

I. IDENTIFIKAČNÍ ÚDAJE

Název práce:	Sampling-Based Motion Planning for Tunnel Detection in Protein Structures
Jméno autora:	Jindřich Durčák
Typ práce:	diplomová
Fakulta/ústav:	Fakulta elektrotechnická (FEL)
Katedra/ústav:	Katedra kybernetiky
Oponent práce:	RNDr. Barbora Kozlíková, Ph.D.
Pracoviště oponenta práce:	Fakulta informatiky, Masarykova univerzita, Brno

II. HODNOCENÍ JEDNOTLIVÝCH KRITÉRIÍ

Zadání	náročnější
<i>Hodnocení náročnosti zadání závěrečné práce.</i>	
Zvolené téma diplomové práce považuji za náročné nejen z pohledu návrhu a implementace prezentovaných algoritmů, ale zejména i z pohledu interdisciplinarity projektu. Student se musel seznámit s netriviálním množstvím informací z oblasti biochemie a bioinformatiky.	

Splnění zadání	splněno
<i>Posuďte, zda předložená závěrečná práce splňuje zadání. V komentáři případně uveďte body zadání, které nebyly zcela splněny, nebo zda je práce oproti zadání rozšířena. Nebylo-li zadání zcela splněno, pokuste se posoudit závažnost, dopady a případně i příčiny jednotlivých nedostatků.</i>	
Zadání bylo zcela splněno.	

Zvolený postup řešení	správný
<i>Posuďte, zda student zvolil správný postup nebo metody řešení.</i>	
Předložené algoritmy jsou dle mého názoru obecně správně zvoleny. Mám pouze drobné komentáře k některým specifickým krokům, které student zvolil. Z textu není zcela jasné, proč je třeba pro správnou funkčnost RRT algoritmu definovat povrchovou reprezentaci proteinu pomocí koulí (Algoritmus 2). Proč nestačí klasická reprezentace pomocí meshe? Další diskutabilní rozhodnutí je přidání kroku pro detekci koncových bodů (sekce 4.1.4). Obrázek 4.5 a) ukazuje, že i bez tohoto kroku dosahuje výsledný strom povrchu proteinu a přidané koule na povrchu pouze zvětšují hrdlo tunelu. Toto je viditelné i z výsledného porovnání s tunely spočtenými pomocí nástroje CAVER. Proč byl tedy tento krok zvolen? Dále bych měla dotaz ke konstrukci výsledné reprezentace tunelů pomocí sady koulí. Jak jsou určeny středy a poloměry těchto koulí? Do kterých uzlů stromu jsou koule umístěny? Student v práci zmiňuje, že zvolené řešení je značně závislé na iniciálním nastavení parametrů a i drobná změna může vést k diametrálně odlišným výsledkům. Jsou nastavení, která student zvolil, dostatečně robustní, aby algoritmus spolehlivě detekoval tunely v libovolných proteinech? Algoritmus pro výpočet tunelů v molekulových dynamikách detekuje tunely v jednotlivých snímcích a poté počítá jejich podobnost mezi snímky. Student zde zvolil práh podobnosti 50%, který byl empiricky odvozen ze studovaných dat. V sekci s výsledky je nicméně zmíněna pouze jediná dynamika. Z kolika simulací dynamik student tuto hodnotu odvodil? Pro dosažení kvalitnějších výsledků by bylo vhodné při výpočtu podobnosti vzít v úvahu rovněž pozice jednotlivých koulí tunelů – čím blíže je tunel povrchu proteinu, tím větší je pravděpodobnost, že se tunel odchýlí. To je dáno tím, že atomy při povrchu proteinu jsou mnohem více flexibilní než atomy blíže k centru molekuly.	

