HAL
open science

Représentation d'objets d'intérêt cristallographique ou biologique par zones colorées

Yves Epelboin, Christian Guidi-Morosini, François Morris, Alexandre Rimsky, Alain Soyer

To cite this version:

Yves Epelboin, Christian Guidi-Morosini, François Morris, Alexandre Rimsky, Alain Soyer. Représentation d'objets d'intérêt cristallographique ou biologique par zones colorées. Deuxième colloque image. Traitement, synthèse, technologie et applications, CESTA : Centre d'Etude des Systèmes et des Technologies Avancées, Apr 1986, Nice, France. pp.490-496. hal-01216359

HAL Id: hal-01216359

https://hal.science/hal-01216359v1

Submitted on 4 Nov 2015

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

REPRESENTATION D'OBJETS D'INTERET CRISTALLOGRAPHIQUE OU BIOLOGIQUE PAR ZONES COLOREES

SPACE FILLING REPRESENTATION OF OBJECTS OF CRYSTALLOGRAPHIC OR BIOLOGIC INTEREST

Y.EPELBOIN, C.GUIDI-MOROSINI, F. MORRIS, A. RIMSKY et A. SOYER

Laboratoire de Minéralogie Cristallographie, UA 09, C.N.R.S., Universités Paris VI et Paris VII
75252 Paris Cedex 05, France

RESUME

La modélisation solide offre l'avantage de donner une meilleure compréhension de l'environnement spatial que les représentations filaires en cage à poule. Elle est indispensable pour représenter, en phase finale d'étude, la molécule ou la cellule étudiée. Par son aspect réaliste, elle est une aide précieuse en cours de travail. Son inconvénient est qu'il n'existe pas encore, à des prix convenables, des moyens pour animer une telle image en temps réel.

Nous avons développé deux techniques de représentation différentes, pour observer de telles images sur une console en couleurs à balayage vidéo.

On peut les classer en deux genres:
- 1 - L'objet est connu par sa surface.
C'est le cas, notamment, en cristallographie: on connait la position des atomes et leur rayon. On décompose ce volume en primitives qui sont des surfaces du 2ème degré. Cela permet de créer des images de très bonne qualité. Ce procédé peut être appliqué à des surfaces plus complexes pour autant qu'on sache les décomposer en quadriques. Il peut être avantageusement comparé aux méthodes à facettes pour des objets ou le nombre de quadriques nécessaires pour les décrire est inférieur au nombre de facettes.
- 2 - L'objet est structuré en coupes successives.
C'est le cas, par exemple, de coupes sériées de cellules observées en microscopie électronique. On peut, très simplement et sans gros moyens de calcul, représenter l'objet en volume, sous la forme de coques imbriquées. Ce procédé est susceptible d'être étendu à toute acquisition de données de même structure, en tomographie notamment.

Ces deux méthodes de représentation sont complémentaires: nous en discuterons les avantages et les limites.

SUMMARY

The understanding of the spatial relationships, between the objects under study, is of the upmost importance in different fields of science such as cristallography or biology.

3D solid modelisation is a much better means to give a good understanding of the shape of an object than the use of calligraphic representations with grids. It is a precious help to apprehend the structure of the object when studiing macromolecules or biological cells. However computations are much too long to allow real time animation of the image.

We have developped two different methods to draw such images; they can be classified in two sets:
- 1 - The object is known through the knowledge of its surface. This is the case, for instance, in cristallography, where the position and the radius of the atoms are known. The object may be described as a set of quadric surfaces. It is possible to draw a realistic image and this is a very good means to present any object as long as it may described as a set of quadric surfaces. This method leads to better and faster representations than the usual facets representation when the object may be described with less quadric than facets.
- 2 - The object is a structure described as successive planes. This is a case, for instance, for serial sections as observed in electron microcopy. It is possible to obtain images of good quality, using a simple image workstation. This method can be applied to any domain where an object may be described as a set of planes, such as scanner images, for instance.

We will discuss the advantages and the limitations of these two methods and show their limitations.

