



## ZADÁNÍ BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

**Název:** Databáze nebezpečných chemických látek  
**Student:** Mgr. Markéta Wachtlová  
**Vedoucí:** Ing. Jiří Mlejnek  
**Studijní program:** Informatika  
**Studijní obor:** Softwarové inženýrství  
**Katedra:** Katedra softwarového inženýrství  
**Platnost zadání:** Do konce zimního semestru 2018/19

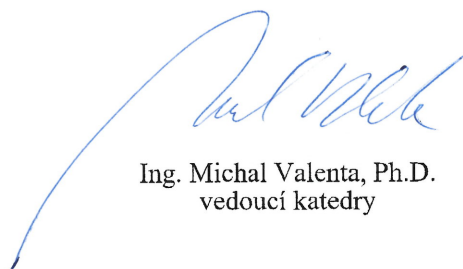
### Pokyny pro vypracování

Cílem práce je navrhnout a implementovat aplikaci umožňující správu databáze nebezpečných chemických látek.

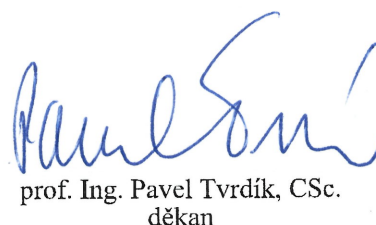
Popište současný způsob evidence nebezpečných chemických látek u zákazníka, popište používaný formát a typ uložených dat. Proveďte sběr požadavků na nové řešení. Na základě analýzy požadavků vyberte vhodný databázový systém a navrhnete vhodné schéma uložení dat. Implementujte databázi a vytvořte skripty pro převod dat z existujícího řešení do nové aplikace. Navrhnete a implementujte grafické uživatelské rozhraní pro vkládání a editaci záznamů nebezpečných chemických látek. Volba vhodné implementační platformy je součástí práce. Výsledné řešení otestujte.

### Seznam odborné literatury

Dodá vedoucí práce.



Ing. Michal Valenta, Ph.D.  
vedoucí katedry



prof. Ing. Pavel Tvrdík, CSc.  
děkan

V Praze dne 27. července 2017



ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE  
FAKULTA INFORMAČNÍCH TECHNOLOGIÍ  
KATEDRA SOFTWAREVÉHO INŽENÝRSTVÍ



Bakalářská práce

## **Databáze nebezpečných chemických látek**

*Mgr. Markéta Wachtlová*

Vedoucí práce: Ing. Jiří Mlejnek

15. května 2018



---

## Poděkování

Na tomto místě bych ráda poděkovala Ing. Jiřímu Mlejnkoví za odborné vedení, cenné rady a čas, který mi věnoval.



---

# Prohlášení

Prohlašuji, že jsem předloženou práci vypracovala samostatně a že jsem uvedla veškeré použité informační zdroje v souladu s Metodickým pokynem o etické přípravě vysokoškolských závěrečných prací.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona, ve znění pozdějších předpisů. V souladu s ust. § 46 odst. 6 tohoto zákona tímto uděluji nevýhradní oprávnění (licenci) k užití této mojí práce, a to včetně všech počítačových programů, jež jsou její součástí či přílohou, a veškeré jejich dokumentace (dále souhrnně jen „Dílo“), a to všem osobám, které si přejí Dílo užít. Tyto osoby jsou oprávněny Dílo užít jakýmkoli způsobem, který nesnižuje hodnotu Díla, a za jakýmkoli účelem (včetně užití k výdělečným účelům). Toto oprávnění je časově, teritoriálně i množstevně neomezené. Každá osoba, která využije výše uvedenou licenci, se však zavazuje udělit ke každému dílu, které vznikne (byť jen zčásti) na základě Díla, úpravou Díla, spojením Díla s jiným dílem, zařazením Díla do díla souborného či zpracováním Díla (včetně překladu), licenci alespoň ve výše uvedeném rozsahu a zároveň zpřístupnit zdrojový kód takového díla alespoň srovnatelným způsobem a ve srovnatelném rozsahu, jako je zpřístupněn zdrojový kód Díla.

V Praze dne 15. května 2018

.....

České vysoké učení technické v Praze  
Fakulta informačních technologií

© 2018 Markéta Wachtlová. Všechna práva vyhrazena.

*Tato práce vznikla jako školní dílo na Českém vysokém učení technickém v Praze, Fakultě informačních technologií. Práce je chráněna právními předpisy a mezinárodními úmluvami o právu autorském a právech souvisejících s právem autorským. K jejímu užití, s výjimkou bezúplatných zákonných licencí a nad rámec oprávnění uvedených v Prohlášení na předchozí straně, je nezbytný souhlas autora.*

### **Odkaz na tuto práci**

Wachtlová, Markéta. *Databáze nebezpečných chemických látek*. Bakalářská práce. Praha: České vysoké učení technické v Praze, Fakulta informačních technologií, 2018.



---

# Abstrakt

Cílem této práce je návrh a realizace aplikace umožňující správu databáze nebezpečných chemických látek. V práci je diskutován výběr vhodného databázového systému a schéma uložení dat. Výstupem praktické části jsou skripty pro převod dat z existujícího řešení do nové aplikace.

**Klíčová slova** databáze, chemická látka, návrh, aplikační rámec Django, Perl

---

# Abstract

The aim of this thesis is to design and implement an application allowing the management of a database of hazardous chemical substances. The thesis discusses the choice of a suitable database system and a data storage scheme. The output of the practical part are scripts for converting data from an existing solution into a new application.

**Keywords** database, chemical, design, framework Django, Perl

---

# Obsah

<b>Úvod</b>	<b>5</b>
<b>1 Analýza</b>	<b>7</b>
1.1 Současný způsob evidence . . . . .	7
1.2 Požadavky na nové řešení . . . . .	10
1.3 Model případů užití . . . . .	13
<b>2 Návrh</b>	<b>17</b>
2.1 Analýza databázových modelů . . . . .	17
2.2 Výběr databázového systému . . . . .	22
2.3 Relační datový model . . . . .	23
2.4 Výběr webového aplikačního rámce . . . . .	36
<b>3 Realizace</b>	<b>39</b>
3.1 Instalace komponent . . . . .	39
3.2 Aplikace pro správu databáze . . . . .	41
3.3 Importní skripty . . . . .	45
<b>4 Testování</b>	<b>47</b>
4.1 Testování importu a exportu . . . . .	47
4.2 Jednotkové a Selenium testy . . . . .	47
4.3 Testy použitelnosti . . . . .	47
<b>Závěr</b>	<b>49</b>
<b>Literatura</b>	<b>51</b>
<b>A Detailní popis současné evidence dat</b>	<b>57</b>
<b>B Ukázka vzhledu aplikace Meditor</b>	<b>73</b>



---

## Seznam obrázků

1.1	Přehled požadavků . . . . .	10
1.2	Návrh obrazovky se seznamem látek . . . . .	12
1.3	Návrh obrazovky pro editaci/přidání látky . . . . .	12
1.4	Případy užití . . . . .	13
2.1	Datový model – hlavní informace . . . . .	23
2.2	Datový model – pokyny pro případ nehody . . . . .	24
2.3	Datový model – dohody o přepravě nebezpečných věcí . . . . .	25
2.4	Datový model – fyzikálně-chemické vlastnosti . . . . .	26
2.5	Datový model – legislativní normy . . . . .	27
2.6	Datový model – CLP klasifikace . . . . .	28
2.7	Datový model – harmonizovaná CLP klasifikace a poznámky zpracovatele CLP . . . . .	29
2.8	Datový model – biologické limity a limity v rámci prevence havárií . . . . .	30
2.9	Datový model – hygienické limity a prahové hodnoty pro ohlašování znečišťujících látek v odpadech . . . . .	31
2.10	Datový model – mezní hodnoty pro prekurzory drog, limitní koncentrace látky v ovzduší, expoziční limity pro případy nehody . . . . .	32
2.11	Datový model – biocidní účinné látky . . . . .	32
2.12	Datový model – první pomoc . . . . .	33
2.13	Datový model – odkazy . . . . .	33
2.14	Datový model – testy toxicity . . . . .	34
2.15	Datový model – systém TRINS . . . . .	35
B.1	Ukázka vzhledu aplikace – seznam látek . . . . .	73
B.2	Ukázka vzhledu aplikace – formulář pro editaci látky . . . . .	74



---

# Seznam tabulek

4.1	Profily participantů testování použitelnosti aplikace . . . . .	48
-----	---	----





---

# Seznam vysvětlivek a použitých zkratk

- ADR** *Accord Dangereuses Route* – evropská dohoda o mezinárodní silniční přepravě nebezpečných věcí. [7](#), [8](#), [25](#), [26](#)
- AJAX** *Asynchronous JavaScript and XML* – technologie vývoje interaktivních webových aplikací, které mění obsah svých stránek bez nutnosti kompletního znovunačítání. [48](#)
- API** *Application Programming Interface* – rozhraní pro programování aplikací. [19](#), [38](#), [40](#)
- BDA** Interní identifikátor chemické látky. [10](#), [14](#)
- big data** Takové množství dat, které není možné v rozumném čase zpracovat běžně používanými softwarovými prostředky. [22](#)
- CAD** *Computer aided design* – počítačem podporované kreslení; CAD systémy se používají při tvorbě přesných výkresů. [19](#)
- CAS** Registrační číslo vytvářeno americkou Chemical Abstracts Service. [14](#), [24](#)
- CLP** *Classification, Labelling, Packaging* – nařízení 1272/2008/ES o klasifikaci, označování a balení látek a směsí. [7](#), [8](#), [24](#), [27](#)
- DSD** *Dangerous Substances Directive* – evropská směrnice 67/548/EHS o nebezpečných látkách. [8](#), [24](#)
- EEC** Registrační číslo chemikálií, vycházející z informačního systému zemí Evropské unie. [24](#)

**EINECS** Identifikační číslo vytvářeno EINECS – *European Inventory of Existing Commercial Chemical Substances*. 14, 24

**ERG** *Emergency Response Guidebook* – pokyny pro hasiče, policii a další osoby, které by mohly přijet jako první k dopravní nehodě, při které byla přítomna nebezpečná látka. 24

**ERIC** *Emergency Response Intervention Card* – pokyny pro zásah hasičů v případě nehody nebezpečné látky bez konkrétních a spolehlivých informací o nakládání s produktem. 24

**ERPG** *Emergency Response Planning Guidelines* – expoziční limity pro jednorázovou expozici chemickým látkám, které mohou být použity jako pomůcka při tvorbě plánů prevence nehod a pokynů pro případ nehody. 30

**GHS** *Globally Harmonized System of Classification and Labelling of Chemicals* – globálně harmonizovaný systém klasifikace a označování chemikálií. 29

**GUI** *Graphical User Interface* – grafické uživatelské rozhraní. 11

**HAZCHEM** Britské kódování Emergency Action Code, označované jako Hazchem kódy; obsahuje informace pro hašení a opatření v místě havárie v prvních minutách likvidace havárie, kde se vyskytly nebezpečné látky. 25

**HTTPS protokol** Internetový komunikační protokol, který umožňuje zabezpečenou komunikaci v počítačové síti. 11

**IATA** *International Air Transport Association* – dohoda o letecké přepravě nebezpečných věcí. 7, 8, 26

**IDE** *Integrated Development Environment* – vývojové prostředí. 38

**IMDG** *International Maritime Dangerous Goods* – evropská dohoda o mezinárodní přepravě nebezpečných věcí po moři. 7, 8, 26

**MVC** *Model-View-Controller* – architektonický vzor, který dělí aplikaci na 3 logické části. 37

**NoSQL** *Not Only SQL* – databáze, které nevycházejí z relačního datového modelu. 17

**plugin** Doplnkový modul jiné aplikace. 37

- REACH** *Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals* – nařízení 1907/2006/ES o registraci, hodnocení, povolování a omezení chemických látek. [24](#)
- RID** *Règlement concernant le transport international ferroviaire des marchandises dangereuses* – Řád pro mezinárodní železniční přepravu nebezpečných věcí. [7](#), [8](#), [26](#)
- SQL** *Structured Query Language* – standardizovaný strukturovaný dotazovací jazyk. [18](#)
- SQL-injection** Technika napadení databázové vrstvy vsunutím libovolného kódu přes neošetřený vstup do SQL příkazu. [11](#)
- TRINS** Transportní informační a nehodový systém. [34](#)
- wiki** Weby, které umožňují uživatelům přidávat vlastní obsah a měnit obsah stávající. [48](#)
- WSGI** *Web Server Gateway Interface* – rozhraní mezi webovým serverem a webovou aplikací nebo aplikačním rámcem v jazyce Python. [44](#)
- XHTML** *Extensible HyperText Markup Language* – rozšiřitelný hypertextový značkovací jazyk. [38](#)
- XML** *Extensible Markup Language* – rozšiřitelný značkovací jazyk. [5](#), [7](#), [17](#), [45](#)



---

# Úvod

Databáze Medis-Alarm, která v současné době obsahuje více než 10000 záznamů nebezpečných chemických látek, sestává ze dvou hlavních částí – samotných dat a aplikace pro jejich procházení. Aplikace je dílem externího spolupracovníka, který neřeší aktuálnost a správnost dat, ale data pouze zobrazuje tak, jak jsou mu předána. To se z historických důvodů uskutečňuje prostřednictvím textových souborů.

Společnost MEDISTYL, spol. s r.o., která je tvůrcem databáze, začala s jejím budováním již roku 1992. V té době bylo pro její pracovníky, převážně chemiky, nejsnazší evidovat informace o nebezpečných látkách v textových souborech. Soubory se upravovaly ručně, později pak pomocí skriptů. V pozdějších letech byly za účelem zjednodušení práce některé soubory převedeny do formátu [XML](#). Ten se však při každé aktualizaci opět konvertuje také do původních textových souborů, se kterými pracuje tvůrce aplikace.

Kvůli obrovskému množství záznamů je současný způsob evidence nedostačující, velmi pracně se udržuje a je náchylný ke vzniku chyb. Data v [XML](#) formě jsou přívětivější, přesto práce s nimi není tak komfortní jako s relační databází, která umožňuje snazší vyhledávání a propojování informací. Převod do relační databáze je motivován také širšími možnostmi využití dat při tvorbě dalších produktů.

**Cílem této práce je uskutečnění následujících bodů:**

- popis současného způsobu evidence nebezpečných chemických látek,
- sběr požadavků na nové řešení,
- výběr vhodného databázového systému,
- návrh schématu uložení dat,
- tvorba skriptů pro převod dat do navržené databáze,
- návrh a implementace aplikace pro vkládání a editaci sloučenin do databáze,
- testy výsledné aplikace.

---

# Analýza

V této kapitole popisují současný způsob evidence nebezpečných chemických látek, rozebírám požadavky na nové řešení a popisují model případů užití.

## 1.1 Současný způsob evidence

Aktuálně je databáze řešena pomocí dokumentů ve formátu Microsoft Excel, XML a textových souborů. Způsob zápisu v dokumentech ve formátu Microsoft Excel, které evidují například seznam položek dle předpisů [ADR](#), [RID](#), [IATA](#), [IMDG](#) či [CLP](#), asi není potřeba podrobně rozebírat, jelikož tato forma je velmi podobná tabulkám v relační databázi a v převodních skriptech bude struktura těchto souborů popsána.

Naproti tomu textové a XML soubory mají způsob zápisu dat velmi různorodý a vzhledem ke špatné a někde i chybějící dokumentaci bylo nejdříve potřeba pomocí metod reverzního inženýrství strukturu těchto souborů odhalit. Pro každý soubor jsem tedy vytvořila skript v jazyce Perl, pomocí kterého jsem načetla data z tohoto souboru. Takto načtená data jsem rozdělila na jednotlivé položky, u kterých jsem spolu se zadavatelem ověřila, jaké informace obsahují, a případně je opravila. Občas bylo nutné způsob zápisu i zcela předělat, což bylo časově poměrně náročné. Abych ověřila, že jsem načetla všechna data, přidala jsem posléze do skriptů část, která z těchto dat vygenerovala nové zdrojové soubory, které jsem porovnála s původními.

Kromě samotných dat jsou ve zdrojových souborech také speciální značky, které indikují tvůrci aplikace, že se data mají zobrazit určitým způsobem. Soubory obsahují spoustu duplicit, které měly v počátku zjednodušit práci, ale nyní ji naopak komplikují, protože je potřeba neustále data překopírovávat z jednoho souboru do jiného.

Popis spolu s ukázkami jednotlivých souborů je relativně rozsáhlý, proto je uveden v [příloze A](#). V následujícím přehledu pouze uvádím typ dat, které evidují:

### **F1.txt – identifikace látky**

Obsahuje různá registrační čísla látky, její synonyma a klasifikace dle nařízení [DSD](#) a [CLP](#), dále základní údaje o struktuře a typu látky, kódy pro případ nehody. Tento zdroj také obsahuje duplicitní data, která lze najít i v souboru F4.txt – jedná se o základní údaje o podmínkách silniční ([ADR](#)), železniční ([RID](#)), letecké ([IATA](#)) a námořní ([IMDG](#)) přepravy nebezpečných látek.

### **F2.txt – základní vlastnosti a způsoby hašení**

Obsahuje základní informace o hořlavosti a reaktivitě látky, způsobech hašení a opatření v místě havárie, jakož i následné likvidaci.

### **F3.xml – fyzikální a chemické vlastnosti**

Soubor obsahuje vybrané fyzikálně-chemické a požárně-technické vlastnosti.

### **F4.txt – přeprava a skladování**

Obsahuje aktuální informace o podmínkách silniční ([ADR](#)), železniční ([RID](#)), letecké ([IATA](#)) a námořní ([IMDG](#)) přepravy nebezpečných látek, včetně řady podrobných údajů o doporučeném balení. Kromě aktuálních údajů jsou zde uvedeny údaje o dřívějším zatřídění látky v předpisech ADR/RID.

### **F5.xml – první pomoc a zdravotní ošetření**

Eviduje možná zdravotní ohrožení plynoucí ze styku s nebezpečnou látkou, zásady předlékařské první pomoci a pokyny pro lékaře.

### **F6.xml – toxicita**

Obsahuje data z toxikologických testů, tedy typy testů, způsoby podání látek, dávky, doby působení a toxikologické účinky na jednotlivé organismy.

### **zdrojeF7.xml – legislativa – údaje**

Obsahuje konkrétní údaje vyplývající pro jednotlivé látky z vybraných legislativních norem. Jedná se především o různé expoziční limity.

### **F8.xml – legislativa – předpisy**

Obsahuje seznam vybraných legislativních norem, ve kterých se látka vyskytuje.

