

Posudek oponenta diplomové práce

Student: Kohout Petr, Bc.
Téma: Identifikace proteinových tunelů s využitím molekulárních dynamik (id 24722)
Oponent: Martínek Tomáš, Ing., Ph.D., UPSY FIT VUT

- 1. Náročnost zadání** **obtížnější zadání**
Cílem práce bylo rozšířit existující aplikaci pro identifikaci tunelů v proteinech (Caver Web) o podporu dat z molekulárních dynamik (MD). K této aplikaci bylo následně potřeba vytvořit webové rozhraní a navrhnout vhodné techniky pro vizualizaci dat z MD. Jádro aplikace by navíc mělo pracovat v prostředí Metacentra. **Zadání považuji za obtížnější.**
- 2. Splnění požadavků zadání** **zadání splněno**
- 3. Rozsah technické zprávy** **je v obvyklém rozmezí**
- 4. Prezentací úroveň předložené práce** **90 b. (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. Formální úprava technické zprávy** **95 b. (A)**
Předložená práce je **na velmi dobré jazykové úrovni.** Rovněž typografická stránka textu je na vysoké úrovni. Text je doplněn názornými obrázky a grafy.
- 6. Práce s literaturou** **95 b. (A)**
Práce s literaturou je na velmi dobré úrovni. **Čerpáno bylo z kvalitních časopiseckých publikací** z oblasti molekulární biologie, bioinformatiky a detekce tunelů v proteinech. Převzaté části textu a obrázky jsou řádně označeny a odděleny od vlastního přínosu.
- 7. Realizační výstup** **85 b. (B)**
Hlavní realizační **výstupy práce tvoří jádro aplikace pro detekci tunelů v proteinech** vytvořené **v jazyce java a kompletní webová aplikace** s využitím knihovny React. Uvedené **zdrojové kódy by měly být funkční.** Student však v závěru své práce konstatuje, že aplikace ještě není připravena pro produkční nasazení.
- 8. Využitelnost výsledků**
Předložená práce **rozšiřuje současné přístupy pro detekci tunelů** v proteinech o analýzu a vizualizaci dat z molekulárních dynamik. Tento přístup navíc implementuje v podobě webového rozhraní vhodného pro použití ze strany biologů a vědecké komunity. **Vytvořená aplikace má nepochybně publikační potenciál** v kvalitním vědeckém časopise.
- 9. Otázky k obhajobě**
 - Co přesně znamená, že práce prozatím není připravena pro produkční nasazení?
 - Výběr tunelů z MD dat aktuálně probíhá uživatelem ručně. Uvažujete o nějaké formě automatizaci tohoto výběru? Jak by se případně implementovala?
 - Vizualizace MD dat je aktuálně dostupná v podobě poměrně jednoduchých diagramů (obrázek 6.9 a 6.10). Uvažujete o nějaké vhodnější formě?
- 10. Souhrnné hodnocení** **85 b. velmi dobře (B)**
Předložená diplomová práce je velmi kvalitní a student prokázal, že je schopen samostatně pochopit poměrně náročnou problematiku a rozšířit aplikaci pro detekci tunelů v proteinech o podporu molekulárních dynamik, včetně vhodného uživatelského rozhraní. Vytvořený výstup má navíc potenciál se stát součástí kvalitní vědecké publikace. Jediné omezení vnímám v tom, že aplikace ještě není připravena pro produkční nasazení. S ohledem na tuto skutečnost hodnotím stupněm **velmi dobře (B) a ponechal bych hodnotící komisi, zda toto hodnocení upraví jakýmkoliv směrem s ohledem na ústní obhajobu a vyjádření se studenta k otázce týkající se funkčnosti výsledného řešení.**

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

V Brně dne: 1. června 2022

Martínek Tomáš, Ing., Ph.D.
oponent