

Posudek bakalářské práce

Matematicko-fyzikální fakulta Univerzity Karlovy

Autor práce	Adam Filandr	
Název práce	Utilizing simulated annealing for molecular fingerprints optimization for virtual screening	
Rok odevzdání	2017	
Studijní program	Informatika	
Studijní obor	Programování a softwarové systémy	
Autor posudku	Miroslav Kratochvíl	Oponent
Pracoviště	Katedra softwarového inženýrství	

K celé práci

lepší OK horší nevyhovuje

	lepší	OK	horší	nevyhovuje
Obtížnost zadání		X		
Splnění zadání	X			
Rozsah práce <i>... textová i implementační část, zohlednění náročnosti</i>		X		
Cíle práce jsou jasně definované a splněné, týkají se současných otevřených problémů na poli chemoinformatiky.				

Textová část práce

lepší OK horší nevyhovuje

	lepší	OK	horší	nevyhovuje
Formální úprava <i>... jazyková úroveň, typografická úroveň, citace</i>		X		
Struktura textu <i>... kontext, cíle, analýza, návrh, vyhodnocení, úroveň detailu</i>	X			
Analýza		X		
Vývojová dokumentace		X		
Uživatelská dokumentace		X		
<p>Text práce je strukturovaný podle zásad kvalitní monografie, čtenáře seznamuje se všemi náležitostmi souvisejícími s virtuálními screeny, způsobem a důvodem výběru použitého řešení a s detailními výsledky. Angličtina práce je na dobré úrovni, většina formálních a formátovacích problémů s textem (např. občasné překlepy nebo mírně neobratná struktura vět, problém pomlčka vs. mínus, přetečené řádky označené TeXovým černým obdélníkem z režimu draft a trochu rušivé umístění obrázků a tabulek s vynuceným here-placementem) je nepodstatná a jde vyřešit technicky.</p> <p>Mírné zlepšení by si zasloužilo finální srovnání autorova výsledku s ostatními metodami — grafy 5.5 a 5.6 (tj. data z tabulek 6.1 a 6.2) by bylo podstatně přehlednější zobrazit jako např. boxplot s jednotlivými testy agregovanými do 4 rozdělení.</p> <p>Uživatelská i programátorská dokumentace jsou na odpovídající úrovni.</p>				

Implementační část práce

lepší OK horší nevyhovuje

	lepší	OK	horší	nevyhovuje
Kvalita návrhu <i>... architektura, struktury a algoritmy, použité technologie</i>		X		
Kvalita zpracování <i>... jmenné konvence, formátování, komentáře, testování</i>	X			
Stabilita implementace		X		

Implementace je ve formě poměrně tradičního chemoinformatického toolboxu — skupiny nástrojů v jazycích Python a C++ spojených především shellem. Kromě provedení samotného výpočtu umožňuje i ovládání skupiny počítačů jako vysoce výkonného clusteru pro tento účel. Zdrojový kód (především ‘uživateli bližší’ nástroje v Pythonu) je dostatečně přehledný a dobře okomentovaný.

Celkové hodnocení Výborně
Práci navrhuji na zvláštní ocenění Ne

Datum

Podpis