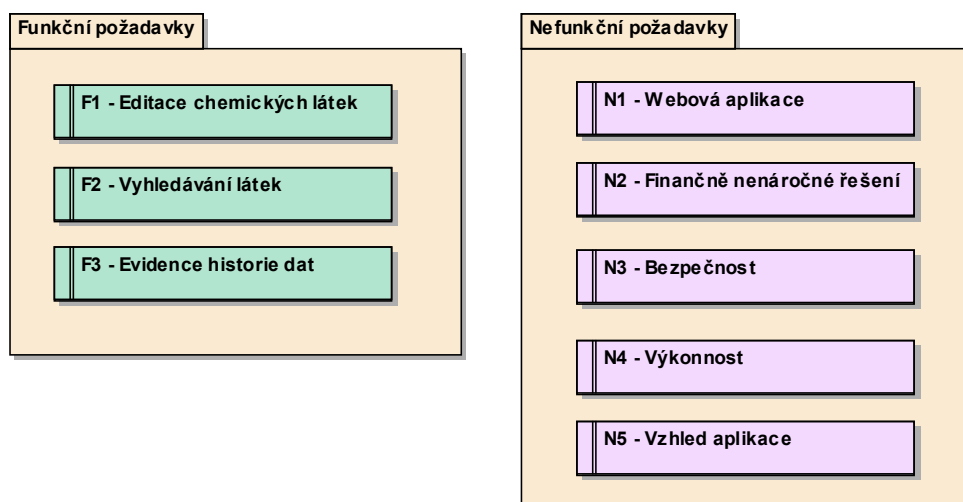


**odkaz.txt – znění odkazů**

Evidence odkazů, které se používají v aplikaci Medis-Alarm především jako vysvětlivky.

### 1.2 Požadavky na nové řešení

Zadavatelem práce jsou zaměstnanci chemické sekce společnosti MEDISTYL, spol. s r.o., kteří budou v budoucnu s novou aplikací pracovat. Ti mají na nové řešení následující požadavky, které dále rozebírám:



Obrázek 1.1: Přehled požadavků

#### 1.2.1 Funkční požadavky

##### **Editace chemických látek**

Systém bude umožňovat jak editaci stávajících záznamů, tak vkládání záznamů nových. Nedílnou součástí editace záznamů bude kontrola správného formátu zadávaných dat.

##### **Vyhledávání látek**

Jelikož databáze obsahuje více než 10000 záznamů, bude systém umožňovat vyhledat látku podle názvu, identifikátoru [BDA](#) a některých identifikačních čísel.

##### **Evidence historie dat**

Znění předpisů chemické legislativy se poměrně často mění, proto dalším důležitým požadavkem zadavatele je evidence historie těchto změn. V databázi tedy budou uchováována i předchozí znění těchto předpisů.

## 1.2.2 Nefunkční požadavky

### Webová aplikace

Systém bude realizován formou webové aplikace, která zajistí správnou funkčnost bez ohledu na operační systém uživatele. Další výhodou této formy aplikace je zaručení, že uživatel bude mít vždy její aktuální verzi.

### Finančně nenáročné řešení

Zadavatel požaduje co nejméně nákladné řešení, které by mělo stavět především na open-source technologiích.

### Bezpečnost

Jelikož databáze je zdrojem výtěžku zadavatele, je nanejvýš vhodné zaměřit se i na bezpečnost týkající se přístupu k datům. Vstup do aplikace pro editaci záznamů látek bude povolen pouze autentizovaným a autorizovaným uživatelům, jejichž hesla budou v databázi uložena ve formě otisků. Komunikace bude zabezpečena pomocí [HTTPS protokolu](#). Samozřejmostí je také zabezpečení dotazů proti technikám [SQL-injection](#). Databáze i aplikace budou nainstalovány na serveru zadavatele. Přístup do databáze bude ošetřen přístupovými právy.

### Výkonnost

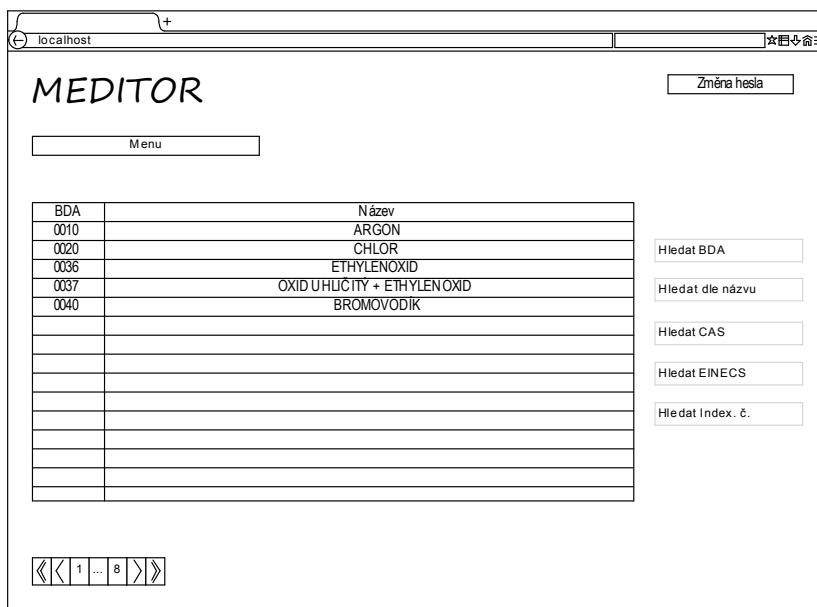
Vzhledem k tomu, že s výslednou aplikací budou pracovat maximálně 3 zaměstnanci společnosti a většinou ne zároveň, nejsou požadavky na výkon vysoké a pro zadavatele není tento bod zásadní.

### Vzhled aplikace

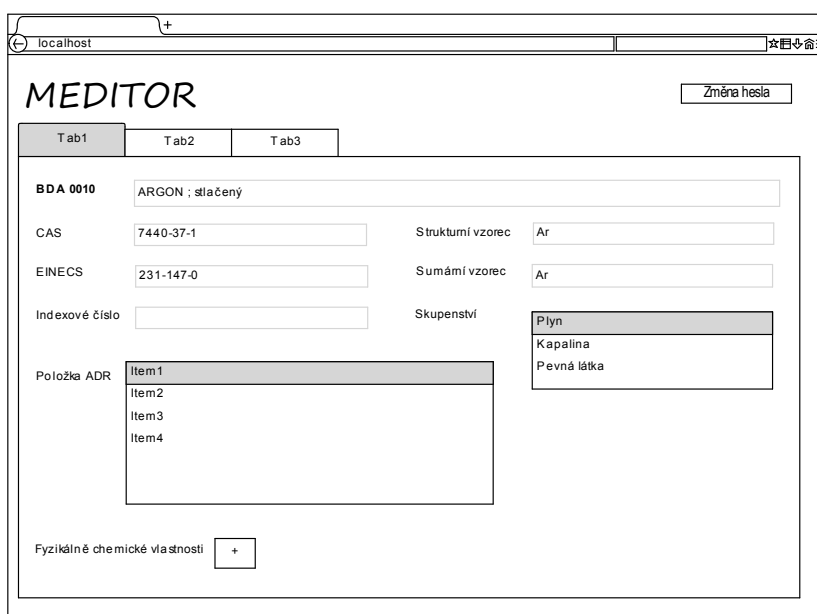
S budoucími uživateli jsme také diskutovali design nové aplikace. Vzhled aplikace jsme se snažili přiblížit obdobné aplikaci, kterou tito uživatelé již používají. Z diskuze vzešly návrhy obrazovek, které posloužily jako základ pro výsledné [GUI](#). To je dostupné v [příloze B](#).

## 1. ANALÝZA

---



Obrázek 1.2: Návrh obrazovky se seznamem látek



Obrázek 1.3: Návrh obrazovky pro editaci/přidání látky

## 1.3 Model případů užití

Cílem této kapitoly je seznámení s typickými uživateli (jejich rolemi) a s tím, jak budou tito uživatelé systém používat.

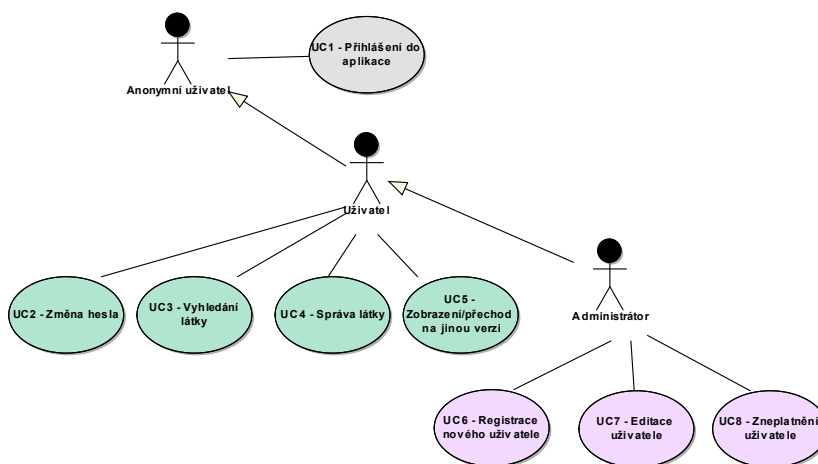
### 1.3.1 Účastníci

Se vznikajícím systémem bude pracovat:

- **Anonymní uživatel** – nepřihlášený uživatel,
- **Uživatel** – vyhledává, vkládá a edituje záznamy chemických látek,
- **Administrátor** – spravuje uživatele aplikace.

### 1.3.2 Případy užití

Na následujícím diagramu jsou zachyceny případy užití, které dále podrobněji popisují.



Obrázek 1.4: Případy užití

#### UC1 – Přihlášení do aplikace

Umožňuje přihlásit se do aplikace, aby bylo dále možné s ní pracovat.

#### Scénář:

1. *Anonymní uživatel* vyplní uživatelské jméno a heslo a stiskne tlačítko "Přihlásit".

## 1. ANALÝZA

---

2. Pokud byly zadané údaje správné, stává se z něj *Uživatel* a zobrazí se mu úvodní stránka aplikace. V opačném případě zůstává na obrazovce formulář pro přihlašovací údaje s informací, že byly zadány nesprávně.

### UC2 – Změna hesla

Umožňuje *Uživateli* změnit jeho heslo sloužící k přihlášení do aplikace.

#### Scénář:

1. *Uživatel* stiskne tlačítko "Změnit heslo".
2. Zobrazí se mu formulář, kde vyplní stávající heslo, 2× nové heslo a tento formulář odešle.
3. Pokud byly údaje správně zadány, zobrazí se informace, že heslo bylo změněno. V opačném případě zůstává *Uživatel* na formuláři, kde vidí podrobnosti ke špatnému zadání.

### UC3 – Vyhledání látky

Umožňuje *Uživateli* vyhledávat chemické látky na základě názvu, identifikátoru **BDA**, registračního čísla **CAS**, čísla **EINECS** a indexového čísla.

#### Scénář:

1. Vedle seznamu chemických látek se nachází pole, do kterých *Uživatel* vepíše hledaný název, BDA, CAS, EINECS či indexové číslo. Je možné zadat i více kritérií, podle kterých má být látka vyhledána.
2. Výběr parametrů *Uživatel* potvrdí stiskem tlačítka "Hledat".
3. V tabulce se zobrazí seznam látek, které odpovídají zadaným kritériím.
4. *Uživatel* klikne na látku, která funguje jako odkaz, a tím přejde na její detail.

### UC4 – Správa látky

Umožňuje *Uživateli* vkládat nové látky i editovat látky stávající. Pro obě tyto akce se zobrazí stejný formulář.

**Scénář:**

1. Pro editaci stávající látky klikne *Uživatel* na vybranou látku v seznamu látek. Pro přidání látky klikne *Uživatel* na tlačítko pro přidání látky.
2. Zobrazí se formulář pro zadání/editaci informací o chemické látce. Tento formulář sestává z několika záložek, do kterých jsou data roztříděna dle typu informace. Mezi jednotlivými záložkami lze přecházet kliknutím na vybranou záložku.
3. *Uživatel* vyplní/upraví potřebné údaje a stiskne tlačítko "Uložit".
4. Pokud byly údaje správně zadány, zobrazí se detail nově přidané látky. V opačném případě zůstává *Uživatel* na formuláři, kde vidí podrobnosti ke špatně zadaným položkám.

**UC5 – Zobrazení/přechod na jinou verzi**

Umožňuje *Uživateli* přejít na jakoukoli verzi chemické látky v historii. Přechod na jinou verzi se typicky používá při odhalení chyby u daného záznamu. Případně je možné pouze zobrazit starší verze, bez přechodu na ně. To je užitečné například při stížnosti zákazníka na chybu ve starší verzi aplikace Medis-Alarm. Tímto způsobem je možné ověřit údaje k datu inkriminované verze.

**Scénář:**

1. Na detailu chemické látky stiskne *Uživatel* tlačítko "Historie".
2. Zobrazí se přehled: kdy, kým a jak byla látka upravována.
3. *Uživatel* klikne na vybrané datum v přehledu změn.
4. Zobrazí se formulář s vyplněnými daty, která odpovídají danému stavu v historii.
5. Přechod na zvolenou verzi lze potvrdit tlačítkem "Uložit".

**UC6 – Registrace nového uživatele**

Umožňuje *Administrátorovi* vytvářet nové uživatelské účty.

**Scénář:**

1. *Administrátor* stiskne tlačítko pro přidání nového uživatele.
2. Zobrazí se formulář pro zadání jména a hesla.
3. *Administrátor* vyplní údaje a odešle formulář.

## 1. ANALÝZA

---

4. Pokud byly údaje zadány nesprávně, zůstává *Administrátor* na stejném formuláři, kde vidí podrobnosti ke špatně zadaným položkám. V opačném případě se zobrazí další formulář, kde je možné zadat další nepovinné údaje uživatele (jméno, příjmení, e-mailovou adresu) a nastavit vytvořenému uživateli oprávnění.
5. *Administrátor* vyplní údaje a odešle formulář.
6. Pokud byly údaje správně zadány, zobrazí se detail s údaji zaregistrovaného uživatele. V opačném případě zůstává *Administrátor* na formuláři, kde vidí podrobnosti ke špatně zadaným položkám.

### UC7 – Editace uživatele

Umožňuje *Administrátorovi* editovat informace o jednotlivých uživateliích.

#### Scénář:

1. *Administrátor* vybere požadovaný účet ze seznamu uživatelů kliknutím na jeho jméno, které funguje jako link.
2. Zobrazí se formulář, kde je možné upravit údaje o uživateli, včetně jeho oprávnění.
3. *Administrátor* upraví údaje a odešle formulář.
4. Pokud byly údaje správně zadány, zobrazí se detail s údaji editovaného uživatele. V opačném případě zůstává *Administrátor* na formuláři, kde vidí podrobnosti ke špatně zadaným položkám.

### UC8 – Zneplatnění uživatele

Umožňuje *Administrátorovi* zneplatnit uživatelské účty. Ke zneplatnění uživatele se přistupuje v případě, kdy uživatel ukončí pracovní poměr u společnosti. Zneplatnění je v tomto případě dána přednost před odstraněním účtu z toho důvodu, aby bylo dohledatelné, která data uživatel v historii editoval.

#### Scénář:

1. *Administrátor* vybere požadovaný účet ze seznamu uživatelů kliknutím na jeho jméno, které funguje jako link.
2. Zobrazí se detail uživatele.
3. *Administrátor* zruší pole "Aktivní" a klikne na tlačítko "Uložit".
4. Zobrazí se detail s upravenými údaji zneplatněného uživatele.



---

# Návrh

Cílem této kapitoly je analýza dostupných databázových modelů a následný výběr jednoho z nich pro praktickou část této práce. Dále diskutuji výběr databázového systému a rozebírám schéma nové databáze. V závěru kapitoly popisují výběr webového aplikačního rámce.

## 2.1 Analýza databázových modelů

Potřebu uchovávat data zaznamenáváme již u starověkých civilizací a jejich knihovnách. Snaha data rovněž třídit je spojena se vznikem kartotéky, kterou vynalezl přírodovědec Carl Linné [1]. S narůstajícím počtem dat však bylo nezbytné práci s daty zautomatizovat. To se podařilo Hermanu Hollerithovi, který pro sčítání lidu USA v roce 1890 navrhl stroj, jenž mechanicky analyzoval údaje uložené na dřevných štítcích [2]. Soubor těchto štítků je dnes považován za první počítačovou databázi. Stále rostoucí množství dat, která byla součástí velkých projektů, dala vznik hierarchickému modelu. Ten vyvinula společnost IBM v šedesátých letech, když spolupracovala na programu Apollo, v rámci kterého vytvořila databázový systém IMS. Ten přišel s nápadem oddělit kód od samotných dat [3]. Prvním komerčním síťovým databázovým systémem byl Bachmanův datový sklad [4]. Cílem síťové databáze bylo reprezentovat komplexní vztahy mezi záznamy efektivněji, než to uměla databáze hierarchická.

V následujících kapitolách popisují modely, které jsou nejvíce používány v dnešní době. Jedná se o model relační, objektový, XML a NoSQL.

### 2.1.1 Relační model

Roku 1970 přišel Edgar Frank Codd se zcela jiným přístupem, když navrhl, aby byla data ukládána v databázi ve formě tabulek [5].

Podstatou relačních databází jsou tabulky, mezi kterými existují logické vazby. Konkrétní tabulky, rovněž označovány jako entity, reprezentují objekty reálného světa. Tabulky sestávají ze sloupců a řádků. Sloupce, neboli atributy,

## 2. NÁVRH

---

popisují vlastnosti entit a jejich hodnoty jsou dány datovým typem (číslo, řetězec, logická hodnota, datum, ...). Řádka představuje jeden záznam v tabulce, který má svůj unikátní identifikátor. Soubor všech tabulek tvoří celou databázi – relační schéma.

### Přednosti

Relační databáze jsou dnes široce využívány pro své přednosti:

- Intuitivní organizace dat do tabulek je pro většinu uživatelů snadno pochopitelná.
- Manipulace s daty je díky jazyku **SQL** snadná, je možné data jednoduše vytvářet, měnit, mazat a vyhledávat. Jazyk rovněž nabízí tvorbu velmi komplikovaných dotazů, umožňujících přesně specifikovat dotčená data. Přístup k datům nevyžaduje znalost fyzické implementace databáze.
- Integrita dat je zajištěna důslednou datovou typizací, možností definovat povinné atributy a kontrolou validity dat a integritních omezení.
- Flexibilní struktura umožňuje škálování a rozšiřování databáze.

### Nedostatky

S časem se ale samozřejmě začaly ukazovat i nedostatky tohoto modelu:

- Tabulky nemusí vždy dobře odpovídat objektům, jelikož relační databáze nepodporují dědičnost či vazby typu M:N. Je tedy potřeba provádět mapování objektů do databáze.
- Relační databáze nejsou vhodné pro uložení dat s různorodou strukturou.
- Čistě relační databáze neumožňují ukládání více hodnot do jednoho atributu – pro tento účel je potřeba vytvořit další tabulku. Relačně-objektové databáze (např. PostgreSQL) tímto nedostatkem netrpí.

### Nejznámější představitelé

Podle [6] se k nejoblíbenějším relačním systémům řadí:

- Oracle,
- MySQL,
- Microsoft SQL Server,
- PostgreSQL,
- DB2.

### 2.1.2 Objektový model

S rostoucí oblibou objektového programování se objevily i objektové databáze, které data ukládají do objektů stejně tak, jak jsou používány v programu. Tento model se používá především v aplikacích, které evidují obrovské množství dat o jednom objektu. Objektové databáze se používají pro CAD aplikace či ukládání multimediálních dat [7].

#### Přednosti

Oproti jiným modelům nabízí objektový přístup tyto výhody:

- Dotazovací jazyk je shodný s jazykem pro aplikaci, což zaručuje těsný vztah mezi objektem aplikace a objektem uloženým v databázi. S objekty lze pracovat pomocí metod, není potřeba další krok v podobě mapování dat na objekty.
- Mnoho objektových databází nabízí tzv. versioning, kdy je objekt množinou svých verzí.
- Objektové databáze umožňují vícenásobnou dědičnost, zapouzdření a polymorfismus.
- Rozšiřitelnost je daná možností vytvářet nové datové typy.