Odborná úroveň	B - velmi dobře
<i>Posuďte úroveň odbornosti závěrečné práce, využití znalostí získaných studiem a z odborné literatury, využití podkladů a dat získaných z praxe.</i>	
Student prokázal způsobilost nastudovat zvolenou problematiku a prezentovat ji v kompaktní a srozumitelné formě, která je očekávána od diplomové práce. Některá uvedená tvrzení jsou dle mého názoru příliš silná. Např. na straně 18 – protein function is directly determined by its structure – toto tvrzení by mělo být podloženo citací. Funkce proteinu je totiž pouze z části ovlivněna jeho strukturou. Roli hrají i další fyzikálně-chemické faktory. Dále obrázek 2.2 představující indukovaný model interakce proteinu a substrátu uvádí v popisku, že došlo ke změně aktivního místa. Tato změna však není	

pozorovatelná. Rovněž opodstatnění existence jednotlivých strukturních modelů proteinů na straně 25 (To make this research area a little clearer) není příliš přesvědčivé.

Při výčtu výzkumných oblastí, kde se studovaná problematika uplatňuje, student smíchal dohromady tyto oblasti (drug discovery, protein engineering) a přístupy, které se v nich používají (protein folding, tunnel detection).

Formální a jazyková úroveň, rozsah práce

B - velmi dobře

Posuďte správnost používání formálních zápisů obsažených v práci. Posuďte typografickou a jazykovou stránku.

Text práce je napsán velmi srozumitelnou formou a obsahuje pouze malé množství chyb a překlepů (např. str. 38 – is a article, would increases, str. 42 – the all proteins, str. 43 – leave, The algorithm also check).

V práci student poměrně často chybně pracuje s určitými a neurčitými členy, na čitelnost a srozumitelnost textu to však nemá zásadní vliv. Práce má velmi dobrou typografickou úpravu, opět pouze s minimem prohrěšků.

Výběr zdrojů, korektnost citací

A - výborně

Vyjádřete se k aktivitě studenta při získávání a využívání studijních materiálů k řešení závěrečné práce. Charakterizujte výběr pramenů. Posuďte, zda student využil všechny relevantní zdroje. Ověřte, zda jsou všechny převzaté prvky řádně odlišeny od vlastních výsledků a úvah, zda nedošlo k porušení citační etiky a zda jsou bibliografické citace úplné a v souladu s citačními zvyklostmi a normami.

Student vhodným způsobem a v dostatečné míře pracuje s literaturou. Za zmínku stojí pouze nedoplněné údaje u citace 34.

Další komentáře a hodnocení

Vyjádřete se k úrovni dosažených hlavních výsledků závěrečné práce, např. k úrovni teoretických výsledků, nebo k úrovni a funkčnosti technického nebo programového vytvořeného řešení, publikačním výstupům, experimentální zručnosti apod.

V závěrečných fázích textu mi chybí rychlostní srovnání navržených algoritmů s existujícím řešením CAVER. Z práce tedy není zcela zřejmé, co bylo cílem navržení alternativního řešení ke CAVERu. Toto by bylo vhodné v rámci obhajoby práce vyjasnit.

III. CELKOVÉ HODNOCENÍ, OTÁZKY K OBHAJOBĚ, NÁVRH KLASIFIKACE

Shrňte aspekty závěrečné práce, které nejvíce ovlivnily Vaše celkové hodnocení. Uveďte případné otázky, které by měl student zodpovědět při obhajobě závěrečné práce před komisí.

Student v rámci diplomové práce prokázal znalosti a schopnosti, které jsou na tento typ práce kladeny. Práce obsahuje veškeré náležitosti, má vhodně zvolenou strukturu a student v dostatečné míře detailu seznamuje jak s navrženými přístupy, tak s dosaženými výsledky. Oceňuji množství odvedené práce a pečlivost vypracování. Práce obsahuje pouze několik výše zmíněných nedostatků a nejasností, což ovlivňuje mé výsledné hodnocení. Otázky položené ve výše uvedených sekcích by bylo vhodné během obhajoby zodpovědět.

Předloženou závěrečnou práci hodnotím klasifikačním stupněm **B - velmi dobře**.

Datum: 5.6.2017

Podpis: