

## Hodnocení vedoucího diplomové práce

**Student:** Kohout Petr, Bc.

**Téma:** Identifikace proteinových tunelů s využitím molekulárních dynamik (id 24722)

**Vedoucí:** Musil Miloš, Ing., Ph.D., UIFS FIT VUT

### 1. Informace k zadání

Záměrem práce bylo rozšířit již existující nástroj CaverWeb o modul, který by byl schopný identifikovat tunely s využitím snímků získaných z molekulární dynamiky. Spuštění molekulární dynamiky by mělo proběhnout pokud možno bez zásahu ze strany uživatele a plynule navázat na další analýzy již obsažené v nástroji CaverWeb. Společně s rozšířením stávající funkcionality mělo být navrženo a implementováno nové uživatelské rozhraní s využitím technologie React. Jedná se o obtížné zadání, dalece přesahující rozsah standardní diplomové práce.

### 2. Práce s literaturou

Student používal doporučenou literaturu a průběžně si dohledával další zdroje.

### 3. Aktivita během řešení, konzultace, komunikace

Student byl aktivní po celý rok a jeho postup byl pravidelně konzultován. Nepodařilo se mu však dodržet domluvené termíny a ani po opakované urgenci nebylo vše dotaženo do podoby vhodné pro nasazení na produkci.

### 4. Aktivita při dokončování

Textová část práce byla dopsána pouze krátce před odevzdáním, ale její obsah byl přesto dostatečně konzultován. Z implementačního hlediska by student na projekt potřeboval více času.

### 5. Publikační činnost, ocenění

Práce byla prezentována formou posteru na konferenci pořádanou organizací ELIXIR CZ. Dále byla prezentována ústně na studentské konferenci EXCEL@FIT, kde jí byla udělena cena Jiřího Kunovského.

### 6. Souhrnné hodnocení

**velmi dobře (B)**

Textová část práce dosahuje vysoké kvality. Z hlediska implementace se však studentovi nepodařilo ani po opakované urgenci některé elementy dotáhnout do stavu vhodného pro nasazení na produkční prostředí. Nicméně, je nezbytné vzít v potaz vysokou obtížnost předložené práce, která svým rozsahem dalece převyšuje, co lze považovat za standardní zadání pro diplomovou práci. S ohledem na textovou část, dosažené výsledky a získaná ocenění tedy navrhuji hodnocení **velmi dobře (B)**.

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

V Brně dne: 24. května 2022

Musil Miloš, Ing., Ph.D.  
vedoucí práce