

# Posudek práce

předložené na Přírodovědecké fakultě JU

- posudek vedoucího  
 bakalářské práce
- posudek oponenta  
 diplomové práce

Autor/ka: Marie Doležalová  
Název práce: Nástroj pro generování elementárního složení z dat hmotnostních spektrometrů s vysokým rozlišením  
Studijní program a obor: Aplikovaná informatika  
Rok odevzdání: 2015

Jméno a tituly vedoucího/opponenta: Ladislav Beránek, doc., Ing., CSc.  
Pracoviště: Ústav aplikované informatiky  
Kontaktní e-mail: beranek@jcu.cz

## Odborná úroveň práce:

- vynikající  velmi dobrá  průměrná  podprůměrná  nevyhovující

## Věcné chyby:

- téměř žádné  vzhledem k rozsahu přiměřený počet  méně podstatné četné  závažné

## Výsledky:

- originální  původní i převzaté  netriviální kompilace  citované z literatury  opsané

## Rozsah práce:

- veliký  standardní  dostatečný  nedostatečný

## Grafická, jazyková a formální úroveň:

- vynikající  velmi dobrá  průměrná  podprůměrná  nevyhovující

## Tiskové chyby:

- téměř žádné  vzhledem k rozsahu a tématu přiměřený počet  četné

## Celková úroveň práce:

- vynikající  velmi dobrá  průměrná  podprůměrná  nevyhovující

**Slovní vyjádření, komentáře a připomínky vedoucího/oponenta:**

Bakalářská práce se zabývá predikcí elementárního složení chemických látek na základě znalosti hmotnosti stanovené s vysokou přesností. Predikce představuje nalezení validní kombinace počtu a druhu atomů, tj. elementárního složení molekuly, která svou hmotností odpovídá přesně naměřené hodnotě. Autorka provedla velmi kvalitní rešerši a na jejím základě vytvořila aplikaci pro zjišťování vzorců metabolitů na základě jejich izotopové obálky. Aplikace je napsána v C++. V této části práce oceňuji zejména navržený způsob paralelizace navrženého řešení. Autorka odvedla velmi dobrou práci, a jak k části teoretické, tak i praktické nemám připomínky. Snad jen drobnou formální připomínku bych měl k tomu, že začátek kapitoly by přeci jenom měl začínat na nové stránce. Zvyšuje to přehlednost textu.

**Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:**

1. V textu odhadujete složitost navrženého algoritmu jako exponenciální, jak byste odhadla vliv paralelizace?
2. Spíše námět do diskuze, není to lehký problém, ale: podobným tématem se zabývají například i autoři některých balíčků (vignette) v prostředí jazyka R (BioConductor), např. odkaz <http://bioconductor.org/packages/release/bioc/vignettes/Rdisop/inst/doc/Rdisop.pdf>. Jedná se o stejný postup nebo existují k tomuto problému i různé přístupy?

**Práci** doporučuji nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

**Navrhuji hodnocení stupněm:** výborně  velmi dobře  dobře  neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta:

V Českých Budějovicích 8.5.2015

