

Posudek oponenta diplomové práce

Student: Sumbalová Lenka, Bc.

Téma: Bioinformatický nástroj pro návrh disulfidických můstků v proteinové struktuře (id 18063)

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** 80 b. (B)

Prezentační úroveň technické zprávy je dobrá, zpráva je velmi dobře pochopitelná pro čtenáře a má logickou strukturu. Výjimku představuje kapitola 5, kde postrádám některé základní informace (bližší popis datové sady, analýza a zhodnocení dosažených výsledků).
5. **Formální úprava technické zprávy** 72 b. (C)

I po jazykové a typografické stránce se jedná o celkem kvalitní práci s výjimkou kapitoly 5, kde se objevuje větší množství překlepů a chybné odkazy na obrázky. Dále bych doporučila číslovat matematické vzorce, aby bylo možné se na ně v textu odkazovat.
6. **Práce s literaturou** 89 b. (B)

Výběr studijních pramenů je dobrý a převzaté prvky jsou v textu řádně odlišeny.
7. **Realizační výstup** 72 b. (C)

Výsledkem diplomové práce je funkční aplikace pro predikci vhodných pozic pro vytvoření disulfidických můstků v proteinech. Otázkou zůstává kvalita dosažených výsledků, protože provedené testy ukazují nízké procento úspěšnosti vyhledání nativních disulfidických můstků, přičemž celkový počet navržených (predikovaných) můstků je dost velký. Postrádám v práci nějakou analýzu tohoto problému, např. zda tento problém není způsobem filtrováním výsledků na základě kolizí.
8. **Využitelnost výsledků**

Práce se snaží zkombinovat různé známé přístupy pro návrh pozic pro vytvoření disulfidických můstků do vlastního nástroje. Bohužel provedené testy ukazují nízkou schopnost nástroje nalézt nativní disulfidické můstky. Proto se obávám, že nástroj bez dalších úprav v praxi použitelný není.
9. **Otázky k obhajobě**
 - Jak velká byla datová sada použitá pro testování nástroje? Kolik obsahovala proteinů a jaký byl celkový počet nativních disulfidických vazeb obsažených v těchto proteinech?
 - Můžete uvést, jaké počty navrhovaných dvojic pozic jsou na výstupu jednotlivých částí algoritmu zobrazených na obrázku 4.1 při použití vytvořené datové sady?
 - Uvažovala jste nad tím, proč bez filtrování výstupu na základě kolizí nástroj nalezne 96% nativních disulfid. můstků, zatímco po filtrování už pouze 64%?
10. **Souhrnné hodnocení** 78 b. dobře (C)

Předložená diplomová práce sestává z lehce nadprůměrné technické zprávy a funkčního programu pro predikci vhodných pozic pro tvorbu disulfidických můstků v proteinech. Otázkou ale zůstává kvalita výsledků vytvořeného nástroje, protože provedené testy nijak přesvědčivě neukazují vysokou kvalitu dosažených výsledků. Proto navrhuji hodnocení stupněm C.

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

V Brně dne: 1. června 2016

.....
podpis

