



Ing. Tomáš Oberhuber, Ph.D.
katedra matematiky
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská
ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE
Trojanova 13
120 00 PRAHA 2

Školitelský posudek bakalářské práce studenta Filipa Bára „Určení struktury diferenciálních rovnic z experimentálních dat“

Autor předkládané bakalářské práce se zabýval tématem na pomezí numerické matematiky a statistiky resp. strojového učení. Rád bych v tomto posudku uvedl, že konzultant Doc. Ing., Václav Šmídl, Ph.D. výrazně přispěl celé této práci zejména částí týkající se variačních bayesovských metod.

Celá práce nejprve popisuje poměrně obsáhlý matematický aparát. Začíná stručným přehledem numerických metod pro řešení diferenciálních rovnic v první kapitole. Druhá kapitola je úvodem do pravděpodobnosti a statistiky. Následující třetí kapitola popisuje gradientní metody pro hledání lokálních extrémů funkcí. Stěžejní částí jsou pak čtvrtá kapitola popisující variační bayesovské metody a pátá, které se věnuje lineární regresi. Šestá kapitola pak popisuje, jak hledat pomocí předloženého aparátu parametry diferenciálních rovnic podle zadaných experimentálních dat. V poslední kapitole je pak prezentována výpočetní studie.

Autorovi se nepodařilo splnit poslední bod zadání, tedy aplikaci na reálná data. Výpočetní studie je provedena jen na datech generovaných právě obyčejnými diferenciálními rovnicemi a přidaným šumem. To ale nepovažuji za výrazný nedostatek neboť i tak se mi zdají být předkládané výsledky dostatečné a objem teorie, se kterou se autor musel seznámit za nadprůměrnou. Navíc autor sám psal kód, pomocí kterého výpočty prováděl.

Dále lze pochválit text po obsahové stránce. V šesté kapitole (a případně i ve čtvrté a páté) mi chybí, jak se vypočítá gradient odvozené ztrátové funkce a následně by se zde hodilo sepsat i pseudoalgoritmus, ze kterého by bylo lépe vidět, jak celá metoda funguje. Jinak je ale výklad poměrně dobře srozumitelný s řadou objasňujících příkladů a podrobným doprovodným textem. Je také pravdou, že zmíněné nedostatky (chybějící výpočet gradientu a pseudoalgoritmus) jsem si uvědomil až při čtení finální verze a studenta na ně před odevzdáním neupozornil.

Zásadní problém této práce spatřuji ale ve formálním zpracování. Celý text obsahuje velkou řadu chyb to často velice závažných. Na první pohled tak práce působí velice odfláknutým dojmem. Velice závažná je, že už na stránce s abstrakty a klíčovými slovy jsem našel čtyři chyby. Jednak jde o klíčové slovo *variační Bayes* (anglicky je zde správně uvedeno *Variational Bayesian methods*), dále se zde píše *"In this thesis. In this thesis..."*, a *"system of differential equation"* místo *systems of differential equations*. Poslední chyba, chybějící mezera za tečkou před slovem *"Phenomena"* je už drobnost. Velice závažná je také zapomenutá pracovní poznámka *OK* v nadpisu části 4.2, která je tedy vidět i v obsahu. Pokud jde o obsah, zřejmě by tu neměla být

ani podsekcce 1.0.1, asi mělo jít o sekci. Také je zvláštní nadpis druhé kapitoly jako *Matematický úvod*, což působí dojmem, že první kapitola není matematická. Domnívám se, že druhé kapitola se asi měla jmenovat *Matematický úvod do pravděpodobnosti a statistiky*. Nadpis sekce 1.2. by měl být Rungova-Kuttova metoda a ne *Rungovu-Kuttova metoda*. Pro úplnost uvádím seznam dalších chyb:

1. Str. 12 - $b_1 = b_1 = 0.5$ místo $b_1 = b_2 = 0.5$.
2. Str. 13. - není vysvětleno značení A^c , mělo by zde být "Pak normou nazveme..." místo "Pak normu nazveme".
3. Str. 14 - místo $L_n(f(x)) = \|f(x)\|_m$ má být $L_m(f(x)) = \|f(x)\|_m$ a místo $\sum_{k=1}^{\infty} A_k$ má zřejmě být $\bigcup_{k=1}^{\infty} A_k$.
4. Str. 15 - ...*pokud ji leze napsat...*
5. Str. 16 - místo "Příklady různých hustot pravděpodobnosti popisující Gaussovo rozdělení." zřejmě "Příklady různých hustot pravděpodobnosti popisovaných Gaussovým rozdělením."
6. Str. 21 - zde jsou špatně čárky a tečky u uvedených vztahů a je zde "funkci" místo "funkcí". Také pojem *kulturně se chovající funkce* je dost vágní.
7. Str. 22 - opět jsou zde špatně čárky a tečky kolem uvedených vztahů.
8. Str. 23 - "... *D soubor data*" místo "... *D soubor dat*".
9. Str. 24 - nad obrázkem 2.3 je nepochopitelný nadpis "*stochastic gradient descent*" !!!
10. Str. 25 - "... *je popsáno v literatuře od Bishopa.*" není korektní citace. Ve vztahu (4.1) chybí závorka ve výrazu $p_{\theta}x|z$.
11. Str. 26 - ve vztahu pro z_{ML} má být za druhým rovnítkem suma a ne produkt. Kromě toho, že nadpis kapitoly 4.2 obsahuje již zmíněnou zapomenutou poznámku (OK), tak místo "*Kullback-Liebler divergence*" má být *Kullbackova-Lieblerova divergence*.
12. Str. 27 - **je zde použita entropie a křížová entropie, která není nikde zavedena.** V předposledním odstavci části 4.2 je chybějící reference [?].
13. Str. 28 - je zde "*Tyto data*" místo "*Tato data*", což se v textu opakuje několikrát, podobně pak "*naměřené data*". Výraz "*data se vlezou do šumu*" nepovažuju za jazykově správný. **Dále zde chybí definice digamma funkce Ψ .**
14. Str. 29 - V textu chybí odkaz na obrázek 4.1.
15. Str. 33 - V prvním vztahu by zřejmě mělo být y místo \hat{y} .
16. Str. 35 - "... *si zvolíme bazické n lineárně nezávislých bazických funkcí, ...*"
17. Str. 36 - Výraz "pro následující model..." a chybí odkazy na obrázek 5.2.
18. Str. 37 - chybí čárka ve větě "*To ovšem za předpokladu že...*", dále je text podivně zalomen v horním pravém rohu.

19. Str. 42 - Na obrázku 5.9. je uvedeno a_i, b_i místo α_i a β_i . Dále je zde napsáno "Zde se na místě si položit otázku...".
20. Str. 45 - "...z kterého byly data získány...". Nadpis sekce 6.1. by zřejmě měl být "Metoda nejmenších čtverců pro ODR". Dále je v textu opakovaně používáno ODE místo ODR.
21. Str. 47 - Zde je opět poangličtělý název sekce "Normal model pro ODE" místo asi "Normální model pro ODR".
22. Str. 48 - Ve vztahu 6.6 se vyskytuje τ_i místo pouhého τ , které bylo původně použito jako parametr pro pravděpodobnostní rozdělení pro \hat{W} .
23. Str. 49 - nadpis sekce 6.4. "Normal-iGamma model pro ODE". Odkazy v textu na vztahy formou "První apriorní člen..." a "Druhý apriorní člen..." jsou nejasné a měl by zde být použit klasický číslovaný odkaz.
24. Str. 52 - další anglický nadpis sekce "Lotka-Volterra ODE".

Ve výpočetní studii chybí odkazy na prezentované výsledky. Dále mám technickou připomínku. PDF celé bakalářské práce má přes 60 MB, což dost komplikuje její posílání a často i zobrazování. Přitom není úplně důvod pro takovou velikost a zřejmě jsou jen špatně vložené výsledné grafy. Nepochybně by se toto dalo nějak vyřešit.

Z výše uvedeného je vidět, že formálních nedostatků je opravdu hodně. Na druhou stranu je potřeba uvést, že v naprosté většině případu uvedené chyby nebrání v porozumění textu a jde převážně jen o formality. Je potřeba vzít v úvahu i omezení, která plynou z bezkontaktní výuky během letního semestru. Domnívám se, že pro studenty třetího ročníku, kteří píšou svou první ročníkovou práci, může být omezená možnost konzultací zásadnější překážkou, neboť ještě neznají formality týkající se psaní bakalářské nebo diplomové práce. Ovšem také je pravdou, že na řadu uvedených chyb jsem autora upozorňoval a nabádal jsem ho k tomu, aby práci odevzdal o dva dny později. Přitom by stačilo jedno nebo dvě pozorné přečtení celého textu a většinu chyb by autor opravil sám.

Na autora mám následující dotazy:

1. Jak se počítají gradienty odvozených ztrátových funkcí?
2. V závěru se píše, že metody naleznou globální minimum těchto ztrátových funkcí? Je to opravdu tak a lze to nějak dokázat?

S uvážením všeho výše uvedeného navrhuji hodnotit práci známkou **C** tedy **dobře**.

V Praze, 17. srpna 2020.

Ing. Tomáš Oberhuber, Ph.D.