.XX。默认消息队列名称如表 4 所示。

表 4 消息队列终端临时消息队列列表

终端	临时消息队列名称
服务器消息队列终端	S.Action
业务操作消息队列终端 user01	Client.Action.C.user01

业务操作消息队列终端 XX	Client.Action.C.XX
数据分析消息队列终端 user02	Client.Action.D.user02
数据分析消息队列终端 XX	Client.Action.D.XX

2.6.2 绑定关系(Binding)

消息队列终端在创建临时消息队列后需要将该队列与交换机绑定,即订阅相关业务.临时消息队列与交换机的绑定关系如表 5 所示.

表 5 临时消息队列与交换机绑定关系表

终端消息队列	绑定交换机	绑定键值	说明
服务器消息队列终端消息队	S.Action	Action.*	*用于匹配命令名称
终端消息队列	Event.Server		不需要设置绑定键值
终端消息队列	Event.Client	Event.XX X*	XXX 代表主机名称,即 Rabbit-MQ 账号.如: Event.C.user01.* Event.D.user02.* *用于匹配事件
终端消息队列	IM.Client	IM.XXX	XXX 代表主机名称,即 Rabbit -MQ 账号.如: IM.C.user01 IM.D.user02
终端消息队列	IM.BC		不需要设置绑定键值

3 消息通信业务场景

3.1 服务器事件的发送与接收

服务器事件是 XRaySCDServer 向所有终端应用程序发布的描述服务器运行状态等信息的消息.服务器事件的发送与接收如图 4、图 5 所示(下图编号假设为用户登录名,实际登录建议不要使用编号).

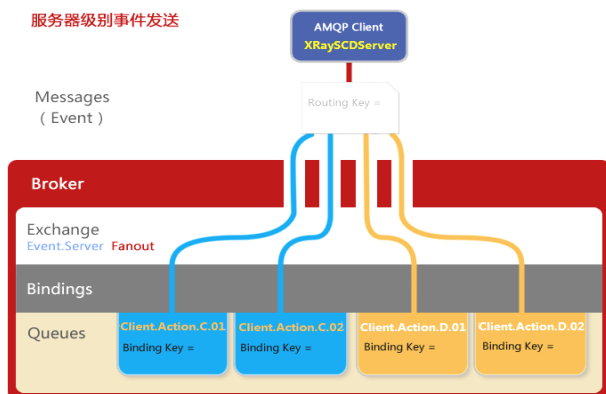


图 4 服务器发送服务器级别事件示意图

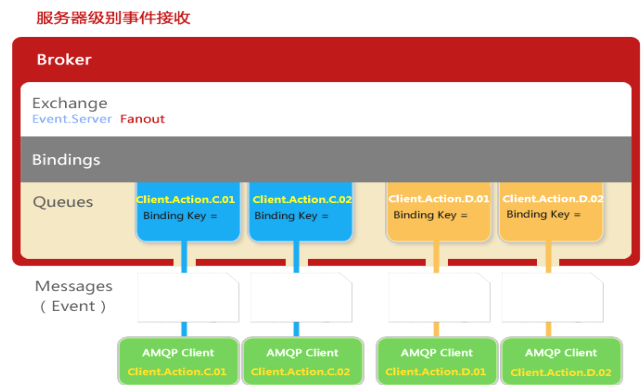


图 5 终端接收服务器级别事件示意图

3.2 终端控制命令的发送与接收

终端控制命令是由终端应用程序向服务器发布的业务功能接口的调用消息.假设用户 C.01 和 D.01 分别向服务器发送轴移动命令和登录命令,终端控制命令的发送与接收如图 6、图 7 所示.

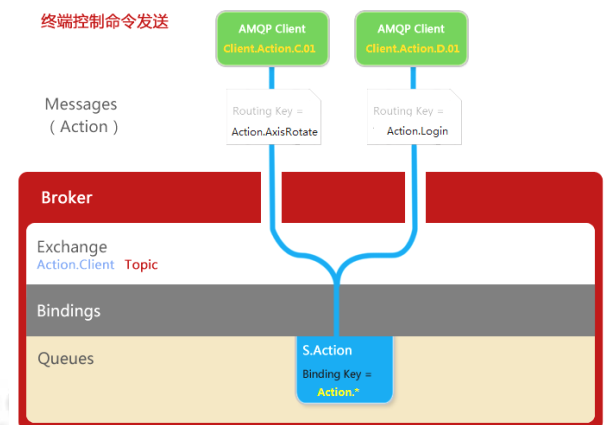


图 6 终端发送终端控制命令示意图

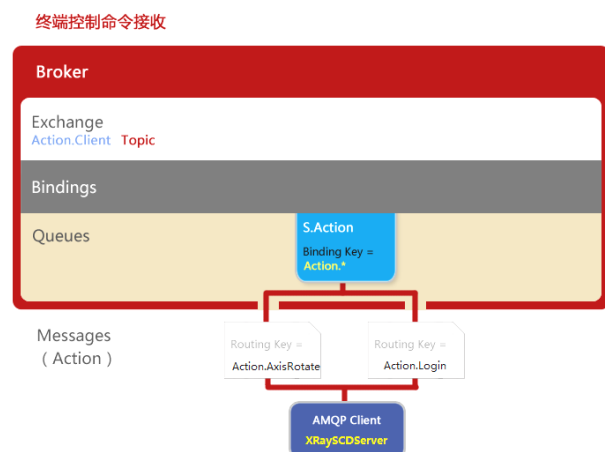


图 7 服务器接收终端控制命令示意图

3.3 即时消息的发送与接收

即时消息按照通信场景可分为广播即时消息和终端即时消息，广播即时消息是由终端应用程序或者服务器向所有终端应用程序发布的文本消息。终端即时消息是由终端应用程序向指定终端应用程序发布的文本消息，以广播即时消息的发送与接收为例分析即时消息的发送与接收，如图8、图9所示。

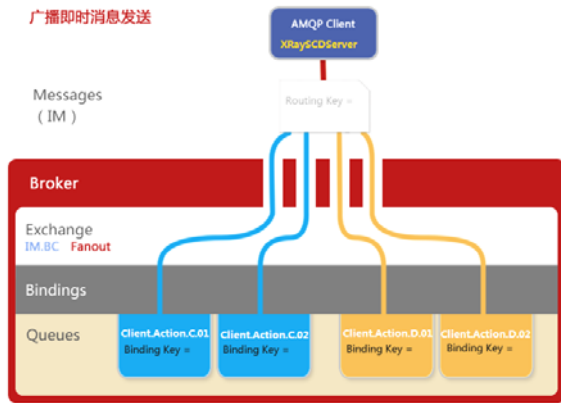


图8 服务器发送广播即时消息示意图

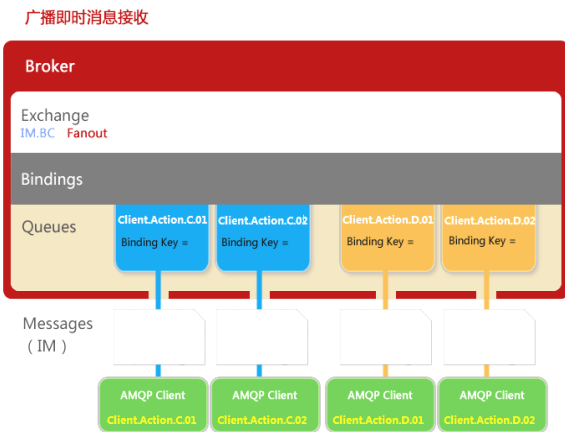


图9 终端接收广播即时消息示意图

4 终端网络稳定性设计

良好的网络连接是客户端与服务器信息交互的基础，为了防止各种情况下服务器与客户端的连接失败导致通信故障，针对网络稳定性设计很有必要，采用基于 Ping/Pong 的服务器心跳检查机制，客户端每 10s 发送一个 Ping 命令给服务器，服务器收到命令后以事件的形式向客户端返回 Pong，终端 1s 内未收到 Pong 即心跳检查超时。连续 3 次未收到 Pong，终端下线。同时添加 AMQP 连接中断处理，中断时断开连接。为

