

POSUDEK OPONENTA DIPLOMOVÉ PRÁCE

Autor práce: Bc. Klára Stefanová

Název práce: Vliv parametrů prostředí na poškození plasmidu DNA ionizujícím zářením

Práce se zabývá vlivem parametrů prostředí poškození plasmidu DNA pomocí počítačových simulací. Práce obsahuje řadu autorčiných originálních výsledků. Vytvořené zdrojové kódy jsou zveřejněné na úložišti. Technická úroveň odvedené práce, je na vysoké úrovni. Vytvořené modely plasmidů a zdrojové kódy představují velký přínos pro komunitu v oboru. Chtěl bych také vyzdvihnout, že se autorce podařilo dotáhnout do konce výpočty výtěžků v Geant4-DNA včetně chemické fáze. Každý jednotlivý krok, vygenerování struktur, zjemnění, vytvoření pdb souborů, a následné využití ve výpočtech s Geant4, obsahuje řadu úskalí, které se autorce podařilo úspěšně překonat.

Jazykově je práce solidní, obsahuje zanedbatelné množství pravopisných chyb a překlepů ("Výtežky" v nadpise 3.4.1, „koncetrace“ v popiscích Obr. 3.3 až 10, „byla vyvinula aplikace“ v první větě sekce 3.3). Na straně 31 před tabulkou 2.6 se píše, že bylo simulované 2000 primárních částic, což se mi zdá málo. V tabulce 2.7 se pro protony uvádí 20000. Přesto je první část práce i s výsledky je slušně napsaná. Občas se vyskytují drobné nedostatky ve formátování, jako občasné přetékání řádků (Např. str 46, nadpis 3.4.1).

Bohužel, diskuze a závěr patří k slabším místům celé práce. Místy je těžko srozumitelná, a ani po trojím přečtení jsem si u některých tvrzení nebyl jistý, jestli chápu, co chce říci. Obrázky 4.1 a 4.2 mají velmi malé popisky os, které jsou téměř nečitelné. Nechápu proč, když ostatní obrázky v práci mají adekvátní velikost písma. Podkapitola 4.2 diskutuje autorčiny problémy s výpočty, s nedostatkem licencí apod., což je zajímavé, ale chybí mi obsáhlejší pojednání o problémech korekčního mechanismu. Druhý odstavec jen letmo zmíní, že něco nefungovalo, ale nedostatečně vysvětluje co a co mohlo být příčinou. V diskuzi se také často opakují věci, které logicky patří do Metod nebo Výsledků (např. první dva odstavce 4.3, str. 56).

Diskuze k Obr 4.3 (str. 59) je podivná, protože vůbec neodpovídá datům v něm. Autorka tvrdí, že rozdíl mezi sadami dat nepůsobí velkou chybou, přitom v Obr. 4.3 jsou původní hodnoty asi pětikrát menší než nové. V případě 5 MeV (Obr. 5.3b) autorka píše o velké odchylce, a přitom jsou body pro 5 MeV pro obě sady téměř totožné.

Srovnání s experimenty si představuji jinak (4.4.1, str. 60). Autorka se srovnání svých výpočtů s experimenty vyhnula. Ač jsou v druhé kapitole jsou experimentální data uvedena, pro účel srovnání se simulacemi, srovnatelné výsledky práce neobsahuje (simulace byly pro energie protonů pod 10 MeV, experimenty pro 15, 20 a 30 MeV). Autorka přesto tvrdí, že „Při porovnání výsledků experimentů, které bylo možné použít, bylo zjištěno, že simulací stanovené výsledky jsou třikrát až desetkrát nižší. Toto zjištění podrobíme dalšímu zkoumání.“ Co s čím a jak autorka srovnávala? Pro které parametry byly simulace třikrát až desetkrát nižší? Byly provedeny simulace pro 20 a 30 MeV a byly z práce vynechány, nebo se autorka pokusila extrapolovat ze svých výsledků pro jiné energie? To není z textu jasné.

Závěr je shrnutím textu práce, ale více než shrnutí, co je v jednotlivých kapitolách, bych chtěl číst shrnutí samotných výsledků a jejich kontext vzhledem k experimentům (např. simulace protonů nad 10 MeV). Toho je v závěru velmi málo.

Použitá literatura obsahuje několik nedostatků v konzistentnosti formátování. Například: Reference s čísla 8, 9, 11, 18, 20, 54, 65 a 67 uvádí prvního autora a pak et al., zatímco u ostatních prací s více autory je „et al.“ až za třetím autorem. Reference na The Geant4 Collaboration je správně v případě čísla 5, 22, ale v případě čísel 24 a 26 je ve tvaru „Collaboration, The Geant4“. Někteří autoři mají tečku za iniciálou (např. 30), a někteří ne (např. 13). U reference 32 autorka není konzistentní v tečkách za iniciálami vůbec. Kromě toho je škoda, že autorka nedodržela pokyny k závěrečným pracím na webu katedry, kde se výslovně uvádí, že nadpisu „Bibliografie“ pro seznam použité literatury se mají studenti vyhnout.

Autorka splnila zadání práce a představila originální výsledky. Bohužel, tyto výsledky by měly být lépe diskutovány, a zejména druhé poloviny práce by slušela větší pozornost.

Práci doporučuji k obhajobě a navrhuji hodnocení B (velmi dobře).

V Richlandu, Washington, USA, dne 18.8.2021

Ing. Martin Šefl, Ph.D.
United States Transuranium and Uranium Registries
College of Pharmacy and Pharmaceutical Sciences
Washington State University

Otázky:

1. Vysvětlete nesoulad textu diskuze s Obr. 4.3. Kromě toho zkuste vysvětlit pokles mezi 1 MeV a 5 MeV na Obr. 4.3b. (Pokud tam patří jiný obrázek, ukažte správný. Vysvětlete, čím se data pro tyto obrázky liší.)
2. Výpočty jsou zatíženy velkou statistickou chybou. Kolik primárních protonů bylo nakonec simulováno? 2000 (str. 31 poslední věta), nebo 20000 (Tab 2.7)? Zkoušela jste pro nějakou konfiguraci výpočet s více primárními částicemi? Jaký vliv to mělo na statistickou chybu?
3. Proč nebyly simulovány energie protonů, které by mohly být srovnány s experimenty (Tabulka 2.8, str. 36)? Vysvětlete jaké bylo porovnání výsledků experimentů, které bylo možné použít, a jak jste dospěla k tomu, že simulace byly třikrát až desetkrát nižší.