

Posudek oponenta bakalářské práce

Student: Ježík Andrej
Téma: Analýza transportu a dokování malých molekul uvnitř proteinových tunelů (id 23793)
Oponent: Martínek Tomáš, Ing., Ph.D., UPSY FIT VUT

- Náročnost zadání** **obtížnější zadání**
Cílem práce bylo upravit existující aplikaci Caver Web do podoby, kdy bude schopna nejen vypočítávat tunely v proteinech, ale také automatizovaně analyzovat průchody substrátů (schválených FDA léčiv) těmito tunely.
Zadání považuji za obtížnější, jelikož bylo potřeba nastudovat poměrně náročnou problematiku z oblasti molekulární biologie. Dále bylo potřeba upravit/rozšířit poměrně komplexní aplikaci běžící v cloudovém prostředí, zahrnující nejen samotný distribuovaný výpočet, ale také webové rozhraní.
- Splnění požadavků zadání** **zadání splněno**
- Rozsah technické zprávy** **je v obvyklém rozmezí**
- Prezentační úroveň předložené práce** **60 b. (D)**
Předložená práce je napsána přehledně a kapitoly jsou uspořádány v logickém sledu. Samotný text je pro čtenáře čitelný a snadno pochopitelný. **Oceňuji** zejména způsob, jakým student zpracoval **teoretickou část práce**, která se skládá z řady poměrně náročných oblastí. Student je dokázal nejen pochopit, ale i srozumitelně popsat a vysvětlit. Na druhou stranu, **výhrady mám k rozsahu textu praktické části**, která je velice stručná.
- Formální úprava technické zprávy** **80 b. (B)**
Jazykovou stránku textu nejsem schopen posoudit, jelikož je práce napsána ve slovenském jazyce. Typografická stránka textu je na dobré úrovni. Text je doplněn názornými obrázky. Doporučoval bych se vyvarovat číslování pod-kapitol obsahujících velmi malé množství textu.
- Práce s literaturou** **90 b. (A)**
Práce s literaturou je také na velmi vysoké úrovni. Primárně bylo **čerpáno z kvalitních časopiseckých publikací** z oblasti proteinového inženýrství. Převzaté části textu a obrázky jsou řádně označeny a odděleny od vlastního přínosu.
- Realizační výstup** **75 b. (C)**
Hlavní realizační **výstupy** práce **tvorí sada skriptů pro spuštění aplikace v cloudovém prostředí**, doplněná o převodní skript v jazyce python. Mezi další výstupy patří kód upravující jádro aplikace a webovou aplikaci. Uvedené zdrojové kódy jsou plně funkční a v souladu s licenčními podmínkami.
- Využitelnost výsledků**
Předložená práce je **spíše kompilačního charakteru**, avšak rozšiřuje existující nástroj Caver Web o novou funkcionalitu ve formě analýzy proteinu s ohledem na sadu schválených FDA léčiv. **Toto rozšíření by mohlo mít velký potenciál jak pro vědeckou komunitu, tak i pro průmyslové partnery.**
- Otázky k obhajobě**
 - Bylo provedeno testování nástroje i na proteinech jiných než z rodiny Haloalkane Dehalogenases?
 - Pokud ano, ověřoval jste funkčnost nástroje např. na proteinech, na kterých by uvedená FDA léčiva měla účinkovat?
- Souhrnné hodnocení** **75 b. dobře (C)**
Předložená práce je kvalitní a student prokázal, že je schopen pochopit poměrně náročnou problematiku, rozšířit poměrně komplexní nástroj Caver Web o novou funkcionalitu analýzy sady FDA léčiv a ověřit jeho funkčnost na reálných datových sadách. **Rád bych ocenil zejména precizně zpracovanou teoretickou část** práci. Hlavní **výhradu bych měl k rozsahu praktické části**, který je velmi stručný navzdory tomu, že student odvedl poměrně dost práce. S ohledem na tyto skutečnosti hodnotím stupněm **dobře (C)**.

Prohlášení: Uděluji VUT v Brně souhlas ke zveřejnění tohoto posudku v listinné i elektronické formě.

V Brně dne: 3. června 2021

Martínek Tomáš, Ing., Ph.D.
oponent