Convención de Ángulos de Euler

Luis Gerardo de la Fraga

BioComputing Unit, Centro Nacional de Biotecnología-CSIC,
Campus Universidad Autónoma, 28049 Madrid, Spain.

Resumen

En este trabajo se describe la convención en el sistema de coordenadas usado por SPIDER y que será el mismo que usará XMIPP, por interoperabilidad entre ambos. Así mismo se describe la convención en el modelo de las imágenes de proyección y los volúmenes.

1 Introducción

Considerando el volumen representado en la Fig. 1. Este no presenta una simetría con ninguno de los ejes, por lo que es un buen caso para una prueba de los programas de retroproyección y reconstrucción que deben conservar la orientación, esto es, la mano, del volumen original. En la Fig. 2 se muestran, para una visualización clara, las tres vistas principales del volumen y una adicional.

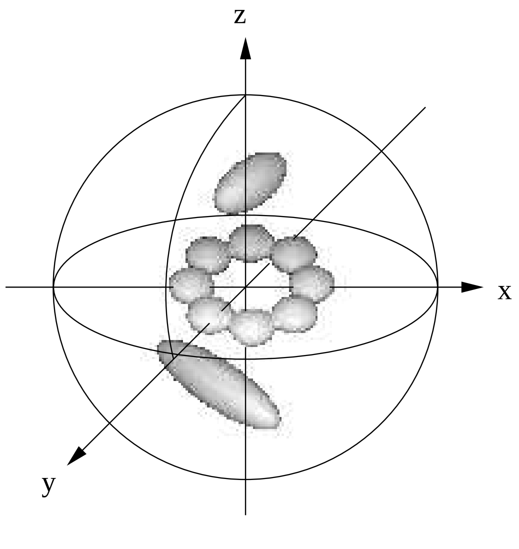

Figura 1: Volumen test en el sistema de coordenadas

Un sistema de coordenadas 3D de mano izquierda [1] (ver Fig. 3, por convención, las rotaciones positivas son tales que, cuando se mira desde un eje positivo hacia el origen, una rotación de 90° en el sentido de las manecillas del reloj transformará un eje positivo en el otro. Esta tabla es deducible de esta

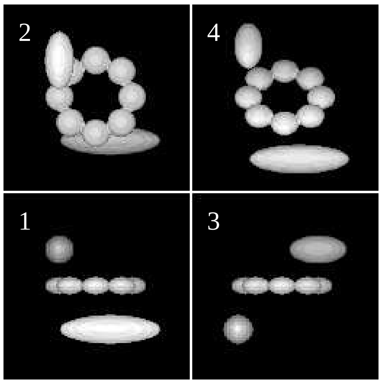

Figura 2: Vistas del volumen: 1: Vista frontal (desde el eje y); 2: Vista superior (desde el eje z); 3: Vista lateral (desde el eje x); 4: Vista a $(90, 45, -90)$.

convención:

Si el eje de rotación es	La dirección de una rotación positiva es
x	y a z
y	z a x
z	x a y

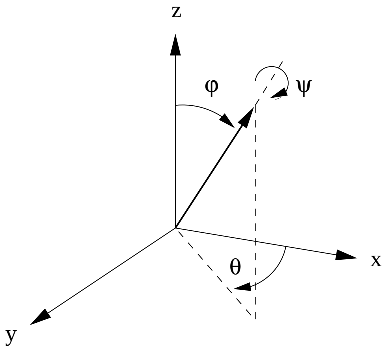

Figura 3: Sistema de coordenadas 3D de mano izquierda

2 Consideraciones

El sistema de coordenadas usado por Penzeck [2], por Radermacher [3], y por Farrow y Ottensmeyer [4], concuerda con el mostrado en la Fig. 3, que es un *sistema de coordenadas de mano izquierda.* Van Heel [5] utiliza el sistema de mano derecha (las rotaciones positivas van en el sentido contrario de las manecillas del reloj, y el eje y quedaría en el sentido contrario al de la Fig. 3).

Ahora, como apunta Foley et al [1] (sec. 5.6): las definiciones de rotaciones positivas permite usar las mismas matrices de rotación en un sistema de coordenadas de mano derecha o de mano izquierda. Aun más, también las ecuaciones involucradas geométricamente en un sistema, por ejemplo la localización de líneas comunes, se mantienen si se usan un sistema u otro.

Sin embargo, existe una inconsistencia en el sentido de giro del ángulo de inclinación (φ en la Fig. 3) que es tomado en *sentido negativo* por Frank [6], por Carazo y Frank [7] y por Boisset et al [8]. Esto parece debido a una convención histórica tomada por Frank [6], del año 1964, antes de la formalización práctica en los sistemas gráficos por ordenador [1].

