

## I. IDENTIFIKAČNÍ ÚDAJE

<b>Název práce:</b>	<b>Deep learning for computational chemistry with differentiable background knowledge</b>
<b>Jméno autora:</b>	<b>Emir Hodžić</b>
<b>Typ práce:</b>	diplomová
<b>Fakulta/ústav:</b>	Fakulta elektrotechnická (FEL)
<b>Katedra/ústav:</b>	Department of Computer Science
<b>Oponent práce:</b>	Ing. Jan Drchal, PhD.
<b>Pracoviště oponenta práce:</b>	Department of Computer Science

## II. HODNOCENÍ JEDNOTLIVÝCH KRITÉRIÍ

<b>Zadání</b>	<b>mimořádně náročné</b>
<i>Hodnocení náročnosti zadání závěrečné práce.</i>	
Tato práce vyžaduje dobré znalosti metod Graph Neural Networks (GNN) a Lifted Relational Neural Networks (LRNN). Obě tato témata nejsou triviální. Navíc je důležité mít dobrý přehled o molekulárních strukturách organické chemie.	

<b>Splnění zadání</b>	<b>splněno</b>
<i>Posuďte, zda předložená závěrečná práce splňuje zadání. V komentáři případně uveďte body zadání, které nebyly zcela splněny, nebo zda je práce oproti zadání rozšířena. Nebylo-li zadání zcela splněno, pokuste se posoudit závažnost, dopady a případně i příčiny jednotlivých nedostatků.</i>	
Splněno bez výhrad.	

<b>Zvolený postup řešení</b>	<b>správný</b>
<i>Posuďte, zda student zvolil správný postup nebo metody řešení.</i>	
V obecnosti s postupem studenta souhlasím. Líbí se mi řada paradigmat GNN, která porovnával i množství a rozmanitost chemických struktur, které zpracoval. V textu experimentální části bohužel chybí podrobný "experimental setup" i detailní popis evaluační metodologie (text kapitoly 10 je nedostatečný). Vzhledem k tomu, že s prací nebyly nahrány žádné přílohy, je opakovatelnost popisovaných experimentů velmi těžko představitelná. Rovněž není zmíněna výpočetní nebo časová náročnost. Na druhou stranu chápu, že se jednalo o předběžný průzkum dané výzkumné oblasti.	

<b>Odborná úroveň</b>	<b>A - výborně</b>
<i>Posuďte úroveň odbornosti závěrečné práce, využití znalostí získaných studiem a z odborné literatury, využití podkladů a dat získaných z praxe.</i>	
K odborné úrovni nemám výhrady. Je zřejmé, že se student v problematice dobře orientuje.	

<b>Formální a jazyková úroveň, rozsah práce</b>	<b>C - dobře</b>
<i>Posuďte správnost používání formálních zápisů obsažených v práci. Posuďte typografickou a jazykovou stránku.</i>	
Práce je psána kvalitní angličtinou s občasnými překlepy. Je členěna do příliš mnoha krátkých kapitol, což zbytečně nafukuje počet stran – například kapitola 10 sestává z jediného odstavce. K přehledovým kapitolám popisujícím architektury GNN, LRNN a základy organické chemie nemám výtky. Problém vidím v popisu implementace (resp. návrhu řešení) – z textu nebylo zřejmé, jak přesně jsou oba přístupy GNN a LRNN kombinovány. Některé části kapitoly popisující experimenty by si zasloužily větší pozornost – např. tabulka 11.2 má příliš stručný popis a bez zvýraznění zajímavých (nejlepších) výsledků je nepřehledná.	

<b>Výběr zdrojů, korektnost citací</b>	<b>A - výborně</b>
<i>Vyjádřete se k aktivitě studenta při získávání a využívání studijních materiálů k řešení závěrečné práce. Charakterizujte výběr pramenů. Posuďte, zda student využil všechny relevantní zdroje. Ověřte, zda jsou všechny převzaté prvky řádně odlišeny od vlastních výsledků a úvah, zda nedošlo k porušení citační etiky a zda jsou bibliografické citace úplné a v souladu s citačními zvyklostmi a normami.</i>	

Zdroje jsou citovány správně.

**Další komentáře a hodnocení**

*Vyjádřete se k úrovni dosažených hlavních výsledků závěrečné práce, např. k úrovni teoretických výsledků, nebo k úrovni a funkčnosti technického nebo programového vytvořeného řešení, publikačním výstupům, experimentální zručnosti apod.*

Rozsah odvedené práce je značný, po rozšíření a doplnění má určitě publikační potenciál.

**III. CELKOVÉ HODNOCENÍ, OTÁZKY K OBHAJOBĚ, NÁVRH KLASIFIKACE**

*Shrňte aspekty závěrečné práce, které nejvíce ovlivnily Vaše celkové hodnocení. Uveďte případné otázky, které by měl student zodpovědět při obhajobě závěrečné práce před komisí.*

Přes výše zmíněné výhrady a s přihlédnutím k náročnosti zadání i rozsahu odvedené práce, předloženou závěrečnou práci hodnotím klasifikačním stupněm **B - velmi dobře**.

K práci mám následující otázku:

*Porovnával jste své výsledky s výsledky dosaženými u jiných publikovaných metod?*

Datum: 1.6.2023

Podpis: