

Databáze v chemické a forenzní analýze

Tereza Uhlíková, tereza.uhlikova@vscht.cz

Tereza Uhlíková

Ústav analytické chemie

skupina teoretické spektroskopie

místnost A277

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

tereza.uhlikova@vscht.cz

1	19.3.	Opakování databází, normalizace, ERA
2	26.3.	Spektroskopické databáze - atmosférické, vesmírné
3	2.4.	NIST, specDB
4	9.4.	MS, krystalografické
5	16.4.	AI a Kvantové počítače pro práci s daty
6	23.4.	Barvy,laky,sklo,textilie
7	30.4.	Půda, hořlaviny,nukleární materiály
8	7.5.	STŘEDEČNÍ ROZVRH = NENÍ PŘEDNÁŠKA
9	14.5.	Toxikologické
10	21.5.	Zkouška

cvičení: společná databáze volně prodejných psychotropních látek

Co je to umělá inteligence

definice:

Marvin Minsky (1927-2016) “vědu 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) “vědu 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 by měla AI splňovat?

Generative Pre-trained Transformer - používá specializované algoritmy k nalezení vzorů v datových sekvencích.

jazykový model pracující na neuronových sítích

příklad

ChatGPT

"Město slunce" může odkazovat na několik různých věcí v různých kontextech, ale nejznámějším může být román od filozofa a spisovatele Tomáše Eloy Martíneze. Tento román se odehrává v Latinské Americe a vypráví příběh o fiktivním městě vznikajícím na okraji pralesa, které je náhle zasaženo epidemií úplavice. Martínezův "Město slunce" využívá prvky magického realismu a politické satiry k popisu rozporů a problémů v latinskoamerické společnosti.

Nicméně, existuje i jiné využití termínu, například v souvislosti s náboženskými, mytologickými nebo vědeckofantastickými příběhy. Pokud máte na mysli nějaký konkrétní kontext nebo dílo, rád vám poskytnu podrobnější informace.

You

Město slunce za husitských válek

ChatGPT

"Město slunce" v kontextu husitských válek se odkazuje na Tábor, město ležící na jihu dnešní České republiky. Během husitských válek se Tábor stalo důležitým centrem husitského hnutí. Jeho obyvatelé, známí jako "taboři", se řídili náboženskými a sociálními ideály zakladatele husitství Jana Husa a jeho následovníka Jana Žižky.

Tábor byl organizován do specifického systému nazvaného "Město slunce". Tento systém zahrnoval společné vlastnictví majetku, rovnost mezi obyvateli a důraz na spravedlivé rozdělení bohatství. Obyvatelé Tábora vytvořili městskou radu, která rozhodovala o veškerých záležitostech města, a vedli společný život podle určitých náboženských a společenských principů.

Město slunce v Táboře bylo jedním z prvních pokusů o utopické společenství a mělo vliv na další

t You

prosim přelož: Dr. Tereza Uhlíková specializes in quantum chemistry modeling of a wide range of spectral features. Her expertise includes studying high electronic excited states and their coupling functions, examining radicals and their structure through investigating, for instance, symmetry-breaking effects going beyond the Born-Oppenheimer approximation (BOA). She also simulates fine and hyperfine splitting of small molecules in order to analyze their highly resolved microwave spectra. Recently, her theoretical predictions regarding the lifetimes and predissociation of the dication NO^{++} have been supported by kinetic energy release experiments.



ChatGPT

Dr. Tereza Uhlíková se specializuje na kvantovou chemii modelování široké škály spektrálních vlastností. Její odbornost zahrnuje studium vysokých elektronických excitovaných stavů a jejich spojovacích funkcí, zkoumání radikálů a jejich struktury prostřednictvím zkoumání například efektů narušení symetrie překračujících Born-Oppenheimerovu aproximaci (BOA). Také simuluje jemné a hyperjemné štěpení malých molekul za účelem analýzy jejich vysokoryzolených



You

prosím rozšíř text



ChatGPT

Dr. Tereza Uhlíková je vedoucí v oblasti kvantové chemie a zaměřuje se na modelování široké škály spektrálních vlastností. Její práce zahrnuje detailní studium vysokých elektronických excitovaných stavů a jejich vzájemných vztahů pomocí spojovacích funkcí. Dále se zabývá zkoumáním radikálů a jejich struktury, přičemž se zaměřuje na efekty, které jdou nad rámec tradiční Born-Oppenheimerovy aproximace.

V rámci svého výzkumu se Dr. Uhlíková také zaměřuje na simulaci jemného a hyperjemného štěpení malých molekul, což umožňuje detailně analyzovat jejich mikrovlnná spektra s vysokým rozlišením. Její práce v této oblasti přináší důležité poznatky do kvantové chemie a molekulární fyziky.

Nedávno získala uznání za své teoretické předpovědi ohledně životnosti a předissociace dikationtu NO^{++} , které byly potvrzeny prostřednictvím experimentů s uvolněním kinetické energie. Tato práce představuje důležitý krok v porozumění chování molekulárních systémů v extrémních podmínkách a má potenciál ovlivnit další vývoj v oblasti kvantové chemie a molekulární fyziky.

Jak to začalo?

1642 Blaise Pascal kalkulačka

1837 Charles Babbage programovatelný mechanický stroj (na páru)

1943 Warren McCulloch a Walter Pitts podobnost mezi lidským
mozkem a počtícím 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

“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

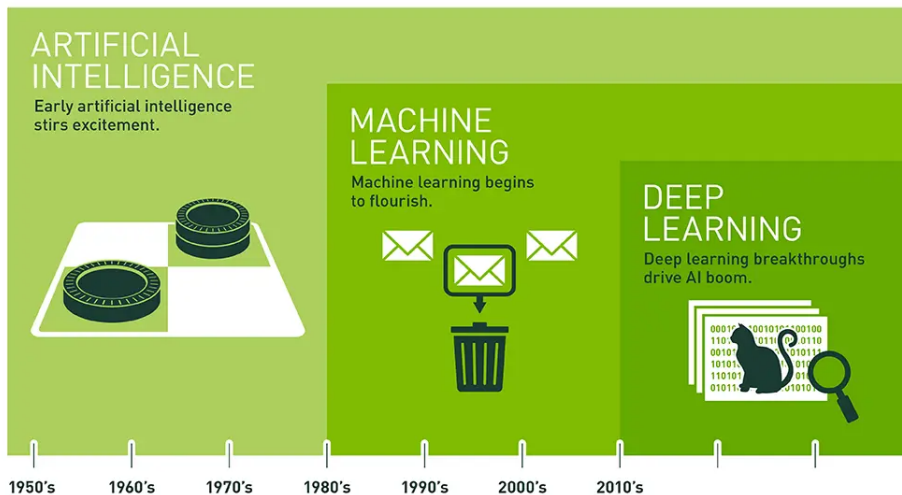
1984 jsou obavy a nejsou peníze ... Terminátor

- 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 obrázků
- 2022 OpenAI konverzace
- 2023 boston dynamics
https://www.youtube.com/watch?v=-e1_QhJ1EhQ

Úzká umělá inteligence (Narrow Artificial Intelligence (NAI)) či „slabá AI“ odkazuje na systémy zaměřené na řešení jediné úzce vymezené úlohy (Siri, boti)

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

- Klasická umělá inteligence
 - Robotika
 - Řešení úkolů (problem solving) umělá inteligence v hrách
 - Rozpoznávání obrazců (pattern recognition) systém zaměřený na rozpoznávání vzorů
 - Dokazování vět (theorem proving)
- Nová umělá inteligence (Soft computing)
 - Neuronové sítě inspirované nervovým systémem živých organismů
 - Reprezentace vágních znalostí a aproximativní uvažování (technického zařízení)
 - Evoluční algoritmy - využívají modelový mechanismus podobný přírodnímu výběru pro získání algoritmů



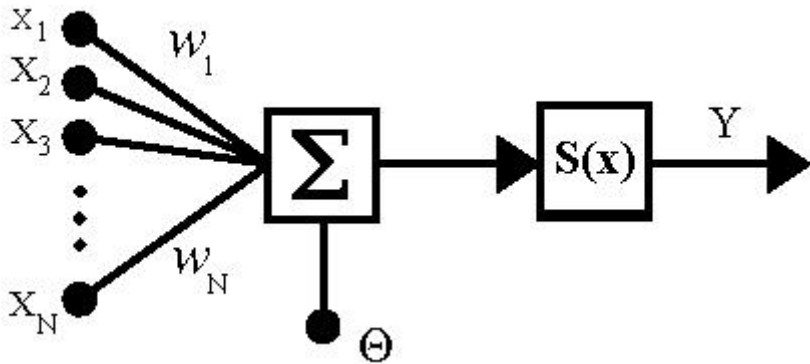
Neurovoné sítě

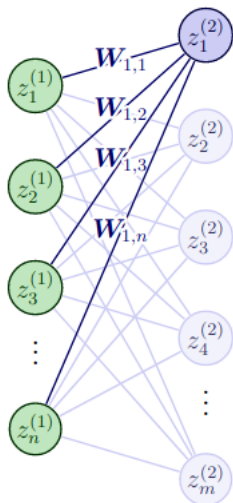


Jeden neuron

Jeden neuron

několik vstupů x_i s vahami $w_i \rightarrow$ aktivační funkce $S(x) \rightarrow$ jeden výstup Y
jeden neuron - Perceptron



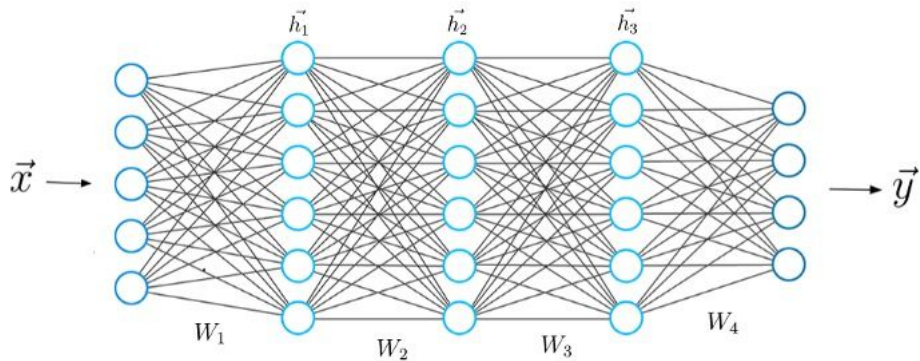


$$\begin{aligned}
 &= f \left(\mathbf{W}_{1,1}z_1^{(1)} + \mathbf{W}_{1,2}z_2^{(1)} + \dots + \mathbf{W}_{1,n}z_n^{(1)} + b_1^{(2)} \right) \\
 &= f \left(\sum_{i=1}^n \mathbf{W}_{1,i}z_i^{(1)} + b_1^{(2)} \right)
 \end{aligned}$$

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

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

Více neuronů



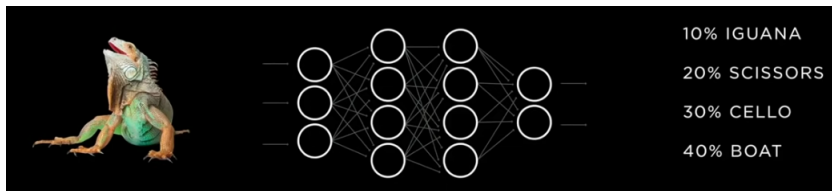
Proč až dnes?

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

Byl jednou jeden život - OKO - minuta 14:27

Trénování neuronových sítí

Natrénovaná síť zná všechny váhy w_i



Algoritmus zpětné propagace chyby

Učení s učitelem

Učení bez učitele

Kolik je potřeba dat na natrénování

čím více tím lépe.

Lidský sval - tisíc opakování

obrázek psa - tisíce, miliony...

<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/9781119795667.ch3>

Kvantové počítače

Co je to kvantový počítač

Co je to kvantový počítač

- Kvantový počítač není superpočítač, který dokáže všechno dělat rychleji. Ale počítač pracující na jiném principu.
- Do kvantového stavu molekuly můžeme zaznamenat informaci.
- Kvantové vlastnosti částic jsou využity pro reprezentaci a strukturu dat a kvantové jevy pak slouží k výkonu operací s těmito daty.

Co je to kvantový počítač

- Kvantový počítač není superpočítač, který dokáže všechno dělat rychleji. Ale počítač pracující na jiném principu.
- Do kvantového stavu molekuly můžeme zaznamenat informaci.
- Kvantové vlastnosti částic jsou využity pro reprezentaci a strukturu dat a kvantové jevy pak slouží k výkonu operací s těmito daty.

Může být v mnoho stavech v jednom čase (superpozice, provázanost, interference).

×

Klasický může být pouze v jednom stavu v jednom čase.

Novinky.cz » Internet a PC » Bezpečnost » Takovým hrozbám jsme ještě nečelili, obávají se experti kvantových

Takovým hrozbám jsme ještě nečelili, obávají se experti kvantových PC



8. 8. 2023, 14:16

[Ondřej Husák](#)



Umělá inteligence, chemický průmysl, předpověď počasí či lékařský výzkum. Kvantové počítače slibují zásadní zlom v mnoha oblastech lidského bádání. Stejně tak ale přinesou kvantové výpočty úplně novou generaci bezpečnostních hrozeb. Upozornili na to experti z kyberbezpečnostní společnosti Check Point.



[NÚKIB](#) > [Infoservis](#) > [Aktuality](#)

> NÚKIB připravil podpůrné materiály pro ochranu před hrozbou v podobě kvantových počítačů

NÚKIB připravil podpůrné materiály pro ochranu před hrozbou v podobě kvantových počítačů

21. červenec 2023

Kvantové počítače zažívají v současné době velký rozmach. S rozvojem jejich schopnosti ovšem nabírá stále větších a konkrétnějších rozměrů také hrozba, kterou kvantové počítače představují pro současné kryptografické standardy v oblasti kybernetické bezpečnosti. V reakci na to Národní úřad pro kybernetickou a informační bezpečnost (NÚKIB) připravil tři podpůrné materiály, které objasňují povahu této hrozby, a kroky, které bude v následujících

