

Oponentský posudek doktorské disertační práce RNDr. Vlastimila Hrušky:

## **Softwarové prostředky pro optimalizaci základních elektrolytů v elektroforéze**

Kapilární elektroforéza je v současnosti velmi používanou analytickou technikou. Požadavkem praxe je neustálé zvyšování výkonu metody z hlediska kvalitativního i kvantitativního, přičemž kritickými parametry jsou citlivost a reprodukovatelnost. Pro návrh a úspěšnou implementaci dobře fungující analytické aplikace je nutno mít přehled nejen o vlastnostech zvoleného elektrolytového systému, ale i o jeho interakci se vzorkem v průběhu separace, a to zejména v počáteční fázi po nadávkování vzorku. Teoretické práce čím dál častěji ukazují, že konkrétní situace může být dosti složitá a vést k neočekávaným nereprodukovatelnostem nebo k chybné interpretaci výsledků. I když by se mohlo zdát, že teoretické principy elektroforézy jsou již dostatečně prozkoumány, ukázalo se v poslední době opakovaně, že i některé dosti zásadní představy o chování elektroforetických systémů dosud chyběly nebo byly nepřesné či velmi neúplné. Proto výzkum v oblasti teorie a metodologie elektroforézy zůstává i nadále velmi potřebný a aktuální. Výborným nástrojem pro předpověď chování konkrétních systémů a pro eliminaci těchto nebezpečí jsou počítačové simulace, v uživatelsky nejvhodnější formě představované programem Simul z dílny pracoviště disertanta. Předkládaná disertační práce je velmi podstatným příspěvkem k uvedené problematice.

Formálně je práce předkládána jako soubor 10 původních prací publikovaných ve světových oborových časopisech. Obsahově je lze rozčlenit do 3 skupin.

První a nejrozsáhlejší skupina prací (I, IV, VI, VII, VIII, X) přináší zásadní příspěvek k teorii systémových zón (eigenzón), vlastností základních elektrolytů a regulačních funkcí. Vektorovou analýzou linearizovaného modelu elektromigrace byl vytvořen pojem eigenmobilit jako inherentních parametrů systémů a popsány jejich vlastnosti a vztah k systémovým zónám a jejich vlastnostem, jako jsou mobilita nebo amplituda (intenzita). Pozoruhodným výsledkem je předpověď neočekávaných vlastností elektroforetických systémů jako důsledek anomálních vlastností systémových zón:

- amplifikace systémové zóny jako důsledek její rezonance se zónou analytu;
- systém bez regulační funkce jako důsledek neuskutečněního křížení s existencí dvou systémových zón s nenulovou mobilitou;
- oscilující systém jako důsledek komplexního křížení a neexistence definovaných reálných systémových zón;
- využití vlastností systémových zón ke stanovení kritické micelární koncentrace v micelární elektroforéze.

Významným příspěvkem je i nový pohled na regulační funkce v elektroforéze, který rozšířil dosavadní spektrum systémů, pro něž je možno takové funkce definovat, a zároveň uvedl problematiku regulačních funkcí i systémových zón do společného jednotícího rámce.

Druhou skupinu (II, III, V) tvoří práce zabývající se praktickou aplikací teorie a tvorbou výpočetních a simulačních programů. Praktické aspekty vypracovaného modelu vlastností elektrolytů a systémových zón byly začleněny do programu Peakmaster, jehož podstatně rozšířená a vylepšená verze v elektroforegramu předpovídá rovněž počet, polohu a intenzitu systémových zón. Velmi podstatným způsobem byl přepracován program Simul na simulaci elektroforetických procesů v kapiláře, který nyní ve freewarové verzi 5 umožňuje provádět složité simulace multikomponentních systémů zahrnujících i amfolyty a vícetytné kyseliny a báze s téměř neuvěřitelnou snadností a uživatelským komfortem. Rovněž další vlastnosti

zahrnuté do vývojové verze programu budou znamenat podstatné rozšíření uživatelských vlastností, z nichž za uživatelsky nejzajímavější považuji zabudování akcelerátoru výpočtu a zahrnutí micelárního módu a komplexotvorných rovnováh.

Poslední publikace (IX) poněkud vybočuje z rámce ostatních prací. Přináší novou metodu stanovení spolehlivých hodnot elektroforetických mobilit oproštěných od vlivu Jouleova tepla a použitého elektrolytu. Metoda využívá sady měření prováděných při různých ohřevech a extrapolaci získaných dat na nulový ohřev. K převodu získaných mobilit na termodynamické hodnoty byl použit program Peakmaster.

#### HODNOCENÍ PRÁCE:

Předložená práce vysoce překračuje požadavky na doktorskou disertaci. Všech 10 původních vědeckých publikací prošlo náročným recenzním řízením a bylo uveřejněno ve špičkových světových oborových časopisech s vysokými impaktními faktory. Také nabíhající citovanost těchto prací dokazuje jejich kvalitu. Programy Peakmaster a Simul jsou široce používány v celosvětovém měřítku. Z výše uvedených důvodů práci plně doporučuji k obhajobě.

V Brně 30.7.2008

.....  
RNDr. Petr Gebauer, CSc.  
UIACH AV ČR Brno, v.v.i.

#### Připomínky a dotazy:

K práci nemám žádné konkrétní výtky. Dovoluji si formulovat jen jeden dotaz obecnějšího rázu, který by mohl být případně diskutován v rámci rozpravy. Je dle současného stavu poznatků reálné, že by v blízké budoucnosti byl některý z výše zmíněných programů opatřen vyšší umělou inteligencí? Mám na mysli třeba situaci, kdy by výpočet v programu Peakmaster ukázal, že zvolený systém není z nějakého důvodu vhodný pro separaci daného vzorku, a program by sám doporučil, jak systém změnit, aby byl splnil požadavky na konkrétní analýzu.