

Posudek oponenta diplomové práce

Autor práce: Ondřej Byrtus

Název práce: Plánování pohybu pro modelování a vizualizaci proteinů

Obsah práce

Diplomant řešil problém, jak a kudy bezkolizně navigovat malou molekulu zevnitř proteinu ven. Model menší molekuly tvoří několik málo koulí (dvě), model proteinu mnohem více hustě sbalených koulí (tisíce). Řešením jsou algoritmy z oblasti robotiky, které vzorkují prostor konfigurací (pozice a rotace) a nad nimi staví graf, kde hrany značí možnost bezpečného přechodu mezi dvěma konfiguracemi.

V teoretické části diplomant popisuje klasické grafové algoritmy (DFS, BFS, Dijkstra, A*), možnosti vzorkování prostoru konfigurací a jak nad vzorky postavit grafy pro plánování pohybu, konkrétně PRM (Probabilistic Road-Map), RRT (Rapidly-exploring Random Trees), a jejich varianty. Krátce zmiňuje i modely proteinů.

V popisu řešení diplomant zdůvodňuje výběr metody RRT* a popisuje svoji implementaci obecných součástí této metody, konkrétně generování konfigurací, jejich připojení do stromu, detekci výsledné cesty a přepojování podstromů v případě nalezení zkratky. Následuje analýza technologií a rizik, na jejímž základě zvolil engine Unity 3D a jazyk C#. Popis řešení končí kapitolou o implementaci, architektuře, návrhových vzorech, atd.

Navržená aplikace umí zobrazit model proteinu, spustit algoritmus plánování pohybu, zobrazovat dosud vygenerovaný graf a zkoumat dosud nalezené řešení. V této aplikaci diplomant provedl 4 druhy experimentů s cílem zjistit, jak moc jsou nalezené cesty opravdu bezkolizní, jak velký vliv na schopnost algoritmu nalézt cesty a na jejich kvalitu má náhoda, interpolace orientace při posouvání vzorků do bezkolizní pozice, nebo zanesení orientace do metriky (trochu podivné sčítání vzdálenosti a úhlu). Ve shrnutí experimentů diplomant uvádí, že se algoritmus osvědčil, ale odhaluje i problémy s uzavíráním cest a úzkými hrdly cest.

V závěru diplomant připomíná cíle práce, podtrhuje sílu a modularitu vytvořené aplikace a shrnuje přínosy, které pro něj diplomová práce měla.

Rozsah práce splňuje požadavek na minimální množství textu. Hrubá logická struktura práce je v pořádku.

Tématicky v práci postrádám následující věci, ale možná nebyly požadovány od vedoucí:

1. Plánování pohybu trochu složitějších molekul (nejenom 2 atomy, ale třeba 10-20 atomů).
2. Tzv. konfigurace je popsána pomocí pozice a natočení, ale rotace jako by se v práci moc neuvažovaly.
3. Nějaká lepší metrika pro dvě konfigurace (včetně natočení) dvou či více atomů složitější molekuly.
4. V teoretické části bych uvítal podrobnější vysvětlení časových a paměťových složitostí a víc obrázků. Není mi úplně jasné, proč a za jakých okolností by měly mít alg. PRM, PRM*, RRT a RRT* složitost $O(n \log n)$.
5. Analýza časové a paměťové složitosti řešení RRT*, které diplomant implementoval. Domnívám se, že časová složitost je minimálně $O(n(m+k))$ pro n vzorků, m uzlů stromu a k atomů proteinu.
6. Alespoň diskuze, jak tu složitost zlepšit s využitím datových struktur pro detekci kolizí.

Kvalita řešení a dosažených výsledků

Návrh aplikace a kvalita zdrojových kódů - pěkně rozdělené do komponent, výborně využívá principů OOP a návrhových vzorů, zdrojové kódy přehledné, poctivě dokumentované a snadno rozšiřitelné, jen vygenerovaný CHM soubor s nápovědou není v pořádku (aplikace Sandcastle jej nevygenerovala správně).

Aplikaci jsem vyzkoušel, pro demonstrační účely je celkem použitelná, ale snesla by ještě víc implementačního úsilí, např. možnost zvolit vstupní soubor, definovat vlastní pozici a poloměr dvojice koulí, nebo začít nový výpočet bez restartu aplikace. Líbí se mi, že je na CD build jak pro Windows tak pro Linux.

Formální úroveň

Positivně hodnotím, že práce je vysázená v TeXu a reference pomocí BibTeX. Snad jen „A star“ a „RRT“ mohly být velkými písmeny. Čitelnost práce je horší. Je zde hodně překlepů a některé věty mají podivný pořádek slov. Překlepy ve slovech si mozek už nějak přebere, ale chyby v pseudokódu jsou nepříjemné. Lepší čitelnosti by určitě pomohlo brzké uvedení některých informací, jinak čtenář dojde pocitu, že se sice něco speciálního provádí, ale neví proč. Např. u vzorce (2.2) na str. 13 by pomohlo nejdřív předeslat, že se uvažuje nějaké okolí proto, aby se snížila časová složitost a teprve pak by následoval složitý vzorec. U popisu RRT* na str. 17 by pomohlo ihned na začátku uvést nevýhody RRT a čím je RRT* odstraňuje. U přepojování podstromů by pomohlo napsat, že se tím zohledňují nově nalezené zkratky.

Str. 24, Alg. 3.2, ř. 7: Proměnná v_{new} nedefinována. Neměla by být výstupem algoritmu?

ř. 13: „ $v_{new} \leftarrow \text{Mix}(v_{near}, v_{new})$ “ má být „ $v_{new} \leftarrow \text{Mix}(v_{near}, v_{rand})$ “

Str. 25, Alg. 3.3, ř. 6: FirstColliding – nedefinovaná metoda. Jak se určí pořadí, pokud objektů koliduje více?

ř. 8,9: Φ nedefinováno - co je to za úhel? Co je $v_{new} \cdot \text{Radius}$, když se používá dvojice sfér?

Str. 26, Sekce 3.1.3, ř. 2: Místo v_{near} by mělo být v_{new} .

Str. 27, Alg. 3.4, ř. 2: Množiny se většinou značí velkými písmeny, takže místo x_{near} by mělo být X_{near} .

Místo $\text{Near}(v_{new}, r_{near})$ má být asi $\text{Near}(v_{near}, r_{near})$, jinak by v_{near} nebylo v Alg. 3.4 použito.

ř. 7, 8: Na jednom řádku špatné uzávorkování, na druhém chybí uzavírací závorka.

ř. 14: Co je cost_{min} ? Tento řádek s aktualizací „ $v_{new} \leftarrow \text{cost}_{min}$ “ by tu vůbec neměl být.

Str. 28, Alg. 3.5, ř. 11: Nekonečná smyčka, zacyklí se. Chybí aktualizace proměnné „ $v \leftarrow v.\text{Parent}$ “.

Chybí aktualizace množiny cest C.

Co je C_{best} , v_{best} ? Sice lze nepřímou vyčíst z textu, ale hodilo by se je mít popsané v Alg. 3.5.

Str. 29, Alg. 3.6, ř. 8: Neměl by se příznak OnPath nejdříve zrušit po celé cestě od vrcholu v až ke kořeni a pak nastavit na všech uzlech od vrcholu v_{new} až ke kořeni?

Str. 33, Místo odkazu na obrázek D.1 má být odkaz na obrázek C.1.

Str. 40, Tab. 4.2: To jsou procenta z poloměru navigované sondy? Jak to souvisí s dvojicí sfér různých poloměrů?

Nechybí u hodnoty 543 desetinná čárka, tedy 54,3?

Str. 43, Tab. 4.4 a 4.5: překlepy „ukazazele“ a „statisitkcé“

Práce s literaturou

Zcela v pořádku. Diplomant cituje 19 relevantních zdrojů.

Splnění zadání

Splněno bez výhrad.

Dotazy k práci

1. Proč jste nezkusil i složitější modely než dvojici koulí? Co by to obnášelo a jaký vliv na algoritmus by to mělo?
2. Dokázal byste nadefinovat nějakou lepší metriku pro dvojici konfigurací (včetně rotace) složitějšího modelu?
3. V implementaci reprezentujete rotaci pomocí Eulerových úhlů (3D vektor) a dvojici takových rotací lineárně interpolujete. V čem to bylo výhodnější oproti quaternionům a sférické lineární interpolaci (slerp)?

Navrhuji hodnocení známkou **velmi dobře** a práci doporučuji k obhajobě.

V Plzni 30.8.2017


**SOUHLASÍ
S ORIGINÁLEM**

Západočeská univerzita v Plzni
Fakulta aplikovaných věd
Katedra informatiky a výpočetní technik

Mgr. Martin Maňák, Ph.D.

