

Posudek bakalářské práce

Matematicko-fyzikální fakulta Univerzity Karlovy

Autor práce Denys Boyko
Název práce De novo generování malých molekul z hmotnostních spekter pomocí modelu diskrétní difúze
Rok odevzdání 2025
Studijní program Informatika
Specializace [Click here to enter text.](#)

Autor posudku David Hoksza
Pracoviště KSI MFF UK

Role Oponent

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*.

K celé práci	lepší	OK	horší	nevyhovuje
Obtížnost zadání	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Splnění zadání	<input checked="" type="checkbox"/>	<input 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 type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Komentář Práce vyžadovala seznámení se s netriviální aplikační doménou a vhodné mapování relativně pokročilých konceptů strojového učení do dané domény. Výsledný model je testován proti state-of-the-art v dané doméně, kde dosahuje srovnatelných výsledků, což je skvělý výsledek na bakalářskou práci. Práce obsahuje také kritické zhodnocení výstupů a návrh na zlepšení, které znějí vcelku realisticky a předpokládám, že by mohli s relativně malým úsilím vést k dalšímu vylepšení metody.				

Textová část práce	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 type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Komentář Text obsahuje vhodné množství detailů nutných nejen k pochopení detailů aplikační domény, ale i ML pozadí celého projektu. Text práce je dobře strukturovaný, dobře se čte a celkově k němu nemám co dodat.				

Implementační část práce

	lepší	OK	horší	nevyhovuje
Kvalita návrhu ... <i>architektura, struktury a algoritmy, použité technologie</i>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Kvalita zpracování ... <i>jmenné konvence, formátování, komentáře, testování</i>	<input checked="" 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 Obzvláště oceňuji snahu o replikovatelnost celé ML pipeline, včetně procesu trénování a evaluace a zabalení celého procesu v rámci *conda prostředí. Možná jediná výtky by mohla být k tomu, že výsledný projekt není zcela multiplatformní (a tato informace není nikde uvedena), přinejmenším kvůli knihovně graph-tool, která neobsahuje Windows implementaci.				

Celkové hodnocení Výborně Choose an item.

Práci navrhuji na zvláštní ocenění Ne

Datum 10. června 2025

Podpis