

POSUDEK BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

<i>Jméno a příjmení studenta:</i>	Jan Konečný
<i>Studijní obor:</i>	Biofyzika a zdravotnická technika
<i>Vedoucí bakalářské práce:</i>	RNDr. Milan Předota, Ph.D.
<i>Katedra:</i>	Ústav fyziky a biofyziky PŘF JU
<i>Název bakalářské práce:</i>	Počítačové zpracování tomografických dat
 Volba tématu:	 1. Aktuální 2. Užitečné a prospěšné 3. Standardní 4. Neobvyklé
 Cíl práce a jeho naplnění:	 1. Vhodně zvolený cíl, který byl naplněn 2. Vhodně zvolený cíl, který byl částečně naplněn 3. Vhodně zvolený cíl, který nebyl naplněn 4. Nevhodně zvolený cíl
 Struktura práce:	 1. Originální – zdařilá 2. Logická – systémová 3. Logická – tradiční 4. Pro dané téma tradiční 5. Pro dané téma nevhodná
 Práce s literaturou:	 1. Vynikající, použity dosud neběžné prameny 2. Velmi dobrá, použity nejnovější dostupné prameny 3. Dobrá, běžně dostupné prameny 4. Slabá, zastaralé prameny
 Vybavení práce (data, tabulky, grafy, přílohy):	 1. Mimořádné, funkční 2. Velmi dobré, funkční 3. Odpovídá nutnému doplnění textu 4. Nedostačující
 Přínosy bakalářské práce:	 1. Originální, inspirativní názory 2. Ne zcela běžné názory 3. Vlastní názor argumentačně podpořený 4. Vlastní názor chybí
 Uplatnění bakalářské práce v praxi a ve výuce:	 1. Práci lze uplatnit v praxi 2. Práci lze uplatnit ve výuce 3. Práci nelze příliš využít ani v praxi ani při výuce
 Formální stránka:	 1. Výborná 2. Přijatelná 3. Nevyhovující

Jazyková stránka:

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

Zásadní připomínky k bakalářské práci:

1. **nemám**
2. mám tyto:

.....
.....
.....

Další hodnocení:

Student pojednal téma zpracování tomografických dat komplexně, od fyzikálních principů jednotlivých zobrazovacích technik, přes hardware a po software na počítačové zpracování 3D dat. Oceňuji jeho aktivitu, kdy si sám dojednal návštěvy na několika klinických pracovištích za účelem získání informací, referencí na zdroje informací, zjištění používaného HW a SW na pracovištích a pořízení fotografií použitých v přílohách BP.

Práce se velmi dobře čte po stránce odborné i jazykové, má jasnou a logickou strukturu. Příkladná je i práce s literaturou, jasné oddělování citací s uvedením zdrojů od vlastního textu studenta.

K části věnované SPM jsem měl během tvorby bakalářské práce částečné výhrady a musel jsem upozornit na několik faktických nepřesností, které byly následně odstraněny.

Celkově student pracoval velmi samostatně a určitě prokázal schopnost zorientovat se ve zvolené problematice a zpracovat ji.

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. nevyhověl

Otázka k ústní obhajobě práce:

.....
.....
.....

Datum: 5.6. 2011

Podpis vedoucího bakalářské práce.....



POSUDEK BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

Jméno a příjmení studenta: **Kristýna Šilhavá**
Studijní obor: **Biofyzika a zdravotnická technika**
Vedoucí bakalářské práce: **RNDr. Milan Předota, Ph.D.,
Ústav fyziky a biofyziky PŘF JU**
Katedra: **Laboratorních metod a informačních systémů**
Název bakalářské práce: **Software pro molekulární dynamiku**

Volba tématu:

1. Mimořádně aktuální
2. Aktuální pro danou oblast
- 3. Užitečné a prospěšné**
4. Standardní úroveň
5. Neobvyklé

Cíl práce a jeho naplnění:

1. Vhodně zvolený cíl, který byl naplněn
- 2. Vhodně zvolený cíl, který byl částečně naplněn**
3. Vhodně zvolený cíl, který nebyl naplněn
4. Nevhodně zvolený cíl

Struktura práce:

1. Originální – zdařilá
- 2. Logická – systémová**
3. Logická – tradiční
4. Pro dané téma tradiční
5. Pro dané téma nevhodná

Práce s literaturou:

1. Vynikající, použity dosud neběžné prameny
- 2. Velmi dobrá, použity nejnovější dostupné prameny**
3. Dobrá, běžně dostupné prameny
4. Slabá, zastaralé prameny

Vybavení práce (data, tabulky, grafy, přílohy):

1. Mimořádné, funkční
- 2. Velmi dobré, funkční**
3. Odpovídá nutnému doplnění textu
4. Nedostačující

Přínosy bakalářské práce:

1. Originální, inspirativní názory
2. Ne zcela běžné názory
- 3. Vlastní názor argumentačně podpořený**
4. Vlastní názor chybí

Uplatnění bakalářské práce v praxi a ve výuce:

- 1. Práci lze uplatnit v praxi**
- 2. Práci lze uplatnit ve výuce**
3. Vhodná pro publikování
4. Práci nelze příliš využít ani v praxi ani při výuce

Formální stránka:

- 1. Výborná**
2. Velmi dobrá
3. Přijatelná
4. Nevyhovující

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 balíčků jsou popisovány na základě práce studentky s jednotlivými programy a utilitami na popsáných modelových systémech 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. nevyhověl

Datum: 7. 6. 2011

Podpis vedoucího bakalářské práce.....