

Review of Master's Thesis

Student: Kadleček Josef, Bc.
Title: Computational Workflow for the Prediction and Design of Stable Proteins (id 24648)
Reviewer: Martínek Tomáš, Ing., Ph.D., DCSY FIT BUT

- 1. Assignment complexity** **more demanding assignment**
Cílem práce bylo rozšířit existující nástroj pro predikci mutací vedoucí ke stabilizaci proteinu (FireProt) o řadu nových funkcí např. o podporu predikce 3D struktury proteinu ze sekvence, predikce flexibility (B-faktory) a ancestrální rekonstrukci sekvencí. Jádro aplikace by navíc mělo pracovat v prostředí Metacentra. **Zadání považuji za obtížnější.**
- 2. Completeness of assignment requirements** **assignment fulfilled with enhancements**
Na rámec zadání student navrhl a implementovat nový přístup pro výběr vícenásobných mutací s využitím grafových algoritmů.
- 3. Length of technical report** **in usual extent**
- 4. Presentation level of technical report** **95 p. (A)**
Diplomová práce je napsána přehledně a kapitoly jsou uspořádány v logickém sledu. **Rozsah teoretické a praktické části je vyvážený.** Samotný text je pro čtenáře čitelný a snadno pochopitelný.
- 5. Formal aspects of technical report** **95 p. (A)**
Předložená práce byla **napsána v angličtině na velmi dobré úrovni.** Rovněž typografická stránka textu je na vysoké úrovni. Text je doplněn názornými obrázky a grafy.
- 6. Literature usage** **95 p. (A)**
Práce s literaturou je na velmi dobré úrovni. **Čerpáno bylo z kvalitních časopiseckých publikací** z oblasti molekulární biologie a predikce vlivu mutace na stabilitu proteinu. Převzaté části textu a obrázky jsou řádně označeny a odděleny od vlastního přínosu.
- 7. Implementation results** **95 p. (A)**
Hlavní realizační **výstupy práce tvoří jádro aplikace pro predikci mutací vedoucí ke stabilizaci proteinu** vytvořené v jazyce java a doprovodné skripty pro spuštění aplikace v prostředí Metacentra. Uvedené zdrojové kódy jsou plně funkční.
- 8. Utilizability of results**
Předložená práce významně **rozšiřuje současný nástroj pro predikci stabilizujících mutací** v proteinech (FireProt). **Vytvořená aplikace má nepochybně publikační potenciál** v kvalitním vědeckém časopise.
- 9. Questions for defence**
 - V čem spočíval problém při integraci nástroje AlphaFold pro predikci homologních sekvencí?
 - Výpočet B-faktorů a ancestrálních sekvencí aktuálně není zapojen do části predikce vícenásobných mutací. Dává vám takové zapojení smysl a jak by jste jej případně implementoval?
 - V práci uvádíte novou metodu pro predikci vícenásobných mutantů s využitím techniky detekce klik v grafu. Proč je zrovna klika ten správný útvar vedoucí ke stabilnějším proteinům?
- 10. Total assessment** **95 p. excellent (A)**
Předložená diplomová práce je velmi kvalitní a student prokázal, že je schopen samostatně pochopit poměrně náročnou problematiku a významně rozšířit existující aplikaci pro predikci stabilizujících mutací v proteinech o podporu několika nových funkcí. Vytvořený výstup má navíc potenciál se stát součástí kvalitní vědecké publikace. S ohledem na obtížnost zadání, kvalitu zpracování, text psaný v anglickém jazyce a publikační potenciál hodnotím tuto práci stupněm **výborně (A)** a doporučuji komisi zvážit případné ocenění této práce.

In Brno 1 June 2022

Martínek Tomáš, Ing., Ph.D.
reviewer