VŠCHT PRAHA

FCHI

Sborník anotací

Studentská vědecká konference

19. 11. 2026

Ústav matematiky, informatiky a kybernetiky

Ústav matematiky, informatiky a kybernetiky
Fakulta chemicko-inženýrská
Vysoká škola chemicko-technologická v Praze

ÚSTAVNÍ KOORDINÁTOR

Ing. Iva Nachtigalová, Ph.D.

FAKULTNÍ KOORDINÁTOR

doc. Ing. Jitka Čejková, Ph.D.

fchi.vscht.cz/svk

SPONZOŘI ÚSTAVU MATEMATIKY, INFORMATIKY A KYBERNETIKY

Bude doplněno po 9. 11. 2026

Výuková matematická aplikace s náhodným generováním příkladů

Jiří Deák (B3)

Školitel: prof. Ing. Jan Mareš, Ph.D.

Tato práce se zabývá návrhem a implementací softwarové aplikace určené k zefektivnění přípravy studentů v oblasti středoškolské matematiky. Aplikace generuje náhodné matematické úlohy ze specifických tematických okruhů a poskytuje uživatelům okamžitou zpětnou vazbu díky implementaci pokročilých vyhodnocovacích mechanismů (algoritmické tolerance pro numerické zaokrouhlování a symbolického vyhodnocování algebraických výrazů pomocí knihovny SymPy). Klíčovým prvkem systému je integrovaná lokální relační databáze (SQLite), která automaticky zaznamenává historii spuštěných kvízů, detailní logy odpovědí a skóre s vazbou na konkrétního uživatele. Tento databázový model umožňuje studentům prohlížet vlastní statistiky a historii chyb přímo v aplikaci, zatímco vyučujícím poskytuje strukturovaná data pro budoucí analýzu nejčastějších koncepčních problémů. Výsledkem bude interaktivní nástroj, který tvoří technologický základ pro budoucí nasazení ve formě webové platformy v univerzitním e-learningu.

Modernizace serverové části kalendářové aplikace VŠCHT Praha

Klára Dvořáková (B3)

Školitel: Ing. Lukáš Mrazík

Stávající kalendářový systém VŠCHT Praha si vyžádal celkovou technologickou restrukturalizaci. Tato práce se věnuje modernizaci jeho serverové části založené na optimalizaci softwarové architektury a využívaných technologií. Práce vychází z analýzy původního monolitického řešení (ASP.NET/MS SQL). Nový relační model v PostgreSQL odstraňuje limity původního návrhu – zavádí flexibilnější systém štítků, plnou podporu vícejazyčnosti a standardizovaný formát pro opakující se události. Kritickou fází je transformace dat pomocí vlastního ETL (Extract, Transform, Load) procesu, který zajišťuje bezeztrátový přesun tisíců historických záznamů a obnovu porušené referenční integrity. Na tomto základě je implementováno REST API ve frameworku Django. Závěrečným krokem je komplexní systémová integrace. Úkolem nového API je odděleně obsluhovat samostatnou webovou administraci a veřejné klientské pohledy, především pak v nové aplikaci EMIL. Ta sjednocuje univerzitní IT ekosystém a poskytuje spolehlivý přehled o dění na VŠCHT a efektivní organizaci sdíleného akademického času.

Inverse Molecular Design of Photolabile Protecting Groups

Bc. Jakub Ferenčík (M2)

Školitel: Ing. et Ing. Štěpán Sršeň, Ph.D.

Photolabile protecting groups provide precise light-mediated spatiotemporal control in medicinal chemistry, organic chemistry, and chemical biology. However, the discovery of new molecular candidates is constrained by two factors: the high cost of quantum chemical simulations and the vastness of chemical space. The objective of this project is to investigate the viability of utilizing algorithmic and data science techniques, namely genetic algorithms and machine learning models, to design molecules with desired photochemical properties. These approaches can accelerate the identification of molecules meeting specified criteria and ultimately enable a more efficient discovery of new photolabile protecting groups.

