

# Posudek DP

## Martin Maňák – Voronoi Diagrams for Spheres in $E^3$

Vedoucí práce: Doc. Dr. Ing. Ivana Kolingerová

Cílem diplomové práce bylo prostudovat algoritmy konstrukce Voronoiova diagramu nelineárních objektů ve 3D (zejména koulí), vybrat vhodný algoritmus a implementovat jej jako dll knihovnu. Dále měl diplomant vyzkoušet funkčnost řešení v kontextu konkrétní aplikace.

Práce je psána anglicky a je rozdělena do 10 kapitol. Kapitola 3 podrobně definuje VDS a jeho duál – kvazi-triangulaci. V kapitole 4 je užitečné teoretické porovnání VDS a dobře známého Voronoiova diagramu bodů. V kapitole 5 diplomant stručně popisuje 3 algoritmy konstrukce VDS (edge tracing, face tracing a region expansion) a diskutuje svůj výběr algoritmu (edge tracing). Bohužel zde nejsou uvedeny časové složitosti algoritmů face tracing a region expansion. V kapitole 6 je vysvětlen výpočet pozice vrcholů a geometrie hran VDS. (Zde je asi drobná chyba. Vrchol VDS se spočítá jako střed koule tečné na čtyři generátory (koule). Vzorec 6.1 patrně předpokládá, že poloměry všech čtyř generátorů byly zmenšeny o poloměr nejmenšího z nich, který pak má nulový poloměr, nicméně v textu toto není explicitně zmíněno.) V kapitole 7 diplomant podrobně popisuje edge tracing a uvádí své vlastní vylepšení inicializačního kroku tohoto algoritmu (hledání prvního vrcholu VDS). Tím končí teoretická část práce.

Kapitola 8 se zabývá implementací algoritmu edge tracing. Dále je zde popsán prohlížeč VDS diagramů, který diplomant implementoval nad rámec zadání. V kapitole 9 jsou popsány provedené experimenty a měření. Kladně hodnotím množství dat, na kterých diplomant svůj program testoval – přes 700 molekul proteinů a několik desítek náhodně generovaných souborů koulí. Méně už jsem nadšen sledovanými charakteristikami – diplomant svá měření omezil na výpočetní čas, počet vrcholů a hran a počet izolovaných generátorů (zjednodušeně řečeno počet chyb algoritmu). Z mého pohledu by bylo zajímavé zjistit křivost hran VDS diagramů a dále zkusit nalézt umělá „ošklivá“ data, jejichž VDS by byl složitější než diagram testovaných proteinů a náhodných koulí. V histogramu 9.2 je drobná chyba – první řádek nesouhlasí s odpovídající tabulkou 9.2.

Konstatuji, že implementovaný program je funkční a jeho výsledky souhlasí s tím, co uvádí diplomant. Nepříjemné je, že v případě chyby se o ní uživatel dozví pouze ze souboru s logy, na konzoli není vypsáno nic. Prohlížeč diagramů se povedl, ovšem prospělo by, kdyby jeho funkce byly dostupné přes klávesové zkratky.

Celkově hodnotím práci jako kvalitní. Zvolené téma je náročné a diplomant ho zvládl velmi dobře. Práce sice nepřináší převratné myšlenky, ale je přesto přínosná. Teoretická část detailně popisuje VDS diagramy a zároveň shrnuje známé algoritmy jejich konstrukce – neznám jinou literaturu, která by dělala totéž. Pro další studium VDS diagramů je přínosný i implementovaný edge tracing (byť částečně zjednodušený), protože podle diplomantova tvrzení není žádný program počítající VDS volně dostupný. Typografická úprava práce nikoho neurazí a text je doplněn množstvím obrázků.

Navrhuji následující otázky:

- Podle kapitoly 9 (konkrétně tabulky 9.2) byl program testován i na proteinech s více než 10 000 atomy – ovšem výsledky těchto testů nejsou uvedeny. Proč?