

# Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě  
Univerzity Karlovy

- posudek vedoucího  posudek oponenta  
 bakalářské práce  diplomové práce

Autor/ka: Ján Kovačovský  
Název práce: Non-additive intermolecular interactions  
Studijní program a obor: Fyzika  
Rok odevzdání: 2023

Jméno a tituly oponenta: RNDr. Martin Žonda, Ph.D.  
Pracoviště: Katedra fyziky kondenzovaných látek, MFF UK  
Kontaktní e-mail: martin.zonda@matfyz.cuni.cz

## Odborná úroveň práce:

- vynikající  velmi dobrá  průměrná  podprůměrná  nevyhovující

## Věcné chyby:

- téměř žádné  vzhledem k rozsahu přiměřený počet  méně podstatné četné  závažné

## Výsledky:

- originální  původní i převzaté  netriviální kompilace  citované z literatury  opsané

## Rozsah práce:

- veliký  standardní  dostatečný  nedostatečný

## Grafická, jazyková a formální úroveň:

- vynikající  velmi dobrá  průměrná  podprůměrná  nevyhovující

## Tiskové chyby:

- téměř žádné  vzhledem k rozsahu a tématu přiměřený počet  četné

## Celková úroveň práce:

- vynikající  velmi dobrá  průměrná  podprůměrná  nevyhovující

## Slovní vyjádření, komentáře a připomínky vedoucího/opponenta:

Ján Kovačovský vo svojej práci skúma možnosť využitia neurónových sietí na konštrukciu efektívnych potenciálov umožňujúcich zahrnúť zložité medzi-molekulové interakcie vo výpočtoch reálnych systémov. Motiváciou je fakt, že neurónové siete sú všeobecnými aproximátormi. To znamená, že dostatočne expresívna sieť dokáže aproximovať ľubovoľnú dostatočne hladkú funkciu. V práci sú používané plytké husto prepojené siete. Ich schopnosť konštruovať správny

potenciál je porovnaná so štandardnými fyzikálne motivovanými potenciálmi, ktoré sa bežne používajú za týmto účelom. Autor konštatuje, že aj keď sú použité neurónové siete naozaj schopné aproximovať potenciály jednoduchých systémov s požadovanou presnosťou, ich tréning si vyžaduje násobne viac dát aj času ako pri štandardne využívaných potenciáloch.

Silnou stránkou práce je samotný výskum prevedený študentom. Ten si zjavne vyžadoval pochopenie problematiky, zvládnutie techník strojového učenia a tiež "benchmarking" rôznych techník na modelových aj reálnych systémov. Samotný výsledok mi príde užitočný, a je to dôležitý prvý krok k prípadnému využitiu neurónových sietí pri skúmaní zložitejších štruktúr.

Slabou stránkou je samotná prezentácia. Uvádzam tu len problémy, ktoré považujem za závažné. Dúfam, že tato kritika v budúcnosti pomôže študentovi pripraviť lepšiu magisterskú prácu.

#### Úvod:

Vzhľadom na to, že nie som expert na neaditívne medzi-molekulárne interakcie, bol by som bol ocenil dlhší úvod do problematiky. Úvod práce tvorí len jeden paragraf. Ten vzbudí záujem, a je z neho zrejmé, že ide o živú a veľmi zaujímavú oblasť fyziky. Lenže nedozvieme sa v ňom, v akom stave je táto oblasť výskumu, čo sú otvorené problémy, a ani to, akému problému sa bude venovať predostretá práca.

#### Obrázky:

Obrázky by mali byť aspoň z časti samonosné. Obrázky v prvých dvoch kapitolách nie sú. Niektorým z nich nerozumiem ani po prečítaní sprievodného textu. Obrázok 1.1 nemá popísané osi. Z jeho štítku sa nedozvieme na čo sa pozeráme. Ten obsahuje len štyri slová, z ktorých dve sú v texte nezavedené skratky: LM (Levenberg-Marquardt algorithm) a GD (gradient descent?). Na obrázku je vynesena Bealeová funkcia, čo je jedna so štandardných funkcií na testovanie optimizačných algoritmov. Myslím si, že má zmysel takúto funkciu a jej využitie v texte explicitne uviesť, pretože čitateľ z iným zameraním ju nebude poznať.

Len trochu lepšie sú na tom obrázky 2.2, 2.3, 2.4, kde tiež chýbajú označenia osí. Obrázkom 2.3 a 2.4 nerozumiem. Myslel som si, že ide o krivky učenia a že je na x-ovej osi počet iterácií. Ale potom by som čakal približne monotónny pokles nie konštantu.

#### Metódy:

Pri predstavení neurónových sietí autor nekomentuje "biasy". V texte nie sú použité siete jasne špecifikované. Dozvieme sa, že sú to plytké husto prepojené siete, ale nevieme koľko majú parametrov a ani ako vyzerajú. Čo presne znamená text nad obrázkom 2.3 "50 random shallow neural networks" o aké siete sa jedná? Čo je tu náhodné?

#### Výsledky:

Popis generovania dát balíkom Molpro, vo forme v akej je uvedený v práci, je asi užitočný pre expertov. Ja by som privítal aspoň pár viet o tom, čo ten balík dokáže a čo znamenajú tie skratky aspoň rámcovo.

Diskusia výsledkov je príliš heslovitá. Obrázky 3.2 a 3.3 nie sú diskutované vôbec.

Celkovo je táto kapitola nedotiahnutá. To je dosť škoda, pretože vzhľadom na vlastnú prácu študenta, by mohla, alebo skôr by mala byť nosnou časťou celej práce. Pokiaľ tomu rozumiem správne, tak aj časť Neural Networks obsahuje vlastné testy študenta. To sa tiež v texte stráca.



Zhrnutie: Silnou stránkou práce je výskum prevedený študentom. Práca tak nie je len prehľadom literatúry, ale obsahuje reálne porovnanie klasických prístupov s neurónovými sieťami. Práca má konkrétny výsledok, na ktorom je možné stavať. Jej slabou stránkou je ale samotný text. Berúc v úvahu oba tieto aspekty, navrhujem stupeň hodnotenia veľmi dobre.

**Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:**

1. Prívitál by som, ak by sa študent počas obhajoby nevynechal tieto body: jasne formulovaná motivácia, konkrétna ukážka a popis použitých neurónových sietí, podrobnú diskusiu výsledkov a to predovšetkým Obrázkov 3.2 a 3.4.
2. Čo presne ukazujú obrázky 2.3 a 2.4? Ako ich máme interpretovať?
3. Vyskúšali ste aj iné prístupy ako plytké husto prepojené siete? Ak áno, aké boli výsledky?
4. Myslíte, že sa problémy neurónových sietí opísané v závere zlepšia, alebo zhoršia pri zložitejších systémoch?

**Práci**

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

**Navrhuj hodnocení stupněm:**

výborně  velmi dobře  dobře  neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/opponenta:

V PRAHE

25.8. 2023

*Šand*