

**Posudek na disertační práci Mgr. Ondřeje Vaculíka nazvanou
„Advanced Spectral and Image Processing of Hyperspectral Data“**

Podle studijního a zkušebního řádu se posudek vyjadřuje k následujícím bodům:

- a) k aktuálnosti tématu disertační práce,
- b) zda disertační práce splnila stanovený cíl,
- c) k postupu řešení problému a k výsledkům disertační práce s uvedením konkrétního přínosu doktoranda,
- d) k významu pro praxi nebo rozvoj oboru,
- e) k formální úpravě disertační práce a její jazykové úrovni,
- f) zda disertační práce splňuje podmínky uvedené v § 47 odst. 4 zákona,
- g) zda student prokázal nebo neprokázal tvůrčí schopnosti v dané oblasti výzkumu a zda práce splňuje nebo nesplňuje požadavky standardně kladené na disertační práce v daném oboru.

Vyjádření:

- a) Předložená práce popisuje vývoj přístroje pro hyper-spektrální mikroskopii s důrazem na automatizované získávání dat a pokročilé metody zpracování dat. Jde o vysoce aktuální práci, metody pro zpracování analýzu enormního množství dat jsou v současné době velmi aktivně vyvíjeny a zkoumány.
- b) V souladu s cíli uvedenými v kapitole 1.3 se práce primárně zaměřuje na vytváření nástrojů pro měření, zpracování a vyhodnocování hyper-spektrálních dat, kalibrace hyper-spektrálního přístroje, implementaci a vyhodnocení technik redukce dimenzionality a spektrálního rozkladu (spectral unmixing).

Z hlediska těchto stanovených cílů je největším přínosem práce strukturovaný a systematický rámec pro zpracování dat, který je představen v kapitole 2.4 a aplikován v kapitole 3.2.2. Analýza redukce dimenzionality (PCA, NMF, použití neuronových sítí) použitá na transmisní kalibrační test NIST představuje metodologicky nejrigoróznější část práce. Bylo provedeno hodnocení přesnosti rekonstrukce pomocí metrik SAD a RMSE a zkoumání kompromisů mezi dimenzionalitou a přesností. Ačkoli některé teoretické aspekty, např. analýza vlivu šumu měření, propagace chyb v celém procesu zpracování, vyhodnocení kondičního čísla směšovací matice (mixing matrix) nejsou detailně prozkoumány, proces zpracování dat je celkově dobře popsán a dokumentován. Část práce týkající se zpracování dat je jasně v souladu s deklarovanými cíli práce a představuje její hlavní silnou stránku.

V popisu instrumentálních a fyzikálních aspektů experimentální realizace hyper-spektrálního přístroje však spatřuji několik problémů. Návrh optického systému není dostatečně zdokumentován. V kapitole 3.1 jsou uvedeny CAD modely a fotografie částí přístroje, ale chybí jasné optické schéma popisující osvětlení vzorku a přenos záření na vstup spektrografu, přičemž zjednodušené schéma na obr. 2.2 neodpovídá použité konfiguraci zvoleného hyper-spektrálního přístroje využívající štěrbinu a zobrazovacího spektrografu. Z popisu osvětlovací soustavy na str. 28 se zdá, že zdroj osvětlení byl zobrazován do prostoru vzorku, což pokud tak bylo skutečně provedeno, vede k výrazné nerovnoměrnosti osvětlení vzorku s vážnými důsledky pro měření. Dalo by se čekat, že bylo použito spíše obvyklé Köhlerovo osvětlení, které ale není diskutováno. V popisu hyper-spektrálního přístroje chybí informace o použité tubusové čočce, parametrech spektrografu Offnerova typu, jako světelnost zrcadel, jejich ohnisková délka, parametry difrakční mřížky apod. Je možné předpokládat, že přístroj byl navržen pro optimální přenos záření při zachování optických invariantů, ale na základě prezentovaných dat to není možné ověřit.

Za nedostatek při popisu návrhu hyper-spektrálního mikroskopu považuji fakt, že prostorové rozlišení mikroskopického systému není nijak charakterizováno, experimentálně ani teoreticky. Není poskytnut žádný odhad prostorového rozlišení, omezený buď optickou konstrukcí přístroje nebo difrakcí, nebylo provedeno měření cílového rozlišení ani analýza MTF. Z hlediska výsledků v kapitole 3.2.3 není jasné, jaký význam má prostorové rozlišení pro analýzu provedených vzorků.

Vyhodnocení spektrálního rozlišení v kapitole 3.2.1 je odvozeno jen ze spektrálního vzorkování (spektrální rozsah pro tři pixely) a ne z naměřené šířky instrumentální spektrální čáry (FWHM). Spektrální rozlišení je ověřeno pouze na jedné vlnové délce (D-čáry ~589 nm), nikoli v celém použitém spektrálním rozsahu 400 – 650 nm, přičemž je jasné, že pro spektrální kalibraci přístroje muselo být nějaké referenční spektrum změřeno. Rovnoměrnost rozlišení podél šterbiny také není hodnocena. Zobrazená křivka zkreslení tvaru šterbiny „smile distortion“ nevykazuje klasický hladký parabolický tvar a není bohužel interpretována z hlediska optického kvality nebo aberací spektrografu. Korekce zakřivení obrazu šterbiny pomocí spojování pixelů (binningu) považují za příliš hrubou a zbytečně snižující spektrální rozlišení.

Spektrální rozlišení je důležitým parametrem pro porovnání realizované hyper-spektrální kamery s jinými komerčními přístroji (Tabulka S4). Kromě problému vyhodnocení spektrálního rozlišení zmiňovaného výše je z textu práce zřejmé, že uvedený spektrální rozsah 350–1100 nm není měřitelný v jedné konfiguraci, ale je nutné měnit nastavení difrakční mřížky, přičemž měření mimo rozsah cca 400 – 650 nm není v práci nijak dokumentováno.