1 INTRODUCTION:

Dans tous les domaines scientifiques où l'on s'intéresse aux caractéristiques tridimensionnelles d'objets on a recherché depuis longtemps les méthodes les plus sûres et les plus rapides pour modéliser les objets étudiés: maquettes en balsa d'une cellule biologique ou de la densité électronique dans une maille cristalline, modèles atomiques sous forme de boules schématisant les atomes reliées par des batonnets, éventuellement même des modèles en platre! Outre son coût non négligeable cette approche est sujette à de nombreuses erreurs au cours du processus d'interprétation de l'information qui conduit à la construction de la maquette et elle est fort longue, ce qui limite le nombre de cas où l'on peut se permettre un tel travail.

Les biologistes savent combien il est délicat d'interpréter l'image d'une cellule obtenue par l'empilement d'une série de lames de verre ou de transparents sur lesquels les différents organelles d'une cellule ont été schématisés sous la forme de lignes de niveaux. L'utilisation de méthodes stéréographiques [1] a grandement amélioré la qualité des observations mais l'enchevêtrement des lignes dans les dessins rend rapidement l'image confuse, l'observateur se fatigue rapidement à observer de telles vues et ceci rend l'interprétation sujette à caution.

La cristallographie a pu se contenter de méthodes simples basées sur des maquettes ou des dessins tant que les molécules étudiées ne comportaient qu'un nombre limité d'atomes. L'explosion des techniques modernes qui permet maintenant d'étudier la structure spatiale de macromolécules contenant des milliers d'atomes a rendu ces méthodes obsolètes et le "drug design" fait maintenant appel aux moyens les plus sophistiqués de la conception assistée par ordinateur.

Dans ces deux domaines il est donc maintenant indispensable de pouvoir représenter un objet rapidement et aisément, donc de fabriquer des images synthétiques tridimensionelles au moyen d'outils informatiques. Il est d'ailleurs certain que ceci est aussi vrai dans bien d'autres domaines des sciences.

La méthode la plus simple est de schématiser l'objet par un modèle filaire. Les volumes sont représentés sous forme de grillages dits "cage à poules". Ceci ne demande pas beaucoup de calculs et il est possible d'animer une image en temps réel sur un écran graphique devant les yeux de l'observateur. La limitation éssentielle est la puissance de la station de travail: sur les plus sophistiquées on peut animer plusieurs dizaines de milliers de vecteurs simultanément, une centaine seulement sur un petit microordinateur. Un dispositif supplémentaire permet, sur les plus évoluées, de faire varier l'intensité du trait en fonction de l'éloignement de l'observateur: les points les plus lointains sont moins brillants. On introduit aussi une fenêtre qui permet de limiter dynamiquement la zône observée dans l'objet. L'existence de ces deux dispositifs est éssentielle pour suggérer une bonne impression de profondeur.

La représentation d'objets sous forme solide avec élimination des parties cachées permet de beaucoup mieux appréhender l'aspect tridimensionnel de l'objet. Malheureusement la complexité des calculs limite les possibilités d'animation de telles représentations qui restent néanmoins indispensables à une compréhension complète de la géométrie de l'objet car l'image obtenue est infiniment plus réaliste. La plupart des méthodes qui sont actuellement utilisées sont basées sur la décomposition de l'objet sous forme de facettes polygonales [2,3]. Les stations de travail les plus perfectionnées permettent une animation de telles représentations. Cependant la méthode présente deux limitations éssentielles: le nombre de facettes manipulables est forcément limité, dans le meilleur des cas à quelques milliers, et ceci peut être tout à fait insuffisant pour représenter des objets de forme complexe comme c'est souvent le cas en biologie ou en cristallographie. De plus, la décomposition polygonale est un travail délicat, fastidieux qui peut difficilement être automatisé dans le cas de ces mêmes objets et qui nécéssite des calculs longs.

Dans le présent papier nous décrivons deux méthodes différentes de représentation. La première est basée sur une décomposition de l'objet sous forme de quadriques [4]. Elle est parfaitement adaptée à la cristallographie où on représente des molécules sous forme de sphères schématisant les atomes, de cylindres représentant les liaisons ou les hélices des chaines aliphatiques et éventuellement de plans. Nous montrerons de plus que cette méthode convient parfaitement à la représentation de surfaces accessibles à un solvant ou une molécule extèrieure en ajoutant aux quadriques précédentes des hyperboloides. L'animation est difficile, chaque image demandant un long temps de calcul, même sur un ordinateur puissant. Ce temps pourrait être trés fortement diminué dans l'avenir car l'utilisation de quadriques conduit, comme nous le verrons, à des calculs linéaires, susceptibles d'être cablés dans des processeurs spécialisés.

