

Studentská vědecká konference 2006

Sekce: INFORMATIKA A CHEMIE

24.11.2006

Zahájení v 9:00 hodin, budova B, místnost BS2

Komise:

Doc. RNDr. Tomáš Vaněk, CSc. - předseda

Anna Součková, PhDr.

Ing. Miloslav Nič, PhD.

Ing. Bedřich Košata, PhD.

Ing. Jiří Jirát, Ph.D. – organizační tajemník

Přihlášeno: 6 účastníků

Dibusz Kryštof

Filip Martin

Forstová Iva

Kohout Václav

Šmídová Lucie

Znamenáček Jiří

Sekce : Informatika a chemie

Law-Ref – Elektronická databáze mezinárodních smluvních dokumentů

Autor: Kryštof Dibusz
Ročník: 3.
Ústav: Laboratoř informatiky a chemie
Školitel: Miloslav Nič

Hlavním cílem práce bylo založit volně přístupnou databázi mezinárodních konvencí, smluv, protokolů a dalších typů mezinárodních smluvních dokumentů a umístit je do jedné elektronické databáze Law-Ref, a vytvořit tak systém, ve kterém by se uživatelé dobře orientovali a dokázali rychle získat potřebné informace. Smlouvy, resp. jejich jednotlivé kapitoly a články jsme propojili pomocí systému klíčových slov a křížových odkazů. Smluvní dokumenty jsou doplněny o výkladový slovník právních pojmů a definic. Většina smluv je doplněna o tzv. metadata, tedy přehled základních informací o dané smlouvě či protokolu. Law-Ref byl vytvořen pomocí technologií XML a programovacích jazyků XSLT a Python, které se jeví jako nejvhodnější pro tvorbu obdobných systémů. Systém je a bude i nadále zpracováván v anglickém jazyce, takže bude využitelný jak českou, tak zahraniční odbornou veřejností. Doposud byl výběr zpracovávaných dokumentů spíše nahodilý. V budoucnu se bude Law-Ref více zaměřovat na chemickou legislativu Evropské unie a především na implementaci projektu REACH do databáze.

Sekce : Informatika a chemie

Prostorová grafika organických molekul

Autor: Martin Filip
Ročník: 2.
Ústav: Laboratoř informatiky a chemie
Školitel: Bohdan Schneider (ÚOCHB AV ČR)

Cílem naší práce bylo ukázat poslední vývoj v počítačové technice, který nám napomáhá se získáváním informací o makromolekulárních organických látkách a umožňuje také jejich zobrazení ve formě prostorových obrazů.

Zabývali jsem se také historií a objevy, které byly od prvního objevení uspořádání atomů v prostoru uskutečněny.

Zároveň jsme prozkoumali možnosti programů, které jsou nabízeny pro zpracování databázových dat (PDB).

Vytvořili jsme také návod jak s molekulami pracovat, ve kterém programu je práce nejjednodušší a nejlevnější, a také jsme zjistili, kde se nachází úskalí a problémy.

Sekce : Informatika a chemie

Elektronické studijní opory pro výuku analytické chemie

Autor: Iva Forstová
Ročník: 3.
Ústav: Laboratoř informatiky a chemie
Školitel: Jiří Jirát

Cílem práce je vytvořit moderní interaktivní pomůcky pro výuku analytické chemie jak v elektronické, tak tištěné podobě, které jsou určeny především pro středoškolské studenty. Účelem těchto studijních opor je objasnit studentům analytickou chemii a pomoci jim při výuce tohoto předmětu. V současné době jsou zpracovány tři oblasti analytické chemie – důkazy kationtů a aniontů, laboratorní vybavení a přístroje a spektroskopické metody. U kationtů a aniontů jsou uvedena činidla, se kterými reagují, a průběh reakce popsány rovnicemi. Laboratorní vybavení a přístroje jsou zpracovány jako seznam, ve kterém je ke každé položce přiřazen jak český, tak anglický název a obrázek příslušného předmětu. Spektroskopické metody jsou popsány v krátkých článcích, které obsahují základní informace o spektroskopiích. Zpracování dat je založeno na XML-technologiích a transformačním jazyce XSLT, který převádí dokumenty XML na dokumenty jiného formátu, v tomto případě na HTML.

Sekce : Informatika a chemie

České pivovary

Autor: Kohout Václav

Ročník: 1.

Ústav: FCHI – Ústav počítačové a řídicí techniky

Školitel: Košata Bedřich

Česká republika již řadu let patří mezi tradiční producenty piva a svou spotřebou na hlavu se řadí na přední příčky na světě. Tento fakt se odráží i v množství pivovarů a jejich produktů na našem trhu. Proto jsem se rozhodl prostřednictvím prezentovaného projektu seskupit a setřídít informace o českých pivovarech a jejich produkci do přehledné formy internetového portálu.

Nejdůležitější součástí projektů byl sběr dat a jejich následné zpracování a organizace. Informace byly získány převážně z internetu a tištěných publikací, ale také z jiných zdrojů (např. návštěva Pivovarnického muzea v Plzni nebo exkurze v pivovaru Krušovice). Pro uložení získaných dat byl navržen vlastní formát založený na technologii XML a šitý na míru konkrétním potřebám projektu. Z dat uložených ve formátu XML byly výsledné HTML stránky generovány pomocí šablon XSL.

Vytvořený portál obsahuje přehled všech českých pivovarů s produkcí nad 9000 hl/rok. Pro každý pivovar jsou kromě přehledu vyráběných piv uvedeny také kontaktní a některé doplňkové informace. Piva jsou roztříděna nejen podle jejich výrobců, ale také podle stupňovitosti, druhu a dalších kritérií. Portál obsahuje také některé obecné informace o výrobě piva.

Portál je v současné době přechodně umístěn na adrese <http://web.vscht.cz/kohoutv/pivo/html/>.

Sekce : Informatika a chemie

Portál elektronických studijních opor VŠCHT Praha

Autor: Lucie Šmídová
Ročník: 3.
Ústav: Laboratoř informatiky a chemie
Školitel: Jiří Jirát

Portál elektronických studijních opor VŠCHT Praha (ESO) vznikl před rokem ve spolupráci zaměstnanců Vydavatelství VŠCHT Praha, pedagogů oboru Informatika a chemie a několika jejich studentů. Jeho hlavním cílem je zpřehlednit narůstající množství studijních materiálů, které jednotlivé ústavy a katedry celé školy vystavují na svých webových stránkách a které i informovaný student hledá mnohdy obtížně. V současné době poskytuje setříděné odkazy na téměř 400 dokumentů. Příspěvek zmíní okolnosti vzniku portálu, jeho strukturu a možnosti vyhledávání podle různých hledisek. Dále pak technologické řešení, které využívá XML, ale zejména se bude zabývat obsahovou náplní a problematikou katalogizace elektronických dokumentů vznikajících na půdě VŠCHT, což je oblast, za kterou je autorka v tomto projektu zodpovědná.

Sekce : Informatika a chemie

Elektronická encyklopedie biochemie

Autor: Jiří Znamenáček
Ročník: 3.
Ústav: Laboratoř informatiky a chemie
Školitel: Bedřich Košata

Cílem práce je připravit novou verzi knihy „Biochemické pojmy – výkladový slovník“, a to jak její elektronickou, tak tištěnou podobu.

Prvním ze dvou hlavních úkolů je doplnit slovník o opravy a nová data, jakož i dodat nové uživatelské možnosti stávajícímu aplikačnímu rozhraní. Podstatnou část práce představuje provázání enzymologických odkazů obsažených ve slovníku se světovými databázemi enzymů. Druhým úkolem je prozkoumat možnosti přípravy sazby tištěného vydání z těchto nových, ve formátu XML uložených dat. Nalezení rozumné cesty jak tohoto dosáhnout umožní, aby budoucí produkce Vydavatelství VŠCHT Praha nebyla stále vázána na velice pracné převádění podkladů mezi nejrůznějšími formáty, z nichž zatím žádný není vhodný pro publikování v tištěné i elektronické formě zároveň.