Využití transformerových architektur pro klasifikaci Ramanových spekter

Zuzana Hájková (B3)

Školitel: Ing. Daniela Janstová a Ing. Jakub Tomeš

Tato práce se zabývá využitím moderních metod hlubokého učení pro automatizovanou klasifikaci Ramanových spekter biologických vzorků. Ramanova spektroskopie představuje převážně nedestruktivní analytickou metodu pro chemickou a strukturální charakterizaci tkání, avšak interpretace vysokodimenzionálních a zašuměných spektrálních dat bývá náročná, mimo jiné i kvůli biologické a technické variabilitě měření. Práce se zaměřuje na návrh a optimalizaci prediktivního řetězce zpracování dat (pipeline) využívajícího architekturu TransformerEncoder. Mechanismus pozornosti (Attention Mechanism) umožňuje zachytit specifické spektrální rysy i vztahy mezi vzdálenými oblastmi spektra. V rámci práce byla zpracována experimentální data tvořená Ramanovými spektry tkání potkanů a byl vyvinut klasifikační model, jehož výkonnost byla porovnána se standardními přístupy, jako je metoda podpůrných vektorů (Support Vector Machines, SVM). Hlavním cílem práce je ověřit úspěšnost klasifikace tkáňových vzorků pomocí transformerů a přispět tak k efektivnějšímu a objektivnějšímu vyhodnocování spektroskopických dat v biomedicínském výzkumu.

Automatizovaná analýza laryngoskopických videí pomocí umělé inteligence

Bc. Jiří Ingr (M2)

Školitel: Ing. Jan Vrba, Ph.D.

Přímá laryngoskopie je metoda sloužící ke sledování struktury a pohybu hlasivek a využívá se při vyšetření hlasových obtíží. Vyhodnocení pořízených videozáznamů však vyžaduje posouzení velkého množství snímků a může být časově náročné a obtížně standardizovatelné. Tato práce se zaměřuje na vývoj systému pro automatizovanou analýzu laryngoskopických videí pomocí metod umělé inteligence. K detekci anatomických struktur jsou využívány modely hlubokého učení, které jsou vyvíjeny a ověřovány na veřejně dostupných datových sadách i na vlastních datech pořízených ve spolupráci s Fakultní nemocnicí Královské Vinohrady. Získané segmentace slouží ke geometrickému měření hlasivek a glotické štěrbiny. Na základě těchto měření systém klasifikuje a lokalizuje dysfunkci. Cílem práce je propojit detekci, segmentaci, geometrické výpočty a klasifikaci diagnózy do jednoho celku a vytvořit základ pro systém poskytující z laryngoskopického videozáznamu objektivní a klinicky interpretovatelný výstup.

Gait quality analysis from video recordings

Bc. Michal Ivanisko (M2)

Školitel: Ing. Jan Kohout, Ph.D.

Assessing gait quality, especially in patients with balance disorder, is a valuable part of health measurement. Currently, this assessment is primarily visual, which makes it difficult for doctors to objectively quantify small changes over time. This work focuses on the development of a software tool for kinematic gait analysis from standard video recordings using anatomical keypoint extraction (MediaPipe framework).

Konstrukce cenově dostupných robotických zařízení pro chemické experimenty

Bc. Radim Ivanovič (M1)

Školitel: doc. Ing. Jitka Čejková, Ph.D.

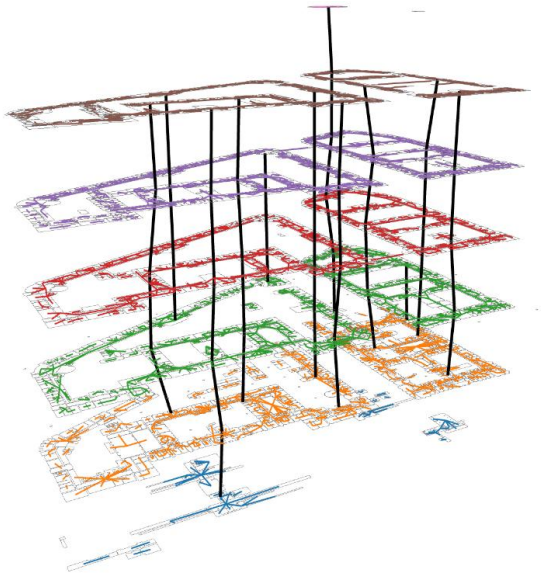
Tato práce si bere za cíl ukázat, že specializované laboratorní zařízení nevyžaduje nutně velkou finanční investici. S rostoucí dostupností elektronických součástek, mikrokontrolérů (platforma Arduino, ESP-32) a 3D tisku roste i schopnost laboratoří vytvářet si vlastní experimentální zařízení místo jejich nákladného pořizování. Tento přístup demonstruje například konstrukce přístroje I.V.A.N. (Instrument of Volumetric and Axial Normalization), což je automatizovaný pipetovací robot určený pro experimenty s nově objeveným chemickým systémem tvořícím vzory. K přesnému polohování a pipetování využívá krokových motorů. Součástí experimentální sestavy je i obrazová analýza umožňující vyhodnocování chování tohoto systému. I.V.A.N. tak představuje alternativu ke komerčním systémům a poskytuje spolehlivou (a flexibilní) platformu pro přesné dávkování a sběr dat. Na tuto filozofii vývoje dostupného hardwaru navazuje nově zkonstruovaný aparát O.L.G.A. (Omni-directional Looped Growth Apparatus) určený k usměrňování růstu chemobrionických struktur. O.L.G.A. tento růst formuje ve 3D prostoru cíleným nakláněním reakční nádoby a kamerové zpětné vazby. Obě zařízení využívají pro komunikaci s počítačem architekturu master (Python) / slave (C++).

Navigátor pro mapy VŠCHT Praha

Matěj Klang (B3)

Školitel: Ing. Lukáš Mrazík

Budovy VŠCHT jsou známé pro spletitost svých chodeb a obtížnost hledání učeben či jiných místností. Hlavní část dejvického kampusu, tedy budovy A a B, obsahuje 2 679 místností napříč osmi podlažími. Webová aplikace EMIL 2.0 sice poskytuje náhled na mapu místností a jejich vyhledávání, avšak neumožňuje uživatelům tvorbu tras mezi jednotlivými místy, funkci nezbytnou v moderních mapových systémech. Doplnění aplikace o tuto funkci je cílem tohoto projektu. Implementace navigátoru zahrnuje několik fází, od zpracování geografických dat poskytnutých školním serverem a jejich doplnění o chybějící údaje, přes optimalizaci pathfinding algoritmů, až po začlenění do stávajících funkcí aplikace. Surová geografická data jsou v programu reprezentována jako grafová struktura, kde vrcholy odpovídají jednotlivým místnostem a hrany vyjadřují průchodnost z jedné místnosti do druhé – dveřmi či spojeními vzniklými segmentací chodeb. Z této struktury čerpá algoritmus hledání tras, který poskytuje optimální trasu budovou či venkovními cestami a nádvořími, v závislosti na parametrech hledání. Tato trasa je poté připravena na předání do webové aplikace. Stávající prototyp je schopen v zanedbatelném čase najít cestu a vykreslit ji do dat poskytnutých EMILem, zbývá tedy jeho závěrečné spojení s aplikací.

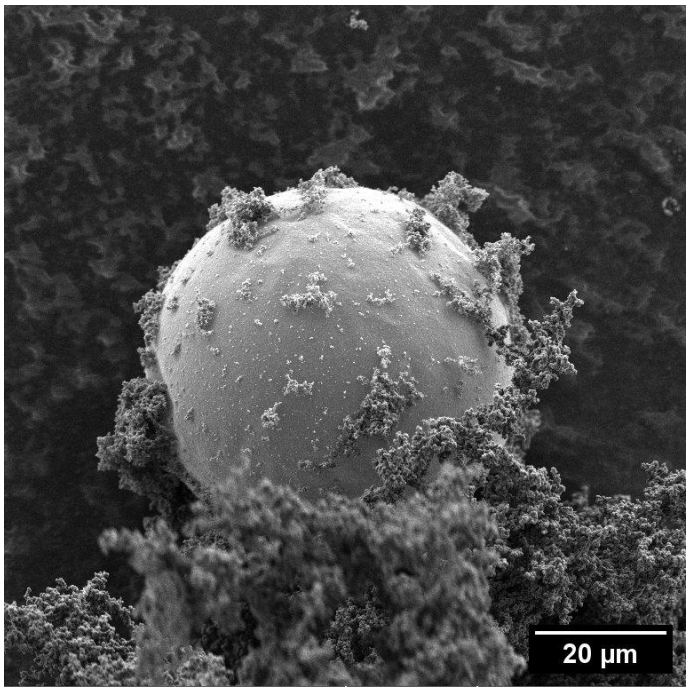


Řízená příprava mikrokulových struktur polypyrrolu na rozhraní plyn-kapalina pro mikrovlnné absorpční kompozity

Bc. Eliška Koželuhová (M1)

Školitel: doc. Ing. Dušan Kopecký, Ph.D.

Radarově absorpční materiály (RAM) snižují energii odraženou od detekovaného objektu absorpcí. Tomu napomáhá vhodné impedanční přizpůsobení, které, mimo jiné, je ovlivněno morfologií plniva. Předmětem této práce je zkoumání kulové morfologie vodivého polymeru polypyrrolu, který nabízí dobré impedanční přizpůsobení a vysokou absorpci v důsledku existence dipólů. Práce rozvíjí myšlenku, že fázové rozhraní plyn-kapalina lze použít jako šablonu pro polymerizaci polypyrrolu. Cílem je připravit sérii vzorků testující vliv surfaktantu dodecylsulfátu sodného na stabilitu a velikost kulových částic a jejich následný vliv na elektrickou vodivost a permitivitu. Připravené vzorky budou charakterizovány z hlediska strukturních a morfologických vlastností a elektrické vodivosti.



Snímek mikrokulové částice polypyrrolu ze SEM

Hodnocení závažnosti obličejové parézy pomocí strojového učení

Bc. Martina Křenková (M2)

Školitel: Ing. Jakub Ciler

Pacienti s obličejovou parézou procházejí dlouhodobou rehabilitací, během níž je potřeba opakovaně posuzovat, zda se jejich stav zlepšuje. K tomu slouží mimo jiné stupnice House-Brackmann (HB). Přiřazení konkrétního stupně však v klinické praxi převážně závisí na subjektivním úsudku lékaře. Cílem práce je navrhnout objektivní postup, který stupeň parézy odhaduje z dat rehabilitační aplikace snímající obličej pacienta pomocí technologie Apple ARKit. Soubor pacientů byl navíc rozšířen o data zpracovaná pomocí knihovny MediaPipe pro sledování obličeje. Analýza celých videozáznamů s následnou klasifikací sice dosahuje dobrých výsledků, je však časově i výpočetně náročná. Navržený postup proto místo celého videa pracuje pouze s vybranou sadou reprezentativních snímků. Pro každé cvičení byl takový snímek určen automatickou detekcí vrcholu pohybu, validovanou na anotovaných datech. Z těchto snímků byly odvozeny příznaky odpovídající kritériím HB, tedy asymetrie v klidu a rozsah a symetrie volního pohybu. Na jejich základě byl navržen model odhadující stupeň parézy.

Analýza stability a interpretovatelnosti modelu NISQA při hodnocení kvality hlasových nahrávek

Iva Křivohlávková Gieselová (B3)

Školitel: Ing. Jan Vrba, Ph.D., Ing. Tomáš Jirsa

Hlas je důležitým zdrojem informací o stavu hlasového ústrojí. Z jeho nahrávek lze hodnotit hlasové poruchy například pomocí škály GRBAS a využívat je při automatické detekci patologií. Kvalita záznamu však může ovlivnit spolehlivost této analýzy. Tato práce zkoumá stabilitu a interpretovatelnost modelu NISQA (Non-Intrusive Speech Quality Assessment), který bez referenční nahrávky odhaduje kvalitu řeči pomocí skóre MOS a čtyř dílčích dimenzí. Analýza využívá datasety Saarbrücken Voice Database (SVD), VOICED a vlastní nahrávky z různých akustických prostředí. Zaměřuje se na rozdíly mezi zdravými a patologickými hlasy a na vliv šumu, bitové hloubky, rychlosti přehrávání, RMS normalizace, ořezu ticha a segmentace. Rozdíly MOS mezi zdravými a patologickými hlasy byly malé, zatímco některé úpravy signálu měly výraznější vliv. Mezi nejvýraznější výsledky patřila RMS normalizace, která v datasetu SVD zvýšila průměrné MOS o 0,238 bodu. Výsledky zdůrazňují význam správné přípravy vstupních dat. Práce tak přispívá k ověření funkčnosti a stability modelu NISQA před jeho plánovaným nasazením do reálného provozu v rámci aplikace určené ORL klinikám.

Generování náhodných čísel

Bc. Hanna Lis (M2)

Školitel: Ing. Lukáš Hájek, Ph.D.

