

Posudek vedoucího diplomové práce

Jméno a příjmení autora posudku: David Hoksza
Jméno a příjmení autora práce: Marek Mikeš
Název práce: Explorace chemického prostoru za pomoci scaffold hoppingu

Cílem práce bylo implementovat algoritmus procházení chemického prostoru. Algoritmus měl být rozšířením metody explorace chemického prostoru pomocí tzv. morfování, kdy existují 2 molekuly v chemickém prostoru, a postupnou změnou startovací molekuly se tato transformuje na molekulu cílovou. Posloupnost těchto transformací (morfování) je pak výstupem metody.

Scaffold je obecnější reprezentace molekuly, kdy jeden scaffold zastřešuje více molekul a pohyb na úrovni scaffoldů. V rámci práce měla být implementována metoda, která se bude místo na úrovni samotných molekul pohybovat na úrovni scaffoldů. Tato metoda pak měla být zapracována do stávajícího projektu Molpher a to jak část explorační, tak část vizualizační, kde uživatel může vidět průchod chemickým prostorem na různých úrovních granularity scaffoldů.

Práce je rozdělena do tří sekcí. První sekce popisuje existující projekt Molpher, který byl v rámci práce rozšiřován. Vzhledem k faktu, že práce je rozšířením stávajícího frameworku, je této části správně věnováno relativně dost prostoru. Další část popisuje různé úrovně scaffoldů a jak jsou tyto zapracovány do exploračního procesu. Jsou zde popsány způsoby generování jednotlivých úrovní scaffoldů a rozšíření morfovacích operátorů pro jednotlivé úrovně. Poslední sekce je věnována testování implementace s ohledem na různé aspekty explorace. Testovány byly různé parametry, přičemž nejzajímavější výsledky jsou doba za kterou je cesta nalezena a strukturní rozmanitost výsledku. Zvláště pak oceňuji experimenty týkající se strukturní rozmanitosti, kdy bylo testováno, zda explorace prostoru přináší strukturně rozmanitější výsledky. Strukturně rozmanité cesty jsou totiž zajímavější z pohledu dalšího použití nalezených molekul v návazných procesech (např. vývoj látek s danou bioaktivitou).

Původní cíle práce byly dva: zrychlení procházení prostorou rozdělením procesu do více kroků, kdy každý funguje na menším prostoru a získání strukturně zajímavějšího výsledku. Z důvodů popsaných v práci bylo dosaženo pouze druhého z výsledků. Myslím si ale, že vyvinutím většího úsilí bylo možno aspoň částečně dosáhnout i výsledků v oblasti zrychlení algoritmu.

Práce je celkově napsána srozumitelně a splňuje zadání. Z technických důvodů byl zvolen odlišný postup od zamýšleného, což je popsáno v práci. Tato volba pak vedla k výsledkům, které nevedly k jednoznačnému zlepšení výkonu při exploraci cesty. Na druhou stranu, výsledné cesty mají tendenci být zajímavější z chemického hlediska, jak bylo ukázáno v experimentální sekci. Nakonec také hodnotím pozitivně zapracování algoritmu do frameworku umožňující vizuální kontrolu výsledků na úrovni scaffoldů.

Doporučení k obhajobě:

Z výše uvedených důvodů práci *doporučuji* k obhajobě.

Vynikající práce vhodná pro soutěž studentských prací	ANO <input type="checkbox"/>
---	------------------------------

Seznam soutěží studentských prací, viz <http://www.mff.cuni.cz/studium/bcmgr/prace/>

Pokud jste výše zaškrtnli ANO, zdůvodněte prosím svůj návrh, případně uveďte konkrétní soutěž, pro kterou je práce vhodná (rámeček lze nechat prázdný, pokud za dostatečné zdůvodnění považujete text posudku):

V Praze dne: 25. 8. 2014

Podpis: