

**POSUDEK BAKALÁŘSKÉ PRÁCE**

|                                                        |                                                                                                                                                                                                                                              |
|--------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <i>Jméno a příjmení studenta:</i>                      | <b>Kristýna Šilhavá</b>                                                                                                                                                                                                                      |
| <i>Studijní obor:</i>                                  | <b>Biofyzika a zdravotnická technika</b>                                                                                                                                                                                                     |
| <i>Vedoucí bakalářské práce:</i>                       | <b>RNDr. Milan Předota, Ph.D.,<br/>Ústav fyziky a biofyziky PřF JU</b>                                                                                                                                                                       |
| <i>Katedra:</i>                                        | <b>Laboratorních metod a informačních systémů</b>                                                                                                                                                                                            |
| <i>Název bakalářské práce:</i>                         | <b>Software pro molekulární dynamiku</b>                                                                                                                                                                                                     |
| <br>                                                   |                                                                                                                                                                                                                                              |
| <i>Volba tématu:</i>                                   | <ol style="list-style-type: none"><li>1. Mimořádně aktuální</li><li>2. Aktuální pro danou oblast</li><li><b>3. Užitečné a prospěšné</b></li><li>4. Standardní úroveň</li><li>5. Neobvyklé</li></ol>                                          |
| <i>Cíl práce a jeho naplnění:</i>                      | <ol style="list-style-type: none"><li>1. Vhodně zvolený cíl, který byl naplněn</li><li><b>2. Vhodně zvolený cíl, který byl částečně naplněn</b></li><li>3. Vhodně zvolený cíl, který nebyl naplněn</li><li>4. Nevhodně zvolený cíl</li></ol> |
| <i>Struktura práce:</i>                                | <ol style="list-style-type: none"><li>1. Originální – zdařilá</li><li><b>2. Logická – systémová</b></li><li>3. Logická – tradiční</li><li>4. Pro dané téma tradiční</li><li>5. Pro dané téma nevhodná</li></ol>                              |
| <i>Práce s literaturou:</i>                            | <ol style="list-style-type: none"><li>1. Vynikající, použity dosud neběžné prameny</li><li><b>2. Velmi dobrá, použity nejnovější dostupné prameny</b></li><li>3. Dobrá, běžně dostupné prameny</li><li>4. Slabá, zastaralé prameny</li></ol> |
| <i>Vybavení práce (data, tabulky, grafy, přílohy):</i> | <ol style="list-style-type: none"><li>1. Mimořádné, funkční</li><li><b>2. Velmi dobré, funkční</b></li><li>3. Odpovídá nutnému doplnění textu</li><li>4. Nedostačující</li></ol>                                                             |
| <i>Přínosy bakalářské práce:</i>                       | <ol style="list-style-type: none"><li>1. Originální, inspirativní názory</li><li>2. Ne zcela běžné názory</li><li><b>3. Vlastní názor argumentačně podpořený</b></li><li>4. Vlastní názor chybí</li></ol>                                    |
| <i>Uplatnění bakalářské práce v praxi a ve výuce:</i>  | <ol style="list-style-type: none"><li><b>1. Práci lze uplatnit v praxi</b></li><li><b>2. Práci lze uplatnit ve výuce</b></li><li>3. Vhodná pro publikování</li><li>4. Práci nelze příliš využít ani v praxi ani při výuce</li></ol>          |
| <br>                                                   |                                                                                                                                                                                                                                              |
| <i>Formální stránka:</i>                               | <ol style="list-style-type: none"><li><b>1. Výborná</b></li><li>2. Velmi dobrá</li><li>3. Přijatelná</li><li>4. Nevyhovující</li></ol>                                                                                                       |



Jazyková stránka:

1. Stylistika **a) výborná**  
b) velmi dobrá  
c) dobrá  
d) nevyhovující
2. Gramatika **a) výborná**  
b) velmi dobrá  
c) dobrá  
d) nevyhovující

Zásadní připomínky k bakalářské práci:

1. **nemám**
2. mám tyto:

Další hodnocení:

Téma práce bylo motivováno mou vědeckou prací v programu Gromacs na zejména anorganických systémech a spoluprací s kolegy modelujícími biomolekuly v programu Amber. Cílem práce bylo porovnat oba programy, vyzdvihnout jejich přednosti a doporučit vhodnější z nich pro konkrétní úkoly. Zatímco program Gromacs používám a rámci něj jsem seznámil studentku se základy molekulárních simulací, program Amber nepoužívám a studentka byla odkázána na internetové zdroje, manuály a konzultace ing. Ondřeje Kroutila – kterému za ně děkuji.

Úvodní kapitola BP velmi vhodně seznamuje s problematikou, čtvrtá kapitola pak systematicky popisuje postup řešení dílčích úkolů v obou programech. Oceňuji zejména prakticky velmi přínosnou část 4.2.2. věnovanou topologickým souborům a možnostem jejich generování ze souřadnicových souborů – což je zásadní krok potřebný pro provádění simulace. Studentka shrnula možnosti i omezení (zejména v případě Gromacsu) automatické tvorby topologie i způsob konverze topologických souborů z Amberu do Gromacsu.

Studentka se při řešení práce musela seznámit s mnoha novými oblastmi – molekulární modelováním, prací v textovém i grafickém okně na vzdáleném linuxovém stroji, prací s programy a dokumentací v angličtině. Vyzdvihuji, že všechny pojednávané funkce obou programových balíků jsou popisovány na základě práce studentky s jednotlivými programy a utilitami na popsání modelových systémů i dalších, nejedná se jen o překlad manuálů či tutoriálů. Jedině tak bylo možné objektivně zhodnotit možnosti obou programů a narazit i na omezení/výhody nedokumentované v manuálech programů.

Studentka po celou dobu řešení bakalářské práce pilně pracovala a věnovala práci nadstandardně času. Ze stanovených cílů jsme upustili od zkoumání vhodnosti obou programů pro modelování povrchů, protože se ukázalo, že tato část by vedla k dalšímu zvyšování náročnosti a rozsahu již tak obsáhlé BP. Práce naopak oproti původním cílům podrobněji diskutuje tvorbu topologií.

Práce rozhodně může posloužit zájemcům o molekulární modelování k orientaci v práci s programy Gromacs a Amber. Výjimečná je právě souběžným popisem obou programů a postupem řešení úkolů v nich.

Práce splňuje základní požadavky kladené na tento typ prací, a proto ji doporučuji k ústní obhajobě:

1. **ano**
2. ne

Navrhovaná klasifikace:

1. **výborně**
2. velmi dobře
3. dobře
4. nevyhově

Datum: 7. 6. 2011

Podpis vedoucího bakalářské práce.....