

Posudek oponenta bakalářské práce

Autor práce: **Oto Štáva**

Název práce: **Vizualizace dělení prostoru v dynamických modelech makromolekul**

Obsah práce

Předložená práce se zabývá vizualizací dělení prostoru pomocí aditivně vážených Voroného diagramů, kde vstupní data jsou tvořena množinou kulových ploch s různými poloměry, přičemž každá takováto koule reprezentuje jeden atom v makromolekule. Práce se zaměřuje jak na statická, tak dynamická data (proměnná v čase).

Kapitola 1 poskytuje úvod do problematiky a stanovuje cíl práce.

Kapitola 2 představuje analytickou část. Zde se nachází několik faktických chyb či nedostatků. Text uvádí, že Voroného vrchol je bodem průniku čtyř Voroného buněk, což je v zásadě pravda, avšak ve speciálních případech může být průnikem většího počtu buněk (např. pokud více než čtyři body s nulovou vahou leží na stejné kulové ploše). Podobně, text popisuje Voroného hranu jako průnik trojice Voroného buněk, ta však může být průnikem i více než tří buněk (např. při čtyřech a více generujících bodech na kružnici). Dále text uvádí, že stěna je průnikem čtyř buněk, což je chyba, jelikož stěna je průnikem dvou buněk, v tomto případě se pravděpodobně autor přepsal. Na straně 12 se v kontextu racionální Bézierovy křivky dvakrát vyskytuje interval s otočenými hranicemi, konkrétně $\langle 1; 0 \rangle$ místo $\langle 0; 1 \rangle$. Sekce 2.2 popisuje P_i jako kontrolní body racionální Bézierovy křivky, bylo by však vhodné v textu také zmínit, že se ve skutečnosti jedná pouze o jednu souřadnici daných bodů a že $C(t)$ reprezentuje pouze jednu souřadnici výsledné křivky. V opačném případě rovnice (2.9) a (2.10) nedávají smysl, protože operátory absolutní hodnoty a porovnání ($<$) nejsou nad body či vektory implicitně definovány a text je nijak nedefinuje. Souhrn již existujících aplikací, které lze využít pro vizualizaci aditivně vážených Voroného diagramů, uvedený v Sekci 2.3, považuji za zdařilý a přehledný. Analýzu v Sekci 2.5 taktéž považuji za povedenou – dobře identifikuje a popisuje problémy, které je pro efektivní vizualizaci Voroného diagramů potřeba řešit, a nastiňuje jejich řešení.

Kapitola 3 popisuje výsledné řešení. Zde mám jisté výhrady k rovnicím (3.1), (3.2) a (3.3). V textu není nijak popsáno, odkud se tyto rovnice vzaly. Pokud k nim autor došel sám, bylo by vhodné v textu popsat proces, kterým k nim autor došel. Pokud jsou odněkud převzaty, měl by být uveden jejich zdroj. Dále není z textu zřejmé, jakou hodnotu konstanty a autor použil. Z popisků u Obrázků 3.7 a 3.8 lze však vydedukovat, že nejspíše $a=2$.

Kapitola 4 popisuje výsledky implementované vizualizace a poskytuje porovnání implementované metody s aplikací Voroprot. Z textu není zřejmé, zda časy pro dynamická data byly získány jako průměr přes všechny snímky nebo nějakým jiným způsobem. Také bych u dynamických dat ocenil informaci o počtu snímků v animaci.

Kapitola 5 shrnuje a uzavírá celou práci.

Kvalita řešení a dosažených výsledků

Realizační část práce považuji za velmi kvalitní a je nejsilnější stránkou celé práce. Rozdělení racionálních Bézierových křivek na menší části pomocí modifikovaného de Casteljau algoritmu a jejich následné vzorkování na GPU s použitím SIMD instrukcí mi přijde jako velmi chytrá myšlenka a celý algoritmus na mě působí velmi promyšleně. Jeho implementace byla zjevně netriviální a vyžadovala nemalé znalosti programování na GPU. Část textu, která algoritmus popisuje, navíc působí dojmem, že autor jednoduše ví, co dělá, a implementace LRU cache pro dynamická data se dokonce zdá být nad rámec zadání, jelikož se původně neočekávalo, že úzkým hrdlem u dynamických dat bude jejich dekomprese. Výsledky také působí přesvědčivě a velmi oceňuji, že autor svoji metodu porovnal s již existující aplikací Voroprot. Z tohoto porovnání, ač bylo provedeno pouze pro jeden dataset, vychází navržená metoda mnohonásobně rychlejší než vizualizace v aplikaci Voroprot, která se jeví pro praktické účely až nepoužitelně.

Formální úroveň

Práce má dobrou formální úroveň a obsahuje naprosté minimum překlepů či gramatických nebo pravopisných chyb. Mám jen výhradu ke stránkám 44 a 45, kde se nacházejí dva webové odkazy na dva různé články v odborných časopisech, což mělo být místo odkazu řešeno citací.

Práce s literaturou

Práce obsahuje 29 referencí, které považuji za vcelku relevantní vzhledem k řešené problematice. V textu se však nachází několik pojmů, které by, dle mého názoru, měly být doplněny o citaci. Konkrétně: databáze RCSB PDB (str. 42), silové pole OPLS-AA (str. 44), silové pole CGenFF (str. 45) a dále již zmíněné rovnice (3.1), (3.2) a (3.3) (str. 33, 34), pokud tedy nebyly odvozeny autorem, v jakémžto případě by toto odvození v textu mělo být.

Splnění zadání

Všechny body zadání považuji za splněné. Implementace LRU cache a porovnání s již existující aplikací jdou možná dokonce lehce nad rámec zadání.

Celkové hodnocení

Realizační část práce považuji za kvalitní, avšak výše uvedené nedostatky v textu práce snižují její celkový dojem, proto nemohu navrhnout nejvyšší hodnocení. Navrhuji tedy hodnocení známkou **velmi dobře** a práci doporučuji k obhajobě.

K práci mám dále následující dotazy:

1. Jak jste došel k rovnicím (3.1), (3.2) a (3.3) použitým pro parametrizaci racionální Bézierovy křivky?
2. Zkoušel jste paralelizovat (na CPU) i část algoritmu, kde se pomocí modifikovaného de Casteljau algoritmu dělí křivky na menší? Pokud ano, pomohlo to z hlediska efektivity, pokud ne, domníváte se, že by došlo k nějakému nezanedbatelnému urychlení?
3. Jaký přesně mají význam časy naměřené pro dynamická data v Kapitole 4 (např. zda se jedná o průměr přes celou animaci) a kolik snímků animace obsahovaly?