

Posudek oponenta diplomové práce

Student: Plaga Michal, Bc.
Téma: Bioinformatický nástroj pro predikci struktury proteinů (id 18180)
Oponent: Burgetová Ivana, Ing., Ph.D., UIFS FIT VUT

1. **Náročnost zadání** průměrně obtížné zadání
2. **Splnění požadavků zadání** zadání splněno
3. **Rozsah technické zprávy** je v obvyklém rozmezí
4. **Prezentační úroveň předložené práce** 63 b. (D)

Předložená technická zpráva má sice logickou strukturu, nicméně pochopitelnost textu příliš dobrá není. Základním nedostatkem technické zprávy je to, že v práci není nikde zřetelně uvedeno, jaké požadavky na meta-prediktor bude moci uživatel zadat. Dále zde postrádám konkrétnější popis toho, pro které požadavky se lépe hodí jednotlivé predikční nástroje. Dále technická zpráva obsahuje podivné věty typu: "...testovací sada se ještě možná změní...".
5. **Formální úprava technické zprávy** 66 b. (D)

Při tvorbě technické zprávy nebyl použit vhodný formát obrázků, takže obrázky jsou nekvalitní. Dále zpráva obsahuje celou řadu překlepů a nesprávných jazykových konstrukcí.
6. **Práce s literaturou** 72 b. (C)

Seznam použité literatury obsahuje řadu kvalitních publikací, ale veškerou snahu studenta o kvalitní dílo kazí to, že seznam nástrojů pro predikci struktury proteinů byl převzat z Wikipedie. Stejně tak ukázkou formátu PDB by bylo lepší převzít přímo z databáze PDB a ne z Wikipedie. Dále pak bibliografické citace nejsou uvedeny jednotným způsobem.
7. **Realizační výstup** 68 b. (D)

V rámci realizačního výstupu diplomové práce byla vytvořena celá řada skriptů, sloužících pro otestování jednotlivých prediktorů, a dále byl vytvořen samotný meta-prediktor, sestávající ze 2 skriptů, který na základě požadavků od uživatele vybere vhodný nástroj pro predikci struktury. Provedené testy hodnotí určité základní vlastnosti prediktorů, ale pro potřeby meta-prediktoru bych očekávala, že těchto testů bude provedeno více. Také jsem zde očekávala přehlednější zhodnocení jednotlivých testů. Vytvořený metaprediktor je funkční a umožňuje uživateli spouštět predikci struktury v jednotlivých prediktorech. Použité prediktory jsou spouštěny pod akademickou licenci.
8. **Využitelnost výsledků**

Vytvořený meta-prediktor je funkční a doporučuje uživateli jeden z existujících prediktorů na základě uživatelských požadavků a na základě znalostí o jednotlivých prediktorech z provedených testů. Podle mého názoru by ale muselo být provedeno daleko více testů, které by vedly k lepšímu ohodnocení jednotlivých nástrojů tak, aby mohl být meta-prediktor použitelný v praxi. Schází zde logické propojení návrhu datové sady, testování dostupných nástrojů a zakomponování zjištěných vlastností do výsledného meta-prediktoru.
9. **Otázky k obhajobě**
 - V tabulce 5.1 představujete 3 nejhorší predikce nástroje HH-suite. Nicméně predikce ostatních nástrojů pro tyto proteiny vykazují přibližně stejné, nebo ještě horší RMSD. Znamená to tedy, že predikce nástroje HH-suite vykazovaly vždy jedno z nejnižších RMSD?
 - Preferuje meta-prediktor některý z využívaných prediktorů?
10. **Souhrnné hodnocení** 68 b. uspokojivě (D)

Předložená diplomová práce sice splňuje všechny body zadání, ale jak z hlediska technické zprávy, tak i z hlediska realizačního výstupu je poněkud nedotažená. V technické zprávě postrádám především popis požadavků, které může uživatel zadávat a popis vlivu těchto požadavků na doporučený prediktor. V realizační části postrádám systematictější způsob testování jednotlivých nástrojů. Proto navrhuji hodnocení stupněm D.

Prohlášení: Uděluji VUT v Brně souhlas ke zveřejnění tohoto posudku v listinné i elektronické formě.

V Brně dne: 1. června 2016

.....
podpis