#### Nedostatky

Model však trpí i některými nedostatky:

- Závislost programovacího jazyka, jelikož OODBMS je pomocí specifického API svázan s určitým jazykem.
- Omezené možnosti tvorby komplikovaných dotazů.

#### Nejznámější představitelé

Podle [8] se k nejoblíbenějším objektovým databázovým systémům řadí:

- Caché,
- Db4o,
- Versant Object Database,
- ObjectStore,
- Matisse.

### 2.1.3 XML model

Stále častější používání XML dokumentů pro ukládání a výměnu dat vedlo ke vzniku XML databází. Ty lze rozdělit do dvou typů: databáze schopné pracovat s XML a nativní XML databáze. V případě prvního typu se jedná o nadstavbu ať už relační, objektové či objektově-relační databáze, která je pak schopná podporovat XML dokumenty, ale není schopna využít skutečné síly XML. Naopak nativní XML databáze byly záměrně navrženy pro ukládání hierarchické struktury XML dat a znalost této struktury využívají při optimalizaci zpracování dotazů [9].

#### Přednosti

Výhody nativní XML databáze jsou následující [10]:

- Umožňuje ukládat data v hierarchické struktuře.
- Nabízí rychlejší přístup k datům oproti relační databázi.
- Poskytuje možnosti typické pro XML, například XML dotazy.

#### Nedostatky

Tyto databáze mají samozřejmě i svá omezení [10]:

- Pokud je potřeba najít data, která nejsou v hierarchickém uspořádání, může být výkon naopak menší než je tomu u relační databáze.
- Většina nativních XML databází vrací data opět jako XML, což může být nevýhodné, pokud aplikace používá data v jiném formátu.

#### Nejznámější představitelé

Podle [11] se k nejoblíbenějším XML databázovým systémům řadí:

- MarkLogic,
- Oracle Berkeley DB,
- Virtuoso,
- BaseX,
- webMethods Tamino.

### 2.1.4 NoSQL model

Potřeba uchovávat obrovské objemy dat, která nemají pevnou strukturu, s sebou přinesla nový způsob správy dat, NoSQL databáze. K hlavním typům patří databáze typu klíč-hodnota, dokumentové, sloupcově orientované či grafové. Přestože je NoSQL poměrně nová technologie, je tento pojem v poslední době často skloňován, jelikož ji využívají společnosti jako Amazon, Facebook, Google, Twitter nebo Yahoo [12].

#### Přednosti

Jako každý jiný model i tento má své přednosti a nedostatky ([12], [13]). Mezi výhody lze zařadit:

- Rychlost, se kterou jsou tyto databáze schopny pracovat s velkým množstvím dat.
- Škálovatelnost.
- Paralelní zpracování v distribuovaných systémech.
- Možnost ukládat problematické datové typy.

#### Nedostatky

Omezení NoSQL databází spočívají v těchto vlastnostech:

- NoSQL databáze až na výjimky negarantují ACID (atomicita, konzistence, izolovanost, trvalost) vlastnosti.
- Nižší požadavky na konzistenci, aby mohla být zaručena dostupnost a odolnost k přerušení. Dle CAP teorému lze dosáhnout pouze 2 z těchto 3 aspektů: konzistence, dostupnost, odolnost k přerušení.

#### Nejznámější představitelé

Podle [14] se k nejoblíbenějším NoSQL databázovým systémům řadí:

- CouchDB,
- MongoDB,
- Cassandra,
- Redis,
- HBase.

### 2.1.5 Výběr databázového modelu

Volbu databázového modelu pro vznikající databázi diskutuji z několika hledisek:

#### Struktura dat

Data, která je potřeba evidovat, jsou poměrně dobře strukturovaná. Mnoho zdrojů je v dokumentech ve formátu Microsoft Excel, tudíž odpovídá struktuře tabulek v relační databázi. Přestože jsou některá data nyní uložena v XML souborech, není vhodnou volbou ani XML databáze, protože většina dat hierarchickou strukturu nemá.

#### Získávání informací

Důležitým požadavkem na vznikající databázi je schopnost tvorby velké škály komplexních dotazů. Ty asi nejlépe podporuje relační databáze. Ta také umožňuje snadné vytvoření indexů, jež urychlují přístup k datům.

#### Velikost dat

Aktuální objem dat určitě není typu **big data**, proto není potřeba použít NoSQL databázi, která nedisponuje potřebnými ACID vlastnostmi.

#### Zkušenosti

Relační databáze jsou osvědčeným modelem, který je používán již řadu let. K dispozici je velké množství materiálů, které popisují, jak takovou databázi navrhnout a spravovat.

## 2.2 Výběr databázového systému

Relačních databázových systémů je nepřehledné množství. Například na žebříčku popularity se jich nachází 137 [6]. V této kapitole se zaměřím na dva nejpoužívanější, které jsou šířeny pod open-source licencí. Jedná se o MySQL/MariaDB a PostgreSQL.

MySQL je díky oblíbené tzv. LAMP platformě (Linux, Apache, MySQL, PHP/Perl/Python) nejpoužívanější databázový systém na webových serverech [15]. Ve svých projektech jej používají například společnosti YouTube, PayPal, Google, Facebook, Twitter či NASA [16]. Systém MySQL vyvinula švédská společnost MySQL AB [17]. V roce 2008 byla společnost odkoupena Sun Microsystems [18], kterou posléze koupila společnost Oracle [19]. Na tento popud vznikla iniciativa, která si dala za cíl ponechat MySQL pod licencí GNU GPL a vytvořila větev nazvanou MariaDB, kterou dále vyvíjejí původní tvůrci MySQL [20].

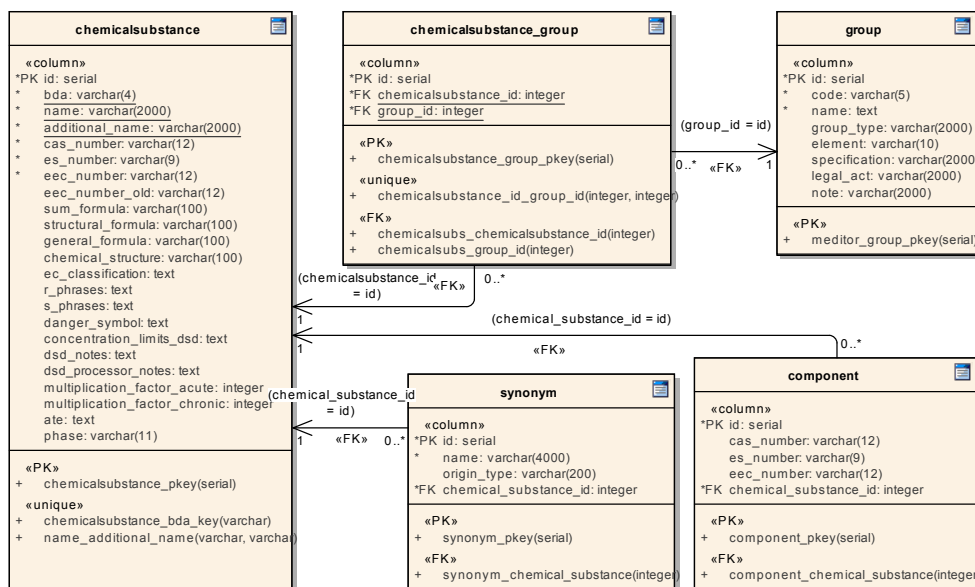
PostgreSQL je relačně-objektový databázový systém, který je vydáván pod open-source licenci PostgreSQL License [21]. Popularitou zatím MySQL nepředčí, ale pomalu ji dohání [22]. Používají jej například společnosti Aflias, Apple, Skype, SourceForge nebo Red Hat. Systém vznikl na Kalifornské univerzitě v Berkeley a jeho hlavním tvůrcem je profesor Michael Stonebraker [21].

PostgreSQL je považována za vyspělejší databázi [23], splňuje ANSI SQL normy a nabízí možnost tvorby složitých uživatelských procedur. Pro uživatelské funkce lze využít velké spektrum jazyků, např. pgSQL, C, Perl, Python, C, sh, R a další [24]. Má také lepší podporu pro kontrolu datové integrity, jelikož před samotným vložením dat do databáze kontroluje, zda jsou tato validní. MySQL toto sice také umožňuje, ale je potřeba nastavit *strict SQL mode*. Další výhodou PostgreSQL je velké množství datových typů a možnost definovat typy vlastní. Z těchto důvodů jsem se rozhodla použít tento systém.

## 2.3 Relační datový model

V následující kapitole rozebírám význam jednotlivých tabulek dle kategorií uložených informací. Diagram se všemi navrženými tabulkami je poměrně rozsáhlý a k nalezení je na příloženém CD.

### Hlavní informace



Obrázek 2.1: Datový model – hlavní informace

## 2. NÁVRH

---

### chemicalsubstance

Nejobsáhlejší tabulka, která uchovává seznam všech chemických látek s jejich daty. Jedná se například o název, identifikační čísla, typ látky, skupenství, popis látky, informace o skladování, reaktivitě, použití, hořlavosti, poznámky k toxicitě, informace o výskytu v nařízení [REACH](#), [DSD](#) a [CLP](#) klasifikaci.

### synonym

Obsahuje seznam synonym chemických látek a jejich zdroj.

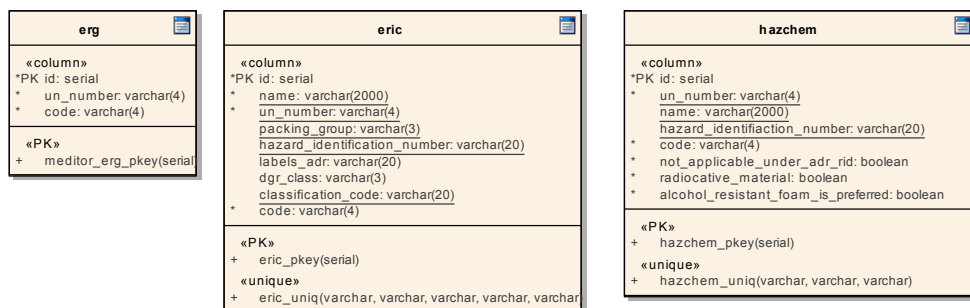
### component

Tabulka eviduje jednotlivé složky chemických látek (pokud se jedná o směsi) spolu s jejich identifikačními čísly ([CAS](#), [EINECS](#), [EEC](#)).

### group

Eviduje skupiny látek, pod který může záznam nebezpečné chemikálie spadat. Jedná se například o sloučeniny chlóru, hexany, soli hliníku, nonány, polycyklické aromatické uhlovodíky a další.

## Pokyny pro případ nehody



Obrázek 2.2: Datový model – pokyny pro případ nehody

### erg

Eviduje pokyny pro hasiče, policii a další osoby, které by mohly přijet jako první k dopravní nehodě, při které byla přítomna nebezpečná látka ([ERG](#)).

### eric

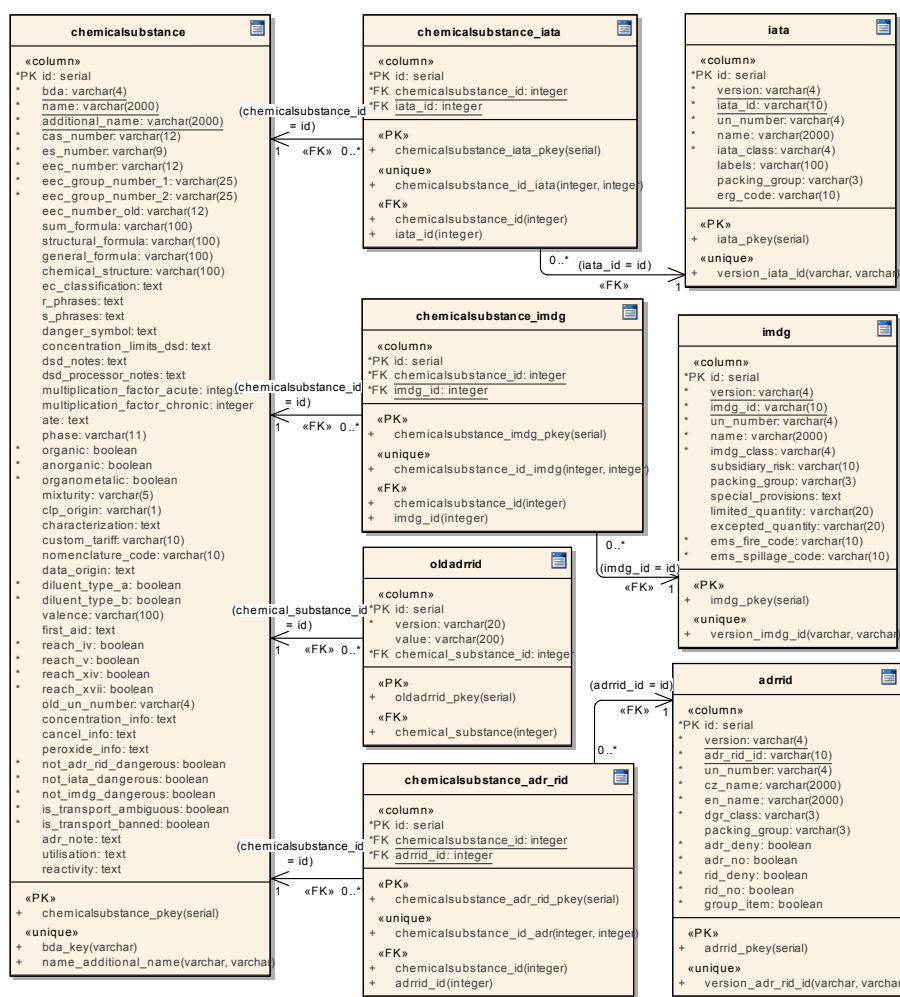
Eviduje pokyny pro zásah hasičů v případě nehody nebezpečné látky bez konkrétních a spolehlivých informací o nakládání s produktem ([ERIC](#)).



## hazchem

Eviduje HAZCHEM kódy, které obsahují informace pro hašení a opatření v místě havárie v prvních minutách likvidace havárie, kde se vyskytly nebezpečné látky.

## Převaha látek



Obrázek 2.3: Datový model – dohody o přepravě nebezpečných věcí

## adrrid

Eviduje nebezpečné věci dle evropské dohody o mezinárodní silniční přepravě nebezpečných věcí ADR a Řádu pro mezinárodní železniční přepravu nebez-

## 2. NÁVRH

pečných věcí [RID](#).

### iata

Eviduje nebezpečné věci dle dohody o letecké přepravě nebezpečných věcí [IATA](#).

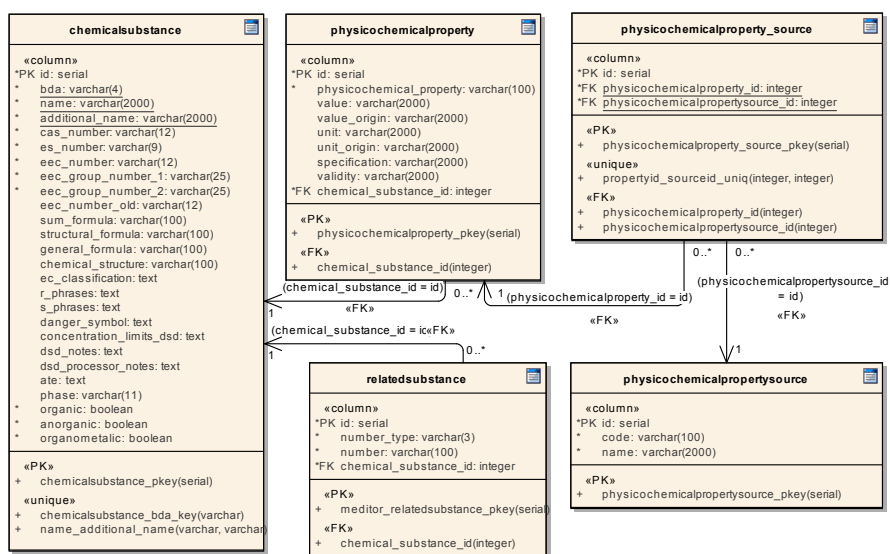
### imdg

Eviduje nebezpečné věci dle evropské dohody o mezinárodní přepravě nebezpečných věcí po moři [IMDG](#).

### oldadrrid

Eviduje třídy a klasifikační kódy dle předchozích verzí (z předchozích let) [ADR](#) a [RID](#).

## Fyzikálně-chemické vlastnosti



Obrázek 2.4: Datový model – fyzikálně-chemické vlastnosti

### physicochemicalproperty

Tabulka obsahuje fyzikálně-chemické vlastnosti látek.

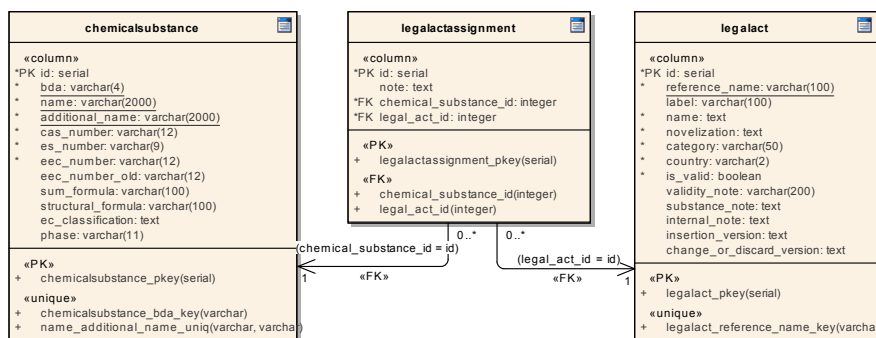
### physicochemicalpropertysource

Eviduje seznam literárních zdrojů pro fyzikálně-chemické vlastnosti.

### relatedsubstance

Obsahuje seznam identifikátorů, na základě kterých lze látkám přiřadit podobné záznamy v rámci fyzikálně-chemických vlastností.

### Legislativní normy



Obrázek 2.5: Datový model – legislativní normy

### legalact

Evidence zpracovaných legislativních norem.

### legalactassignment

Seznam vybraných legislativních norem, ve kterých se látka vyskytuje.

### CLP klasifikace

#### clpitem

Eviduje položky klasifikace dle nařízení **CLP** – třídu a kategorií nebezpečnosti, H-věty, GHS symboly, signální slova.

#### clpnote

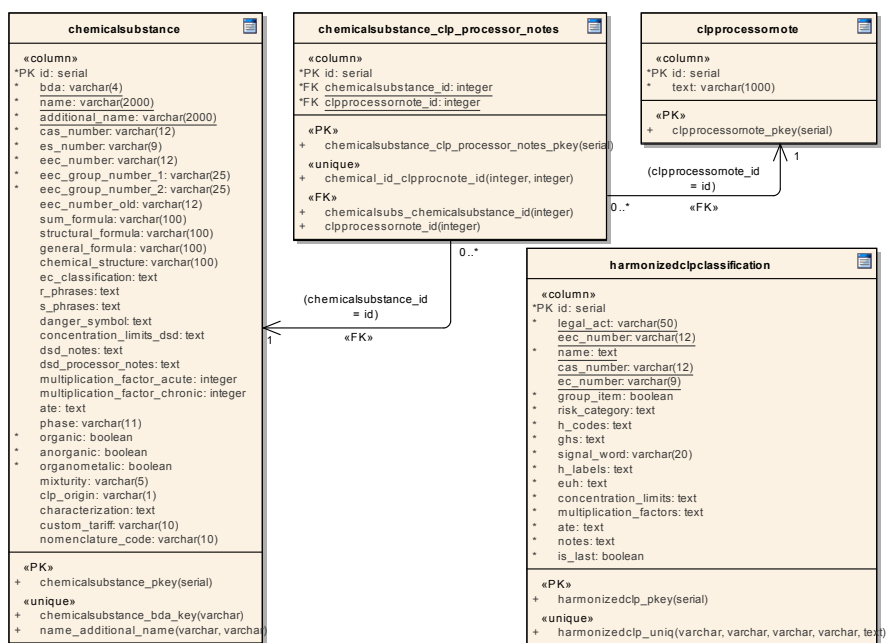
Obsahuje poznámky dle nařízení **CLP**.

#### clpprocessornote

Tabulka obsahuje poznámky, ze kterých může vybírat zpracovatel **CLP** klasifikace.



## 2.3. Relační datový model



Obrázek 2.7: Datový model – harmonizovaná CLP klasifikace a poznámky zpracovatele CLP

### ghssymbol

Tabulka obsahuje položky Globálně harmonizovaného systému klasifikace a označování chemikálií (GHS).

### harmonizedclpclassification

Tabulka obsahuje přehled harmonizovaných klasifikací z přílohy VI nařízení 1272/2008/ES a jeho novelizací.

### Limity

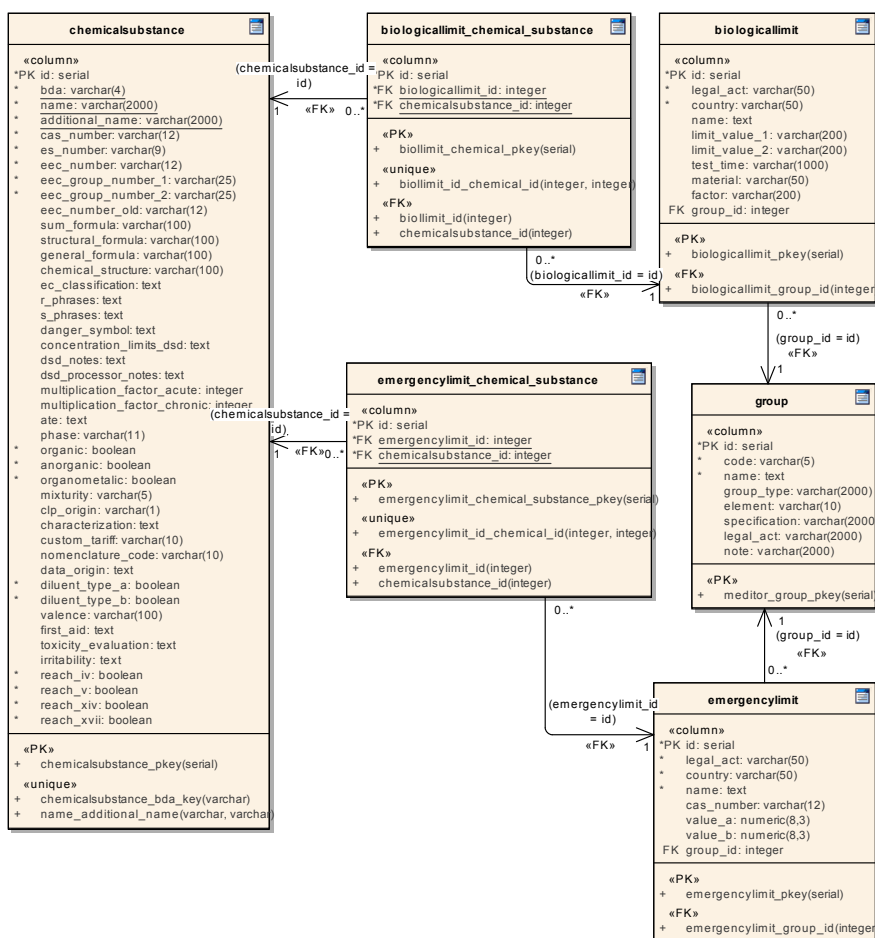
#### biologicalimit

Tabulka eviduje limitní hodnoty ukazatelů biologických expozičních testů.

#### emergencylimit

Eviduje minimální množství nebezpečných látek podle zákona č. 224/2015 Sb., o prevenci závažných havárií.

## 2. NÁVRH



Obrázek 2.8: Datový model – biologické limity a limity v rámci prevence havárií

### hygieniclimit

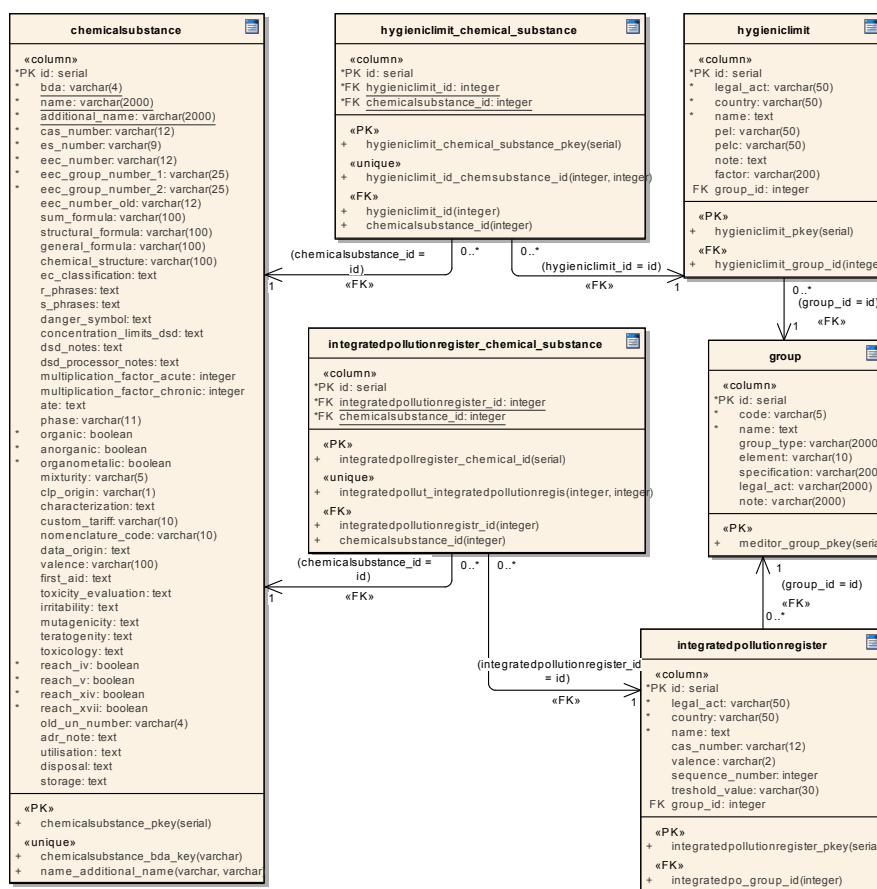
Tabulka obsahuje hygienické limity z různých nařízeních zabývajících se ochranou zdraví při práci.

### integratedpollutionregister

Tabulka uchovává prahové hodnoty pro ohlašování přenosů znečišťujících látek v odpadech mimo provozovnu.

### erpg

Eviduje expoziční limity Americké asociace pro průmyslovou hygienu [ERPG](#). Jde o limity pro jednorázovou expozici chemickým látkám, které mohou být



Obrázek 2.9: Datový model – hygienické limity a prahové hodnoty pro ohlašování znečišťujících látek v odpadech

použity jako pomůcka při tvorbě plánů prevence nehod a pokynů pro případ nehody.

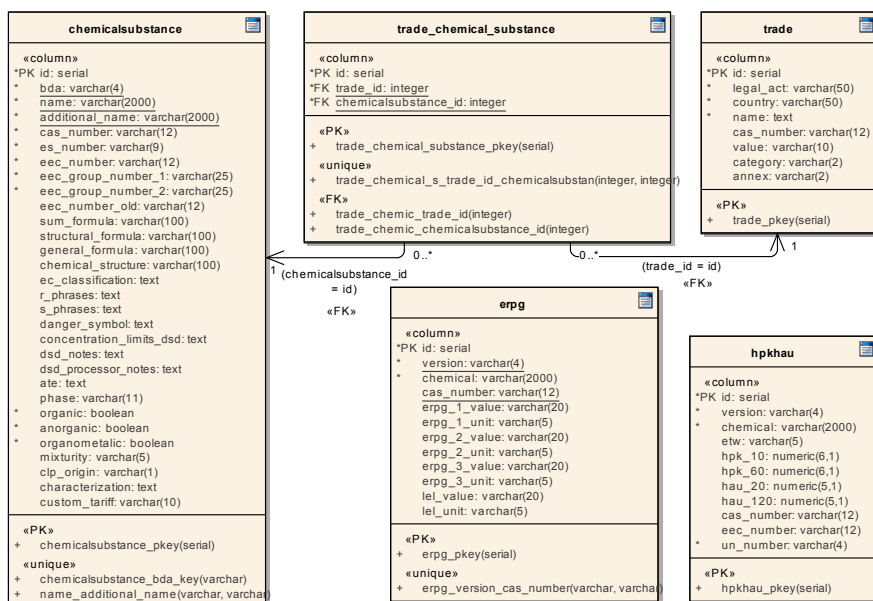
### trade

Tabulka eviduje mezní hodnoty pro látky považované za prekursory drog.

### hpkhau

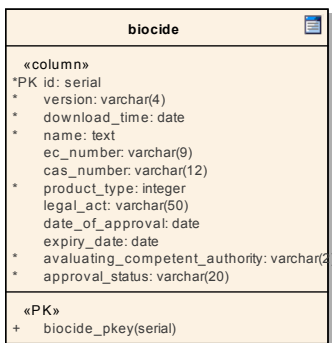
Eviduje havarijní přípustné limitní koncentrace plynu, páry nebo aerosolu látky v ovzduší, kterým se mohou vystavit záchranáři při záchraně osob bez prostředků individuální ochrany po určitou dobu. Dále eviduje havarijní limitní koncentrace plynu, páry nebo aerosolu látky v ovzduší, při kterých je nutné obyvatelstvo vyvést ze zamořeného prostoru do určité doby od zahájené inhalace.

## 2. NÁVRH



Obrázek 2.10: Datový model – mezní hodnoty pro prekuzory drog, limitní koncentrace látky v ovzduší, expoziční limity pro případy nehody

## Biocidní účinné látky



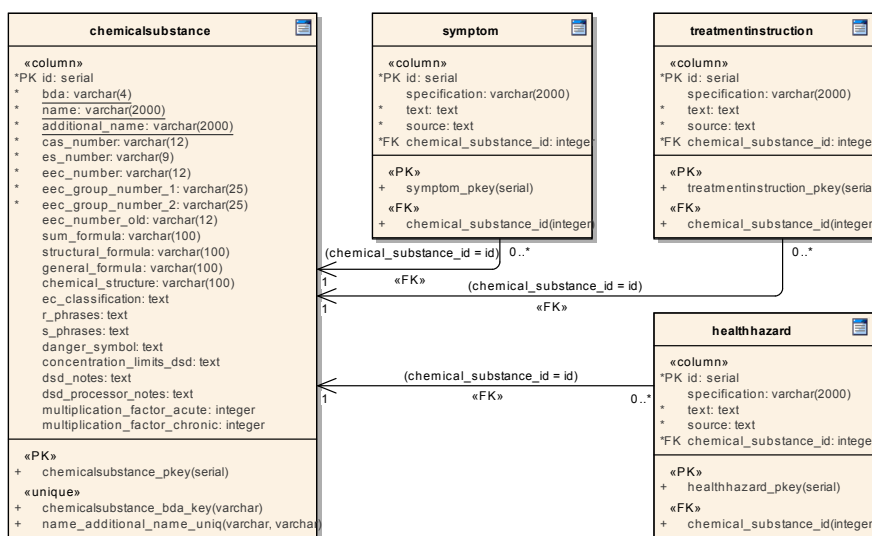
Obrázek 2.11: Datový model – biocidní účinné látky

### biocide

Seznam látek schválených dle směrnice o biocidních přípravcích 98/8/ES a nařízení o biocidních přípravcích (EU) č. 528/2012.



## 2.3. Relační datový model



Obrázek 2.12: Datový model – první pomoc

### První pomoc

#### healthhazard

Tabulka obsahuje popis zdravotních rizik dané chemické látky.

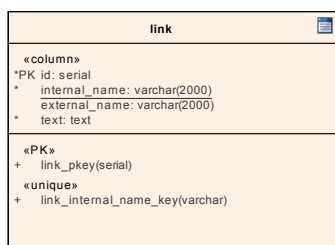
#### symptom

Tabulka eviduje popis příznaků po kontaktu s danou chemickou látkou.

#### treatmentinstruction

Tabulka obsahuje pokyny pro ošetření po kontaktu s danou chemickou látkou.

### Odkazy



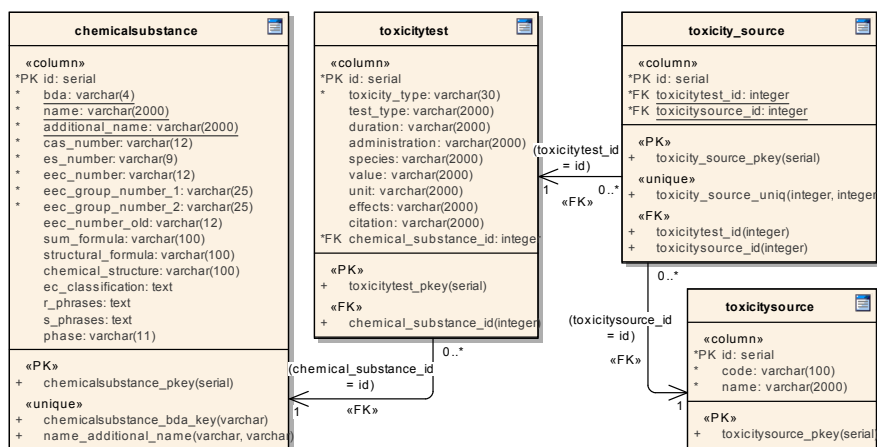
Obrázek 2.13: Datový model – odkazy

## 2. NÁVRH

### link

Tabulka obsahuje seznam odkazů, které se používají v aplikaci Medis-Alarm.

### Testy toxicity



Obrázek 2.14: Datový model – testy toxicity

### toxicitytest

Evidence testů toxicity.

### toxicitysource

Evidence seznamu literárních zdrojů pro testy toxicity.

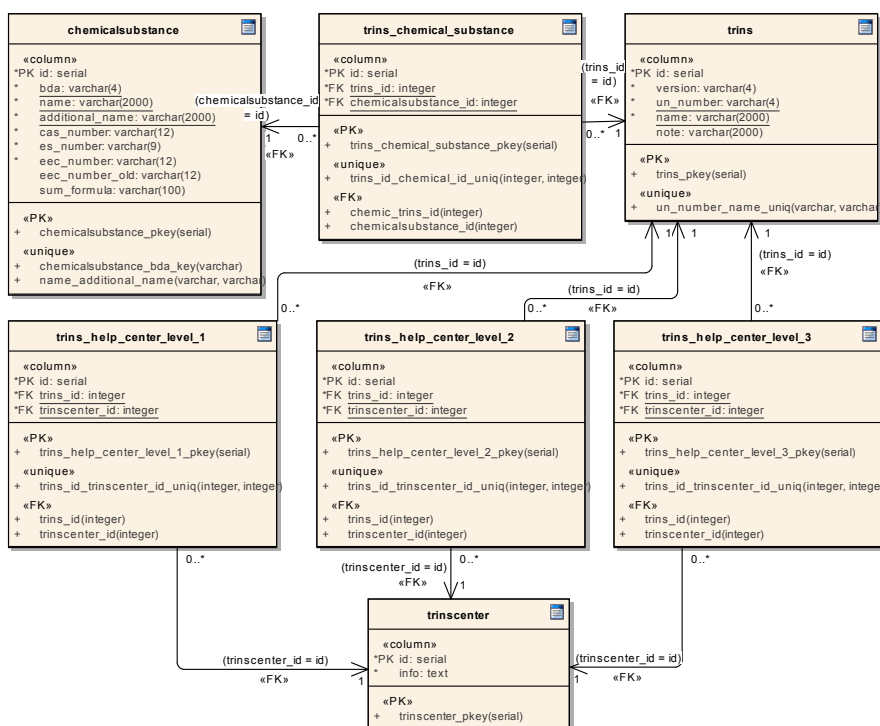
## Systém TRINS

### trins

Přiřazení středisek **TRINS** (systém pomoci při nehodách spojených s přepravou nebezpečných látek) k jednotlivým chemickým látkám. Každé látce může být přiřazeno více středisek.

### trinscenter

Kontaktní údaje středisek, které jsou zapojeny do systému pomoci **TRINS**. Střediska poskytují pomoc v závislosti na naléhavosti nehody ve třech stupních.



Obrázek 2.15: Datový model – systém TRINS

## 2.4 Výběr webového aplikačního rámce

V dnešní době již vývojáři nebudují webové aplikace od úplných začátků, ale využívají knihoven aplikačních rámců. Aplikační rámec je platforma, která poskytuje podporu programátorovi nabídkou velké škály funkcí, které řeší typické rutinní úkoly. Webových aplikačních rámců je nepřehledné množství a vybrat mezi nimi ten nejvhodnější není snadné. Při výběru je potřeba vzít v potaz několik aspektů. Jedním z nich je znalost jazyka, ve kterém je aplikační rámec psán. Určitě není ideální se kromě samotného aplikačního rámce učit i nový jazyk. Z tohoto důvodu bych s ohledem na své předchozí zkušenosti vybírala z aplikačních rámců psaných v jazycích Perl a Python. Ovšem s ohledem na budoucí spolupracovníky či následovníky omezím výběr pouze na Python. Jedná se o jazyk, jehož znalostí disponuje větší množství potenciálních zaměstnanců [25] a i pro začínající programátory je snazší na naučení, jelikož má jednoduchou a čitelnou syntaxi [26].

Aplikační rámce lze rozdělit na tzv. "full-stack" a "non full-stack". Full-stack aplikační rámce poskytuje veškeré komponenty, které jsou potřeba pro tvorbu aplikace, v jednom balíku. Na druhé straně non full-stack aplikační rámec má v základu pouze několik málo funkcí a většinu rozšíření si programátor volí sám [27].

Z těchto dvou přístupů jsem vybrala full-stack aplikační rámec, a to z několika důvodů. Je vysoce pravděpodobné, že v budoucnu se bude rozšiřovat funkcionality aplikace a pro komplexnější a rozsáhlejší projekty je full-stack aplikační rámec vhodnější. Dalším důvodem je rychlejší vývoj, který je jedním z požadavků zadavatele. V neposlední řadě odpadá problém s integrací mnoha komponent, ta je ve full-stack aplikačním rámci již vyřešena a dobře otestována.

Mezi nejoblíbenější full-stack aplikační rámce dle [27] patří:

- Django,
- TurboGears,
- web2py.

Všechny výše zmíněné aplikační rámce jsou distribuovány pod open-source licencí – Django pod BSD [28], TurboGears pod MIT [29] a web2py pod LGPLv3 [30].

Django je nejoblíbenějším aplikačním rámcem v Pythonu vůbec [31]. Důkazem jeho popularity budiž i rozsáhlý seznam webových stránek, které jsou v něm implementované [32].

Co se týče dokumentace, ta je u Django na vysoké úrovni a mimo jiné obsahuje i tutoriály, které uživatele provedou tvorbou jeho první aplikace [33]. Podrobnou dokumentaci disponují i TurboGears [34] a web2py [35], ale ta od Django mi připadá o řád přehlednější.

Při řešení problémů se programátor často obrací na komunitu serveru StackOverflow.com. V tomto směru vede Django, kterému je na této stránce věnováno 161 674 dotazů [36], za ním následuje web2py s 1 937 dotazy [37] a nejméně dotazů lze najít pro TurboGears – 107 [38].

Všechny tři aplikační rámce jsem také porovnála pomocí komunity Slant, která je založena na hodnocení různorodých produktů členy této komunity [39].

Uživatelé hodnotí Django takto [40]:

### **Pozitiva aplikačního rámce Django:**

- snadno přizpůsobitelný panel pro administraci projektu,
- vývoj prototypu může být velmi rychlý,
- jedná se o vyspělý software s mnoha [pluginy](#),
- velice kvalitní dokumentace a velká komunita,
- jasně definovaná [MVC](#) organizace,
- snadná správa databáze,
- podpora objektově-relačního mapování,
- velmi přizpůsobitelný,
- snadno upravitelné a různým způsobem zobrazované formuláře, které lze navázat na modely.

### **Negativa aplikačního rámce Django:**

- pro malé projekty může být příliš složitý,
- směrování URL používá regulární výrazy,
- chyby v šablonách selhávají potichu.

Dle komunity TurboGears vyniká či pokulhává v těchto oblastech [41]:

### **Pozitiva aplikačního rámce TurboGears:**

- mocné a flexibilní objektově-relační mapování s podporou mnoha databází,
- kód se píše snadno,
- umožňuje rychlou a jednoduchou tvorbu prototypů, ale i komplexních aplikací,
- podpora horizontálního škálování dat,

## 2. NÁVRH

---

- umožňuje vytvářet různá rozšíření,
- šablonový systém je založený na [XHTML](#), je tedy kontrolován na chyby při kompilaci do HTML,
- umožňuje flexibilní návrh aplikace.

### **Negativa aplikačního rámce TurboGears:**

- velká volnost v rozšiřitelnosti i spousta různých možností řešení jednoho problému může být ochromující.

Uživatelé zmiňují tyto výhody a nevýhody web2py [42]:

### **Pozitiva aplikačního rámce web2py:**

- je snadný na naučení, přesto ale velmi výkonný a flexibilní,
- po optimalizacích může být velmi rychlý a paměťově nenáročný,
- dokumentace je psána přívětivou formou pro začátečníky,
- není nutné importovat [API](#) pro přístup ke kontextu modelů a kontrolerů,
- přenositelnost a podpora různých databází,
- přátelská a otevřená komunita,
- zpětná kompatibilita – kód psaný ve starší verzi dobře funguje i v té nejnovější,
- podporováno vývojovými prostředími PyCharm, WinIDE i Eclipse.

### **Negativa aplikačního rámce web2py:**

- není kompatibilní s Python 3,
- admin aplikace, která slouží jako webové [IDE](#), není plnohodnotnou náhradou těch desktopových.

Po porovnání všech zmíněných charakteristik jsem zvolila Django, které se ze všech tří aplikačních rámců jeví jako nejvyspělejší. Jeho velkou výhodou je automaticky generovaná administrace projektu [43] a silná komunita [44], a to i v České republice [45]. Django bylo vytvořeno pro rychlý vývoj webových projektů [46] a velice dbá na bezpečnost [47].

---

# Realizace

Realizace práce sestává z následujících kroků:

- instalace jednotlivých komponent,
- vytvoření aplikace pro správu databáze,
- převod dat do vzniklé databáze.

## 3.1 Instalace komponent

V prvním kroku je potřeba nainstalovat závislosti:

### 3.1.1 Python

Dokumentace Django radí používat Python 3, jelikož poslední verzi Django (1.11), která podporuje Python 2.7, končí podpora v roce 2020. Je také doporučováno používat co nejnovější verze Pythonu 3. Ty bývají zpravidla rychlejší, mají více funkcí a jsou lépe podporovány. Poslední oficiální verze Django je 2.0.1. Ta podporuje tyto verze Pythonu: 3.4, 3.5, 3.6. V souladu s doporučeními tedy budu instalovat Python 3.6 [48].

### 3.1.2 Virtualenv

Virtualenv je nástroj používaný k vytváření izolovaných Python prostředí. To je velmi užitečné, pokud je v systému více Python aplikací. Při použití virtuálního prostředí může mít každá taková aplikace jinou skladbu balíčků a jejich verzí, aniž by došlo ke kolizím. Další výhodou virtuálního prostředí je fakt, že při instalaci balíčků není potřeba a disponovat právy superuživatele, jelikož virtuální prostředí se vytváří v adresáři uživatele [49].

### 3.1.3 Django

Django lze instalovat třemi způsoby:

- pomocí nástroje pip – oficiální vydání,
- prostřednictvím správce balíků – verze poskytovaná danou distribucí operačního systému,
- stažením z gitu [50] – nejnovější vývojová verze.

Dokumentace doporučuje instalaci pomocí prvního způsobu [51]. Poslední oficiální verze Django je 2.0.1 [52].

### 3.1.4 Postgres

Aplikace bude nainstalována na server s operačním systémem CentOS. Ten ve svých repozitářích sice obsahuje postgres balíky, ale pokud chceme nejnovější verzi, je lepší použít balíky dostupné na stránkách samotného projektu PostgreSQL [53].

### 3.1.5 Psycopg

Psycopg je modul Pythonu, který komunikuje s databází PostgreSQL a umožňuje přístup k mnoha jejím funkcím [54]. Nainstalovat ho lze jednoduše pomocí nástroje pip.

### 3.1.6 Apache a mod\_wsgi

Při nasazení Django aplikace je osvědčeným a otestovaným řešením webový server Apache a jeho modul mod\_wsgi. Mod\_wsgi je modul Apache, který poskytuje rozhraní pro hostování webových aplikací psaných v Pythonu.

### 3.1.7 Geckodriver

Geckodriver je WebDriver, který poskytuje HTTP API pro komunikaci s Gecko prohlížeči, jako je například Firefox. Tohoto API využívají Selenium testy, které jsou součástí vytvořené aplikace [55].

### 3.1.8 Sphinx

Sphinx je nástroj, který usnadňuje tvorbu softwarové dokumentace. Nabízí celou řadu výstupních formátů. Jako zdrojový-značkovací jazyk používá reStructuredText [56].

### 3.1.9 Pillow

Pillow je knihovna, která rozšiřuje možnosti zpracování obrázků [57].



## 3.2 Aplikace pro správu databáze

Cílem této kapitoly je popis základní struktury projektu a přehled použitých rozšiřujících balíčků.

### 3.2.1 Struktura projektu

Základní struktura projektu, kterou dále popisují, je následující:

```

meditorapp..... adresář projektu
├── docs/ ..... dokumentace
├── locale/ ..... překlady
├── media/ ..... soubory nahrané uživateli
├── meditor ..... adresář aplikace
│   ├── admin/ ..... definice administračního rozhraní
│   ├── migrations/ ..... migrace
│   │   └── *.py
│   ├── models/ ..... definice schématu databáze
│   │   └── *.py
│   ├── static/ ..... statické soubory
│   ├── templates/ ..... šablony
│   ├── tests ..... testy
│   │   └── *.py
│   ├── apps.py
│   └── views.py ..... funkce, které zpracovávají HTTP požadavky
├── meditorapp
│   ├── settings.py ..... konfigurace projektu
│   ├── urls.py ..... deklarace URL adres
│   └── wsgi.py ..... konfigurace rozhraní pro nasazení aplikace na server
└── manage.py ..... skript pro správu projektu

```

#### docs/

Adresář `docs/` obsahuje dokumentaci projektu. Pro její tvorbu byl použit nástroj Sphinx. Kostra dokumentace vypadá následovně:

```

docs
├── _build ..... adresář pro hotovou dokumentaci
├── source ..... zdrojové soubory
├── _static ..... statické soubory
├── _templates ..... vlastní šablony
├── conf.py ..... konfigurační soubor
├── index.rst ..... zdroj pro hlavní stranu
└── Makefile ..... spouštěcí soubor

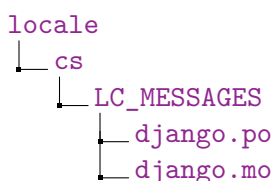
```

### 3. REALIZACE

---

#### locale/

Složka má na starosti překlad aplikace do požadovaného jazyka. `django.po` obsahuje lokalizační řetězce a po editaci se převádí do binární podoby `django.mo`, která se používá při generování stránek.



#### media/

Do adresáře se ukládají soubory nahrané uživateli. V případě této aplikace se jedná o obrázky chemických struktur, které mohou uživatelé k chemickým látkám vkládat.

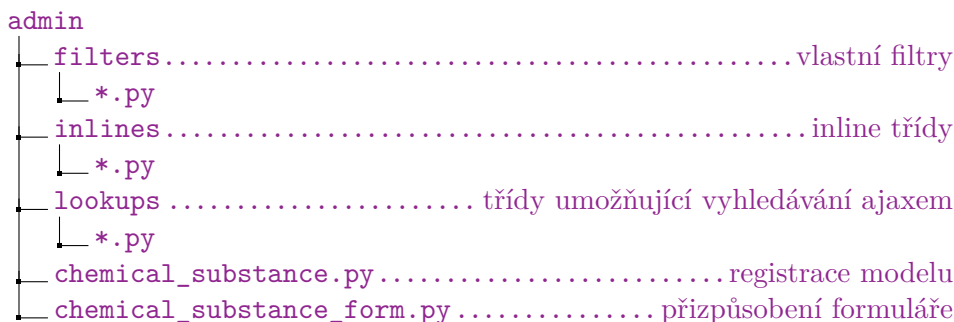
#### meditor/admin

Složka obsahuje registrace modelů a definice vlastních formulářů.

Protože standardní filtry, které se v Django používají pro vyhledávání záznamů, neumožňují hledat podle více atributů najednou, vytvořila jsem si filtry vlastní. Jejich implementace je ve složce `filters/` [58].

Inline třídy umožňují na stejném formuláři editovat jak záznamy hlavní tabulky, tak i záznamy jiné tabulky, které jsou na hlavní tabulku vázány přes cizí klíče. Použité inline třídy jsou v adresáři `inlines/`.

Aby bylo možné rozumně vybírat z mnoha položek výběrových polí, využila jsem balíček `django-ajax-select` (viz níže). Pro ten je potřeba nadefinovat tzv. vyhledávací kanály, které jsou v adresáři `lookups/`.



#### meditor/migrations

V migrační souborech v této složce jsou uchovávány veškeré změny v modelech. Tyto soubory se vygenerují automaticky na základě definice modelů.

### **meditor/models**

Schéma databáze je v Django aplikacích definováno pomocí modelů. Tabulky se definují pomocí tříd, jejich sloupce pomocí atributů dané třídy. Na základě těchto modelů lze jednoduchým způsobem vytvořit v databázi všechny potřebné tabulky.

### **meditor/static**

Ve složce jsou umístěny veškeré statické soubory aplikace (kaskádové styly, JavaScript, obrázky).

### **meditor/templates**

Veškeré vlastní šablony jsou k nalezení v tomto adresáři. `base_site.html` upravuje šablonu z balíčku `django-suit`. `input_site.html` je formulář pro vlastní filtry zmíněné výše. Adresář `edit_inline` obsahuje přizpůsobené šablony pro zobrazení tabulek vázaných přes cizí klíče.

```
templates
├── admin
│   ├── edit_inline
│   │   ├── stacked.html
│   │   └── tabular.html
│   ├── base_site.html
│   └── input_filter.html
```

### **meditor/tests**

Implementace unit testů.

### **meditor/apps.py**

Slouží ke konfiguraci aplikace.

### **meditor/views.py**

Soubor slouží k definici funkcí, které zpracovávají HTTP požadavky.

### **mediorapp/settings.py**

V tomto souboru se nachází konfigurace celého projektu – je zde možné například měnit nastavení databáze, definovat cesty ke statickým souborům, přidávat aplikace či měnit nastavení doplňků (např. `django-suit`).

### **mediorapp/urls.py**

Mapování URL cest na funkce.

#### **meditorapp/wsgi.py**

Vstupní bod pro webové servery kompatibilní s [WSGI](#).

#### **manage.py**

Utilita pro příkazový řádek, která umožňuje projekt spravovat. Používá se například k vytváření aplikací, migraci databáze, spuštění lokálního vývojového serveru či sběru statických souborů.

### **3.2.2 Rozšiřující balíčky**

Pro Django existuje mnoho dostupných balíčků, které rozšiřují základní funkcionalitu tohoto aplikačního rámce. Pro svůj projekt jsem použila následující:

#### **django-suit**

Umožňuje vytvořit moderní vzhled admin rozhraní [\[59\]](#).

#### **django-reversion**

Správa historických verzí, která umožňuje návrat k libovolnému stavu instance modelu v historii a obnovu smazaných instancí [\[60\]](#).

#### **django-extensions**

Nabízí kolekci rozšíření; instalováno za účelem generování diagramů [\[61\]](#).

#### **django-ajax-selects**

Umožňuje vybírat z mnoha položek výběrových polí zadáním hledaného textu [\[62\]](#).

### 3.3 Importní skripty

Nejdůležitějším a nejnáročnějším úkolem práce bylo pochopit způsob dosavadní evidence dat a také určit, která data je potřeba evidovat v databázi a která se naopak dají na základě jiných odvodit. Například na základě identifikačních čísel lze přiřadit záznamy z legislativy, na základě zařazení do ADR/RID klasifikace lze určit pokyny pro případ nehody atd.

Pomocí Perl skriptů jsem zanalyzovala nejen strukturu zápisu, která je velice pestrá, ale i typy evidovaných dat. Jazyk Perl jsem vybrala, protože se v praxi pro zpracování textu často využívá. Ostatně za tímto účelem jej Larry Wall navrhl [63]. Dostupné jsou i moduly pro práci s dokumenty ve formátech Microsoft Excel [64] a XML [65], takže ani s tímto typem souborů nebyl v Perlu problém. Při analýze jsem narazila na spoustu chyb v původní evidenci a spolu se zadavatelem je opravila nebo jsem úplně změnila způsob jejich zápisu.

Tyto původně analytické skripty jsem využila jako základ pro tvorbu skriptů importních. Pro každý soubor se zdroji dat tedy vznikl samostatný skript, pomocí kterého importuji data do odpovídajících tabulek vytvořené Postgres databáze. Soubory (případně adresáře) se zdroji dat se skriptům předávají jako parametry. Struktura souborů s daty je daná a je popsána na začátku každého skriptu, kromě souborů F1.txt až F8.xml a odkaz.txt, které mají strukturu složitější – ta je popsána v příloze A. Návratová hodnota 0 značí, že skript úspěšně došel a data nainportoval. Pokud dojde k chybě, je tato vypsána na chybový výstup. Přihlašovací údaje lze najít a případně upravit v modulu DbConnector.pm.

Importních skriptů je více než 30, a proto zde nejsou podrobně rozebírány. Dokumentace k nim je součástí přiloženého CD.



---

# Testování

Samotné testování sestávalo z několika fází: testování importu a exportu, jednotkových a Selenium testů a testů použitelnosti.

## 4.1 Testování importu a exportu

Databázový model byl otestován pomocí importních skriptů. Díky tomu, že dosavadní systém obsahuje více než 10 000 záznamů chemických látek, byl vytvořený databázový model v rámci jejich importu do Postgres databáze důkladně odladěn.

V rámci testování byly vytvořeny skripty pro převod z nové postgres databáze do původních textových souborů a bylo ověřeno, že se shodují s původní verzí. Tyto skripty nejsou součástí práce, jelikož nebyly součástí zadání a obsahují chráněné duševní vlastnictví společnosti.

## 4.2 Jednotkové a Selenium testy

Prostřednictvím jednotkových testů jsem otestovala vlastní funkce a metody. Vzhledem k níže popsanému problému s načítáním formulářů jsem dále vytvořila testy pomocí Selenium aplikačního rámce, které mohou odhalit problémy s načítáním stránek v prohlížečích. Selenium je nástroj umožňující testovat automaticky webové stránky v prohlížečích.

## 4.3 Testy použitelnosti

Systémové testování probíhalo manuálně za spoluúčasti zaměstnanců MEDISTYL, spol. s r.o., kteří budou v budoucnu tuto aplikaci používat. Všichni účastníci mají chemické vzdělání a jsou velmi dobře seznámeni s doménou nebezpečných chemických látek a legislativy kolem nich. V následující tabulce shrnuji profil participantů testování:

#### 4. TESTOVÁNÍ

---

Pohlaví	Věk	Zkušenosti s počítačem
žena	41	pokročilý
žena	35	vysoce pokročilý (zkušenosti s programováním)
muž	41	středně pokročilý

Tabulka 4.1: Profily participantů testování použitelnosti aplikace

Cílem testování bylo určit, do jaké míry je aplikace intuitivní, a ověřit jednotlivé případy užití:

Případy užití pro uživatele s rolí *Uživatel*:

- přihlášení do aplikace,
- vyhledání látky,
- vložení nové či editace stávající látky,
- přechod na jinou verzi chemické látky.

Uživatel s rolí *Administrátor* má definovány stejné případy užití jako *Uživatel* a navíc tyto:

- registrace nového uživatele,
- editace uživatele,
- zneplatnění uživatele.

Každému participantovi jsem v aplikaci vytvořila uživatelský účet a přidělila role *Uživatel* nebo *Administrátor*. Účastníkům jsem následně předala přihlašovací údaje, adresu webové aplikace a seznam případů užití, které je potřeba otestovat. Poté jsem každého účastníka požádala, aby při testování komentoval, co právě dělá a sledovala jsem, zda účastníkům některý z úkolů nečiní problémy. Po skončení testování jsem se účastníků ještě doptala na to, jak se jim s aplikací pracovalo, zda se jim líbí vzhled aplikace a co se jim naopak na aplikaci nelíbí.

Participantů popsal aplikaci jako intuitivní. Jednotlivé případy užití bez obtíží sami zvládli. Při testování jsme narazili na to, že formuláře se načítaly delší dobu, než bylo příjemné. To bylo způsobeno velkým počtem položek v některých polích, která nabízejí výběr z možností. Chyba byla vyřešena použitím technologie [AJAX](#) pro tato pole. Kromě tohoto problému byly odhaleny jen menší chyby, které byly po upozornění opraveny a následně znovu otestovány.

Z testování vzešly nápady na další zlepšení aplikace, které ale nebyly v původním zadání, a nebudou tedy součástí této práce. Do budoucna bych je ale ráda implementovala. Jedná se například o podporu pro tvorbu [wiki](#) stránek nebo implementaci tiketovacího systému.



---

## Závěr

Práci se podařilo úspěšně dokončit. Nejprve byl důkladně popsán dosavadní způsob evidence nebezpečných chemických látek. V dalším kroku pak byly shromážděny požadavky na nové řešení, které byly následně plněny.

Zpracovala jsem rešerši databázových systémů a na jejím základě vybrala pro databázi konkrétní relační systém. Navrhla jsem schéma uložení dat v nově vznikající databázi a toto schéma popsala.

V praktické části jsem splnila požadavek na tvorbu importních skriptů. Tyto skripty jsou dostupné na příloženém CD. Povedlo se mi také navrhnout a implementovat aplikace pro vkládání a editaci sloučenin do databáze. Výsledná aplikace s omezeným počtem dat je do konce června roku 2018 dostupná na adrese <https://meditor.classific.cz>, zdrojové kódy jsou součástí příloženého CD. Aplikace s veškerými daty je v současné době nasazena v produkčním prostředí na serveru zadavatele a je přístupná pouze v jeho lokální síti.

Úspěšně jsem aplikaci otestovala na několika úrovních. Navržené schéma bylo ověřeno testem importu 10 000 záznamů do databáze. Součástí práce jsou samozřejmě jednotkové testy a testy využívající nástroj Selenium. Na závěr proběhly testy použitelnosti.

Z testování také vzešly nápady na další rozšíření aplikace, zahrnující například podporu Wiki stránek či tiketovacího systému, které bych v budoucnu ráda implementovala.



---

## Literatura

- [1] Müller-Wille, S.: Linnaeus' herbarium cabinet: a piece of furniture and its function. *Endeavour*, ročník 30, č. 2, 2006: s. 60–64.
- [2] Hollerith, H.: The electrical tabulating machine. *Journal of the Royal Statistical Society*, ročník 57, č. 4, 1894: s. 678–689.
- [3] Klein, B.: *An Introduction to IMS: Your Complete Guide to IBM Information Management System*. Books 24x7 IT PRO, IBM Press, 2012, ISBN 9780132886871. Dostupné z: <https://books.google.cz/books?id=FLYaNUkWbYYC>
- [4] Haigh, T.: How Charles Bachman invented the DBMS, a foundation of our digital world. *Communications of the ACM*, ročník 59, č. 7, 2016: s. 25–30.
- [5] Codd, E. F.: A relational model of data for large shared data banks. *Communications of the ACM*, ročník 13, č. 6, 1970: s. 377–387.
- [6] solid IT: DB-Engines Ranking of Relational DBMS. 2017, [cit. 2017-10-18]. Dostupné z: <https://db-engines.com/en/ranking/relational+dbms>
- [7] r, P.: *Object – Oriented Database Systems : Approaches and Architectures*. Eastern Economy Edition, PHI Learning Pvt. Ltd., 2005, ISBN 9788120340930. Dostupné z: <https://books.google.cz/books?id=DBkM4XjKKw4C>
- [8] solid IT: DB-Engines Ranking of Object Oriented DBMS. 2017, [cit. 2017-10-18]. Dostupné z: <https://db-engines.com/en/ranking/object+oriented+dbms>
- [9] Noaman, A. Y.; Al Mansour, A. A.: A Comparative Study Between Two Types of Database Management Systems: XML-Enabled Relational and

- Native XML. *World Applied Sciences Journal*, ročník 19, č. 7, 2012: s. 972–985.
- [10] Bourret, R.; aj.: XML and Databases. 2005, [cit. 2017-10-18]. Dostupné z: <http://lexispublisher.com/files/xml%20guide.pdf>
- [11] solid IT: DB-Engines Ranking of Native XML DBMS. 2017, [cit. 2017-10-18]. Dostupné z: <https://db-engines.com/en/ranking/native+xml+dbms>
- [12] Moniruzzaman, A.; Hossain, S. A.: NoSQL Database: New Era of Databases for Big data Analytics-Classification, Characteristics and Comparison. *International Journal of Database Theory and Application*, ročník 6, č. 4, 2013: s. 1–13.
- [13] Vaish, G.: *Getting Started with NoSQL*. Packt Publishing, 2013, ISBN 978-1-84969-4-988.
- [14] am Programmer, I.: Best NoSQL Databases 2017 – Most Popular among Programmers. 2017, [cit. 2017-10-18]. Dostupné z: <http://www.improgrammer.net/most-popular-nosql-database/>
- [15] Rouse, M.: LAMP (Linux, Apache, MySQL, PHP). 2017, [cit. 2017-10-19]. Dostupné z: <http://whatis.techtarget.com/definition/LAMP-Linux-Apache-MySQL-PHP>
- [16] and/or its affiliates, O. C.: MySQL Customers. 2017, [cit. 2017-10-20]. Dostupné z: <https://www.mysql.com/customers/>
- [17] George Reese, R. J. Y.; Tim King, w. H. E. W.: *Managing and Using MySQL (2nd Edition)*. O'Reilly Media, 2002, ISBN 0-596-00211-4. Dostupné z: [https://docstore.mik.ua/oreilly/weblinux2/mysql/ch01\\_02.htm](https://docstore.mik.ua/oreilly/weblinux2/mysql/ch01_02.htm)
- [18] Šmíd, P.: Sun koupil společnost MySQL AB. 2017, [cit. 2017-10-20]. Dostupné z: <https://www.root.cz/zpravicky/sun-koupil-spolecnost-mysql-ab/>
- [19] Krčmář, P.: Sun právě koupila společnost Oracle. 2017, [cit. 2017-10-20]. Dostupné z: <https://www.root.cz/zpravicky/sun-prave-koupila-spolecnost-oracle/>
- [20] Foundation, M.: About MariaDB. 2017, [cit. 2017-10-20]. Dostupné z: <https://mariadb.org/about/>
- [21] Group, T. P. G. D.: History. 2017, [cit. 2017-10-20]. Dostupné z: <https://www.postgresql.org/about/>

- 
- [22] solid IT: DB-Engines Ranking - Trend of MySQL vs. PostgreSQL Popularity. 2017, [cit. 2017-10-20]. Dostupné z: [https://db-engines.com/en/ranking\\_trend/system/MySQL%3BPostgreSQL](https://db-engines.com/en/ranking_trend/system/MySQL%3BPostgreSQL)
- [23] Kellerer, T.: SQL Feature Comparison. [cit. 2017-11-7]. Dostupné z: [http://www.sql-workbench.net/dbms\\_comparison.html](http://www.sql-workbench.net/dbms_comparison.html)
- [24] Mlodgenski, J.: PostgreSQL Procedural Languages: Tips, Tricks and Gotchas. [cit. 2017-11-7]. Dostupné z: [https://www.slideshare.net/jim\\_mlodgenski/postgresql-functions](https://www.slideshare.net/jim_mlodgenski/postgresql-functions)
- [25] software BV, T.: TIOBE Index for January 2018. [online], 2018, [cit. 2018-1-24]. Dostupné z: <https://www.tiobe.com/tiobe-index>
- [26] Peters, T.: PEP 20 – The Zen of Python. [online], [cit. 2017-11-8]. Dostupné z: <http://legacy.python.org/dev/peps/pep-0020/>
- [27] Foundation, P. S.: Web Frameworks for Python. [online], [cit. 2018-1-24]. Dostupné z: <https://wiki.python.org/moin/WebFrameworks/>
- [28] Foundation, D. S.: Download Django. [online], [cit. 2018-1-24]. Dostupné z: <https://www.djangoproject.com/download>
- [29] Team, T. D.: TurboGears Licenses. [online], [cit. 2018-1-24]. Dostupné z: <http://turbogears.readthedocs.io/en/rtfd2.2.2/main/License.html>
- [30] Pierro, M. D.: web2py Download. [online], [cit. 2018-1-24]. Dostupné z: <http://www.web2py.com/init/default/download>
- [31] Web framework rankings. [online], [cit. 2018-1-24]. Dostupné z: <https://hotframeworks.com/languages/python>
- [32] DjangoSites.org: Latest Additions :: DjangoSites.org - Powered by Django. [online], [cit. 2018-1-24]. Dostupné z: <https://djangosites.org/>
- [33] Foundation, D. S.: Django documentation. [cit. 2017-11-8]. Dostupné z: <https://docs.djangoproject.com/en/1.11/>
- [34] Team, T. D.: The TurboGears Documentation. [online], [cit. 2018-1-24]. Dostupné z: <http://turbogears.readthedocs.io/en/latest/index.html>
- [35] Pierro, M. D.: web2py Documentation & Resources. [online], [cit. 2018-1-24]. Dostupné z: <http://www.web2py.com/init/default/documentation>

- [36] Stack Exchange, I.: Highest Voted 'django' Questions - Stack Overflow. [online], [cit. 2018-1-24]. Dostupné z: <https://stackoverflow.com/questions/tagged/django>
- [37] Stack Exchange, I.: Highest Voted 'web2py' Questions - Stack Overflow. [online], [cit. 2018-1-24]. Dostupné z: <https://stackoverflow.com/questions/tagged/web2py>
- [38] Stack Exchange, I.: Highest Voted 'turbogears' Questions - Stack Overflow. [online], [cit. 2018-1-24]. Dostupné z: <https://stackoverflow.com/questions/tagged/turbogears>
- [39] Kearney, S.: What is Slant. [online], [cit. 2018-1-25]. Dostupné z: <https://medium.com/building-slant/what-is-slant-5a836b200c0>
- [40] Kearney, S.: Django - What are the best general-purpose Python web frameworks usable in production sites? [online], [cit. 2018-1-25]. Dostupné z: <https://www.slant.co/topics/426/viewpoints/1/~best-general-purpose-python-web-frameworks-usable-in-production-sites-django>
- [41] Kearney, S.: TurboGears 2 - What are the best general-purpose Python web frameworks usable in production sites? [online], [cit. 2018-1-25]. Dostupné z: <https://www.slant.co/topics/426/viewpoints/6/~best-general-purpose-python-web-frameworks-usable-in-production-sites-turbogears-2>
- [42] Kearney, S.: web2py - What are the best general-purpose Python web frameworks usable in production sites? [online], [cit. 2018-1-25]. Dostupné z: <https://www.slant.co/topics/426/viewpoints/4/~best-general-purpose-python-web-frameworks-usable-in-production-sites-web2py>
- [43] Foundation, D. S.: The Django admin site. [cit. 2017-11-8]. Dostupné z: <https://docs.djangoproject.com/en/1.11/ref/contrib/admin/>
- [44] Foundation, D. S.: Django Community. [online], [cit. 2017-11-8]. Dostupné z: <https://www.djangoproject.com/community/>
- [45] Valoušek, M.: Komunita | Django Česká republika. [online], [cit. 2017-11-8]. Dostupné z: <http://www.djangoproject.cz/komunita/>
- [46] Foundation, D. S.: Django overview. [cit. 2017-11-8]. Dostupné z: <https://www.djangoproject.com/start/overview/>
- [47] Foundation, D. S.: Security in Django. [cit. 2017-11-8]. Dostupné z: <https://docs.djangoproject.com/en/1.11/topics/security/>

- 
- [48] Foundation, D. S.: FAQ: Installation | Django documentation. [online], [cit. 2018-1-29]. Dostupné z: <https://docs.djangoproject.com/en/2.0/faq/install>
- [49] Bicking, I.: Virtualenv - virtualenv 15.1.0 documentation. [online], [cit. 2018-1-29]. Dostupné z: <https://virtualenv.pypa.io/en/stable>
- [50] Foundation, D. S.: django/django: The Web framework for perfectionists with deadlines. [online], [cit. 2018-1-29]. Dostupné z: <https://github.com/django/django.git>
- [51] Foundation, D. S.: Quick install guide | Django documentation. [online], [cit. 2018-1-30]. Dostupné z: <https://docs.djangoproject.com/en/2.0/intro/install/>
- [52] Foundation, D. S.: How to get Django. [online], [cit. 2018-1-30]. Dostupné z: <https://www.djangoproject.com/download/>
- [53] Group, T. P. G. D.: PostgreSQL: Linux downloads (Red Hat family). [online], [cit. 2018-1-29]. Dostupné z: <https://www.postgresql.org/download/linux/redhat/>
- [54] Varrazzo, D.: PostgreSQL + Python | Psycopg. [online], [cit. 2018-1-29]. Dostupné z: <http://initd.org/psycopg/>
- [55] Tolfsen, A.: mozilla/geckodriver: WebDriver <-> Marionette proxy. [online], [cit. 2018-5-2]. Dostupné z: <https://github.com/mozilla/geckodriver>
- [56] Brandl, G.: Overview - Sphinx 1.8.0+ documentation. [online], [cit. 2018-5-3]. Dostupné z: <http://www.sphinx-doc.org/en/master/>
- [57] Lundh, F.: Pillow - Pillow (PIL Fork) 5.2.0.dev0 documentation. [online], [cit. 2018-5-3]. Dostupné z: <http://pillow.readthedocs.io/en/latest/>
- [58] Benita, H.: How to add a text filter to Django Admin. [online], [cit. 2018-5-3]. Dostupné z: <https://medium.com/@hakibenita/how-to-add-a-text-filter-to-django-admin-5d1db93772d8>
- [59] (darklow) DjangoSuit.com, K. S.: Django Suit - Modern theme for Django admin interface. [online], [cit. 2018-4-29]. Dostupné z: <http://djangosuit.com/>
- [60] Hall, D.: django-reversion - django-reversion 2.0.13 documentation. [online], [cit. 2018-4-29]. Dostupné z: <http://django-reversion.readthedocs.io/en/latest/>

- [61] Michael Trier, B. v. O.; contributors: django-extensions 2.0.7 documentation. [online], [cit. 2018-5-2]. Dostupné z: <https://django-extensions.readthedocs.io/en/latest/>
- [62] Sattinger, C.: django-ajax-selects - django-ajax-selects 1.4.0 documentation. [online], [cit. 2018-5-14]. Dostupné z: <http://django-ajax-selects.readthedocs.io/en/latest/>
- [63] Dařena, F.: *Myslíme v jazyku PERL: knihovna programátora*. Grada Publishing a.s., 2005, ISBN 80-247-1147-8. Dostupné z: <https://books.google.cz/books?id=jGVaAgAAQBAJ>
- [64] McLean, G.: XML::Simple. [online], [cit. 2018-5-9]. Dostupné z: <http://search.cpan.org/~grantm/XML-Simple-2.25/lib/XML/Simple.pm>
- [65] Luehrs, J.: Spreadsheet::ParseXLSX. [online], [cit. 2018-5-9]. Dostupné z: <http://search.cpan.org/~doy/Spreadsheet-ParseXLSX/lib/Spreadsheet/ParseXLSX.pm>



---

## Detailní popis současné evidence dat

V této příloze podrobně rozebírám strukturu jednotlivých textových a XML souborů se zdroji dat. Speciální značky, které slouží pouze tvůrci aplikace Medis-Alarm, zde nezmiňuji, jelikož se do databáze přenášet nebudou.

### A.0.1 F1.txt – Identifikace látky

Soubor F1.txt obsahuje data týkající se základní identifikace látky, informace o klasifikaci látky, informace o přepravě. V databázi budou uložena pouze data, která se nedají na základě jiných odvodit.

- **BDA** – unikátní identifikátor látky,
- **Název látky** – na první řádce za BDA identifikátorem,
- **Příznaky:**
  - A/O – ústrojnost látky (O – organická/A – anorganická/M – organometalická),
  - MOC – přechodný prvek a mocenství (př. Ag<sup>2+</sup>); bude pravděpodobně zařazeno pod příznak SKUP,
  - SKUP – skupiny látek, pod kterou sloučenina spadá (př. 96 – sloučeniny chlóru),
  - CLP – typ položky z hlediska CLP,
  - ADR – typ položky z hlediska ADR,
  - TRINS – typ položky z hlediska TRINS,
  - PZH – typ položky z hlediska PZH,
  - LATKAID – identifikátor záznamu v ADR (evropská dohoda o mezinárodní silniční přepravě nebezpečných věcí – více viz dále),

## A. DETAILNÍ POPIS SOUČASNÉ EVIDENCE DAT

- L/S – příznak, zda se jedná o čistou látku či směs více složek,
- puvodCLP – původ klasifikace CLP (pokud má látka harmonizovanou klasifikaci, jedná se o původ revidované CLP klasifikace),
- IMDG\_ID – identifikátor záznamu v IMDG (evropská dohoda o mezinárodní přepravě nebezpečných věcí po moři – více viz dále),
- IATA\_ID – identifikátor záznamu v IATA (dohoda o letecké přepravě nebezpečných věcí – více viz dále),

```
+BDA0020/1 CHLOR
pri: A/O-A| MOC-| SKUP-92, 96, 94, 94a| CLP-VYJM| ADR-VYJM| TRINS-TRINS1|
    PZH-VYJM| LATKAID-1017| L/S-| puvodCLP-R| IMDG_ID-1017| IATA_ID-1017
...
```

- **Synonyma** – synonyma označená číslem (př. syn :1, syn :2, . . .) je možné dohledat v zákoně na základě identifikačních čísel látky,

```
...
syn :1 chlorine_(dle 1272/2008/ES)
syn :2 Chlor_(dle Vyhl. 369/2005 Sb.)
syn :2 chlór_(dle Zák. 163/2001 Z.z.)
syn :2 chlorine_(dle 67/548/EHS)
syn :5 CHLÓR (dle ADR/RID 2017 CZ)
syn :5 CHLÓR (dle ADR/RID 2017 SK)
syn :5 CHLORINE (dle ADR/RID 2017 EN)
syn :5 CHLOR (dle ADR/RID 2017 DE)
syn :5 CHLORE (dle ADR/RID 2017 FR)
syn : chlór (dle IUPAC – CZ)
syn : chlór (dle IUPAC – SK)
syn : chlorine (dle IUPAC – EN)
syn : Chlor (dle IUPAC – PL)
syn : Chlor (dle IUPAC – DE)
syn : chlore (dle IUPAC – FR)
syn : CHLOR ; skroplony (pl)
syn : Chlorum
syn : Chlorine
syn : Chlore
syn : Cl2
...
```

- **Strukturní vzorec,**
- **Sumární vzorec,**

```
...
strukturní vzorec:Cl2
sumární vzorec: Cl2
...
```

- **Identifikační čísla:**

- CAS – registrační číslo CAS je vytvářeno americkou Chemical Abstracts Service,
- EINECS – identifikační číslo, které je vytvářeno EINECS – European Inventory of Existing Commercial Chemical Substances,
- Indexové číslo – registrační číslo chemikálií, vycházející z informačního systému zemí Evropské unie,

Pokud se jedná o směs, jsou většinou evidována též identifikační čísla jednotlivých složek.

```
...
reg.číslo CAS: 7782-50-5
Číslo ES(EINECS): 231-959-5
Index.číslo (EEC): 017-001-00-7
...
```

