

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

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.	MS; CCSD	tvorba MS databáze
6	15.4.	ML; facial; GPT pomoc?; acces	
7	22.4.		
8	29.4.		
9	6.5.	ČTVRTEČNÍ ROZVRH = NENÍ PŘEDNÁŠKA	
10	...	Zkouška	

Improving first responder forensic capabilities: On-site detection and quantification of explosive precursors using portable near-infrared spectroscopy and machine learning

<https://doi.org/10.1016/j.forsciint.2025.112378>

Predicting the rotational dependence of line broadening using machine learning

<https://doi.org/10.1016/j.jms.2024.111901>

Obličejové rozpoznávání - Facial recognition

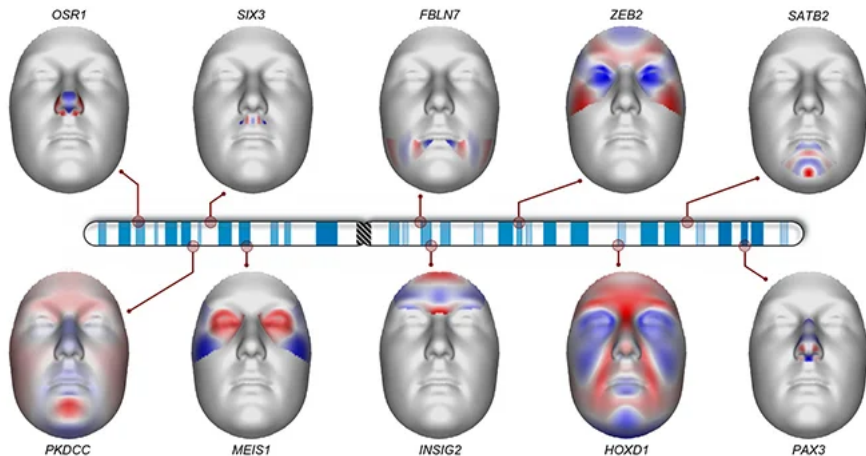


Obličejové rozpoznávání

<https://videos.cctvcamerapros.com/v/facial-recognition-security-cameras.html>



Z obličej DNA



Z DNA obličej

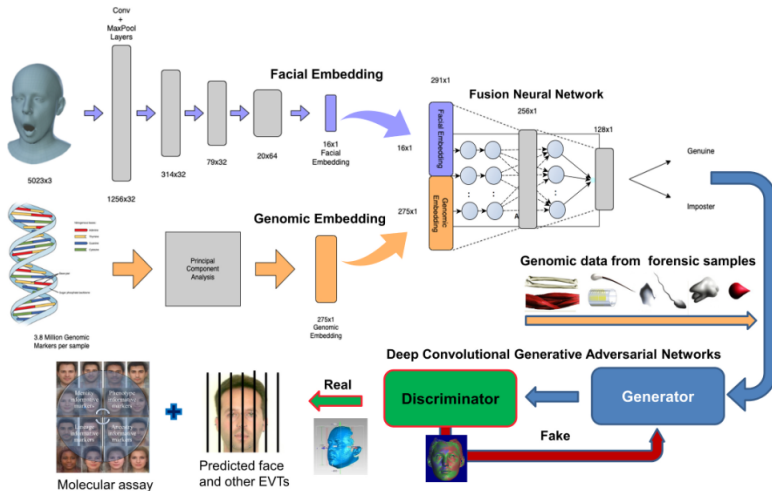
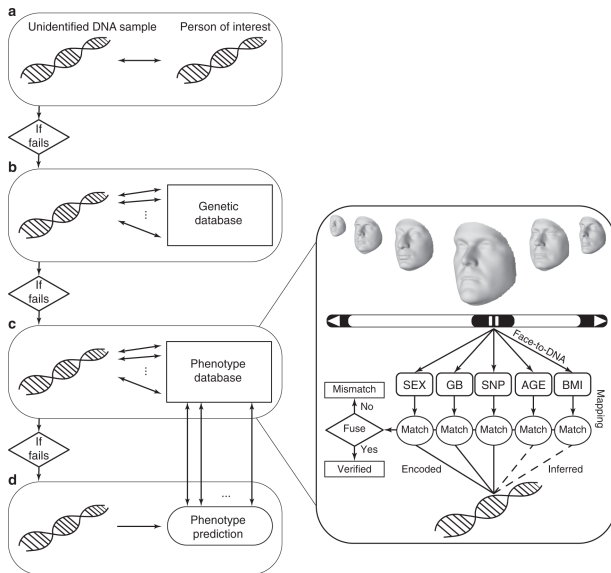


Fig. 6. Illustration of the proposed GANs approach for predicting complex phenotyping traits from genomic data (see [46] for more details).

NATURE COMMUNICATIONS

Facial recognition from DNA using face-to-DNA classifiers

<https://doi.org/10.1038/s41467-019-10617-y>



Popis k vývojovému diagramu:

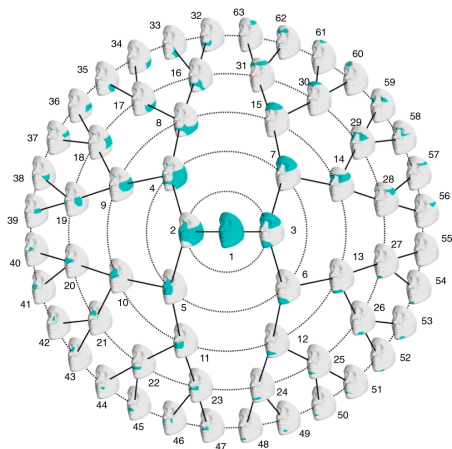
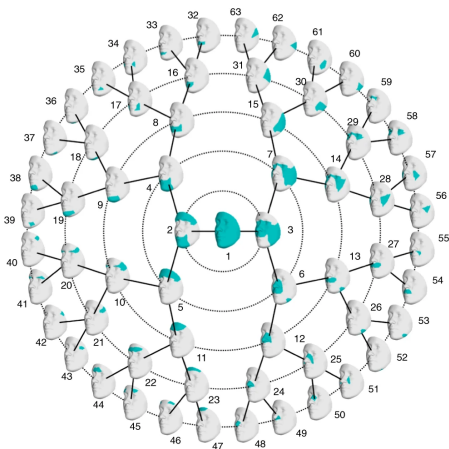
- a Neidentifikovaný vzorek DNA - porovnat jej s DNA osoby, která nás zajímá.
- b Stejný neidentifikovaný vzorek DNA - porovnat s profily DNA osob se známou identitou zapsaných v genetické databázi.
- c Každý klasifikátor face-to-DNA odpovídá **obličej** v galerii obličejů (databáze fenotypů), v rámci molekulární rysů (pohlaví, genotyp pozadí, individuálních genetických rysů (SNP), věku a indexu tělesné hmotnosti (BMI) na **jedina část DNA**.
- d Předpověď fenotypu. Konkrétně ukázat obličej veřejnosti a doufat, že někdo pozná daného jedince. Této schopnosti však současný stav fenotypizace DNA zatím nedosahuje (2025).

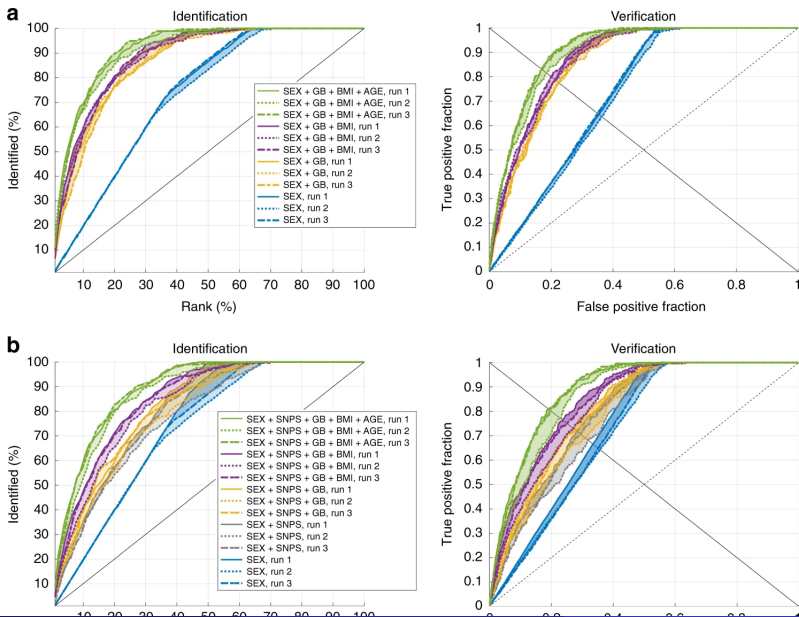
GLOBAL nepříbuzných a geneticky heterogenních jedinců z různých míst po celém světě = 3 295

EURO nepříbuzných účastníků evropského původu 3 542

Obě skupiny byly odděleně náhodně rozděleny do tréninkových, validačních a testovacích sad.

Fenotypizace obličeje





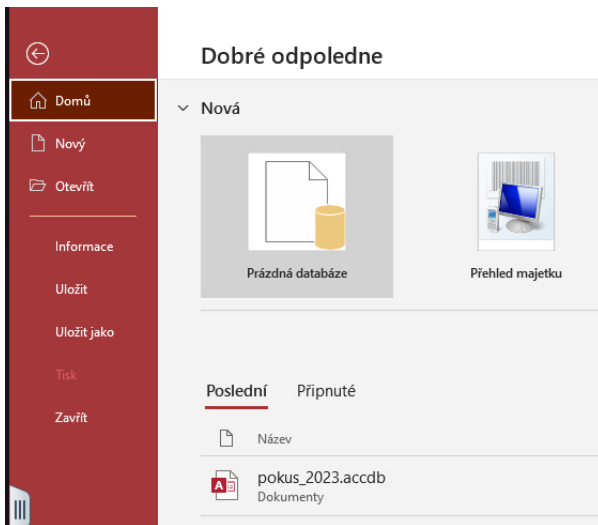
Z DNA obličej



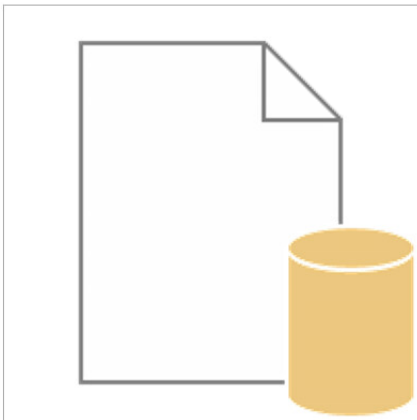
`https://www.google.com/search?channel=fs&client=ubuntu-sn&q=face+from+DNA+#fpstate=ive&vld=cid:cfdd6bf1,vid:Nh4ME_16oLA,st:0`

MS Access

Vytvoření nové databáze



Vytvoření nové databáze



Prázdná databáze

Název souboru

pokus2.accdb

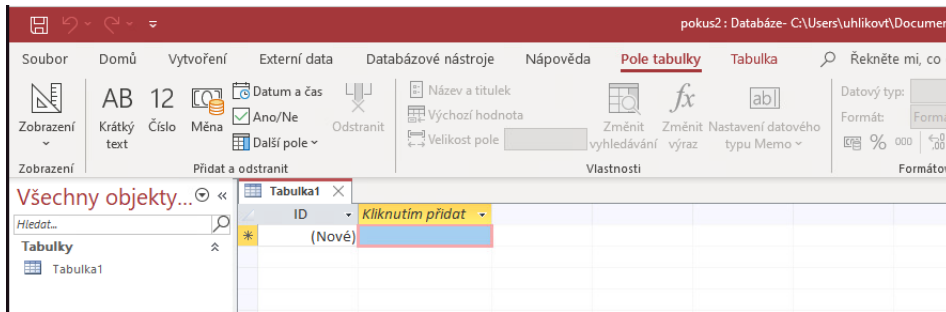


C:\Users\uhlikov\Documents\

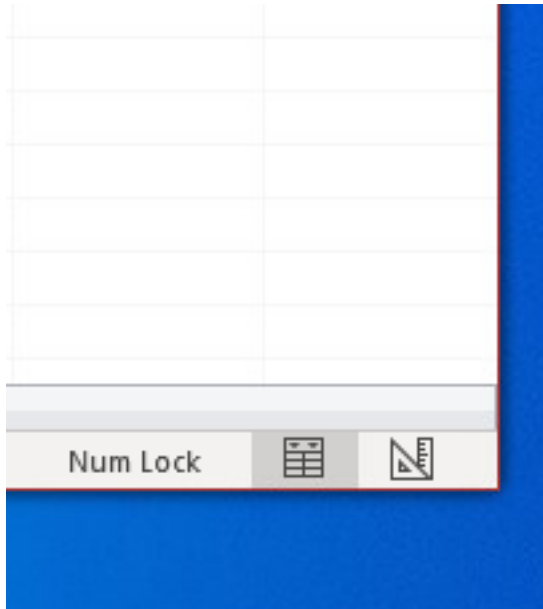


Vytvoření nové tabulky

vytvoření → Tabulka



Zobrazení datové x návrhové



Vlastnosti atributu

Nástroje vlastnosti makra

Zobrazit nebo skrýt Události ta

Název pole	Datový typ
ID	Automatické číslo
jmeno	Krátký text
prijmeni	Krátký text
skola	Krátký text

Obecný Vyhledávání	
Velikost pole	255
Formát	
Vstupní maska	
Titulek	
Výchozí hodnota	
Ověřovací pravidlo	
Ověřovací text	
Je nutno zadat	ano
Povolit nulovou délku	ano
Indexovat	ne
Komprese kódu Unicode	ano
Režim editoru IME	Bez kontroly
Větný režim editoru IME	No Conversion
Zarovnání textu	Obecně

Podokno. F1 = Nápověda.

Datový typ

pokus_2023 : Databáze- C:\Users\uhlikovt\Documents\pokus_2023.accdb (Formát souborů Access)

Externí data Databázové nástroje Návoděda Pole tabulky Tabulka Řekněte mi, co chcete dělat

Průvodce formulářem
Návrh dotazů Průvodce formulářem
Formulář Návrh formuláře Prázdný formulář Navigace
Další formuláře

Sestava Návrh sestavy Prázdná sestava Šablona

Dotazy Formuláře Sestavy

clanek x autor x Tabulka1 x

ID	nazev	prvni_autor	pocet_autor	pocet_z_vsc	pocet_mimc	casopis_fk
1	ambrox	Uhlikova				
(Nové)						

Zadaná hodnota se neshoduje s datovým typem Číslo v tomto sloupci.
Zadejte novou hodnotu.
Převeďte data v tomto sloupci na datový typ Text.
[Nápověda k datovým typům a formátům](#)

Vytvoření relací

pokus_2023 : Databáze- C:\Users\uhlikovt\Documents\poku

Soubor Domů Vytvoření Externí data Databázové nástroje Nápo věda Pole tabulky Ta

Zkomprimovat a opravit databázi Visual Basic Spustit makro Relace Závislosti objektů Dokumentace databáze Analýza výkonu Analýza tabulky Databáze aplikace Access SharePoint Dop

Nástroje Makro Relace Analyzovat Přesunout data Dop

Všechny objekty... << >>

Hledat...

Tabulky

- autor
- casopis
- clanek

ID	nazev	prvni_autor	pocet_autor	pocet_z_vsc
1	ambroxol	1	5	
* (Nové)		0	0	

Vytvoření relací

The screenshot shows the Microsoft Access application window titled 'pokus_2023 : Databáze- C:\Users\uhlikova\Documents\pokus_2023.accdb (Formát souborů Accessu 2007-2016) - Access'. The user is 'Uhlíková Tereza'. The 'Návrh relací' (Relationship Design) tab is active. The ribbon includes 'Soubor', 'Domů', 'Vytvoření', 'Externí data', 'Databázové nástroje', 'Nápověda', and 'Návrh relací'. The 'Návrh relací' ribbon has buttons for 'Vymazat rozložení', 'Přidat tabulky', 'Přímé relace', 'Všechny relace', 'Sestava relací', 'Skrýt tabulku', and 'Zavřít'. The 'Všechny objekty...' (All Objects) pane on the left shows a list of tables: 'autor', 'casopis', and 'clanek'. The 'clanek' table is selected. The main workspace shows three table schemas: 'autor' (ID, jmeno, prijmeni, skola), 'casopis' (ID, vydavatelstvi, riv_bodu, nazev, impact_factor), and 'clanek' (ID, nazev, prvni_autor_fk, pocet_autor, pocet_z_vycht, pocet_mimo). The 'Přidat tabulky' (Add Tables) pane on the right shows a search bar and a list of tables: 'autor', 'casopis', and 'clanek'. The status bar at the bottom indicates 'Hotovo' (Finished) and 'Num Lock'.

Vytvoření relací

pokus_2023 : Databáze- C:\Users\uhlikovt\Documents\pokus_2023.accdb (Formát souborů Accessu 2007–2016) -

obrazové nástroje Nápověda Návrh relací 🔍 Řekněte mi, co chcete udělat

řít

casopis

Upravit relace ? X

Tabulka nebo dotaz: **autor** Propojená tabulka/dotaz: **clanek**

ID	prvni_autor_fk

☐ Zajistit referenční integritu

☐ Kaskádová aktualizace souvisejících polí

☐ Kaskádové odstranění souvisejících polí

Typ relace: 1:N

OK

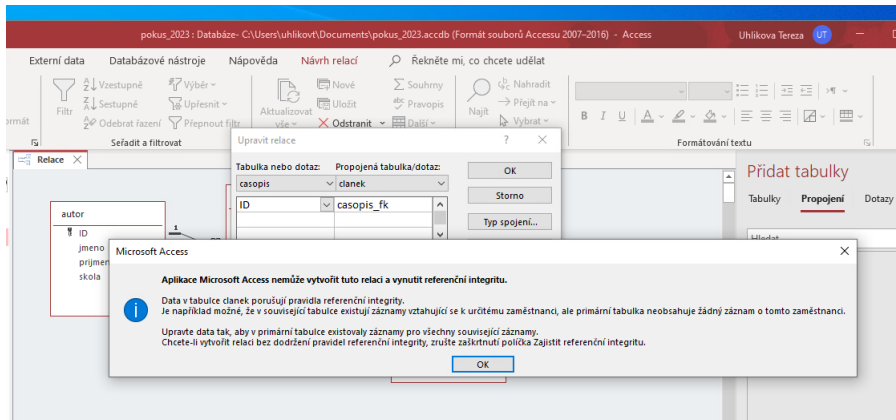
Storno

Typ spojení...

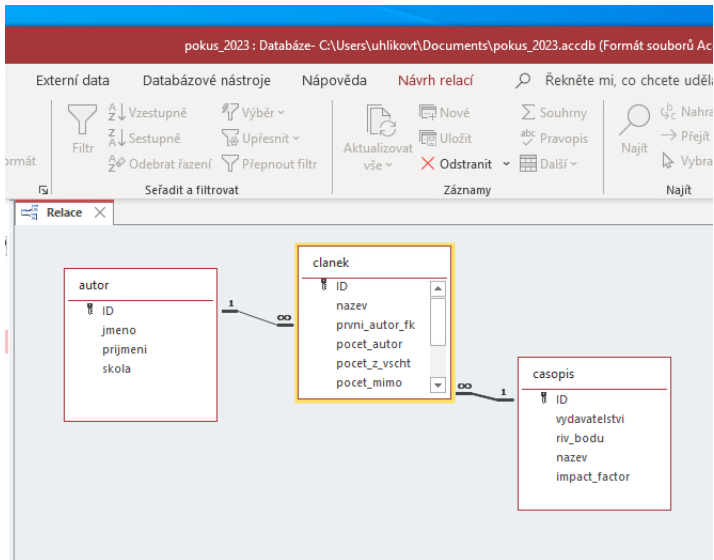
Vytvořit novou...

nazev
impact_factor

Vytvoření relací



Vytvoření relací



doplňování záznamů - pole se seznamem

Relace X clanelek X

Název pole	Datový typ
ID	Automatické číslo
nazev	Dlouhý text
prvni_autor_fk	Číslo
pocet_autor	Číslo
pocet_z_vscht	Číslo
pocet_mimo	Číslo
casopis_fk	Číslo
rok	Datum a čas
citace	Dlouhý text
...	...

Obecný Vyhledávání

Zobrazit ovládací prvek	Pole se seznamem
Typ zdroje řádků	tabulka nebo dotaz
Zdroj řádků	
Vázaný sloupec	1
Počet sloupců	1
Hlavičky sloupců	ne
Šířky sloupců	
Počet řádků seznamu	16
Šířka seznamu	automatická
Omezit na seznam	ne
Povolit více hodnot	ne
Povolit úpravy seznamu	ne
Formulář pro úpravu polí	

Propojení dvou tabulek pro doplňování záznamů

Relace X claneK X

Název pole	Datový typ
ID	Automatické číslo
nazev	Dlouhý text
prvni_autor_fk	Číslo
pocet_autor	Číslo
pocet_z_vscht	Číslo
pocet_mimo	Číslo
casopis_fk	Číslo
rok	Datum a čas
citace	Dlouhý text
casopis	Číslo

Obecný Vyhledávání

Zobrazit ovládací prvek	Pole se seznamem
Typ zdroje řádků	tabulka nebo dotaz
Zdroj řádků	
Vázaný sloupec	autor
Počet sloupců	casopis
Hlavičky sloupců	claneK
Šířky sloupců	
Počet řádků seznamu	16
Šířka seznamu	automatická
Omezit na seznam	ne
Povolit více hodnot	ne
Povolit úpravy seznamu	ne
Formulář pro úpravu polí	

šířka sloupců - vidět pouze čitelný sloupec

Relace X clanelek X autor X

Název pole	Datový typ
ID	Automatické číslo
nazev	Dlouhý text
prvni_autor_fk	Číslo
pocet_autor	Číslo
pocet_z_vscht	Číslo
pocet_mimo	Číslo
casopis_fk	Číslo
rok	Datum a čas
citace	Dlouhý text
...	...

Obecný Vyhledávání

Zobrazit ovládací prvek	Pole se seznamem
Typ zdroje řádků	tabulka nebo dotaz
Zdroj řádků	autor
Vázaný sloupec	1
Počet sloupců	3
Hlavičky sloupců	ano
Šířky sloupců	0,3cm
Počet řádků seznamu	16
Šířka seznamu	automatická
Omezit na seznam	ne
Povolit více hodnot	ne
Povolit úpravy seznamu	ne
Formulář pro úpravu pole	

prvni_autor se zobrazí jméno

Relace X **clanek** X autor X

ID	nazev	prvni_autor	pocet_autor	pocet
1	ambroxol	Uhlikova	5	
2	vinylketen	Koucky	0	
4	aa	Uhlikova	0	
5	kk	Rohlicek	0	
*	(Nové)		0	

propojíme i časopis

Relace X **clanek** X autor X casopis X

Název pole	Datový typ
ID	Automatické číslo
nazev	Dlouhý text
prvni_autor_fk	Číslo
pocet_autor	Číslo
pocet_z_vscht	Číslo
pocet_mimo	Číslo
casopis_fk	Číslo
rok	Datum a čas
citace	Dlouhý text
...	...

Obecný Vyhledávání

Zobrazit ovládací prvek	Pole se seznamem
Typ zdroje řádků	tabulka nebo dotaz
Zdroj řádků	casopis
Vázaný sloupec	1
Počet sloupců	2
Hlavičky sloupců	ne
Šířky sloupců	0cm;2cm
Počet řádků seznamu	16
Šířka seznamu	automatická
Omezit na seznam	ano
Povolit více hodnot	ne
Povolit úpravy seznamu h	ne
Formulář pro úpravu polí	

Relace X **clanek** X autor X casopis X

ID	nazev	prvni_autor	pocet_autor	pocet_z_vsc	pocet_mimic	casopis_fk	rok
1	ambroxol	Uhlíkova	5	4	1	J mol spec	01.11..
2	vinylketen	Koucky	0	0	0	J chem phys	
4	aa	Uhlíkova	0	0	0	J chem phys	
5	kk	Rohlíček	0	0	0	chem select	
6	nn	Uhlíkova	0	0	0	PCCP	
*	(Nové)		0	0	0		

Umožňuje kontrolovat vkládané hodnoty. Určuje formát ve kterém se tato pole budou zadávat.

Výchozí hodnota - např. letošní rok 2023

Ověřovací pravidlo - hodnota musí splňovat nějakou podmínku

Ověřovací text - to co uvidí uživatel, když zadá špatnou hodnotu

Zadávání rodného čísla

datový typ: text → vstupní maska

Průvodce vstupní maskou

Která vstupní maska odpovídá požadovanému vzhledu dat?

Pokud chcete zjistit, jak vybraná maska funguje, použijte pole Zkouška.

Seznam Vstupní maska změňte kliknutím na tlačítko Upravit seznam.

Vstupní maska:	Vzhled dat:
Telefon	(56105) 934
PSČ	155 00
Rodné číslo	541109/1234
Heslo	*****
Čas (dlouhý)	0:00:00
Datum (krátké)	27.09.1969

Zkouška:

Upravit seznam Storno < Zpět Další > Dokončit

Vlastnosti pole

Obecný	Vyhledávání
Velikost pole	255
Formát	
Vstupní maska	
Titulek	
Výchozí hodnota	
Ověrací pravidlo	
Ověrací text	
Je nutno zadat	ne
Povolit nulovou délku	ano
Indexovat	ne
Kompresce kódu Unicode	ano
Režim editoru IME	Bez kontroly
Větný režim editoru IME	No Conversion
Zarovnání textu	Obecně

Vzorový tvar pro všechna data, která budou vložena do tohoto pole

Seznam vlastností

Typ výběru: Vlastnosti tabulky

Obecný

Vnořený datový list rozvízen	ne
Výška vnořeného datového listu	0cm
Orientace	zleva doprava
Popis	
Výchozí zobrazení	Datový list
Ověrací pravidlo	
Ověrací text	
Filtr	
Řadit podle	
Název vnořeného datového listu	[Auto]
Podřízená propojovací pole	
Řídicí propojovací pole	
Filtrovat při zavedení	ne
Řadit podle hodnoty Při zavedení ano	
Zapnout řazení	0

