

UNIVERZITA KARLOVA

Matematicko-fyzikální fakulta

Zápis o obhajobě disertační práce

Akademický rok: 2018/2019

Jméno a příjmení studenta: Mgr. Petr Škoda
Rok narození: 1989
Identifikační číslo studenta: 30654622

Typ studijního programu: doktorský
Studijní program: Informatika
Studijní obor: Softwarové systémy
Identifikační čísla studia: 455224

Název práce: Representation of chemical compounds and its utilization in similarity search

Pracoviště práce: Katedra softwarového inženýrství (204. • 32-KSI)

Jazyk práce: angličtina
Jazyk obhajoby: čeština
Školitel: RNDr. David Hoksza, Ph.D.
Oponent(i): prof. Jan Brezovský
Mgr. Martin Modrák, Ph.D.

Datum obhajoby : 18.09.2019 **Místo obhajoby :** Praha
Hlasování komise: prospěl/a: 9 neprospěl/a: 0

Průběh obhajoby: Předseda komise představil uchazeče a členy komise, a zahájil obhajobu prohlášením, že byly splněny všechny podmínky pro její konání. Následně školitel přednesl své vyjádření k osobě uchazeče, jeho výsledkům a předložené disertační práci. Uchazeč prezentoval výsledky své práce, ve které se zabýval aplikací technik podobnostního vyhledávání na identifikaci vhodných molekul a chemických sloučenin podle různých kritérií (schopnost tvořit určité chemické vazby, atd). Hlavní motivací pro tuto práci je efektivní nalézání molekul a sloučenin, které mohou tvořit součást léků na konkrétní onemocnění. Kromě toho uchazeč také vytvořil platformu na experimentální porovnávání různých vyhledávacích technik ve množině chemických sloučenin.

Oponenti ve svých posudcích hodnotili práci velmi pozitivně. Oba jednoznačně konstatovali, že předložená práce dokládá schopnosti uchazeče samostatně vědecky pracovat a publikovat výsledky, a doporučili přijetí práce a udělení titulu Ph.D. V rámci následující diskuze uchazeč zodpověděl všechny dotazy oponentů a dalších členů komise. Především uchazeč důkladně a přesvědčivě objasnil svůj vlastní přínos, co se týče publikací s více autory. Dotazy byly zaměřeny především na (1) obecnou použitelnost veřejných datových sad pro účely experimentálního porovnávání různých technik pro vyhledávání molekul, (2) omezení prohledávání na všechny možné dvojice molekul za účelem zrychlení výpočtu, (3) reprodukovatelnost výsledků měření v kontextu celého oboru, a (4) vizuální odlišnost molekul které mají podobné chemické vlastnosti.

Obhajoba pokračovala neveřejnou částí a tajným hlasováním, na jehož základě RDSO 4I2 uděluje Mgr. Petru Škodovi titul Ph.D.

Výsledek obhajoby:	prospěl/a (P)	
Předseda komise:	prof. Ing. Petr Tůma, Dr.
Členové komise:	doc. RNDr. Petr Hnětynka, Ph.D.
	doc. RNDr. Vlastislav Dohnal, Ph.D.
	prof. Ing. Jan Holub, Ph.D.
	RNDr. Jan Kofroň, Ph.D.
	RNDr. Martin Kruliš, Ph.D.
	prof. RNDr. MUDr. Petr Maršálek, Ph.D.
	RNDr. Pavel Parížek, Ph.D.
	RNDr. Filip Zavoral, Ph.D.