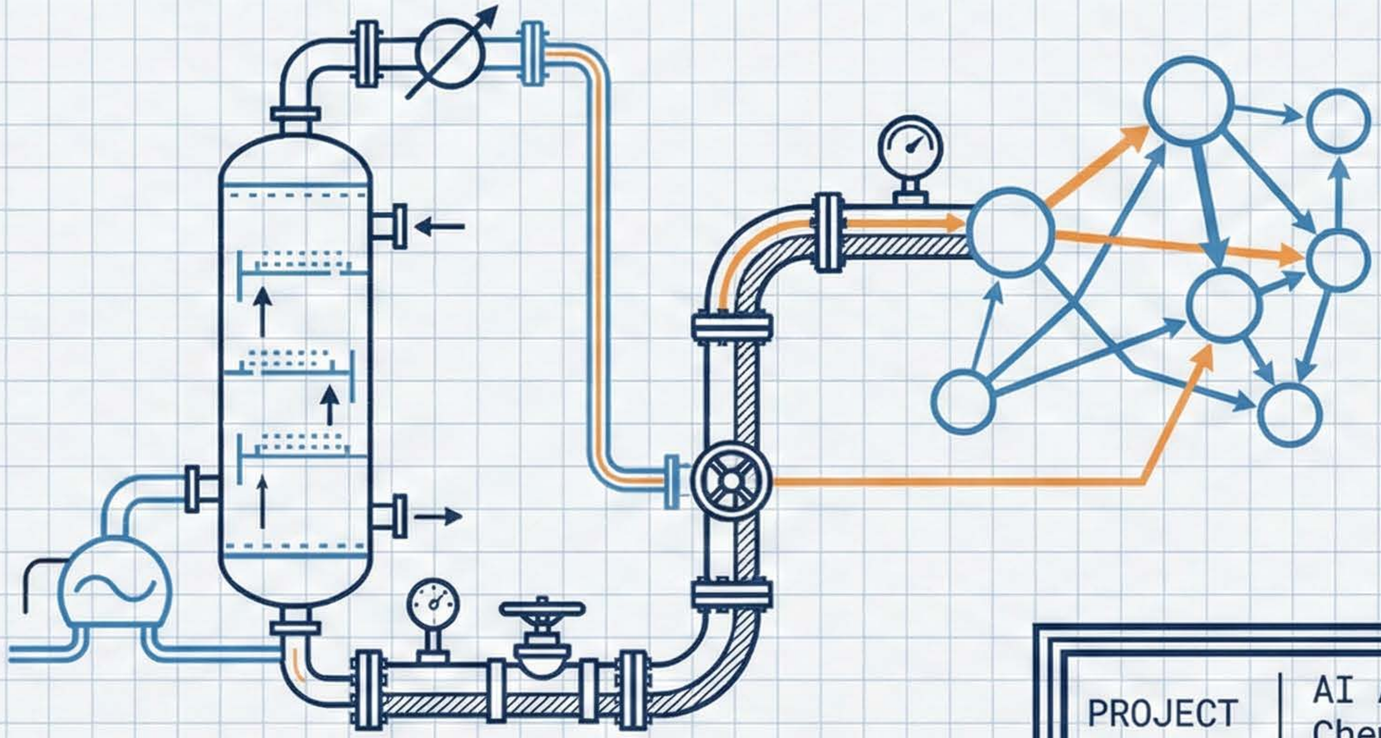
Unit 01: AI與機器學習概論

課程導讀與學習地圖



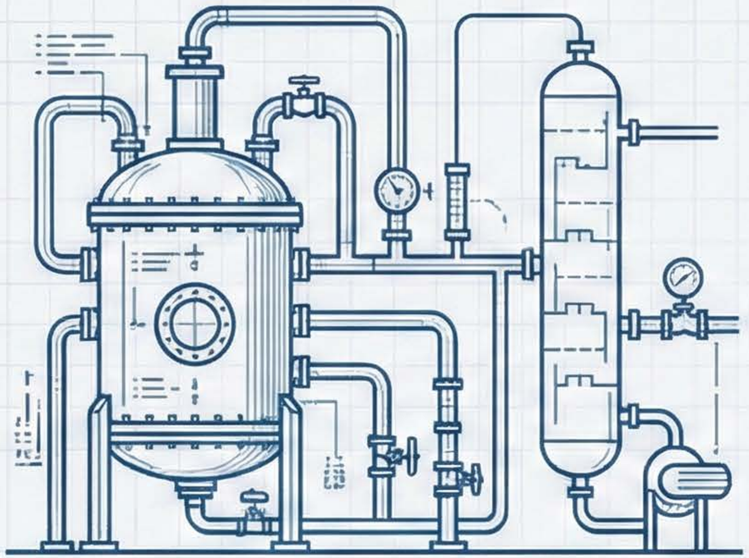
PROJECT	AI Application in Chemical Engineering
DOC TYPE	Course Syllabus & Roadmap
STATUS	Phase I - Orientation