Generování náhodných čísel nachází široké uplatnění v počítačových simulacích, statistických analýzách a matematickém modelování. Tato práce se zaměřuje na návrh a praktické hodnocení generátoru pseudonáhodných čísel a na zkoumání možností využití fyzikálních zdrojů náhodnosti. V první části práce byl navržen a implementován vlastní generátor pseudonáhodných čísel založený na lineárním kongruentním generátoru a reverzibilních operacích pro promíchávání bitů. Navržený algoritmus umožňuje rychlé generování 64bitových čísel a vyznačuje se dlouhou periodou. Jeho statistické vlastnosti byly hodnoceny pomocí testovací sady TestU01 vyvinuté na Université de Montréal. Druhá část práce se zabývá možnostmi získávání náhodných bitů z fyzikálních procesů. Jako konkrétní příklad je zkoumán pohyb tekoucí vody zachycený na videozáznamu. Změny jasových hodnot pixelů mezi jednotlivými snímky jsou převáděny na binární posloupnosti, ze kterých jsou následně vytvářena čísla.

Vliv syntézních parametrů na vlastnosti uhlíkových teček pro transport léčiv

Bc. Vladimir Nikolaev (M2)

Školitel: doc. Mgr. Fatima Hassouna, Ph.D.

Uhlíkové tečky (CDs) jsou fluorescenční nanočástice, které díky malé velikosti, biokompatibilitě a snadno modifikovatelnému povrchu představují perspektivní nosiče léčiv s možností současného zobrazování. Jejich vlastnosti však silně závisejí na podmínkách syntézy, jejichž volba se dosud opírá převážně o metodu pokus-omyl. Změna jednoho parametru přitom často zlepší jednu vlastnost na úkor jiné, například kvantového výtěžku fluorescence, koloidní stability nebo výtěžku syntézy. Cílem této práce je systematicky popsat, jak syntézní parametry ovlivňují klíčové vlastnosti CDs, a nalézt podmínky nejvhodnější pro jejich využití v transportu léčiv. CDs byly připraveny hydrotermální syntézou z rozvětveného polyethyleniminu s persíranem amonným jako oxidačním činidlem. Zkoumán byl vliv množství oxidačního činidla, koncentrace prekurzoru a doby čištění na velikost částic, povrchový náboj, optické vlastnosti a stabilitu při skladování. Vzorky byly charakterizovány metodami dynamického rozptylu světla, měření zeta potenciálu, UV-Vis a fluorescenční spektroskopie. Získané poznatky umožní zvolit optimální podmínky syntézy CDs pro jejich následné využití jako nosičů léčiv.

Návrh a experimentální ověření platformy STM32 pro řízení krokového pohonu laboratorního zařízení

Bc. Daniil Prikhodko (M2)

Školitel: doc. Ing. Dušan Kopecký, Ph.D.

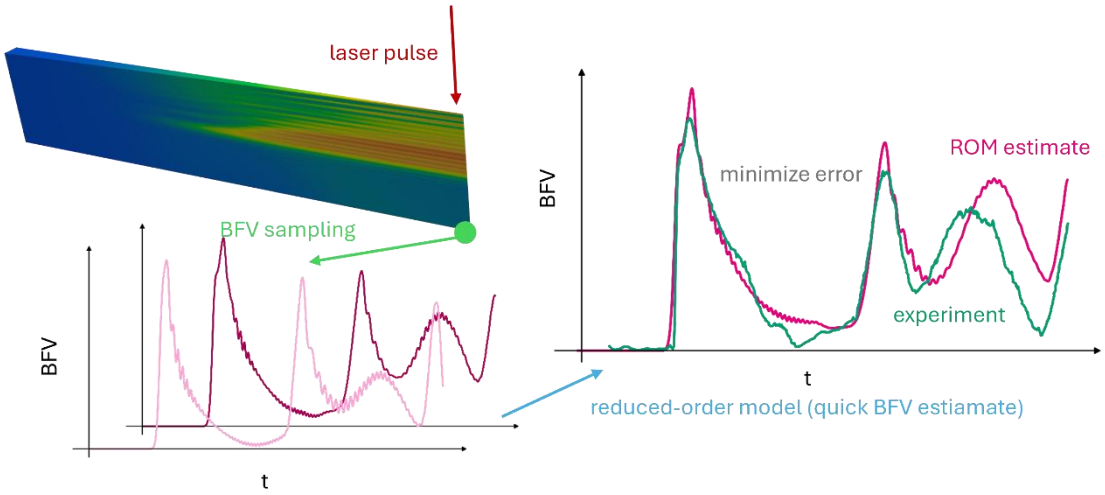
Práce se zabývá návrhem a experimentálním ověřením platforem STM32 pro řízení krokového pohonu laboratorního zařízení. Cílem je porovnat dostupné vývojové desky STM32 z hlediska jejich časovačů, možností přesného generování krokových impulzů, komunikačních rozhraní, dostupných vstupů a výstupů, výpočetního výkonu a možností budoucího rozšíření systému. Pro všechny hodnocené platformy bude v jazyce C implementován základní řídicí firmware podporující řízení směru, počtu kroků a rychlosti motoru, provádění základních pohybových sekvencí a komunikaci s nadřazeným počítačem. Jednotlivé platformy budou experimentálně ověřeny pomocí malého krokového motoru a porovnány z hlediska přesnosti a opakovatelnosti pohybu, časového chování a zatížení mikrokontroléru. Na základě výsledků bude vybrána nejvhodnější platforma pro budoucí řízení motoru laboratorního testovacího stojanu. Součástí práce bude také návrh rozšíření systému o snímání polohy, komunikaci se siloměrem a bezpečnostní funkce.

