

Posudek bakalářské práce

Matematicko-fyzikální fakulta Univerzity Karlovy v Praze

Autor práce Šťastná Aneta
Název práce Grafová reprezentace molekul a její využití ve virtuálním screeningu
Rok odevzdání 2017
Studijní program Informatika **Studijní obor** Obecná informatika

Autor posudku RNDr. Michal Kopecký, Ph.D. **Role** Oponent
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 checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Splnění zadání	<input 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 Autorka se seznámila s obsáhlou sbírkou dostupných reprezentací chemických molekul a algoritmů pro výpočet grafové podobnosti. Obojí pak využila při implementaci programu, který porovnává podobnosti molekul s cílem předpovědět výskyt žádané bioaktivity sloučeniny pro daný lékařský účel bez toho, že by musel být lék testován reálně.				

Textová část práce

	lepší	OK	horší	nevyhovuje
Formální úprava ... <i>jazyková úroveň, typografická úroveň, citace</i>	<input checked="" 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 checked="" 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 Práce obsahuje obsáhlou část, vysvětlující srozumitelně všechny potřebné pojmy, nutné k pochopení problematiky, které práce řeší. Popis je velmi dobře formalizován. Práce obsahuje jen zanedbatelný počet překlepů. Z těch, které nemusí být na první pohled zřejmé, je v definici Tanimotova koeficientu na straně 8 vynechán znak "=", takže vzorec vypadá jako součin $Tc(\dots)$ místo $Tc=(\dots)$.				

Implementační část práce

	lepší	OK	horší	nevyhovuje
Kvalita návrhu ... architektura, struktury a algoritmy, použité technologie	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Kvalita zpracování ... jmenné konvence, formátování, komentáře, testování	<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"/>
<p>Komentář Vývoj software nebyl cílem této práce. Autorka především využívá existující volně dostupné implementace algoritmů. Nějaké další zpracování bylo potřeba prakticky pouze pro počáteční konverze formátů dat do formátu, požadovaného použitými nástroji a závěrečné konverze výsledků. Sekce 5.5 se proto věnuje hlavně popisu zadání vstupních parametrů a jejich vlivu na výpočet. Celkově hodnotím práci jako velmi pěknou. Autorka provedla velké množství testů a výsledky přehledně popisuje v sekci 5.6.</p>				

Celkové hodnocení Výborně
Práci navrhuji na zvláštní ocenění Ne

Datum 11. června 2017

Podpis