Las variables del cabecero de la imágenes con formato SPIDER que corresponden a los tres ángulos de Euler son:

```
/*15*/   float fPhi;    /* = ROTATIONAL ANGLE, XY PLANE               */
/*16*/   float fTheta;  /* = TILT ANGLE, Z'X' PLANE                   */
/*17*/   float fGamma;  /* = PSI  = ROTATIONAL ANGLE OVER X''Y'' PLANE */
```

la unidades en los valores de los ángulos son *grados*.

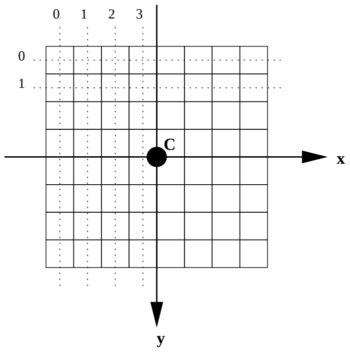

Figura 4: Modelo 2D

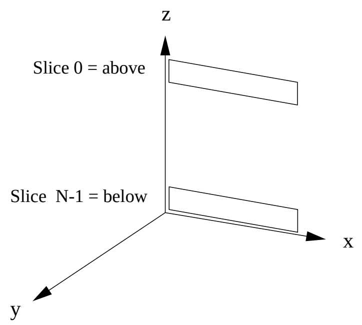

Figura 5: Situación del eje z

El convención usada para las imágenes de proyección en 2D está presentada en la Fig. 4; el punto central C, está en $(N-1)/2.0$, donde N es el tamaño de la imagen y es aplicable tanto para N par o impar; la coordenada $(0,0)$ esta situada en el centro del pixel $[0,0]$. La situación del eje z, como se observa en la Fig. 5, corresponde al *origen* con la rebanada $N-1$, con el sentido positivo del eje hacia la rebanada cero (0). Los modelos de volúmenes construidos son esta convención pueden visualizarse con el paquete WEB [9]. Si se usa la posible convención contraria (origen en la rebanada cero y la dirección positiva del eje z hacia la rebanada $N-1$), el volumen visualizado con WEB será la versión especular del correcto.

3 El sistema de coordenadas de SPIDER

En la Fig. 6 se presenta la covención del sistema de coordenadas usado por SPIDER. En la Fig. 6 φ es el ángulo de inclinación (el segundo ángulo de Euler) y θ el primer ángulo de Euler. El tercer ángulo de Euler (no representado en la Fig. 6) tiene el mismo sentido que *theta* (en el sentido de las manecillas del reloj) y representa la rotación en el plano de la proyección dada. Una explicación un más amplia sobre los ángulos de Euler usados en SPIDER puede ver en [8]

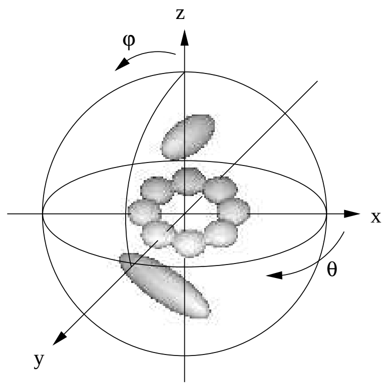

Figura 6: El sistema de coordenadas usado por SPIDER

Referencias

[1] J. D. Foley, A. van Dam, S. K. Feiner, and J.F. Hughes. *Computer Graphics: Principles and Practice*, chapter 5. Addison-Wesley, second edition, 1990.

[2] P. A. Penczek, R. A. Grassuni, and J. Frank. The ribosome at improved resolution: new techniques for for merging and orientation refinement in 3D cryo-electron microscopy of biological particles. *Ultramicroscopy*, 53:251–270, 1994.

[3] M. Radermacher. Three-dimensional reconstruction from random projections: Orientational alignment via Radon transforms. *Ultramicroscopy*, 53:121–136, 1994.

[4] N. A. Farrow and F. P. Ottensmeyer. A posteriori determination of relative projection directions of arbitrarily oriented macromolecules. *J. Opt. Soc. Am. A*, 9(10):1749–1760, 1992.

[5] M. van Heel. Angular reconstitution: a posteriori assignment of projection direction for 3D reconstruction. *Ultramicroscopy*, 21:111–124, 1987.

[6] J. Frank. *Three-Dimensional Electron Microscopy of Macromolecular Assemblies.* Academic Press, 1996. San Diego, CA.

[7] J. M. Carazo and J. Frank. Three-dimensional matching of macromolecular structures obtained from electron microscopy. *Ultramicroscopy*, 25:13–22, 1988.

[8] N. Boisset, P. A. Penczek, J.C. Taveau, V. You, Felix de Haas, and J. Lamy. Effects of angular oversampling in 3D reconstruction. *IN PRESS*, 00:00–00, 1997.

[9] J. Frank, M. Radermacher, P. Penczek, J. Zhu, Y. Li, M. Ladjadj, and A. Leith. SPIDER and WEB: Processing and visualization of images in 3D electron microscopy and related fields. *J. Struct. Biol.*, 116:190–199, 1996.