Model order reduction for parameter identification in Laser Peening simulations

Bc. Jarmila Terpáková (M2)

Školitel: Ing. Martin Isoz, Ph.D.

Laser peening (LP) is a surface treatment technique that uses high-intensity laser pulses to induce compressive residual stresses near material surface and, as a result, improves fatigue resistance of mechanical components. The material response to LP can be investigated and predicted using numerical simulations. However, numerous factors affecting the outcome of LP make the development of predictive models difficult. In particular, during LP, materials experience strain rates exceeding 10^6 s^{-1} and their description requires suitable constitutive models, such as the Johnson-Cook material model. However, the parameters of this model are difficult to determine accurately, as conventional mechanical tests cannot directly characterize material behaviour at such high strain rates. Alternatively, these parameters can be identified by loading a thin sample via LP, measuring its backface velocity (BFV) profile and attempting to match it with numerical simulations. Nevertheless, repeated simulations needed for this process are computationally expensive. To address this challenge, model order reduction is employed in this work. Specifically, proper orthogonal decomposition (POD) is applied to BFVs obtained from numerical simulations performed for various parameter combinations, reducing BFVs to a few modes. Artificial neural networks (ANNs) are then trained, enabling us to quickly predict the BFVs for new parameter combinations, and finding ones that result in the best match with the experiment.



Modelování UV/Vis spekter Criegeeho intermediátů kombinací kvantové chemie a strojového učení

Aleš Toman (B3)

Školitel: Ing. et Ing. Štěpán Sršeň, Ph.D.

Criegeeho intermediáty jsou reaktivní částice významné v atmosférické chemii, jejichž experimentální charakterizace je komplikována krátkou dobou života. Počítačové simulace jsou proto klíčové pro jejich popis včetně modelování absorpčních spekter, která slouží jako vstup do atmosférických modelů a výpočtu rychlostních konstant fotolýzy. Výpočet UV/Vis spekter metodou jaderného souboru však vyžaduje kvantově chemické výpočty excitovaných stavů pro tisíce geometrií, což je kvůli složité elektronové struktuře Criegeeho intermediátů extrémně náročné. Tato práce proto kombinuje kvantově chemické výpočty se strojovým učením, čímž lze řádově snížit počet drahých výpočtů. Nejprve byly porovnány různé úrovně kvantově chemických výpočtů a metody vzorkování geometrií základního stavu včetně Wignerova vzorkování a variant molekulové dynamiky. K predikci excitačních energií a oscilátorových sil byl použit model jádrové hřebenové regrese s reprezentací MBTR. Strojové učení umožnilo porovnat metody na bezprecedentně nízké úrovni vzorkovací chyby a vybrat kombinaci s optimálním poměrem chyby a výpočetní náročnosti. Spektra byla sestrojena jádrovým odhadem hustoty s 95% intervalem spolehlivosti (bootstrap) a porovnána s experimenty. Tento přístup lze dále využít při modelování větších systémů.