Databáze v chemické a forenzní analýze

Tereza Uhlíková

March 18, 2025

Kdo jsem

doc. Mgr. Tereza Uhlíková, Ph.D.

Ústav analytické chemie

skupina teoretické spektroskopie

místnost A277

https://web.vscht.cz/~uhlikovt/

tereza.uhlikova@vscht.cz

O čem to bude?

		Téma přednášky	Téma cvičení
1	11.3.	Opakování a seznamování	Hledání odpovědí pomocí AI
2	18.3.	Princip AI	AI databázové nástroje
3	25.3.	Chemické databáze	Analýza spekter pomocí databází
4	1.4.	Forenzní databáze	zkoušková témata
5	8.4.	společná databáze volně prodejných psych. látek ERA	
6	15.4.	společná databáze volně prodejných psych. látek VY a AI	
7	22.4.		
8	29.4.		
9	6.5.	ČTVRTEČNÍ ROZVRH = NENÍ PŘEDNÁŠKA	
10	...	Zkouška	

Co je to umělá inteligence

Co je to umělá inteligence

definice:
Marvin Minsky (1927-2016) “věda o výrobě strojů, které by dělaly věci, které by vyžadovaly inteligenci, kdyby ji dělali lidé”
schopnost strojů napodobovat lidské schopnosti, jako je uvažování, učení se, plánování nebo kreativita

Co je to umělá inteligence

definice:
Marvin Minsky (1927-2016) “věda o výrobě strojů, které by dělaly věci, které by vyžadovaly inteligenci, kdyby ji dělali lidé”
schopnost strojů napodobovat lidské schopnosti, jako je uvažování, učení se, plánování nebo kreativita
Umělá inteligence (AI) je technologie, která umožňuje počítačům a strojům simulovat lidské učení, porozumění, řešení problémů, rozhodování, kreativitu a autonomii.

Co je to umělá inteligence

definice:
Marvin Minsky (1927-2016) “věda o výrobě strojů, které by dělaly věci, které by vyžadovaly inteligenci, kdyby ji dělali lidé”
schopnost strojů napodobovat lidské schopnosti, jako je uvažování, učení se, plánování nebo kreativita
Umělá inteligence (AI) je technologie, která umožňuje počítačům a strojům simulovat lidské učení, porozumění, řešení problémů, rozhodování, kreativitu a autonomii.

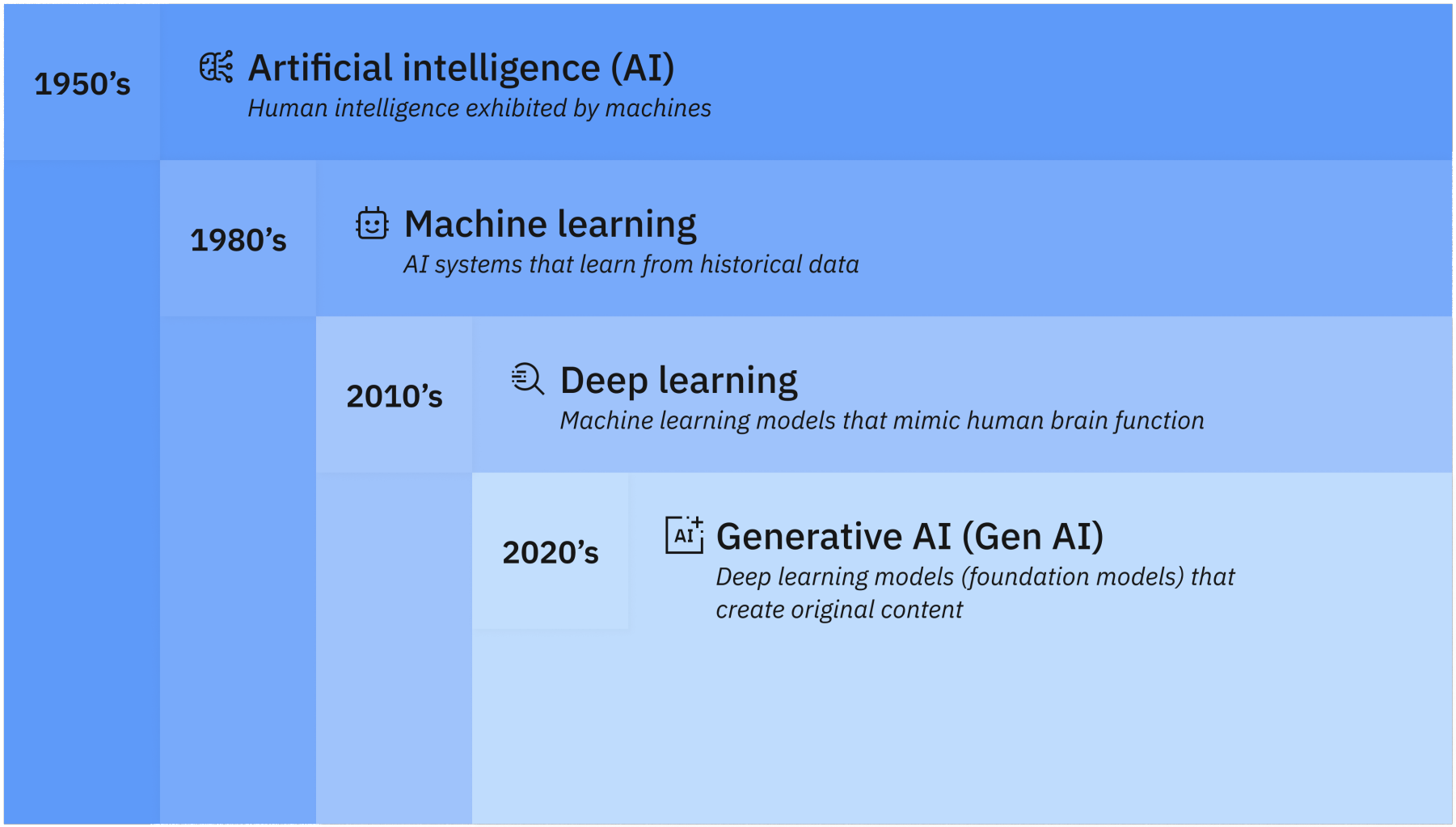
Co by měla AI splňovat?

Co je to umělá inteligence

definice:
Marvin Minsky (1927-2016) "věda o výrobě strojů, které by dělaly věci, které by vyžadovaly inteligenci, kdyby ji dělali lidé"
schopnost strojů napodobovat lidské schopnosti, jako je uvažování, učení se, plánování nebo kreativita
Umělá inteligence (AI) je technologie, která umožňuje počítačům a strojům simulovat lidské učení, porozumění, řešení problémů, rozhodování, kreativitu a autonomii.

Co by měla AI splňovat?
Uvažování a řešení problémů; Reprezentace znalostí
Plánování a rozhodování; Učení
Zpracování přirozeného jazyka
Vnímání; Sociální inteligence; Obecná inteligence

Hloubkové učení, Strojové učení, Umělá inteligence



Jak to začalo?

1642 Blaise Pascal kalkulačka

Jak to začalo?

1642 Blaise Pascal kalkulačka

1837 Charles Babbage programovatelný mechanický stroj (na páru)

Jak to začalo?

1642 Blaise Pascal kalkulačka

1837 Charles Babbage programovatelný mechanický stroj (na páru)

1943 Warren McCulloch a Walter Pitts podobnost mezi lisdkým mozkem a početním strojem

Jak to začalo?

1642 Blaise Pascal kalkulačka

1837 Charles Babbage programovatelný mechanický stroj (na páru)

1943 Warren McCulloch a Walter Pitts podobnost mezi lisdkým mozkem a početním strojem

“What we want is a machine that can learn from experience.“
Alan Turing (20th February 1947, London)

1950 Alan Turing a Turingův test

Jak to začalo?

- 1642 Blaise Pascal kalkulačka
- 1837 Charles Babbage programovatelný mechanický stroj (na páru)
- 1943 Warren McCulloch a Walter Pitts podobnost mezi lisdkým mozkem a početním strojem

"What we want is a machine that can learn from experience."
Alan Turing (20th February 1947, London)

- 1950 Alan Turing a Turingův test
- 1952 Arthur Samuel aplikace schopná strojového učení pro hraní dámy
- 1957 Frank Rosenblatt "The Perceptron: A Perceiving and Recognizing Automaton"

Jak to začalo?

1642 Blaise Pascal kalkulačka

1837 Charles Babbage programovatelný mechanický stroj (na páru)

1943 Warren McCulloch a Walter Pitts podobnost mezi lisdkým mozkem a početním strojem

"What we want is a machine that can learn from experience."
Alan Turing (20th February 1947, London)

1950 Alan Turing a Turingův test

1952 Arthur Samuel aplikace schopná strojového učení pro hraní dámy

1957 Frank Rosenblatt "The Perceptron: A Perceiving and Recognizing Automaton"

"Man is still the most extraordinary computer of all." J.F. Kennedy 1960

Jak to začalo?

1642 Blaise Pascal kalkulačka

1837 Charles Babbage programovatelný mechanický stroj (na páru)

1943 Warren McCulloch a Walter Pitts podobnost mezi lisdkým mozkem a početním strojem

"What we want is a machine that can learn from experience."
Alan Turing (20th February 1947, London)

1950 Alan Turing a Turingův test

1952 Arthur Samuel aplikace schopná strojového učení pro hraní dámy

1957 Frank Rosenblatt "The Perceptron: A Perceiving and Recognizing Automaton"

"Man is still the most extraordinary computer of all." J.F. Kennedy 1960

1966 ELIZA první chatbot

Jak to začalo?

1642 Blaise Pascal kalkulačka

1837 Charles Babbage programovatelný mechanický stroj (na páru)

1943 Warren McCulloch a Walter Pitts podobnost mezi lisdkým mozkem a početním strojem

"What we want is a machine that can learn from experience."
Alan Turing (20th February 1947, London)

1950 Alan Turing a Turingův test

1952 Arthur Samuel aplikace schopná strojového učení pro hraní dámy

1957 Frank Rosenblatt "The Perceptron: A Perceiving and Recognizing Automaton"

"Man is still the most extraordinary computer of all." J.F. Kennedy 1960

1966 ELIZA první chatbot

1967 Frank Rosenblatt neuronová síť postavenou na perceptronech

Jak to začalo?

