

Smoothing of spectrometric data

Petra Millarová

posudek vedoucího práce

Předložená bakalářská práce je věnovaná vyhlazování spektrometrických dat z projektu NAKI DF13P01OVV002 „Nové moderní metody dokumentace památkových objektů“. Měřená data byla pořízena spektrometrem NIRQuest512-2.5 firmy Ocean Optics, který měří ve vlnových délkách zhruba 900-2500 nm. K dispozici byly měřené vzorky různých stavebních materiálů a dále syntetická data, která simulovala složené materiály, na kterých byla ověřována schopnost programu QSdata detekovat dominantní složky směsí.

Jak ukazuje bakalářská práce, jsou přímo měřená data velmi zatížena lokálním šumem a cílem práce proto bylo porovnat odhady složení vzorků pro surová a vyhlazená data. Studentka implementovala standardní algoritmus Savitzky-Golay filter (SGF), dále pro porovnání klouzavé průměry (MA - moving average filter) a porovnávala výsledky výpočtu optimální lineární kombinace daných etalonů se syntetickými vzorky metodou nejmenších čtverců s nezápornými parametry (z analyzovaného vzorku nelze etalony “odečítat”). Pro ekvidistanční krok vlnových délek je snadný výpočet prvních a druhých derivací, které v daném případě můžeme použít pro odhady složení vzorků a určení lokálních extrémů.

Studentka na práci pracovala samostatně, spolehlivě a zadání práce splnila. Při pravidelných konzultacích a při práci během semestru prokázala schopnost samostatně tvůrčí práce na výbornou, stejně tak hodnotím odbornou úroveň práce, která je psána jasným stylem a angličtinou rodilé bilingvní mluvčí. Dokonalá vzorná sazba v systému LaTeX kvalitu textu podtrhuje. Formální jazykovou úroveň, srozumitelnost práce, výběr zdrojů a korektnost citací hodnotím také jako výborné.

Osobně si na práci cením serióznosti se kterou Petra Millarová přistupovala k softwaru, který je součástí práce. Zdrojové kódy jsou psány přehledně a čistým stylem, autorka využívá C++ knihovnu Boost (XML parser, lineární algebra). Software je zveřejněn pod licencí GNU GPL a zdrojové kódy jsou veřejně přístupné na serveru GitHub na adrese <https://github.com/millapet/petra-millarova-bt>.

Předloženou bakalářskou práci hodnotím klasifikačním stupněm **A - výborně**

prof. Ing. Aleš Čepek, CSc.
V Praze 9. června 2017