datový typ při zadávání barev jako RGB

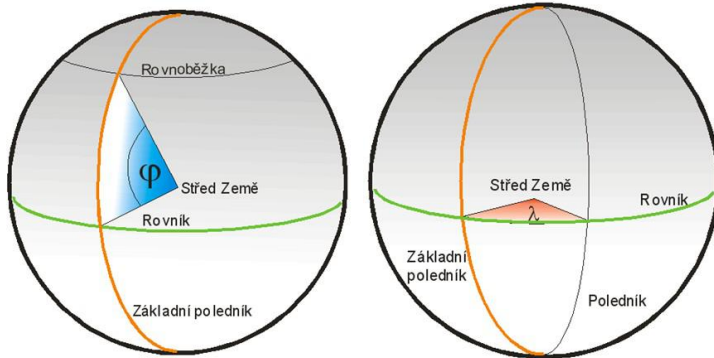
name	hexCode	red10	green10	blue10
acid green	#B0BF1A	176	191	26
Amaranth purple	#AB274F	171	39	79
Canary yellow	#FFEF00	255	239	0

name	hexCode	refFraction	greenFrac	blueFrac
acid green	#B0BF1A	0.69	0.75	0.1
Amaranth purple	#AB274F	0.67	0.15	0.31
Canary yellow	#FFEF00	1	0.94	0

<https://www.back4app.com/database/back4app/rgb-color-codes-and-names/color-dataset-via-api>

<https://encycolorpedia.com/ffef00>

zeměpisná šířka & zeměpisná délka



Jako GPS šířka: Decimal(8,6), délka: Decimal(9,6)
formát bude vypadá takto ##.##### and ###.#####
přesnost polohy ~ 10 cm

Formuláře - přidat existující pole

2023.accdb (Formát souborů Accessu 2007–2016) - Access

Uspořádání Formát Řekněte mi, co chcete udělat

Logo
Název
Datum a čas

Přidat existující pole
Seznam vlastností ovládacích prvků
Pořadí
Nastavení grafu

Podformulář v novém okně
Zobrazit kód
Převést makra formuláře do Visual Basicu

Záhlaví nebo zápatí

Nástroje

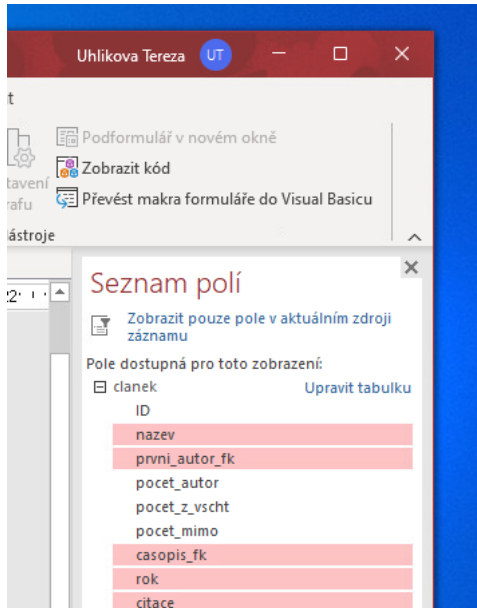
Seznam polí

 Zobrazit pouze pole v aktuálním zdroji záznamu

Pole dostupná v jiných tabulkách:

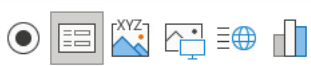
 autor	Upravit tabulku
 casopis	Upravit tabulku
 clanek	Upravit tabulku

Formuláře - seznam polí převedu myši



seznam se objeví ve formuláři

Externí data Databázové nástroje Nápopvěda **Návrh formuláře**



Vložit obrázek ▾ Vložit moderní graf ▾

Ovládací prvky

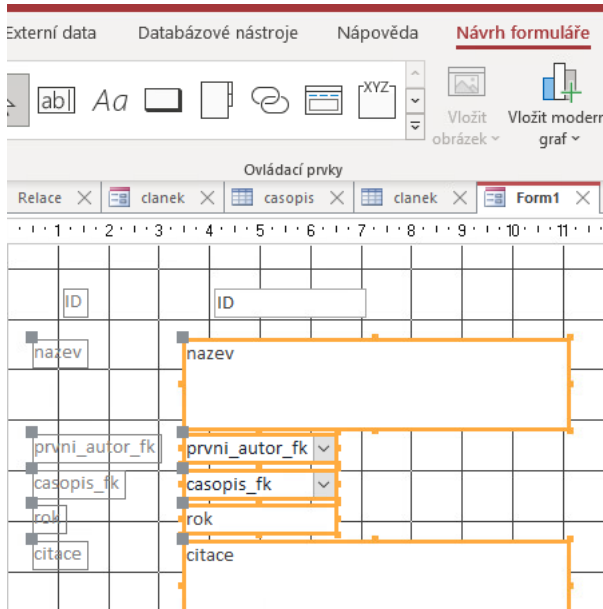
Relace × claneek × casopis × claneek × formular s v

1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11

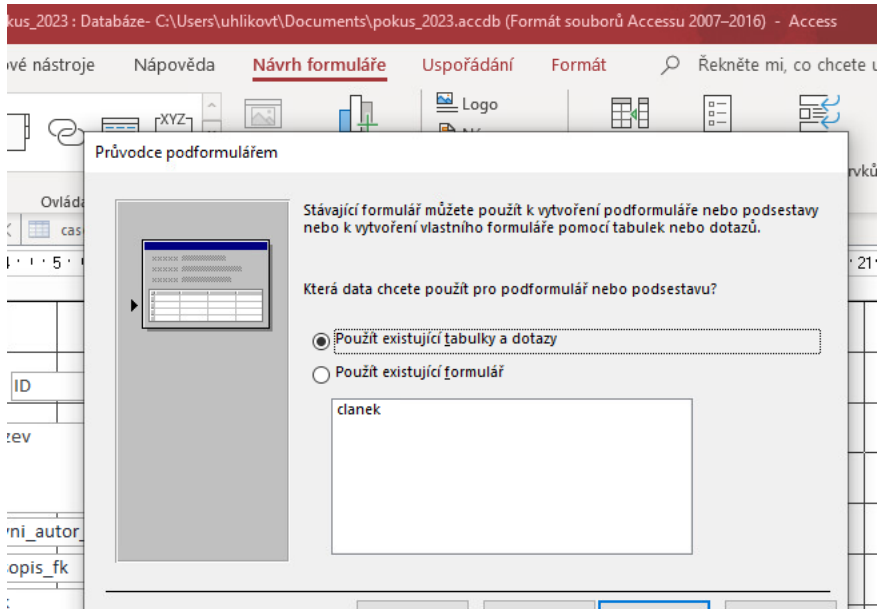
Podrobnosti

ID	ID
nazev	nazev
prvni_autor_fk	prvni_autor_fk ▾
casopis_fk	casopis_fk ▾
rok	rok
citace	citace

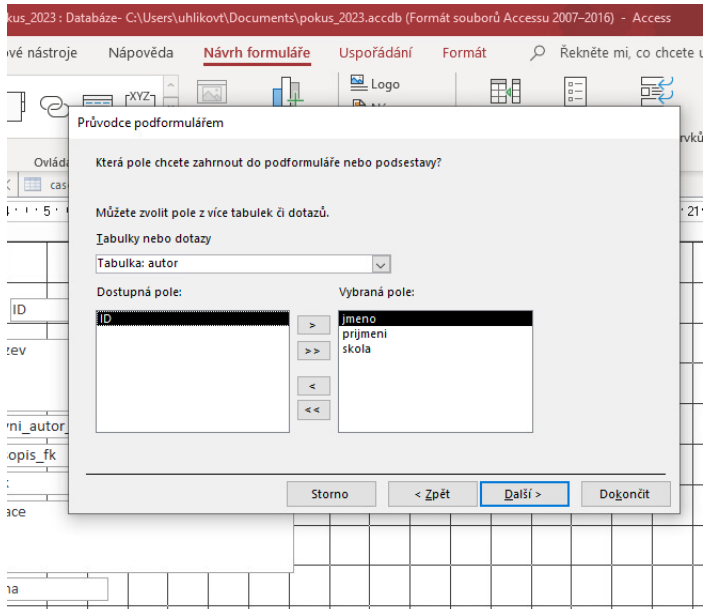
Uspořádávání pomocí myši



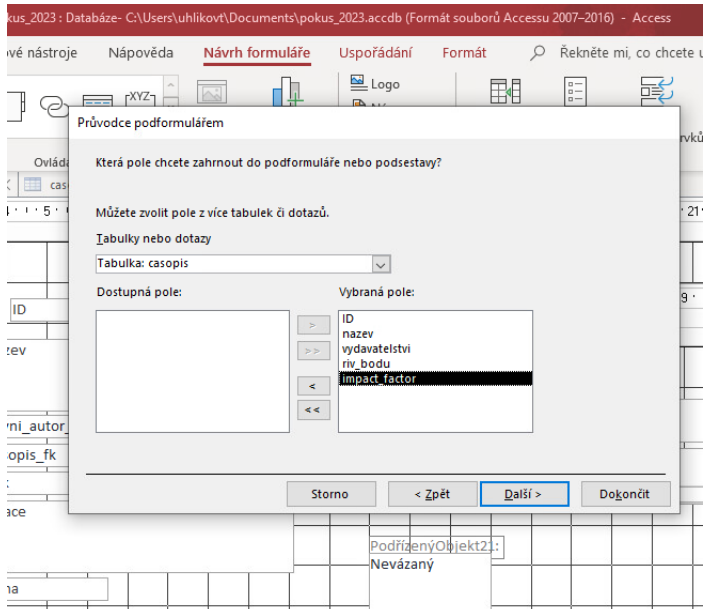
Přidat podformulář



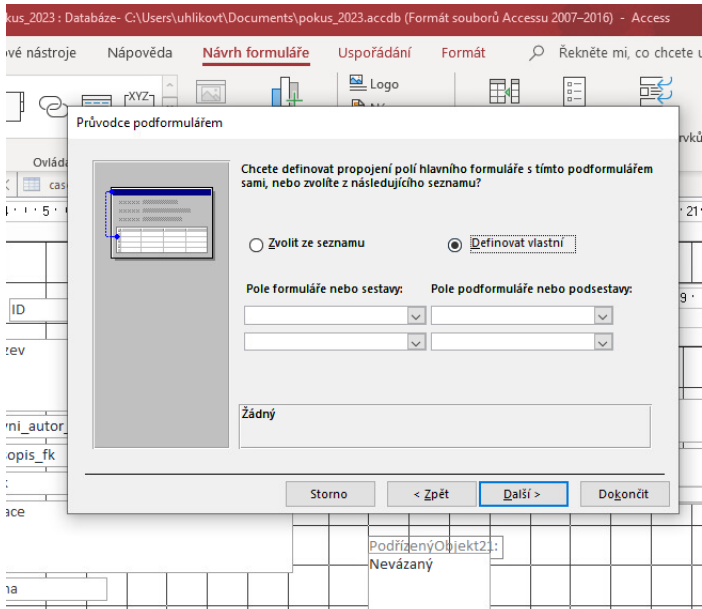
podFormulář - vybrat data z tabulky



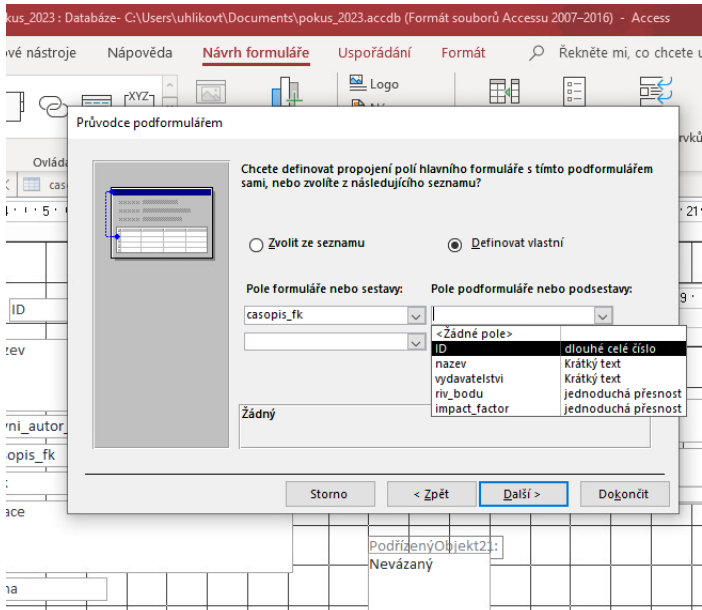
podFormulář 2 - vybrat data z tabulky



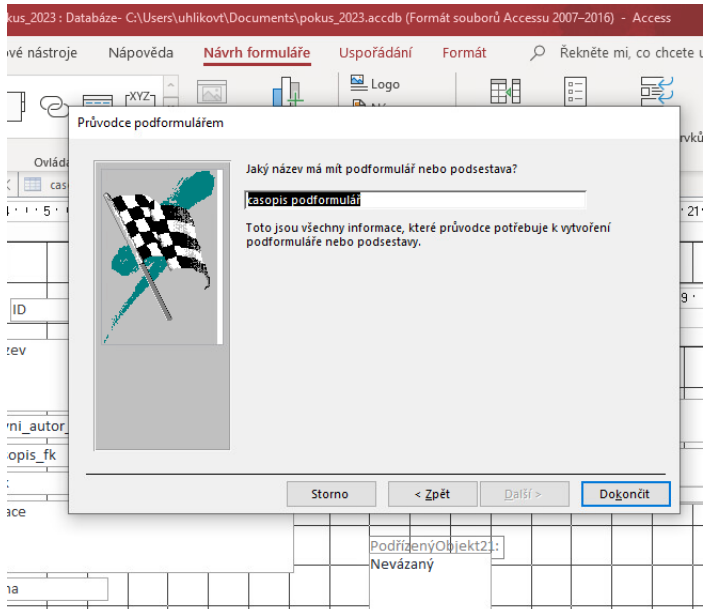
podFormulář - definovat propojení



podFormulář - přes ID a FK



podFormulář 2 - dokončit



Hlavní formulář a dva podformuláře

Seřadit a filtrovat Záznamy Najít Formátování textu

Relace × clanek × casopis × clanek × **formular s vyberem** × autor ×

Podrobnosti

ID	ID
nazev	nazev
prvni_autor_fk	prvni_autor_fk
casopis_fk	casopis_fk
rok	rok
citace	citace
cena	cena

autor podformular1

Záhlaví formuláře
Podrobnosti

ID	ID
jmeno	jmeno
prijmeni	prijmeni

casopis podformular1

Záhlaví formuláře
Podrobnosti

ID	ID
nazev	nazev
vydavatelstvi	vydavatelstvi

Zobrazení pro uživatele - přidávání

Seřadit a filtrovat | Záznamy | Najít | Formátovat

Relace x | clanek x | casopis x | clanek x | formular s vyberem x | autor x

ID

nazev

prvni_autor_fk

casopis_fk

rok

citace

cena

autor podformulář1

ID	jmeno	prijmeni
3	Jan	Rohlicek
* (Nové)		

Záznam: 1 z 1 | Bez filtru | Vyhledávání

casopis podformulář

ID	nazev	vydavatel
1	chem select	Wiley-VCH
* (Nové)		

Záznam: 1 z 1 | Bez filtru | Vyhledávání

Zobrazení pro uživatele - výběrání

Seřadit a filtrovat Záznamy Najít Formátovat

Relace × casopis × **formular s vyberem** ×

ID

nazev

prvni_autor_fk

casopis_fk

rok

citace

cena

autor podformulář1

ID	jmeno	prijmeni
3	Jan	Rohlicek
* (Nové)		

Záznam: 1 z 1 Bez filtru Vyhledávání

casopis podformulář

ID	nazev	vydavatel
1	chem select	Wiley-VCH
* (Nové)		

Záznam: 1 z 1 Bez filtru Vyhledávání

access Romana Sováková - youtube videa

např. <https://www.youtube.com/watch?v=XAwV193fwdA>

<https://edu.gcfglobal.org/en/access2013>

Karel kohout access - youtube videa

např. <https://www.youtube.com/watch?v=LaNf1iEeznY>

<https://www.youtube.com/watch?v=mAMBOXzltng> validation email address