

Hodnocení vedoucího závěrečné práce

České vysoké učení technické v Praze

Fakulta informačních technologií

Student: Jonatan Matějka
Vedoucí práce: Mgr. Jan Starý, Ph.D.
Název práce: Genetické algoritmy pro generování molekul
Obor: Teoretická informatika

Datum vytvoření: 1. 6. 2017

Hodnotící kritérium: 1. Náročnost a další komentář k zadání	Způsob hodnocení - následující škálou 1 až 5: 1=mimořádně náročné zadání, 2=náročnější zadání, 3=průměrně náročné zadání, 4=lehčí, ale ještě dostatečně náročné zadání, 5=nedostatečně náročné zadání
Popis kritéria: Podrobněji charakterizujte diplomovou (bakalářskou) práci a její případné návaznosti na předchozí nebo běžící projekty. Dále posuďte, čím je zadání této ZP náročné. (U obtížnější ZP lze dále tolerovat některé nedostatky, které by u ZP standardní obtížnosti tolerovány nebyly; a naopak u jednoduché ZP mohou být zjištěné nedostatky hodnoceny přísněji.)	
Komentář: Jedná se o implementaci genetických algoritmů nad datovým modelem molekuly.	
Hodnotící kritérium: 2. Splnění zadání	Způsob hodnocení - následující škálou 1 až 4: 1=zadání splněno, 2=zadání splněno s menšími výhradami, 3=zadání splněno s většími výhradami, 4=zadání nesplněno
Popis kritéria: Posuďte, zda předložená ZP splňuje zadání. V komentáři uveďte body zadání, které nebyly zcela splněny, případně rozšíření ZP oproti původnímu zadání. Nebylo-li zadání zcela splněno, pokuste se posoudit závažnost, dopady a případně i příčiny jednotlivých nedostatků.	
Komentář: Práce splňuje všechny body zadání, a v mnoha detailech zadání překračuje.	
Hodnotící kritérium: 3. Rozsah písemné zprávy	Způsob hodnocení - následující škálou 1 až 4: 1=splňuje požadavky, 2=splňuje požadavky s menšími výhradami, 3=splňuje požadavky s většími výhradami, 4=nesplňuje požadavky
Popis kritéria: Zhodnoťte přiměřenost rozsahu předložené ZP vzhledem k obsahu, tj. zda všechny části ZP jsou informačně bohaté a ZP neobsahuje zbytečné části.	
Komentář: Rozsah práce je odpovídající.	
Hodnotící kritérium: 4. Věcná a logická úroveň práce	Způsob hodnocení - bodové hodnocení 0 až 100 bodů (známka A až F): 95 (A)
Popis kritéria: Posuďte, zda předložená ZP je po věcné stránce v pořádku, případně vyskytují-li se v práci věcné chyby nebo nepřesnosti. Zhodnoťte dále logickou strukturu ZP, návaznosti jednotlivých kapitol a pochopitelnost textu pro čtenáře.	
Komentář: Práce je sepsána pečlivě. Začíná stručným připomenutím základů genetických algoritmů (kapitola 2) a rekapituluje existující řešení v oblasti virtuálního screeningu molekul (kapitola 3), totiž zkoumání fyzikálně-chemických vlastností molekul "in silico" ještě před testováním v laboratoři. Připomíná stromy a matice jakožto tradiční datové modely (genotypy), včetně jejich nedostatků, a navrhuje vlastní genotyp (kap. 4), totiž graf molekuly samotné, s přirozenou konverzí na průmyslové standardy SDF a XYZ pro popis molekul. Nad tímto genotypem pak implementuje (kap. 5) obvyklé genetické kroky selekce, křížení, mutace inkluze. Tyto kroky jsou ilustrovány na jednoduchých ale kompletních příkladech, nad reálnými daty z databáze PubChem. Závěrečná kapitola se zabývá měřením výkonu (samotné chemické výpočty jsou dosti náročné). Na sto generacích populace s původně 132 molekulami se měří rychlost konvergence k nejepšimu/průměrnému jedinci, režie aplikace samotné (zanedbatelná), velikost "vyšlechtěných molekul", atd.	
Hodnotící kritérium:	Způsob hodnocení - bodové hodnocení 0 až 100 bodů (známka A až F):

5. Formální úroveň práce

95 (A)

Popis kritéria:

Posuďte správnost používání formálních zápisů obsažených v práci. Posuďte typografickou a jazykovou stránku ZP, viz Směrnice děkana č. 14/2015, článek 3.

