

# Posudek oponenta diplomové práce

Jméno a příjmení autora posudku: Petr Škoda

Jméno a příjmení autora práce: Velkoborský Jakub

Název práce: Hierarchická vizualizace chemického prostoru

---

Cílem práce bylo vytvořit hierarchii chemických sloučenin a tuto pak dále využít v aplikaci, jež by umožnila hierarchické procházení chemického prostoru.

Z hlediska hodnocení je možné práci rozdělit do tří celků: textová část, vytvořená hierarchie a implementovaná aplikace. Za povšimnutí v textové části stojí připomínání již jednou uvedených pojmů na začátku kapitol. Tento přístup přispívá k lepšímu čtení diplomové práce, neb je čtenář vždy uveden do kontextu dané kapitoly. Tato skutečnost vynahrazuje místy horší návaznost textu a z jistého pohledu nejasné dělení. To je nejvýraznější u uživatelské dokumentace. Ačkoli je v práci přítomna, není tato část jednoduše identifikovatelná z obsahu a ani se nevyskytuje na jednom souvislém místě. Za nadprůměrnou by se dala označit diskuse o použité chemoinformatické knihovně. Autor zde uvádí různé možnosti a diskutuje svoji volbu. V práci naopak chybí popis používaného vlastního formátu či API, jež by umožnilo integraci výsledného programu do jiných systémů. Tyto nedostatky mohou být způsobeny menším důrazem na programátorskou část práce.

Významná část práce se věnuje návrhu hierarchie chemických sloučenin, její reprezentaci a analýze. Popsán je proces tvorby, učiněná rozhodnutí a zkoušené přístupy. Tuto část práce je možné hodnotit velmi kladně.

Poslední částí práce jen samotné softwarové dílo, to se skládá z webového frontendu, backendu a programu pro generování hierarchie. Samotná vizualizační aplikace je uživateli prezentována jako neresponzivní webový klient. Ačkoliv autor zmiňuje snahu, jež by měla umožnit v vizualizaci i větších datových sad, samotná aplikace skýtá prostor pro možná vylepšení a opravu chyb. Příkladem je možné uvést třeba:

- Absenci chybové hlášky při nevalidním vstupním souboru.
- Velké a místy zbytečné množství dotazů pro obrázky molekul.
- Velká paměťová náročnost i při prohlížení prázdného pozadí.
- Příliš malý rámeček pro některé molekuly, jež dělá jejich přítomnost prakticky zbytečnou.

I přes tyto připomínky aplikace splňuje svůj účel a její provedení je dostatečné pro potřeby této práce.

Při celkovém hodnocení je třeba přihlídnout k mezioborovosti a důrazu na jednotlivé části diplomové práce.

## Doporučení k obhajobě:

Z výše uvedených důvodů práci doporučuji k obhajobě.

V Praze dne: 12.8.2016

Podpis: