

Metode umjetne inteligencije u kemijskom inženjerstvu



Predavači

izv. prof. dr. sc. Željka Ujević Andrijić
prof. dr. sc. Nenad Bolf

Asistent

Filip Vretenar, univ. mag. ing. cheming.

Nastava

Predavanja: UR, utorak 11-12

Vježbe: UR, 2 grupe, četvrtak 16-17:30
petak 11-12:30

Pokazati [Plan nastave](#)

Nastavni materijali

- Presentacije s **predavanja** – osnovni sadržaj kolegija
- PDF vodiči za rad na **vježbama**
- Materijali na stranici FKIT-a i Merlinu
- **Skripta** „Metode umjetne inteligencije u kemijskom inženjerstvu” – detaljnija objašnjenja i dodatni sadržaji
- **Ocjena**: Presentacija seminarskog rada + Kolokvij u Google Colabu na vježbama



Sveučilište u Zagrebu
Fakultet kemijskog
inženjerstva i tehnologije



Metode umjetne inteligencije u kemijskom inženjerstvu

Pripremili:

Izv. prof. dr. sc. Željka Ujević Andrijić

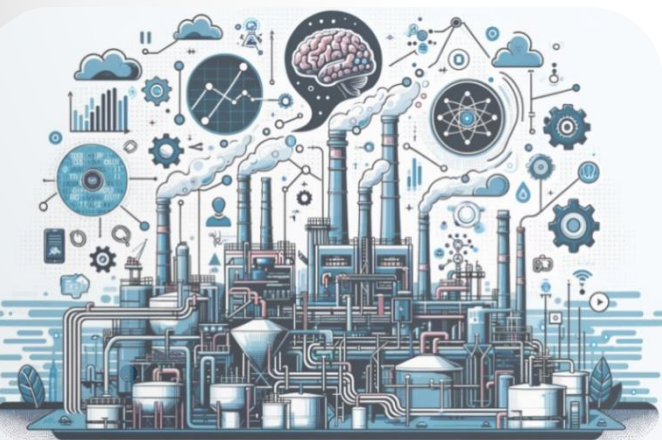
Prof. dr. sc. Nenad Bolf

*Interno izdanje
Niti jedan dio ove publikacije ne smije se
fotokopirati ili umnožavati bez pismenog
odobrenja
Zagreb, 2026.*



Što ćete naučiti na ovom predmetu?

- Pregled temeljnih metoda strojnog učenja.
- Primijeniti metode za predobradu velikih količina podataka i interpretirati rezultate dobivenih modela.
- Upoznat ćete prednosti i nedostatke različitih metoda predobrade podataka i strojnog učenja.
- Moći ćete prepoznati probleme u kemijskom inženjerstvu za koje je pogodno primijeniti metode umjetne inteligencije.
- Naučit ćete osnove rada u **Python**-u s relevantnim paketima.



Što je inteligencija?

Česta definicija je da je to sposobnost snalaženja u novim situacijama.

Postoji nekoliko skupina definicija inteligencije, a obično se navode slijedeće **sposobnosti** kao osnova inteligencije:

- učenja,
- zaključivanja,
- rješavanja problema,
- prilagodbe novim situacijama i
- primjene stečenog znanja.

Početak umjetne inteligencije kao znanstvene discipline

Umjetna inteligencija kao znanstvena disciplina

prihvaćena je 1956. na konferenciji na Dartmouth College, SAD.

Termin *artificial intelligence* predložio je **John McCarthy**, jedan od organizatora skupa.

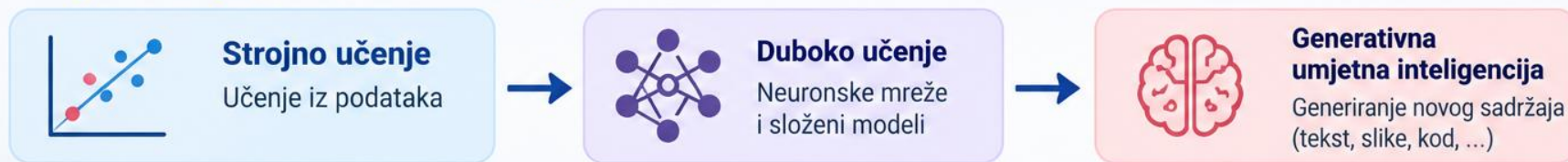
Cilj skupa je bio istražiti mogućnost razvoja strojeva sposobnih za učenje.



Područja umjetne inteligencije:



Strojno učenje (područje u fokusu kolegija)

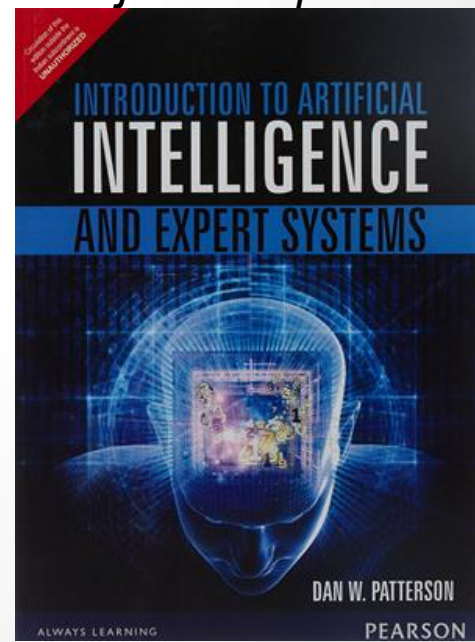


Definicija umjetne inteligencije

Dan W. Patterson (1990.)

„Umjetna inteligencija grana je računarske znanosti koja se bavi proučavanjem i oblikovanjem računalnih sustava koji pokazuju neki oblik inteligencije.

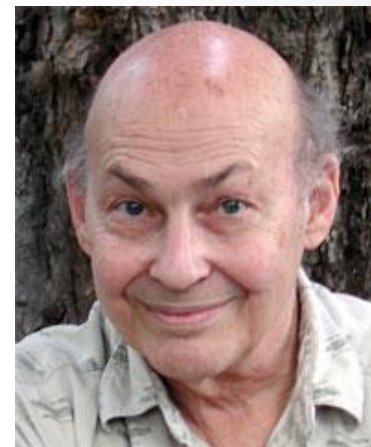
Takvi sustavi mogu učiti, mogu donositi zaključke o svijetu koji ih okružuje, oni razumiju prirodni jezik te mogu spoznati i tumačiti složene vizualne scene te obavljati druge vrste vještina za koje se zahtijeva čovjekov tip inteligencije.”



Definicije umjetne inteligencije

Marvin Minsky (MIT)

„Znanost o tome kako postići da strojevi izvode zadatke koji bi, kada bi ih radio čovjek, iziskivali inteligenciju.”



