

Studentská vědecká a odborná činnost
na Fakultě chemicko-inženýrské

Přednáškové sekce:

Analytická chemie

Fyzikální chemie

Chemické a procesní inženýrství

Matematické modelování a informatika

Ekonomika a řízení chemických a
potravinářských podniků

Seznam sekcí:

Analytická chemie.....	3
Fyzikální chemie.....	9
Chemické a procesní inženýrství.....	13
Matematické modelování a informatika.....	17
Ekonomika a řízení chemických a potravinářských podniků.....	22

Seznam účastníků

Bakeš Daniel 17
Baxa Stanislav 9
Buřič Lubor 18
Formánek Tomáš 23
Francová Magda 10
Gavlasová Andrea 18
Helm Rudolf 19
Hloušková Petra 22
Horáčková Blanka 19
Knápková Veronika 20
Koukolová Jitka 3
Kryl David 20
Křupka Jaromír 4
Kukuková Alena 13
Laštovka Václav 10
Majdloch Tomáš 4
Nevrkla Miroslav 23
Ondo Daniel 11
Petr Rudolf 24

Polák Jan 5
Radek Pernica 24
Reková Marie 5
Řezanka Pavel 6
Sedláčková Adéla 24
Sedláková Zuzana 12
Slouka Zdeněk 14
Starý Tomáš 15
Straka Martin 12
Svátek Michal 21
Špás Petr 14
Tutsch Jiří 6
Uchýtilová Petra 15
Vaňková Petra 16
Večerník Petr 7
Vodička Josef 16
Vontrobová Martina 25
Vrzák Jan 25
Záhrebský Martin 21

Sekce: **Analytická chemie**

Zahájení: 9:00 v posluchárně A 11

Přihlášeno: 8 prací

Komise: Doc. Ing. Radko Volf, Csc. – předseda
prom. fyz. Jan Fährnich, CSc.
Ing. Jaroslav Havlíček, CSc.
Ing. Radka Konířová, Ph.D.
Doc. Ing. Oto Mestek, CSc.

**Studium komplexace aniontových receptorů
s krátkodobými radionuklidy**

Autor: Jitka Koukolová, 5. ročník
Ústav: analytické chemie
Školitel: Doc. RNDr. Vladimír Král CSc.
Doc. Ing. Věra Křížová CSc.

Cílem této práce bylo nalézt aniontové receptory na bázi porphyrinů a sapphyrinů, vhodné pro komplexaci aniontových forem krátkodobých radionuklidů $^{99m}\text{TcO}_4^-$ ($t_{0,5} = 6$ hod) a $^{186}\text{ReO}_4^-$ ($t_{0,5} = 90,6$ hod). Vzniklé komplexy by mohly nalézt uplatnění v diagnostice a terapii nádorových onemocnění. U studovaných ligandů byl proveden předběžný screening pomocí UV – VIS titrace. Byla sledována komplexace vybraných látek s těmito anionty: ClO_4^- a ReO_4^- . Na základě tohoto screeningu byl vybrán úzký soubor látek, u kterých byla podrobně sledována komplexace s $^{186}\text{ReO}_4^-$. Byla sledován vliv poměru kov:ligand, pH a kinetika komplexace s radionuklidem $^{186}\text{ReO}_4^-$.

Použití Ramanovy mikrospektroskopie a optické mikroskopie pro studium povrchu jehličí smrku ztepilého

Autor: Jaromír Křupka, 5. ročník
Ústav: analytické chemie
Školitel: Doc. Dr. RNDr. Pavel Matějka

Při vyhodnocování znečištění životního prostředí je užívaným biomarkerem jehličí smrku ztepilého (*Picea abies*). Poškození jehlice, resp. její ovlivnění znečištěným prostředím lze sledovat metodami vibrační spektroskopie, obzvláště technikou FT Ramanovy spektroskopie. Při měření některých jehlic se ve spektrech objevuje zvýšené pozadí způsobené spojitou emisí záření v blízké infračervené oblasti. Cílem této práce bylo zjistit, zda a případně jak zvýšené pozadí souvisí s mikroskopickými nečistotami na povrchu jehlic. Byla k tomu použita metoda Ramanovy mikrospektroskopie v kombinaci s optickou mikroskopií, sloužící k záznamu obrazu povrchu jehlic. Spektrální data byla vyhodnocována chemometrickými metodami.

Polymerní filmy na bázi binaftolového derivátu: příprava a charakterizace

Autor: Tomáš Majdloch, 3. ročník
Ústav: analytické chemie
Školitel: Mgr. T. V. Šiškanová, CSc.

Polymerní filmy obsahující vhodné receptorové jednotky mohou nacházet uplatnění jako potenciometrické sensory. Cílem předkládané práce bylo vytvoření a charakterizace polymerních filmů na bázi pyrolem substituovaného binaftolamidu.

Mezi sledované faktory ovlivňující vlastnosti polymerního filmu patřila přítomnost organické kyseliny a poměr pyrolu k pyrolem substituovanému binaftolamidu. Připravené elektrody byly testovány potenciometricky na aminy, aminokyseliny a amonné soli v prostředí tetraboritanového pufru o pH 10.

Aniontová odezva připravených elektrod se zlepšovala se snižováním množství pyrolu a za přítomnosti organické kyseliny v polymerační směsi a závisela na způsobu aktivace elektrod.

Stanovení palladia ve vzorcích prachu z blízkosti dálnice metodou ICP-MS

Autor: Jan Polák, 5. ročník
Ústav: analytické chemie
Školitel: Doc. Ing. Oto Mestek, CSc.

Palladium nachází největší uplatnění spolu s platinou jako katalyzátor při organických i anorganických reakcích, zvláště pak jako třícestný katalyzátor u osobních i nákladních aut. Při provozu automobilové dopravy tak dochází v malé míře k uvolňování materiálu katalyzátoru a ve spadu prachu v okolí často užívaných silnic pak můžeme detekovat zvýšené množství platinových kovů (řádově ng/g).

Předkládaná práce se zabývá jednoduchým rozkladem vzorků kontaminovaných prachů a jejich přímou analýzou metodou ICP-MS. Nejprve byl vybrán nejvhodnější vnitřní standard a optimalizován průtok Ar a příkon plazmatu. Dále byl sledován vliv matrice vzorku, jako je kyselost, obsah NO_3^- a obsah Ca, na signál Pd. Dále byla testována účinnost matematických korekcí spektrálních interferencí způsobených ionty $^{89}\text{Y}^{16}\text{O}^+$ a $^{90}\text{Zr}^{16}\text{O}^+$, které ruší stanovení ^{105}Pd a ^{106}Pd a byla testována správnost výsledků metodou standardního přídávku.

Stanovení konstanty stability komplexu Ho - DO3A(NH₂) pomocí UV-VIS titrace a potenciometrie

Autor: Marie Reková, 5. ročník
Ústav: analytické chemie
Školitel: Ing. Michaela Koudelková, Ph.D.

Deriváty kyseliny DOTA (1,4,7,10-tetraazacykloodekan-N,N,N,N-tetraoctová kyselina), DO3A(NH₂) s krátkodobými radionuklidy (^{166}Ho , ^{90}Y ,..) se používají jako radiofarmaka. Tato bifunkční chelatační činidla slouží v nukleární medicíně pro značení protilátek. Cílem této práce bylo stanovení podmíněné konstanty stability komplexu Ho-DO3A(NH₂) pomocí UV-VIS titrace a protonizačních konstant DO3A(NH₂) prostřednictvím statické potenciometrie. Na základě UV-VIS titrace bylo zvoleno optimální pH a vhodný poměr Ho-Arzenazo-III (indikátor). Dále byl sledován vliv pH, reakční doby a poměru Ho/DO3A(NH₂) na výtěžek komplexace. Ze získaných dat byla stanovena konstanta stability komplexu Ho-DO3A(NH₂).

Využití derivátů brucinu pro chirální interakce s aromatickými karboxylovými kyselinami

Autor: Pavel Řezanka, 3. ročník
Ústav: analytické chemie
Školitel: Ing. Kamil Záruba

V rámci své práce jsem se zabýval přípravou a využitím derivátů brucinu na bázi kvarterních solí ke sledování interakcí s racemickými karboxylovými kyselinami.

Tato práce je rozčleněna do dvou částí. První se zabývá testováním nové chirální stacionární fáze na bázi kvarternizovaného brucinu při dělení enantiomerů pomocí vysokoúčinné kapalinové chromatografie. Druhá část se zabývá hledáním vhodných podmínek pro elektropolymeraci pomocí cyklické voltametrie pro brucin a jeho deriváty. Tyto polymerní látky byly zkoumány Ramanovou spektroskopií a měly by být využity pro *coated wire* elektrody.

Nové možnosti využití modifikovaných kobaltikarboranových aniontů jako lipofilního přídavku v membránách iontově-selektivních elektrod

Autor: Jiří Tutsch, 1. ročník
Ústav: analytické chemie
Školitel: Ing. M. Krondřák, Mgr. H. Březnová, Ing. G. Broncová

Předkládaný projekt byl zaměřen na sledování funkčnosti membrán ISE v závislosti na použitém lipofilním přídavku – jednalo se o nesubstituovaný kobaltikarboranový aniont, phenylenekobaltikarboranový aniont, bisphenylenekobaltikarboranový aniont a pro srovnání byl aplikován nesubstituovaný tetrafenylborát. Všechny lipofilní přídavky byly testovány v kombinaci s vybranými ionofory (dibenzo-18-crown-6-ether, dicyklohexano-18-crown-6-ether a inofor selektivní na vápník). Experimenty prokázaly, že kobaltikarboranový aniont je dostatečně lipofilní pro možné použití jako lipofilní přídavek v membránách ISE. Oproti běžně užívaným derivátům, např. tetrafenylborátu, neabsorbuje v UV oblasti a lze jej s výhodou použít i pro optické senzory. Další výhodou oproti tetrafenylborátu je jeho chemická stabilita, neboť je výrazně odolnější vůči kyselé i bazické hydrolýze.

Sorpce technecistanu na bentonitu

Autor: Petr Večerník, 5. ročník
Ústav: analytické chemie
Školitel: Ing. Radka Konířová, Ph.D.

S rostoucím využíváním radionuklidů ve vědě, výzkumu a průmyslu nastává otázka uložení radioaktivních odpadů. Jednou z možností jak nakládat s vysoce aktivním odpadem je jeho umístění do hlubinného úložiště, kde bude využito bentonitu jako zásypového materiálu.

Byla studována kinetika sorpce technecistanu na bentonitu za aerobních a anaerobních podmínek a vliv počátečního pH na sorpci technecistanu na bentonitu. Aerobní experimenty byly prováděny za laboratorních podmínek, anaerobní experimenty byly uskutečněny v rukavicovém boxu v inertní atmosféře dusíku.

Bylo zjištěno, že za aerobních i anaerobních podmínek dosažených v rukavicovém boxu je zachyt technecistanu na bentonitu minimální, což potvrdily nízké hodnoty distribučních koeficientů K_D . Díky pufrovací kapacitě bentonitu je vliv počátečního pH na sorpci technecistanu zanedbatelný. Přítomnost jednotlivých specií technecia v bentonitovém výluhu byla ověřena pomocí DPP.

Sekce: **Fyzikální chemie**

Zahájení: 9:00 v místnosti A402

Přihlášeno: 6 prací

Komise: Doc. Ing. Milan Zábranský, CSc. (předseda)
Ing. Lubomír Hnědkovský, CSc.
Ing. Karel Řehák, CSc.

Stanovení tepelných kapacit kalibračních standardů

Autor: Stanislav Baxa, 5.ročník,
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Ing. Květoslav Růžička, CSc.

Tepelné kapacity patří mezi základní termodynamické veličiny a jejich spolehlivé hodnoty, závisující na co nejpřesnější kalibraci měřícího zařízení, slouží jako vstupní údaje v mnoha chemicko-inženýrských výpočtech.

V rámci práce byly stanoveny izobarické tepelné kapacity čtyř kalibračních standardů (kyseliny benzoové, kofeinu, bifenyly a difenyl etheru) v teplotním rozsahu 30 °C až 200 °C. Měření probíhalo na přístroji francouzské výroby Setaram C80 kontinuální metodou a metodou teplotních inkrementů. Naměřená data, která byla vyhodnocena a porovnána s literárními údaji o izobarických tepelných kapacitách, budou sloužit k pravidelnému ověřování funkce kalorimetru.

Závislost můstkové funkce na hustotě a na mezimolekulární vzdálenosti

Autor: Magda Francová, 5. ročník
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Prof. Ing. Antol Malijevský, CSc. ,
Prof. Ing. Stanislav Labík, CSc.

Můstková funkce je základní veličinou pro určení vnitřní struktury a termodynamických vlastností kapalin a plynů. Tato práce se zabývá návrhem analytického tvaru závislosti můstkové funkce na mezimolekulární vzdálenosti a hustotě. Jako vstupní data jsem obdržela přesné hodnoty závislosti této funkce na mezimolekulární vzdálenosti pro řadu hustot.

Práce se skládá ze dvou částí. První částí je určení stěžejních bodů z výše zmíněných dat a jejich závislostí na hustotě. Těmito body jsou funkční hodnoty můstkové funkce a její derivace v bodě dotyku a polohy a funkční hodnoty můstkové funkce v prvních třech extrémech. Těchto závislostí bylo v druhé části práce využito pro návrh analytického vztahu.

Výsledný vztah byl testován na datech z počítačových simulací.

Měření teplotní závislosti limitních aktivních koeficientů nižších 1 - alkanolů ve vodě při nízkých teplotách metodou HSA.

Autor: Václav Laštovka, 5.ročník
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: ing. Dana Fenclová, CSc.

Cílem této práce bylo rozšířit teplotní závislost limitních aktivních koeficientů nižších 1–alkanolů ve vodě k teplotám blízkým normálnímu bodu tání vody. Experimentální data byla naměřena pomocí chromatografické metody „Head Space Analysis“ (HSA). U systémů s omezenou mísitelností se při klasickém experimentálním postupu HSA objevily problémy související s pomalým rozpouštěním 1-alkanolu ve vodě. Pro odstranění tohoto nežádoucího vlivu bylo dávkování samotného čistého 1-alkanolu do vody, nahrazeno přidáváním jeho směsi s metanolem. Chyba takto stanovených limitních aktivních koeficientů je odhadována na 3-5%.

Naměřená data byla vyhodnocena a simultánně korelována s literárními aktivními koeficienty, parciálními molárními dodatkovými entalpiemi a parciálními molárními dodatkovými tepelnými kapacitami v nekonečném zředění pro daný systém.

**Měření limitních aktivitních koeficientů C_1 - C_5 alkoholů ve vodě
metodou nestacionární plynové chromatografie**

Autor: Daniel Ondo, 5.ročník
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: doc. Ing. Vladimír Dohnal, CSc.

Práce se zabývá stanovením limitních aktivitních koeficientů (γ^∞) C_1 - C_5 alkoholů ve vodě metodou nestacionární plynové chromatografie. Tato technika navržená Belferem (1972) představuje rychlou a jednoduchou metodu ke stanovení γ^∞ těkavých solutů v těkavých rozpouštědlech. Spočívá v měření poklesu retenčního času solutu s časem jeho nástřiku do kolony obsahující rozpouštědlo. Existující výsledky ukazují, že metoda ale nedosahuje příliš dobré přesnosti (cca 10%) a vykazuje též systematickou odchylku směrem k nižším hodnotám. Tato práce na základě analýzy původní teorie předkládá novou zdokonalenou teorii a aplikuje ji na nově naměřená data. Zdokonalená teorie mění původní teorii ve třech aspektech: (i) uvažuje jiný vztah pro rychlost eluce rozpouštědla z kolony, (ii) modifikuje kompresibilitní korekci pro nosný plyn nasycený parou rozpouštědla, (iii) přesněji interpretuje naměřené hodnoty retenčního času. Aplikace zdokonalené teorie na retenční data získaná v této práci vedou k hodnotám γ^∞ o 15-20% vyšším v porovnání s aplikací původní teorie, přičemž tyto hodnoty dobře korespondují (v rámci 4%) se spolehlivými údaji změřenými jinými technikami. Práce prezentuje nově získané hodnoty limitní relativní těkavosti, Henryho konstanty a limitního aktivitního koeficientu pro všechny izomerní C_1 - C_5 alkoholy (s výjimkou neopentanolu) ve vodě při 328,15 K.

Rovnováha pevná látka – kapalina
v systému kyselina octová (1) – formamid (2)

Autor: Zuzana Sedláková, 5.ročník,
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Ing. I. Malijevská, CSc.

Byla měřena rovnováha pevná látka - kapalina binárního systému kyselina octová (1) – formamid (2). Tento systém tvoří 2:1 sloučeninu s inkongruentním bodem tání.

Měření bylo prováděno dynamickou metodou. Rovnovážné teploty byly odečítány z křivek tání. Rychlost chlazení směsi byla 5°/hod a rychlost ohřevu směsi byla 4°/hod, jeden experimentální bod obsahoval kolem 100 000 teplotních údajů.

Pro naměřená data byly vypočteny aktivitní koeficienty a určena jejich přesnost.

Stanovení tlaku nasycených par vybraných alkoholů C4 a C5

Autor: Martin Straka, 4.ročník,
Ústav: fyzikální chemie
Školitel: Ing. Michal Fulem, Ing. Květoslav Růžička, CSc.

V rámci této práce byla naměřena data tlaku nasycených par vybraných větvených alkoholů C4 a C5. Tlak nasycených par byl pro tyto látky stanoven v teplotním intervalu 233K – 293K. Naměřená data byla porovnána s literárními zdroji.

Protože měření byla provedena na nové plně automatizované aparatuře, jedním z cílů této práce bylo její otestování. V rámci měření bylo proto provedeno zkušební měření tlaku nasycených par naftalenu. Aparatura umožňuje měření v oblasti nízkých teplot, zajímavých např. z environmentálního hlediska. Měřícím elementem aparatury je absolutní tlakoměr firmy MKS Instruments Baratron 690A11TRA s tlakovým rozsahem od 1 Pa do 1.3 kPa a přesností 0.05% z odečítané hodnoty.

Sekce: **Chemické a procesní inženýrství**

Zahájení: 9:00 v místnosti č. B139

Přihlášeno: 7 prací

Komise: Doc. Ing. Igor Schreiber, CSc. – předseda
Dr. Ing. Milan Jahoda – místopředseda
Ing. Frantisek Hovorka, CSc.
Ing. Lenka Schreiberová, CSc.
Dr. Ing. Pavlína Basařová

Studium reakcí s oscilačním průběhem pH
pomocí pulsích perturbací

Autor: Daniel Bakeš, 5. ročník
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Lenka Schreiberová, CSc.
Konzultant: Doc. Ing. Igor Schreiber, CSc.

Práce se zabývá experimentálním studiem dynamiky pH-oscilační reakce peroxid vodíku – thiosíran – Cu^{2+} v kyselém prostředí s využitím metodiky vzruchu a odezvy, která zjišťuje závislost fázového posuvu na fázi přídavku. Autonomní dynamika těchto reakcí zahrnuje násobné ustálené stavy, oscilace a excitabilitu. Jednorázové přídavky klíčových reaktantů ovlivňují chod reakce specifickým způsobem, což umožňuje charakterizovat danou reakci, odlišit ji od jiných podobných reakcí s oscilační kinetikou a utřídit v systému reakcí se složitou topologií reakční sítě. Výsledky experimentů jsou zpracovány formou křivek fázového posuvu (PTC křivky) a porovnány s PTC křivkami vypočtenými z matematického modelu.

Mikrochemické inženýrství

Autor: Zdeněk Slouka
Ústav: Chemické inženýrství
Školitel: Doc. Ing. Dalimil Šnita, CSc.

Tato práce pojednává o miniaturizaci v oblasti chemie a chemického inženýrství. Budou zmíněny základní výhody, které mikrotechnologie přináší a principy, na kterých je *zmenšování měřítka* založeno. Vzájemnou integrací jednotlivých miniaturizovaných procesů (dnes se již používá pojem mikro-jednotkové operace) na malém prostoru dostáváme velmi užitečné nástroje pro zacházení s chemickými látkami, jakož i pro vývoj nových postupů při výrobě či analýze různých sloučenin a směsí. *Zvětšování měřítka* je možno realizovat paralelním zapojením velkého množství mikrojedenotek. Jako jeden z produktů miniaturizace bude uvedena laboratoř na čipu (*lab-on-a-chip*). Jedná se o automatizovaný systém, který je schopen provést kompletní analýzu vzorku. V druhé části práce bude popsána *elektrolytická dioda* a některé výsledky získané měřeními na tomto systému.

Studium složité oscilační reakce metodami bifurkační analýzy

Autor: Petr Špás, 5. ročník
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: doc. Ing. Igor Schreiber, CSc., Ing. Lenka Schreiberová, CSc.

Byla provedena experimentální studie bifurkačního chování reakce peroxid vodíku – thiosíran - Cu^{2+} v míchaném průtočném reaktoru. Z naměřených dat byly sestaveny bifurkační diagramy pro různé dvojice kontrolních parametrů (vstupní koncentrace, reciproká doba prodlení) a použita metoda klasifikace oscilačních reakcí k bližšímu popisu této reakce. Příslušnost určité reakce k nějaké kategorii lze určit experimentálně sledováním bifurkací, tj. přechodů dynamiky systému z jednoho typu režimu na jiný. Tato metoda spočívá v konstrukci bifurkačního diagramu - zobrazení oblasti existence násobných ustálených stavů a oscilací v rovině dvou vybraných parametrů. Vhodnými parametry pro klasifikaci oscilačních reakcí jsou vstupní koncentrace reaktantů a meziproductů a reciproká doba prodlení. Oblast násobných stavů v bifurkačním diagramu má buď diagonální nebo antidiagonální sklon. Na tuto oblast pak navazuje oblast oscilací se stejným sklonem. Tato vlastnost umožňuje určit kategorii, do níž daná oscilační reakce náleží.

Koncepční návrh membránové elektrolýzy solanky

Autor: Tomáš Starý
Ústav: Systémové a procesní inženýrství
Vedoucí: Doc. Ing. Václav Václavek, CSc.
Konzultanti: Ing. Alexandra Novotná, CSc.
Doc. RNDr. Tomáš Vaněk, CSc.

Světová roční produkce chlóru je cca 38 mil. tun. Z 95% se chlór vyrábí elektrolýzou solanky a louh sodný je přitom koprodukt. V Evropě je to z 55% amalgamová technologie. Vývoj jednoznačně směřuje k útlumu amalgamových technologií. Důvodem jsou ekologické limity. U amalgamových procesů dochází k emisím Hg do vzduchu a vody v rozsahu 0,2 – 3g Hg/t chlóru. Membránový proces je dnes nejvíce slibná a rychle se rozvíjející technologie, která během času bezpochyby nahradí další techniky. Celý proces sestává z těchto částí – příprava a čištění solanky, vlastní elektrolýzy, dechlorace a desulfurizace anolytu a zahuštění roztoku hydroxidu sodného. Cílem práce je pomocí bilančních programů spočítat bilanci systému pro produkci 95 tun chlóru za den, na základě dodaných vstupních údajů některých proudů a ze znalosti předběžné topologie procesu. Dále určit potřebná množství vstupních surovin a pomocných látek v závislosti na znečištění surového chloridu sodného. Posledním cílem práce je navržení základní dimenze vybraných zařízení. Vlastní elektrolyzéry nejsou předmětem řešení úlohy. Tato úloha vznikla na základě požadavků z průmyslu a její výsledky budou součástí příslušného projektu.

Sorpce v binárních a ternárních systémech zahrnujících polymery a jejich popis stavovou rovnicí PC-SAFT

Autor: Petra Uchytlová, 5. ročník
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Juraj Kosek

Znalost rozpustnosti a transportních vlastností látek v polymerech umožňuje rozlišení mezi transportními, kinetickými a termodynamickými vlivy na katalytickou polymerizaci olefinů. Naměřená sorpční data pro binární systémy ethylen/PE (polyethylen), 1-hexen/PE a ternární systém ethylen/1-hexen/PE jsou porovnávána s predikcemi stavové rovnice PC-SAFT (Perturbed Chain – Statistical Associating Fluid Theory). Stavová rovnice SAFT zahrnuje popis velikosti a tvaru molekul, energii nevazebných interakcí a odpudivé a přitažlivé síly mezi molekulami. Sorpční data za průmyslově relevantních podmínek byla naměřena gravimetricky s využitím vah s magnetickým závěsem vzorku a byla korigována na vliv bobtnání polymeru. Práce se také zabývá dynamikou odplynění částic polymeru v systémech penetrant/PE a formulací realistického modelu tohoto odplyňování.

Porovnání chování kontrolních a synchronizovaných buněk ***Dictyostelium discoideum***

Autor: Petra Vaňková, 5. ročník
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Ing. Hana Ševčíková, CSc.

V biologických systémech se při přenosu informací či ve vývojových procesech uplatňují reakčně-difúzní procesy. V populaci hladovějících buněk *Dictyostelium discoideum* se reakčně-difúzními mechanismy šíří koncentrační vlny cAMP, které: a) přenáší mezi buňkami informaci o nepříznivých životních podmínkách (hladu) a b) vyvolávají chemotaktický pohyb buněk ke zdroji vln. Vlny vznikají náhodně a vzájemně interagují, což je pro studium jejich šíření nevyhovující. Byla proto navržena metoda synchronizace buněk, kdy hladové buňky jsou protřepávány po určitou dobu v pufru a periodicky se k nim přikapává roztok cAMP. Takto připravené buňky pak citlivě reagují na přídatky cAMP orientovaným pohybem a proto předpokládáme, že budou vhodným médiem pro řízenou iniciaci cAMP vln a jejich studium. Nejprve je nutné zjistit, zda a nakolik je šíření vln a vývoj synchronizovaných buněk odlišný či stejný jako šíření vln a vývoj buněk přirozených. Studiu této dílčí problematiky je věnovaná předložená práce.

Studium charakteru toku v miniaturním reaktoru **pro enzymové reakce**

Autor: Josef Vodička, 5. ročník
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Doc. Ing. Pavel Hasal, CSc.

Pro studium charakteru toku v miniaturních průtočných zařízeních (o objemu řádově ve stovkách mm³) lze v principu využít metody a techniky užívané při studiu systémů běžných makroskopických velikostí, tj. například zjišťování rozdělení dob prodlení pomocí metody vzruchu a odezvy. Miniaturní rozměry zařízení však způsobují specifické problémy spojené se způsobem dávkování stopovací látky do systému a především se způsobem její detekce na výstupu ze zařízení, kdy je nutno konstruovat a užívat čidla miniaturních rozměrů. V předkládaném příspěvku jsou shrnuty poznatky a zkušenosti se zjišťováním rozdělení dob prodlení v miniaturním reaktoru pro enzymové reakce (objem 785 mm³) s použitím vodivostní metody (stopovací látka: KCl) a optické metody (stopovací látka: eosin Y) a s kombinací obou metod.

Sekce: **Matematické modelování a informatika**

Zahájení: 9:00 v místnosti č. B06

Přihlášeno: 9 prací

Komise: Prof. RNDr. Alois Klíč, CSc. – předseda
Doc. Ing. Jaroslav Poživil, CSc. – místopředseda
Ing. Alexandra Novotná, CSc.
Dr. Ing. Juraj Kosek
Ing. Michal Příbyl, PhD

**Popis šíření křivočarých koncentračních vln
pomocí eikonální rovnice**

Autor: Lubor Buřič, 5. ročník
Ústav: matematiky
Školitel: Doc. RNDr. Alois Klíč, CSc.
Prof. RNDr. Milan Kubíček, CSc.

Šíření koncentračních vln je často pozorovaným jevem v reakčně-difuzních systémech jako je např. Bělousova-Žabotinského reakce, katalytické spalování nebo přenos nervových vzruchů.

Práce se zabývá speciálně křivočarými vlnami v rovině, pro jejichž popis je představena geometrická teorie odvozující eikonální rovnici.

Byly provedeny numerické experimenty s jednoduchou parciální diferenciální rovnicí (PDR), které srovnávají výsledky výpočtu šíření vln podle eikonální rovnice a výsledky dosažené přímou integrací PDR. Profily vlnových řešení byly získány s použitím kontinuace heteroklinických a homoklinických trajektorií v numerickém softwaru CONT.

Wavelet transformace ve zpracování biomedicínských obrazů

Autor: Andrea Gavlasová, 5. ročník

Ústav: ÚPŘT

Školitel: Prof. Ing. Aleš Procházka, CSc.

Problematika číslicového zpracování obrazů tvoří v současné době významnou mezioborovou disciplínu. Její aplikace přitom zahrnují mimo jiné rekonstrukci obrazů při restaurování památek a dále zvýrazňování, segmentaci a klasifikaci biomedicínských signálů a obrazů. Cílem vlastní práce je rozbor možností aplikace diskrétní Wavelet transformace při analýze obrazů a aplikace vybraných metod při zpracování biomedicínských dat. V úvodní části je práce zaměřena na problematiku kódování obrazů a jejich vizualizaci. Další část práce je pak věnována dekompozici signálů a obrazů pomocí Wavelet transformace a jejich následné rekonstrukci z hlediska ověření vlastností Wavelet transformace a pro potřeby potlačování rušivých složek obrazů. Součástí této části je i algoritmizace metod pro zpracování dat. Z hlediska prezentace obrazů je následující část práce věnována problematice tvorby videosekvencí, které mohou být využity např. pro vizualizaci po sobě jdoucích vrstev mozkové tkáně. V závěru práce jsou naznačeny i další aplikační možnosti zpracování obrazů a signálů s ohledem na tuto velmi širokou, obsáhlou a neustále se rozvíjející disciplínu, jejíž rozvoj vyžaduje neustálé studium a rozšiřování nových poznatků.

Fraktální analýza SPECT obrazu mozku

Autor: Rudolf Helm, 5. ročník

Ústav: Ústav počítačové a řídicí techniky

Školitel: Ing. Jaromír Kukal, Ph. D.

Fraktální (Hausdorfova) dimenze je jedním z parametrů hranice objektů umožňující jejich porovnávání. Aplikace na SPECT (Single photon emission computed tomography) obrazy mozku, umožňuje zkoumat vztah mezi zdravotním stavem mozku pacienta a fraktální dimenzí. K určení odhadu fraktální dimenze je možné použít více metod (boxcounting, sandbox, spektrální analýza). V práci je porovnáván dvoupřímý a čtyřparametrový model. Hodnota odhadu fraktální dimenze závisí na dalších faktorech (poloha řezu, prahování). Tato práce se zabývá nalezením optimální kombinace těchto parametrů pro získání reprodukovatelných odhadů.

Vliv visko-elastických vlastností na morfogenezi porézních částic polyolefinů

Autor: Blanka Horáčková, 5. ročník
Ústav: chemického inženýrství
Školitel: Dr. Ing. Juraj Kosek

Tato práce se zabývá matematickým modelováním procesu utváření meso-skopické struktury materiálů, kde je proces utváření řízen silovými interakcemi mezi mikro-elementy materiálu (např. koloidní agregace siliky, růst porézních částic polyolefinů, vznik pěny apod.). Mezi mikro-elementy jsou uvažovány jak binární tak i ternární silové interakce elastického a visko-elastického typu. Vlastnosti visko-elastických interakcí jsou ilustrovány na jednoduchých modelech Maxwellova typu. Parametry modelů zahrnujících větší počet mikro-elementů jsou kalibrovány na základě experimentálních měření. Vliv teplotní závislosti visko-elastických parametrů je studován na případě morfogeneze porézní částice polymeru v katalytické polymerizaci olefinů.

Výpočet distribuce reagující iontové složky v mikrokanálu při známém rozložení elektrického potenciálu

Autor: Veronika Knápková, 4. ročník
Ústav: Chemické inženýrství
Školitel: Ing. Michal Přibyl, Ph.D.

Prostorové rozložení koncentrace reagující iontové složky ve stacionárním stavu je možno nalézt při znalosti distribuce elektrického potenciálu, která je dána řešením Poissonovy rovnice. V reálných systémech elektrolytů nastávají tyto limitní případy: 1) lineární rozložení potenciálu v celém systému (při velkém přebytku inertních iontových složek elektrolytu), 2) sigmoidální profil potenciálu (u systémů s úzkou oblastí o nízké hodnotě elektrolytické vodivosti). V prezentované práci budou uvedena numerická a analytická (resp. přibližná analytická) řešení pro oba limitní případy. Dále budou uvedena numerická řešení pro libovolně zvolená rozložení potenciálu. Uvedená práce bude výchozím bodem pro opačně definovaný problém, kdy bude nutno vypočítat rozložení elektrického potenciálu při znalosti distribuce některé iontové složky. Výsledky řešení takto definovaného problému bude možno ověřovat experimentálně například pomocí fluoreskujících iontových sloučenin.

Introduction to Mathematical Modelling of Biological Systems

Model of Predator and Prey

Author: David Kryl, 5th school year
Department: Department of applied mathematics
Consultant: Doc. RNDr. Alois Klíč, CSc.
RNDr. Pavel Pokorný

Mathematical models of populations of predator and prey describing the simplified biological systems are suitable for demonstrating the basic characteristics of population models in biology. However, more complicated forms of such models fit real biological systems satisfyingly.

The project deals with models depicting a locality with limited amount of vegetation inhabited by one predator and one prey species and a locality with two different predator and prey species. The basic principles of deriving a model are introduced and fundamentals of examination and classification of its characteristics are discussed.

CFD simulace toku kapaliny v míchané nádobě

Autor: Alena Kukuková, 5. ročník
Ústav: chemické inženýrství
Školitel: Dr. Ing. Milan Jahoda

Pro simulace dějů v mechanicky míchaných aparátech se v současné době užívá Computational Fluid Dynamics (CFD). Je to věda, která kombinuje matematicko-fyzikální zákony s výpočetní technikou. V této práci byl k simulacím použit modul MixSim ve verzích 1.7 a 2.0 a Fluent 6.1. Při výpočtech byla testována strukturovaná a nestrukturovaná síť, různý počet buněk v síti a okolí míchadla. Turbulentní proudění kapaliny bylo modelováno standardním $k-\epsilon$ modelem turbulence. Pro simulaci otáčení míchadla byla použita metoda mnohonásobné rotující soustavy (Multiple Reference Frames) a metoda rotující sítě (Sliding Mesh). Výsledky simulací byly porovnány s experimentálními daty (profily bezrozměrné axiální rychlosti pod míchadlem). Experimentální data byla převzata z literatury a byla měřena ve válcové nádobě o vnitřním průměru 0,3 m se čtyřmi radiálními narážkami a centricky umístěným standardním lopatkovým míchadlem se šesti rovnými šikmo skloněnými lopatkami (45°) o průměru jedné třetiny průměru nádoby.

Bilanční výpočty pro procesní design

Autor: Michal Svátek

Ústav chemického inženýrství VŠCHT Praha

Školitel: Doc. Vladimír Václavek, CSc

V současné době je zvýšený zájem o bilanční výpočty složitých chemicko-technologických procesů jako doplněk komerčních simulačních výpočtů. Cílem této práce SVOČ je příprava vstupních dat pro bilančně simulační výpočet variant výroby kyseliny monochloroctové (MCA) včetně postupů pro zpracování, použití nebo likvidace vedlejšího produktu kyseliny dichloroctové (DCA). Při zpracování se budeme snažit navázat na předchozí zkušenosti s výpočty materiálové a entalpické bilance složitých chemicko-technologických procesů a upravit metodiku tak, aby ji bylo možno použít pro kapacitní přepočet výroby. Jako programovací jazyk bude použit VBA v kombinaci s MS Excel, které jako součást MS Office snižují náklady na použitý software. Tato úloha vznikla na základě požadavků z průmyslu a její výsledky budou použity v příslušném projektu.

Modelování dynamického chování katalytického reaktoru

Autor: Martin Záhrubský, 5. ročník

Ústavy: chemického inženýrství a matematiky

Školitel: Prof. RNDr. Milan Kubíček, CSc.,
Ing. Vladislav Nevoral, PhD.

Předaný matematický model popisuje oxidaci CO, která probíhá v katalytickém spalovacím reaktoru ve formě monolitu, konkrétně třícestném katalyzátoru (TWC), jenž se hojně vyskytuje v tzv. automobilových katalyzátorech. Na modelu jsem prováděl parametrické studie a k nim příslušné dynamické simulace. K realizaci dynamických simulací a parametrických studií jsem použil volně dostupný fortranský programový balík CONT založený na algoritmu DERPAP. Veškeré výpočty jsem realizoval pro konstantní koncentrace všech složek obsažených v plynu na vstupu do reaktoru. Sledovanou stavovou veličinou mi byla koncentrace CO v plynu na výstupu z reaktoru a jako kontinuální parametr jsem volil koncentraci kyslíku v plynu na vstupu do reaktoru.

Sekce: **Ekonomika a řízení chemických a potravinářských podniků**

Zahájení: 9:00 v posluchárně C11

Přihlášeno: 7 prací

Komise:

Doc.Ing. Sláva Balatka, CSc. (předseda)
Doc.Ing. Stanislava Grosová, CSc.
Mgr.Ing. Marek Botek, Ph.D.
Ing. Dana Strachotová

Mapující výzkum využívání úklidových prostředků

Autor: Petra Hloušková, 5. ročník
Ústav ekonomiky a řízení chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Doc.Ing. Stanislava Grosová, CSc.

Práce analyzuje které typy úklidových prostředků (hadry a „švédské utěrky“, mopy) jsou nejpoužívanější u úklidových firem a které v domácnostech. Další součástí je porovnání cen u jednotlivých výrobců úklidových prostředků a dostupnost výše jmenovaných typů zboží na trhu. Data jsou získávána prostřednictvím dotazníků zaslaných elektronicky vybraným firmám, osobním dotazováním respondentů reprezentujících domácnosti a osobním šetřením v prodejnách s drogistickým zbožím.

Analýza výroby infúzních roztoků

Autor: Miroslav Nevrkla, 5.ročník
Ústav: ekonomiky a řízení chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Prof. Ing. Ivan Gros, CSc.

Cílem práce je zjistit a rozdělit sortiment firmy do skupin a kvantifikovat výkonové profily jednotlivých linek.

Práce je rozdělena na čtyři části:

První část je věnována základním charakteristikám podniku Infusia,a.s., který je významným farmaceutickým výrobcem i distributorem infúzních roztoků.

Ve druhé části práce se zabývám popisem technologického postupu výroby infuzních roztoků.

V další části práce jsem rozdělil výrobky do skupin a přiřadil jim příslušné časy výrobních operací.

Poslední část zahrnuje popis a kvantifikaci výkonového profilu.

Výsledkem práce jsou grafy a harmonogramy, které budou sloužit jako podklad pro budoucí, dynamický model výroby v simulačním programu Witness.

Specifika marketingu v poradenské firmě

Autor: ing. Jana Nováková, 4. ročník
Ústav: ekonomiky a řízení chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Mgr.Ing. Marek Boteck, PhD.

Předložená práce se zabývá popisem a analýzou specifik, které se vyskytují v práci marketéra v poradenské firmě. Analýza postihuje firmu zabývající se poradenstvím v oblasti potravinářského průmyslu a uváděná specifika porovnává s prací marketéra ve výrobních podnicích, zejména v oblasti průmyslu potravinářského a chemického.

Snímkování pracovního času

Autor: Radek Pernica, 4.ročník
Ústav“ ekonomiky a řízení chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Prof.Ing. Ivan Gros, CSc.

Práce se zabývá analýzou pracovního času dělníků na jednotlivých linkách a ověřením současných výkonových norem. Protože se jedná zejména o chemické reaktory, zaznamenával jsem pouze čtyři základní druhy pozorovaných činností. Jedná se o vlastní postup, založený na časovém snímkování předem definovaných operací.

Optimalizace výroby polyetylenu a polypropylenu

Autor: Rudolf Petr
Ústav“ ekonomiky a řízení chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Prof.Ing. Ivan Gros, CSc.

Záměrem předložené práce je seznámit s projektem, který v současnosti probíhá ve společnosti Chemopetrol, a.s. Jeho základem je spuštění a využívání počítačového modelu, pomocí kterého budou propojeny a řízeny jednotlivé oblasti činnosti podniky od zásobování přes řízení výroby až po odbyt.

Ve své práci jsem se zaměřil na modul výroby a zejména na optimalizaci dob přejezdů mezi různými reaktorovými typy.

Určení celkových nákladů a kalkulace nákladů cukrářské výroby – Catering ČSA

Autor: Adéla Sedláčková, 5.ročník
Ústav“ ekonomiky a řízení chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Doc.Ing. Stanislava Grosová, CSc.

Předložená práce vychází z odborné praxe, kterou jsem absolvovala v Cateringu ČSA.

V rámci celé praxe jsem se zaměřovala na celkovou problematiku tohoto útvaru a stěžejní náplní bylo určení aktuální situace cukrářské výroby v Cateringu ČSA.

Hlavním úkolem bylo určení celkových nákladů a kalkulaci nákladů cukrářské výroby s cílem posouzení, zda cukrářskou výrobu ponechat součástí Cateringu ČSA či využít externích firem (využití outsourcingu) pro dodávku cukrářských výrobků.

Výsledkem zpracované studie je závěr, že by bylo vhodné ponechat cukrářskou výrobu součástí Cateringu ČSA.

Srovnání GAAP a českého účetního systému

Autor: Martina Vontrobová, 5.ročník
Ústav: ekonomiky a řízení chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Ing. Milan R. Paták CSc.

GAAP (generally accepted accounting principles) je mezinárodní účetní systém založený na všeobecně uznávaných účetních zásadách.

Od roku 1995 narůstá v České republice objem zahraničních investic.

Dochází tedy k tomu, že firmy musí vykazovat výsledky svého hospodaření nejen prostřednictvím českého účetnictví, které je povinné ze zákona, ale také v účetním systému, který používá zahraniční investor.

Cílem práce je představit účetní systém GAAP a poukázat na základní rozdíly mezi GAAP a českým účetním systémem v oblasti účtování majetku.

Analýza a řízení nákladů v keramické výrobě

Autor: Jan Vrzák, 5.ročník
Ústav: ekonomiky a řízení chemického a potravinářského průmyslu
Školitel: Doc.Ing. Sláva Balatka,CSc.

Tématem práce je analýza a řízení nákladů v podniku RAKO III. Obsahuje též základní informace o tomto podniku včetně stručného popisu technologického postupu výroby obkladaček jednožárovým způsobem. Vlastní téma práce je zpracováno ve dvou rovinách. Teoretická část se zabývá klasifikací nákladů, jejich evidencí, a tvorbou rozpočtů. V praktické části je uveden přehled nákladových účtů tak jak se používá v podniku. Hlavním cílem práce bylo analyzovat vybrané nákladové položky pomocí intervalové analýzy jednicových nákladů pro jednotlivé měsíce roku 2002. Tato metoda je poměrně rychlým nástrojem pro kontrolu jednicových nákladů a umožňuje posoudit v jakém intervalu by se měly jednicové náklady pohybovat, aby celkové náklady odpovídaly plánu a relaci na skutečně vyrobené množství.