

Hodnocení vedoucího bakalářské práce

Autor/autorka práce: **Vít Kovarovič**

Název práce: **Návrh a implementace open source knihovny pro kompresi molekulárních trajektorií**

Student na tématu aktivně pracoval po celé dva semestry, až na výjimky pravidelně docházel na konzultace a průběžně zapracovával mnou nadnesené připomínky, ačkoliv někdy mohlo být průběžně odvedené práce o trochu více. Student prokázal schopnosti porozumění vědeckému textu a dokázal se velice rychle zorientovat v komplexním nedokumentovaném zdrojovém kódu, který provádí netriviální geometrické výpočty. Velice si také cením toho, že student průběžně s kódem psal i automatické testy, které často umožnily včas detekovat možné problémy.

Práce má za cíl implementovat již dříve publikovanou metodu pro kompresi molekulárních trajektorií. Student sice v kapitole věnované popisu této metody občas parafrázoval některá tvrzení z původního článku, ale kde je to možné, vždy přidal citaci. Navíc je z textu patrné, že student konceptům původního článku porozuměl, což bylo nezbytné pro realizaci práce. Zdrojový kód implementované knihovny je v mnoha ohledech podobný tomu v původní prototypové implementaci, což je z velké části způsobené tím, že obě tyto implementace mají vést na totožné výsledky. Nicméně, student sám identifikoval některé nedostatky, či možná zlepšení a ty implementoval a popsal v textu. Student také řeší licenční ujednání a možnosti integrace knihovny do dalších programovacích jazyků, což je věc, které nebyla v původní implementaci věnována žádná pozornost.

Práce je kvalitní jak po formální, tak po obsahové stránce. Výsledný software je mnohem přehlednější, než původní implementace, což do budoucna umožní jeho další rozšíření. Dá se také jednoduše integrovat do jazyka Python, což umožní jeho využití širší vědeckou komunitou. Výhrady bych měl pouze ke kapitole popisující experimentální výsledky. Jelikož tato část práce vznikala na poslední chvíli, je zde popsán experiment docela limitovaný. Z prezentovaných výsledků sice určité závěry vyvodit lze, nicméně by tyto závěry mohly být ověřeny na více datech.

Ačkoliv ještě není knihovna zveřejněná, věřím, že studentova práce několikanásobně zvýšila využitelnost implementované metody v praxi. Do budoucna bude také mnohem jednodušší do této knihovny doplňovat novou funkcionalitu, což bylo u původní prototypové implementace takřka nemyslitelné.

Zadání bylo splněno ve všech bodech bez výhrad.

Navrhuji hodnocení známkou **výborně** a práci doporučuji k obhajobě.

V Plzni 22. 5. 2023

Ing. Jan Dvořák