- **Klasifikace CLP** – klasifikace označená "harm." čerpá z přílohy VI, tabulky tab. 3.1 přílohy VI nařízení CLP 1272/2008, ostatní klasifikace jsou tzv. "neharmonizované",

```
...
Klas. CLP harm.: Ox. Gas 1; H270
                Press. Gas
                Acute Tox. 3 (~*-); H331
                Eye Irrit . 2; H319
                STOT SE 3; H335
                Skin Irrit . 2; H315
                Aquatic Acute 1; H400
Symbol CLP harm.: GHS03 GHS04 GHS06 GHS09
Sig. slovo harm.: Nebezpečí
H-označení harm.: H270 H331 H319 H335 H315 H400
EUH harm.:
Pozn.-CLP harm.: ~U~
M. faktory harm.: M=100
Klasifikace CLP: @Ox. Gas 1; H270
                Press. Gas (Liq.); H280
                Eye Irrit . 2; H319
                STOT SE 3; H335
                Skin Irrit . 2; H315
                Aquatic Acute 1; H400
                §Acute Tox. 2; H330
                #Aquatic Chronic 1; H410
Symbol CLP: GHS03 (GHS04) GHS06 GHS09
Signální slovo: Nebezpečí
H-označení: @H270 H280 H330 H319 H335 H315 H410
Poznámky-CLP: ~U~
Multipl. faktory: @M=100
                M(Chronic)=1
...
```

- **Klasifikace látky v rámci předpisů pro přepravu nebezpečných látek:**
  - ADR – silniční přeprava,
  - RID – železniční přeprava,
  - IMDG – námořní přeprava,
  - IATA – letecká přeprava,
- **ERG** – odkaz na znění pokynů pro hasiče, policii a další osoby, které by mohly přijet jako první k dopravní nehodě, při které byla přítomna nebezpečná látka,
- **ERIC** – odkaz na znění pokynů pro zásah hasičů v případě nehody nebezpečné látky bez konkrétních a spolehlivých informací o nakládání s produktem,

## A. DETAILNÍ POPIS SOUČASNÉ EVIDENCE DAT

- **HAZCHEM** – kód obsahující informace pro hašení a opatření v místě havárie v prvních minutách likvidace havárie, kde se vyskytly nebezpečné látky,

```
...
Kemlerův kód: 265
Kemlerův kód(RID):265
UN číslo: 1017
ADR: 2,2TOC
RID: 2,2TOC
Bezpeč.zn. RID/ADR: 2.3 + 5.1 + 8 (+ 13)
Bezpeč.zn. (ADR): 2.3 + 5.1 + 8
Bezpeč.zn. (RID): 2.3 + 5.1 + 8 (+ 13)
Obalová skupina: -
IMDG: 2.3
IMDG-vedl.nebez.: 5.1/8 P
IMDG-obal.skup.:
ICAO/IATA: 2.3 Zákaz letecké přepravy.
IATA-vedl.účinek: 5.1/8
IATA-obal.skup.:
ERG 2016: ~ERG124~
ERIC 2015: ~2-31~
HAZCHEM 2015: 2XE
...
```

- **REACH** – číslo přílohy REACH, ve které je látka uvedena,
- **Poznámky zpracovatele CLP a přepravy**,
- **Celní sazebník** – kód zboží dle celního sazebníku,
- **Kód nomenklatury** – kód podle nařízení 273/2004/ES o prekursorech drog,
- **Pomocné texty** – faktor přepočtu z mg/m<sup>3</sup> na ppm,

```
...
REACH: Látka je uvedena v příloze XVII.
Pozn-zprac-CLP: Klasifikace se vztahuje na čistou látku
Pozn-zprac-prepr: Není nebezpečný pro přepravu dle ADR/RID/IATA.
Celní sazebník: 2806 10 00
Kód nomenklatury: 2806 10 00
Pomocné texty: FAKTOR: 0,421
...
```

- **Popis látky**,

```
...
Popis látky:
Surová ropa, bod vzplanutí pod 23 °C, jejíž tenze par při 50 °C přesahuje 175 kPa (1,75 bar)
...
```

### A.0.2 F2.txt – Základní vlastnosti a způsoby hašení

Jedná se o poměrně málo strukturovaný text. Hlavní údaje lze rozdělit do několika kategorií, které jsou z velké části označeny tagy (znak '#' a název kategorie):

- **BDA** – unikátní identifikátor látky,

- **Název látky** – na první řádce za BDA identifikátorem,

```
+BDA0020/2 CHLOR ; zkapalněný
...
```

- **Klasifikace Diamant** – slouží k označování obalu nebezpečných látek, kde značí míru nebezpečí poškození zdraví, požáru, reaktivity a dalšího nebezpečí,

```
...
#DIAMANT_ZDRAVOTNI_NEBEZPECNOST#
^09Zdravotní nebezpečnost: 3
    Velmi nebezpečná látka! Plyn je nedýchátný a toxický,
    silně dráždí ke kašli již v malém množství.
    Dýchací přístroj a úplný ochranný oblek nutný!
#/DIAMANT_ZDRAVOTNI_NEBEZPECNOST#
#DIAMANT_HORLAVOST#
^12Hořlavost: 0
    Nehořlavá látka – neslučuje se přímo s kyslíkem.
#/DIAMANT_HORLAVOST#
#DIAMANT_REAKTIVITA#
^10Přepavní stabilita: 1
    Látka je při zahřátí nestálá. Používejte ochranné
    prostředky!
#/DIAMANT_REAKTIVITA#
...
```

- **TRINS** – systém pomoci při nehodách spojených s přepravou nebezpečných látek,

```
...
#TRINS#
TRINS

Pro tuto látku je poskytována pomoc v rámci dohody TRINS.

UN 1017 – Chlor žíravý (kapalný)
Stupeň pomoci 3 (praktická pomoc): ~T1~,~T4~,~T5~
Stupeň pomoci 2 (porada na místě): ~T1~,~T4~,~T5~,~T20~,~T22~
Stupeň pomoci 1 (telefonická porada): ~T1~,~T4~,~T5~,~T6~,~T8~,~T13~,~T20~,~T22~

~(TRINS-all)~
#/TRINS#
...
```

- **ERG** – odkaz na znění pokynů pro hasiče, policii a další osoby, které by mohly přijet jako první k dopravní nehodě, při které byla přítomna nebezpečná látka,
- **ERIC** – odkaz na znění pokynů pro zásah hasičů v případě nehody nebezpečné látky bez konkrétních a spolehlivých informací o nakládání s produktem,
- **HAZCHEM** – kód obsahující informace pro hašení a opatření v místě havárie v prvních minutách likvidace havárie, kde se vyskytly nebezpečné látky,

```
...
~(F2-ERG124)~
~(F2-2-31)~
Hazchem-kód: 2XE
...
```

## A. DETAILNÍ POPIS SOUČASNÉ EVIDENCE DAT

---

- **Nestrukturovaný text týkající se rozličných dat,**

```
...
#OPATRENI_HAVARIE#
Opatření v místě havárie:
- nehasit v blízkosti uvolněného kyslíku,
  kyslík nechat odproudit!
- pokud je nádrž rozpálená, uniká kyslík
  a podporuje hoření, nebezpečí výbuchu!
- úplná ochrana – ochranný oblek, dýchací přístroj
- látka může prudce reagovat
- látku lze ředit vodou
- zjistit možnost evakuace
- látka může vážně ohrozit okolí
- nepoužívat elektrické přístroje, jiskřící spínače,
  radary, signální zařízení, apod.
- nepoužívat motory v oblasti výskytu plynu
#/OPATRENI_HAVARIE#
...
```

```
...
#LIKVIDACE#
Likvidace:
Nádoby s unikajícím chlorem umístit na bezpečné venkovní místo
nebo do prostoru s tlakovým větráním. Připevnit vhodný regulační
ventil s odlučovačem a dlouhou hadicí vypouštět pomalu plyn do
odpovídajícího množství 15% vodného roztoku hydroxidu sodného nebo jiného
alkalického roztoku. Jakmile je všechný plyn vypuštěn, uzavřít ventil
u původní nádoby a vzniklý roztok soli odvézt na příslušné místo
k neutralizaci a likvidaci. Neutralizace se provádí přidáním k velkému
objemu redukčního činidla (siřičitan sodný, železnaté soli a.j.).
Uvolněný kapalný chlór pokrýt těžkou pěnou.
#/LIKVIDACE#
...
```

### A.0.3 F3.xml – Fyzikální a chemické vlastnosti

- **BDA** – unikátní identifikátor látky,
- **Název látky,**
- **Fyzikálně-chemické vlastnosti látky:**
  - hodnota,
  - originální hodnota – hodnota uvedená v citovaném zdroji (pouze pokud byla převedena na jinou hodnotu),
  - jednotka,
  - originální jednotka – jednotka uvedená v citovaném zdroji (pouze pokud byla převedena na jinou hodnotu),
  - platnost – na jakou koncentraci roztoku, případně na jakou látku (u hromadných položek) se údaj vztahuje,
  - specifikace – za jakých podmínek (nejčastěji teplota) platí uvedená hodnota,
  - zdroj – odkaz na zdroj uváděné informace,

```

<slouc bda="0020" nazev="CHLOR ; zkapalněný">
...
<Bod_tani>
  <zaznam>
    <hodnota>-101,0</hodnota>
    <jednotka>°C</jednotka>
    <zdroj>F3_18, F3_19, F3_1</zdroj>
  </zaznam>
  <zaznam>
    <hodnota>-101,5</hodnota>
    <jednotka>°C</jednotka>
    <zdroj>F3_7</zdroj>
  </zaznam>
</Bod_tani>
...
<Tenze_par>
  <zaznam>
    <hodnota>777,27</hodnota>
    <hodnota_orig>5,83e+3</hodnota_orig>
    <jednotka>kPa</jednotka>
    <jednotka_orig>mmHg</jednotka_orig>
    <specifikace>při 25°C</specifikace>
    <zdroj>F3_5</zdroj>
  </zaznam>
</Tenze_par>
...
<Dynamicka_viskozita>
  <zaznam>
    <hodnota>1,93e-04</hodnota>
    <hodnota_orig>0,193</hodnota_orig>
    <jednotka>Pa*s</jednotka>
    <jednotka_orig>cP</jednotka_orig>
    <platnost>kapalina</platnost>
    <specifikace>při 25°C</specifikace>
    <zdroj>F3_5</zdroj>
  </zaznam>
</Dynamicka_viskozita>
...

```

#### A.0.4 F4.txt – Přeprava a skladování

- **BDA** – unikátní identifikátor látky,
- **Název látky** – na první řádce za BDA identifikátorem,

```
+BDA0020/4 CHLOR ; zkapalněný
...
```

- **Klasifikace dle dohod ADR a RID,**

```

...
#ADR_RID#
<b>SILNIČNÍ/ŽELEZNIČNÍ PŘEPRAVA (podle ADR/RID)</b>
#TABV#
Verze: | ADR 2017 | RID 2017
UN číslo: | #HODN_UN_CIS# | #HODN_UN_CIS#
Název: </td><td colspan=2> CHLÓR
Třída ADR/RID: | 2 | 2
Klasifikační kód: | 2TOC | 2TOC
Obalová skupina: | - | -
Bezpečnostní značka: | 2.3 + 5.1 + 8 | 2.3 + 5.1 + 8 (+ 13)
Zvláštní ustanovení: | - | -
Identifikační číslo nebezpečnosti: | 265 | 265
Převážná kategorie: | 1 | 1
Kód omezení pro tunely: | ~T-C/D~ | -
Omezené množství: | 0 | 0
Vyňaté množství: | ~E0~ | ~E0~

```

## A. DETAILNÍ POPIS SOUČASNÉ EVIDENCE DAT

```

Pokyny pro balení: | P200 | P200
Zvláštní ustanovení pro balení: | - | -
Ustanovení o společném balení: |~MP9~ |~MP9~
#TABE#
#/ADR_RID#

#OLD_ADR_RID#
#S#Dřívější klasifikace RID/ADR (UN kód, třída ADR, klasifikační kód)
RID 92: 2 ,3at
RID 93: 2 ,3at
RID 95: 2 ,3at
RID 99: 2 ,2TC
ADR 99: 2 ,2TC
ADR/RID 2005: UN 1017 2, 2TC
RID 2007: UN 1017 2, 2TC
ADR 2007: UN 1017 2, 2TC
RID 2009: UN 1017, 2, 2TC
ADR 2009: UN 1017, 2, 2TC
RID 2011: UN 1017, 2, 2TOC
ADR 2011: UN 1017, 2, 2TOC
RID 2013: UN 1017, 2, 2TOC
ADR 2013: UN 1017, 2, 2TOC
RID 2015: UN 1017, 2, 2TOC
ADR 2015: UN 1017, 2, 2TOC
#E#
#/OLD_ADR_RID#
...

```

- **Doplňující informace k ADR** – například informace o zrušených vyhláškách,

```

...
#ZRUS_INFO#
~(ZRUS-48-98-A)~
#/ZRUS_INFO#
...

```

- **Klasifikace dle dohody IATA,**

```

...
#IATA#
<b>LETECKÁ PŘEPRAVA (podle DGR IATA)</b>
#TABV#
Verze: | IATA 2017
UN číslo: |#HODN_UN_CIS#
Název: | Chlorine
Třída IATA (vedlejší nebezpečí): | 2.3 (5.1, 8)
Štítky:
<b>Obalová skupina:</b>
<b>Osobní a nákladní přeprava</b>
- vyňaté množství:
- omezené množství – pokyny: | Zákaz přepravy
- omezené množství – max. množství/obal | Zákaz přepravy
- pokyny | Zákaz přepravy
- max. množství/obal
<b>Pouze nákladní přeprava</b>
- pokyny | Zákaz přepravy
- max. množství/obal
Zvláštní ustanovení | A2
Nouzová opatření pro letecké havárie | 2CP
#TABE#
#/IATA#
...

```

- **Klasifikace dle dohody IMDG,**

```

...
#IMDG#

```



```

<b>NÁMOŘNÍ PŘEPRAVA (podle IMDG)</b>
#TABV#
Verze: | IMDG 2016
UN číslo: | #HODN_UN_CIS#
Název: | CHLÓR
Třída IMDG: | 2.3
Obalová skupina:
Vedlejší nebezpečí: | 5.1/8 P
Zvláštní ustanovení:
Omezené množství: | 0
Pokyny pro případ požáru (EmS F): |(F-C)~
Pokyny pro případ úniku (EmS S): |(S-U)~
#TABE#
#/IMDG#
...

```

### A.0.5 F5.xml – První pomoc a zdravotní ošetření

- **BDA** – unikátní identifikátor látky,
- **Název látky**,

```

<slouc bda="0001" cast="4" kapitola="5"
navez="DINITROFENOL ; suchý nebo s max. 15 % hm. vody">
...

```

- **Obecné informace**,

```

...
<obecne_informace>
  <info>Obecná pravidla první pomoci viz ~P01~.</info>
  <zdroj/>
</obecne_informace>
...

```

- **Zdravotní ohrožení**,

```

...
<zdravotni_ohrozeni>
  <nezarazene>
    <info>Prach dráždí oči (zánět spojivek) a dýchací cesty (bronchitida). Při styku s
    pevnou látkou podráždění očí a kůže. Látka se vstřebává plicemi po nadýchání
    prachu, a také pokožkou. Trinitrotoluen mění krevní barvivo (tvorba MetHb) a po
    škozuje červené krvinky (hemolýza). Později dochází k poškození jater a ledvin.
    Pozor, při zahřátí k rozkladu se vyvíjejí prudce toxické nitroslí plyny.</info>
  </nezarazene>
  <pri_dlouhodobem_pusobeni>
    <info>Může způsobit poškození dýchacích cest a smyslových orgánů, centrální nervové
    soustavy, při dlouholetém účinku i poškození krevetvorby. Nebezpečí genetických
    změn, karcinogenní látka (IARC: 2A)</info>
  </pri_dlouhodobem_pusobeni>
  <pri_nadychani>
    <info>Vdechování látky (500–700 ppm) po dobu 2–3 minut může mít za následek
    nevolnost, zvracení, bolesti hlavy, ztrátu orientace, kašel, poškození plic. Draždí
    dýchací cesty. Symptomy se mohou projevit až po několika hodinách. Po
    vdechnutí par je lékařské vyšetření v každém případě nutné.</info>
  </pri_nadychani>
  <pri_zasazeni_oci>
    <info>Způsobuje podráždění a popáleniny.</info>
  </pri_zasazeni_oci>
  <pri_styku_s_kuzi>
    <info>Kontakt s kapalinou vede k omrzlinám a poleptání postižených částí těla.</
    info>
  </pri_styku_s_kuzi>
  <pri_poziti>
    <info>Způsobuje podráždění žaludečních cest a poškození jater.</info>

```

## A. DETAILNÍ POPIS SOUČASNÉ EVIDENCE DAT

```
</pri_poziti>
<pri_rozkladu_latky_zahratim_nebo_pri_pozaru>
  <info>Mohou vznikat toxické výpary sírovodíku, které dráždí oči, cesty dýchací a plí
  ce.</info>
</pri_rozkladu_latky_zahratim_nebo_pri_pozaru>
<zdroj/>
</zdravotni_ohrozeni>
...
```

### • Příznaky,

```
...
<priznaky>
  <nezarazene>
    <info>Hořká pachuf v ústech. Pálení očí, sliznice nosu a hrtanu, kašel, velká
    nevolnost, zvracení, kolaps, křeče.</info>
  </nezarazene>
  <pri_kratkodobem_pusobeni>
    <info>Koncentrace 0,25% par ve vzduchu je nebezpečná při vdechování po dobu 30
    min.</info>
  </pri_kratkodobem_pusobeni>
  <pri_nizkych_koncentracich>
    <info>Při nepatrných koncentracích dráždění sliznice hrtanu, slzení, silná nevolnost,
    zvracení, strach, bolesti hlavy, růžové zbarvení kůže, dušnost.</info>
  </pri_nizkych_koncentracich>
  <pri_vysokych_koncentracich>
    <info>Při vysokých koncentracích bezvědomí, křeče, ochrnutí dechu, smrt.</info>
  </pri_vysokych_koncentracich>
  <pri_styku_s_kuzi>
    <info>Dochází k dráždění a zčervenání již u jednocentního vodného roztoku.
    Kontakt s více než 40% roztoky způsobuje tvorbu puchýřů.</info>
  </pri_styku_s_kuzi>
  <pri_tezke_otrave>
    <info>Okamžité bezvědomí, koma, křeče, zástava dechu, zástava srdce.</info>
  </pri_tezke_otrave>
  <pri_stredne_tezke_a_lehke_otrave>
    <info>Slzení, pálení a bolest očí, dráždění dýchacích cest, kašel, dušnost, silná
    nevolnost, zvracení, průjem, křeče v břiše. Bolesti hlavy, malátnost, rozrušení,
    bezvědomí. Poruchy srdečního rytmu.</info>
  </pri_stredne_tezke_a_lehke_otrave>
  <pri_rozkladu_latky_zahratim_nebo_pri_pozaru>
    <info>Dráždivý kašel, dušnost, křeče, bezvědomí, smrt.</info>
  </pri_rozkladu_latky_zahratim_nebo_pri_pozaru>
  <pri_nadychani>
    <info>Při vdechování nerozložené látky: lehké podráždění dýchacích cest, kašel s ná
    slednou bronchitidou.</info>
  </pri_nadychani>
  <pri_poziti>
    <info>Průjemy, nevolnost, zvracení, koliky, svalové křeče. Při vdechnutí produktů
    vzniklých rozkladem za ohřevu: podráždění očí a dýchacích cest, plicní edém!</
    info>
  </pri_poziti>
  <pri_zasazeni_oci>
    <info>Zčervenání očí.</info>
  </pri_zasazeni_oci>
  <zdroj/>
</priznaky>
...
```

