

# Posudek bakalářské práce

Matematicko-fyzikální fakulta Univerzity Karlovy

**Autor práce** Ondřej Lopuch  
**Název práce** Detection of protein-ligand binding sites using 3D Vision Transformers  
**Rok odevzdání** 2023  
**Studijní program** Informatika  
**Specializace** Umělá inteligence

**Autor posudku** David Hoksza  
**Pracoviště** KSI

**Role** Vedoucí

Prosím vyplňte hodnocení křížkem u každého kritéria. Hodnocení *OK* označuje práci, která kritérium vhodným způsobem splňuje. Hodnocení *lepší* a *horší* označují splnění nad a pod rámec obvyklý pro bakalářskou práci, hodnocení *nevyhovuje* označuje práci, která by neměla být obhájena. Hodnocení v případě potřeby doplňte komentářem. Komentář prosím doplňte všude, kde je hodnocení jiné než *OK*.

<b>K celé práci</b>	lepší	OK	horší	nevyhovuje
Obtížnost zadání	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Splnění zadání	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Rozsah práce ... <i>textová i implementační část, zohlednění náročnosti</i>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
<b>Komentář</b> Cílem práce bylo otestování možnosti využití 3D vision transformeru pro detekci ligand-vazebných residuí na základě proteinové struktury. Vision transformery jsou relativní novinka ve světě ML a tím spíše pak jejich zobecnění do 3D. Obtížnost zadání pak dále komplikovala aplikace do domény, která je relativně specifická a byla studentovi zcela neznámá. Z toho vyplynuli úskalí, kterým musel student v průběhu práce čelit a k horšímu odhadu celkové časové náročnosti řešení. To se odrazilo v relativně slabé evaluační části, což bylo důsledkem skutečnosti, že funkční řešení bylo k dispozici teprve krátce před samotným odevzdáním práce. Práce ovšem splnila zadání v tom smyslu, že vznikl model, který je možný pro daný problém využít a na výsledcích (které jsou ovšem zatím stále výrazně podprůměrné s ohledem na SOTA) dále stavět.				

<b>Textová část práce</b>	lepší	OK	horší	nevyhovuje
Formální úprava ... <i>jazyková úroveň, typografická úroveň, citace</i>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Struktura textu ... <i>kontext, cíle, analýza, návrh, vyhodnocení, úroveň detailu</i>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Analýza	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Vývojová dokumentace	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Uživatelská dokumentace	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
<b>Komentář</b> Práce se může jevit jako kratší, ale obsahuje všechny náležitosti a nižší počet stránek je dle mého názoru důsledkem dvou skutečností: 1) úspornou, avšak dostatečně vysvětlující, volbou formulací a 2) omezeným množstvím experimentů, které by vyhodnocovali hyperparametry/různé přístupy k návrhu architektury (viz. výše).				

**Implementační část práce**

	lepší	OK	horší	nevyhovuje
Kvalita návrhu ... <i>architektura, struktury a algoritmy, použité technologie</i>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Kvalita zpracování ... <i>jmenné konvence, formátování, komentáře, testování</i>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Stabilita implementace	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Komentář Je vhodné vyzdvihnout skutečnost, že velikost problému si vyžádala od studenta vzhled do metod práce s GPU clusterem, dávkovými systémy apod.				

**Celkové hodnocení** Výborně (spíše horší)

**Práci navrhuji na zvláštní ocenění** Ne

**Datum** 16. srpna 2023

**Podpis**