

Posudek školitele bakalářské práce

Jméno a příjmení uchazeče/ky: Evžen Wybitul

Název práce: Differential discovery of protein features using tandem mass spectrometry

Cíl práce: Mass spectrometry has become an indispensable tool for identification of various chemicals, ranging in size from single isotopes and small molecules to large protein complexes. In particular, spectra obtained from tandem mass spectrometry provide information about the precise mass of the sample and m/z values of its fragments, which gives a natural possibility to reconstruct even very large chemical structures. Because the naive matching of the spectra to the vast space of chemical structures is computationally hard, practical methods usually incorporate various heuristics and prior information about the sample, which simplify the analysis. This thesis will review the currently available strategies and heuristics used for the identification. The results will be used to construct a custom variant of the identification algorithm useful for identifying presence of specific chemical features on proteins (e.g. disulfide bonds) by differential analysis under various peptide modifications, including the targeted modifications (alkylation, enzymatic cleavage, disulfide bond modifications) and the ones occurring spontaneously during the measurement (oxidation, deamination). Performance (computation speed and precision) of the algorithm will be evaluated on locally generated datasets.

Obsahuje práce i experimentální část? Autorovu implementaci je možné považovat za výpočetní experiment; tradiční laboratorní experiment práce neobsahuje.

Hodnocení jednotlivých aspektů práce (označte známkou ve standardní stupnici 1 až 4)

1. Samostatnost uchazeče/ky

Ve fázi zpřesňování tématu práce:	1
Při práci s literaturou a databázemi:	1
Během zpracování zadaného tématu:	1
Při sepisování práce:	1

2. Komunikativnost, schopnost spolupráce: 1

3. Zájem o práci a pracovní nasazení uchazeče/ky: 1

4. Spolehlivost a plnění zadaných úkolů: 1

5. Pokud práce obsahuje výsledky uchazeče/ky, jaké je Vaše hodnocení této práce: 1

Případný slovní komentář k výše uvedeným bodům:

Téma práce je odvozené z aktuálních potřeb datové analýzy na ÚOCHB. Práce popisuje teoretické základy nutné pro pochopení problému detekce disulfidových můstků, následně autorův přístup k vyhodnocování dat a implementaci. Kvalita zpracování textové části práce je výrazně nadprůměrná a implementace je vhodně strukturovaná a dobře dokumentovaná. Výsledný program dává smysluplné výsledky a vizualizace poskytují zajímavou možnost kontrolování „false positives“. Problematická identifikace některých můstků je pravděpodobně způsobená vlastnostmi vstupních dat, korekce by výrazně přesahovala očekávaný rozsah práce.

Stanovisko k opravě chyb v práci: opravný lístek/oprava v textu **NENÍ** podmínkou přijetí práce

Celkový návrh:

Práci **doporučuji** k přijetí k dalšímu řízení: **ANO**

Navrhovaná celková klasifikace: **výborně**

Datum vypracování posudku: 10. 9. 2021

Jméno a příjmení, podpis školitele (SIS): Miroslav Kratochvíl, RNDr., PhD.