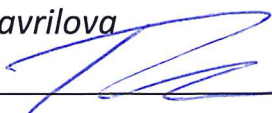




Examiner's Assessment of Thesis

Name of Candidate Mgr. Martin Manak	Degree Ph D	Faculty Applied Sciences
Thesis Title Application of Computational Geometry to Modeling and Visualizatoin of Proteins <p>The thesis looks into the practical and very important problem of creating a tool for visualizing proteins using 3D Voronoi Diagrams, for visualizing Connolly surfaces, and cavities detection. The thesis makes significant and solid contribution to the discipline, particularly in regards to dealing with disconnected cases for additively weighted (aw) Voronoi diagrams, as well as interactive detection of cavities in proteins. The work is based on the predceeding research in the Voronoi diagram domain (Aurenhammer apha complexes, D-S Kim beta complexes, and Gavrilova aw-Voronoi diagram algorithms), which is properly cited and described in great detail. This makes thesis comprehensive, readable and useful for others who might want to repeat the experiments. A significant contribution on its own is in the development of interactive tool for cavities analysis in proteins - CAVER, which incapsulates theoretical developments and practical applicability of the thesis. The thesis is very well structured, logically written, shows sufficient degree of sophistication, and has excellent illustrations and experimental design, which makes this original work repeatable and thus useful for further research in the area.</p> <p>However, on a minor note, it would be logical to expect that the thesis would provide a clear distinction between the main purpose of the tool CAVER: visualization or analysis, and whether analysis of cavities using CAVER should be done by an expert, or a non-expert. Overall, this is a very good work in the area of applied computational geometry.</p> <p>The thesis also lists vast publications by the author in high quality CG venues and a number of research projects benefiting from this work, which shows the merit of the contribution. I undoubtfully recommend the thesis for defence.</p>		
Examiner's Name <i>M.L. Gavrilova</i> 	Affilliation <i>University of Calgary</i>	Date <i>Sept 15, 2016</i>

Posudek oponenta na disertační práci

Mgr. Martina Maňáka

s názvem

Application of Computation Geometry to Modeling and Visualization of Proteins

Disertační práce Martina Maňáka se zaměřuje na využití primárně aditivně vážených Voroného diagramů pro prostorovou analýzu a vizualizaci proteinových modelů. Téma prostorové analýzy proteinových modelů je velmi důležité, protože pomáhá k porozumění struktury a funkci proteinů, a v současné době tuto analýzu nelze provádět bez moderních metod počítačové grafiky. Využití aditivně vážených Voroného diagramů není při analýze proteinových modelů příliš časté, protože práce s nimi je složitější než například práce s obyčejnými Voroného diagramy nebo mřížkovými modely (grid models), které jsou používány častěji. Přitom jsou však aditivně vážené Voroného diagramy konceptuálně velmi vhodné, protože jednotlivé atomy lze v mnoha případech modelovat pomocí různě velkých koulí, což u nich lze přirozeně vyjádřit pomocí kladných vah. Zvolené téma i metody považují za relevantní.

Text práce je relativně obsáhlý, vhodně strukturovaný, psán slušnou angličtinou, ale zasloužil by si mnohem více přesnosti a péče. Prvních pět kapitol poskytuje základní informace z oblastí souvisejících s hlavním tématem práce, zejména proteinových modelů (kap. 2), výpočetní geometrie (kap. 3), prostorové analýzy proteinů (kap. 4) a konstrukce koster Voroného diagramů (kap. 5). Všechny tyto kapitoly ukazují, že se student orientuje v souvisejících oblastech a podávají dostatek informací k pochopení hlavních přínosů práce, které jsou blíže popsány v druhé části práce (konkrétně kapitolách 6 až 9). Bohužel je čitelnost práce snížena relativně dost velkým množstvím nepřesností a nepečlivostí. Do posudku samozřejmě nelze uvést vše, ale alespoň několik příkladů:

