



Oponentský posudek

Diplomová práce: **Automatická analýza dat v kapilární zónové elektroforéze**

Diplomantka: **Bc. Magda Ördögová**

Studijní obor: **Fyzikální chemie**

Diplomová práce Magdy Ördögové se zabývá implementací statistických metod pro analýzu dat získaných z elektroforetických měření do softwaru Eval, vyvíjeného v místní skupině. Pro úspěšné naplnění této práce si tak musela diplomantka osvojit hned několik technik, které jdou nad rámec klasické náplně oboru fyzikální chemie.

1. Objektové programování v C++
2. Základy numerické matematiky pro řešení nelineárních úloh
3. Pokročilejší metody matematické statistiky (intervalové odhady, testování hypotéz)

V úvodní části je představena elektroforeza jako fyzikálně-chemická/analytická metoda, jejíž výsledky je třeba kvalitně statisticky zpracovat, aby bylo možné ověřit robustnost dovozovaných závěrů. Takto motivovány jsou postupně představeny jednotlivé techniky, které je/bude třeba použít při naplňování cíle práce. Část textu popisující numerickou matematiku a programování mi přijde možná až příliš podrobná, na druhou stranu dobře poslouží i budoucím *vývojářům* ve skupině. Naopak u části věnované testování hypotéz, které chápu na osvojení jako nejnáročnější část této práce, by mohl být text obsáhlejší. Možná doplněn o ilustrativní, ale netriviální příklad.

Výsledková část práce je velmi přehledná, text je pěkně dokreslen ukázkami z kódu. Nové funkce programu Eval jsou ve shodě s výsledky obdrženy jiným populárním softwarem (R, Origin) a stručně diskutovány. Text samotný obsahuje minimum drobných chyb a překlepů, snad *nejvážnějším proviněním* je neskloňování slova Tabulka, při odkazování se v textu.

Otázky a připomínky:

1. V rovnicích 22-24 – při minimalizaci funkce χ^2 se vyskytuje několik proměnných, které nejsou pojmenovány – např. γ , vztah vektoru \mathbf{d} k $\text{grad}(\chi^2)$ atp. Mohla byste je dovysvětlit?
2. Píšete, že v blízkosti minima lze χ^2 nahradit kvadratickou formou. Platí to pouze v blízkosti minima? Jak byste odvodila rovnici 23 z rovnice 22?
3. Co znamená, že je matice diagonálně dominantní a proč je to důležitá vlastnost matice?
4. Jaký je význam $w_{0,05}$ a $w_{L0,05}$ ve vztahu 47?
5. V kapitole 4.4.4, obrázek 19, Tabulka 6 – nelze závěr na straně 75, že se mobility enantiomerů neliší odvodit už z hodnoty $\Delta\mu_{SL} \pm$ směrodatná odchylka? Řekl bych, že to by byl dnes nejčastější postup.
6. S ohledem na skupinu v níž práce vznikala mi chybí alespoň jedno uvedení rovnice kontinuity, např. ve zde diskutovaném systému s komplexujícím činidlem.
7. Jaký je správný název: elektroferogram, nebo elektroforeogram?

Celkově práce působí velmi dobrým dojmem. Je překvapivě čtivá a přímočaře naplňuje krok za krokem vytčené cíle. Nejen proto, že se diplomantka nebála si osvojit (a zjevně si i osvojila) znalosti z oborů ve společnosti veskrze neoblíbených, doporučuji práci Bc. Magdy Ördögové k obhajobě.

V Praze, 21. května 2015

RNDr. Mgr. Jan Heyda, Ph.D.