V kapitole 3.2.3 se zdá, že spektrální rozklad je aplikován na transmisní data bez explicitní transformace do absorpčního prostoru. Vzhledem k tomu, že lineární aditivita je fyzikálně odůvodněna v absorpci (Lambert-Beerův zákon), vyvolává to obavy ohledně teoretické platnosti modelu míchání. Ve vztahu (2.9) je uveden přepočítání mezi absorbancí a transmitancí - ale význam absorbance není v linearity měření signálu, jak je nesprávně uvedeno, ale právě v možnosti lineárního rozkladu spektra do jednotlivých složek – vztah (2.11). Použití transmitance v kapitole 3.2.3 mohlo mít vliv na relativně velkou chybu v rozkladu spekter do složek, a pokud by byla použita absorbance, je možné, že by výsledky byly lepší. Otázky fluorescence, a zejména rozptylu u biologických vzorků, které mohou mít vliv na validitu Lambert-Beerova zákona, tedy validitu předpokladu možnosti lineárního rozkladu do spekter, bohužel nebyly diskutovány vůbec.

Lze říci, že práce splňuje svůj primární cíl v oblasti zpracování hyper-spektrálních dat a integrace pracovních postupů. Hlavní slabiny se týkají úplnosti optické a spektroskopické dokumentace a fyzikálního popisu a odůvodnění modelování. Tyto otázky by měly být objasněny během obhajoby, ale neznamenají zneplatnění hlavních vědeckých přínosů práce.

c) Hlavní přínos doktoranda při řešení disertační práce je možné spatřovat (a je tak i v práci deklarován) především ve dvou oblastech: podíl na vývoji hyper-spektrální kamery a ve zpracování hyper-spektrálních dat. V kapitole 3.1.4 je uvedeno, že v oblasti vývoje hyper-spektrální kamery byl přínos v oblasti realizace a ovládnutí motorizovaného polohování difrakční mřížky ve spektrografu, testování spektrálního rozlišení a stability hyper-spektrálního systému. Je škoda, že tyto evidentně provedené důležité činnosti nejsou v disertační práci dostatečně zdokumentovány, jak již bylo uvedeno výše. Přínos doktoranda z hlediska zpracování hyper-spektrálních dat je podle mého názoru dobře doložen.

d) Práce má velký význam pro praxi, hyper-spektrální zobrazování se používá v mnoha průmyslových oborech a vývoj experimentálního zařízení a automatizovaných postupů pro zpracování dat hrají zásadní roli. Byl vyvinut hyper-spektrální mikroskopický přístroj s unikátními

parametry, který je použitelný jak pro měření transmitance vzorků, ale díky vysokému spektrálnímu rozlišení a při úpravě osvětlení vzorku by mohl být použit i Ramanově spektroskopii (což pravděpodobně bylo zamýšleno).

e) Formální úroveň práce je dobrá a nemám k ní výraznější připomínky. Práce je psaná velmi dobrou angličtinou. Je škoda, že autor nepřiložil do příloh práce tři recenzované publikace, jichž je spoluautorem. Publikace v časopise *Optics Express* a v *Gels* jsem měl možnost stáhnout a prohlédnout, publikaci v *Journal of Vacuum Science and Technology B* bohužel ne. V přílohách předložené disertační práce mi také chybí popis nebo dokumentace k funkčnímu vzorku a prototypu hyper-spektrálního přístroje, který není veřejně přístupný.

Je škoda, že výsledky důležité prvoautorské publikace v *Optics Express* nejsou v předloženém textu disertační práce reflektovány, i s ohledem a použité techniky zpracování dat. Naopak výsledky disertační práce v kapitole 3.2.3 doposud publikovány nebyly.

f) S ohledem na výše uvedené, práce splňuje podmínky uvedené v § 47 odst. 4 zákona o vysokých školách. Doktorand publikoval jednu prvoautorskou publikaci v časopise *Optics Express* ve které byl zásadní jeho přínos v oblasti zpracování hyper-spektrálních dat. Doktorand byl dále spoluautorem dalších dvou recenzovaných publikací, prototypů a funkčního vzorku hyper-spektrálního přístroje s unikátními parametry.

g) Závěrem je možné konstatovat, že student prokázal tvůrčí schopnosti v dané oblasti výzkumu a práce splňuje požadavky standardně kladené na disertační práce v daném oboru.

Práci doporučuji k obhajobě s tím, že se doktorand vyjádří k výše uvedeným výhradám a zodpoví následující dotazy:

1) Prosím vyjádřete se k osvětlení vzorku v použitém přístroji a uveďte, zda bylo použito Köhlerovo osvětlení. Dokumentujte výsledky měření světlého pole (bright field), které byly evidentně provedeny.

2) Jak byste vyhodnotil prostorové rozlišení použitého hyperspektrálního přístroje?

3) Dokumentujte skutečné spektrální rozlišení v použitém spektrálním rozsahu, včetně toho, jak se v tomto rozsahu spektrální rozlišení mění, diskutujte spektrální rozlišení podél šterbiny spektrografu a vliv polohy difrakční mřížky na kvalitu spektra.

4) Jaká byla stabilita spektrálních měření v čase s ohledem na polohování difrakční mřížky?

5) Vyjádřete se k použití transmisních spekter v kapitole 3.2.3 a diskutujte, zda by přepočet na absorbanci mohl vést k jiným výsledkům, především z hlediska rozkladu spekter na složky.

V Olomouci dne 24. února 2026

RNDr. Josef Kapitán, Ph. D.
Katedra optiky
Přírodovědecká fakulta UP