

Posudek bakalářské práce

Matematicko-fyzikální fakulta Univerzity Karlovy v Praze

Autor práce Ondřej Míčka
Název práce Využití nekorelovaných vícebodových farmakoforových otisků při virtuálním screeningu
Rok odevzdání 2016
Studijní program Informatika **Studijní obor** Obecná informatika

Autor posudku David Hoksza **Role** Vedoucí
Pracoviště KSI MFF UK

Prosím vyplňte hodnocení křížkem u každého kritéria. Hodnocení *OK* označuje práci, která kritérium vhodným způsobem splňuje. Hodnocení *lepší* a *horší* označují splnění nad a pod rámec obvyklý pro bakalářskou práci, hodnocení *nevyhovuje* označuje práci, která by neměla být obhájena. Hodnocení v případě potřeby doplňte komentářem. Komentář prosím doplňte všude, kde je hodnocení jiné než *OK*.

| K celé práci | lepší | OK | horší | nevyhovuje |
|---|-------------------------------------|-------------------------------------|--------------------------|--------------------------|
| Obtížnost zadání | <input type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| Splnění zadání | <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| Rozsah práce ... <i>textová i implementační část, zohlednění náročnosti</i> | <input type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| Komentář Práce vyžadovala seznámení se s problematikou virtuálního screeningu, studium stávajících metod a implementace farmakoforů v state-of-the-art framework pro chemickou informatiku RDKit. Tento byl v rámci práce analyzován a optimalizován. Tím bylo umožněno vypracování samotného zadání práce. To zahrnovalo implementaci korelační analýzy, vícebodových farmakoforů a vyhodnocení na širokém spektru datových sad, což vyžadovalo využití paralelní infrastruktury Metacentra. | | | | |

| Textová část práce | lepší | OK | horší | nevyhovuje |
|---|--------------------------|-------------------------------------|--------------------------|--------------------------|
| Formální úprava ... <i>jazyková úroveň, typografická úroveň, citace</i> | <input type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| Struktura textu ... <i>kontext, cíle, analýza, návrh, vyhodnocení, úroveň detailu</i> | <input type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| Analýza | <input type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| Vývojová dokumentace | <input type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| Uživatelská dokumentace | <input type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| Komentář Textová část obsahuje kromě vysvětlení samotné problematiky farmakoforů a jejich použití i širší úvod do reprezentace molekul a virtuálního screeningu jako takového poukazující na širší pochopení dané tematiky. | | | | |

| Implementační část práce | lepší | OK | horší | nevyhovuje |
|--|--------------------------|-------------------------------------|--------------------------|--------------------------|
| Kvalita návrhu ... <i>architektura, struktury a algoritmy, použité technologie</i> | <input type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| Kvalita zpracování ... <i>jmenné konvence, formátování, komentáře, testování</i> | <input type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| Stabilita implementace | <input type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| Komentář Click here to enter text. | | | | |

Celkové hodnocení Výborně (spíše lepší)
Práci navrhuji na zvláštní ocenění Ne

Datum 8. srpna 2016

Podpis