

Posudek vedoucího bakalářské práce

Téma: Path planning in protein structures

Student: Tom Jankovec

Posudek vypracoval: Ing. Vojtěch Vonásek, Katedra kybernetiky, ČVUT FEL

Tématem bakalářské práce je hledání tunelů v proteinových strukturách. Výpočet tunelů je dosud řešen převážně algoritmy výpočetní geometrie. Cílem této práce bylo navrhnout alternativní metody pro výpočet tunelů, které budou založeny na algoritmech plánování pohybu. Řešení tohoto úkolu vyžaduje jednak dobrou znalost metod plánování pohybu, ale také schopnost aplikovat ji na “nerobotická” data.

Student ve své práci navrhl hledat tunely metodou založenou na algoritmu RRT. Ten byl původně určen pro hledání cest/trajektorií robotů mezi dvěma zadanými místy. Student využil základní vlastnosti RRT — prohledávání konfiguračního prostoru — a upravil jej tak, aby byly nalezeny tunely mezi zadaným místem v proteinu a jeho povrchem. To vyžadovalo vyřešit několik problémů (např. detekce povrchu proteinu, vhodné generování náhodných bodů nebo vyhlazování nalezených tunelů). Hlavní myšlenkou popsaného řešení TOM-RRT je opakované prohledávání volného prostoru proteinu s tím, že prohledávání tunelů nalezených v předchozích iteracích je zablokováno pomocnými sférami.

Práce je psána anglicky, text je vhodně členěn do kapitol a doplněn precizně provedenými obrázky, jejichž příprava musela jistě zabrat spoustu času. Popis problému a relevantní state-of-the-art je uveden v první kapitole, popis metod plánování pohybu je v druhé kapitole. Řešení navržené studentem je popsáno v kapitole 3 a 4 a jejich experimentální ověření je popsáno v páté kapitole. Text je psán čtivě, vše podstatné je popsáno a krásně ilustrováno na obrázcích.

Detekce tunelu navrženým algoritmem byla porovnána s nástrojem CAVER. Experimenty byly provedeny na několika proteinech a tunely byly hledány pro různé velikosti tzv. sond. Porovnání vyžadovalo navrhnout výpočet podobnosti tunelů a také provést řadu menších experimentů pro nalezení vhodných konstant. Ukázalo se, že algoritmus navržený studentem je schopen hledat chemicky nejvíce relevantní tunely, což je více než pozitivní výsledek.

Jako vedoucí práce velmi oceňuji aktivní přístup T. Jankovce k řešení bakalářské práce. Na pravidelné konzultace chodil vždy perfektně připravený. Oceňuji schopnost samostatné práce, např. implementace plánovacích metod podle vědeckých článků včetně jejich odladění a nastavení potřebných konstant. Výsledkem práce je praktický algoritmus pro detekci tunelů ve statických proteinech, který lze dále rozšiřovat. Oproti jiným studentům neměl problémy s psaním anglického textu, jeho angličtina je (i přes drobné chyby) na velmi dobré úrovni. Zadané cíle práce byly splněny.

Otázky:

1. Proč se v Alg. 3 (str. 25) generují náhodné **nekolizní** vzorky? (řádek 5). Šlo by použít i kolizní vzorky?
2. Proč se šířka tunelu počítá iterativně přes detekci kolizí (Alg. 5, str. 29) a ne analyticky?

Předloženou bakalářskou práci hodnotím **A** — **výborně**.