歡迎來到「AI在化工上的應用」。本課程專為化學工程學系設計，旨在連結領域知識與人工智慧，建構您的數位工程競爭力。

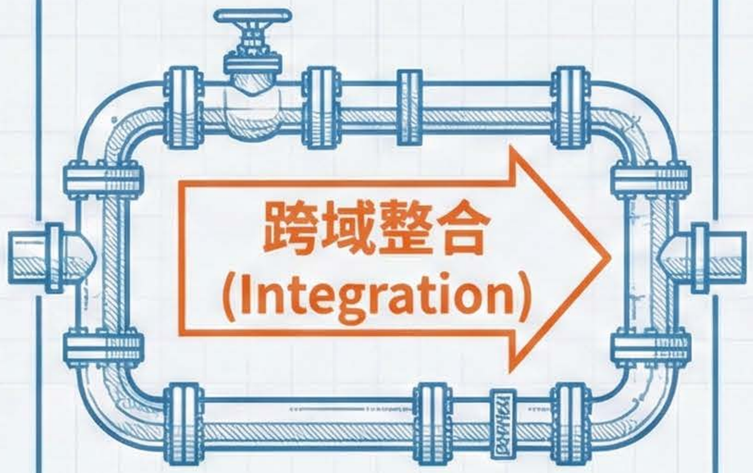
NotebookLM

專案目標：連結化工領域知識與 AI 技術

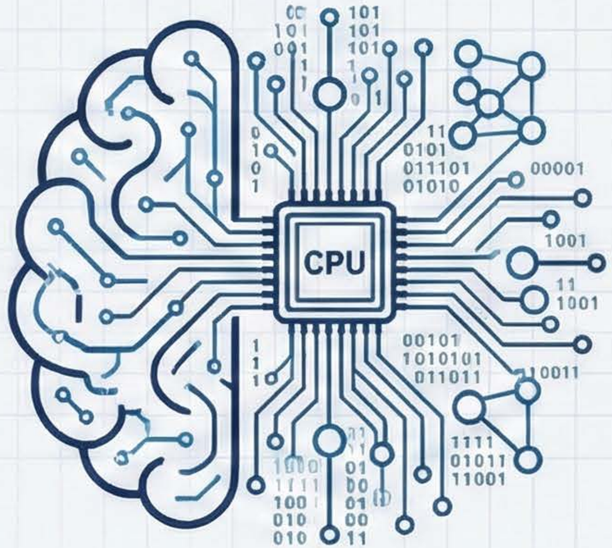
化學工程 (Chemical Engineering)



- 製程設計 (Process Design)
- 單元操作 (Unit Operations)
- 反應動力學 (Reaction Kinetics)



人工智慧 (Artificial Intelligence)

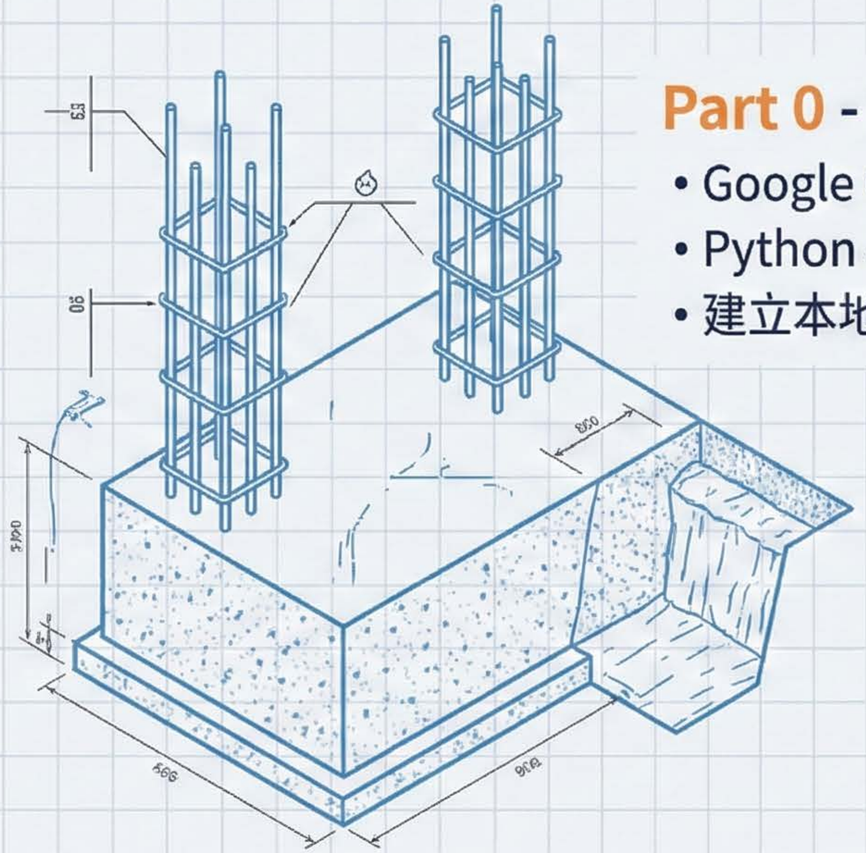


- 機器學習 (Machine Learning)
- 數據分析 (Data Analysis)
- 演算法模型 (Algorithmic Models)

本課程不只是學習寫程式，而是學習如何將 AI 技術應用於化工領域的實際問題。
從基礎概念到實際案例，建立完整的機器學習工作流程。

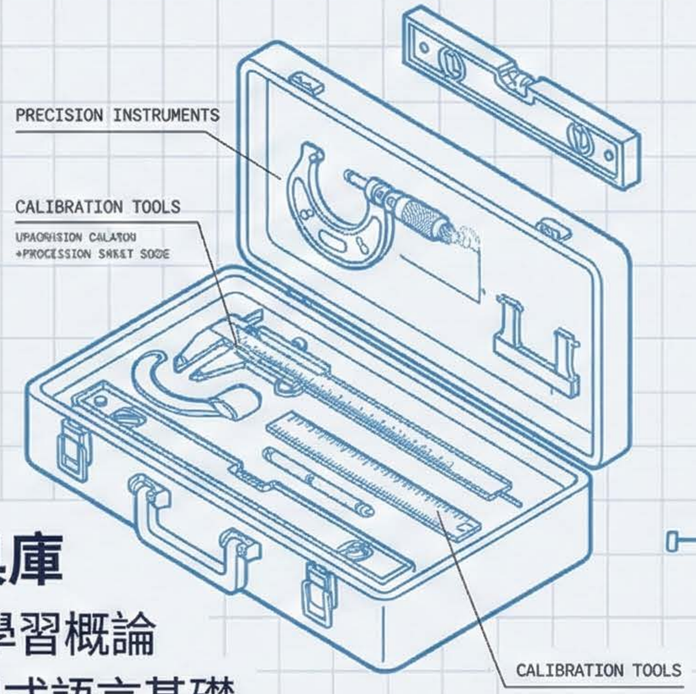
NotebookLM

第一階段：地基工程 (Phase I: The Foundation)



Part 0 - 開發環境建置

- Google Colab 雲端環境教學
- Python 基礎操作熟悉
- 建立本地開發環境（選修）



Part 1 - 核心工具庫

- Unit 01: AI與機器學習概論
- Unit 02: Python 程式語言基礎
- Unit 03: Numpy 與 Pandas 模組 (資料處理)
- Unit 04: Matplotlib 與 Seaborn 模組 (數據視覺化)

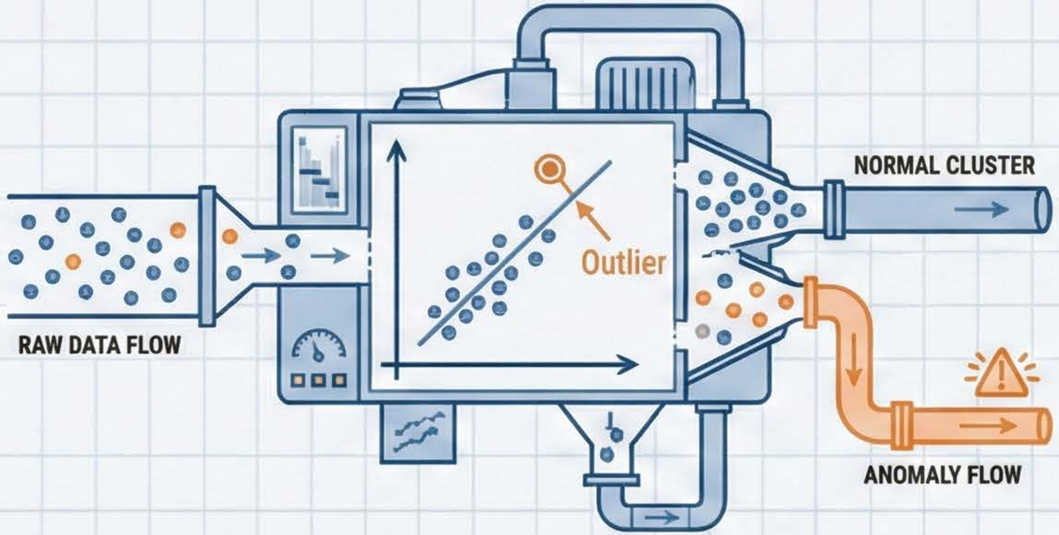
工欲善其事，必先利其器。我們先熟悉 Python 生態系中的數據分析工具。

NotebookLM

第二階段：主體結構 (Phase II: The Core Structure)

Part 2 – 非監督式學習 (Unsupervised Learning)

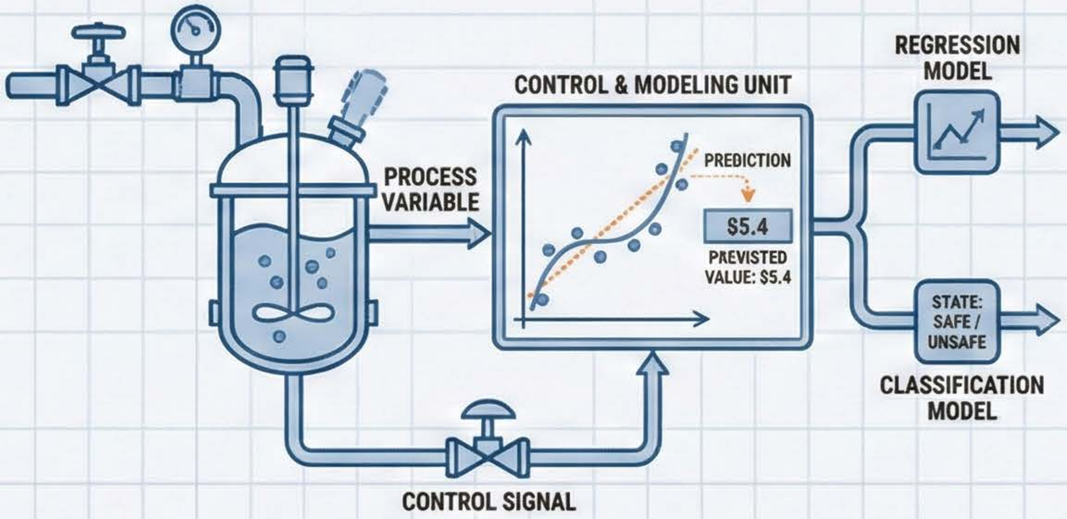
目標：發現數據中的隱藏結構



- **Unit 05:** 分群 (Clustering)
- **Unit 06:** 降維 (Dimensionality Reduction)
- **Unit 07:** 異常檢測 (Anomaly Detection)
- **Unit 08:** 關聯規則學習 (Association Rule Learning)

Part 3 – 監督式學習 (Supervised Learning)