了处理终端程序异常断开的情况，在断开连接后，客户端尝试重新连接，重新登录。

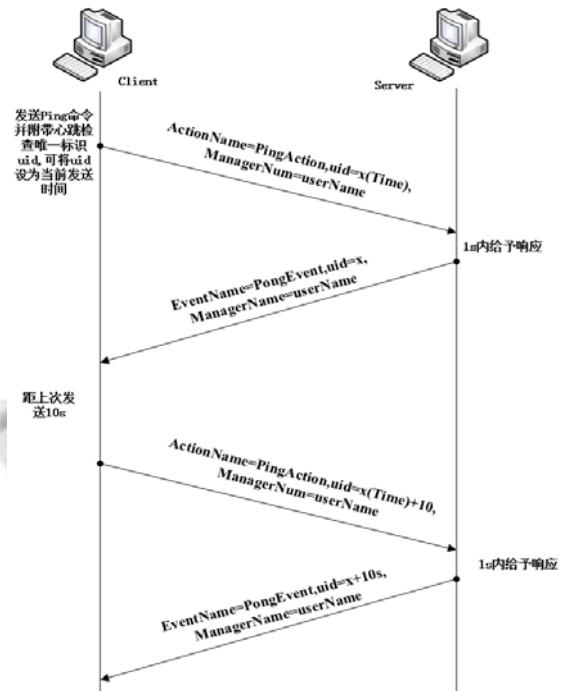


图10 客户端与服务器连接状态良好

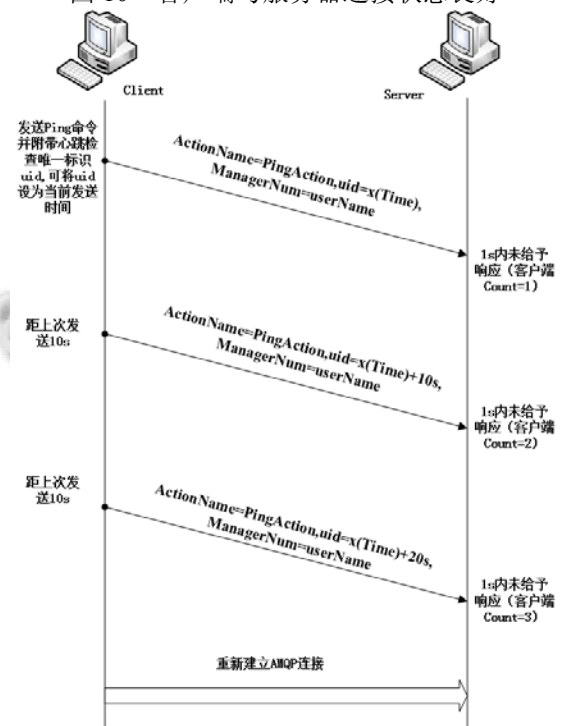


图11 客户端与服务器连接异常

设计心跳命令的作用是向服务器请求检查服务器心跳用于检查服务器是否处于正常工作状态。当客户端完成单晶衍射仪远程控制系统的服务器登录操作后，

将持续的向服务器发送服务器心跳检查命令. 数据结构的时候携带心跳检查唯一标识 uid, 一次心跳检查过程中心跳检查命令携带的唯一标识与心跳检查事件携带的唯一标识应保证一致. 图 10、图 11 分别表示连接状况正常以及服务器网络不稳定时的场景.

5 业务功能封装

X 射线单晶衍射仪的实际业务根据不同的应用场景划分为不同的命令和事件, 依据实际的业务需求简洁明了的制定不同业务的传递参数, 对于业务功能相近的事件或命令加以合并, 以减少传输负载和代码冗余. 由于远程控制系统的业务种类繁多, 业务需求复杂, 以用户登录为例简述业务功能的封装, 并对用户登录过程进行日志捕获.

用户在客户端输入登录信息后通过 RabbitMQ 服务器验证账号, 依据验证结果服务器端返回登录结果事件. 登录服务接口参数如表 6 所示. 根据业务需要参数可扩展.

表 6 登录服务接口参数表

参数名称	参数类型	参数描述
Action	string	事件名称. 设置为 LoginAction.
Manager-Number	string	管理终端标识, 是具有可维护性的自定义标识. 由消息通信系统中终端 RabbitMQ 账号表示. 该标识不允许为空.
AuthCode	string	验证码

```
internal struct SLoginAction
{
    /// <summary>
    /// 命令名称
    /// </summary>
    [MarshalAs(UnmanagedType.ByValTStr, SizeConst = 32)]
    public string action;
    /// <summary>
    /// 管理账号
    /// </summary>
    [MarshalAs(UnmanagedType.ByValTStr, SizeConst = 32)]
    public string managerNumber;
    /// <summary>
    /// 验证码
    /// </summary>
    [MarshalAs(UnmanagedType.ByValTStr, SizeConst = 32)]
    public string authCode;
}
```

图 12 登录命令结构体

图 12 是用 C#语法定义的登录命令结构体. 登录结果事件表示客户端向服务器登录操作的结果. 当客户端向服务器发出登录命令后由服务器发送给客户

端.