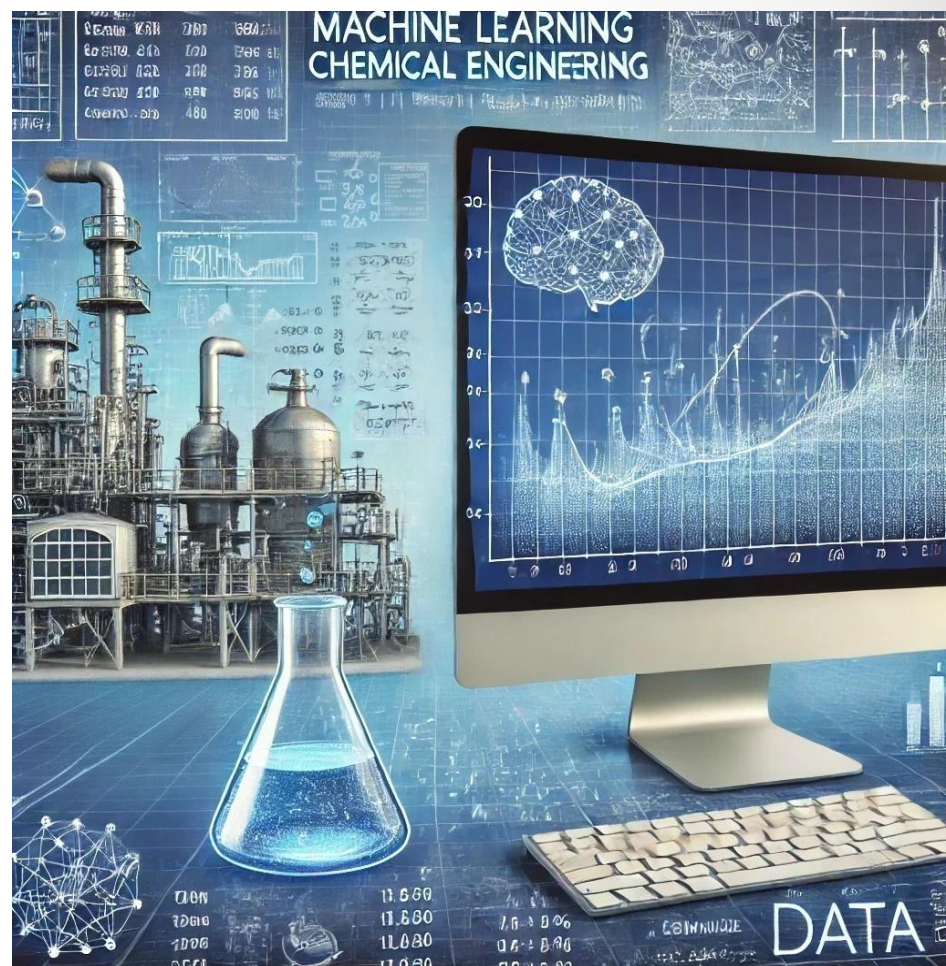
Elain Rich (University of Texas u Austinu)

„Umjetna inteligencija bavi se izučavanjem kako računalo učiniti sposobnim da obavlja poslove koje u ovom času ljudi obavljaju bolje.”



Strojno učenje (engl. *Machine learning*)

- **Strojno učenje** je grana umjetne inteligencije koja omogućuje računalima da uče iz podataka i donose odluke na temelju tih podataka, bez potrebe za izričitim programiranjem za obavljanje specifičnih zadataka.
- Strojno učenje koristi algoritme koji prepoznaju obrasce i relacije unutar podataka te primjenjuju te obrasce za donošenje predviđanja ili odluka.



PRIMJENA STROJNOG UČENJA

Porastom količine podataka koji se kontinuirano stvaraju strojno učenje postalo je posebno važno:

- **medicina** – dijagnostika i procjena rizika
- **energetika** – predviđanje potrošnje i proizvodnje energije
- **financije** – analiza tržišta i procjena rizika
- **preporučivački sustavi** – preporuke filmova, glazbe i proizvoda
- **trgovina** – analiza ponašanja i potreba kupaca
- **industrija** – predviđanje svojstava proizvoda, otkrivanje poremećaja i optimiranje procesa

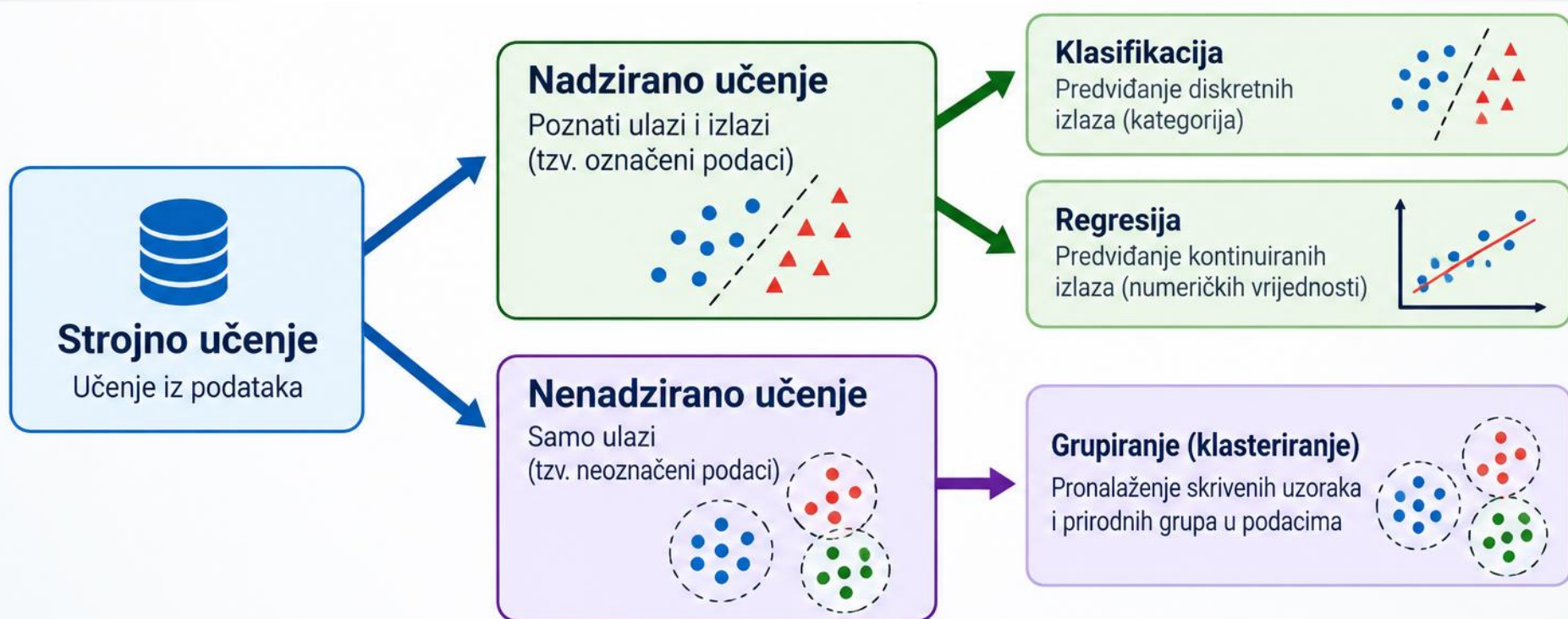
Zajedničko svim primjenama: **učenje obrazaca iz podataka** radi predviđanja, klasifikacije ili donošenja odluka.



KAKO RADI STROJNO UČENJE

Osnovne tehnike:

- **Nadzirano učenje** (engl. *Supervised learning*)
- **Nenadzirano učenje** (engl. *Unsupervised learning*)



KAKO ODABRATI ALGORITAM?

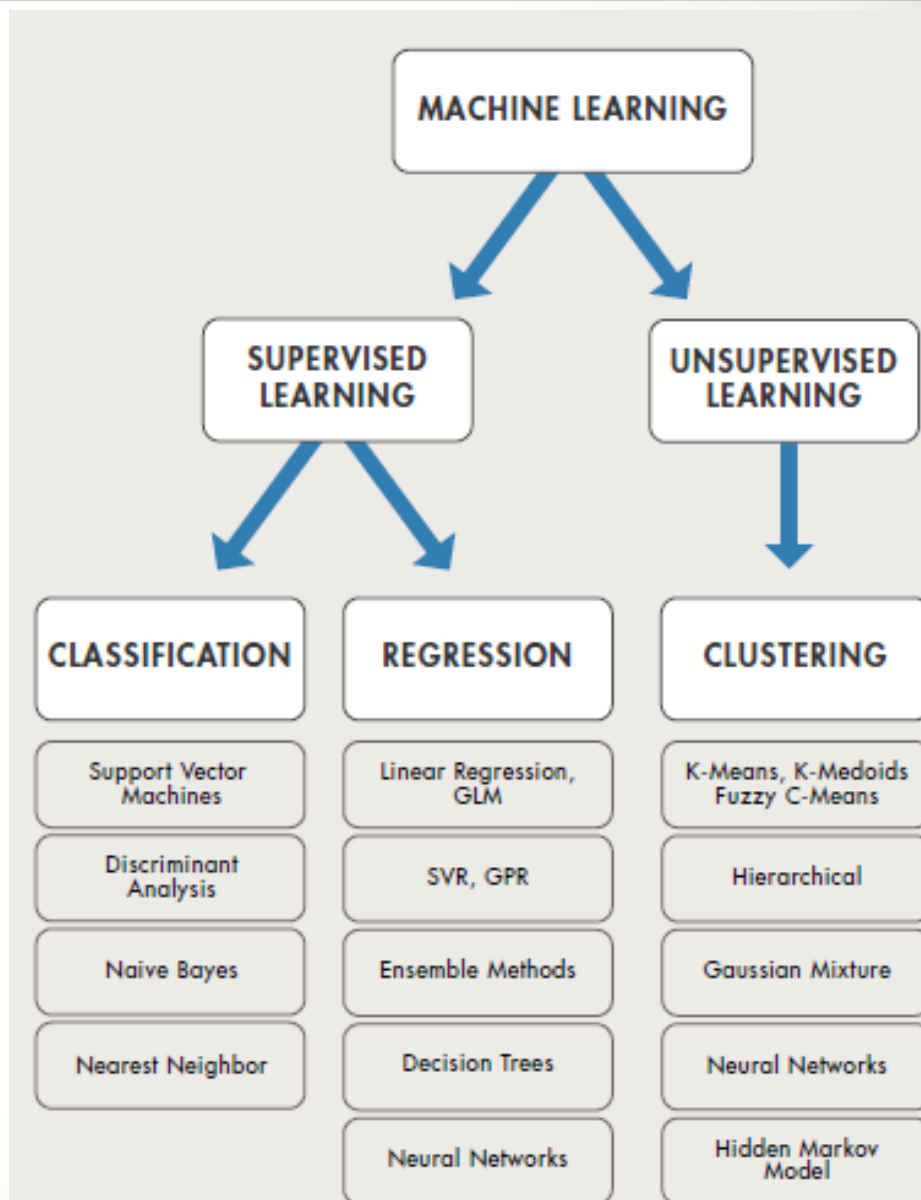
Izbor algoritma je velik ;

Svaki od njih ima drugačiji pristup učenju;

Ne postoji najbolja niti univerzalna metoda;

Čak i vrloiskusni eksperti ne mogu predvidjeti hoće li algoritam raditi dobro;

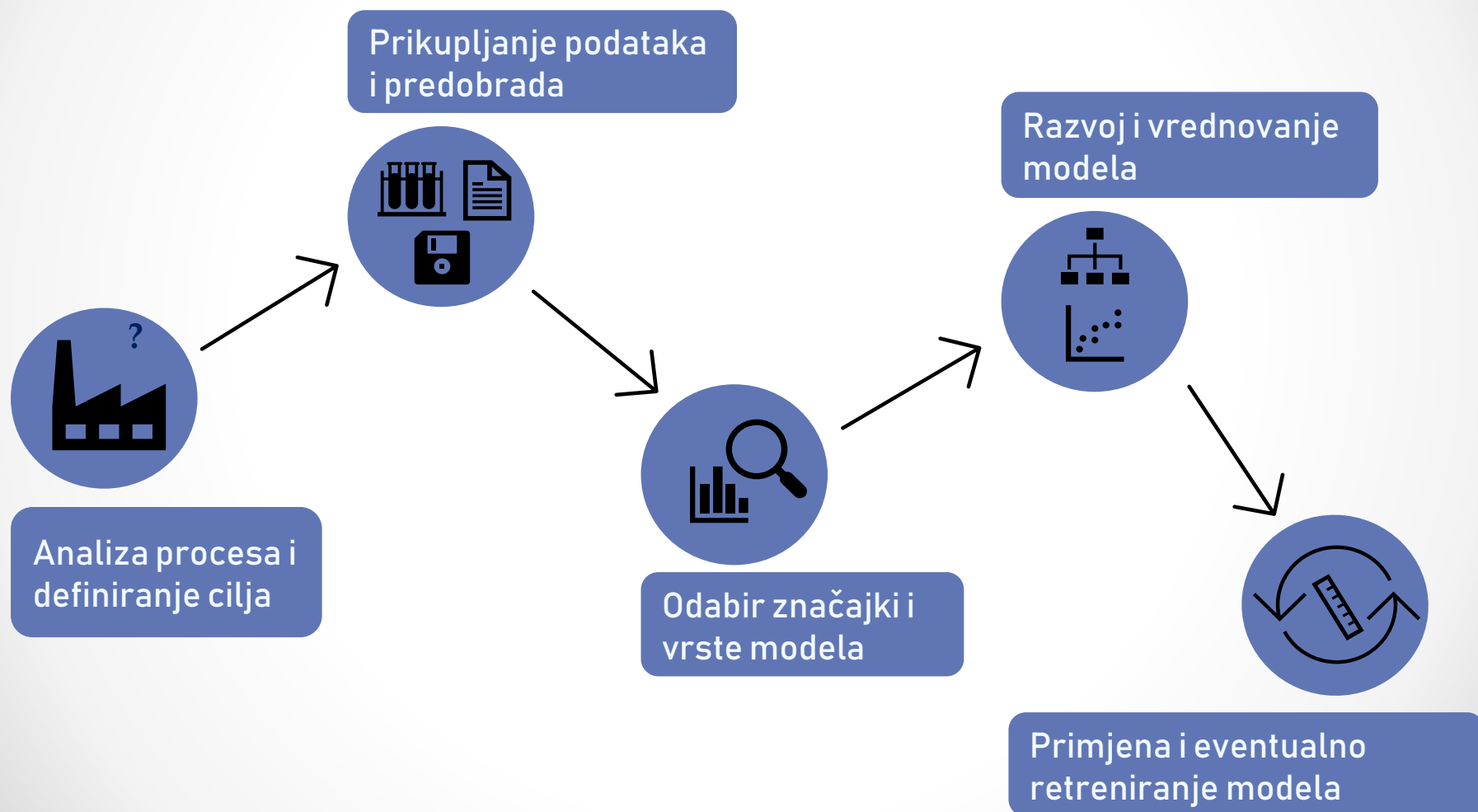
Odabir algoritma ovisi i o **broju i vrsti** podataka, što se želi postići te gdje i kako će se **primijeniti** rezultati.



KADA PRIMIJENITI STROJNO UČENJE?

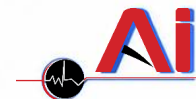
- Strojno učenje posebno je korisno kada su dostupne **dovoljne količine kvalitetnih podataka**, a **odnosi** između varijabli **složeni**, kada je teško je opisati ih klasičnim modelima ili je njihovo modeliranje računalno zahtjevno.
- Primjenjuje se za predviđanje, klasifikaciju, otkrivanje obrazaca, procjenu teško mjerljivih veličina i potporu odlučivanju.

Metodologija



Umjetna inteligencija u kemijskom inženjerstvu

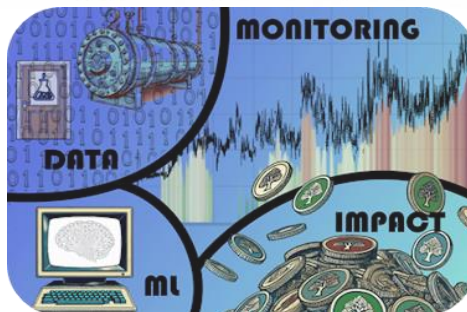
iz naše istraživačke prakse



Soft senzori u rafinerijskoj proizvodnji



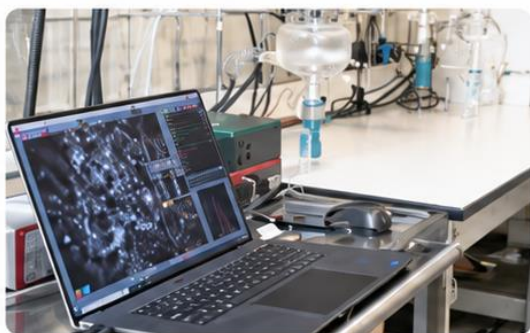
Dijagnostika procesne opreme



Procjena nastanka kokristala u farmaceutskom razvoju



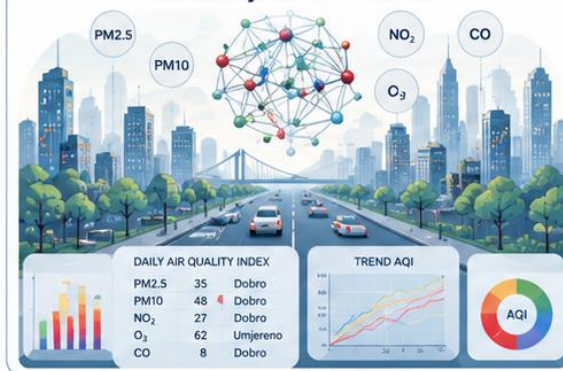
Primjena PAT alata u farmaceutici



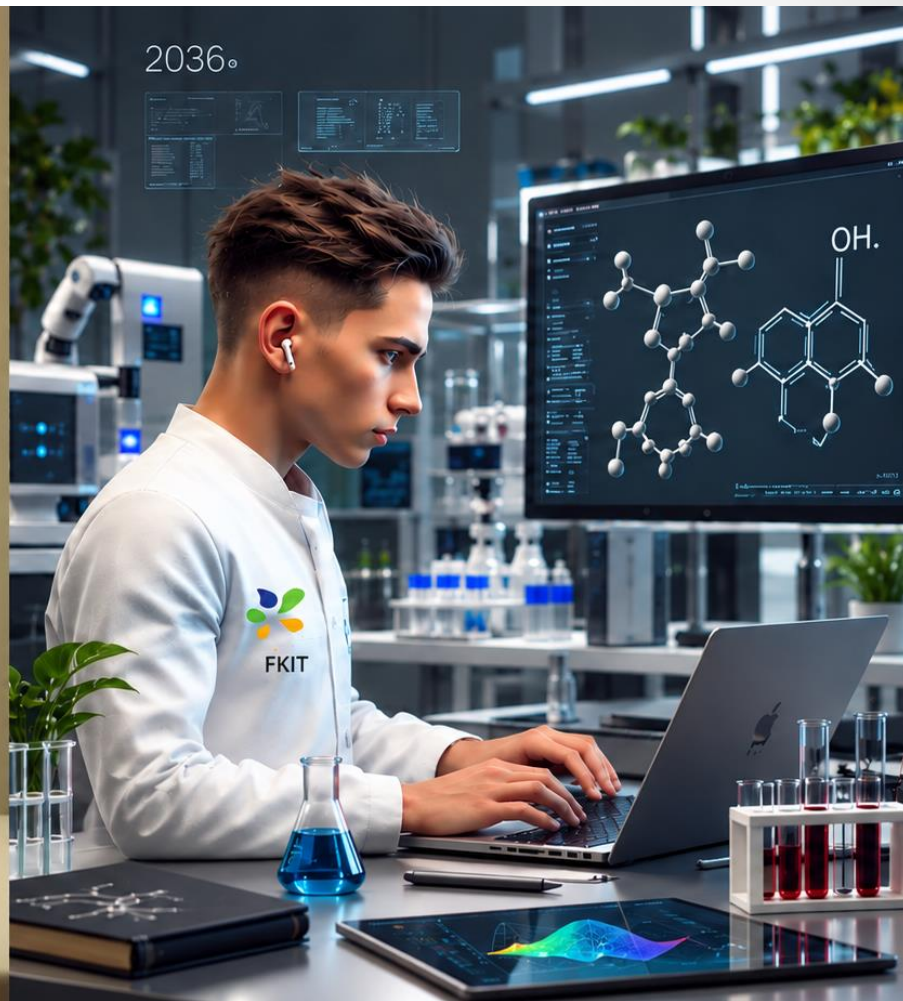
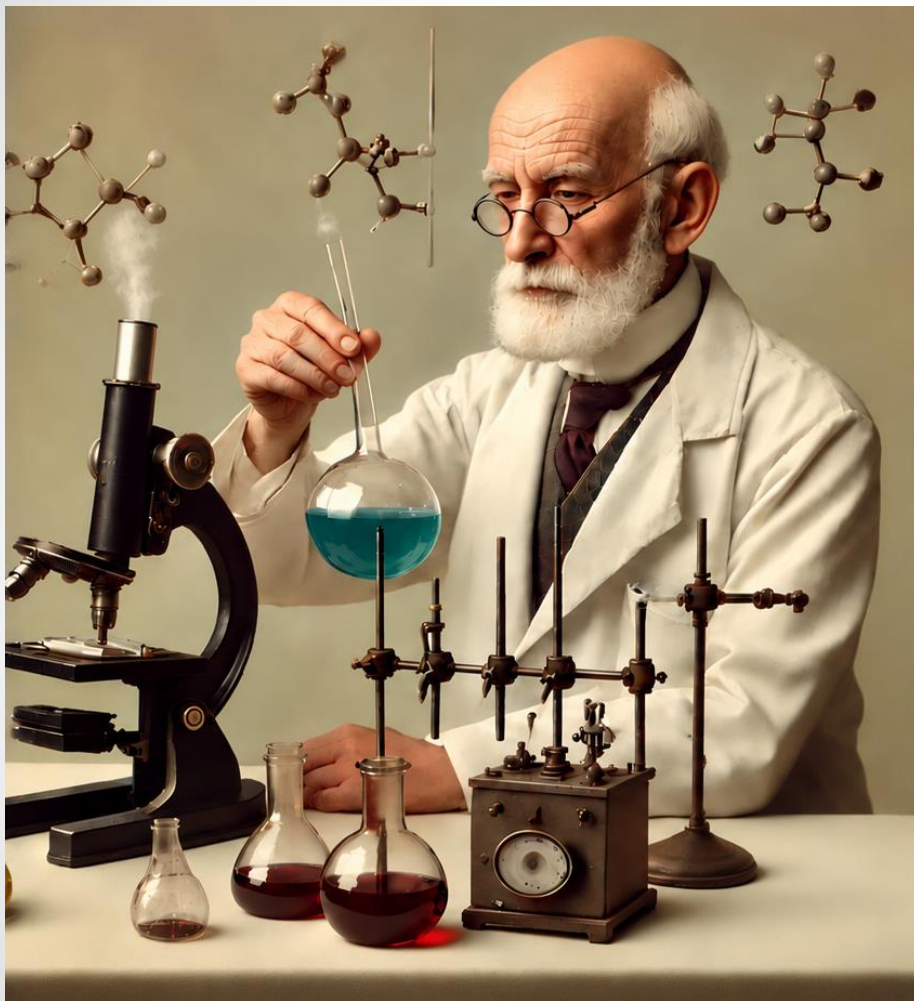
Razvoj modela za praćenje stanja baterija



Predviđanje kvalitete zraka



Strojno učenje značajno mijenja naš pristup struci i znanosti



Mogućnosti primjene su brojne i važnost strojnog učenja raste s digitalizacijom laboratorija i postrojenja. Strojno učenje značajno mijenja naš pristup struci i znanosti. Od ručnog rada u laboratoriju do naprednih simulacija na računalu, ove tehnologije se nadopunjuju i omogućuju da brže i lakše dođemo do novih otkrića.