

# Databáze v chemické a forenzní analýze

Tereza Uhlíková

March 17, 2026

doc. Mgr. Tereza Uhlíková, Ph.D.

Ústav analytické chemie

skupina teoretické spektroskopie

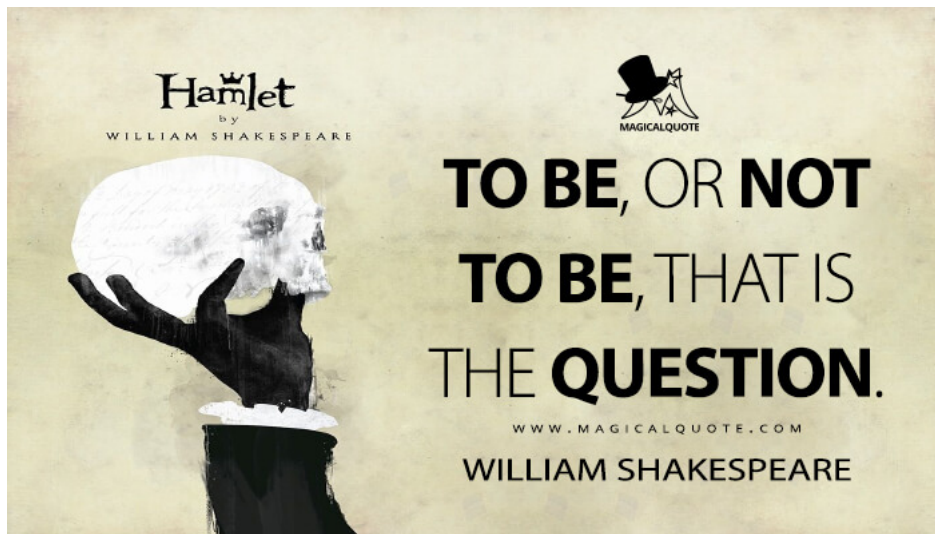
místnost B4337

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

[tereza.uhlikova@vscht.cz](mailto:tereza.uhlikova@vscht.cz)

# O čem to bude?

		Téma přednášky	Téma cvičení
5	17.3.	Základní principy AI	otázky - odpovědi - učení
6	24.3.	Použití ML	Algoritmy ML
7	31.3.	Chemické databáze	Analýza spekter pomocí databází
8	7.4.	Chemické databáze	Konkrétní použití ML
9	14.4.	Konkrétní použití ML, Forezní databáze - zkušková témata	
10	21.4.	opakování, ERA, normalizace, tvorba MS databáze	
11	28.4.	Ivan Raich	
12	5.5.	Ivan Raich	



## Pár otázek pro začátek

Co je to normalizace? Druhá věta termodynamiky. Co je to Primární klíč? Kde leží město Slunce? Na co se používá Cizí klíč? Jak se tvoří Relace? Co si představíte pod pojmem umělá inteligence? Co je to Entita? Jak hluboko se dostaneme, když používáme Hlubkové učení? Co znamená Tabulka v relačních databázích? Co znamená atomická hodnota? Čeho je zkratka NIST? Kdo všechno se podílí na tvorbě databáze? Jak často používáte ChatGPT? Co je to Systém Řízení Báze Dat? Co znamená zkratka SQL? Co je to Acces? Jaký je princip RSA šifry? Jaký je princip Starkova jevu? Jak se jinak nazývá sloupec tabulky? V čem je hrozba kvantových počítačů? Jaké znáte datové typy? Co zapisujeme do řádku tabulky? Co znamená ERA? Jaké máme druhy integrity? Druhá sloka písňe "Kde domov můj". Co znamená kardinalita vztahu? Jaké znáte Forezní databáze? Jaké znáte Chemické databáze? Jaké znáte Spektroskopické databáze? Co je to Perceptron? Kdo to byl Alan Turing? Co je to Qbit? Jak postupujete při hledání odpovědí? Jak postupuje počítač při hledání?

# 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

1950's	 <b>Artificial intelligence (AI)</b> <i>Human intelligence exhibited by machines</i>
1980's	 <b>Machine learning</b> <i>AI systems that learn from historical data</i>
2010's	 <b>Deep learning</b> <i>Machine learning models that mimic human brain function</i>
2020's	 <b>Generative AI (Gen AI)</b> <i>Deep learning models (foundation models) that create original content</i>

# Jak to začalo?

1642 Blaise Pascal kalkulačka

1837 Charles Babbage programovatelný mechanický stroj (na páru)

1943 Warren McCulloch a Walter Pitts podobnost mezi lidským mozem 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

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

- 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](https://www.youtube.com/watch?v=-e1_QhJ1EhQ)  
<https://www.youtube.com/watch?v=v8UaiRgqvlc>
- 2025 Jaké příklady najdete vy?

**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.

existují 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

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).

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:

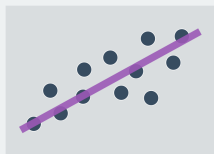
- Rozpoznávání obrazu (např. Google Photos, Facebook tagy).
- Prediktivní modely (např. předpověď počasí, detekce podvodů).
- Překladače (např. Google Translate).

# Hlavní rozdíly mezi Symbolickou AI a Strojovým učením

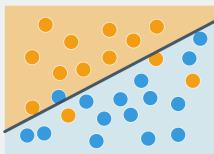
<b>Faktor</b>	<b>Symbolická AI</b>
Přístup	Pravidla a logika
Způsob rozhodování	Explicitní pravidla
Potřeba dat	Nízká (ruční programování)
Přizpůsobivost	Slabá (musí se upravovat pravidla)
Vysvětlitelnost	Vysoká (každý krok je jasný)
Příklady použití	Expert Systems, logické úlohy

<b>Faktor</b>	<b>Strojové učení</b>
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

- **regrese** = odhad číselné hodnoty (Jak bude daný uživatel hodnotit daný film? Jaká bude teplota zítra odpoledne?)
- **klasifikace** = určování příslušnosti k jedné z několika předem daných kategorií (Je daný e-mail spam? Která kytka je na fotce?)
- **shlukování** = rozdělení příkladů do skupin s podobnými vlastnostmi (Které zprávy řeší podobné téma? Které chemické látky se chovají podobně?)
- **hledání anomálií** = upozornění na podezřelé příklady, které se výrazně liší od zbytku dat (detekce případů, kdy bankovní účet nevyužívá jeho skutečný majitel)
- **řazení (ranking)** = uspořádání příkladů (seřazení výsledků vyhledávání, seřazení doporučených videí)
- **generování** = vytvoření textu nebo obrázku na základě jiného textu nebo obrázku (odpovídání na otázky, strojový překlad, vygenerování popsaného obrázku)
- **řízení** = hledání strategie pro optimální rozhodování (hraní šachů a podobných her, řízení autonomního auta)



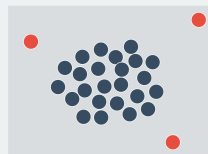
regrese



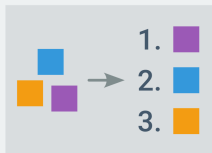
klasifikace



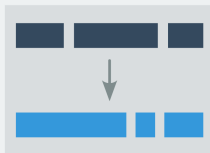
shlukování



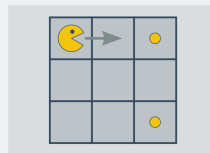
detekce anomálií



řazení (ranking)

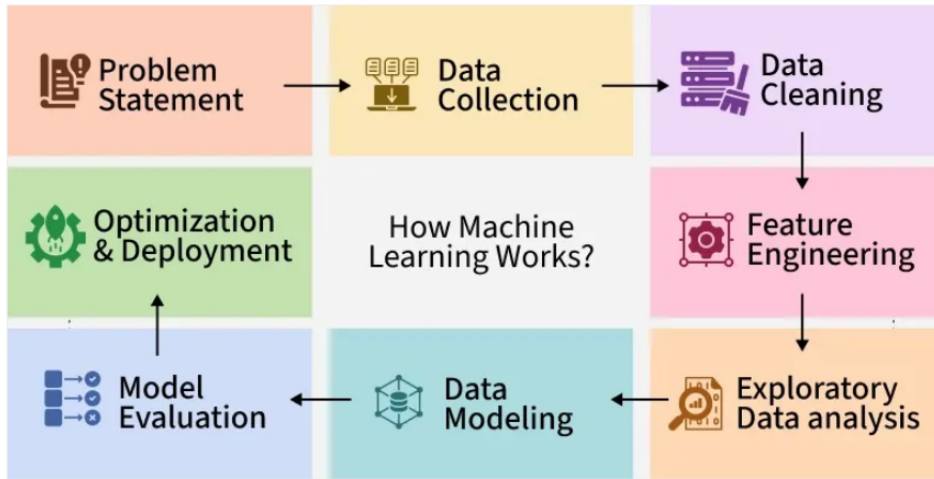


generování



řízení

# Jak probíhá učení



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

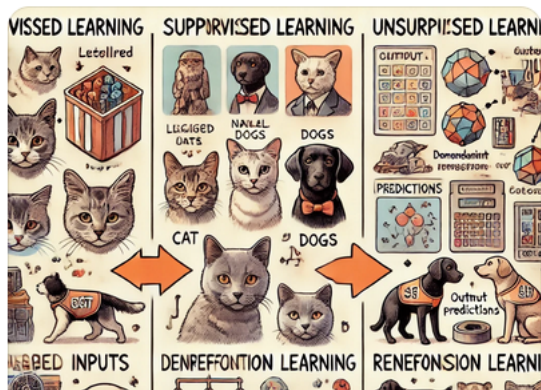
- Reaktivní stroje (Reactive Machines) - Nemají paměť, reagují pouze na aktuální vstup. Příklad: IBM Deep Blue (šachový program).
- AI s omezenou pamětí (Limited Memory AI) - Používá minulé zkušenosti ke zlepšení rozhodování. Příklad: Samořídící auta (pracují s předchozími dopravními daty).
- Pravidlová 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.

- 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.

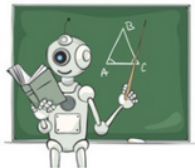
# Dělení úzké AI - Podle způsobu učení

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 learning** approaches.

Generating now... 🎨🖌️



# Dělení úzké AI - Podle způsobu učení



**Supervised Learning**

VS



**Unsupervised Learning**

VS



**Reinforcement Learning**

**Princip:** Model se učí z dat, kde každý příklad má vstup (features) a správnou odpověď (label). Task Driven

**Cíl:** Najít funkci, která dokáže správně předpovídat výstup pro nové příklady.

**Typické úlohy:**

Regrese: předpověď čísel (cena domu, teplota, spotřeba)

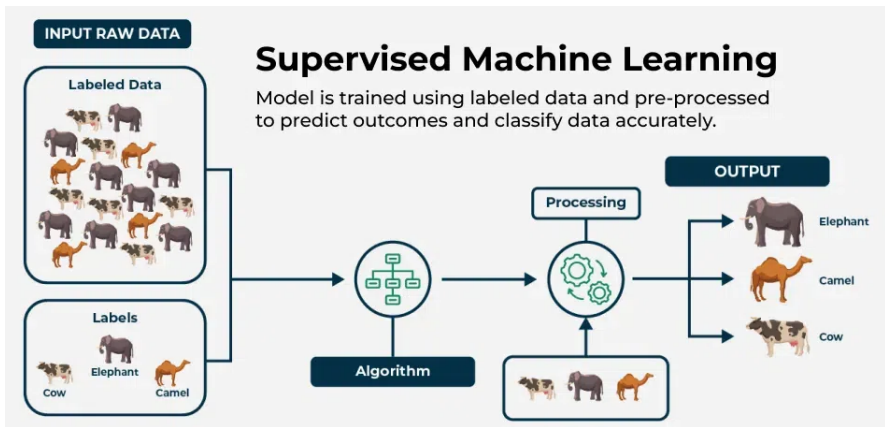
Klasifikace: přiřazení kategorie (spam/nespam, druh květiny)

**Jak to funguje:** Model se učí minimalizovat chybu mezi předpovědí a známým správným výsledkem. Vyžaduje anotovaná (označená) data.

**Výhody:** přesnější a kontrolovatelná predikce.

**Nevýhody:** získání anotovaných dat je drahé/časově náročné.

# Učení s učitelem (Supervised Learning ML)



# Učení bez učitele (Unsupervised Learning ML)

**Princip:** Data nemají žádné štítky – model se sám snaží najít strukturu.

Data driven

**Cíl:** Objevit vzory, skupiny, podobnosti nebo skryté struktury.

**Typické úlohy:**

Shlukování (clustering): seskupování podobných objektů (segmentace zákazníků)

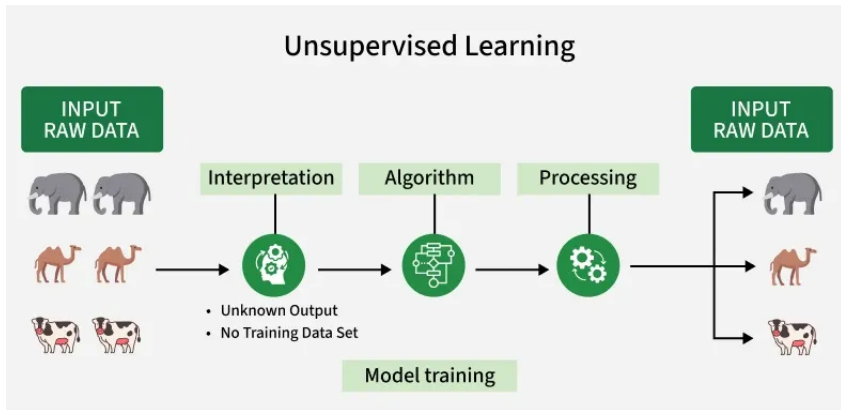
Snížení rozměrnosti: nalezení hlavních směrů variability (např. PCA)

**Jak to funguje:** Model vyhledává podobnosti, vzdálenosti nebo latentní faktory.

**Výhody:** nepotřebuje anotace.

**Nevýhody:** výsledky je těžší interpretovat a ověřovat.

# Učení bez učitele (Unsupervised Learning ML)



**Princip:** Agent se učí interakcí s prostředím. Learning from mistakes

**Cíl:** Získat strategii (policy), která maximalizuje celkovou odměnu.

**Klíčové pojmy:**

**Agent:** kdo se učí (robot, software, hráč)

**Prostředí:** svět, ve kterém agent jedná

**Akce:** co agent může udělat

**Odměna (reward):** zpětná vazba, zda byla akce dobrá nebo špatná

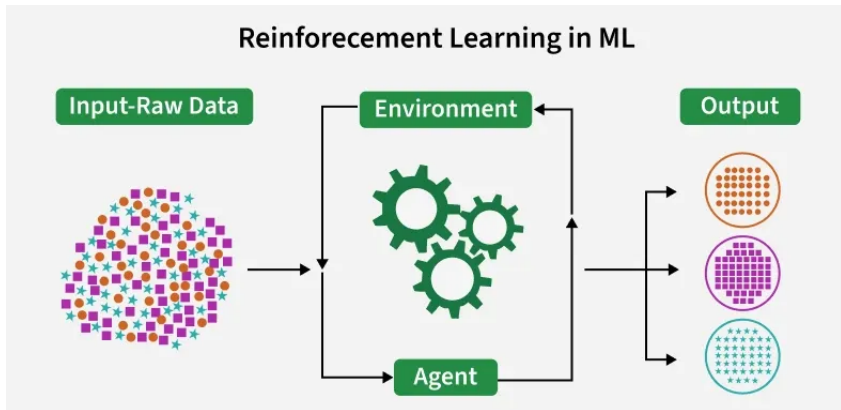
**Stav (state):** konfigurace prostředí v daném okamžiku

**Typické úlohy:** hry (šachy, Atari), robotika, optimalizace.

**Výhody:** zvládá sekvenční rozhodování.

**Nevýhody:** dlouhé učení, nutnost simulací nebo bezpečné interakce.

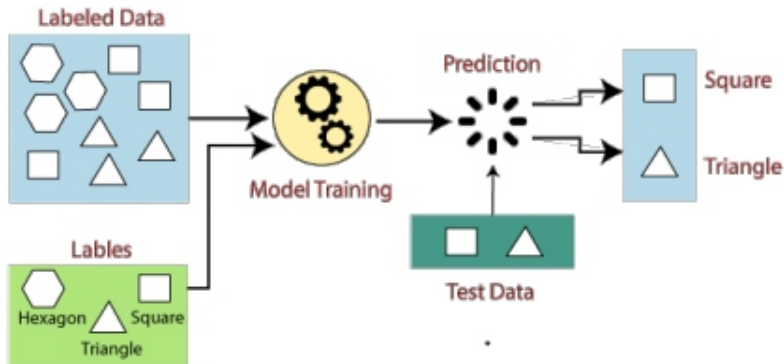
# Posilovaném učení (Reinforcement Learning ML)



# Společná práce - Učení s učitelem

Vstup: data a štítky

Úkol: navrhnout pravidla, která podle znaků správně klasifikují geometrické tvary



testování

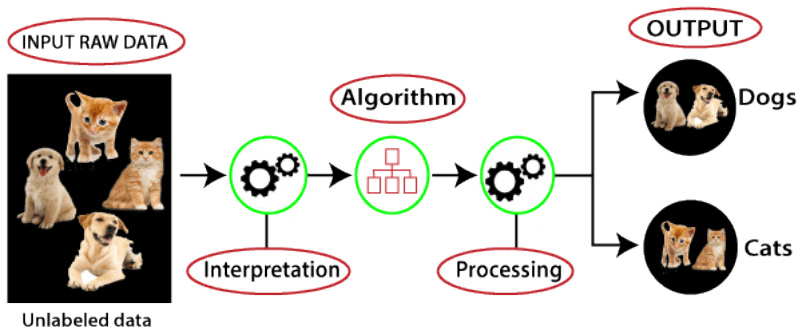
# Společná práce - Učení bez učitele

Učení bez učitele – "Najdi skryté skupiny"

Vstup: sada zvířat se znaky. Bez štítků!

Úkol: rozdělit zvířata do přirozených skupin (clusters), aniž by jste věděli, jaké kategorie existují.

Poté vysvětlit, podle čeho jste skupiny vytvořily



## **Supervised Learning (Učení s učitelem)**

Používá označená (labeled) data

K natrénování modelu potřebuje „dozor“ – tedy správné odpovědi

Má vstupní příznaky (features) a odpovídající štítky (labels)

Předpovídá nebo klasifikuje data na základě tréninku

Cílem je minimalizovat chyby v předpovědích

Mezi typické metody patří regrese a klasifikace

Vyhodnocuje se pomocí metrik jako přesnost (accuracy), preciznost (precision), citlivost (recall)

Příklad: filtrování spamů, diagnostika v medicíně, klasifikace obrázků

## **Unsupervised Learning (Učení bez učitele)**

Používá neoznačená (unlabeled) data

K natrénování modelu nepotřebuje žádný dozor ani správné odpovědi

Pracuje pouze se vstupními příznaky

Objevuje vzory, vztahy nebo shluky v datech

Cílem je najít v datech vnitřní struktury nebo vztahy

Typické metody zahrnují shlukování (clustering) a snižování rozměrnosti (dimensionality reduction)

Hodnocení se zaměřuje na strukturu, podobnost nebo detekci anomálií

Příklad: doporučovací systémy, detekce anomálií

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/>

nejpoužívanější algoritmy strojového učení

[https://s3.amazonaws.com/assets.datacamp.com/email/other/ML+Cheat+Sheet\\_2.pdf](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>