Komentář:

Práce je sepsána kultivovanou češtinou, překlepů je minimum.

Hodnotící kritérium:

Způsob hodnocení - bodové hodnocení 0 až 100 bodů (známka A až F):

6. Práce se zdroji

95 (A)

Popis kritéria:

Vyjádřete se k aktivitě studenta při získávání a využívání studijních materiálů k řešení ZP. Charakterizujte výběr studijních pramenů. Posuďte, zda student využil všechny relevantní zdroje nebo zda se pokoušel řešit již vyřešené problémy. 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.

Komentář:

Práce obsahuje 23 odkazů, z nichž všechny jsou namístě.

Hodnotící kritérium:

Způsob hodnocení - bodové hodnocení 0 až 100 bodů (známka A až F):

7. Hodnocení výsledků, publikační výstupy a ocenění

95 (A)

Popis kritéria:

Vyjádřete se k úrovni dosažených hlavních výsledků ZP, např. k úrovni teoretických výsledků, nebo k úrovni a funkčnosti technického nebo programového vytvořeného řešení, apod. Případně také zhodnoťte, zda software nebo zdrojové texty, které nevytvořil sám student, byly v ZP použity v souladu s licenčními podmínkami a autorským právem. Popište případnou publikační činnost a získaná ocenění související s řešením této ZP.

Komentář:

Hlavním výsledkem je funkční aplikace, která umožňuje uživateli geneticky "šlechtit" molekuly s požadovanými vlastnostmi - se zřejmou inklinací k fotochemickým vlastnostem, jak plyne ze zadání. Po 100 generacích a prozkoumání desetitisíců molekul došel program k několika málo "dobrým" molekulám, z nichž 5 se nachází v použité databázi PubChem (3 z nich jsou komerčně dostupné).

Hodnotící kritérium:

Způsob hodnocení - nehodnotí se

8. Komentář o využitelnosti výsledků

Popis kritéria:

Uvedte, zda hlavní výsledky ZP rozšiřují již publikované známé výsledky a/nebo přinášející zcela nové poznatky. Uvedte možnosti využití výsledků ZP v praxi.

Komentář:

Aplikace je reálně využitelná v chemických laboratořích, pro které je zamýšlena. Pokusíme se aplikaci zařadit do Elixir Life Sciences.

Hodnotící kritérium:

Způsob hodnocení - následující škálou 1 až 5:

9. Aktivita a samostatnost studenta v průběhu řešení

9a:

1=výborná aktivita,

2=velmi dobrá aktivita,

3=průměrná aktivita,

4=slabší, ale ještě dostatečná aktivita,

5=nedostatečná aktivita

9b:

1=výborná samostatnost,

2=velmi dobrá samostatnost,

3=průměrná samostatnost,

4=slabší, ale ještě dostatečná samostatnost,

5=nedostatečná samostatnost

Popis kritéria:

Posuďte, zda byl student během řešení aktivní, zda dodržoval dohodnuté termíny, jestli své řešení průběžně konzultoval a zda byl na konzultace dostatečně připraven (9a). Posuďte schopnost studenta samostatně tvůrčí práce (9b).

Komentář:

Řešitel pracoval od začátku zcela samostatně, na pravidelné schůzky byl vždy pečlivě připraven.

Hodnotící kritérium:

Způsob hodnocení - bodové hodnocení 0 až 100 bodů (známka A až F):

10. Celkové hodnocení

95 (A)

Popis kritéria:

Shrňte stránky ZP studenta, které nejvíce ovlivnily Vaše celkové hodnocení. Celkové hodnocení **nemusí** být aritmetickým průměrem či jinou hodnotou vypočtenou z hodnocení v předchozích jednotlivých kritériích 1 až 9.

Text hodnocení:

BP jako celek stojí výrazně nad průměrem, a objemem a kvalitou práce se blíží spíše práci diplomové.

Podpis vedoucího práce: