

# Posudek diplomové práce

Matematicko-fyzikální fakulta Univerzity Karlovy

**Autor práce** Adam Frey  
**Název práce** Predicting novel drug-target interactions via deep learning techniques  
**Rok odevzdání** 2020  
**Studijní program** Informatika      **Studijní obor** Umělá inteligence

**Autor posudku** Ladislav Peška      **Role** Vedoucí  
**Pracoviště** Katedra Softwarového Inženýrství

## Text posudku:

Student se v práci zabývá možnostmi, jak zapojit strojové učení (především různé deep learning modely) při predikci vazeb mezi léčivými látkami a proteiny (drug-target interaction, DTI). Na práci oceňuji především velmi pěkně zpracovanou teoretickou část, která může sloužit jako úvod jak do problematiky drug-target interactions, tak i strojového učení. Teoretická část také poskytuje poměrně obsáhlý rozbor výchozích bodů pro predikci DTI a již existujících přístupů.

V praktické části práce se oproti předpokladu příliš neprosadily techniky založené na deep learningu a obohacování datové sady o CB informace. Nicméně, některé varianty navržených modelů (založené na faktorizaci matic) dosáhly poměrně výrazného zlepšení predikce oproti state-of-the-art - experimentální část práce lze tedy hodnotit jako úspěšnou.

Mezi slabší části práce lze uvést popis modelu a experimentů (kapitola 4), který by mohl být trochu lépe provázaný s předchozími kapitolami a dosažené výsledky analyzovat více do hloubky. Také předložený zdrojový kód by mohl obsahovat detailnější popis jednotlivých kroků algoritmu a lépe modelovat jednotlivé varianty řešení.

Zmíněné nedostatky však nejsou nikterak závažné a práci doporučuji k obhajobě.

**Práci doporučuji k obhajobě.**

**Práci nenavrhuji na zvláštní ocenění.**

*Pokud práci navrhuje na zvláštní ocenění (cena děkana apod.), prosím uveďte zde stručné zdůvodnění (vzniklé publikace, významnost tématu, inovativnost práce apod.).*

**Datum** 23. ledna 2020

**Podpis**