

Posudek práce
předložené na Přírodovědecké fakultě JU

- | | |
|---|---|
| ☒ posudek vedoucího | ☐ posudek oponenta |
| ☒ bakalářské práce | ☐ diplomové práce |

Autor/ka:	Matyáš Suchý
Název práce:	Molekulární simulace proteinů
Studijní program a obor:	Biologie
Rok odevzdání:	2023

Jméno a tituly vedoucího:	RNDr. Zdeněk Futera, Ph.D.
Pracoviště:	Katedra fyziky
Kontaktní e-mail:	zfutera@prf.jcu.cz

Odborná úroveň práce:

- ☐ vynikající ☒ velmi dobrá ☐ průměrná ☐ podprůměrná ☐ nevyhovující

Věcné chyby:

- ☐ téměř žádné ☒ vzhledem k rozsahu přiměřený počet ☐ méně podstatné četné ☐ závažné

Výsledky:

- ☐ originální ☒ původní i převzaté ☐ netriviální kompilace ☐ citované z literatury ☐ opsané

Rozsah práce:

- ☐ veliký ☒ standardní ☐ dostatečný ☐ nedostatečný

Grafická, jazyková a formální úroveň:

- ☐ vynikající ☒ velmi dobrá ☐ průměrná ☐ podprůměrná ☐ nevyhovující

Tiskové chyby:

- ☐ téměř žádné ☒ vzhledem k rozsahu a tématu přiměřený počet ☐ četné

Celková úroveň práce:

- ☐ vynikající ☒ velmi dobrá ☐ průměrná ☐ podprůměrná ☐ nevyhovující

Slovní vyjádření, komentáře a připomínky vedoucího:

Předkládaná bakalářská práce je věnována úvodu do problematiky molekulárních simulací proteinů z pohledu studenta nefyzikálních oborů. V práci jsou postupně rozebrány typické kroky, které se při simulacích biomolekul provádějí, a to od vyhledání proteinové struktury v online databázi, její vizualizaci a následnou parametrizaci, až po samotné základní simulační techniky jako je strukturní optimalizace, molekulární dynamika a vybrané analýzy. Práce je doplněna praktickými ukázkami jednotlivých kroků na proteinu aktin, jehož struktura je volně dostupná. Text tak může sloužit jako jakýsi návod či úvodní seznámení s počítačovými simulacemi biomolekul a minimálně v mé skupině bude k tomuto účelu nadále používán.

Přestože práce nepředstavuje žádný vědecký či výzkumný projekt, přesahuje svojí povahou a provedením pouhou rešerši. Student se musel během jednoho roku seznámit s relativně velkým množstvím informací a postupů, např. s linuxovými operačními systémy a strukturními datovými formáty, s různými vizualizačními programy, a hlavně se simulačními balíky Amber a Gromacs a práce s nimi. Tyto nástroje si musel vyzkoušet a osvojit do takové míry, aby je byl schopen popsat a porovnat v předkládané práci. Tím jednoznačně prokázal svoji schopnost provádět samostatnou odbornou činnost, a proto doporučuji tuto práci k obhajobě. Vzhledem k velmi dobré úrovni práce, a to jak po stránce formální, tak věcné, navrhuji její ohodnocení stupněm výborně.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

Jaké další texty (nad rámec této práce), návody, tutoriály, nebo instruktážní videa byste doporučili případným zájemcům o molekulární simulace, kteří by se této problematice rádi věnovali?

Práci

☒ doporučuji
☐ nedoporučuji
uznat jako bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

☒ výborně ☐ velmi dobře ☐ dobře ☐ neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího: