

Seznam sekcí a složení komisí

Sekce: **Analytická chemie (přednášková)**
místnost A105, 8.30 hod.

Komise:

Předseda: Dr. RNDr. David Sýkora

Členové: Ing. Gabriela Broncová, Ph.D.
Ing. Martin Člupek
Mgr. Ing. Pavel Řezanka

Sekce: **Aplikovaná fyzikální chemie (přednášková)**
místnost A402, 9.00 hod.

Komise:

Předseda: Doc. Ing. Ivan Cibulka, CSc.

Členové: Doc. Ing. Lidmila Bartovská, CSc.
Doc. Ing. Květoslav Růžička, CSc.

Sekce: **Teoretická fyzikální chemie (přednášková)**
místnost A125, 8.30 hod.

Komise:

Předseda: Prof. Ing. Stanislav Labík, CSc.

Členové: Prof. RNDR. Petr Voňka, CSc.
Prof. Ing. Anatol Malijevský, CSc.

Sekce: **Matematické modelování v chemickém inženýrství (přednášková)**
místnost B139, 8.30 hod.

Komise:

Předseda: Doc. RNDr. Tomáš Vaněk, CSc.

Členové: Ing. Petr Kočí, Ph.D.
Ing. Otto Hadač
Ing. Matyáš Schejbal
Ing. Hronza zástupce firmy Ricardo

Firmy, jejichž zástupci jsou v komisích sekcí chemického inženýrství, jsou sponzory sekcí

Sekce: **Procesní a chemické inženýrství (přednášková)**
místnost B141b, 8.30 hod.

Komise:

Předseda: Doc. Dr. Ing. Milan Jahoda

Členové: Dr. Ing. Michal Příbyl
Ing. Libor Šeda
Ing. Walter Schrott
zástupce f. Synthos
zástupce f. Hexion
zástupce f. Chemoprojekt
zástupce f. Lovochemie

Sekce: **Chemické inženýrství, biotechnologie a experimenty (předn.)
posluchárna B03, 8.30 hod.**

Komise:

Předseda: Doc. Ing. Dalimil Šnita, CSc.

Členové: Ing. František Jonáš Rejl, Ph.D.

Ing. Jitka Čejková

Ing. Tomáš Gregor

zástupce f. Synthos

zástupce f. Mondi

zástupce f. Lovochemie

Sekce: **Ekonomika a management (přednášková)
posluchárna C11, 9.00 hod.**

Komise:

Předseda: Prof. Ing. Ivan Gros, CSc.

Členové: Doc. Ing. Sláva Balatka, CSc.

Ing. Jiří Brada, CSc.

Ing. Eva Kemrová

sponzor – firma Logio

Sekce: **Inženýrská informatika, měření a řízení procesů (přednášková)
místnost A335, 9.00 hod.**

Komise:

Předseda: Doc. Ing. Jaromír Kukal, CSc.

Členové: Ing. Martina Mudrová, Ph.D.

Ing. Eva Hošťálková

Ing. Jana Finkeová, CSc.

Sekce: Analytická chemie

Vývoj metodiky analýzy listoví klonů vrby jívy (*Salix caprea*) FT-Ramanovou spektroskopií

Autor: Zuzana Cieslarová
Ročník: B3
Ústav: Analytické chemie
Školitel: Prof. Dr. RNDr. Pavel Matějka

Vrba jíva je rychle rostoucí dřevina, která může být vysazována na půdách kontaminovaných těžkými kovy (např. v oblastech zasažených těžbou, či na skládkách). V procesu „bioremediace“ se předpokládá využití symbiózy mezi různými klony vrby a půdními houbami, z nichž některé mají mít extrakční efekt, jiné pak stabilizační. Houby tak mají buď napomáhat akumulaci těžkých kovů v biomase, nebo mají zabránit jejich průniku do biomasy. Půdní houby však celkově ovlivňují fyziologii stromů, a proto je důležité sledovat jejich primární vliv na celkový zdravotní stav listoví. FT-Ramanova spektroskopie je nedestruktivní metoda, kterou můžeme studovat listoví vrb při jejich zachování pro další analýzy. Ve spektrech se významně projevují fotosyntetické pigmenty, které hrají klíčovou roli ve fyziologii rostlin.

Ve spolupráci s Botanickým ústavem (BÚ) AV ČR byla vyvinuta metodika odběru a krátkodobého skladování listoví. Pro vzorky z areálu BÚ i přímo z lokality Lhota u Příbrami byly naměřeny první série spekter, které byly chemometricky vyhodnoceny metodou analýzy hlavních komponent (PCA), shlukovou analýzou a diskriminační analýzou. Výsledky jednotlivých metod byly porovnány a bylo sledováno jaké faktory (vliv doby skladování listů, klonu vrby, inokulovaných hub a strany listů) a v jaké míře ovlivňují variabilitu Ramanových spekter.

Sekce: Analytická chemie

Nové metody elektrochemické přípravy měděných SERS-aktivních substrátů

Autor: Alžběta Kokaislová
Ročník: B3
Ústav: Analytické chemie
Školitel: Ing. Martin Člupek

Spektroskopie povrchově zesíleného Ramanova rozptylu (angl. surface enhanced Raman scattering - SERS) je analytická metoda využívající studiu filmů a vrstev organických látek vázaných na nanostrukturovaných površích vybraných kovů (SERS-aktivních substrátů).

Hlavním cílem této práce bylo porovnání SERS-aktivity měděných substrátů připravených ze dvou elektrochemických lázní obsahujících stejný kationt $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$ a lišících se obsaženým aniontem. Dále byly porovnány dva různé způsoby přípravy: buď samotná katodická redukce, nebo kombinace katodické redukce a následné aplikace metody oxidačně-redukčních cyklů. Pro testování SERS-aktivity byly vybrány thiolové deriváty alifatických karboxylových kyselin. Získaná spektra byla porovnána se spektry stejných modelových látek naměřenými na substrátech, které byly připraveny metodou katodické redukce z roztoku síranu měďnatého. Morfologie povrchů připravených substrátů byla studována pomocí skenovací elektronové mikroskopie (SEM).

Sekce: Analytická chemie

Modelování SPM technik pro analýzu DNA

Autor: Prokop Hapala
Ročník: M2
Ústav: Analytické chemie
Školitel: Ing. Pavel Jelínek, Ph.D.

Vzhledem k rostoucí poptávce po cenově efektivních metodách sekvenování DNA se objevují návrhy monomolekulárních technik, které jsou buď přímo založené nebo přinejmenším laboratorně studovatelné za pomoci mikroskopií skenovací sondy (SPM) jako AFM a STM. Moje práce je výpočetní studií spjatou s experimentem tohoto typu. Užitím velice rychlého DFT kódu spoluvyvíjeného mým konzultantem Pavlem Jelínkem zkoumám jednak mechanické a jednak elektronické vlastnosti párů bazí v DNA. Ačkoli použitý DFT funkcionál (LDA) není kvantitativně příliš přesný, výhodou oproti náročnějším metodám je možnost postihnoutí provázanosti změn geometrické a elektronické struktury studovaných systémů.

Principem experimentu, jehož se mé výpočty týkají, spočívá v přibližování a vzdalování hrotu modifikovaného bazí od povrchu s imobilizovanou DNA za současného měření volt-ampérových charakteristik a výchylky. K rozlišení bazí by mělo dojít na základě jednak selektivních supramolekulárních interakcí (sil) a jednak na základě vodivosti zprostředkované vodíkovou vazbou. Při experimentu báze vzájemně perturbují svou elektronickou strukturu a zároveň podstupují geometrické deformace. Detailní mechanismus a souvislost jsou však experimentálně nedostupné.

Sekce: Analytická chemie

Speciální analýza stopových prvků v listech vrby

Autor: Bc. Kateřina Mališová
Ročník: M1
Ústav: Analytické chemie
Školitel: Doc. Ing. Oto Mestek, CSc.

V rámci této práce byla analyzována směs listů stromů *Salix smithiana*, *Salix alba*, *Salix rubens* a *Salix dasyclados*, které bylo trháno pracovníky České zemědělské univerzity na podzim roku 2007 v okolí řeky Litavky na Příbramsku. Oblast sběru byla před několika lety kontaminována těžkými kovy z odkaliště a půda má zvýšený obsah Cd, As, Pb, Zn. Nejprve byly stanoveny celkové obsahy kovů v listí. Rozpustné specie těžkých kovů byly extrahovány do dvou druhů extrakčního činidla, a to do tris(hydroxymethy)aminomethanu o pH = 7,5 a dále pak do hydroxidu sodného o koncentraci 1 mol/l. V odstředěných extraktech byl stanoven celkový obsah rozpustných specií kovů. Pro frakcionaci specií byla použita gelová permeační chromatografie s detekcí ICP-MS. Kvantitativní vyhodnocení bylo provedeno metodou pokolonového nástřiku standardu. Bylo zjištěno, že těžké kovy jsou obsaženy zejména v nízkomolekulární frakci. Tyto frakce byly izolovány pomocí preparativní gelové permeační chromatografie a přečištěny pomocí afinitní chromatografie s vázaným iontem kovu. Tímto postupem byly izolovány pouze látky s vysokou afinitou k iontům kovů. Složení a struktura těchto látek byly studovány analýzou aminokyselinového složení a hmotnostní spektroskopii s ionizací desorpce za účasti matrice.

Sekce: Analytická chemie

Konformační studie Poly- γ -benzyl-L-glutamátu metodou vibračního cirkulárního dichroismu

Autor: Pavlína Novotná
Ročník: B3
Ústav: Analytické chemie
Školitel: Prof. RNDr. Marie Urbanová, CSc.

Poly- γ -benzyl-L-glutamát (PBLG) je synteticky připravovaný polypeptid rozpustný v organických rozpouštědlech. V závislosti na rozpouštědle a koncentraci vykazuje řadu konformací a různé typy agregace. PBLG tak představuje modelový systém mající velký potenciál pro studium závislosti biologicky významných interakcí na struktuře chirální matrice. Cílem této práce je pomocí vibračního cirkulárního dichroismu (VCD) charakterizovat jednotlivé konformace, sledovat agregace a nalézt podmínky pro realizaci různých konformačních forem PBLG v roztoku.

PBLG zaujímá v řadě rozpouštědel α -helikální strukturu, která byla v této práci pozorována např. v CDCl_3 . Po přidání kyselin, např. trifluoroctové kyseliny (TFA), byla pomocí spektra VCD pozorována také forma polyprolin II. V práci byla prokázána a charakterizována závislost struktury PBLG na složení směsného rozpouštědla CDCl_3/TFA . V další skupině rozpouštědel, např. v benzenu, PBLG silně agreguje; někdy je agregace doprovázena tvorbou kapalných krystalů cholesterického typu. V předkládané práci byla forma kapalného krystalu charakterizovaná velmi silným signálem VCD.

Sekce: Analytická chemie

Vibračně spektroskopická analýza listové klony vrby jívy (*Salix caprea*)

Autor: Jitka Weissová
Ročník: M2
Ústav: Analytické chemie
Školitel: Prof. Dr. RNDr. Pavel Matějka

Infračervená spektroskopie ve střední infračervené oblasti (MIR) s využitím techniky zeslabeného úplného odrazu (ATR) je vhodnou metodou pro analýzu rostlinných pletiv bez nutnosti předúpravy vzorků. Metodu lze využít pro sledování povrchu listu, jehož chemické složení úzce souvisí s vitalitou rostlin. Transmisní IR spektroskopie v blízké infračervené oblasti (NIR) je další metoda, která může poskytnout informace o komponentách listu.

V předkládané práci byly měřeny dvě série listů dvou odlišných klonů vrby jívy, pěstované v symbióze s půdními houbami. U těchto hub se předpokládá extrakční nebo naopak stabilizační efekt pro těžké kovy jako půdní kontaminanty. Jedna série vzorků pochází z rostlin pěstovaných v Botanickém ústavu AV ČR (BÚ) v Průhonicích, druhá série z plantáží ve Lhotě u Příbrami. Série spekter byly vyhodnocovány shlukovou analýzou, metodou analýzy hlavních komponent (PCA) a lineární diskriminační analýzou (LDA). Výsledky vyhodnocení byly porovnány a byly sledovány faktory, které ovlivňují variabilitu NIR a ATR spekter (např. vliv klonu vrby, přítomnosti půdních hub, strany listů, lokalizace měřeného místa na listu).

Sekce: Analytická chemie

Studium povrchové modifikace stříbrných nanočástic a jejich možné využití v analytické chemii

Autor: Bc. Pavel Žvátora
Ročník: M2
Ústav: Analytické chemie
Školitel: Ing. Kamil Záruba, Ph.D.

Povrchem zesílený Ramanův rozptyl je jev, který je široce používán pro studium především vibračních vlastností systémů v bezprostředním okolí studovaného povrchu. Zkoumané molekuly jsou nanесeny na povrchu ušlechtilých kovů a k zesílení (v řádech $10^4 - 10^8$) dochází interakcí excitujícího záření vhodné vlnové délky s kovovým povrchem. To může vést až k možnosti detekovat jednotlivé molekuly.

Jedním z vhodných povrchů jsou nanočástice stříbra, jejichž příprava a SERS aktivní schopnosti byly studovány v této práci. Pomocí SERS spektroskopie byla sledována interakce s 3-merkaptopropanovou kyselinou a látkami, které interagují s povrchem stříbra přes dusík (např. Trögerovy báze).

Nanočástice byly připraveny redukcí dusičnanu stříbrného různými redukčními činidly (citrát sodný, Chelaton III a tetrahydridoboritan sodný) a charakterizovány absorpční spektroskopií ve viditelné oblasti spektra. Byl sledován vliv koncentrace interagujících látek a pH roztoku na intenzitu signálů v Ramanových spektrech. Byly také studovány podmínky imobilizace ve vodě málo rozpustných derivátů Trögerových bazí.

Sekce: Aplikovaná fyzikální chemie

Teplotní závislost limitních aktivitních koeficientů 1-hexanolu ve vodě: měření, literární rešerše a doporučená data

Autor: Aleš Blahut
Ročník: M2
Ústav: Fyzikální chemie
Školitel: Ing. D. Fenclová, CSc.

1-hexanol je prvním reprezentantem nového projektu naší laboratoře, který sleduje termodynamické vlastnosti vybraných vonných a aromatických látek. Cílem práce bylo stanovit teplotní závislost limitních aktivitních koeficientů 1-hexanolu v intervalu 273 – 373 K. Naměřené limitní aktivitní koeficienty byly simultánně korelovány s literárními aktivitními koeficienty, parciálními molárními dodatkovými enthalpiemi a parciálními molárními dodatkovými tepelnými kapacitami v nekonečném zředění. Výsledkem jsou doporučené parametry korelační rovnice vystihující závislost limitních aktivitních koeficientů na teplotě od teploty tání až po normální teplotu varu vody.

Sekce: Aplikovaná fyzikální chemie

Studium vlivu nanočástic na transportní vlastnosti polyimidových membrán

Autor: Barbora Černochová
Ročník: M2
Ústav: Fyzikální chemie
Školitel: Ing. Karel Friess, Ph.D.,
Ing. Vladimír Hynek, CSc.

V této práci byl studován vliv hydrosilikátového nanoplniva na transportní vlastnosti polyimidových membrán (Kapton) při 25 °C. Pomocí gravimetrické metody byly studovány sorpční vlastnosti plněných (5 obj %) a neplněných PI membrán připravených na bázi kyseliny pyromellitové a 4,4'-diaminodifenyletheru. Experimentálně byly stanoveny rovnovážné hodnoty sorpce par methanolu a toluenu a na základě sledování kinetiky sorpce látek v polymerních membránách byly vypočteny difuzní koeficienty studovaných látek. Pro porovnání byly difuzní koeficienty par rovněž stanoveny pomocí diferenciální permeační metody. Bylo zjištěno, že přítomnost nanočástic v polymeru zvyšuje hodnoty transportních parametrů par organických látek.

Sekce: Aplikovaná fyzikální chemie

Stanovení propustnosti polymerních membrán pro plyny a páry organických látek

Autor: Václav Frýdl
Ročník: M2
Ústav: Fyzikální chemie
Školitel: Ing. Vladimír Hynek, CSc.
Ing. Ondřej Vopička

V práci byly studovány vlastnosti polymerních membrán, které byly připraveny na bázi polyimidu s různými přidanými komponenty (hydrosilikátové nanodestičky, hydrosilikátové nanotrubičky, uhlíková vlákna, montmorillonity s vloženými diaminy). Experimenty byly prováděny na diferenciálním permeamtru s tepelně – vodivostní detekcí.

Na základě naměřených údajů byly vypočteny a porovnány koeficienty propustnosti a difuzní koeficienty plynů (N_2 , O_2 , CO_2) a par organických látek (toluen, methanol) pro výše uvedené membrány.

Sekce: Aplikovaná fyzikální chemie

Rozšíření možností aplikace saturační metody pro směsi se zvýšenými hodnotami Henryho konstanty

Autor: Zdeněk Jonát
Ročník: M1
Ústav: Fyzikální chemie
Školitel: Dr. Ing. Pavel Vrbka

V rámci rozšíření možností aplikace saturační metody (inert gas stripping - IGS) na směsi se zvýšenými hodnotami Henryho konstanty (až 250 MPa), byla zkonstruována nová rovnovážná cela. Její funkce byla ověřena stanovením limitního aktivního koeficientu isofluranu ve vodě v teplotní závislosti. Nově naměřená data byla porovnána s dostupnými literárními údaji a s hodnotami získanými měřením v jiném, již prověřeném typu rovnovážné cely.

Sekce: Aplikovaná fyzikální chemie

Stanovení rozpustnosti iontových kapalin ve vodě

Autor: Martin Strejc
Ročník: M1
Ústav: Fyzikální chemie
Školitel: doc. Ing. Karel Řehák, CSc.

Kvantitativní znalost mísitelnosti nových materiálů – iontových kapalin s vodou je důležitá pro další potenciální využití těchto materiálů v praxi i pro jejich další výzkum. Vzhledem k povaze iontových kapalin je měření jejich rozpustnosti ve vodě ztíženo. Iontové kapaliny mají například zanedbatelný tlak nasycených par, což vylučuje použití plynového chromatografu. V práci jsou demonstrovány některé neanalytické metody stanovení rozpustnosti iontových kapalin ve vodě. Na podkladě získaných výsledků pro 1-butyl-3-methylimidazolium hexafluorofosfát, methyltrioktylamonium trifluoroacetát a 1-butyl-1-methylpyrrolidinium bis(trifluoromethylsulfonyl)imid je diskutována použitelnost uvedených metod.

Sekce: Aplikovaná fyzikální chemie

Fázové rovnováhy v systémech obsahujících fenolické sloučeniny

Autor: Jiří Zapletal
Ročník: M2
Ústav: Fyzikální chemie
Školitel: doc. Ing. Karel Řehák, CSc.

Práce popisuje metodiku měření fázové rovnováhy kapalina–kapalina a kapalina–pevná fáze v systémech butyl acetát + fenolická sloučenina + voda. Obsahem této práce je příprava analytických metod pro stanovení obsahu složek v rovnovážných kapalných fázích a demonstrace získaných experimentálních dat v systému butyl acetát + fenol + voda. Na podkladě experimentálních dat příslušných dvousložkových systémů byly vyhodnoceny parametry Redlichovy-Kisterovy rovnice, pomocí kterých byly následně modelovány fázové rovnováhy v ternárním systému.

Sekce: Aplikovaná fyzikální chemie

Zkoumání aditivního charakteru Sečenovovy konstanty v systému MTBE - voda

Autor: Kateřina Zemánková
Ročník: M1
Ústav: Fyzikální chemie
Školitel: Dr. Ing. Pavel Vrbka

V práci jsou prezentovány výsledky zpracování experimentálních hodnot limitního aktivního koeficientu methyl t-butyl etheru (MTBE) ve vodných roztocích anorganických solí při jejich různých koncentracích.

Ze závislosti limitního aktivního koeficientu MTBE na koncentraci soli ve vodě byly vyhodnoceny konstanty Sečenovovy rovnice.

Bylo zjištěno, že vliv jednotlivých solí na hodnotu Sečenovovy konstanty nemá aditivní charakter. Toto chování může být vysvětleno polaritou methyl t-butyl etheru.

Sekce: Teoretická fyzikální chemie

Využití QM:QM modelování pro výpočet ionizačních potenciálů

Autor: Michal Kocourek
Ročník: M2
Ústav: Fyzikální chemie
Školitel: RNDr. Petr Slavíček, PhD.

Technika QM:QM byla vyvinuta pro usnadnění kvantově-chemických výpočtů velkých molekulárních systémů. V tomto přístupu rozdělíme systém na několik podjednotek, na něž působí elektrostatické pole všech podjednotek ostatních, a přepočítáváme náboje na jednotlivých atomech až k dosažení rovnovážného nábojového rozložení. Tak je možné modelovat polarizaci molekul i v relativně velkých systémech, které by nebyly zvládnutelné tradičním kvantově-chemických výpočtem (např. molekula obklopená 150 molekulami vody). V této práci byla studována vhodnost QM:QM modelu pro výpočet ionizačních potenciálů, konkrétně na příkladu molekuly imidazolu. Pomocí metod molekulové dynamiky jsou konstruovány jednotlivá uspořádání molekul vody kolem imidazolu a na tyto klastry je poté aplikován QM:QM model. V práci je diskutována konvergence ionizačního potenciálu k experimentálně naměřené hodnotě jednak s počtem vod, v nichž je imidazol solvatován, jednak s úrovní kvantově-chemického výpočtu. Dále jsou načrtnuta možná vylepšení této metody ve fotochemickém kontextu

Sekce: Teoretická fyzikální chemie

Povrchové jevy ve vodných roztocích iontových kapalin – Simulace metodou molekulární dynamiky

Autor: Karel Matas
Ročník: M2
Ústav: Fyzikální chemie
Školitel: Doc. RNDr. Jiří Kolafa, CSc.

Provedl jsem sérii MD simulací vodných roztoků 1-butyl-3-metylimidazolium chloridu a 1-oktyl-3-metylimidazolium chloridu ve slab geometrii. Sledoval jsem pohyb jednotlivých iontů, jejich preferované polohy a orientace vůči fázovému rozhraní a povrchové napětí. Kationty preferují fázové rozhraní s uhlovodíkovými řetězci směřujícími do vakua. Anionty kompenzují přebytek kladného náboje na povrchu vytvořením vrstvy pod rozhraním. Při nižších koncentracích povrchové napětí klesá s koncentrací; při vyšších dochází k „nasycení“ fázového rozhraní kationty a pokles zpomaluje. Anomální chování závislosti povrchového napětí na teplotě známé z experimentů nebylo pozorováno. Při simulacích nebylo dosaženo patřičně nízkých koncentrací.

Sekce: Teoretická fyzikální chemie

Ionizace složek nukleových kyselin v roztoku a v plynné fázi

Autor: Eva Pluhařová
Ročník: M1
Ústav: Fyzikální chemie
Školitel: RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.

Jedním z nejvýznamnějších důsledků působení vysokoenergetického záření na buňku je ionizace DNA, což vede ke vzniku zoxidovalého centra, tj. kladně nabitě „díry“. Tato díra se obvykle lokalizuje na guaninu, bázi s nejnižším ionizačním potenciálem, ačkoli k ionizaci může dojít i na jiném místě. Pro pochopení mechanismu přenosu náboje podél dvojšroubovice je nutné určit, jak vertikální, tak adiabatický ionizační potenciál (IP) každé složky nukleové kyseliny za realistických podmínek. Ionizační spektra některých komponent v roztoku již byla změřena pomocí metody fotoelektronové spektroskopie za použití mikrotřesek v experimentální skupině Bernda Wintera (BESSI, Berlin).

Předkládaná práce si klade za cíl studovat ionizaci složek nukleových kyselin metodami teoretické chemie. Výpočty jsme prováděli pro purinové báze a uracil a studovali jsme, jak je ionizační potenciál báze ovlivněn přítomností cukru, fosfátu a také vody. Roztok jsme popsali modelem polarizovatelného kontinuálního dielektrika (PCM), ke správnému výpočtu vertikálního IP bylo ovšem třeba použít nerovnovážné PCM. V některých případech jsme kromě PCM zahrnuli navíc i první solvatační slupku, jedná se o tzv. hybridní model solvatace.

Sekce: Teoretická fyzikální chemie

Studie magnetických vlastností systémů pomocí modelových hamiltoniánů

Autor: Ondřej Svoboda
Ročník: B3
Ústav: Fyzikální chemie
Školitelé: Nathalie Guihéry, Nicolas Suaud (Université Paul Sabatier, Toulouse),
RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.

Kompletní hamiltonián je možné použít pouze v případě velmi malých systémů. Pro popis větších či dokonce nekonečných systémů je třeba zavést další aproximace. Jedním z přístupů je použití modelových hamiltoniánů, které berou v úvahu jen nejdůležitější interakce v systému. Zabýval jsem se dvěma skupinami magnetických systémů, polyoxometaláty a dále řetězci se silně korelovanými elektrony. V případě menších systémů jako jsou polyoxometaláty je modelový hamiltonián analyticky řešitelný a je možné z něj vypočítat některé vlastnosti látek jako například magnetickou susceptibilitu či spektra UV a EPR. V případě velkých či nekonečných systémů je třeba zavést další aproximace. Zde jsem se zabýval otázkou, zdali je možné vypočítat magnetickou susceptibilitu po přijetí těchto aproximací.

Sekce: Teoretická fyzikální chemie

Ionizace a solvatace molekul tvořící iontové kapaliny

Autor: Lukáš Šišťák
Ročník: M2
Ústav: Fyzikální chemie
Školitel: RNDr. Petr Slavíček, Ph.D.

Iontové kapaliny, tj. organické iontové molekuly kapalně často i za pokojové teploty, představuje perspektivní novou skupinu látek. Unikátní vlastnosti těchto látek (solvatace, šetrnost k životnímu prostředí atp.) se začínají využívat v mnoha odvětvích chemického průmyslu.

V první části této práce jsou studovány iontové kapaliny v základním stavu na *ab initio* úrovni. Jsou srovnávány některé vybrané DFT funkcionály s konvenční MP2 metodou na úrovni strukturálních parametrů. *Ab initio* výpočty iontových kapalin jsou mimořádně náročné z pohledu počítačového času i paměťových nároků. Levné metody totiž nesplňují požadavky kladené na kvalitu vypočtených dat, např. v DFT metodách není zahrnutá disperzní část interakční energie. V naší práci jsme přitom ukázali, že tento příspěvek hraje svou roli v optimální geometrii molekuly. Proto jsme studovali nové a efektivní přístupy pro zahrnutí disperzní energie, konkrétně: lokálně korelované metody, nové DFT funkcionály, nové přístupy ke korekci na disperzní energii pro starší DFT funkcionály.

V druhé části jsou srovnávána experimentální fotoelektronová spektra s teoreticky vypočtenými spektry a je posuzován vliv implicitní a explicitní solvatace na podobu spekter.

Sekce: Teoretická fyzikální chemie

Molekulární simulace tekutiny prostupných koulí

Autor: Linda Viererblová
Ročník: M2
Ústav: Fyzikální chemie
Školitel: Doc. RNDr. Jiří Kolafa, CSc.

Práce spadá do oboru statistické termodynamiky tekutin. Zabývá se systémem prostupných koulí, v němž dvojice sféricky symetrických částic interagují prostřednictvím modelového párového potenciálu, který je roven konečné konstantní hodnotě v případě překryvu částic, jinak je nulový. Kvalitativně tento model vystihuje chování některých reálných systémů, např. roztoků hvězdicových polymerů. Tekutina prostupných koulí byla simulována metodou molekulární dynamiky. Byly tak získány hodnoty kompresibilitního faktoru pro řadu teplot a hustot. Tato data byla srovnána s výsledky získanými simulacemi Monte Carlo a s literárními daty. Širší rozsah dat bude sloužit společně s dříve získanými viriálními koeficienty k návrhu stavové rovnice pro tento systém.

Sekce: Matematické modelování v chemickém inženýrství

Dynamika redukce oxidů dusíku na katalyzátoru s ukládáním NO_x

Autor: Šárka Bártová
Ročník: M2
Ústav: Chemického inženýrství
Školitel: Ing. Petr Kočí, Ph.D.

Práce se věnuje katalytické redukci oxidů dusíku na automobilových katalyzátorech, zejména dynamickému chování při periodicky proměnných redoxních podmínkách. Problematika je zkoumána jak experimentálně s použitím laboratorního reaktoru, tak pomocí matematického modelu a počítačových simulací.

Měření byla prováděna na průmyslovém katalyzátoru typu PtRh/Ba/CeZrO₄/□-Al₂O₃ s ukládáním NO_x a jako redukční činidla byly použity CO, C₃H₆ a H₂. Z naměřených dat byly vyhodnoceny reakční parametry matematického modelu. Na základě simulací pak byl analyzován vývoj koncentračních profilů jednotlivých reaktantů a (mezi)produktů v prostorově distribuovaném systému katalytického monolitického reaktoru.

Sekce: Matematické modelování v chemickém inženýrství

Modelování rázové odolnosti houževnatého polystyrenu

Autor: Martin Klejch
Ročník: B3
Ústav: Chemického inženýrství
Školitel: Dr. Ing. Juraj Kosek, ing. Zdeněk Grof, Ph.D.

Houževnatý polystyren (HIPS) je heterofázový kopolymer vykazující lepší odolnosti při nárazu v porovnání s polystyrenovým (PS) homopolymerem. Cílem této práce je nalezení závislosti mezi mikrostrukturou materiálu HIPS a jeho aplikačními mechanickými vlastnostmi. Fázovými separacemi při výrobě HIPS vzniká dvojúrovňová (tzv. salámová) morfologie materiálu: (i) nepravidelné submikronové domény PS jsou dispergovány v částicích polybutadienu (PB), a (ii) oválné částice PB o charakteristické velikosti několika mikronů jsou dispergovány v kontinuální fázi PS. Pro modelování odolnosti houževnatého polystyrenu byla zvolena metoda diskrétních elementů (DEM). Vzorek HIPS tak byl diskretizován na kulaté diskrétní elementy dvou typů (PS nebo PB). Každý diskrétní element je popsán souřadnicemi středu, vektorem rychlosti a poloměrem. Mezi diskrétními elementy působí elastické síly, které ovlivňují pohyb elementů. Rázová houževnatost je v praxi testována postupem upraveným v technických normách a stanovuje se postupem Charpy nebo Izod. Konfigurace systémů uvažovaných v našich simulacích odpovídá těmto testům.

Sekce: Matematické modelování v chemickém inženýrství

Modelování Enzym-Substrátové reakce ve dvou míchaných průtočných reaktorech propojených membránou

Autor: František Muzika
Ročník: M2
Ústav: Chemického inženýrství
Školitel: prof. Ing. Igor Schreiber, CSc.

Studie se zabývá modelem dvou ideálně míchaných průtočných reaktorů propojených membránou za účelem nalezení podmínek pro vznik Turingovy nestability pomocí dané membrány a vytvořením diagramů řešení a bifurkačních diagramů. V každém z těchto reaktorů probíhají reakce enzymu a substrátu podle bilančních rovnic v článku F.Morán, A.Goldbeter: Onset of birhythmicity in a regulated biochemical system, 1984, Brusel. Následně podle modelu s konstantními řády reakcí. Prostředky studia byly jedno a dvou-parametrická kontinuační bilančních rovnic pro oba modely systému enzym-substrát a pro model s konstantními efektivními řády reakcí byla použita analýza stechiometrických sítí k zjištění bezrozměrných rychlostních konstant chemických reakcí pro kontinuační. Byla nalezena vazba na vznik bifurkace typu křížení z bifurkace vidličkové pro bezrozměrné koncentrace substrátu a produktu v jednotlivých reaktorech. Důvodem změny typů bifurkace je konstantní efektivní řád reakce inhibice navržené velikosti oproti původním bilančním rovnicím z uvedeného článku. Práce obsahuje diagramy řešení a bifurkační diagramy jak pro bilanční rovnice systému enzym-substrát z uvedeného článku, tak pro model s konstantními efektivními řády reakcí a též částečné diagramy řešení pro model s konst. efektivními řády reakcí pro různé efektivní řády.

Sekce: Matematické modelování v chemickém inženýrství

Složitá dynamika propojených biochemických oscilátorů

Autor: Alena Nováková
Ročník: M2
Ústav: Chemického inženýrství
Školitel: Ing. Lenka Schreiberová, CSc.

Byl vytvořen zjednodušený model kaskády biochemických reaktorů se vzájemnou difúzní interakcí. Model zjednodušeně popisuje chování pozorované v určitých typech biologických systémů, jako jsou nervo-svalová vlákna. Dynamika v reaktoru odpovídá buď jednomu ustálenému stavu, který je excitabilní, násobnému ustálenému stavu nebo periodickým oscilacím. Při výpočtech byl model nastaven tak, že všechny členy kaskády se nachází v excitačním režimu. Kaskáda byla perturbována dvěma způsoby: stimuly přiváděnými do prvního reaktoru a stimulací prostřednictvím předřazeného reaktoru, který byl v oscilačním režimu. Byla studována závislost frekvence excitací, které systémem prošly, na amplitudě vnějších vzruchů a na intenzitě difúzní interakce mezi reaktory. Míra výstupní frekvence je dána excitačním číslem, vyjadřujícím počet excitací připadající na jeden stimul. Výsledky obecného modelu byly srovnány s modelem popisujícím dynamiku vápníkových iontů v buněčném cytosolu.

Sekce: Matematické modelování v chemickém inženýrství

Rekonstrukce lamelární struktury sferulitů a predikce efektivní difuzivity v polyolefinech

Autor: Richard Pokorný
Ročník: M1
Ústav: Chemického inženýrství
Školitel: Dr. Ing. Juraj Kosek, Ing. Libor Šeda

Semi-krystalická struktura polyolefinů je odpovědná za jejich optické a mechanické vlastnosti a významně ovlivňuje difuzi penetrantů těmito polymery. Prvním cílem této práce je počítačová rekonstrukce prostorově 3D struktury sferulitů, které tvoří charakteristický morfologický rys polyolefinů. Sferulity jsou formálně rekonstruovány laterálním růstem krystalických lamel o tloušťce přibližně 10 nm. Během růstu přitom dochází k větvení a kroucení lamel. Mezi lamelami je přítomen amorfní polymer. Tímto postupem je možno dosáhnout až 70% obsah krystalické fáze v polymeru, což odpovídá reálným vzorkům polyetylénu. Druhým cílem práce je mapování vlivu semi-krystalické struktury na difuzi penetrantu polymerem. Difuze přitom probíhá pouze v amorfním polymeru, protože krystalický polymer je pro penetranty prakticky nepropustný. Je ukázáno, že polymery se stejným obsahem krystalické fáze mohou mít výrazně odlišnou efektivní difuzivitu.

Sekce: Matematické modelování v chemickém inženýrství

CFD modelování požáru v místnosti

Autor: Bc. Jan Salaba
Ročník: M2
Ústav: Chemického inženýrství
Školitel: Doc. Dr. Ing. Milan Jahoda

Cílem práce je CFD predikce rychlostních a teplotních polí vyvolaných otevřeným ohněm uvnitř místnosti. K výpočtu byl použit řešič FDS (Fire Dynamics Simulator). Byly testovány případy lokálního nerozšiřujícího se a rozšiřujícího se požáru. Výsledky byly porovnány s fyzikálními daty experimentálních modelů.

Sekce: Matematické modelování v chemickém inženýrství

Modelování homogenizace v aerované nádobě s mechanickým míchadlem

Autor: Lenka Tomášková
Ročník: M2
Ústav: Chemického inženýrství
Školitel: Doc. Dr. Ing. Milan Jahoda

Práce se zabývá CFD simulacemi průběhu homogenizace kapalné vsádky v aerované nádobě promíchávané mechanickým rotačním míchadlem. Výsledky simulací byly porovnávány s výsledky experimentů, které byly provedeny ve válcové nádobě opatřené nárazkami a míchadlem se šikmo skloněnými lopatkami s konstantní frekvencí otáčení pro různé objemové průtoky plynu. CFD výpočty metodou Euler-Euler se směšovací k-epsilon modelem turbulence proběhly v řešiči Fluent 6.3. Pro předpověď tokového pole plyn-kapalina byly užity obě základní metody simulace pohybu rotujícího zařízení (míchadla): metoda vícenásobné rotující soustavy (angl. Moving Reference Frames) a klouzající síť (angl. Sliding Mesh). I přes uvažovaná zjednodušení (mono-disperzní bubliny kulového tvaru, bez štěpení nebo spojování bublin) byla numerická predikce v dobré shodě s experimentálními daty.

Sekce: Matematické modelování v chemickém inženýrství

Praktické využití nástrojů pro optimalizaci a řízení chodu ropných rafinerií

Autor: Vladimír Vadlejch
Ročník: M2
Ústav: Chemického inženýrství
Školitel: Doc. RNDr. Tomáš Vaněk, CSc.

Práce se zabývá použitím programů pro optimalizaci, plánování a řízení operací probíhajících v ropných rafineriích. Pro plánování chodu rafinerie je klíčový zisk přesných a konzistentních dat. Takovými daty mohou být např. úroveň hladiny v nádrži, teplota, hydrostatický tlak apod. Práce popisuje programové vybavení poskytující operátorovi přehled všech takto naměřených, nebo vypočítaných dat. Mezi nejdůležitější procesy v rafineriích se řadí míchání produktů jako je benzin, plynový olej nebo topný olej. Ceny a množství komponent společně s hodnotou výsledných produktů míchání jsou základními parametry pro optimalizaci procesu. Práce vychází z prakticky nabitých zkušeností při programování doplňků pro řídicí programové vybavení firmy Invensys Process Systems.

Sekce: Matematické modelování v chemickém inženýrství

Evoluce heterofázové struktury houževnatého polystyrenu

Autor: Michal Vonka
Ročník: M1
Ústav: Chemického inženýrství
Školitel: Dr. Ing. Juraj Kosek, Ing. Libor Šeda

Práce představuje vývoj algoritmu pro dynamickou simulaci transportních a separačních procesů během fázové separace mechanismem spinodální dekompozice za vzniku heterofázových polymerů, například houževnatého polystyrenu (HIPS). Vyvíjené modely jsou konzistentní s termodynamickým popisem systémů obsahujících polymery. Matematické modelování fázové separace a vzniku heterofázové (tzv. salámové) morfologie HIPS je založeno na modelu s gradientem chemického potenciálu jako hybnou silou transportu, přičemž je chemický potenciál zobecněn tak, aby obsahoval také příspěvek mezifázové energie. Požadovanou salámovou morfologii HIPS lze charakterizovat těmito znaky: (i) částice polybutadienu (PB) o velikosti několika mikronů jsou distribuovány v kontinuální polystyrenové (PS) fázi, (ii) částice PB obsahují nepravidelné submikronové okluze PS. Aplikační vlastnosti HIPS, např. lesk a rázová houževnatost, závisí na morfologii HIPS. Výsledky práce jsou zajímavé nejen teoreticky, ale také aplikačně pro lepší porozumění utváření heterofázových morfologií řady polymerů.

Sekce: Matematické modelování v chemickém inženýrství

Modelování výroby styren-butadienového kaučuku emulzní polymerací

Autor: Alexandr Zubov
Ročník: M2
Ústav: Chemického inženýrství
Školitel: Dr. Ing. Juraj Kosek, Ing. Libor Šeda

Butadienstyrenové kaučuky (SBR) jsou tradiční surovinou v gumárenském průmyslu. Kvalita SBR kaučuku je mimo jiné určena distribucí molárních hmotností, složením kopolymeru a stupněm větvení. Cílem práce je zlepšení jakostních parametrů SBR latexů vyráběných emulzní volně-radikálovou polymerací v kaskádě 12 průtočných míchaných reaktorů. K naplnění tohoto cíle je sestaven matematický model průmyslového procesu. V každém členu kaskády reaktorů je uvažována přítomnost monomerní, vodné a polymerní fáze. Reakční schéma polymerace včetně větvení je zpracováno populačními bilancemi metodou takzvaných polymerních momentů, takže je možno predikovat také kvalitu vyráběného polymeru. Predikce modelu jsou validovány reálnými experimentálními daty. Na základě vyvinutého matematického modelu bude minimalizováno množství mimo-jakostních produktů při přejíždění mezi typy s různým obsahem vázaného styrenu a viskozitou Mooney, bude zvýšena roční kapacita výroby a bude možná optimalizace procesu výroby SBR latexů při náhlých technologických změnách.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství

Studium mechanismu kolize při interakci stacionární kulové částice a izolované stoupající bubliny

Autor: Monika Coufalová
Ročník: M2
Ústav: Ústav Chemického inženýrství
Školitel: Dr. Ing. Pavlína Basařová

Cílem této práce je snaha o prohloubení znalostí o interakci izolované vzduchové pohybující se bubliny a stacionární pevné kulové částice. Zachycení bubliny na pevném povrchu nebo odpojení bubliny je základním krokem pro pochopení této problematiky. Pozornost je věnována především studiu mechanismu kolize pro různé velikosti bublin i částic. Během experimentu byly vyhodnoceny trajektorie střetů bublin, rychlost bublin, relativní rychlost, uhel φ , účinnost kolize v závislosti na velikosti bubliny a částice. Pro experimentální měření byly použity částice o průměrech 7, 10, 15 a 20 mm a bubliny o průměrech 0,5 a 0,8 mm. Děje byly sledovány vysokorychlostní kamerou a výsledky byly získány obrazovou analýzou dat pomocí softwaru NIS-Elements.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství

Studium pohybu izolované bubliny před kolizí s pevnou částicí

Autor: Lucie Dolejší
Ročník: M1
Ústav: Chemického inženýrství
Školitel: Dr. Ing. Pavlína Basařová

Tato práce je součástí projektu, který se zabývá studiem vzájemných interakcí bublin a částic. Náplní této práce bylo experimentální pozorování a popis trajektorie a rychlosti izolované bubliny před kolizí s nakloněnou rovinou, představující kulovou částici o nekonečném průměru, s úhlem náklonu od 0° do 80° . V dostatečné vzdálenosti od roviny není rychlost ani trajektorie bubliny ovlivňována její přítomností. Při větším přiblížení dochází k zakřivení toku tekutiny, tudíž i ke změně trajektorie pohybu bubliny a ke snížení rychlosti bubliny. Interakce byly sledovány rychloběžnou kamerou. Experimentálně byl sledován pohyb bubliny z dostatečné vzdálenosti od nakloněné roviny až do okamžiku kolize. Obrazovou analýzou byly zjištěny souřadnice středů bublin a jejich průměr a byly vypočteny jejich okamžité a relativní rychlosti. Dále byly vyhodnoceny trajektorie pohybu bublin.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství

Charakterizace polymerů metodou TD-NMR

Autor: Josef Chmelař
Ročník: M1
Ústav: Chemického inženýrství
Školitel: Dr. Ing. Juraj Kosek, Ing. Tomáš Gregor

Přístroj NMR použitý v našich experimentech není klasickým NMR spektrometrem určeným pro získávání detailních spekter chemických posunů ^1H nebo ^{13}C , ale patří do třídy spektrometrů měřících v časové doméně (time-domain NMR). TD-NMR spektrometr měří vývoj NMR signálu v čase a charakterizuje tento vývoj pomocí relaxačních časů (např. T1 a T2). Pro získání relaxačních dat jsou používány vhodně zvolené pulsní experimenty. Získaná relaxační data mohou být rigorózně nebo empiricky korelována s fyzikálními vlastnostmi a složením vzorku, např. s viskozitou nebo obsahem fází v hetero-fázových polymerech. Pro měření technikou TD-NMR není vyžadována u kapalných a pevných vzorků žádná úprava. V této práci stručně popisujeme metodiku měření a vyhodnocování signálů TD-NMR. Naše dosavadní zkušenosti s TD-NMR jsou diskutovány jak na příkladech dobře definovaných jednoduchých vzorků, tak i složitých vzorků polymerů s hetero-fázovou morfologií. Je ilustrováno, že technikou TD-NMR je možno stanovit difuzní koeficienty. Současná TD-NMR měření jsou zaměřena na pokročilou charakterizaci měknutí polymerů za vyšších teplot, což je průmyslově důležitá problematika.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství

Elektrodová pole v mikrostrukturovaných systémech

Autor: Jaroslav Kotowski
Ročník: M1
Ústav: Chemického inženýrství
Školitel: Ing. Jiří Lindner, Ph.D., Ing. Miloš Svoboda

Řada mikrostrukturovaných systémů využívá elektrické pole; například pro čerpání kapalin pomocí elektroosmózy, pro urychlení pohybu iontů elektromigrací (některé DNA čipy) či pro detekční účely (lab-on-chip systémy). Většina zmíněných aplikací funguje na skleněných či křemíkových substrátech; vytváření kovových funkčních vrstev v mikrozařízeních je mnohem obtížnější vzhledem k často problematické adhezi kov na plast a velkým rozdílům fyzikálních vlastností (tepelná roztažnost).

Cílem této práce je vytvoření systému mikroelektrod v plastovém mikrozařízení, jež umožní měření rozložení potenciálu a vodivosti v mikrokanálu. Součástí práce bude diskuse metod vytváření kovových vrstev na plastových substrátech a zvládnutí kompletního postupu výroby mikrostrukturovaného zařízení.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství

Měření transportních charakteristik porézních částic inverzní plynovou chromatografií

Autor: Jiří Maršálek
Ročník: M2
Ústav: Chemického inženýrství
Školitel: Dr. Ing. Juraj Kosek, Ing. Tomáš Gregor

Práce popisuje dostavbu aparatury pro inverzní plynovou chromatografii (iGC) umožňující studium termodynamiky adsorpce a dynamiky transportu ve vzorcích polymerů nebo keramiky za normálních a zvýšených teplot a tlaků. V chromatografii iGC jsou z detailního tvaru odezvy na pulzní nebo skokový signál vyhodnocovány především transportní charakteristiky náplně kolony, např. prášku porézního polyolefinu. Je popsána metodika pro vyhodnocení transportních charakteristik výplně kolony z měřeného signálu teplotně-vodivostního detektoru. Tato metodika je založena na popisu van Deemterovy křivky. Je diskutována oblast praktické použitelnosti aparatury iGC vzhledem k charakteristickým časům difuze v porézních částicích. Měření a vyhodnocení transportních charakteristik je ilustrováno na vzorcích částic zeolitů a porézních částic polyolefinů.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství

Studie procesu výroby styrenu z hlediska systémového inženýrství

Autor: Petr Pitín
Ročník: M2
Ústav: Chemického inženýrství
Školitel: Doc. Ing. Vladimír Václavek, CSc.

Práce je zaměřena na studii procesu výroby styrenu v podniku SYNTHOS Kralupy a.s.. Na základě dostupných firemních materiálů typu PFD ("Process Flow Diagram") a PID ("Process Instrumentation Diagram"), technologického reglementu a dalších zdrojů je stávající proces porovnáván s dřívějším uspořádáním výroby tzv. starého styrenu z pohledu procesního a systémového inženýrství. Cílem je na základě tohoto srovnání opětovně identifikovat a charakterizovat procesní a utilitní proudy a místa s procesním měřením těchto proudů pro potřeby vytvoření materiálové a entalpické bilance procesu. V další fázi této studie by mělo dojít i k ověření stanovitelnosti požadovaných bilancovaných veličin jak z hlediska celého procesu, tak i jeho jednotlivých uzlů.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství

Studium kinetiky suché neutralizace

Autor: Marek Schöngut
Ročník: M1
Ústav: Chemického inženýrství
Školitel: Doc. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Smyslem studie je prozkoumání a kvantitativní popsání dějů probíhajících během reakce uhličitanu sodného s kyselinou dodecylbenzensulfonovou (HLAS). Tato reakce patří do skupiny tzv. suchých neutralizací, protože zásada (v našem případě uhličitan sodný) je v pevném stavu. Sodná sůl kyseliny dodecylbenzensulfonové (NaLAS) je významný surfaktant, který je hojně využíván ve výrobě pracích a čistících prostředků. Jeho hlavní výhodou je vysoká účinnost a šetrnost vůči životnímu prostředí. Budou prezentovány výsledky měření dynamiky smáčení substrátu (tableta uhličitanu sodného) za současného vývinu oxidu uhličitého a tvorby pasivační vrstvy. Výsledky budou prezentovány jednak formou grafické závislosti smáčecího úhlu, poloměru a výšky kapky na čase, a následně bude vyhodnocena závislost zdánlivé reakční rychlosti na tloušťce pasivační vrstvy. Bude diskutován význam získaných závislostí pro kinetiku reaktivní granulace a zrání (stárnutí) granulovaných detergentů.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství

Simulace procesů se sypkými hmotami z využitím simulačního programu Aspen Plus

Autor: Petr Stloukal
Ročník: M2
Ústav: Chemického inženýrství
Školitel: Doc. RNDr. Vaněk Tomáš, CSc.

Tato práce je zaměřena na studium možností a zvládnutí metodiky simulací procesů, v nichž se vyskytují sypké hmoty, pomocí simulačního programu Aspen Plus. Simulace těchto procesů vyžaduje dostatečné znalosti metodiky popisů sypkých směsí, zvláště v případech, kdy se jedná o směsi heterogenní, tedy složené z více látek. Důležitým faktorem je také dostatečná orientace v databázích fyzikálních modelů a z ní vycházející schopnost správné volby modelů používaných pro výpočet fyzikálních vlastností sypkých hmot. Dále byly prozkoumány jednotkové moduly používané pro zpracování sypkých hmot. Metodika a možnosti využití programu Aspen Plus při simulaci těchto procesů, byly studovány na jednotlivých procesních příkladech.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství

Experimentální studium elektroosmotického toku v plastových mikrofluidních čípech

Autor: Jiří Ston
Ročník: M2
Ústav: Chemického inženýrství
Školitel: Ing. Michal Příbyl, Ph.D.

Práce se zabývá studiem elektroosmotického transportu, který slouží k čerpání, dávkování nebo promíchávání elektrolytů v mikrofluidních čípech. Elektroosmotický tok charakterizují veličiny: rychlost elektroosmotického toku, elektroosmotická mobilita a zeta-potenciál. Tyto veličiny závisí na povrchových vlastnostech použitého materiálu, koncentraci elektrolytů, intenzitě vnějšího napětí vkládaného na zdrojové elektrody aj.

Experimentální měření je založeno na nepřímé vodivostní metodě, při které se do mikrokánalku vnášejí různě koncentrované roztoky při konstantním vkládaném rozdílu potenciálů a zaznamenává se proudová odezva. Cílem této práce jsou parametrické studie naměřených hodnot charakteristik elektroosmotického toku v závislosti na velikosti rozdílu elektrického potenciálu a koncentraci používaných roztoků. Součástí práce je také postup výroby mikrofluidních zařízení z polymerního materiálu PDMS a postup výroby fluorescenčního proteinu GFP, který bude sloužit k vizualizaci elektroosmotického toku a ke kontrole naměřených hodnot vodivostní metodou.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství

Experimentální studium dynamiky v kaskádě dvou propojených průtočných reaktorů

Autor: Petra Šimčíková
Ročník: M2
Ústav: Chemického inženýrství
Školitel: Ing. Lenka Schreiberová, CSc.

Práce je zaměřena na studium nelineární dynamiky chemické reakce peroxid vodíku – thiosíran – měďnaté kationy probíhající v kyselém prostředí v kaskádě dvou průtočných míchaných reaktorů se vzájemnou výměnou hmoty. Tento systém se řadí mezi pH oscilátory, to znamená, že i nepatrný přírůstek některého reaktantu (perturbant) vyvolá velkou odezvu v chování. Jako perturbant byla použita kyselina sírová, jejíž přídavky byly přiváděny pouze do prvního reaktoru a byl sledován přenos do druhého reaktoru. Výsledky experimentů byly zpracovány do podoby křivek zobrazujících časový průběh pH v obou reaktorech, změny pH v prvním reaktoru byly způsobeny přímým dávkováním kyseliny a reakcí systému na tento přírůstek, pH v druhém reaktoru se měnilo v důsledku difúze H^+ iontů přes pórovitou přepážku umístěnou mezi reaktory.

Sekce: Procesní a chemické inženýrství

Elektroformace obřích liposomů

Autor: Martin Ullrich
Ročník: B3
Ústav: Chemického inženýrství
Školitel: Doc. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Liposomy jsou schránky kulového tvaru, jejichž stěna je tvořena jednou popřípadě více fosfolipidovými dvojvrstvami. Průměr mohou mít od desítek nm až po stovky μm . Konkrétně těm, které mají v průměru přes 10 μm , se říká obří liposomy. Jejich výhoda tkví v tom, že je můžeme kvůli své velikosti pozorovat optickými mikroskopy a také do nich uzavírat (enkapsulovat) nějaký roztok, který i při změně okolní koncentrace uvnitř zůstává. Tohoto by mohlo být využito například pro medicínské účely (řízené vylučování léčiv).

Cílem této práce je nalézt takové podmínky syntézy obřích liposomů, aby měly úzké spektrum velikostí, a následně prozkoumat možnost enkapsulace roztoků. Z mnoha způsobů přípravy byla zvolena tzv. elektroformace. Metoda je založena na tom, že na elektrody nanese fosfolipidový film a mezi ně umístíme roztok, který chceme enkapsulovat. Začnou se tvořit liposomy, jejichž tvorbu urychlíme působením elektrického proudu. Hlavní výhodou metody je, že takto lze připravit liposomy o průměrech v řádu desítek μm , formace je rychlá (cca 2h) a vysoké procento z nich neobsahuje žádné vady jako například nekulový tvar či jeden nebo více uzavřených liposomů uvnitř jednoho velkého.

Sekce: Chemické inženýrství, biotechnologie a experimenty

Studium smáčivosti autoskel s různou povrchovou úpravou

Autor: Zuzana Brabcová
Ročník: M2
Ústav: Chemického inženýrství
Školitel: Dr. Ing. Pavlína Basařová

Práce se zabývá stanovením kontaktního úhlu třífázového rozhraní pevná fáze – kapalina – plyn, který má velký význam pro stanovení mezifázových napětí jako jedna z mála přímo měřitelných veličin. Měření bylo prováděno na autosklech (přední, boční čiré, boční zelené) s různou povrchovou úpravou (čistě, po průchodu myčkou, zaprášené) s čistou i znečištěnou vodou (dešťová voda, kalužová voda). Cílem práce je studium smáčivosti povrchu skla za různých podmínek simulujících přirozené prostředí. Profil kapky byl snímán kamerou přes mikroskop a takto vzniklé obrazy byly zpracovány v softwaru NIS-Elements.

Sekce: Chemické inženýrství, biotechnologie a experimenty

Vývoj zařízení pro tepelné slinování polymerních mikrostruktur

Autor: Vladimír Buday
Ročník: M1
Ústav: Chemického inženýrství
Školitel: Doc. Ing. Dalimil Šnita CSc.

Jednou z možností výroby mikrofluidních zařízení je vytváření sendvičových struktur spojováním funkčních vrstev. Obsahem práce je vedle základní literární rešerše popis nově vyvinutého slinovacího lisu, umožňujícího nezávislou regulaci teploty přítlačných desek a vyvinutí síly do 200 kN. Jsou popsány základní experimenty pro ověření funkce zařízení a je navržen další postup pro zdokonalení zařízení.

Sekce: Chemické inženýrství, biotechnologie a experimenty

Použití techniky Drop on Demand jako nástroje pro produkci mikročástic

Autor: Jiří Dohnal
Ročník: M2
Ústav: Chemického inženýrství – Laboratoř chemické robotiky
Školitel: Doc. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Práce se zabývá technologií Ink – Jet (Drop on Demand) jako nástroje pro výzkum kinetiky sprejového sušení při produkci mikročástic. Náplní je popis technologie Ink - Jet, způsob a průběh generování mikrokapek (popis řídicí vlny) a výpočet jejich objemu. Dále se práce zabývá mapováním vlivu měnících se řídicích prvků na parametry mikrokapek a nežádoucí jevy. Součástí je i test reprodukovatelnosti v závislosti na měnících se parametrech techniky (změnách řídicích prvků generování) a na měnících se vlastnostech použité kapaliny (viskozita).

Sekce: Chemické inženýrství, biotechnologie a experimenty

Experimentální studium biologických reaktorů pro odstraňování organických barviv z odpadních vod

Autor: Ondřej Knotek
Ročník: M2
Ústav: Chemického inženýrství
Školitel: Prof. Ing. Pavel Hasal, CSc.

Odpadní vody z textilního průmyslu obsahují některá barviva těžko odstranitelná běžnými procesy užívaných v ČOV. V této práci se zabýváme studiem konstrukčního řešení a optimalizací provozních parametrů biologických reaktorů, ve kterých je na vhodném nosiči imobilizováno mycelium dřevokazné houby *Irpelex lacteus*. Zmíněná houba produkuje skupinu enzymů, které katalyzují potřebné biodegradační procesy. Složité organické struktury nežádoucích barviv se tak degradují na jednodušší organické sloučeniny, které lze odstranit v obvyklých aktivačních procesech.

V současné době studujeme dvě konstrukční řešení reaktorů. TBR - kolonový reaktor se zkrápěným ložem a RBC – rotující biologický kontraktor. Kromě míry odbourání barviva jsou též stanoveny některé chemicko-inženýrské parametry zařízení např. doba zdržení či zadrž kapaliny. Velký důraz je kladen na zvětšování měřítka zařízení a proto jsou po úspěšném řešení laboratorních reaktorů konstruovány i reaktory v poloprovozním měřítku.

Sekce: Chemické inženýrství, biotechnologie a experimenty

Syntéza „těl“ chemických robotů na bázi dutých SiO₂ mikročástic

Autor: Pavel Kovačík
Ročník: M1
Ústav: Chemického inženýrství
Školitel: Doc. Ing. František Štěpánek, Ph.D.

Cílem práce je vytvořit tvrdé porézní částice na bázi silikátů, které by tvořily těla (obaly, schránky) chemických robotů. Chemickým robotem je v kontextu této práce myšlen velmi jednoduchý plně syntetický „jednobuněčný organismus“ mající s výjimkou schopnosti samoreprodukce a evoluce většinu hlavních rysů živých organismů, jako je schopnost pohybu v prostředí, látková výměna s okolím či schopnost akumulace nebo vylučování produktu. Velikost těchto vnitřně strukturovaných entit se pohybuje řádově v desítkách mikrometrů. Existuje několik metod k přípravě takovýchto částic, předložená práce se soustředí na dvě z nich, a sice:

- (i) srážení SiO₂
- (ii) proces samouspořádání koloidních částic.

V práci bude prezentován jednak základní postup přípravy, a dále pak budou studovány podmínky, které ovlivňují základní vlastnosti částic (velikost, tloušťka, propustnost) tak, aby bylo možné vyrobit tělo chemického robota přesně podle zadaných požadavků.

Sekce: Chemické inženýrství, biotechnologie a experimenty

Studium interakce bubliny a částice

Autor: Milan Melmer
Ročník: B3
Ústav: Chemického inženýrství
Školitel: Dr. Ing. Pavlína Basařová

Cílem této práce bylo studium flotační kolizní účinnosti při interakci izolované bubliny a mobilní kulové částice. K vlastnímu měření byly použity skleněné částice o velikosti 15mm a bubliny o velikosti od 0,3mm do 0,7mm. Pro toto měření bylo nutné sestavit a otestovat měřicí aparaturu. Děje byly sledovány a zaznamenávány vysokorychlostní kamerou a výsledky byly získány obrazovou analýzou dat pomocí softwaru NIS elements. Byly studovány trajektorie bublin před střetem s pohyblivou částicí, kolizní účinnosti pro různé velikosti bublin a závislost kolizního úhlu na počátečním úhlu.

Sekce: Chemické inženýrství, biotechnologie a experimenty

Měření selektivity redukce oxidů dusíku na katalyzátoru s ukládáním NO_x

Autor: Karel Mikota
Ročník: B3
Ústav: Chemického inženýrství
Školitelé: Prof. Ing. Miloš Marek, DrSc., Ing. František Plát

V rámci této práce budou diskutovány výsledky série měření provedených se vzorkem automobilového katalyzátoru. Experimenty mapují vliv provozních podmínek (teplota, použité redukční činidlo - H₂, CO, nebo C₃H₆) na selektivitu redukce NO_x. Tato veličina představuje jednu ze základních charakteristik, které kvantitativně popisují provoz katalyzátoru z hlediska míry eliminace škodlivých dusíkatých látek produkovaných motory spalující chudou směs (tj. všechny dieslové a některé benzinové motory).

Experimentální data dále slouží ke kalibraci (tj. vyčíslení kinetických parametrů) matematického modelu katalyzátoru s ukládáním NO_x.

Sekce: Chemické inženýrství, biotechnologie a experimenty

Konstrukce biologického palivového článku

Autor: Zuzana Nováková
Ročník: M2
Ústav: Chemického inženýrství
Školitel: Prof. Ing. Pavel Hasal, CSc.

Práce se zabývá konstrukcí biologického palivového článku a studiem možností zvyšování jeho výkonu. V biologických palivových článcích se přeměňuje prostřednictvím mikroorganismů chemická energie paliva přímo na energii elektrickou. Palivem mohou být jednotlivé sacharidy, jejich směsi nebo alternativně též odpadní vody s energeticky bohatými sloučeninami. Molekula sacharidu prochází metabolismem mikroorganismu, v našem případě se jedná o buňky kvasinek (*Saccharomyces cerevisiae*) v anaerobních podmínkách. Elektrony uvolňované při fermentaci (oxidaci) substrátu jsou odebírány na anodě článku, účinkem rozdílu elektrického potenciálu procházejí vnějším obvodem ke katodě a generují tak elektrický proud. Cílem práce je nalezení faktorů, ovlivňujících elektrický výkon palivového článku a uskutečnění opatření vedoucích ke zvýšení výkonu článku a jeho zachování po delší provozní dobu. Je sledován vliv stáří kultury kvasinek na výkon a délku provozní doby článku. Buňky jsou aplikovány v různém období exponenciální fáze růstu. Pozornost je věnována také vlivu promíchávání elektrolytů v obou poločláncích systému.

Sekce: Chemické inženýrství, biotechnologie a experimenty

Experimentální studium nevratného bobtnání v polyolefinech

Autor: Klára Smolná
Ročník: M1
Ústav: Chemického inženýrství
Školitel: Dr. Ing. Juraj Kosek, Ing. Hana Hajová, Ing. Lucie Pecháčková

Znalost termodynamiky sorpce a dynamiky transportu malých molekul v polyolefinech je důležitá nejen při výrobě polymerů, ale také v membránových separacích. Stanovení bobtnání polymeru v důsledku sorpce malých molekul je důležité z několika důvodů. Za prvé, gravimetrická měření sorpčních isoterem v polymerech je nutno korigovat na vztlakovou sílu působící na nabobtnalý objem a tato korekce je často významná. Za druhé, rozsah bobtnání charakterizuje semi-krystalickou strukturu polyolefinu, tj. distribuci amorfní a krystalické fáze a tzv. vazacích elastických řetězců. Za třetí, elastické efekty doprovázející bobtnání ovlivňují difuzi semi-krystalickým polyolefinem. Za čtvrté, tyto elastické efekty umožňují kvantitativní propojení teorie termodynamiky sorpce a experimentálních dat. V této práci je na dvou experimentálních zařízeních charakterizován děj nevratného bobtnání polymeru. Video-mikroskopicky bylo pozorováno, že se objem polyethylenu po desorpci 1-hexenu nevrátí na původní hodnotu. Gravimetricky bylo zjištěno, že rozvolnění elastických vazeb sorpcí 1-hexenu významně ovlivňuje následnou sorpci ethylenu.

Sekce: Chemické inženýrství, biotechnologie a experimenty

Experimentální studium pH-oscilační reakce v průtočném reaktoru

Autor: Tomáš Veber
Ročník: M2
Ústav: Chemického inženýrství
Školitel: Ing. Lenka Schreiberová, CSc.

Práce se zabývá experimentálním studiem složité chemické reakce provozované v průtočném promíchávaném reaktoru. Byla studována reakce peroxid vodíku – thiosíran – sířičitan v kyselém prostředí. Na základě předešlých experimentů bylo prokázáno, že tato reakce za určitých podmínek vykazuje tzv. oscilační chování, kdy dochází k periodickým změnám koncentrace vodíkového kationu H^+ . Naším cílem byla snaha dynamické chování této reakce prozkoumat v mnohem hlubší míře. Za tímto účelem byla učiněna řada experimentů, kdy do probíhající reakce byla periodicky vstřikována kyselina sírová o nízké koncentraci. Délka přídávku a hodnota koncentrace vstřikované látky tvořily důležité parametry, které byly v průběhu experimentů měněny, aby bylo dosaženo teoreticky předpovězené změny chování reakce. Takto experimentálně získaná data byla poté užita ke konstrukci tzv. křivek fázového posuvu, jež charakterizují periodicky oscilující systém. Naměřená experimentální data jsou v práci uvedena v podobě grafů.

Sekce: Chemické inženýrství, biotechnologie a experimenty

Vliv smáčivosti na interakci bubliny s pevným povrchem

Autor: Lucie Vobecká
Ročník: M2
Ústav: Chemického inženýrství
Školitel: Dr. Ing. Pavlína Basařová, Ing. Mária Fugasová - Zedníková, Ph.D.

Tato práce se zabývá nárazem bubliny na pevný povrch (např. částici, stěnu nádoby apod.). Znalost hydrodynamického chování bubliny při nárazu a pravděpodobnosti její adheze na povrch je potřebná při studiu řady průmyslových procesů (např. flotace plastů). Cílem této práce je zkoumání vlivu různých vlastností povrchu na celý proces interakce.

Náplní této práce je porovnání chování bubliny při nárazu na povrchy s rozdílným kontaktním úhlem (sklo, plexisklo, sklo potažené silanem a teflon). Jako plynná fáze je použit vzduch a jako kapalná deionizovaná voda. Experimenty jsou prováděny pomocí rychloběžné kamery a její záznam je zpracováván v programu vytvořeném pomocí Matlab Image Processing Toolbox. Vyhodnocovanými hydrodynamickými parametry jsou rychlost bubliny při nárazu a při odrazu, maximální deformace bubliny, doba potřebná pro vytvoření kontaktní čáry apod.

Sekce: Ekonomika a management

Omezení IS SAP při operativním plánování keramické výroby

Autor: Ing. Josef Dvořák
Ročník: M2
Ústav: Ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Ing. Miroslav Vágner, MBA., Ph.D.

V této semestrální práci je zkoumána možnost využití informačního systému SAP pro operativní plánování keramické výroby. Keramická výroba jako taková je velmi specifická a vyznačuje se několika charakteristickými rysy: jde o kontinuální provozy, zařízení velkých výkonů a rozměrů – proto se zásahy projevují za dlouhou dobu, procesy probíhají za vysokých teplot, procesy jsou založeny na heterogenních reakcích, složení vstupních surovin má proměnlivé složení, kvalita produktu je špatně stanovitelná, provozní veličiny jsou zatíženy velkým šumem. Proto se zde při použití informačního systému SAP pro operativní plánování můžeme setkat s řadou problémů a omezení. Součástí práce je analýza výchozího stavu a diskuze omezení IS SAP pro operativní plánování v keramické výrobě.

Sekce: Ekonomika a management

Konstrukce ukazatele OEE v podmínkách firmy

Autor: Jelena Mazunina
Ročník: M2
Ústav: Ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Ing. Dana Strachotová, Ph.D.

Overall Equipment Effectiveness (OEE – celková účinnost zařízení) je všeobecně uznávaná metodika měření pro porovnávání účinnosti zařízení, výrobních linek nebo celých výrobních závodů, která kombinuje informace o dostupnosti zařízení, jeho výkonu a o kvalitě výrobku do jediné srozumitelné metodiky měření. Hlavním cílem práce bylo navrhnout způsob sledování a výpočtu hodnoty ukazatele OEE jednotlivých strojů v podmínkách vybraného podniku. V rámci projektu byly taky provedeny analýzy činností zařízení a jejich obsluhy. Na základě zadání podniku jsem provedla dílčí audity jednotlivých pracovišť a navrhla jsem některé kroky ke zvýšení efektivity výroby.

Práce popisuje nejrozšířenější metody hodnocení využití výrobních kapacit, podstatu těchto metod a případnou aplikaci v praxi. Důraz je kladen na ukazatel celkové efektivity zařízení: jeho význam a přínos, způsob výpočtu a sběr dat, využití a znázornění výsledků.

Praktická část je orientovaná na konkrétní požadavky zadavatele výrobní praxe v prostředí podniku. Výsledné návrhy byly prezentovány vedení firmy.

Sekce: Ekonomika a management

Rozbor struktury materiálové toku výrobní linky

Autor: Tomáš Muzikář
Ročník: M2
Ústav: Ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Ing. Petra Vegnerová

Cílem projektu byla analýza struktury materiálové toku na montážní lince v podniku KOSTAL CR, spol. s r.o., jenž se zabývá výrobou elektroniky a elektromechanických součástek určených zejména pro automobilový průmysl. V rámci projektu byl důkladně zmapován materiálový tok na montážní lince podvolantových modulů a byly provedeny náměry časů výrobních i nevýrobních operací na jednotlivých pracovištích. Tato data následně posloužila jako podklad pro konstrukci reálného modelu linky v softwarovém prostředí aplikace Witness.

Vzhledem k tomu, že se KOSTAL CR potýká s akutním nedostatkem výrobních pracovníků, bude tento model využit k optimalizaci jejich využití. Dále by měl usnadnit nalezení optimálního způsobu minimalizace zásob rozpracované výroby mezi jednotlivými úseky linky. V neposlední řadě by měly výstupy z tohoto modelu posloužit ke zvážení vhodnosti současného systému řízení výroby na této lince, případně pomoci při návrhu systému nového.

Sekce: Ekonomika a management

Optimalizace využití pracovního času mistrů lakovacích linek ve společnosti Linet, s.r.o.

Autor: Kateřina Reblánová
Ročník: M2
Ústav: Ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Ing. Dana Strachotová, Ph.D.

Produktivita práce je uznávaný ekonomický ukazatel. Pro jeho zjištění se používají osvědčené moderní metody a studie, které nám usnadňují efektivní řízení procesů a zabezpečují dosažení vyšší produktivity procesů, eliminaci plýtvání či snižování nákladů.

Nicméně aplikace a využití pracovních studií je v ČR pořád podceňovaným nástrojem. V současnosti se ukazuje, že prostřednictvím měření práce lze stále ještě odhalovat rezervy v produktivitě a efektivnosti výrobních procesů.

Některé firmy zjistily, jaké nevídané možnosti skýtají pracovní studie, a že je možné na jejich základě vypracovat komplexní systémový přístup uplatňující se při racionalizaci procesů a může významně zvyšovat a trvale zajišťovat produktivitu práce, prosperitu a konkurenceschopnost výrobní i nevýrobní organizace.

Tato práce je zaměřena na problematiku časových studií a následně jejich vyhodnocení pro zjištění reálné situace ve výrobní části podniku Linet, s.r.o. V závěru práce jsou uvedeny výsledky snímkování mistrů lakovacích linek a návrhy na zlepšení organizace a řízení práce.

Sekce: Ekonomika a management

Analýza faktorů působících na výkonový profil linky

Autor: Alena Vacková
Ročník: M2
Ústav: Ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Ing. Petra Vegnerová

Cílem projektu byla analýza faktorů, které působí na výkon montážní linky DC v podniku KOSTAL CR, spol. s r. o. Na montážní lince byly naměřeny reálné časy výrobních i manipulačních operací a pro tyto časy byly určeny základní statistické míry. Pomocí vypočtených hodnot byl sestaven výkonový profil linky. Dále bylo zkoumáno, jak různé faktory ovlivňují délku operačních časů, a tím i výkonový profil.

Výsledkem daného projektu je vytvořený simulační model montážní linky v programu Witness. Vstupními daty modelu byly naměřené a vypočtené hodnoty časů a výkonů jednotlivých pracovišť. Správnost modelu byla ověřena s pomocí dat o výrobě z předešlých období. Model byl použit pro stanovení využití zařízení a pracovníků na lince při různých parametrech výroby a potvrdil předpokládanou lehkou nevyváženost linky.

Model by mohl být posléze využit pro kontrolu reálnosti plánů výroby, při sestavování plánu zásobování linky a pro zjištění časů dispozice hotových výrobků.

Sekce: Ekonomika a management

Zavádění nového výrobku na průmyslovém trhu

Autor: Kristýna Veselá
Ročník: M2
Ústav: Ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Ing. Olga Kutnohorská

Zavádění nového výrobku na průmyslový trh je velice komplexní proces, který v sobě zahrnuje mnoho dílčích kroků. Aby byl celý tento proces úspěšný je nutné všechny jeho etapy důsledně prozkoumat a veškeré výsledky zohlednit. Teoretická část této práce je zaměřena na vymezení základních pojmů, popis jednotlivých etap procesu a popsání specifík průmyslového trhu. Praktická část se poté zabývá zaváděním konkrétního výrobku. Tato práce tedy popisuje jednotlivé etapy, zaznamenává průběh procesu, analyzuje první výsledky prodeje a vývoj ceny v prvních obdobích. Závěrem je úspěšnost celého procesu zavádění nového výrobku na průmyslovém trhu zhodnocena a je popsán předpokládaný budoucí vývoj.

Sekce: Inženýrská informatika, měření a řízení procesů

Vizualizace třírozměrných dat

Autor: Lenka Kňazovická
Ročník: M1
Ústav: Počítačové a řídicí techniky
Školitel: Ing. Martina Mudrová, Ph.D.

Vizualizace dat je jedním z běžných témat v inženýrské praxi. U vícerozměrných dat se však stává přehledné zobrazení údajů problematickým. Tato skutečnost platí i pro zobrazování obrazových dat ve více vrstvách. Existují různé zobrazovací metody založené na objemovém či vektorovém modelování.

Práce je zaměřena na vizualizaci sady rastrových snímků lidské hlavy pocházejících z NMR vyšetření. Cílem je zobrazení daného objektu v souvislostech s dalšími informacemi. V práci jsou studovány možnosti systému Matlab pro řešení daného problému. Nezbytnou součástí je také studium teoretického pozadí vizualizačních metod.

Sekce: Inženýrská informatika, měření a řízení procesů

Implementace webových stránek výzkumné skupiny řízení bioprocusů

Autor: Václav Kohout
Ročník: B3
Ústav: Počítačové a řídicí techniky
Školitel: Prof. Ing. Jan Náhlík, CSc.

Příspěvek se zabývá problematikou návrhu nových webových stránek výzkumné skupiny řízení bioprocusů vedené profesorem Náhlíkem. Cílem příspěvku je seznámení s průběhem vypracování semestrálního projektu a informacemi, které jsem získal při jeho tvoření. Tyto informace jsem získával nejen z internetu a literatury, ale také z vlastních zkušeností.

Úvodem bude popsán současný stav webu, který nevyhovuje dnešním požadavkům jak po technologické, grafické i po obsahové stránce. Dále budou uvedeny výsledky rešerše obsahu existujících webů vědeckých skupin zabývajících se podobnou tematikou a vědeckých skupin pracujících na VŠCHT v Praze. Po přehledu existujících technologií pro tvorbu webu zmíním, které z nich byly zvoleny pro návrh webu. Zvolené technologie umožnily vytvořit nový design a funkce webu, které budou rovněž představeny. Nakonec pojednám o možnostech funkcí zaregistrování a odbírání příspěvků.

Sekce: Inženýrská informatika, měření a řízení procesů

Statistické a databázové zpracování dat z formuláře

Autor: František Kučera
Ročník: B3
Ústav: Počítačové a řídicí techniky
Školitel: Ing. Jana Finkeová, CSc.

Cílem práce je vytvořit formulář pro sběr dat a aplikaci pro jejich zpracování. Pro sběr dat budou použity formuláře, vytvořené jako webová aplikace v PHP jazyce. Poté co uživatel formulář vyplní a potvrdí správnost vyplněných údajů, uloží se do databáze na serveru. Poté se uživateli nabídne možnost, vygenerovat vyplněný formulář do PDF. Toto by se jistě uplatnilo u některé veřejné instituce, jakou je například ČSSZ, pokud zde již ovšem něco podobného nemají, kde by to ušetřilo práci při zpětném přepisování formulářů do počítače. Stačilo by, kdyby uživatel vytiskl formulář z PDF, podepsal a poslal poštou na ČSSZ. Textová podoba formuláře by se již nemusela převádět do počítače a sloužila by jen pro kontrolu.

Druhou částí projektu je vytvoření aplikace pro zpracování těchto dat. Bude tvořena ve vývojovém prostředí Microsoft Visual Studio 6 – Visual Basic a měla by být schopna připojit se k databázi na serveru, stáhnout si ji do počítače a pracovat v ní offline. Uživatel bude mít možnost pracovat s daty pomocí SQL dotazů. Pro statistické zpracování a jednodušší práci s daty, bude aplikace obsahovat, knihovnu předdefinovaných SQL dotazů.

Sekce: Inženýrská informatika, měření a řízení procesů

Získávání dat z webových stránek pro hodnocení vědeckých článků

Autor: Oldřich Matouš
Ročník: B3
Ústav: Počítačové a řídicí techniky
Školitel: Ing. Jaroslav Vovsík, Ph.D.

Cílem práce je vytvoření systému pro automatické získávání dat o citačním ohlasu vědeckých časopisů ze stránek "ISI Web of Knowledge" ve formě textového dokumentu/sešitu tabulkového kalkulátoru. Výsledek práce bude používán při získávání informací o časopisech pro každoroční hodnocení vědeckých výsledků studentů školy. V současné době je třeba procházet množství stránek a ručně přepisovat hodnoty do tabulkového kalkulátoru. Data potřebná pro hodnocení jsou "Impact faktor" časopisu a "Median Impact Factor" oboru příslušejícího k danému časopisu. Tato data jsou dostupná na webových stránkách <http://www.isiknowledge.com>.

Sekce: Inženýrská informatika, měření a řízení procesů

Užití wavelet transformace v kompresi vícerozměrných signálů

Autor: František Mojžíš
Ročník: B3
Ústav: Počítačové a řídicí techniky
Školitel: Ing. Eva Hošťálková

Projekt je zaměřen na použití wavelet transformace ke kompresi vícerozměrných dat. Řešení zahrnuje:

popis wavelet transformace včetně charakteristiky vybraných vlnkových rodin a rozboru některých jejich vlastností a aplikací

užití Haarovy transformace ke kompresi dat a posouzení míry ztráty obrazové informace s použitím Parsevalova teorému

aplikaci popsaných metod na video nahrávky získané pomocí Matlabu

Sekce: Inženýrská informatika, měření a řízení procesů

Návrh merania teploty a vlhkosti v sušiarne pre kontinuálne sušenie zemiakového škrobu

Autor: Lukáš Rusyniak
Ročník: M1
Ústav: Fyziky a měřicí techniky
Školitel: Ing. Jiří Macháč, CSc.

Obsahom predkladanej práce je osadenie kontinuálnej sušiarne zemiakového škrobu vhodnými senzormi na meranie teploty a vlhkosti. Práca sa v teoretickej časti zaoberá popisom výroby zemiakového škrobu, vrátane popisu sušiarne. V praktickej časti sa rieši na základe rešerše odborných článkov a firemných katalógov otázka výberu senzorov na meranie technologických veličín. Kritéria na výber senzorov sú nasledujúce: kompatibilita senzoru s aparaturou, presnosť prístrojov vzhľadom ku požadovanej citlivosti, veľkosť spotreby energie, možnosť automatizovaného zberu dát a v neposlednom rade aj cena prístrojov. Výsledkom práce bude návrh konkrétneho usporiadania senzorov v sušiarne.

Sekce: Inženýrská informatika, měření a řízení procesů

Analýza a zvýrazňování textur obrazů reprezentujících znečištění ovzduší

Autor: Bc. Petra Slavíková
Ročník: M2
Ústav: Počítačové a řídicí techniky
Školitel: Ing. Martina Mudrová, PhD.

Znečištění ovzduší je čím dál tím významnějším světovým problémem. Jednoduchým a zároveň velmi účinným prostředkem jeho monitorování je využití bioindikátorů pro kvantifikaci poškození zplodinami v ovzduší a jeho rozdělení do pěti tříd znečištění. Sběr vzorků a jejich studium nám poskytuje informace o možném znečištění a dává nám možnost určit jeho stupeň. Pro svou rozšířenost na území České Republiky byl vybrán smrk ztepilý a předmětem obrazové analýzy byly zvoleny snímky jehlic z elektronového skenovacího mikroskopu.

Charakter snímků stomat (průduchů) jehlic smrku ztepilého nám dává možnost určení stupně znečištění pomocí metod zpracování obrazů. Pokud byl vzorek odebrán z oblasti s velmi malou mírou znečištění, stoma má jemnou vláknitou strukturu. Se zvyšujícím se stupněm znečištění se stoma začíná pokrývat vrstvou epikutikulárních vosků, jimiž se rostlina snaží chránit před nepříznivými vlivy z okolí. Lze tedy předpokládat, že čím rozsáhlejší je pokrytí vosky, tím více je ovzduší v dané lokalitě znečištěno. Tento jev lze z hlediska zpracování obrazů dobře kvantifikovat pomocí metod detekce hran.

Předmětem této práce je studium detekčních metod, jejich aplikace a výběr nejvhodnější z nich pro určení tabulky kritérií, pomocí kterých bude možno rozdělit snímky do 5 tříd znečištění.
