

Posudek vedoucího bakalářské práce

Student: Jan Holý

Název: Rozšíření programu OpenChrom o integrované řízení sběru dat

Analýza složení chemických látek je kritická pro mnoho odvětví průmyslu, lékařství a výzkumu. Přesné stanovení složek látek a jejich koncentrací přímo zjištěním jejich molekulové struktury je stále na hranici science fiction a proto se používají metody, které rozdělí směs nejdříve na jednotlivé složky buď podle poměru jejich molekulových vah a nábojů (hmotnostní spektrometrie) nebo dochází k rozdělení složek rozpuštěných v mobilní fázi při průchodu směsi fází stacionární na základě rozdílné rychlosti adsorbce a eluce jednotlivých složek (chromatografie). Po rozdělení složek v čase pak stačí nespécifická detekce přítomnosti některé ze složek k prokázání její přítomnosti nebo podle velikosti odezvy (píku) k určení její koncentrace.

Pro oblast chromatografie existuje velké množství velmi drahých komerčních aplikací a zařízení pro sběr dat a vyhodnocení výsledků. Mnoho uživatelů ale dává přednost otevřeným systémům nebo jejich kombinaci s existujícími, často staršími zařízeními. Problém je i kompatibilita originálních programů dodaných se zařízeními s novějšími verzemi operačních systémů.

Množství laboratoří používá i otevřený software CHROMuLAN, který byl za finanční prostředky firmy PiKRON vyvinutý na Přírodovědecké fakultě UK. Tento software zajišťuje ne jen zpracování, ale i sběr dat. V současné době je však již celkem zastaralý. Náhradou může být nový projekt OpenChrom, jehož komunita je na vzestupu a který je podporovaný Eclipse foundation.

Úkolem bakalářské práce bylo rozšířit tento program, který je schopný vzorky vyhodnocovat, o možnost sběru dat přímo ze analytických přístrojů. Program OpenChrom je implementovaný v jazyce Java na bázi platformy Eclipse RPC.

Program a je rozsáhlý a vlastní platforma vyžaduje osvojení si značných znalostí k tomu, aby bylo možné ji rozšiřovat. Téma práce bylo vypsané teprve poté, co student prokázal v rámci příprav, že dokáže napojit postupně postupně narůstající záznam/signál na zobrazovací prvky systému. Byly vytvořené nejnižší knihovny pro napojení ovladačů hardware do prostředí Java. Samostatně pak navrhl vyšší vrstvy rozhraní k zařízením. Příklad jak správně přidat kostru rozšíření do programu OpenChrom poskytl Dr. Philip Wenig, zakladatel a správce projektu OpenChrom. I přes tuto počáteční pomoc a podporu považuji zvládnutí komplexnosti práce studentem za příkladné. Přitom i při práci na vlastní implementaci částí, kde byl zcela odkázaný pouze na své schopnosti, se musel podrobit požadavkům na formátování a styl daných pravidly rozsáhlého projektu založeného a v současné době integrovaného do ještě komplexnější platformy ChemEclipse přesouvané přímo do projektu a správy Eclipse foundation.

Při této koordinaci na dálku s týmem v Hamburku se projevila určitá nezkušenost a nesmělost studenta, kterou také zmiňuje ve svém hodnocení Dr. Philip Wenig. Vlastní práci a výsledný kód však hodnotí slovy „In summary, he did a good job. The code is well structured. I only found some minor issues which need to be addressed. Furthermore, he quickly understood the Eclipse RCP concept“. Výsledek projektu jsme zatím stihli nezávisle otestovat s reálným zařízením jen v Čechách, ale věřím, že se stane rozšíření stane součástí projektu a příkladem pro další zařízení.

Práci doporučuji k obhajobě. Řešení je plně funkční, zůstává sice několik drobností z pohledu uživatelského komfortu k dořešení, ale vzhledem k náročnosti práce a schopnosti samostatně analyzovat a rozšířit takto rozsáhlý projekt hodnotím klasifikačním stupněm **výborně (A)**.

V Praze, dne 28. 1. 2016

Ing. Pavel Piša, Ph.D.
Katedra řídicí techniky
Fakulta elektrotechnická
České vysoké učení technické