1642 Blaise Pascal kalkulačka

1837 Charles Babbage programovatelný mechanický stroj (na páru)

1943 Warren McCulloch a Walter Pitts podobnost mezi lisdkým mozkem a početním strojem

"What we want is a machine that can learn from experience."
Alan Turing (20th February 1947, London)

1950 Alan Turing a Turingův test

1952 Arthur Samuel aplikace schopná strojového učení pro hraní dámy

1957 Frank Rosenblatt "The Perceptron: A Perceiving and Recognizing Automaton"

"Man is still the most extraordinary computer of all." J.F. Kennedy 1960

1966 ELIZA první chatbot

1967 Frank Rosenblatt neuronová síť postavenou na perceptronech

1984 jsou obavy a nejsou peníze ... Terminátor

Pokračování po zimě

1997 superpočítač Deep Blue od IBM porazil Garryho Kasparova v šachu

Pokračování po zimě

1997 superpočítač Deep Blue od IBM porazil Garryho Kasparova v šachu

2002 automatické vysavače, co se vyhýbají překážkám

Pokračování po zimě

1997 superpočítač Deep Blue od IBM porazil Garryho Kasparova v šachu

2002 automatické vysavače, co se vyhýbají překážkám

2009 samořídící auto od Google

Pokračování po zimě

1997 superpočítač Deep Blue od IBM porazil Garryho Kasparova v šachu

2002 automatické vysavače, co se vyhýbají překážkám

2009 samořídící auto od Google

2011 Siri osobní asistentka

Pokračování po zimě

1997 superpočítač Deep Blue od IBM porazil Garryho Kasparova v šachu

2002 automatické vysavače, co se vyhýbají překážkám

2009 samořídící auto od Google

2011 Siri osobní asistentka

2014 Eugene prošel turingovým testem

Pokračování po zimě

1997 superpočítač Deep Blue od IBM porazil Garryho Kasparova v šachu

2002 automatické vysavače, co se vyhýbají překážkám

2009 samořídící auto od Google

2011 Siri osobní asistentka

2014 Eugene prošel turingovým testem

2016 AlphaGo porazil světového šampiona Lee Se-dola ve hře Go

Pokračování po zimě

1997 superpočítač Deep Blue od IBM porazil Garryho Kasparova v šachu

2002 automatické vysavače, co se vyhýbají překážkám

2009 samořídící auto od Google

2011 Siri osobní asistentka

2014 Eugene prošel turingovým testem

2016 AlphaGo porazil světového šampiona Lee Se-dola ve hře Go

2022 Dall-e AI pro tvorbu obrazků

Pokračování po zimě

1997 superpočítač Deep Blue od IBM porazil Garryho Kasparova v šachu

2002 automatické vysavače, co se vyhýbají překážkám

2009 samořídící auto od Google

2011 Siri osobní asistentka

2014 Eugene prošel turingovým testem

2016 AlphaGo porazil světového šampiona Lee Se-dola ve hře Go

2022 Dall-e AI pro tvorbu obrazků

2022 OpenAI konverzace

Pokračování po zimě

1997 superpočítač Deep Blue od IBM porazil Garryho Kasparova v šachu

2002 automatické vysavače, co se vyhýbají překážkám

2009 samořídící auto od Google

2011 Siri osobní asistentka

2014 Eugene prošel turingovým testem

2016 AlphaGo porazil světového šampiona Lee Se-dola ve hře Go

2022 Dall-e AI pro tvorbu obrazků

2022 OpenAI konverzace

2023 Boston dynamics
`https://www.youtube.com/watch?v=-e1_QhJ1EhQhttps://www.youtube.com/watch?v=v8UaiRgqvlc`

Pokračování po zimě

1997 superpočítač Deep Blue od IBM porazil Garryho Kasparova v šachu

2002 automatické vysavače, co se vyhýbají překážkám

2009 samořídící auto od Google

2011 Siri osobní asistentka

2014 Eugene prošel turingovým testem

2016 AlphaGo porazil světového šampiona Lee Se-dola ve hře Go

2022 Dall-e AI pro tvorbu obrazků

2022 OpenAI konverzace

2023 Boston dynamics
`https://www.youtube.com/watch?v=-e1_QhJ1EhQhttps://www.youtube.com/watch?v=v8UaiRgqvlc`

2025 Jaké příklady najdete vy?

Dělení AI

Úzká umělá inteligence (Narrow Artificial Intelligence (NAI)) či „slabá AI“ odkazuje na systémy zaměřené na řešení jediné úzce vymezené úlohy (Siri, boti, Reaktivní stroje - hráči šachu, Omezená paměť AI - samoředitelná auta)

Obecná umělá inteligence (Artificial General Intelligence (AGI)) či „silná AI“ odkazuje na systémy řešící úlohy stejně dobře nebo dokonce lépe než člověk a řeší je bez nutnosti předchozího učení jednotlivých úzce vymezených úloh.

Dělení AI

Úzká umělá inteligence (Narrow Artificial Intelligence (NAI)) či „slabá AI“ odkazuje na systémy zaměřené na řešení jediné úzce vymezené úlohy (Siri, boti, Reaktivní stroje - hráči šachu, Omezená paměť AI - samoředitelná auta)

Obecná umělá inteligence (Artificial General Intelligence (AGI)) či „silná AI“ odkazuje na systémy řešící úlohy stejně dobře nebo dokonce lépe než člověk a řeší je bez nutnosti předchozího učení jednotlivých úzce vymezených úloh.

exitují i jiná dělení (Umělá superinteligence (ASI), Teorie mysli AI, Sebeuvědomělá umělá inteligence)

`https://www.nature.com/articles/d41586-023-04007-0`
AGI spojující „lidské“ flexibilní myšlení a uvažování se super rychlým zpracováním dat by se mohla stát realitou podmíněnou úspěšným vývojem kvantových počítačů

Úzká AI

Symbolická AI (Pravidlová AI) x Strojové učení (Machine Learning, ML)

Symbolická AI (Pravidlová AI)

Založená na pravidlech a logice - používá **explicitní pravidla a logiku** k reprezentaci znalostí a rozhodování.

Charakteristiky:

- Používá předdefinovaná pravidla (např. „Pokud X, pak Y“).
- Informace je reprezentována jako symboly a vztahy mezi nimi.
- Logika a inference (odvozování) se používají k řešení úloh.
- Výsledky jsou vysvětlitelné, protože AI se řídí jasnými pravidly.

Příklady použití:

- Expert Systems (např. lékařské diagnostické systémy).
- Pravidlové chatboty (např. starší verze hlasových asistentů).
- Sémantické sítě (např. ontologie pro zpracování přirozeného jazyka).

Strojové učení (Machine Learning, ML)

Učení na základě dat - **nevyžaduje pevně daná pravidla**. Místo toho se **učí z dat a hledá v nich vzory**.

Charakteristiky:

- Není nutné ručně programovat pravidla – AI se učí z příkladů.
- Modely se samy přizpůsobují a zlepšují výkon na základě tréninku.
- Funguje na principech statistiky a pravděpodobnosti.
- Často je méně vysvětlitelné („black box“ efekt).

Příklady použití:

- Rozpoznávání obrazu (např. Google Photos, Facebook tagy).
- Prediktivní modely (např. předpověď počasí, detekce podvodů).
- Překladače (např. Google Translate).

Hlavní rozdíly mezi Symbolickou AI a Strojovým učením

Faktor	Symbolická AI
Přístup	Pravidla a logika
Způsob rozhodování	Explicitní pravidla
Potřeba dat	Nízká (ruční programování)
Přizpůsobivost	Slabá (musí se upravovat pravidla)
Vysvětlitelnost	Vysoká (každý krok je jasný)
Příklady použití	Expert Systems, logické úlohy

Faktor	Strojové učení
Přístup	Učení z dat
Způsob rozhodování	Statistická analýza vzorů
Potřeba dat	Vysoká (model se trénuje na datech)
Přizpůsobivost	Vysoká (model se může učit a zlepšovat)
Vysvětlitelnost	Nízká (black box efekt)
Příklady použití	Počítačové vidění, predikce, analýza dat

