

# Posudek bakalářské práce

Matematicko-fyzikální fakulta Univerzity Karlovy

**Autor práce** Prokop Divín  
**Název práce** Srovnání sekvenčních a strukturních metod strojového učení pro predikci protein-ligand vazebných reziduí  
**Rok odevzdání** 2023  
**Studijní program** Informatika  
**Specializace** Umělá inteligence

**Autor posudku** David Hoksza  
**Pracoviště** KSI

**Role** Vedoucí

Prosím vyplňte hodnocení křížkem u každého kritéria. Hodnocení *OK* označuje práci, která kritérium vhodným způsobem splňuje. Hodnocení *lepší* a *horší* označují splnění nad a pod rámec obvyklý pro bakalářskou práci, hodnocení *nevyhovuje* označuje práci, která by neměla být obhájena. Hodnocení v případě potřeby doplňte komentářem. Komentář prosím doplňte všude, kde je hodnocení jiné než *OK*.

<b>K celé práci</b>	lepší	OK	horší	nevyhovuje
Obtížnost zadání	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Splnění zadání	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Rozsah práce ... <i>textová i implementační část, zohlednění náročnosti</i>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Komentář Cílem práce bylo srovnání přístupů pro predikci vazebných aminokyselin z proteinové sekvence a tento cíl byl splněn. V rámci práce byly otestovány jak různé modely strojového učení, tak různé reprezentace aminokyselin od nejjednodušších typu one-hot embedding, přes kontextově nezávislé vlastnosti aminokyselin až po kontextově závislé předtrénované proteinové jazykové modely. Tyto pak byly porovnány se state-of-the-art přístupem predikce vazebných reziduí na základě struktury.				

<b>Textová část práce</b>	lepší	OK	horší	nevyhovuje
Formální úprava ... <i>jazyková úroveň, typografická úroveň, citace</i>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Struktura textu ... <i>kontext, cíle, analýza, návrh, vyhodnocení, úroveň detailu</i>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Analýza	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Vývojová dokumentace	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Uživatelská dokumentace	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Komentář <a href="#">Click here to enter text.</a>				

<b>Implementační část práce</b>	lepší	OK	horší	nevyhovuje
Kvalita návrhu ... <i>architektura, struktury a algoritmy, použité technologie</i>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Kvalita zpracování ... <i>jmenné konvence, formátování, komentáře, testování</i>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Stabilita implementace	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Komentář V rámci implementace je třeba vyzdvihnout fakt, že evaluace byla implementována jako framework, který umožňuje vícenásobné puštění testů s různými parametrizacemi a automatické vyhodnocení. Dále pak je třeba vyzdvihnout skutečnost, že komplexita částí s jazykovými modely si vyžádala od studenta vzhled do metod práce s GPU clusterem, dávkovými systémy apod.				

**Celkové hodnocení** Výborně  
**Práci navrhuji na zvláštní ocenění** Ne

**Datum** 15. srpna 2023

**Podpis**