La deuxième méthode est basée sur une organisation particulière de l'information qui sert à calculer l'image: lorsque l'objet est connu sous forme de coupes successives (coupes sériées de cellules observées en microscopie électronique, densité éléctronique calculée dans une maille cristalline ou même éventuellement coupes tomographiques) il est possible de construire des images de façon rapide et peu couteuse en calcul. Pour peu qu'on dispose d'une station de travail pouvant mémoriser simultanément

quelques images il est possible d'inclure les calculs nécèssaires dans la station et de reconstruire l'image dynamiquement au fûr et à mesure de l'acquisition ou du calcul des plans de coupe successifs.

2 REPRESENTATION D'UN OBJET AU MOYEN DE QUADRIQUES:

2.1 Equations

On définit l'intérieur d'un solide limité par une surface quadrique et éventuellement aussi par plusieurs plans, au moyen des inégalités suivantes:

$X^t A X \leqslant 0$

$U_i^t X \leqslant 0$ où i est l'indice du plan limite considéré, soit n plans au total.

A est une matrice symmétrique caractéristique de la quadrique représentée.

U_i est le vecteur des composantes du plan i.

X représente les coordonnées du point considéré sur la surface.

L'indice t signifie matrice transposée.

L'ensemble de l'objet à représenter peut ainsi être décomposé en une série de figures élémentaires, chacune obéissant à une équation de ce genre.

2.2 Perspective

La perspective est définie par la position de l'oeil de l'observateur supposé placé sur l'axe des z, perpendiculaire à l'écran sur lequel l'image est observée, à la distance d.

Les coordonnées de la projection x',y' d'un point de coordonnées x,y,z dans l'espace sont:

$$x' = \frac{x}{1 + z / d}$$

$$y' = \frac{y}{1 + z / d}$$

Ce point peut aussi être considéré comme la projection orthogonale du point M'(x',y',z') [5] tel que:

$$z' = \frac{z}{1 + z / d}$$

Cette transformation simplifie les calculs car il est équivalent de calculer la perpective du point M ou d'éffectuer une projection orthogonale du point M'. Les coordonnées de ce point vérifient les inégalités:

$X'^t A' X = 0$

$U'^t X' \leqslant 0$

ou X' est le vecteur des coordonnées:

$$X' = \begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \\ 1' \end{bmatrix}$$

avec

$A' = (P^{-1})^t A P^{-1}$

$U' = U P^{-1}$

P est la matrice caractéristique de la perspective:

$$P = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1/d & 0 \end{bmatrix}$$

Il est possible de combiner cette perpspective avec toutes les transformations géométriques classiques (rotation, symmétrie, translation ou changement d'échelle). La profondeur z' d'un point de la surface est la solution d'une équation du 2ème degré à coéfficients constants (quadrique) ou du premier degré dans le cas d'un plan.

2.3 Eclairement

L'intensité de la lumière réfléchie par la surface est une fonction des angles entre la normale à la surface et les directions de la source lumineuse et de l'oeil:

$I = f(\underline{N}.\underline{L}) + g(\underline{N}.\underline{L}')$

ou $\underline{N}$ est la normale à la surface, $\underline{L}$ la direction de la lumière, $\underline{L}'$ la direction du point de vue, f et g sont deux fonctions tabulées d'aprés le modèle de Phong [3]:

$f(x) = I_a + k_d x$

$g(x) = k_s x^n$

où I_a est la réflexion due à la lumière ambiante, k_d un facteur de réflexion diffuse, k_s un coéfficient de réflexion spéculaire, n un exposant caractéristique des propriétés de la surface considérée.

L'équation de la normale $\underline{N}$ à la surface se calcule aisément à partir de la matrice A' et conduit donc à des calculs rapides. Il faut remarquer que l'éclairement calculé en effectuant une projection orthogonale de la quadrique transformée est légérement différent du résultat qu'on obtiendrait à partir de la perpsective. Mais généralement la distance du point de vue au plan de projection est suffisamment grande vis à vis des dimensions de l'objet pour que cette différence ne soit pas visible.

