

Posudek oponenta na bakalářskou práci:

Metody strojového učení ve fyzice pevných látek

Autor práce: **Jan Trödler**

Předložená práce se zabývá využitím metod strojového učení pro predikci parametrů krystalů pro výrobu fotovoltaických článků. Hlavní metodou zvolenou pro tento úkol je metoda kernel ridge regression (KRR). V práci je tato metoda důkladně teoreticky analyzována a poté aplikována na data ze soutěže NOMAD2018.

Práce je rozdělena do tří hlavních kapitol. V první kapitole je představena teorie regrese, nejmenších čtverců a detaily metody KRR. Oceňuji, že autor provedl ověření některých předpokladů metody, například podmínky Mercerovy věty v části 1.5.4. V druhé kapitole jsou představena data ze soutěže NOMAD a jejich fyzikální význam. Hlavní výsledky práce jsou ve třetí kapitole, kde jsou představeny čtyři varianty aplikace KRR na zvolená data. Autor srovnává své prediktivní kvalitu svých metod s ostatními účastníky soutěže a podařilo se mu dosáhnout na úroveň odpovídající 25. místu z 882.

Zadání bakalářské práce bylo splněno. Výsledná práce je napsána čitelně s malým množstvím překlepů a formálních nedostatků (např. chybějící citace Mercerovy věty). Výsledky považuji za velmi dobré, i když myslím, že některé zvolené parametry nejsou optimální. K práci mám následující dotazy:

1. V teoretické části je popsána metoda LASSO, která se v experimentální části nepoužívá. Jaký byl důvod netestování této metody?
2. Ve vzorci Gaussova jádra (1.38) uvádíte parametr c a striktně jej nastavíte roven jedné. Jaký je důvod této volby? Mohl byste popsat jaký má tento parametr vliv na výsledek? Jakou metodu byste použil pro jeho odhad z dat?

Práci doporučuji k obhajobě, hodnotím ji známkou **B** – velmi dobře.

Doc. Ing. Václav Šmídl, Ph.D.