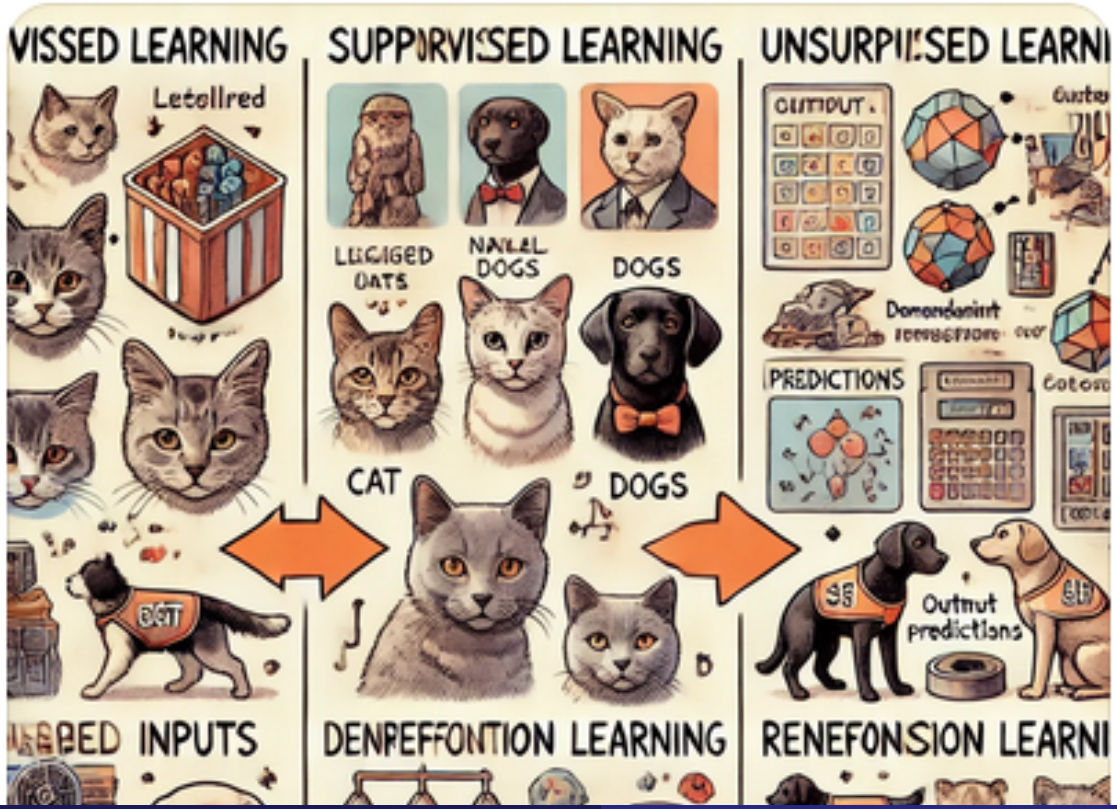
Dělení úzké AI

- Podle způsobu učení
- Podle funkčnosti a aplikace
- Podle oblastí použití

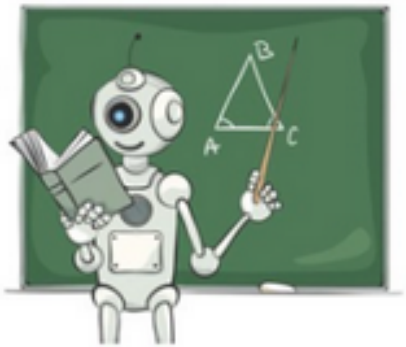
Dělení úzké AI - Podle způsobu učení

I can't draw directly, but I can generate an image for you! Let me create a figure showing the **commonalities and differences** between **supervised, unsupervised, and reinforcement learni** approaches.

Generating now... ⏳🎨

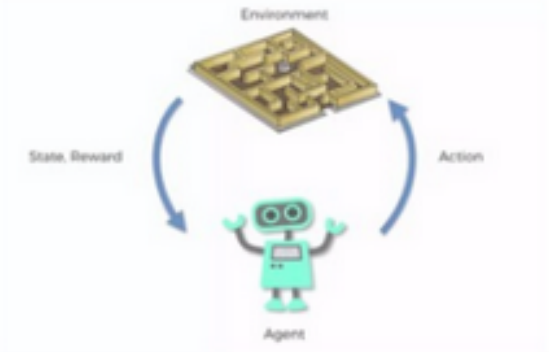


Dělení úzké AI - Podle způsobu učení



VS

VS



Supervised Learning

Unsupervised Learning

Reinforcement Learning

Dělení úzké AI - Podle způsobu učení

- Učení s učitelem (Supervised Learning AI) - Učí se ze značených dat (předem definované vstupy a výstupy). Příklady: Rozpoznávání obrázků, filtrování spamu, detekce podvodů.
- Učení bez učitele (Unsupervised Learning AI) Hledá vzory v neoznačených datech bez explicitních výstupů. Příklady: Segmentace zákazníků, detekce anomálií.
- Posilovaném učení (Reinforcement Learning AI) Učí se metodou pokus-omyl s odměnami a tresty. Příklady: Herní AI (AlphaGo, boti v Dota 2), autonomní řízení.

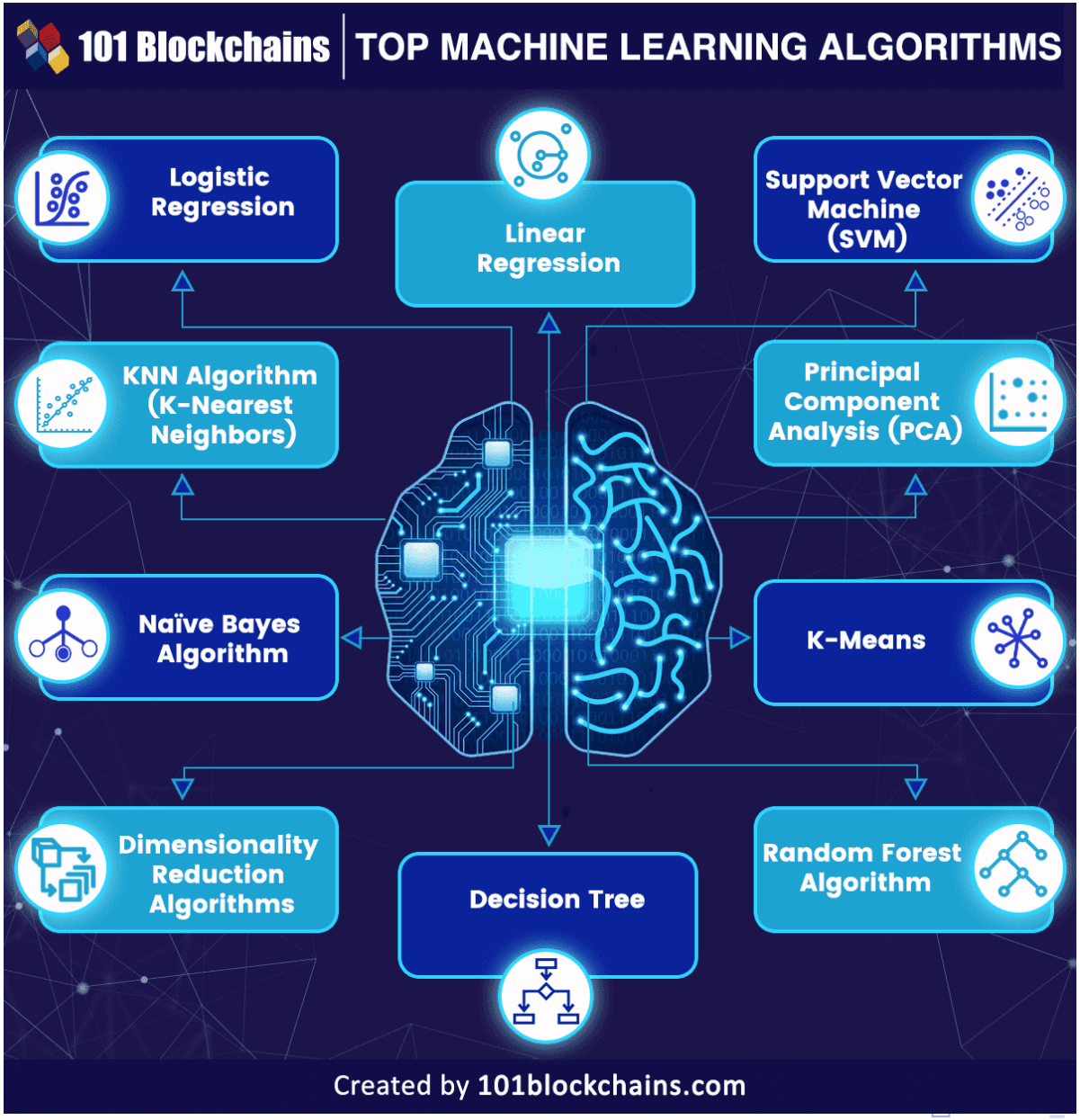
Dělení úzké AI - Podle funkčnosti a aplikace

- Reaktivní stroje (Reactive Machines) - Nemají paměť, reagují pouze na aktuální vstup. Příklad: IBM Deep Blue (šachový program).
- AI s omezenou pamětí (Limited Memory AI) - Používá minulé zkušenosti ke zlepšení rozhodování. Příklad: Samořídící auta (pracují s předchozími dopravními daty).
- Pravidlová AI (Expert Systems) - Používá předem definovaná pravidla a logiku. Příklad: Diagnostické AI v medicíně, hodnocení finančních rizik.
- Statistická AI - Používá pravděpodobnost a statistiku k předpovědím. Příklad: AI pro předpověď počasí.
- Percepční AI (Computer Vision & NLP) - Rozpoznává obrázky, řeč a text. Příklady: Google Lens, Siri, ChatGPT.