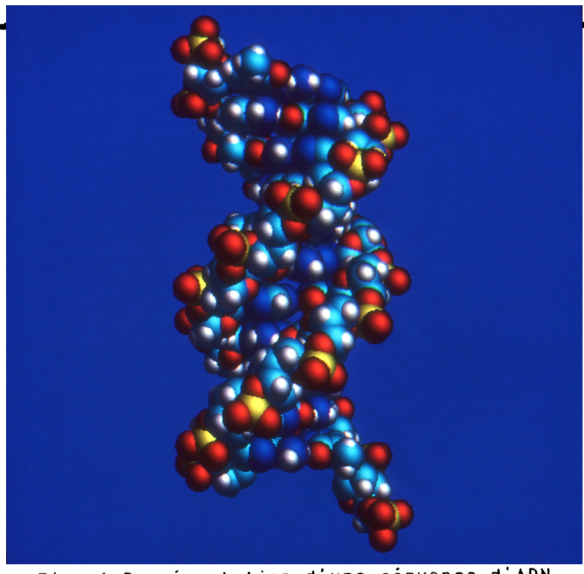


Fig. 1.Représentation d'une séquence d'ADN

L'image de la figure 1 est un bon exemple de représentation par des sphères uniquement. Dans la

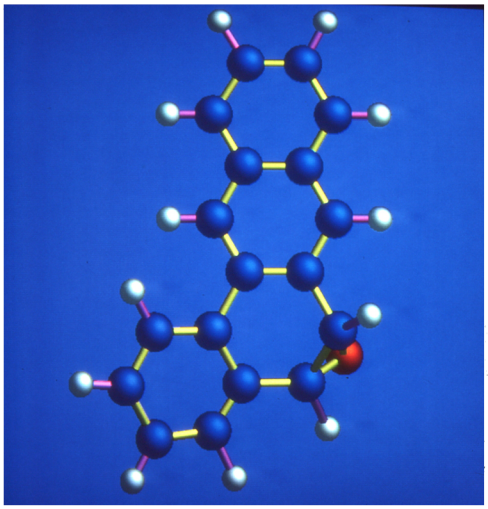


Fig. 2.Benzopyréne-epoxy

figure 2 on a utilisé des cylindres pour représenter les liaisons. Dans la figure 3, l'effet de perspective a été volontairement exagéré pour montrer que l'approximation utilisée dans le calcul de l'éclairement n'etait pas visible.

Il est extrèmement aisé de changer de point de vue puisqu'il suffit de multiplier la matrice de projection par la matrice de la rotation considérée. Nous avons ainsi réalisé un film d'animation [6] qui montre une séquence d'ADN (fig.1) en mouvement. La longueur des calculs (quelques dizaines de secondes par image sur un ordinateur de 3 Mips) ne permet pas encore d'envisager une animation en temps réel mais ce temps n'est pas déraisonnable, compte tenu de la complexité de l'objet.

Il était particulièrement aisé, dans le cas des images présentées de déterminer l'ensemble des quadriques et des plans qui constituent l'objet. Cependant cette méthode est susceptible d'être généralisée à tout objet de forme complexe, pour peu que l'on sache déterminer les segments de quadrique qui l'approxime. Un premier exemple est présenté au paragraphe suivant.

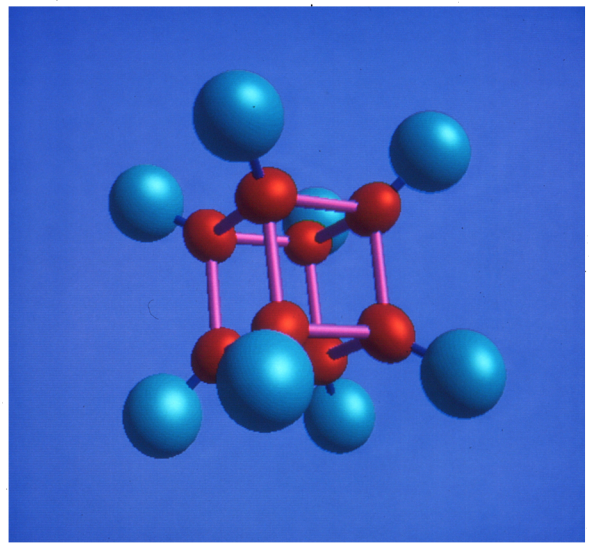


Fig. 3.Cubane

2.4 Représentation de la surface accessible

Un problème important dans l'étude des macromolécules est de déterminer la surface accessible à une sonde. Celle-ci peut être une autre molécule complexe ou de l'eau. Une approximation couramment utilisée est de considérer que la surface de contact de ce second objet est une portion de sphère. Trois cas peuvent donc se présenter:

