

POSUDEK BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

Jméno a příjmení studenta: Kristýna Šilhavá

Studijní obor: Biofyzika

Oponent bakalářské práce: Mgr. Michal Kutý, PhD.

Katedra:

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:

Bakalářská práce Kristýny Šilhavé s názvem „Software pro molekulární dynamiku“ je zaměřena na popis a porovnání dvou nejpoužívanějších softwarových balíčků určených pro molekulárně dynamické studie, Gromacsu a Amberu. Toto téma je aktuální, neboť uvedené *in silico* metody nacházejí uplatnění v moderním výzkumu při simulacích a interpretacích experimentálně náročných studií.

Bakalářská práce v celkovém rozsahu 71 stran je napsána poměrně jasně a srozumitelně a je logicky členěna na standardní části.

V první polovině práce jsou stručně popsány matematicko-fyzikální základy molekulárně dynamických metod, druhá polovina je věnována vlastní práci, kde je popsán způsob zadávání vstupních parametrů pro přípravu výpočtů a analýzy výsledných dat. Na třech modelových systémech, které jsou standardně uváděny v příručkách k uvedeným programům, byla provedena příprava a spuštění dynamických simulací.

Přínos práce spatřuji především v diskuzní části práce a v jejím závěru, kde oceňuji poměrně podrobný přehled kladů i nedostatků obou studovaných softwarových nástrojů.

Uvedená práce neobsahuje zásadní faktické či formální nedostatky, nicméně chtěl bych mimo jiné upozornit na překlepy (zřejmě nebyla použita korekce češtiny), problémy s formátováním textu a především stylistickou úroveň v úvodní a metodické části, nevhodně zvolený font u výpisu vstupních souborů a také nesprávně přeložené odborné termíny (např. solut, oktahedron, sdružení biologických makromolekul, strukturální interakce, defaultní aj.).

Bakalářská práce nebyla publikována v odborné literatuře, nicméně některé kapitoly mohu doporučit při výuce základních dynamických studií.

Práci doporučuji k obhajobě a navrhuji stupeň hodnocení „velmi dobře“.

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

1. ano
2. ne

- 3. dobře
- 4. nevyhověl

Otázka k ústní obhajobě práce:

V bakalářské práci byla uvedena pouze příprava a spuštění dynamických simulací na třech modelových systémech bez následných analýz výsledných dat. Předpokládám, že byla provedena také finální analýza dynamických simulací a porovnání výsledků simulací i rychlostí výpočtů obou softwarových nástrojů. Můžete i tyto výsledky alespoň stručně prezentovat u obhajoby?

Datum:.....7.6.2011...

Podpis oponenta bakalářské práce.....

- Podpis oponenta bakalářské práce:
- 1. dobře
 - 2. dobře
 - 3. dobře
 - 4. nevyhověl

Otázka k ústní obhajobě práce:

V bakalářské práci byla uvedena pouze příprava a spuštění dynamických simulací na třech modelových systémech bez následných analýz výsledných dat. Předpokládám, že byla provedena také finální analýza dynamických simulací a porovnání výsledků simulací i rychlostí výpočtů obou softwarových nástrojů. Můžete i tyto výsledky alespoň stručně prezentovat u obhajoby?

Datum:.....7.6.2011...

Podpis oponenta bakalářské práce.....