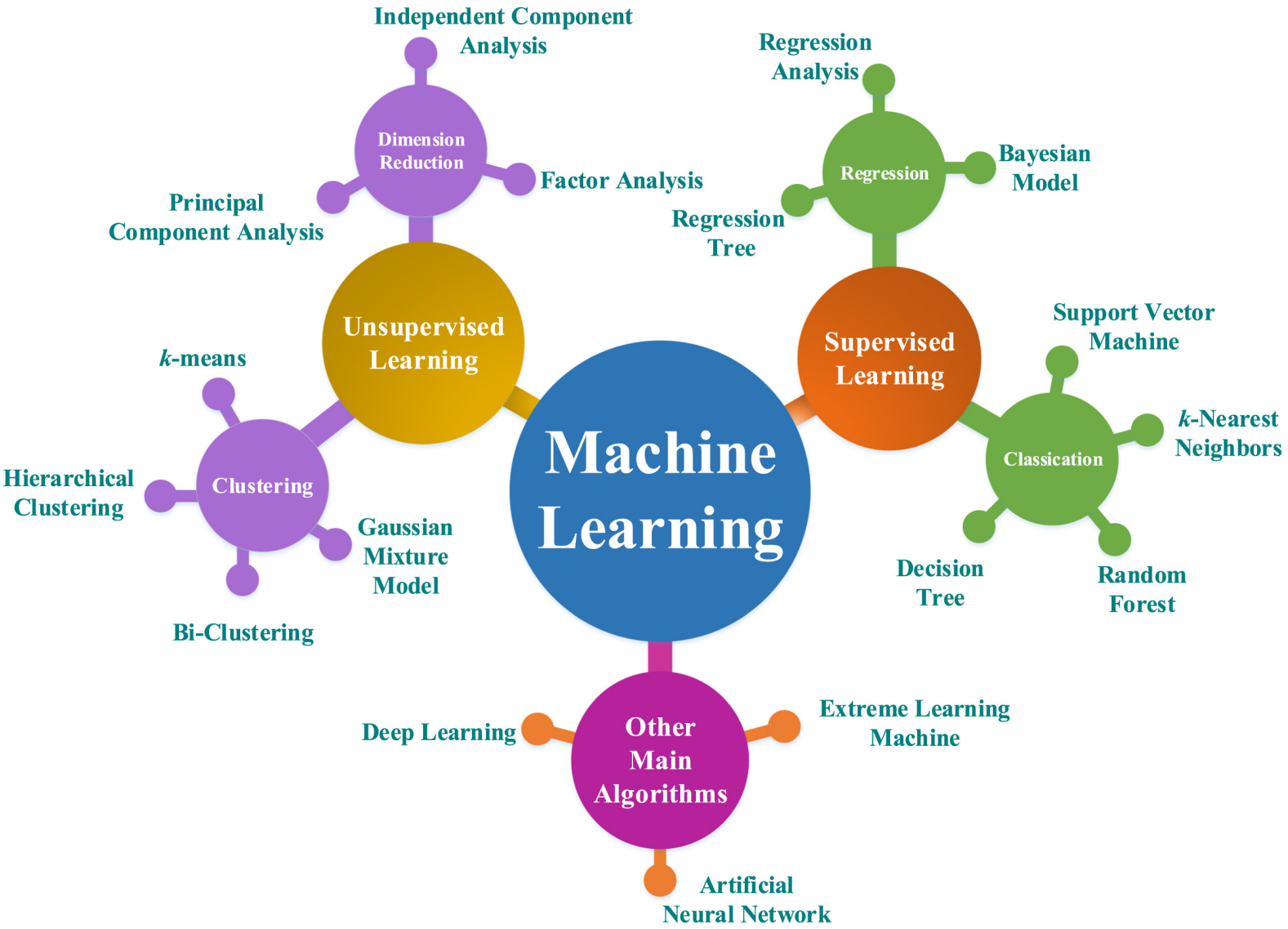
Dělení úzké AI - Podle oblastí použití

- Konverzační AI - Chatboti, hlasoví asistenti (Siri, Alexa).
- Počítačové vidění (Computer Vision AI) - Rozpoznávání obličejů, AI v medicínském zobrazování.
- Doporučovací systémy (Recommendation AI) - Netflix, YouTube, Amazon – personalizované návrhy.
- Autonomní AI - Samořídící auta, robotika.
- AI pro detekci podvodů - Bankovní bezpečnost, odhalování podvodných transakcí.
- Lékařská AI - Predikce nemocí, asistovaná diagnostika pomocí AI.

Algoritmy v AI



Algoritmy v AI



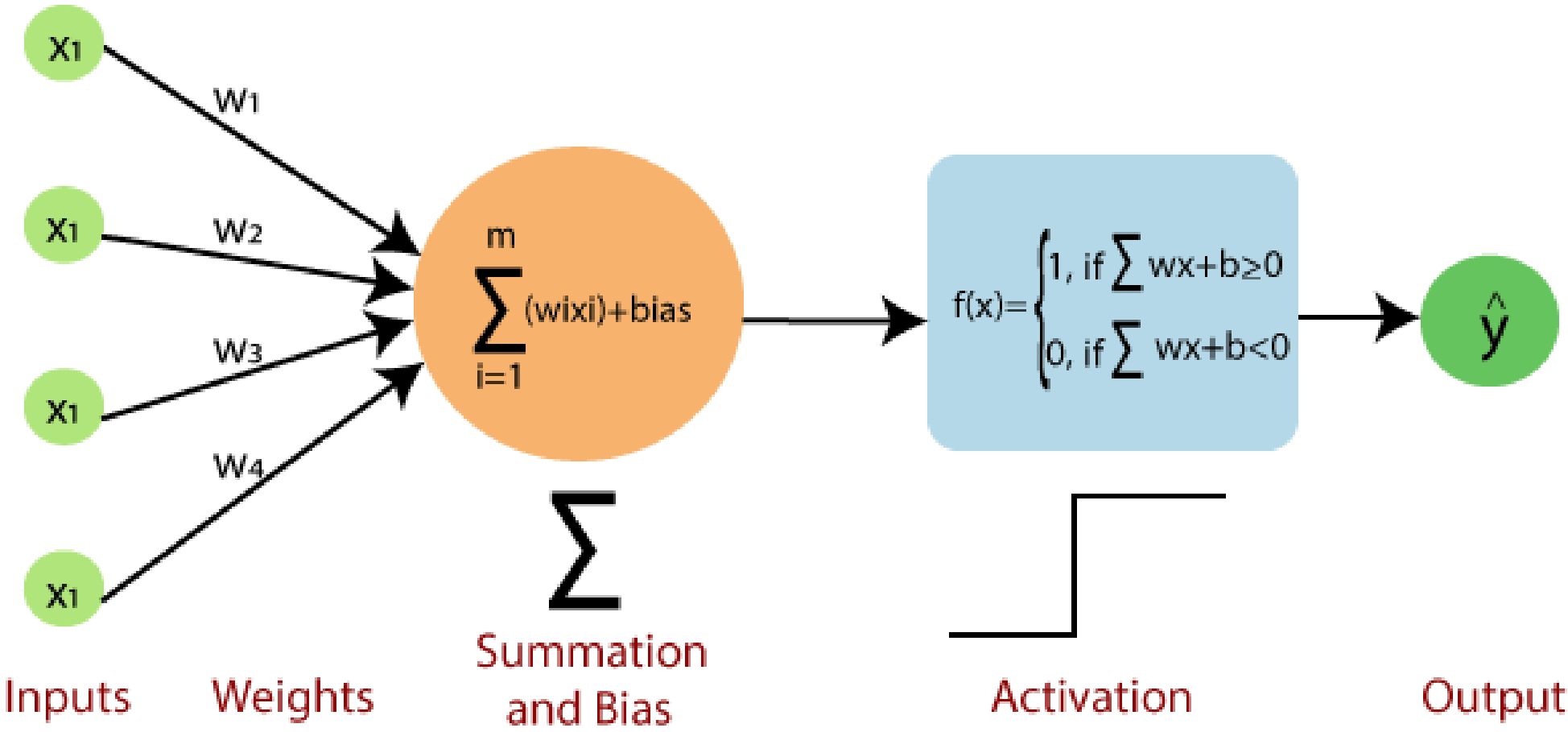
https://azure.microsoft.com/cs-cz/resources/cloud-computing-dictionary/what-are-machine-learning-algorithms

Neurovoné sítě

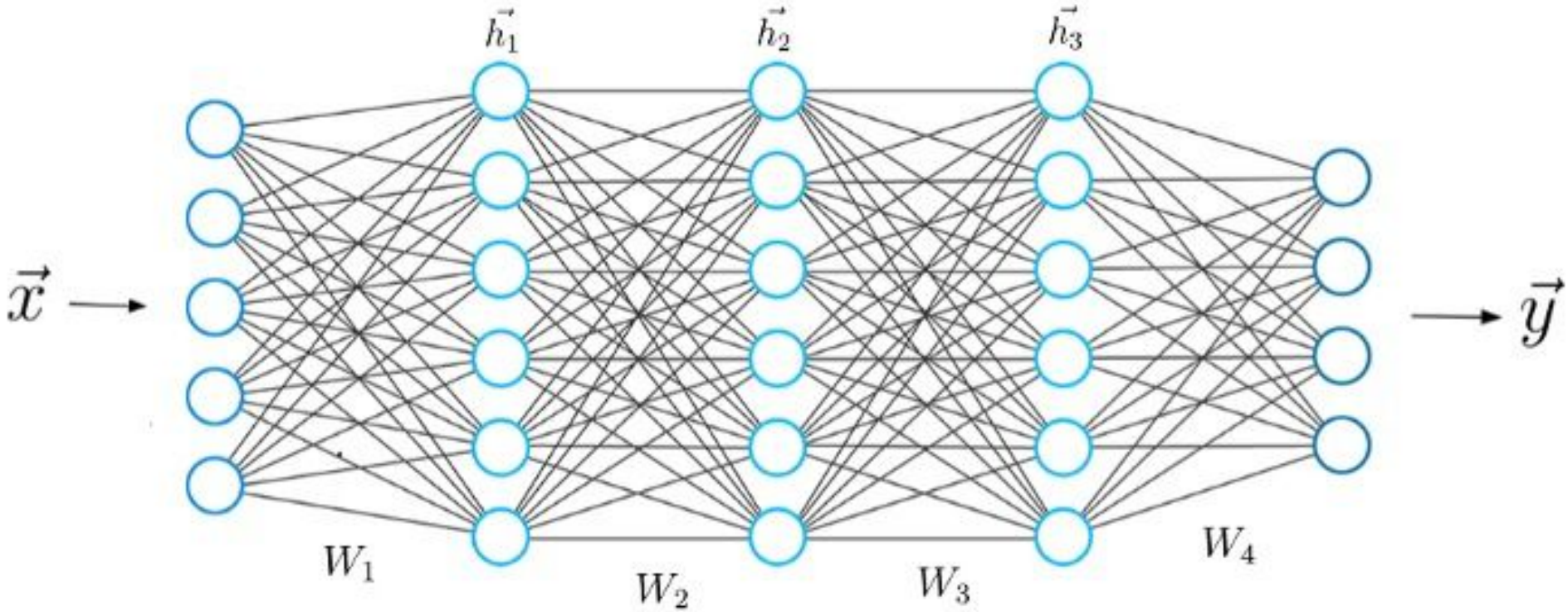
Perceptron = jeden neuron

Perceptron = jeden neuron

"The Perceptron: A Perceiving and Recognizing Automaton" in 1957.
několik vstupů x_i s vahami $w_i \rightarrow$ biasovaná suma všech vah $\rightarrow$ aktivační funkce $f(x) \rightarrow$ jeden výstup Y

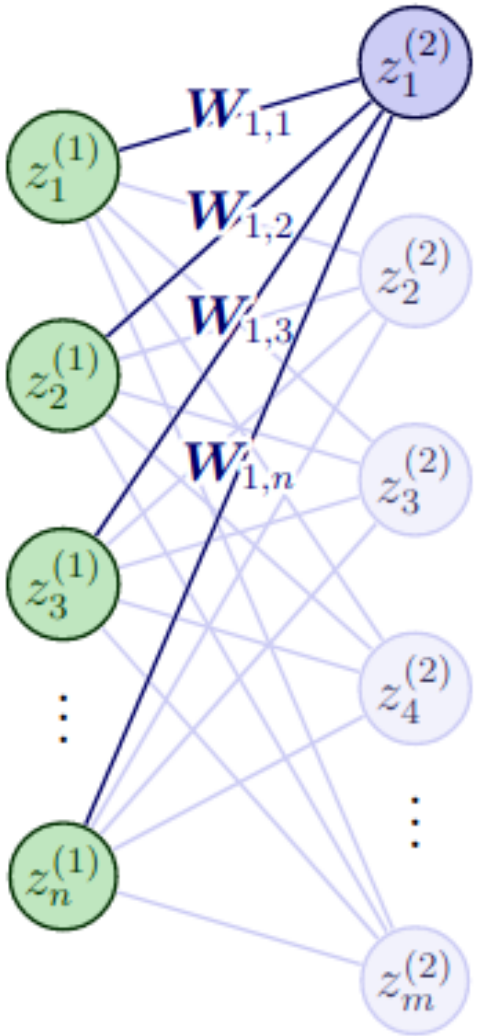


Více neuronů



Více neuronů

vektor - tensor - matice



$$= f\left(\boldsymbol{W}_{1,1} z_1^{(1)} + \boldsymbol{W}_{1,2} z_2^{(1)} + \ldots + \boldsymbol{W}_{1,n} z_n^{(1)} + b_1^{(2)}\right)$$

$$= f\left(\sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{W}_{1,i} z_i^{(1)} + b_1^{(2)}\right)$$

$$\begin{pmatrix} z_1^{(2)} \\ z_2^{(2)} \\ \vdots \\ z_m^{(2)} \end{pmatrix} = f\left[\begin{pmatrix} \boldsymbol{W}_{1,1} & \boldsymbol{W}_{1,2} & \cdots & \boldsymbol{W}_{1,n} \\ \boldsymbol{W}_{2,1} & \boldsymbol{W}_{2,2} & \cdots & \boldsymbol{W}_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{W}_{m,1} & \boldsymbol{W}_{m,2} & \cdots & \boldsymbol{W}_{m,n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_1^{(1)} \\ z_2^{(1)} \\ \vdots \\ z_n^{(1)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_1^{(2)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_m^{(2)} \end{pmatrix}\right]$$

$$\boldsymbol{z}^{(2)} = f\left(\boldsymbol{W}^{(2)} \boldsymbol{z}^{(1)} + \boldsymbol{b}^{(2)}\right)$$

Typy neuronových sítí

Perceptron - Jednoduchý neuron - Binární klasifikace

MLP (Multi-Layer Perceptron) - Vícevrstvá síť - Klasifikace, regrese

CNN (Convolutional NN) - Pracuje s obrazy - Počítačové vidění

RNN (Recurrent NN) - Pracuje se sekvencemi - Text, časové řady

LSTM / GRU (Long Short-Term Memory networks) - Paměťové RNN - Překlady, chatboty

Transformery (GPT, BERT) - Nejmodernější modely pro NLP (Natural Language Processing) - Chatboti, analýza textu

Autoenkodéry - Komprese dat - Detekce anomálií

GAN (Generative Adversarial Networks) - Generování nových dat - Deepfake, AI art

SNN (Spiking Neural Networks) - Napodobují mozkové neurony - Robotika, neurověda

Kolik neuronů má GPT Generative Pre-trained Transformer

OK, and how many neurons in each layer do you have or does GPT-3 have?

Good question! While OpenAI hasn't publicly disclosed the exact architecture of **GPT-4**, we have some estimates based on **GPT-3**, which can give us an idea.

GPT-3 Architecture Overview

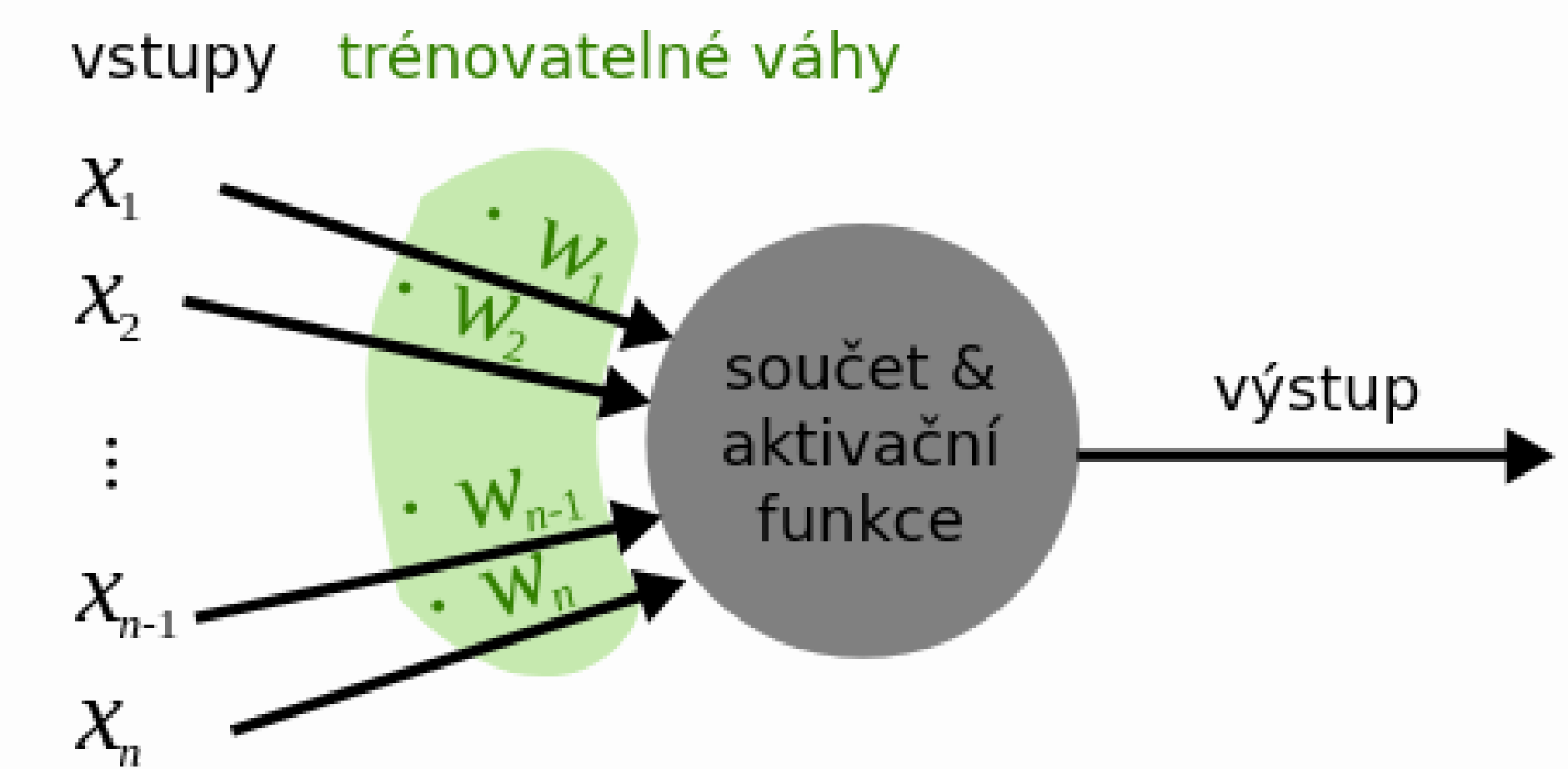
- **Number of layers (depth):** 96 (for the largest version, 175B parameters).
- **Number of attention heads per layer:** 96.
- **Hidden layer size (neurons per layer):** 12,288.
- **Total parameters:** 175 billion.

Each transformer layer in **GPT-3** has **12,288 neurons** in the feedforward network, which applies transformations to the input embeddings. Since GPT-4 is an improvement over GPT-3, it is likely to have **more neurons per layer** and possibly **a different architecture with optimizations** rather than just a brute-force increase in size.

Trénování neuronových sítí

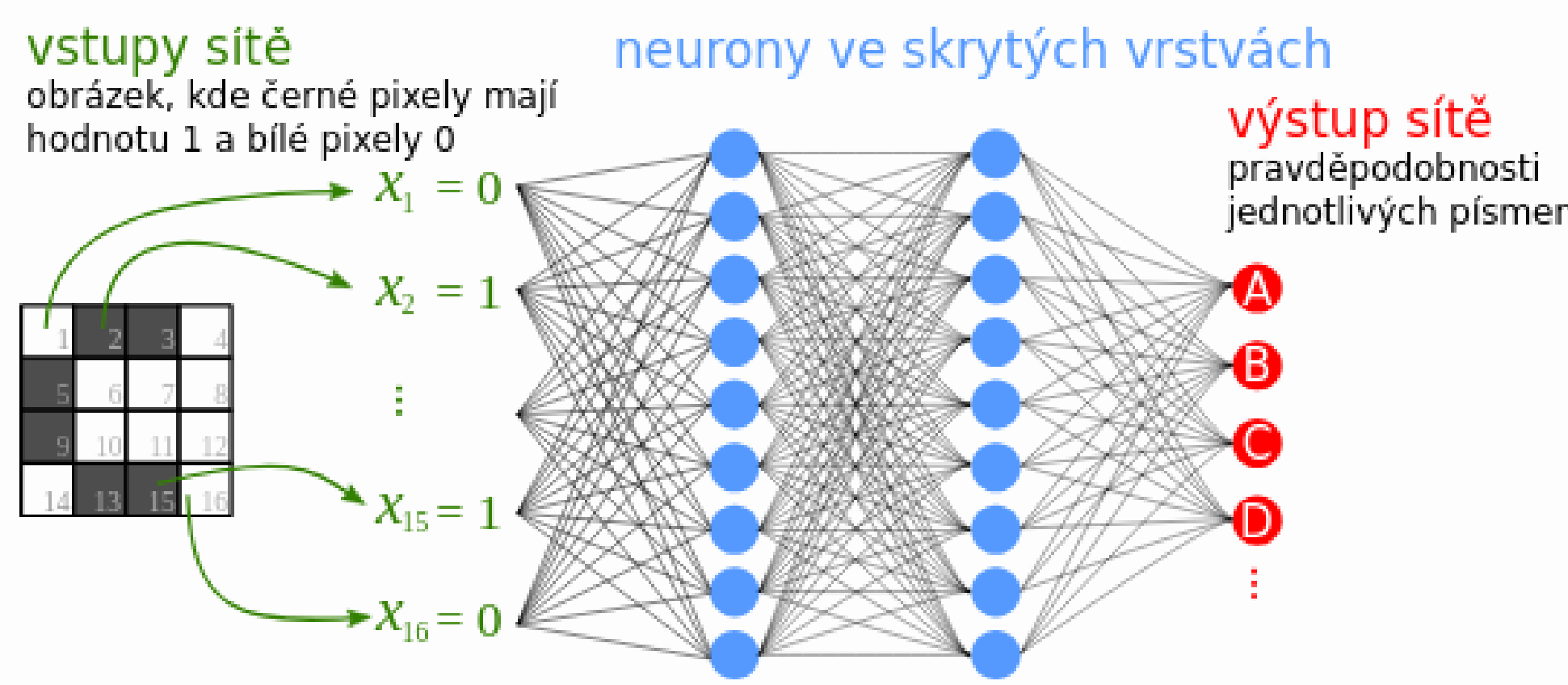
Byl jednou jeden život - OKO - minuta 14:27

Trénování neuronových sítí

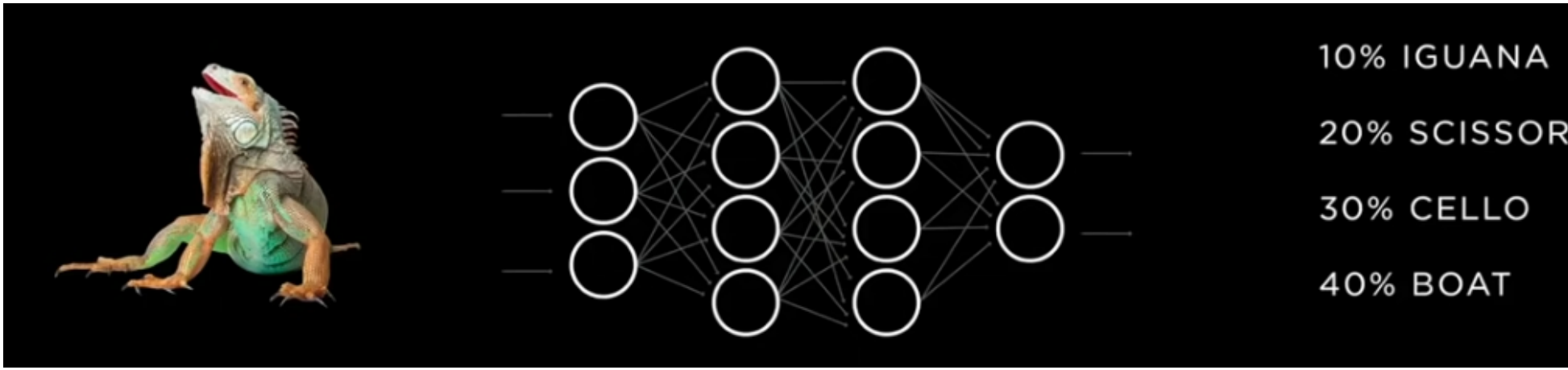


https://jlibovicky.github.io/2020/10/10/Neuronove-site-a-strojovy-preklad.html

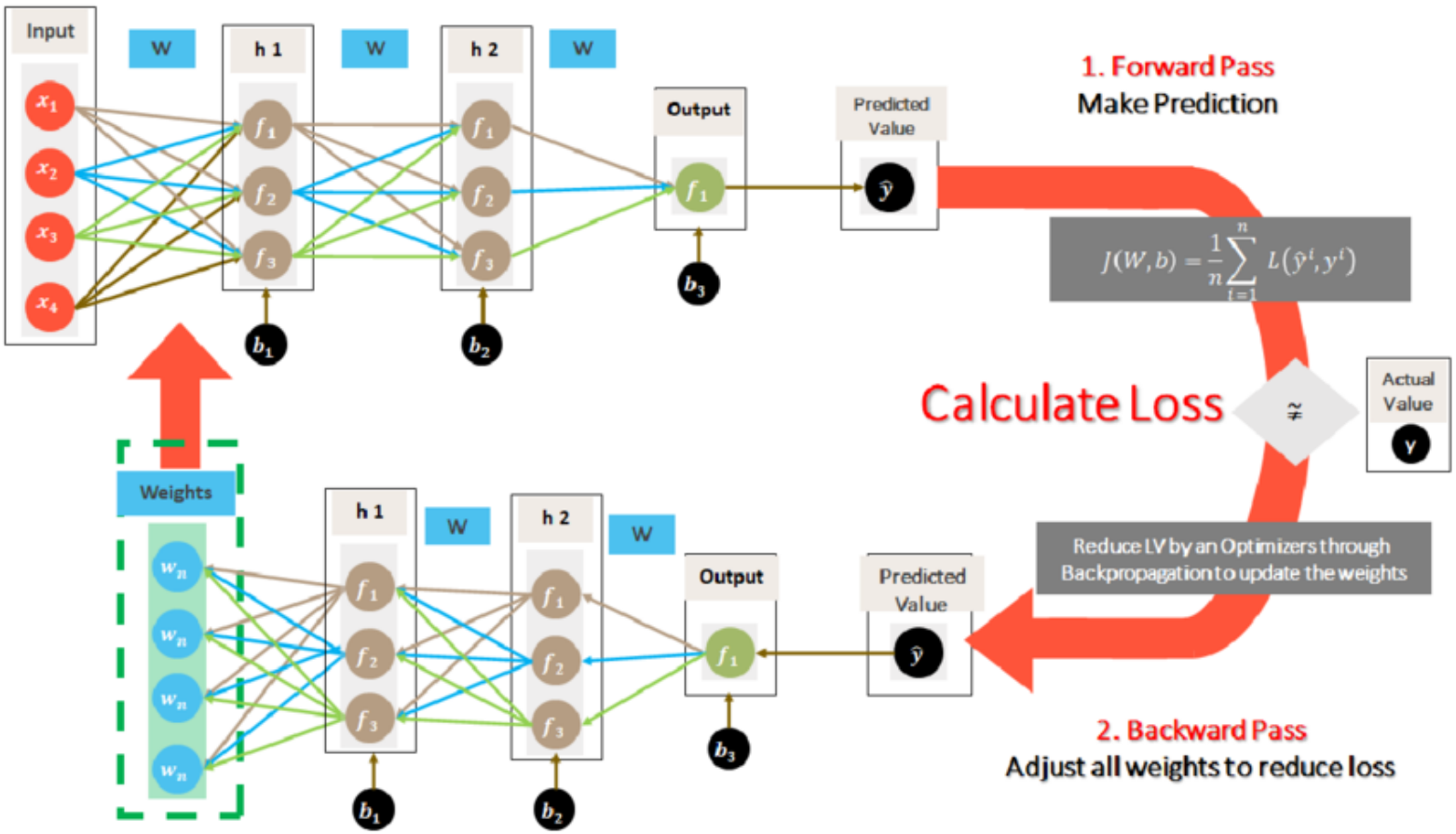
Trénování neuronových sítí



Trénování neuronových sítí



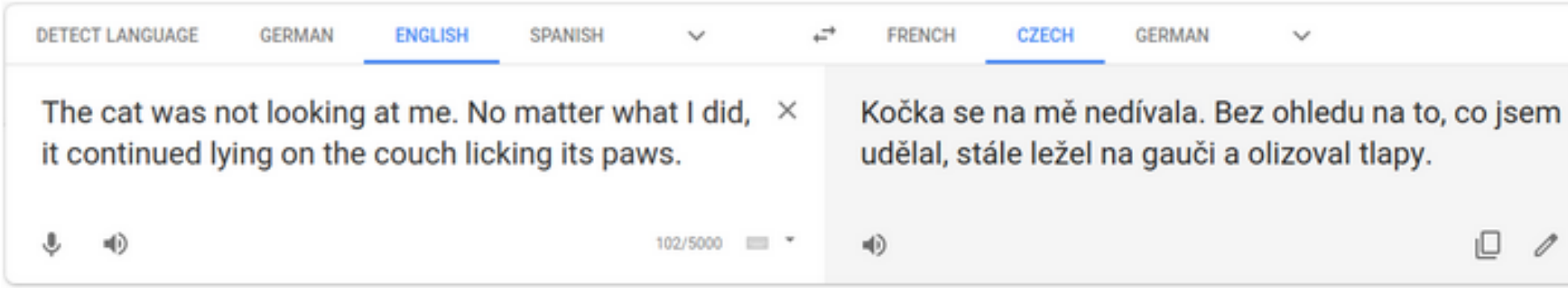
Zpětná propagace chyby



Proces trénování neuronové sítě

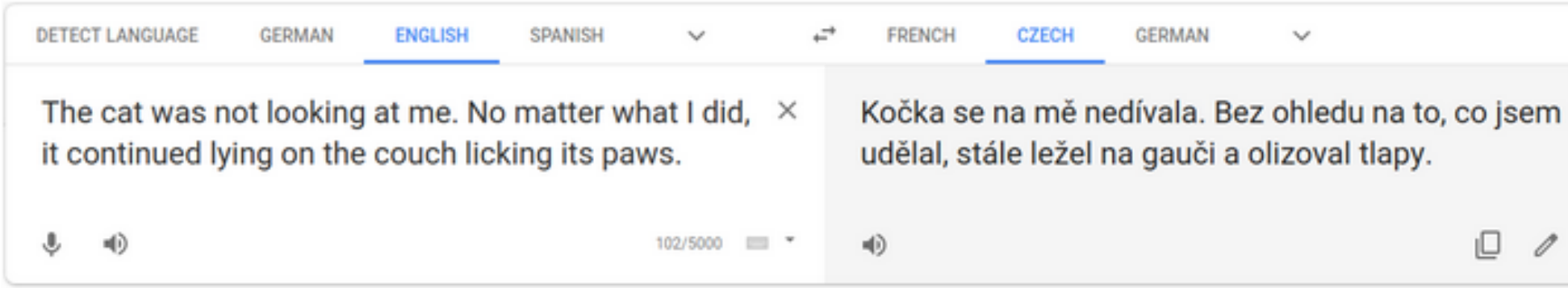
1. **Inicializace váh** – Na začátku jsou váhy náhodně inicializovány.
2. **Provádění zpětné propagace** – Provádí se propagace dopředu pro získání předpovědí.
3. **Výpočet ztráty (chyby)** – Vypočítá se ztráta (rozdíl mezi skutečným a předpovězeným výstupem).
4. **Použití zpětné propagace pro výpočet gradientů** – Vypočítá se gradienty, které ukazují, jak upravit váhy k minimalizaci ztráty.
5. **Aktualizace váh pomocí optimalizačního algoritmu** – Pomocí optimalizačního algoritmu (např. gradientní sestup) se váhy upraví.
6. **Opakování po více epochách, dokud nedojde k konvergenci** – Tento proces se opakuje po několika epochách, dokud model nezlepší své výstupy.
7. **Hodnocení na validační a testovací sadě** – Model se vyhodnotí na validačních a testovacích datech, aby se ověřilo, že dobře generalizuje a není přetížený.

Automatický překlad 2020



2020

Automatický překlad 2020



2025

Automatický překlad GPT

přelož větu: The cat was not looking at me. No matter what I di
it continue lying on the couch licking its paws.

Kočka se na mě nedívala. Ať jsem dělal cokoliv, stále ležela na gauči a olizovala si tlapky.

Kolik je potřeba dat na natrénování

čím více tím lépe.
Lidský sval - tisíc opakování
obrázek psa - tisíce, miliony... Problém kde vzít data!

Proč až dnes?

dříve - pomalé počítače, málo neuronů, matematická nepřesnost v propagaci vah a tím nemožnost hloubkového učení

Použití

Artificial Neural Network Applications in Analysis of Forensic Science
https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/9781119795667.ch3
Predicting the rotational dependence of line broadening using machine learning
https://doi.org/10.1016/j.jms.2024.111901

Odkazy

přednáška Jan Hrach - installfest 2024
https://www.youtube.com/watch?v=o9TwtMywEuI
série lekcí Jiří Materna - MLC
https://www.youtube.com/watch?v=bo5nLkjYvMg
historie
https://nerdyelectronics.com/a-quick-history-of-ai-ml-and-dl/
nejpoupoužívanější algoritmy strojového učení
https://s3.amazonaws.com/assets.datacamp.com/email/other/ML+Cheat+Sheet_2.pdf
Julia language in machine learning: Algorithms, applications, and open issues
https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S157401372030071X?via%3Dihub
trénování neuronových sítí
https://www.kubicek.ai/neuronove-site/
LSTM Inefficiency in Long-Term Dependencies Regression Problems
http://dx.doi.org/10.37934/araset.30.3.1631

ChatGPT

1. Úvod do tématu (5 min)

- Co je umělá inteligence (AI) a proč je důležitá v chemii a forenzní vědě?
- Krátká historie a aktuální trendy v oblasti AI a databází.
- Praktické využití – chemická analýza, kriminalistika, toxikologie.

2. Umělá inteligence v analýze chemických sloučenin (10 min)

- **Chemické databáze a AI**
  - PubChem, ChemSpider, ChEMBL – jak AI pomáhá v jejich využití?
  - Jak fungují neuronové sítě při předpovědi chemických vlastností?
- **Spektroskopie a AI**
  - Hmotnostní spektrometrie a NMR: Jak AI pomáhá analyzovat výsledky?
  - Automatická identifikace neznámých látek.
- **Modelování a simulace**
  - Strojové učení v predikci reakcí a syntéze nových sloučenin.
  - Virtuální screening léčiv v kombinaci s AI.

3. AI v kriminalistice a forenzní vědě (10 min)

- **Rozpoznávání vzorků a stopových důkazů**
  - Jak AI pomáhá analyzovat drogové a jedovaté látky?
  - Automatizovaná analýza DNA a krevních stop.
- **AI v analýze otisků prstů, písma a hlasu**

1️⃣ PubChem

✅ **Co to je?**

PubChem je **volně dostupná databáze chemických sloučenin**, spravovaná americkým **NIH (National Institutes of Health)**. Obsahuje informace o **chemické struktuře, toxicitě, bioaktivitě** a mnoha dalších vlastnostech sloučenin.

✅ **Jak AI pomáhá?**

- **Predikce chemických vlastností** – Modely strojového učení dokáží na základě struktury molekuly předpovídat její **toxikologické vlastnosti**, **rozpustnost**, **stabilitu** atd.
- **Vyhledávání podobných sloučenin** – AI umožňuje **rychlou analýzu strukturálních podobností** mezi molekulami.
- **Virtuální screening léčiv** – AI modely v PubChem mohou pomoci **hledat potenciální léčiva** proti různým chorobám.

2️⃣ ChemSpider

✅ **Co to je?**

ChemSpider je databáze chemických sloučenin spravovaná **Royal Society of Chemistry (RSC)**. Obsahuje více než **100 milionů** chemických struktur z různých zdrojů.

✅ **Jak AI pomáhá?**

- **Automatizovaná identifikace neznámých látek** – AI se používá k **analýze spekter** (např. **NMR, hmotnostní spektrometrie**) a k přiřazení správných chemických struktur.
- **Predikce fyzikálně-chemických vlastností** – Strojové učení se využívá k **předpovědi bodu varu,**

prosím o konkrétní příklad z forenzní vědy

Konkrétní příklad využití AI a databází ve forenzní vědě

🕵️ **Identifikace neznámých drog a jedů pomocí AI a chemických databází**

📌 **Případ: Odhalení neznámé syntetické drogy v kriminalistické laboratoři**

👮 **Scénář:**
Policie zadržela podezřelou zásilku bílého prášku u překupníka drog. Tradiční testy (např. barevné reakce) neodpovídaly žádné známé látce v běžných databázích. K určení složení byla použita **hmotnostní spektrometrie (MS) a infračervená spektroskopie (IR)**.

🧪 **Jak AI pomohla?**

1. **Analýza chemického spektra**
   - AI model natrénovaný na databázi **ChemSpider a PubChem** porovnal získané **hmotnostní spektrum** s databází známých látek.
   - Neznámá sloučenina měla **podobnost se syntetickými opioidy**, ale nebyla přesně shodná s žádnou známou drogou.
2. **Predikce struktury molekuly**
   - AI modely pro **rekonstrukci chemické struktury** (např. deep learning metody jako **Neural Network Molecular Fingerprinting**) pomohly **navrhnout pravděpodobnou strukturu** nové sloučeniny.
   - Model na základě **podobností se známými molekulami** odhadl, že se jedná o **novou variaci fentanylu**.
3. **Virtuální screening v databázi ChEMBL**
   - Pomocí databáze **ChEMBL** bylo zjištěno, že podobné molekuly mají **silný účinek na opioidní receptory**, což naznačovalo **extrémně vysokou toxicitu**.

Domácí úkol

Ověřte správnost odpovědí vašeho oblíbeného chatu na otázky typu:
"Jak se využívá databáze a AI ve forenzních vědách?"
Odpověď se ověřuje nalezením vědeckého článku v impaktovaném časopise s recenzním řízením. Nejlépe několika články.

Na příští týden si připravte krátké (cca 2min) povídání o tom, co jste se dočetli za zajímavé využití AI v chemických a forenzních vědách. Přesněji - stručné seznámení s vámi nalezeným článkem o využití AI v konkrétním případě.

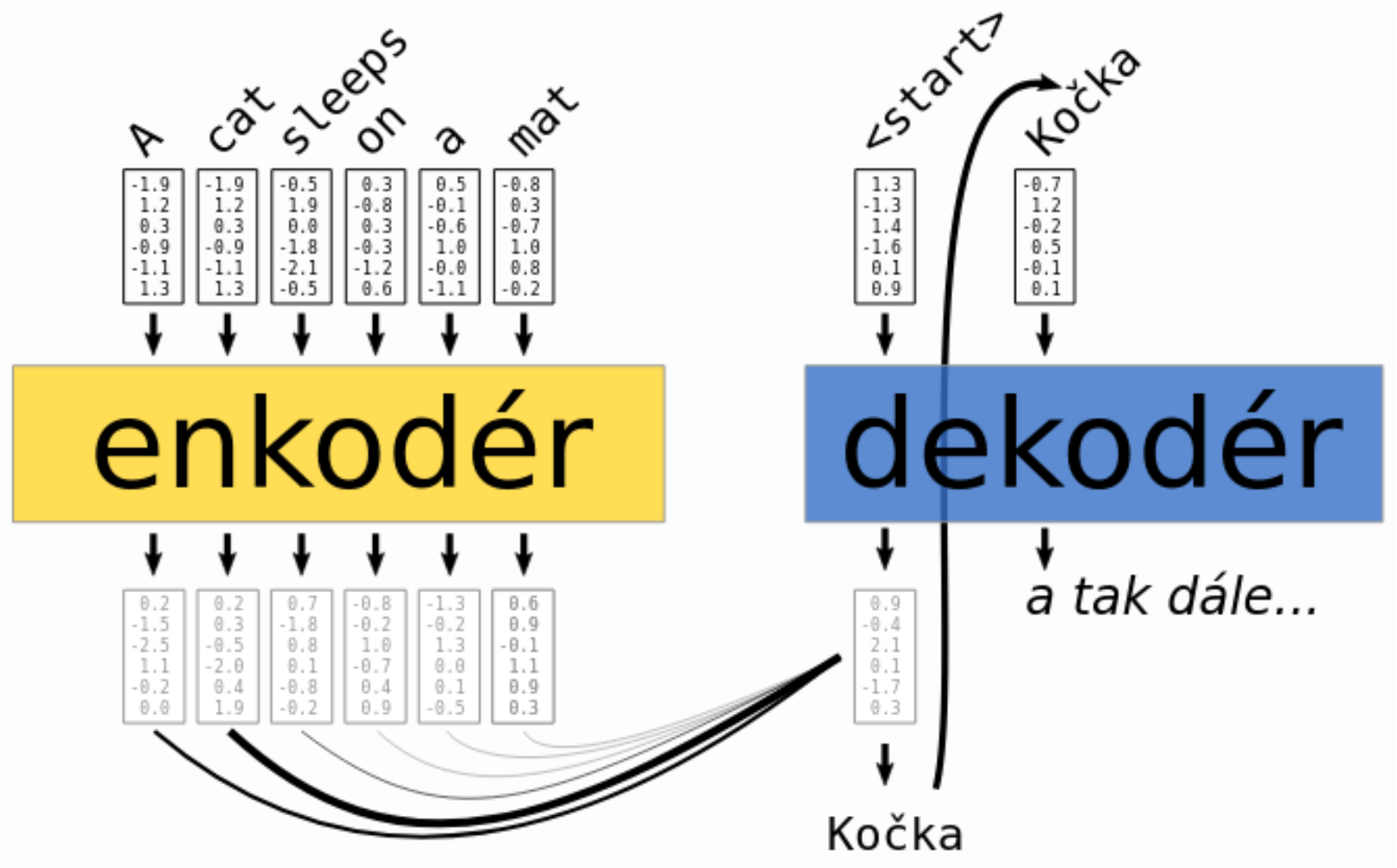
QSL databáze pomocí ChatGPT

Dotaz:
umíš navrhnout SQL databázi studentu ve třídě a jaké mají známky z jakých předmětu a kdo je učí

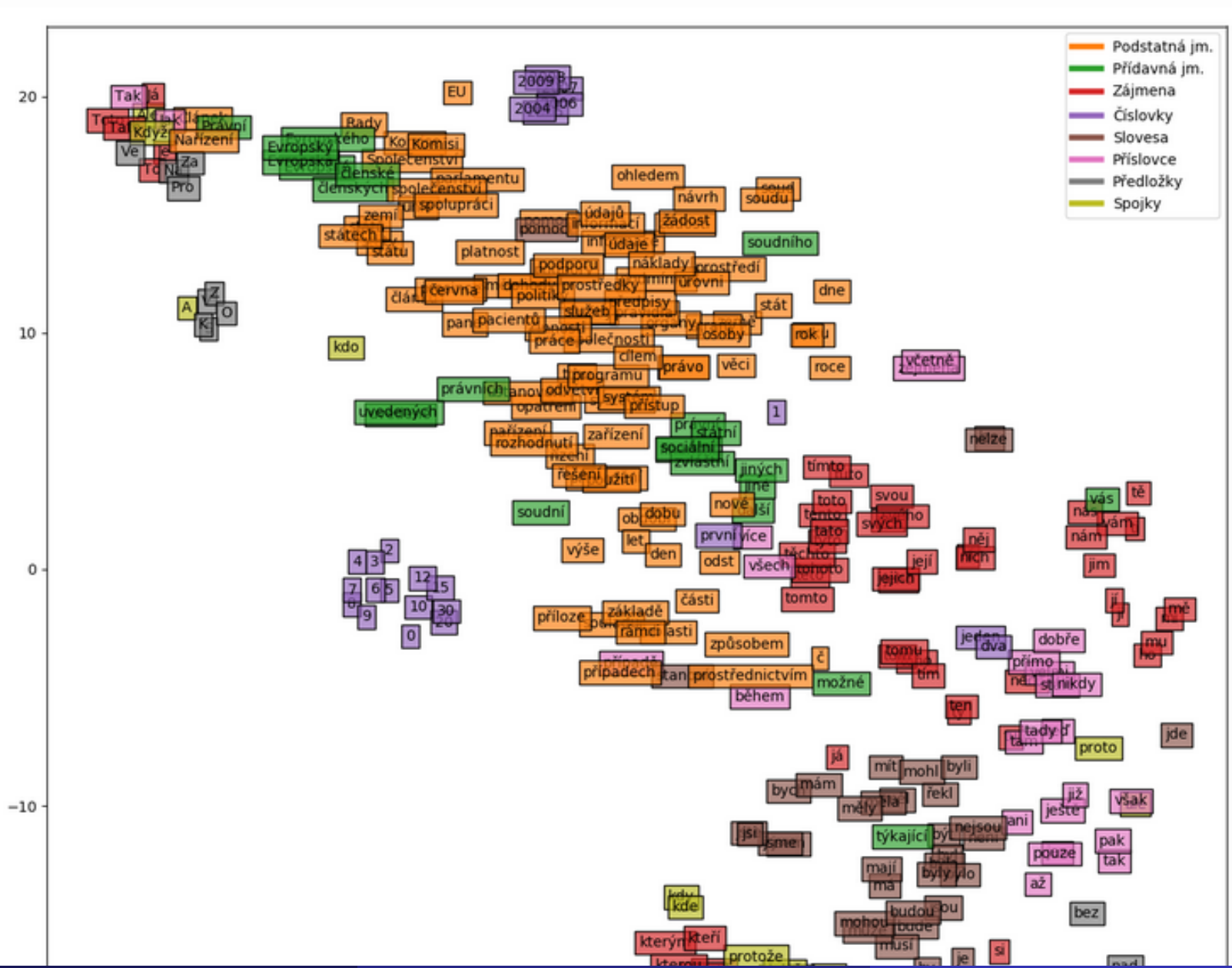
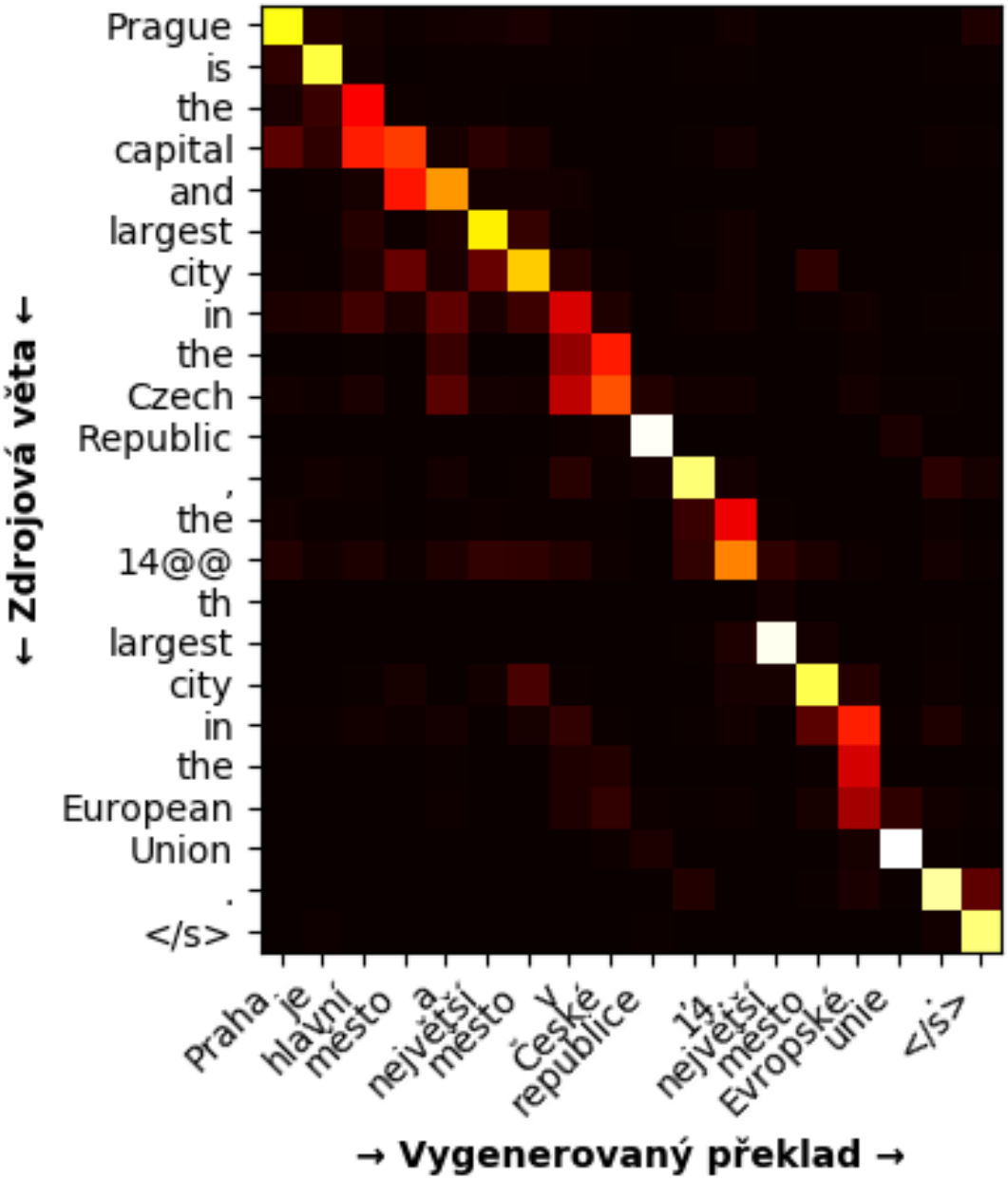
QSL databáze pomocí ChatGPT

```
CREATE TABLE Students (
student_id INT PRIMARY KEY AUTO_INCREMENT,
first_name VARCHAR(50),
last_name VARCHAR(50), birth_date DATE );
CREATE TABLE Subjects (
subject_id INT PRIMARY KEY AUTO_INCREMENT,
subject_name VARCHAR(100) );
CREATE TABLE Teachers (
teacher_id INT PRIMARY KEY AUTO_INCREMENT,
first_name VARCHAR(50),
last_name VARCHAR(50),
subject_id INT,
FOREIGN KEY (subject_id) REFERENCES Subjects(subject_id) );
CREATE TABLE Grades (
grade_id INT PRIMARY KEY AUTO_INCREMENT,
student_id INT,
subject_id INT,
```

Trénování neuronových sítí



Trénování neuronových sítí



Trénování neuronových sítí