

## Supervisor assessment of Master's Thesis

**Student:** Kadleček Josef, Bc.

**Title:** Computational Workflow for the Prediction and Design of Stable Proteins (id 24648)

**Supervisor:** Musil Miloš, Ing., Ph.D., DIFS FIT BUT

### 1. Assignment comments

Práce navazuje na již existující projekt FireProt, sloužící k automatizovanému návrhu stabilních proteinů. Hlavním cílem práce bylo vytvořit novou implementaci výpočetního jádra, která by zohlednila nové funkce a analýzy výpočetního workflow (homologní modelování, analýza flexibility, analýza MSA, ...) a vylepšila části stávajícího řešení. V rámci projektu byl rovněž optimalizován výpočet analýz na HPC. Jedná se o mírně obtížnější zadání, jelikož student musel nejenom nastudovat problematiku proteinového inženýrství, ale také komplexní strukturu nástroje FireProt. Nová implementace byla dokončena a dostatečně otestována.

### 2. Literature usage

Student využíval poskytnuté zdroje a další si sám dohledal během psaní diplomové práce.

### 3. Assignment activity, consultation, communication

Student byl aktivní po celý rok a postup byl průběžně konzultován dle aktuální potřeby. Dohodnuté milníky byly vždy splněny.

### 4. Assignment finalisation

Implementace byla dokončená ve značném předstihu a textová zpráva byla dostatečně konzultována.

### 5. Publications, awards

Výsledek práce bude použit v implementaci nové verze nástroje FireProt, který je připravovaný pro publikaci v impaktovaném časopise na přelomu 2022/23.

### 6. Total assessment

**excellent (A)**

Student byl aktivní po celý rok, splnil všechny požadavky a dodal kód v kvalitě dostatečné pro její přímé použití ve výpočetní platformě FireProt. Obzvláště oceňuji studentovu práci při návrhu nové metody pro výběr mutací pro použití ve vícebodovém návrhu. S ohledem na výše uvedené navrhuji studentovi udělat hodnocení **výborně (A)**.

In Brno 24 May 2022

Musil Miloš, Ing., Ph.D.  
supervisor