

Posudek oponenta diplomové práce

Katarína Figurová: Úlohy globální optimalizace v praxi

Vedoucí diplomové práce: Doc. RNDr. Petr Lachout, CSc.

Oponent: Mgr. Bc. Michal Červinka

Autorka diplomové práce si zvolila zajímavé téma. V současné době využívá moderních optimalizačních metod velká řada vědních disciplín. Jedním z takových vědních oborů je také strukturní biochemie, která optimalizační algoritmy aplikuje na problém skládání proteinů; polypeptidů tvořících řetězec aminokyselin poskládaných v 3-dimenzionální strukturu. Skládání samotné je fyzikální proces, který podléhá základním fyzikálně-chemickým zákonům a na konečný tvar polypeptidu má vliv velké množství faktorů. Snahou strukturní biochemie je pak efektivně a co nejpřesněji tyto faktory zohlednit a předpovědět tak finální strukturu proteinu.

Obsahu názvu práce diplomantka věnuje vhodně jen minimum prostoru a hlavní pozornost věnuje právě aplikaci optimalizačních metod na problém skládání proteinů. Na druhou stranu úvodní část věnovanou globální optimalizaci redukuje pouze na velmi hrubý základní vývoj a přehled podoborů a stručný výčet používaných metod. Často pak k popisu používá sice efektní, ale pro člověka dokonale neseznaného s tematikou globální optimalizace bez podrobného výkladu spíše matoucí pojmy (např. prohledávací strategie sledování cesty, diverzní minorantní funkce nebo esenciální supremum užitkové funkce). Všechny nestandardní pojmy by pro usnadnění čtenáři zasloužily stručný komentář a přinejmenším odkaz na vhodnou základní literaturu.

V úvodu následné kapitoly věnované přehledu aplikací velice pěkně popisuje známé aplikace v ekonomii, logistice, fyzice, chemii a medicíně, nicméně proč se v druhé části věnuje podrobněji pouze využití v medicíně a podmořské akustice není vůbec zmíněno, čímž kapitola působí nesourodě.

V následující kapitole věnované problému skládání proteinů diplomantka čtenáře seznamuje se základními pojmy z biochemie a názorně za pomoci obrázků a grafů ilustruje náročnost úlohy. V kapitole 5 pak velmi stručně objasňuje rozdíl mezi dvěma základními modely (hydrofobním-polárním a polypeptidovým modelem). Téměř polovina rozsahu celé práce je pak věnovaná popisu osmi používaných algoritmů k řešení uvažované úlohy, v závěru práce doplněným o stručné porovnání. Pro náplň těchto kapitol diplomantka zpracovala materiál úctyhodného množství zdrojů. Na druhou stranu ale opět nebere v potaz, že čtenář nemusí být dokonale seznámen se všemi uvedenými pojmy a tak např. cyklický a fibrilární peptid, či Markovská procházka na hypermřížce a Boltzmanovy pravděpodobnosti přechodu čtenáři nejsou objasněny.

Z celé práce je cítit snaha autorky co nejvíce se vyhnout rigorózním matematickým formulacím a zůstat pouze u obecného slovního popisu; pouze v úvodu práce je uveden sled čtyř definic lokálního/globálního minima a maxima. Tento dojem je nejvíce citelný v části věnované algoritmům, kdy veškerý popis je pouze slovní, často pak umocněn vágními formulacemi, např. „po několika opakováních s rozumnou jistotou najdeme globální minimum“ (str. 41) nebo „vyberou se nejlepší ...(pohyby)... (na základě nějakých pravděpodobnostních pravidel)“ (str. 50). Především právě výpočetní složitost a paměťová

náročnost algoritmů a jejich rychlost konvergence k řešení, z výpočetního hlediska pro vhodnost použití té dané metody na konkrétní úlohy klíčové faktory, pak v popisu jednotlivých metod mnohdy nejsou uvažovány.

V úvodních kapitolách autorka uvádí u nových pojmů také anglický ekvivalentní název, což výrazně usnadňuje čtenáři orientaci v citované literatuře; nicméně od kapitoly 3 již anglické názvy k pojmům neuvádí. Obrázek 5.3 (Ramachandranův graf pro hemoglobin) je uveden bez škály a popisu os. Po matematické stránce zásadně nesouhlasím pouze s větou pod vzorcem (6.2) (str. 42), která je nepravdivá. Z typografických nedostatků bych uvedl nevhodné náhodné odsazování odstavců v rámci jednotlivých kapitol mezerami rozdílné velikosti, nekonzistenci v odsazování podkapitol na novou stranu (výjimkou je podkapitola 5.2) a velmi často se opakující mezeru i před čárkou oddělující věty. Dalších typografických chyb je v práci s ohledem na délku textu přijatelné množství.

Odhlédneme-li od výše zmíněných nedostatků, diplomantka úspěšně splnila vytyčený cíl práce seznámit čtenáře se základní problematikou úlohy skládání proteinů a možnostmi využití metod globální optimalizace k řešení tohoto výpočetně náročného problému. Autorka zpracovala velké množství literatury, čímž čtenáři neznalému problematice uvedené úlohy tato diplomová práce poskytne základní přehled o doposud známých výsledcích a umožní mu snadno vyhledat v případě zájmu vhodné odborné zdroje.

Předložená práce splňuje předpoklady kladené na diplomovou práci. Doporučuji ji proto za práci diplomovou uznat.

V Praze dne 5.9.2007



Mrg. Bc. Michal Červinka