

Posudok školiteľa bakalárskej práce

“Počítačové simulácie fluorescenčnej korelačnej spektroskopie”

študenta Jakuba Kubečku

Predložená bakalárska práca popisuje simulácie difúzie makromolekúl v zriedenom roztoku a predstavuje vyhodnotenie dát pre experimentálnu metódu FCS. Jedná sa o relatívne mladú metódu na štúdium difúzie fluorescenčne značených molekúl.

Priamym výstupom práce je stredné kvadratické posunutie (MSD) a FCS autokorelačná funkcia $G(t)$, z ktorej autor následne počíta zdanlivé MSD* postupom bežným pri vyhodnocovaní experimentálnych dát. Tento postup predstavuje istú aproximáciu, a porovnaním MSD s MSD* autor sleduje, k akej systematickej chybe dochádza pri použití danej aproximácie v rôznych situáciách. Vzhľadom k stochastickému charakteru simulácie a z nej získaných dát kladie dôraz na štatistické spracovanie výsledkov, aby bolo možné odlíšiť systematické ochýlky od náhodných. Závěry práce môžu mať zaujímavé dôsledky pre vyhodnotenie experimentálnych dát, z ktorých je možné získať MSD*, ale nie je možné priamo získať MSD, ani jednoduchým spôsobom overiť predpoklady vyššie zmienenej aproximácie.

V rámci práce sa autor oboznámil s technickými aspektmi molekulových simulácií, ktoré vykonával v open-source programe ESPResSo. Oboznámil sa tiež s metodikou simulácií a so štatistickou analýzou simulačných dát. Vďaka tomu sa mu podarilo odhaliť chybu v simulačnom programe, ktorá v extrémnych situáciách môže viesť na nefyzikálne výsledky. Predpokladáme, že výsledky prezentované v tejto práci po rozšírení a doplnení o ďalšie simulované systémy sa stanú základom budúcej publikácie.

Z pohľadu školiteľa by som rád vyzdvihol Jakubovu schopnosť samostatne pracovať a riešiť technické i metodické problémy spojené so simuláciami. Za povšimnutie stojí i kreatívne pojmávanie obálky práce.

Na základe vyššie uvedeného si dovoľím navhnúť hodnotenie práce známkou výborný.

Peter Košovan, 2.6.2015