Home > Zprávičky

Google tvrdí, že jeho kvantový počítač dosáhl tzv. kvantové nadřazenosti

ČTK — 24. 10. 2019 | Zprávičky



HOME > SCIENCE ADVANCES > VOL. 9, NO. 9 > GRID-BASED METHODS FOR CHEMISTRY SIMULATIONS ON A QUANTUM COMPUTER

 | RESEARCH ARTICLE | CHEMICAL PHYSICS



Grid-based methods for chemistry simulations on a quantum computer

[HANS HON SANG CHAN](#) , [RICHARD MEISTER](#) , [TYSON JONES](#) , [DAVID P. TEW](#), AND [SIMON C. BENJAMIN](#)  [Authors Info & Affiliations](#)

SCIENCE ADVANCES · 1 Mar 2023 · Vol 9, Issue 9 · DOI: [10.1126/sciadv.abo7484](https://doi.org/10.1126/sciadv.abo7484)

↓ 5,484



Abstract

First-quantized, grid-based methods for chemistry modeling are a natural and ele-

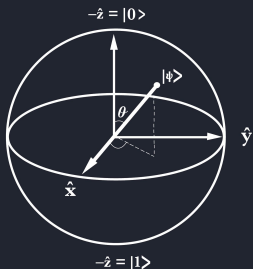
https://www.aldebaran.cz/bulletin/2017_37_kvp.php

- superpozice (superposition)
- provázanost (entanglement)
- interference (interference)

QUANTUM STATES

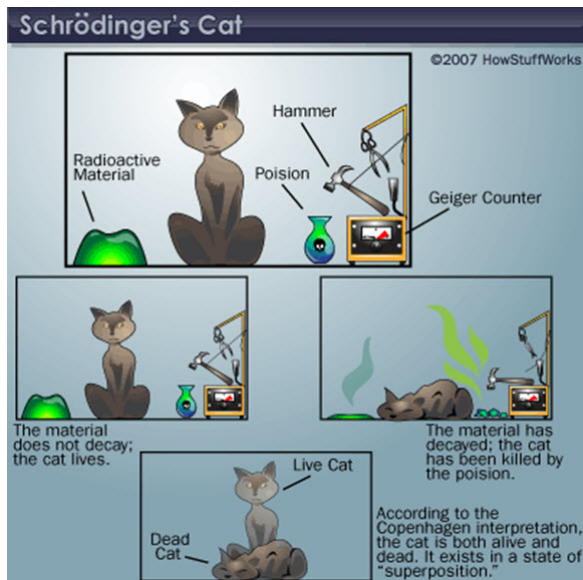
Hydrogen Wave Function
Probability density plots.

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = \sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2\pi [n+l]!}} e^{-\rho/2} \rho^l L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) \cdot Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

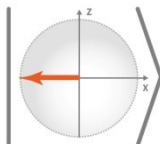
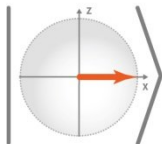
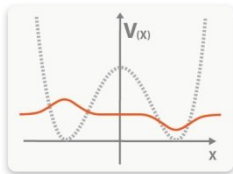
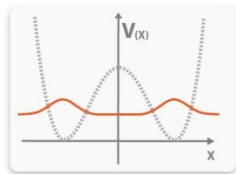


Schrödingerova kočka 1937

Schrödingerova kočka 1937

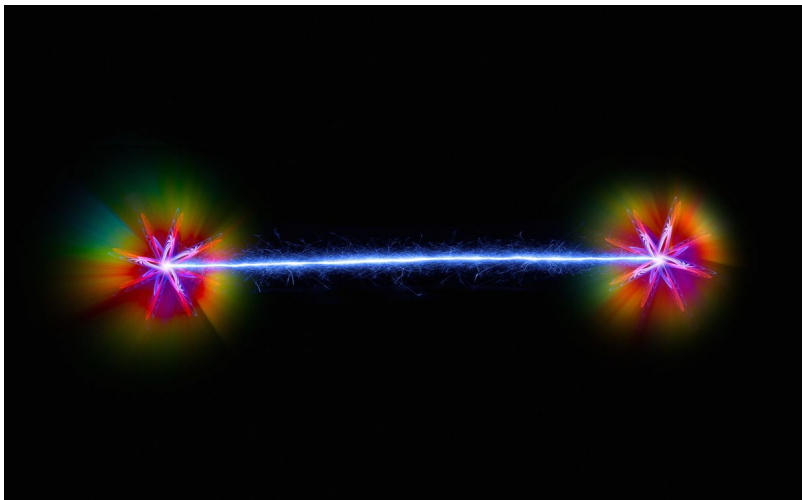


Superpozice



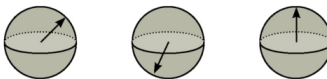
2022 - nobelova cena - Alain Aspect, John F. Clauser, and Anton Zeilinger

$$|\psi_{AB}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|H\rangle_A \otimes |H\rangle_B - |V\rangle_A \otimes |V\rangle_B)$$



interference

qubits



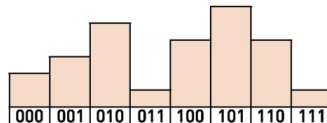
quantum wavefunctions

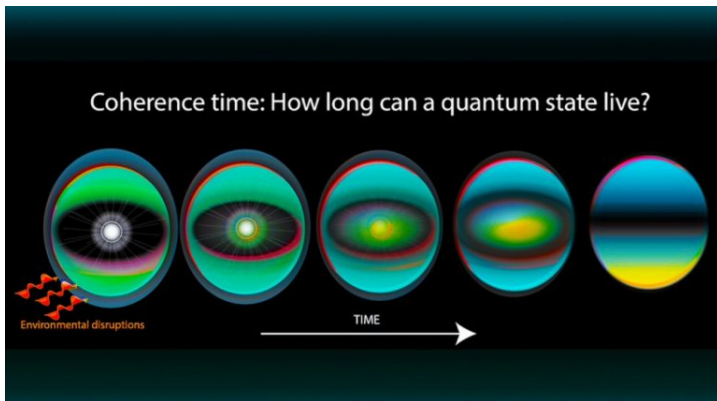


overall wavefunction

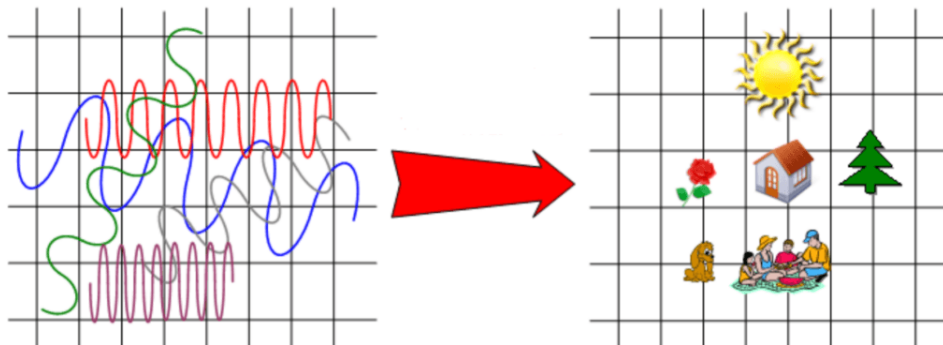


probability distribution

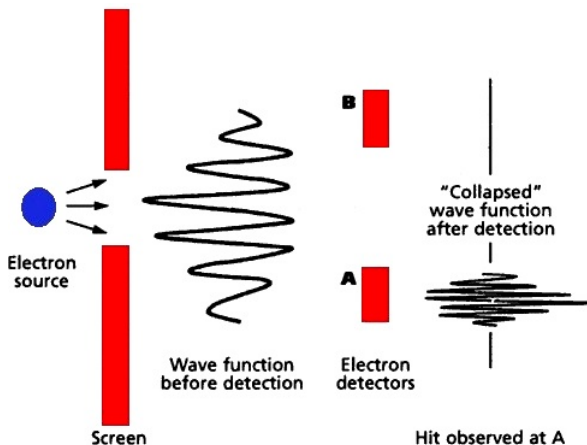




Kolaps při pozorování



Kolaps při pozorování



Bit

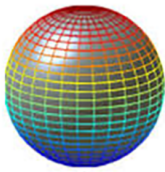
0



1

Qubit

0



1

BITS

Classical Computer – Operations on BITS



1



0



vs

QBITS

Quantum Computer – Operations on Quantum BITS



1



0 and 1 at the same time
"SUPERPOSITION"



0



Qubits can take same value simultaneously. This characteristic expands the possibility of parallel calculations

QUBIT A JEHO VYUŽITÍ

GRAFICKÝ MODEL QUBITU V PODOBĚ BLOCHOVY SFÉRY.



Souřadnice
 N 23°34'41,4422";
 E 32°48'10,3476";
 znázorněné kruhy
 vyjadřují superpozici
 pravděpodobnosti stavů
 (70 % pro spin nahoru,
 30 % pro spin dolů)

LOGICKÉ HODNOTY QUBITŮ

0 Spin dolů



1 Spin nahoru



$|0\rangle$ Superpozice blíže 0

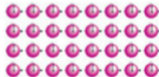


$|1\rangle$ Superpozice blíže 1

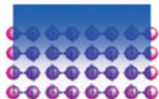


PRINCIP KVANTOVÝCH VÝPOČTŮ

1. Před začátkem výpočtu



2. Částice jsou vystaveny laseru



3. Výsledek



https://en.wikipedia.org/wiki/List_of_proposed_quantum_registers
transmon

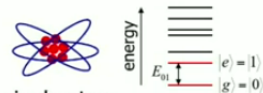
Nature's quantum bits

true qubits



single spin-1/2

effective qubits



single atom

Manmade quantum bits

artificial atoms built from circuits

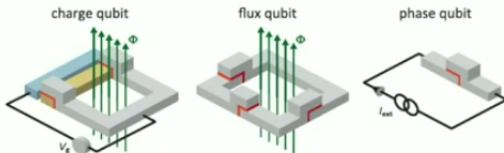


Image credit: W.D. Oliver & P.B. Welander, MRS Bulletin **38**, 816 (2013)

Fyzický qbit

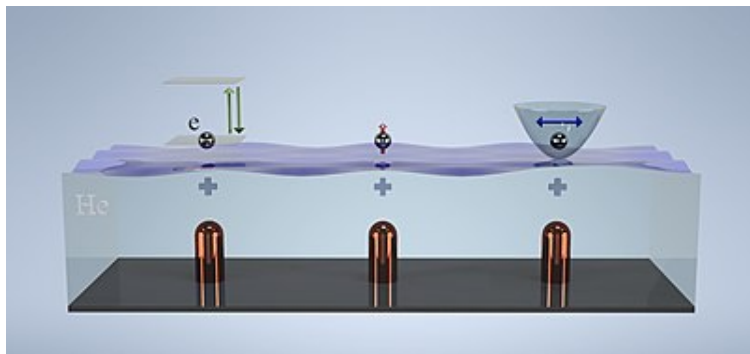
Iontové pasti

NMR - využívá spinu

Vibrační - superpozice vibračních stavů

Fullerenové ($N@C_{60}$)

Electron-na-heliu



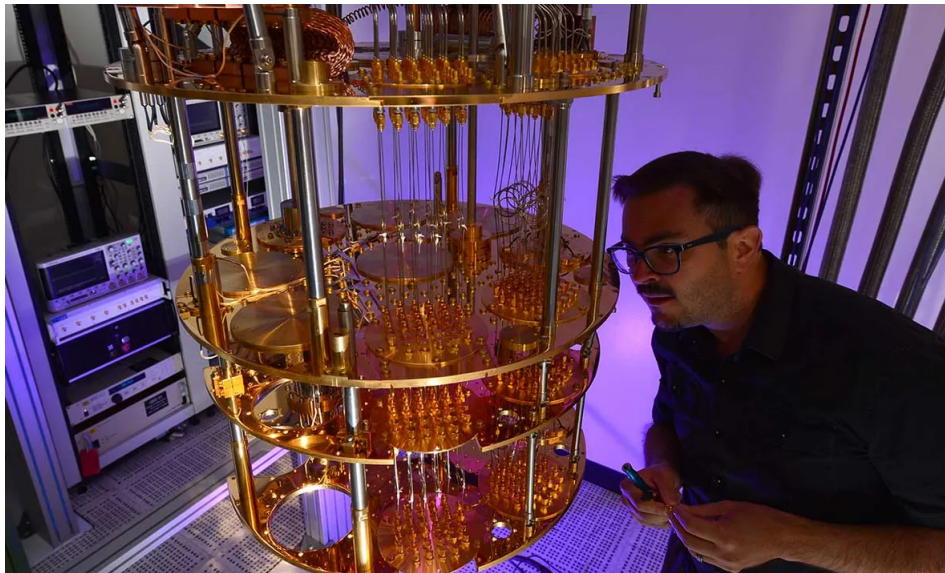
https://www.aldebaran.cz/bulletin/2017_37_kv.p.php

Hardware zvenku - stínění

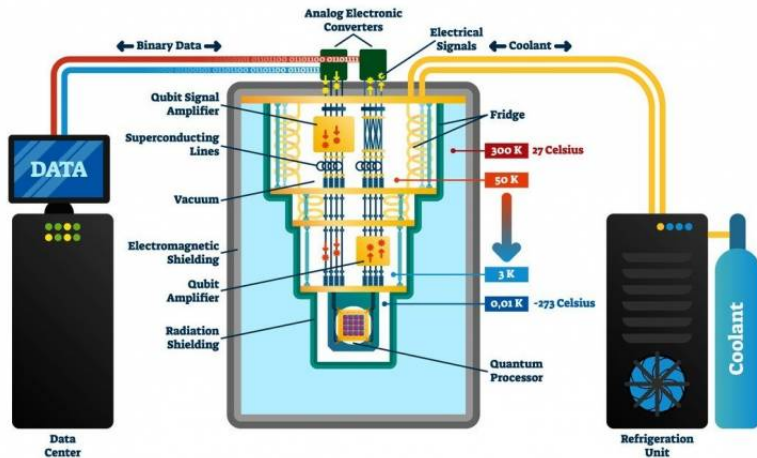


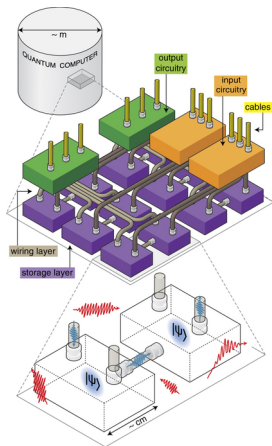


Hardware - bez chlazení

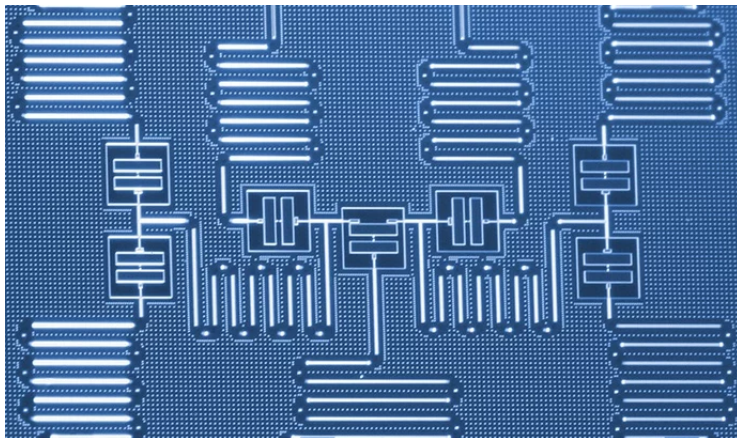


Hardware - náčrtek

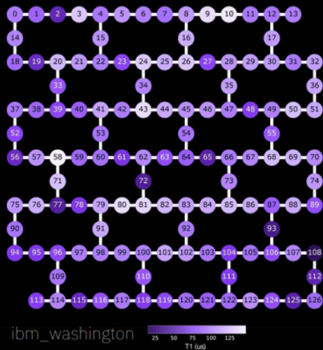




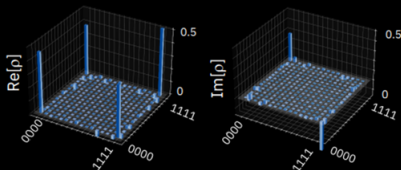
Hardware - 7 qbitů



Eagle has landed



IBM Quantum
Eagle Processor
127 qubits



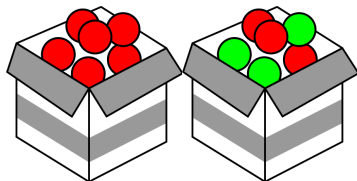
<https://www.newscientist.com/question/what-is-a-quantum-computer/>

Úkol: Hledání osoby. Všichni víte svoje jméno (stav qbitu). Všichni víte zároveň o všech ostatních (provázanost). Zeptám-li se na konkrétní jméno, okamžitě dostanu výsledek na jeden průchod.

Karty

Bludiště

1992 David Deutsch a Richard Jozsa



Máme funkci (černou krabičku) $f : 0, 1^n \rightarrow 0, 1$
je buď konstanta (stejný výstup pro všechna x)
nebo balancovaná (rovná se 0 nebo 1 přesně v polovině případů x).
Jak zjistit, jestli je funkce konstanta nebo balancovaná?

Klasický počítač: složitost $O(2^N)$

Kvantový počítač: 1 průchod

RSA šifrování

obecně známá faktorizace čísla

$$3 \cdot 5 = 15$$

$$437 = 19 \cdot 23$$

Klasický počítač: $O(\exp b)$

1994 Peter Shor

Faktorizace čísla na základě zkoumání posloupnosti číslic a zjišťování jejich periodičnosti

Kvantový počítač: Složitost polynom $O(b^3)$

Groverův prohledávací algoritmus

1996 Lov Grover

Klasický počítač: $O(N)$

Kvantový počítač: $O(\sqrt{N})$

Obecně - Když částice, kvantový balíček potencialit, narazí do bariéry nebo je jinak vyrušena, záporné vlnky se zkombinují s kladnými a v sebedestrukci zanechávají jen jedinou vlnku popisující možnost, která se realizuje v pozorovaném světě - **kolabs vlnové funkce**.

Nejprve jsou všechny položky převedeny na jedničky a nuly a společně umístěny v kvantové superpozici - **inicializace qbitu**.

Výsledkem je svazek vln reprezentujících jednotlivé položky. Pak systém ovlivníte - **laserový impuls** - tak, aby se vlnky pozitivních amplitud vyrušily s vlnkami negativních amplitud - **vývoj systému v čase**. Nakonec zbude jen vlnka reprezentující hledanou položku databáze - **kolabs interferentní vlnové funkce do výsledku**.

Jak programovat Qbity

fyzicky - mikrovlny, laserovým pulzem, magnetickým polem

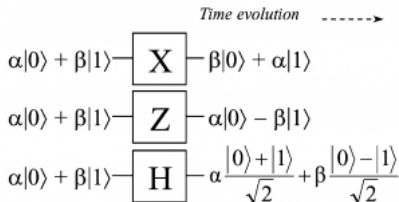
informaticky - logické funkce nazvaná hradla

na 1 qbit:

Pauliho-X hradlo - přetáčí stav qubitu z $|0\rangle$ na $|1\rangle$ a $|1\rangle$ na $|0\rangle$ (ekvivalent funkce NOT u klasických bitů)

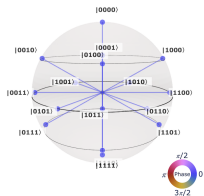
Pauliho-Z hradlo - ponechává $|0\rangle$ a přetáčí stav qubitu $|1\rangle$ na $-|1\rangle$ (přehození fáze)

Hadamardovo hradlo – snižuje pravděpodobnosti stavu qubitu $|0\rangle$ nebo $|1\rangle$ na polovinu



Quantum single qubit gates.

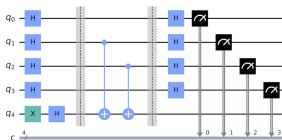
Operace s Qbity



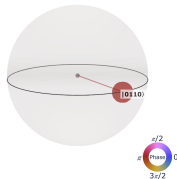
Superposition of all possibilities



Quantum circuit



Computation driven interference



Solution

<https://www.ibm.com/quantum/qiskit-runtime>

- 1960 Stephen Wiesner - kvantové stavy jako nositele informace
- 1976 Roman Stanisław Ingarden - Quantum Information Theory
- 1980 Paul Benioff popíše počítač pomocí kvantové mechaniky
- 1982 Richard Feynman - navrhl použití kvantových systémů k výpočtům
- 1984 Charles Bennett a Gilles Brassard - kv. kryptografický protokol BB84
- 1985 David Deutsch - kvantový Turingův stroj
- 1994 Peter Shor - faktorizační algoritmus
- 1995 poslána zpráva kvantovým kanálem
- 1996 Lov Grover - vyhledávací algoritmus
- 1996 Peter Shor a Andrew Steane - kvantová oprava chyb možná
- 1997 uskutečněna kvantová teleportace
- 1999 Richard Huges - iontové pasti s desítkami qubitů

- 2001 IBM a Stanford University odzkoušeli Shorův algoritmus (číslo 15 na 7-qbitech)
- 2010 D-Wave One: první komerční kvantový počítač (annealer)
- 2016 IBM - experience pro každého
- 2019 Google tvrdí kvantovou nadřazenost
- 2023 Česká republika bude hostit evropský kvantový počítač LUMI-Q
- 2024 IBM více jak 1000 qb

dekoherence kvantových stavů
pohyb všeho - $T = 0\text{K}$
dokonalé stínění

ARTICLE JOURNALS ▾

Science

News Home All News ScienceInsider News Features

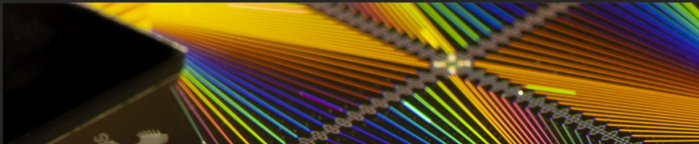
HOME > NEWS > ALL NEWS > ORDINARY COMPUTERS CAN BEAT GOOGLE'S QUANTUM COMPUTER AFTER ALL

NEWS | PHYSICS

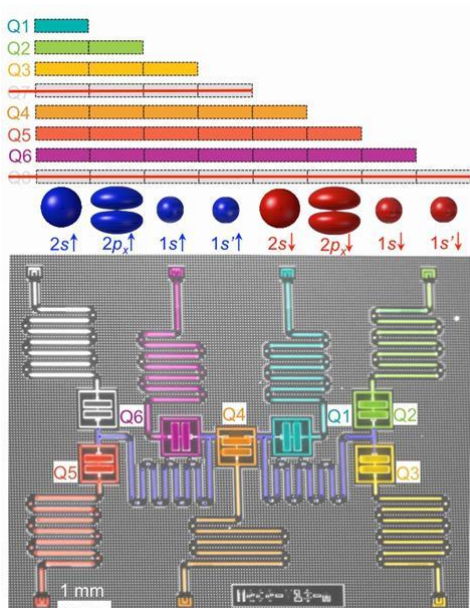
Ordinary computers can beat Google's quantum computer after all

Superfast algorithm put crimp in 2019 claim that Google's machine had achieved "quantum supremacy"

2 AUG 2022 · 5:05 PM ET · BY [ADRIAN CHO](#)



Využití v chemii



Využití v chemii

