

## Posudek oponenta bakalářské práce

Autor práce: Jakub Nierostek  
Název práce (rok): Počítačové studium skládání proteinů na zjednodušených modelech (2021)  
Pracoviště: Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy v Praze  
Vedoucí práce: doc. RNDr. Filip Uhlík, Ph.D.  
Oponent: doc. RNDr. Jan Jirsák, Ph.D. (PřF UJEP v Ústí nad Labem)

Úvodem svého posudku bych si dovolil upozornit na skutečnost, že vycházím z textu práce, který mi na mou žádost zaslal vedoucí práce doc. Uhlík dne 6. července 2021, neboť odevzdaná verze mi oficiálními kanály zpřístupněna nebyla. Nemám sebemenší důvod se domnívat, že se uvedené verze jakkoli liší, nicméně z formálních důvodů jsem považoval za vhodné na uvedené upozornit.

Nyní již k samotné práci s názvem „Počítačové studium skládání proteinů na zjednodušených modelech“, ve které autor Jakub Nierostek představuje problematiku modelování sbalování proteinů a popisuje své vlastní výpočty k tomuto procesu pomocí zhrubených modelů. Téma práce je zajímavé a aktuální. Autor si k řešení problémů vybral vhodné metody, aplikoval je v souladu se stavem poznání a o výsledcích podal zprávu způsobem odpovídajícím zásadám vědecké komunikace. Dojem z práce mám veskrze pozitivní, výhrady pouze drobné.

Členění práce je logické a přehledné, obsah a rozsah jednotlivých kapitol je vyvážený. V Úvodu autor nenásilně představuje problematiku struktury proteinů a jejich sbalování, bez zbytečných odboček popisuje termodynamické ukazatele procesu a kapitolu zakončí přehlednou rešerší, která je vyloženě napínavá (což jsem netušil, že kdy o jakékoli rešerši prohlásím). Ve druhé kapitole autor věcně představuje základní zhrubené modely pro popis proteinů. Ve třetí kapitole jsou popsány stručné základy statistické termodynamiky a simulačních metod využívaných autorem. Ve čtvrté kapitole autor popisuje svou implementaci výše zmíněných simulačních metod – zde je velmi zajímavé použití hash tabulky pro hledání sousedů. V páté kapitole jsou uvedeny výsledky s četným využitím kvalitně provedené vizualizace. Závěr stručně shrnuje celou práci a nastiňuje budoucí vývoj. Literatura sestává vesměs z kvalitních a relevantních zdrojů citovaných dle zvyklostí oboru. Musím říci, že jsem při čtení práce obdivoval autorův styl, kdy poměrně komplexní problematiku bez zbytečných odboček zaostří až k vlastním výsledkům, aniž by ve čtenář ztratil nebo měl pocit, že něco podstatného schází. Celá práce působí velice kompaktním, střízlivým a věcným dojmem. Každá její část slouží celku a podepírá hlavní téma – u bakalářské práce nevídaná integrita.

Ze slibovaných drobných výhrad uvedu např. to, že Protein Data Bank by měla být citována jako literární zdroj spíše než jako poznámka po čarou a že by odkaz na ni měl být přidán i do obrázku 1.3 – tam by se též slušelo jmenovitě pochválit použitý vizualizační nástroj, též nejlépe bibliografickou citací. Poslední odstavec podkapitoly 1.2 obsahuje poměrně závažná sdělení, která by si též zasloužila řádně ocitovat. V rešerši bych se já osobně zdráhal použít přívlastek „ab initio“ pro metody využívající Lennard-Jonesův potenciál apod. Konec str. 6: „míra schody“ – jediný překlep, který jsem zachytil. Dále si dovoluji autora upozornit, že v české literatuře se používá desetinná čárka, jakkoli je to pro nás modeláře bolestné. Rovněž autorem použité značení uzavřeného intervalu odpovídá spíše anglofonnímu prostředí, ale nejsem matematik. Citace [14] je neúplná – našel jsem jako preprint na arXiv.org, lze citovat pomocí kódu/adresy. Citace [18] je nedostatečná – u webu je nutné ještě uvést alespoň datum přístupu, to je úplné minimum. Uvedené výhrady jsou skutečně marginální a nijak nesnižují přínos práce.

Na studenta mám v rámci obhajoby dvě otázky:

1. Je z Vámi použitých modelů možné získat informaci o entalpických a entropických změnách při sbalování?
2. Budete v práci pokračovat?

Závěrem konstatuji, že předkládaná bakalářská práce Jakuba Nierostka „Počítačové studium skládání proteinů na zjednodušených modelech“ vyhovuje všem požadavkům na takové dílo kladené. Práci **doporučuji k obhajobě** a navrhuji ji hodnotit klasifikačním stupněm „výborně“.

7. 7. 2021 v Mělníku

doc. RNDr. Jan Jirsák, Ph.D.