登录结果事件是非独立的事件, 该事件只有在用户发送登录请求时才会由远程控制系统服务器发送. 登录结果事件服务接口参数如表 7 所示.

表 7 登录结果事件服务接口参数表

参数名称	参数类型	参数描述
EventName	string	事件名称. 设置为 LoginResultEvent.
LoginResult	枚举类	登录结果类型, 枚举类中包含登录成功, 用户名错误, 密码错误, 已登录, 登录超时等登录结果.
loginTime	string	表示登录时间

```
internal struct SLoginResultEvent
{
    /// <summary>
    /// 事件名称
    /// </summary>
    [MarshalAs(UnmanagedType.ByValTStr, SizeConst = 32)]
    public string eventName;
    /// <summary>
    /// 登录结果
    /// </summary>
    [MarshalAs(UnmanagedType.I4, SizeConst = 32)]
    public LoginResult result;
    /// <summary>
    /// 登录时间
    /// </summary>
    [MarshalAs(UnmanagedType.ByValTStr, SizeConst = 32)]
    public string loginTime;
}
```

图 13 登录结果事件结构体

图 13 是用 C#语法定义的登录结果事件结构体.

登录过程中客户端日志捕获如下:

```
send login action ... CLoginAction {Action:LoginAction;
ManagerNumber:C.01; AuthCode:123456}
命令名称: LoginAction
consume message ... 2
consume message ... 1
get msg from message pool ...
receive
event:=====LoginResultEvent
dispatch message ... Event.Client
parse event ...
CLoginResultEvent {Event:LoginResultEvent;
LoginResult:success; LoginTime:2016/5/31 20:04:43}
服务器端日志捕获如下:
parse action ...
CLoginAction {Action:LoginAction;
```

```
ManagerNumber:C.01; AuthCode:123456}  
UserName: C.01,Password:123456  
send login result ...  
发送 LoginResultEvent.C.01 事件  
get msg from message pool ...  
dispatch message ... S.Action  
parse message ...
```

日志表明,在服务器端接收到客户端的登录请求命令后能够及时反馈给客户端登录结果的事件,客户端接收到服务器端的登录成功结果即可实现后续的业务操作,服务器端与客户端能够实现可靠稳定的消息通信,在此基础上对其他其他业务功能封装,即可实现远程通信。

6 结语

X射线单晶衍射仪远程控制系统是对X射线单晶衍射仪操作与控制系统的进一步升级改进,远程控制系统采用了基于RabbitMQ消息队列的消息传输机制实现了分布式子系统间的通信,大大降低了系统间的耦合度,同时也增加了系统的可拓展性。此外,RabbitMQ消息队列服务器具有很高的稳定性,应用也很广泛,也为实现远程控制系统提供了理论和实践的

保障。本文详细说明了消息通信系统的设计,合理的将远程控制系统的业务流程封装后即可实现不同平台终端间的数据交互。

参考文献

- 1 李国武.CCD平面探测X射线单晶衍射新技术开发[学位论文].北京:中国地质大学(北京),2010.
- 2 洪韵棋.基于消息队列的通信系统设计与应用[学位论文].北京:中国科学院研究生院,2011.
- 3 马礼敦.X射线单晶体衍射仪.上海计量测试,2003,30(2):46-50.
- 4 石磊.衍射仪控制系统的研究与设计[学位论文].西安:西安电子科技大学,2011.
- 5 张钟俊,蔡自兴.智能控制与智能控制系统.信息与控制,2002.
- 6 袁佳,郭燕慧.基于rabbitmq的海量日志的分布式处理.软件,2013,34(7):19-23.
- 7 侯蓉晖.基于Web的异构同步中间件系统.现代计算机:专业版,2015,(9):70-72.
- 8 Vinoski S. Advanced message queuing protocol. IEEE Internet Computing, 2006, 10(6): 87.