- 1 - Le contact se réduit à un point: la surface de contact est donc la portion de l'atome considéré elle-même.
- 2 - Le contact est double: la sonde touche deux atomes simultanément. Le contact est un morceau de tore dont l'axe de révolution est la droite joignant les centres des deux atomes. On peut alors approximer ce tore par un morceau d'un hyperboloïde à une nappe tangent aux deux atomes.
- 3 - Le contact est triple: la position de la sonde est alors parfaitement définie. Le contact est donc un morceau de sphère qui se confond avec la sonde elle-même.

Fig. 4.Représentation de la surface accessible pour une molécule simple

La figure 4 est un exemple théorique de la représentation obtenue. Il est possible de visualiser ainsi la surface accessible à une molécule d'eau pour n'importe quelle molécule biologique, quelques soit le nombre d'atomes. Le calcul est long mais la plus grande partie en est la recherche des éléments de quadriques qui composent l'objet et non la représentation elle-même. En effet le temps de calcul de l'image, lorsque les quadriques qui la composent sont déterminées, est essentiellement fonction du nombre et de la taille de ces quadriques, non de leur nature. Notons d'ailleurs que le temps de calcul est proportionnel au nombre n d'objets et non à n^2 ou nLogn comme dans la plupart des méthodes couramment utilisées.

3 REPRESENTATION D'UN OBJET PAR COUPES SUCCESSIVES:

3.1 Structuration des données

La méthode de représentation que nous venons d'expliquer présente l'inconvénient de recourir à des calculs importants pour décomposer l'objet en quadriques et le représenter. Dans le cas où l'information est déjà structurée en plans on peut obtenir des images trés satisfaisantes [7] sans qu'il soit nécéssaire de recourir à un gros ordinateur. Par contre il est nécéssaire de disposer d'une station d'imagerie pouvant stocker en mémoire simultanement plusieurs images de taille raisonnable (jusqu'à 400x400 pixels environ) et les combiner pour une représentation en vraies couleurs, comme la station Pericolor 2000 de Numelec que nous avons employée.

La méthode utilisée consiste à envoyer successivement dans une mémoire image des plans ou coupes de l'objet à représenter en faisant varier la luminosité de ces plans du fond vers l'avant, afin de créer une impression de relief. Ces plans sont décalés pour obtenir une perspective cavalière (Fig.5). La suppression des parties cachées se fait automatiquement puisque le contenu des plans situés en avant va écraser en partie celui des plans du fond.

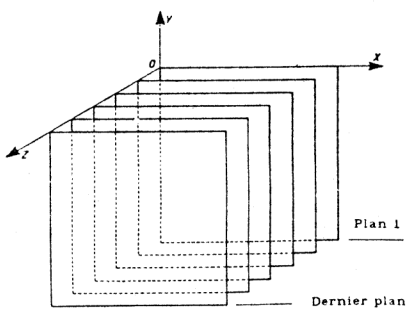


Fig. 5.Principe des représentations par coupes successives

Les données à représenter peuvent provenir:
- soit de numérisations d'une série d'images à deux dimensions (exemple: coupes cytologiques vues en microscopie électronique dans le cas de la biologie) ayant subit ou non un prétraitement;
- soit de résultats de calculs théoriques effectués sur un ordinateur hôte.

D'un point de vue général ces données peuvent être considérées comme l'échantillonage d'une fonction tridimensionelle F(I,J,K) dont les valeurs sont normalisées entre 0 et 255 sur un octet.

On suppose que ces données sont rangées par plans successifs correspondant chacun à une valeur de K constante. K varie de 1 au nombre total de plans à représenter (fig.5).

3.2 Segmentation

Dans chaque plan il est nécéssaire de segmenter l'information afin de ne représenter que les zônes dignes d'intérêt. Si on suppose que chaque point est normalisé entre 0 et 255, on voit donc qu'il suffit de définir des intervalles de valeurs qui correspondra à un segment représenté par une couleur caractèristique comme schématisé dans la figure 6.

