

Posudek školitele bakalářské práce  
“Počítačové studium skládání proteinů na zjednodušených modelech”  
Jakuba Nierostka

Předložená práce popisuje studium skládání (velmi) zjednodušených modelů proteinů pomocí metod statistické termodynamiky a to od návrhu modelů a jejich parametrizace, přes metody molekulové dynamiky, hamiltonovského Monte Carla a simulovaného žíhání, jejich implementaci a testování, až po provedení a vyhodnocení simulací několika instancí modelu odvozených od skutečných proteinů. Jako školitel jsem chtěl, aby si kandidát veškeré tyto fáze zkusil sám a zcela od počátku, včetně různých slepých uliček, tak jak je to v originální vědecké práci běžné. Pan Jakub Nierostek veškeré tyto úlohy úspěšně a samostatně vyřešil a prokázal schopnost originálních nápadů i kritického myšlení nezbytných pro vědeckou práci. Na druhou iteraci konstrukce a parametrizace modelů zahrnujících všechny páry aminokyselin a lepší popis sekundární struktury již nezbylo dost času a zůstala rozpracovaná, ale i tak považuji objem práce za zcela dostatečný a logicky uzavřený. Pokud má školitel navrhnout známku, navrhuji hodnotit předloženou práci výborně.



Filip Uhlík  
7. 7. 2021