### • Pokyny pro ošetření,

```
...
<pokyny_pro_osetreni>
  <nezarazene>
    <info>Symptomatická léčba.</info>
  </nezarazene>
  <pri_zasazeni_oci>
    <info>Po zasažení oka okamžitě výplach spojivkového vaku. Okamžitě přivolat očního
    lékaře!</info>
  </pri_zasazeni_oci>

```

```

<pri_rozkladu_latky_zahratim_nebo_pri_pozaru>
  <info>Pozor na plicní edém způsobený nitrosními plyny.</info>
</pri_rozkladu_latky_zahratim_nebo_pri_pozaru>
<pri_lehke_otrave>
  <info>(s pacientem je možná komunikace) podat natriumthiosulfát (Devenan Spofa) ve
    výše uvedených dávkách.</info>
</pri_lehke_otrave>
<pri_rozkladu_latky_zahratim_nebo_pri_pozaru>
  <info>Viz fluorovodík.</info>
</pri_rozkladu_latky_zahratim_nebo_pri_pozaru>
<pri_zasazeni_oci>
  <info>Po vstříknutí do oka, okamžitý důkladný výplach spojivkového vaku. Okamžitě
    přivoláme očního lékaře!</info>
</pri_zasazeni_oci>
<pri_kratkodobem_pusobeni>
  <info>Mez snesitelnosti je asi 0,15 mg/m3. Inhalace 900 mg/m3 po dobu 30 minut
    smrtelná. Při poskytování první pomoci nosit úplné ochranné obleky!</info>
</pri_kratkodobem_pusobeni>
<dalsi_pokyny_pro_lekare>
  <info>Ošetřit také poleptání očí, protože inkrustace vápna mohou vážně ohrozit zrak.
    Neprodleně vyžádat pomoc očního lékaře.</info>
</dalsi_pokyny_pro_lekare>
<lecba_methemoglobinemie>
  <info>Methylénová modř (Coloxid) nebo thionin (Katalysin), nebo podpůrně ev. při
    podezření na nízkou methemoglobinémii podat vysokou dávku kys. askorbové i.v.
    U těžkých případů krevní transfuze nebo event. výměnná transfuze. Bohatý pří
    sun tekutin, ev. izotonický hroznový cukr a roztok NaCl i.v. Udržovat dostateč
    nou diurézu pro nebezpečí anurie při hemolýze. Při požáru pozor na otravu
    nitrosními plyny.</info>
</lecba_methemoglobinemie>
<pri_styku_s_kuzi>
  <info>Poškození kůže se léčí jako poleptání louhy. Symptomatická léčba.</info>
</pri_styku_s_kuzi>
<pri_poziti>
  <info>Výplach žaludku při orálním příjmu se provádí s přísadou parafinového oleje (asi
    100 ml). Potom aplikovat intragastricky asi 50 ml spolu se síranem sodným.</
    info>
</pri_poziti>
<zdroj/>
</pokyny_pro_osetzeni>
...

```

### A.0.6 F6.xml – Toxicita

- BDA – unikátní identifikátor látky,
- Název látky,

```

<compound bda="0001">
  <name>DINITROFENOL</name>
  <details>suchý nebo s méně než 15% hm. vody</details>
...

```

- Akutní toxicita,

```

...
<toxicology processingStage="f">
  <note/>
  <test type="LDLo" administration="orálně" species="člověk">
    <value>36</value>
    <unit>mg/kg</unit>
    <comment>koma, změny srdečního rytmu, zvýšení tělesné teploty</comment>
    <citation/>
    <duration/>
  </test>
  <test type="LD50" administration="orálně" species="králík">
    <value>30</value>
    <unit>mg/kg</unit>

```

## A. DETAILNÍ POPIS SOUČASNÉ EVIDENCE DAT

```
        <comment>motorické změny, porucha souměrnosti pohybů, tetanie</comment>
        <citation/>
        <duration/>
    </test>
</toxicology>
...
```

### • Ekotoxická,

```
...
<ecotoxicology processingStage="p">
  <note/>
  <test type="LC50" species="Gammarus fasciatus (blešivec)"
        speciesClass="sladkovodní koryši">
    <value>2,100–2,500</value>
    <unit>mg/l</unit>
    <comment/>
    <citation/>
    <duration>48 hod.</duration>
  </test>
  <test type="toxická" species="Pseudomonas putida" speciesClass="bakterie">
    <value>115</value>
    <unit>mg/l</unit>
    <comment/>
    <citation>-F6–lit–234~</citation>
    <duration/>
  </test>
  <test type="LC100" species="Phoxinus phoxinus (střevle potoční)" speciesClass="ryby">
    <value>10</value>
    <unit>mg/l</unit>
    <comment/>
    <citation>-F6–lit–262~, ~F6–lit–131~</citation>
    <duration>24 hod.</duration>
  </test>
</ecotoxicology>
...
```

### • Chronická toxicita,

```
...
<chronictox processingStage="">
  <note/>
  <test type="TCLo" administration="inhalačně" species="potkan">
    <value>12800</value>
    <unit>ppb – 7 hod.</unit>
    <comment>plice, hrudník, dýchání, v souvislosti s chronickými údaji</comment>
    <citation>-F6–lit–676~</citation>
    <duration>65 dní (přerušovaně)</duration>
  </test>
  <test type="TCLo" administration="inhalačně" species="morče">
    <value>12800</value>
    <unit>ppb – 7 hod.</unit>
    <comment>plice, hrudník, dýchání, výživa, hrubý metabolismus, v souvislosti s
      chronickými údaji</comment>
    <citation>-F6–lit–676~</citation>
    <duration>65 dní (přerušovaně)</duration>
  </test>
</chronictox>
...
```

### • Vodní toxicita,

```
...
<aquatoxicology processingStage="f">
  <test type="2B" species="101" speciesClass="v přípravě">
    <value>Anthraquinone</value>
    <unit>cmpd</unit>
    <comment>IARC</comment>
  </test>
</aquatoxicology>
```

```

        <citation/>
        <duration/>
    </test>
</aquatotoxicology>
...

```

- **Dráždivost,**

```

...
< irritability processingStage="f">
    <note/>
    <test type="test dráždivosti" administration="aplikace na kůži" species="králík">
        <value>300</value>
        <unit>mg</unit>
        <comment>slabé podráždění</comment>
        <citation/>
        <duration>4 týdny (přerušovaně)</duration>
    </test>
</ irritability >
...

```

- **Toxicita pro reprodukci,**

```

...
<teratogenity processingStage="s">
    <note>embryotoxický a fetotoxický účinek, vývojové změny po inhalační expozici</note>
</teratogenity>
...

```

- **Mutagenita,**

```

...
<mutagenicity processingStage="s">
    <note>tvoří kovalentní vazbu s DNA (játra, ledviny, plíce myši a potkanů, pokusy in vitro i in vivo) Amesův test: negativní pokusy in vivo rozporné: negativní mikronukleus test, analýza chromozómových aberací a dominantní letální test u myši po orální aplikaci, pozitivní mikronukleus test po intraperitoneální aplikaci u myši</note>
</mutagenicity>
...

```

- **Karcinogenita,**

```

...
<carcinogenity processingStage="s">
    <note>dlouhodobé experimenty po orální aplikaci u potkanů a myši: pouze u krysích samců zvýšený výskyt neoplastických nodulů v játrech</note>
</carcinogenity>
...

```

- **Biokoncentrace,**

```

...
<biokonc processingStage="s">
    <note>* Aroclor 1260. Persistence (poločas rozpadu v půdě: 10 dní–1,5 roku) a vysoký rozdělovací koeficient isomerů (log Kow=4,3–8,26) představují nezbytné podmínky pro koncentraci v organismech [00@ RITTER, K.R et al. Persistent Organic Pollutants : an assesment report on DDT–Aldrin–Dieldrin–Endrin–Chlordane.. WHO : Ženeva, 1995].</note>
    <test type="120000" administration="Pimephales promelas" species="">
        <value>250 dní</value>
        <unit>sladká</unit>
        <comment>3 ug/l*</comment>
        <citation>-F6–lit–1577–</citation>
        <duration/>
    </test>

```

## A. DETAILNÍ POPIS SOUČASNÉ EVIDENCE DAT

---

```
<test type="270000" administration="Pimephales promelas" species="">
  <value>250 dní</value>
  <unit>sladká</unit>
  <comment>2,1 ug/l*</comment>
  <citation>-F6-lit-1577~</citation>
  <duration/>
</test>
</biokonc>
...
```

- **Hodnocení,**

```
...
<evaluation>Škodlivé při vdechování, ve styku s pokožkou a při požití. Dráždí oči, dýchací
systém a pokožku.</evaluation>
...
```

- **Faktor přepočtu z mg/m<sup>3</sup> na ppm,**

```
...
<raw>
  <faktor>0,108</faktor>
  <mol_hm>227,13</mol_hm>
</raw>
<faktor pritomen="ano"/>
...
```

### A.0.7 zdrojeF7.xml – Legislativa – údaje

- **Havárie,**

```
...
<havarie stat="CZ" zneni="sevesoIII-I" prirazeno="gr">
  <jmeno>E1 NEBEZPEČNOST PRO VODNÍ PROSTŘEDÍ V KATEGORII AKUTNÍ 1
  NEBO CHRONICKÁ 1</jmeno>
  <mnozstvi1>100</mnozstvi1>
  <mnozstvi2>200</mnozstvi2>
  <vlastnost>Aquatic Chronic 1; H410</vlastnost>
</havarie>
...
```

- **Hygienické limity,**

```
...
<hyg_lim stat="CZ" zneni="9/2013" prirazeno="cas">
  <jmeno>Kyselina pikrová</jmeno>
  <CAS>88-89-1</CAS>
  <PEL>0,1</PEL>
  <NPK_P>0,5</NPK_P>
  <poznamka>D, I, S</poznamka>
</hyg_lim>
...
```

- **Biologické limity,**

```
...
<biol_lim stat="CZ" zneni="107/2013" prirazeno="gr">
  <jmeno>Fluoridy</jmeno>
  <ukazatel>Fluorid</ukazatel>
  <lim_hod_1>10 mg/g kreatininu</lim_hod_1>
  <lim_hod_2>60 μmol/mmol kreatininu</lim_hod_2>
  <doba_odberu>konec směny</doba_odberu>
  <material>moč</material>
</biol_lim>
...
```

```
<skupina>12</skupina>
</biol_lim>
...
```

- **Limity pro obchod,**

```
...
<obchod stat="EU" zneni="1258/2013" prirazeno="cas">
  <CAS>7647-01-0</CAS>
  <nazev>Kyselina chlorovodíková/chlorovodík</nazev>
  <kat>3</kat>
  <priloha>I</priloha>
</obchod>
...
```

- **Prahové hodnoty pro integrovaný registr znečišťování,**

```
...
<irz stat="CZ" zneni="450/2011" prirazeno="cas">
  <poradi>68</poradi>
  <CAS>91-20-3 </CAS>
  <jmeno>Naftalen </jmeno>
  <prah_hodnota>100</prah_hodnota>
</irz>
...
```

## A.0.8 F8.xml – Legislativa – předpisy

- **Identifikace a klasifikace – informace překopírované z F1.txt,**

```
<slouc bda="0001" nazev="DINITROFENOL ; suchý nebo s max. 15 % hm. vody">
  <priznaky a_o="O" moc="" skup="" clp="VYJM" adr="VYJM" trins="0" pzh="" latkaid
    ="0076" ls="L" puvod_clp="" />
  <id>
    <casrn>25550-58-7</casrn>
    <einecs>247-096-2</einecs>
    <cas_sl></cas_sl>
    <einecs_sl></einecs_sl>
    <index_c>609-016-00-8</index_c>
    <eec_sk></eec_sk>
    <sum_vz>C6H4N2O5</sum_vz>
  </id>
  <klasif_DSD>
    <symbol>E T</symbol>
    <r_vety>2-4-23/24/25</r_vety>
    <s_vety>(1/2-)28-35-37-45</s_vety>
    <klas_ec></klas_ec>
  </klasif_DSD>
  <klasif_CLP>
    <klas_clp>Acute Tox. 3 (~~); H331@Acute Tox. 3 (~~); H311@Acute Tox. 3 (~~);
      H301@STOT RE 2 (~~); H373 (~~~)@Aquatic Acute 1; H400@Aquatic Chronic
      1; H410</klas_clp>
    <sym_clp>GHS06 GHS08 GHS09</sym_clp>
    <sig_slovo>Nebezpečí</sig_slovo>
    <h_ozn>H331 H311 H301 H373 H410</h_ozn>
    <euh></euh>
  </klasif_CLP>
  <klasif_preprava>
    <adr>1,1.1D</adr>
    <un>0076</un>
  </klasif_preprava>
  ...
</slouc>
```

- **Zákony – odkazy na zákony, ve kterých je látka zmíněna,**

## A. DETAILNÍ POPIS SOUČASNÉ EVIDENCE DAT

```
...
<zakon tema="BALENÍ" platnost="P">F8-EU-1272-2008-obal</zakon>
<zakon tema="BIOCIDY" platnost="Z">F8-CZ-125-2005</zakon>
<zakon tema="CHEMICKÉ ZBRANĚ" platnost="P" pozn="Tato látka je uvedena v Seznamu 3
  - Méně nebezpečné látky, oddíl A - Toxické látky, pod názvem: 02 Chlorokyan ">F8-CZ
  -208-2008-3</zakon>
<zakon tema="HAVÁRIE" platnost="P">F8-CZ-224-2015</zakon>
<zakon tema="HYGIENICKÉ LIMITY" platnost="Z">F8-PL-217-2002</zakon>
<zakon tema="KLASIFIKACE" platnost="P">F8-EU-1179-2016</zakon>
<zakon tema="KOSMETIKA" platnost="Z">F8-CZ-26-2001-Z</zakon>
<zakon tema="OBCHOD" platnost="Z" pozn="Látka je uvedena v Seznamu chemických látek,
  na které se vztahuje postup oznámení o vývozu podle 689/2008/ES (čl. 7) pod názvem:
  Ethylenoxid (Oxiran)">F8-EU-689-2008</zakon>
<zakon tema="OCHRANA ZDRAVÍ" platnost="P">F8-CZ-258-2000-azbest</zakon>
<zakon tema="OCHRANA ŽIVOTNÍHO PROSTŘEDÍ" platnost="P" pozn="Těkavé organické l
  átky jsou uvedeny v příloze č. 5, 7, 8 a 11.">F8-CZ-415-2012</zakon>
<zakon tema="ODPADY" platnost="P">F8-CZ-34-2008</zakon>
<zakon tema="PESTICIDY" platnost="P">F8-CZ-381-2007</zakon>
<zakon tema="POTRAVINY" platnost="P">F8-EU-K399-1999</zakon>
<zakon tema="REACH" platnost="Z">F8-Z-posuz_PBT_REACH</zakon>
<zakon tema="TRESTNÍ PRÁVO" platnost="P">F8-CZ-467-2009</zakon>
...
```

### A.0.9 odkaz.txt – Znění odkazů

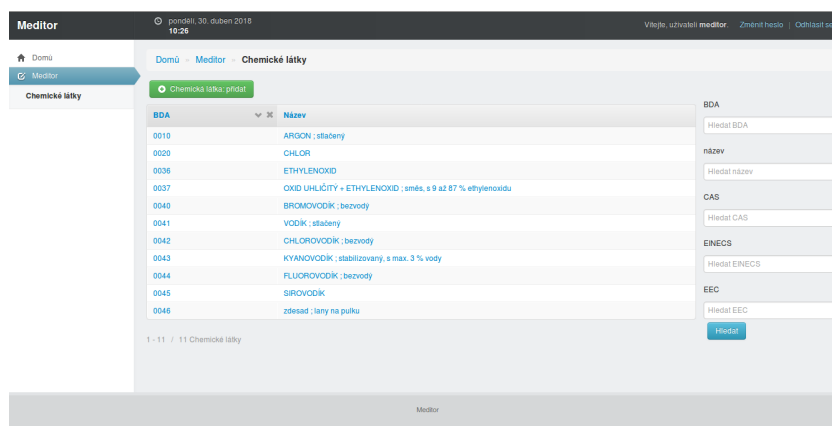
- **Název odkazu** – následuje za textem "++ODKAZ "
- **Alternativní název odkazu** – následuje za znakem "|"
- **Text odkazu** – vše za prvním řádkem

```
...
++ODKAZ F8-CZ-221-2004-1467

<td class="v">KLASIFIKACE</td> <td class="v">#IMG:CZ#</td> <td class="v">221/2004 Sb
.</td> <td class="v">ZRUŠENO (1.6.2009 zákonem č. 371/2008 Sb.)</td> <td class="v">
Vyhláška č. 221/2004 Sb., kterou se stanoví seznamy nebezpečných chemických látek a nebezpeč
ných chemických přípravků, jejichž uvádění na trh je zakázáno nebo jejichž uvádění na trh, do
oběhu nebo používání je omezeno</td> <td class="v">-F8-CZ-221-2004-1467-text-</td>
...
++ODKAZ F3_2|2
F.A. Cotton et al., Advanced Inorganic Chemistry, Sixth Edition; Wiley-Interscience
...
```



# Ukázka vzhledu aplikace Meditor



Obrázek B.1: Ukázka vzhledu aplikace – seznam látek

## B. UKÁZKA VZHLEDU APLIKACE MEDITOR

The screenshot displays the Meditor application interface for editing a chemical substance. The page title is "0010 - ARGON ; sřažené". The interface includes a navigation menu on the left with "Chemické látky" selected. The main content area is divided into several sections:

- Identifikace:** Fields for "BDA:" (0010), "Název:" (ARGON), and "Doplňující název:" (sřažené).
- Identifikační čísla:** A table of identification numbers with their respective formats and units.
- Tools:** A sidebar with "Historie" and "Chemická látka: přidat".
- Složky:** A section for "Přidat složku".

Identifikační číslo	Formát	Učtovací jednotka
Registrační číslo CAS:	7440-37-1	Formát: N(2-7); NN-R (N je číslo, R je kontrolní číslice)
Číslo ES:	231-147-0	Formát: NNN-NNN-R (N je číslo, R je kontrolní číslice)
Indexové číslo:		Formát: MNN-NNN-NN-R (M je 0-16, N je číslo, R je kontrolní číslice)
Indexové číslo odvětví:		Formát: MNN-NNN-NN-R (M je 0-16, N je číslo, R je kontrolní číslice)
Indexové číslo skupiny 1:		Formát: MNN-NNN-NN-R (M je 0-16, N je číslo, R je kontrolní číslice)
Indexové číslo skupiny 2:		Formát: MNN-NNN-NN-R (M je 0-16, N je číslo, R je kontrolní číslice)
Celní sazebník:	2804 21 00	Formát: NNNN_NN_NN (N je jakýkoliv číslo, _ je mezera)
Kód nomenklatury:		

Obrázek B.2: Ukázka vzhledu aplikace – formulář pro editaci látky

## Obsah přiloženého CD

	readme.txt.....	stručný popis obsahu CD
	src	
	impl.....	zdrojové kódy implementace
	thesis.....	zdrojová forma práce ve formátu $\text{\LaTeX}$
	text.....	text práce
	thesis.pdf.....	text práce ve formátu PDF