

## Posudek oponenta bakalářské práce

Jméno a příjmení uchazeče/ky: Jakub Telčer

Název práce: Detection of Similar Binding Sites in Protein Structure Databases

### A. Bodové hodnocení jednotlivých aspektů práce (označte právě jednu z možností)

1. Rozsah BP a její členění	
x	A - přiměřené, odpovídají charakteru BP a významu jednotlivých částí
	B - nevyrovnané, členění není logické n. rozsah jednotlivých částí nekoresponduje s jejich významem
	C - uspokojivé, rozsah některých částí nedostačuje
	<b>N - nedostatečné</b>

2. Odborná správnost	
	A - výborná, bez závažnějších připomínek
x	B - velmi dobrá, s ojedinělými drobnými závadami (nejasnost výkladu, chyby ve vzorcích nebo chemických názvech, nedokonalý popis metod nebo výsledků)
	C - uspokojivá, s čtenějšími drobnými závadami
	<b>N - nevyhovující, s hrubými chybami</b>

3. Uvedení použitých literárních a j. zdrojů	
x	A - bez připomínek, všechny převzaté údaje s citací zdroje, celkový počet citací odpovídá charakteru práce
	B - uspokojivé, s občasnými neobratnostmi zejm. v umístění odkazů, nebo s celkově nižším počtem citací
	C - s vážnějšími závadami, např. převažují "nestandardní" odkazy na učebnice, přednášky, webové stránky, nebo se ojediněle vyskytuje opominutí odkazu na zdroj převzatých dat
	<b>N - nevyhovující, velmi málo citací, ev. rysy plagiátu (časté opomíjení odkazu na zdroj převzatých dat, popř. opsání velkých částí textu)</b>

4. Jazyk práce	
x	A - výborný, práce je napsána čtivě a srozumitelně, bez závažnějších gramatických n. pravopisných chyb
	B - velmi dobrý, ojedinělé stylistické neobratnosti, gramatické n. pravopisné chyby
	C - uspokojivý, čtenější slohové neobratnosti, gramatické n. pravopisné chyby, ojediněle se vyskytují obtížně srozumitelné n. nejednoznačné formulace
	<b>N - nevyhovující, s četnými hrubými chybami</b>

5. Formální a grafická úroveň práce	
x	A - výborná, bez překlepů a chyb ve formátování
	B - velmi dobrá, ojedinělé chyby formátu citací, překlepy, chybějící zkratky apod.
	C - uspokojivá, s ojedinělými většími (např. vynechání stránky) nebo čtenějšími drobnými chybami
	<b>N - nevyhovující, s četnými hrubými chybami</b>

Případný slovní komentář k bodům 1. až 5.:

Práce je obecně zpracována srozumitelně a čtivě. Jisté výhrady bych však měl k sekci 2.1.4 (Query and Putative Binding Site Superposition):

- Tato sekce obsahuje větu "Finding such rotation and translation is not as difficult [...] and is briefly covered in section 2.1.4.", protože se však tato věta nachází právě v sekci 2.1.4, tak není jasné, kam přesně věta čtenáře odkazuje.
- Sekce 2.1.4 obsahuje podsekcí "Finding the Optimal Mapping", ta však vůbec nepopisuje způsob, jak získat mapování, pouze zavádí funkce  $\Phi$ , která je při hledání optimálního mapování dále použita.
- Na tuto funkci se odkazuje podsekcí "Iterative Closest Point" za použití chybné reference: "the mapping function  $\Phi$  (defined as in ??)".

Pokud jde o prezentované výsledky, práce srovnává předkládanou metodu s jinými metodami, například v sekci 3.1.1 uvádí: "The performance on the NMR dataset is directly comparable with the current state-of-the-art methods, such as FuzCav. It even outperforms RAPMAD, PocketMatch, Shaper, VolSite, ProBis, KRIPO, IsoMif and all other interaction based methods." Neobsahuje však žádné tabulky nebo grafy, ze kterých by toto hodnocení bylo možné přímo vyčíst.

V textu je předkládaná metoda srovnávána s konkurenčními metodami i z hlediska doby běhu. Vzhledem k tomu, že testování zřejmě proběhlo na jiném HW, není toto srovnání pravděpodobně až tak moc vypovídající.

Obsahuje-li práce i vlastní výsledky uchazeče/ky (nejsou povinnou součástí práce), pak prosíme o Vaše stanovisko k následujícímu:

Jsou řádně stanoveny a vysvětleny cíle experimentu? Ano.

Je množství experimentů adekvátní k cílům? Ano.

Je dokumentace výsledků dostačující? Ano.

Jsou výsledky diskutovány a zasazeny do kontextu existující literatury? Spíše ano.

Případný další slovní komentář k výsledkům autora:

Předkládaná metoda je pojata jako proof-of-concept a nemám k ní vážnějších námitek.

## B. Obhajoba

### ***Dotazy k obhajobě (povinná část posudku)***

Byla metoda testována i s jinými parametry, než s těmi uvedenými v práci? Pokud ano, jak velký měly tyto parametry vliv na dosažené výsledky nebo dobu běhu?

Jak přesně byla metoda srovnávána s konkurenčními metodami? Existují k tomuto srovnání nějaké grafy nebo tabulky?

## C. Celkový návrh

Práci **doporučuji** k přijetí k dalšímu řízení: **ANO** / ~~NE~~

Navrhovaná celková klasifikace **Výborně**

Datum vypracování posudku: 15.6.2024

Jméno a příjmení, podpis oponenta (SIS): Jakub Galgonek