



## Posudek oponenta diplomové práce

Název práce: Využití multiprvkové a vícerozměrné statistické analýzy pro klasifikaci suchých krmiv pro psy a kočky

Autor: Bc. Jana Venclová

Studijní obor: Analytická chemie

Předložená diplomová práce byla věnována problematice multielementární analýzy vzorků suchých krmiv pro psy a kočky pomocí hmotnostní spektrometrie s ionizací v indukčně vázaném plazmatu na spektrometru s průletovým analyzátozem s ortogonální akcelerací iontů (oTOF-ICP-MS) a optické emisní spektrometrie s buzením v indukčně vázaném plazmatu (ICP-OES). Data získaná z široce pojatého experimentu, ve kterém bylo v 51 vzorcích krmiv sledováno 35 prvků, byla zpracována pomocí vícerozměrných statistických metod. Pomocí diskriminační analýzy byly nalezeny proměnné umožňující úspěšné zařazení vzorků do tříd. Data podobného rozsahu nebyla dosud publikována, téma je zajímavé z hlediska hodnocení nutriční hodnoty i zdravotní nezávadnosti pro odbornou i laickou veřejnost.

Práce je členěna na úvod, teoretickou část, experimentální část, výsledky s diskusí a závěr. Teoretická část práce podává přehled současné nabídky suchého krmiva pro psy a kočky v České republice, jejich složení a výrob. Zabývá možnostmi prvkové analýzy krmiv se zaměřením na ICP-MS. V experimentální části práce jsou popsány použité instrumentace, chemikálie, analyzované vzorky, příprava vzorků k analýze a optimalizované parametry ICP-OES a ICP-MS analýzy. V kapitole výsledky a diskuze jsou uvedeny optimalizace lyofilizace a podmínek ICP-OES a oTOF-ICP-MS analýzy s cílem dosáhnout maximální detekční schopnosti a citlivosti navržených postupů, dále jejich validace a analytické charakteristiky. Data získaná pro analyzované vzorky jsou vyhodnocena pomocí základních statistických parametrů, jsou zpracována vícerozměrnými metodami – diskriminační a faktorovou analýzou a porovnává s legislativními limity. V závěru práce jsou shrnuty dosažené výsledky.

K práci mám následující připomínky a dotazy:

- [1] Autorka pracuje s množstvím zkratk, které jsou vysvětleny pouze v jejich seznamu, nikoliv přímo v textu při jejich prvním uvedení. V textu je řada drobných chyb v mezerách u pomlček, u symbolů jednotek, jsou zaměňovány pomlčky a spojovníky apod., výsledky nejsou uváděny jednotným způsobem, co se týká počtu platných míst (např. normy ČSN ISO 31-11, ČSN 016910...).
- [2] Teoretická část je psána stručně, až stroze bez propojujících myšlenek, což má za následek určitou nesourodost a nenávaznost jejích částí. V pasáži věnované vlastní analýze krmiv je velmi krátký úvodní přehled použitelných / používaných metod pro tento účel. Za ní následuje bez nijak vysvětlené souvislosti obsáhlá kapitola věnovaná spektrálnímu a nespektrálnímu interferencím v ICP-OES a ICP-MS. Z mého pohledu by bylo vhodné do teoretické části uvést i vysvětlení principů vícerozměrných metody, což autorka provedla ve výsledkové části, kde jejich zařazení narušuje prezentaci vlastních výsledků.

- [3] Popis přípravy multielementárních zásobních a kalibračních standardních roztoků (kapitola 3.2.1 a 3.2.3) nejsou příliš srozumitelné. Vhodnější by bylo shrnout přípravu např. do tabulkové formy.
- [4] V tabulce 7 jsou shrnuty analyzované vzorky. Pokud jsou dostupné informace, bylo by vhodné uvést i základní složku krmiva, což by mohlo pomoci při hodnocení vzorků z hlediska jejich podobnosti nebo při hledání možných zdrojů kontaminace např. těžkými kovy. *Proč není v tabulce uvedeno, pro koho je krmivo určeno?*
- [5] V tabulce 14 jsou vedeny detekční limity technik a metody. *Jakým způsobem byly určeny směrodatné odchylky, z nichž byly limity detekce a stanovitelnosti počítány?*
- [6] *Jakým způsobem bylo provedeno hodnocení rozdílů směrnic kalibračních závislostí (tabulka 12)? Byl použit nějaký statistický nástroj?*
- [7] Exploratorní analýzou (4.4.1) byly zajištěny nenormality u některých datových souborů a pro další jejich použití vyplynula potřeba transformace. Kroky zpracování dat, např. druh použité transformace, nakládání s odlehlými body, způsob hodnocení testů apod. jsou uváděny většinou ve vysvětlivkách pod tabulkami nikoliv textu, což zhoršuje sledování procesu zpracování. Považuji za vhodné celý datový soubor přiložit k práci (např. na CD nosiči). *Byly v souboru přítomné body, které odpovídají koncentracím pod limitou detekce / stanovitelnosti? Jak s nimi bylo naloženo?*
- [8] *Na základě jakého kritéria byly vzorky rozděleny do tříd pro hodnocení diskriminační analýzou?*
- [9] Při použití statistických nástrojů by bylo vhodné uvést, co bylo cílem jejich konkrétního použití, zda tento cíl byl naplněn a jaký to má důsledek pro vyhodnocení dat.
- [10] *Je možná fyzikální či nějaká jiná logická interpretace faktorů získaných faktorovou analýzou?*
- [11] *Je počet vzorků (51 případů) při počtu měřených analytů (35 proměnných, po redukci pro zpracování diskriminační analýzou 8, pro faktorovou analýzu 16) dostačující pro získání spolehlivých výsledků v práci použitých vícerozměrných metod?*

Předložená diplomová práce splňuje obsahové i formální nároky kladené na závěrečné práce a doporučuji ji k obhajobě s hodnocením: **B**

V Pardubicích 22. 5. 2018

doc. Ing. Anna Krejčová, Ph.D.

