



MATEMATICKO-FYZIKÁLNÍ
FAKULTA
Univerzita Karlova

Zápis o obhajobě disertační práce

Akademický rok: 2022/2023

Jméno a příjmení studenta: Mgr. Radoslav Krivák
Identifikační číslo studenta: 96052965

Typ studijního programu: doktorský
Studijní program: Informatika - Softwarové systémy
ID studia: 423217

Název práce: Prediction of ligand binding sites from protein structure
Pracoviště práce: Katedra softwarového inženýrství (204. • 32-KSI)
Jazyk práce: angličtina
Jazyk obhajoby: čeština
Školitel: doc. RNDr. David Hoksza, Ph.D.
Oponent(i): doc. RNDr. Karel Berka, Ph.D.

prof. Jan Brezovský
Datum obhajoby: 31.03.2023 **Místo obhajoby:** Praha
Termín: řádný

Průběh obhajoby: Předseda komise stručně představil uchazeče a také prohlásil, že byly splněny všechny podmínky pro konání obhajoby. Následně školitel přednesl své vyjádření k osobě uchazeče a jeho výsledkům zahrnutým do předložené disertační práce.

V další části obhajoby uchazeč prezentoval výsledky své práce v oblasti bio-informatiky, a to konkrétně použití metod strojového učení na predikci a detekci vazebních míst proteinů. Hlavní výsledky zahrnují tyto metody a implementované nástroje:

- využití různých databází proteinů (jako třeba PDBe-KB), dotazy a jejich prohledávání;
- algoritmus P2Rank a především jeho důležité součásti jako "clustering" a "ranking";
- metoda AHoj Apo-Holo pro hledání proteinů.

Kromě toho uchazeč také popsal metodologii pro experimentální vyhodnocení a prezentoval výsledky svých experimentů.

Dále se ke předložené dizertaci vyjádřili oba dva oponenti (jeden ve zastoupení přítomným členem komise), shrnuli posudky a hlavní výhrady, a položili několik dotazů. Oponenti hodnotili práci velmi pozitivně, a to především její relevanci a dosažený posun ve vědeckém poznání. Dotazy oponentů se týkaly především:

- metodologie nastavení hodnot parametrů a optimalizací predikční metody (použití Bayesovské optimalizace);
- významu parametrů algoritmu P2Rank a jejich interpretovatelnosti;
- možnosti rozšíření směrem ke využití jiných databází;

- možnosti identifikace vazebných míst také uvnitř proteinů nebo jenom na povrchu;

- lehce nepřesné terminologie v popisu vazeb ligandů.

Druhý oponent ještě dodal, že obsahem dizertace je hlavně popis metod (nástrojů), ale trochu chybí hlubší diskuze omezení navržených metod.

Oponenti byli spokojeni se odpověďmi uchazeče, a doporučili práci ke obhajobě.

Následovaly dotazy členů komise na:

- velikost trénovacích dat pro algoritmy strojového učení;
- existenci novějších (lepších, schopnějších) metod hlubokého učení, které mohly být vyvinuté nedávno (během studia uchazeče);
- kvalitu softwarových implementací bio-informatických metod obecně (v rámci celé komunity) a publikační zvyklosti.

Obhajoba pokračovala neveřejnou částí (tedy uzavřeným jednáním komise), kde všichni uznali schopnost uchazeče výborně reagovat na dotazy komise.

Proběhlo tajné hlasování s jednoznačně kladným výsledkem, na jehož byl udělen titul Ph.D.

Výsledek obhajoby:

prospěl/a (P)

Předseda komise:

prof. Ing. Petr Tůma, Dr.

Členové komise:

doc. Mgr. Martin Nečaský, Ph.D.

doc. RNDr. Pavel Parížek, Ph.D.

doc. RNDr. Irena Holubová, Ph.D.

doc. Ing. Vojtěch Spiwok, Ph.D.

doc. Mgr. Daniel Svozil, Ph.D.