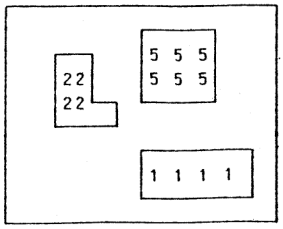


Fig. 6.Principe de la segmentation

L'élimination des parties cachées est triviale puisque chaque nouveau plan représenté masque les points cachés du plan précédent. Trois segments, représentés par des couleurs différentes, sont visibles dans la figure 7. La coupure permet de voir les détails des densités éléctroniques élevées prés des atomes d'hydrogène de la molécule représentée.

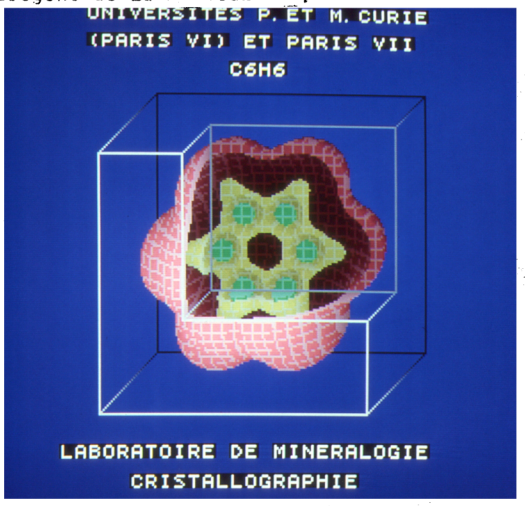
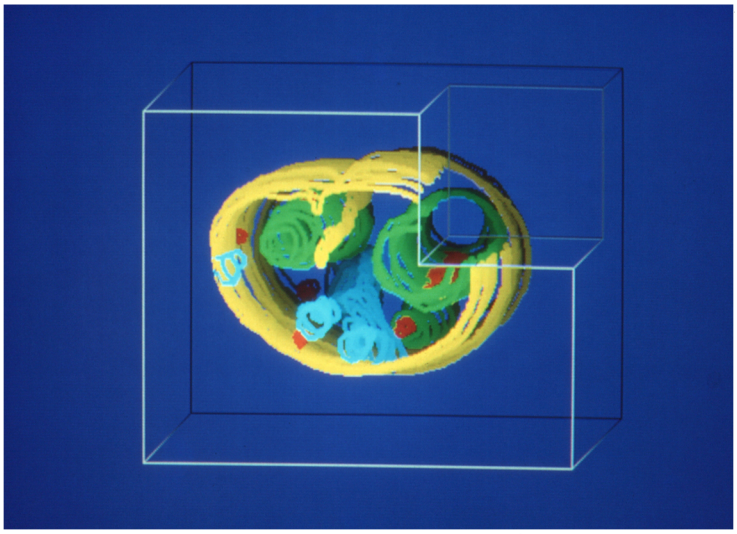


Fig. 7.Représentation de la densité d'électrons dans une molécule de benzène.

Cette méthode de représentation conduit à des images tout à fait satisfaisantes lorsque l'épaisseur des segments, dans chaque plan, est suffisante pour donner une impression de continuité dans l'image achevée. On voit ainsi l'objet sous forme de coques imbriquées. La coupure placée dans un coin de la fenêtre d'observation (fig.7), permet de faire apparaitre des parties qui seraient normalement masquées. Cette coupure est paramètrable en dimensions et en position: elle peut être placée sur l'un des quatre coins en avant de la fenêtre d'obnservation, au choix de l'utilisateur. Il n'y a pas de limites théoriques au nombre de segments visualisables simultanément mais l'expérience montre que 7 ou 8 représente un maximum pour pouvoir comprendre l'image.

La figure 8 est l'image du noyau d'une cellule de cervelet de rat [8] infestée par la rougeole. En jaune



on voit l'enveloppe du noyau de la cellule, en vert les inclusions virales, en bleu le nucléole et en rouge les corps nucléaires. L'aspect visuel est moins satisfaisant que dans la figure antérieur car la méthode d'acquisition des coupes sériées était des plus frustres: comme nous ne disposions pas alors d'une caméra à numériser, nous avons utilisé une série de transparents sur lesquels des contours schématisaient les limites des différents organelles. Ces courbes ont été numérisées puis artificiellement épaissies pour créer des segments d'épaisseur convenable.

