

# Posudek práce

předložené na Ústavu aplikované informatiky Přírodovědecké fakulty 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 obor:**

Aplikovaná informatika

**Datum odevzdání:**

24.4.2015

**Jméno a tituly vedoucího/oponenta:**

**ing. František Drdák, CSc.**

**Pracoviště:**

ÚAI PřF JU

**Kontaktní e-mail:**

fdrdak@prf.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:**

Práce se zabývá návrhem a implementací sw aplikace podporující proces zjišťování elementárního složení neznámých látek na základě dat získaných z hmotnostního spektrometru Thermo Orbitrap Exactive Plus.

V úvodní teoretické části je uveden fundovaný popis fyzikálně chemických principů hmotnostní spektrometrie, konkrétního měřicího technického zařízení a dat, které toto zařízení generuje v rámci prováděných měřicích experimentů.

Tato data jsou pak předmětem zpracování aplikací, jejíž návrh je proveden v praktické části předkládané práce. Jádrem této aplikace tvoří autorkou navržený algoritmus generování sumárního vzorce molekuly, který odpovídá naměřené celkové hmotě dané molekuly. Problém ověřování všech možných kombinací prvků vykazuje vysoký stupeň složitosti. Ta je významně redukována aplikací omezujících pravidel, které se na sumární vzorce vztahují. Technicky je aplikace implementována v jazyce C++ a formou DLL knihovny integrována do programového vybavení pracoviště. Ke zvýšení výkonu aplikace je dále využito paralelního zpracování řešené úlohy. V závěru autorka diskutuje výsledky testování a možnosti další optimalizace heuristických pravidel.

Lze konstatovat, že autorka prokázala schopnost úspěšně se zorientovat v náročné problematice oboru hmotnostní spektrometrie a na velmi dobré úrovni aplikovat informatické postupy pro řešení zadané navazující úlohy. Proto hodnotím tuto práci **výborně**.

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

Byla provedena verifikace nástroje provedením experimentů s látkami se známým složením?  
S jakým výsledkem?

### **Námět do diskuze:**

#### **Práci**


- doporučuji  
 nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

#### **Navrhuji hodnocení stupněm:**

- výborně  velmi dobře  dobře  neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta:  
České Budějovice, 9/5/15

  
.....