- Věta na straně 12 „The order is encoded in DNA and chains are synthesized in the process of transcription and translation.“ je jedním z příkladů vágnosti. Pro člověka bez znalosti věci, bude jen těžko pochopitelné „pořadí čeho“ je kódováno v DNA, jaké řetězce jsou syntetizovány (trošku by pomohl určitý člen, aby bylo alespoň jasné, že se myslí řetězce zmíněné v předchozí větě) a hlavně pojmy transkripce a translace sice se syntézou proteinů souvisí, ale určitě proteiny nejsou syntetizovány během těchto procesů.
- Série tvrzení na straně 18 tiše předpokládá, že množina koulí neobsahuje „degenerované“ případy. Tyto případy jsou sice zmíněny a diskutovány na následující stránce, ale bez jejich vyloučení například tvrzení o $d+1-k$ průnicích Voroného regionů na straně 18 neplatí, protože průníků může být obecně více.
- Význam funkcí FindInitialVoronoiElement a FindEndVertex v Algoritmu 1 na straně 33 je popsán až mnohem dál v textu (strana 36 a 37). Přitom by úplně bývalo stačilo je alespoň stručně vysvětlit slovně již při popisu základního algoritmu a teprve po té dopřesnit v dalších kapitolách.
- Na straně 31 je jeden odstavec duplikovaný.

- Špatné odkazy na obrázky, např. odkaz na Figure 9.6 na straně 67 je zřejmě špatně.
- Není dodržována jednotná terminologie. Např. v kapitole 8 se z ničeho nic hojně používá termín „atom“ ve významu „site“.
- Z řezu použitého písma pro sazbu matematických výrazů není jasné, zda daný symbol označuje vektor nebo skalár. Tato připomínka se týká například výrazů na straně 42. Používání kurzívy jak pro vektory tak skaláry považuji za naprosto nevhodné.
- V textu se vyskytuje několik nedefinovaných symbolů. Např. symbol $R(p)$ na straně 40.

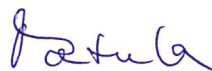
Z kontextu je sice význam symbolu jasný, ale mnohem lepší by bývalo bylo jej definovat. Výše uvedené příklady sice snižují srozumitelnost textu, ale nemají zásadní vliv na posouzení obsahu.

Za hlavní přínosy práce lze označit (1) snížení výpočetního času při konstrukci aditivně vážených Voronoi diagramů pomocí dynamických filtrů, (2) rozšíření algoritmu pro konstrukci aditivně vážených Voronoi diagramů tak, aby byly správně zpracovány i nespojitě případy, (3) návrh postupu pro interaktivní detekci a vizualizaci dutin v proteinech pomocí kombinace hledání dutin a rychlého vykreslování Connollyho povrchů na GPU a (4) návrh metody pro výpočet všech možných dutin v proteinech. Každému z přínosů je věnována samostatná kapitola (kapitoly 6, 7, 8 a 9) a výsledky každé z těchto kapitol byly publikovány na mezinárodních konferencích nebo kvalitních impaktovaných časopisech. Zejména publikace přínosů (3) a (4) v časopise Computer Graphics Forum, který patří mezi Q1 časopisy lze označit za výborný výsledek. U obou publikací je student hlavním autorem a u jedné z nich dokonce jediným autorem. Za pozitivní lze jistě označit i to, že navržené metody byly implementovány a dány k dispozici komunitě v rámci otevřených knihoven.

Během obhajoby bych rád slyšel odpovědi na tyto otázky:

1. Na straně 53 se tvrdí, že Vaše definice hierarchie komponent je jiná než ta popsaná v článcích 58 a 60. Můžete prosím vysvětlit v čem přesně? Následné tvrzení o tom, že by měla být stejná nebo podobná považuji za neodborné.
2. Na straně 57 se tvrdí „Voronota has the computation of vertex coordinates more robust than $awVoronoi$ “. Co se tím myslí? Robustní v jakém smyslu?
3. Proč není označena zeleně hvězdicovitá oblast (tj. ta mezi komponentami K_i)? Neměla by být také součástí f ?

I přesto, že je předložená práce díky nepřesnostem místy obtížně srozumitelná, tak po obsahové stránce je na kvalitní úrovni. Publikační aktivita studenta je výborná, a proto v případě úspěšné obhajoby doporučuji, aby byl Mgr. Martinovi Maňákovi **udělen akademický titul Ph.D.**



V Brně, 18. října 2016

doc. RNDr. Petr Matula, Ph.D.