3.3 Aspects observables

La modulation de l'intensité de la lumière accentue l'impression de relief. Lorsque cela est insuffisant on peut dessiner des courbes de niveau, sur la surface, comme sur la figure 7 par exemple.

Un objet peut être observé suivant huit points de vue différents: quatre en utilisant une perspective de bas en haut ou inversement et vers la gauche ou la droite, quatre autres en inversant l'ordre des plans d'avant en arrière. Vouloir changer ces points de vue pour une direction quelconque ne pose pas de problèmes théoriques mais conduit à des calculs extrêmement longs qui sont contradictoires avec la rapidité obtenue dans ces images. Cette méthode n'est donc intéressante que tant que l'on se satisfait d'une observation cohérente avec la structure des données.

Cette représentation est néanmoins d'un grand intérêt, comme le prouve la figure 8, où les spécialistes ont pu observer des détails qui leur avaient échappé auparavant. Par exemple ils ont remarqué que le nucléole se divisait en deux canaux: cette continuité n'avait pas été découverte auparavant.

4 CONCLUSION:

Les deux méthodes que nous avons décrites sont complémentaires.

Lorsque l'information est structurée sous forme de coupes succèssives on peut prendre avantage de cette structuration pour dessiner rapidement une image. Par contre, comme nous l'avons vu, le nombre de points de vue d'observation est limité. Un changement de direction complet de l'oeil de l'observateur conduirait à un rééchantillonage extrémement couteux en temps de calcul.

La décomposition d'un objet sous forme de quadriques ne présente pas cette limitation. Par contre chaque image est beaucoup plus longue à calculer et nécèssite des moyens de calcul déja importants. Elle est cependant extrèmement prometteuse. A priori tout objet complexe qui peut être décomposé en une série de surfaces dont les primitives sont des quadriques, peut être représenté par cette méthode, sans recourir à des décompositions plus complexes comme des surfaces bicubiques, par exemple. La décomposition en quadriques présente l'immense avantage qu'il existe des solutions analytiques pour les équations, ce qui permet une programmation simple et très éfficace. Les paramètres de ces surfaces peuvent même être déterminés de façon automatique si on sait quadriller l'espace pour déterminer les bords de ces surfaces. Ce problème n'est pas simple mais des solutions peuvent être trouvées.

Comparée à la décomposition sous forme de facettes la décomposition en quadriques peut offrir de grands avantages dans la représentation d'objets complexes où le nombre de quadriques nécéssaire peut être très inférieur au nombre de facettes utilisées pour obtenir la même qualité d'image. Les calculs pourraient être fortement accélérés en utilisant les possibilités de calcul linéaire et vectoriel des nouveaux processeurs qui apparaissent sur le marché. Ceci devrait permettre demain l'apparition d'une nouvelle catégorie de stations de travail interactives bien mieux adaptées à la représentation d'objets complexes que les matériels que nous connaissons aujourd'hui.

5 REMERCIEMENTS

C'est un plaisir pour nous de remercier M.Bouteille, G.Geraut et tous les membres du laboratoire de cytologie spatiale (ERA 189 CNRS) qui nous ont apporté le matériel nécéssaire à la réalisation de l'image d'une cellule.

6 BIBLIOGRAPHIE:

[1] P.Moens etP.Moens (1981) Ultrastruct.Res. 75,131
[2] H. Gouraud (1971) IEEE Trans.Computers, C20,6
[3] Bui Tuong Phong (1975) Communications ACM, 18,6
[4] F.Morris (1986) J. Mol.Graphics, à paraitre
[5] W. M. Newman and R. F. Sproull (1979) Principles of Interactive Computer Graphics, Mc Graw-Hill
[6] Y.Epelboin, C.Guidi-Morosini, F.Morris, A.Soyer et A.Rimsky (1985) Colloque Applications de l'Imagerie à la Physique, Ecole Polytechnique.
[7] E.J.Farrell (1983) IBM J.Res. and Dev.,27,4
[8 G.Geraut (1985) Communication personnelle