

Posudek oponenta diplomové práce

Autor práce: **Lukáš Jirkovský**

Název práce: **Computation and visualization of cavities in large molecule models**

Diplomová práce se zabývá urychlením výpočtu a vizualizací dutin v modelech velkých molekul. Princip urychlení výpočtu dutin je následující. Existující řešení počítá „drahý“ aditivně vážený Voronoiův diagram celé molekuly a v něm pak hledá dutiny. Navrhované řešení v prvním kroku konstruuje „levnou“ Delaunayovu triangulaci molekuly a v ní pak hledá přibližné dutiny. V druhém kroku je použito existující řešení - pro každou „slibnou“ přibližnou dutinu je vytvořen aditivně vážený Voronoiův diagram pouze atomů obklopujících dutinu a následně je dutina znovu spočítána v tomto přesnějším diagramu. K urychlení vizualizace dutin je použit algoritmus ray casting, který nahradil existující řešení založené na vykreslování a ořezávání 3D meshů. Dále práce popisuje několik nových, převážně geometrických, charakteristik dutin, které může uživatel použít pro odfiltrování nepodstatných výsledků.

Práce je rozdělena standardně. V prvních čtyřech kapitolách zabírajících zhruba třetinu rozsahu práce diplomant popisuje řešenou úlohu, nutný matematický aparát a existující metody výpočtu molekulárních povrchů a dutin.

Kapitola 5 popisuje novou metodu pro rychlý výpočet přibližných dutin a jejich vizualizaci metodou ray casting. Zde mne překvapuje, že popisu výpočtu přibližných dutin jsou věnovány pouze tři stránky. Chybí mi časová složitost navrhované metody a detailní popis výpočtu nejužšího místa stěny v triangulaci. Také není dostatečně zdůvodněno, proč jsou při výpočtu přibližných dutin poloměry všech atomů nahrazeny poloměrem nejmenšího atomu. Proč není možné ponechat původní poloměry? Následující popis ray castingu je výrazně podrobnější, detailně rozebírá výpočet průsečíků pro jednotlivé typy těles použitých pro vizualizaci dutin. I zde chybí zmínka o časové složitosti. Kapitola 6 popisuje existující a nově navržené charakteristiky dutin. Navržené charakteristiky jsou jednoduché, přesto mohou být užitečné.

V sedmé kapitole diplomant popisuje integraci svého řešení do nástroje Caver. Stojí za zmínku, že diplomant zde vytvořil v JNI můstek mezi C++ knihovnami a Javou, což je nejen časově ale i psychicky náročná práce. Dále diplomant porovnává své výsledky s předchozím řešením. Z porovnání je zřejmé, že práce splnila svůj účel – navržené metody urychlují výpočet dutin i vizualizaci.

Po formální stránce hodnotím text práce jako zdařilý, je psán čtivě a dobrou angličtinou. Typografická úprava textu běžného čtenáře neurazí. Diplomantovi nečiní potíže práce s odbornou literaturou, o čemž svědčí i vložení dvou autocitací. Snad jen sekce popisující ray casting by mohla odkazovat na více zdrojů.

Práce splnila zadání bez výhrad a vzhledem k integraci vytvořeného softwaru do nástroje Caver (byť do starší neveřejné verze) je tu jistá naděje, že neupadne v zapomnění a bude s úpravami používána v praxi.

SOUHLASÍ
S ORIGINÁLEM

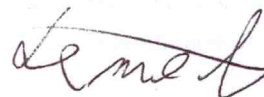
Dotazy k práci

1. Proč jsou při výpočtu přibližných dutin poloměry všech atomů nahrazeny poloměrem nejmenšího atomu. Proč není možné ponechat původní poloměry?
2. Volání C++ knihovny z Javy přes JNI rozhraní a přenášení dat z Javy do C++ a zpět může být pomalé. Kolik procent času celého výpočtu přibližných dutin je spotřebováno na komunikaci Javy a C++?
3. Proč je objem dutiny počítán jinak při výpočtu „konvexity“ dutiny a jinak při samostatném výpočtu objemu dutiny popsáném v sekci Existing methods?
4. Ve filtrování dutin metodou „branching“ jsou větve dutiny ohodnocovány v závislosti na jejich délce. Zvažoval jste jiná kritéria, například šířku či objem?

Navrhuji hodnocení známkou **v ý b o r n ě** a práci doporučuji k obhajobě.

V Plzni 2.6.2014

Ing. Michal Zemek



Západočeská univerzita v Plzni
Fakulta aplikovaných věd
katedra informatiky a výpočetní techniky

②

 **SOUHLASÍ
S ORIGINÁLEM**