目標：預測數值與分類狀態



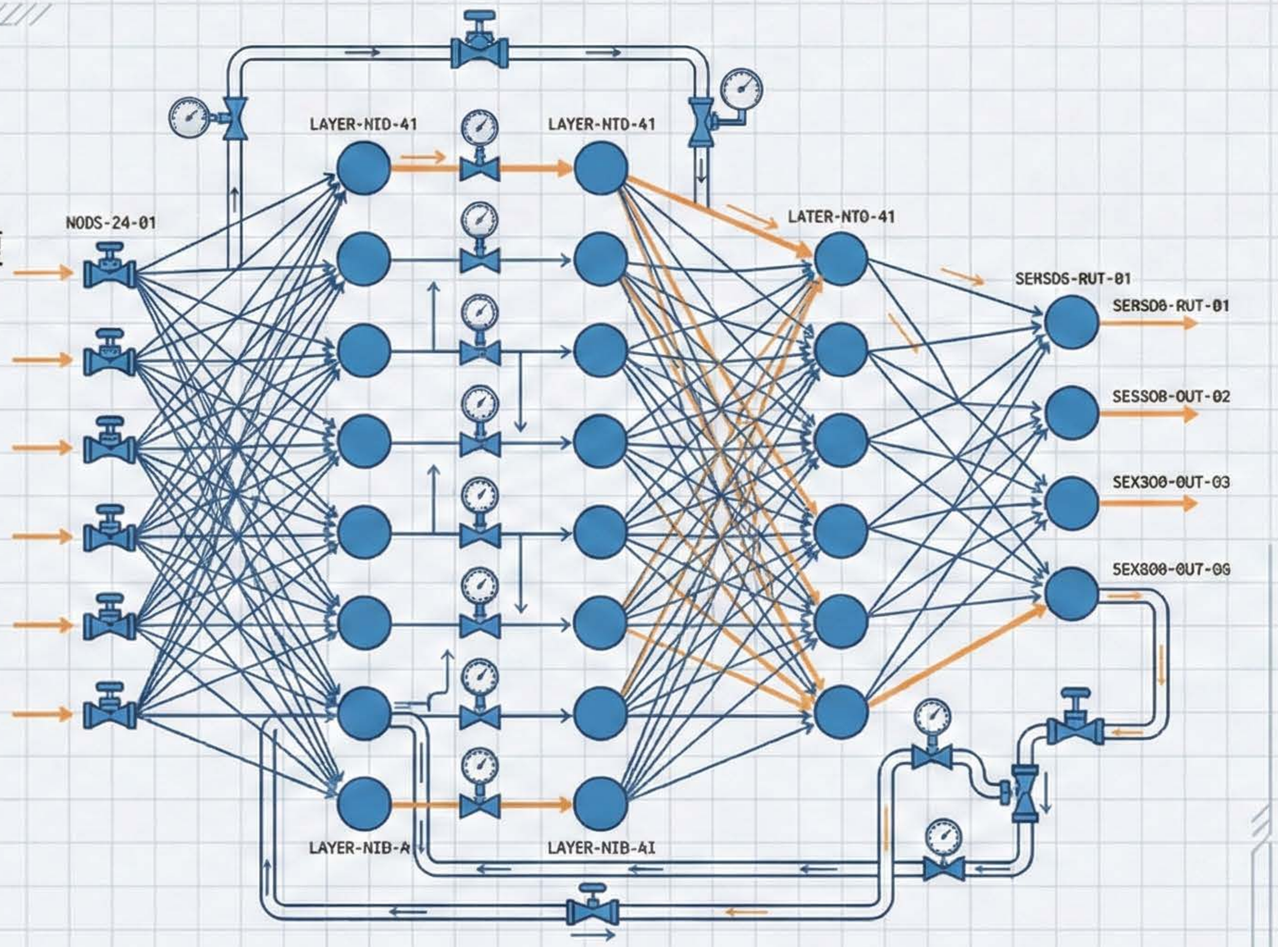
- **Unit 10-11:** 線性與非線性模型回歸 (Regression)
- **Unit 12:** 分類模型 (Classification)
- **Unit 13:** 模型評估與選擇
- **Unit 14:** 綜合案例研究

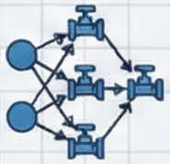
NotebookLM

第三階段：進階系統 (Phase III: Advanced Systems)

Part 4 - 深度學習 (Deep Learning)

概述：處理影像、序列等複雜數據的『重型機械』。





- **Unit 15: 深度學習基礎 (Neural Networks)**

- **Unit 16: 卷積神經網路 (CNN)**
  影像辨識/語義分割

- **Unit 17: 循環神經網路 (RNN/LSTM)**
  時間序列/自然語言

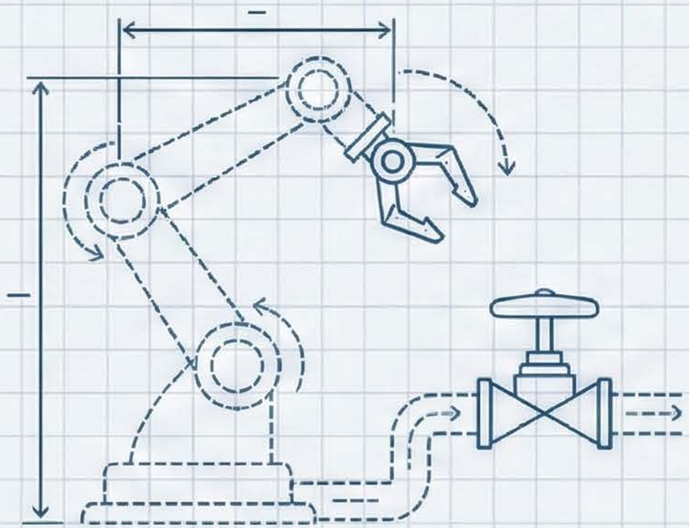
- **Unit 18: 深度學習應用案例**

當傳統演算法無法滿足需求時，我們使用深度學習來解決高維度與非線性的複雜問題。

NotebookLM

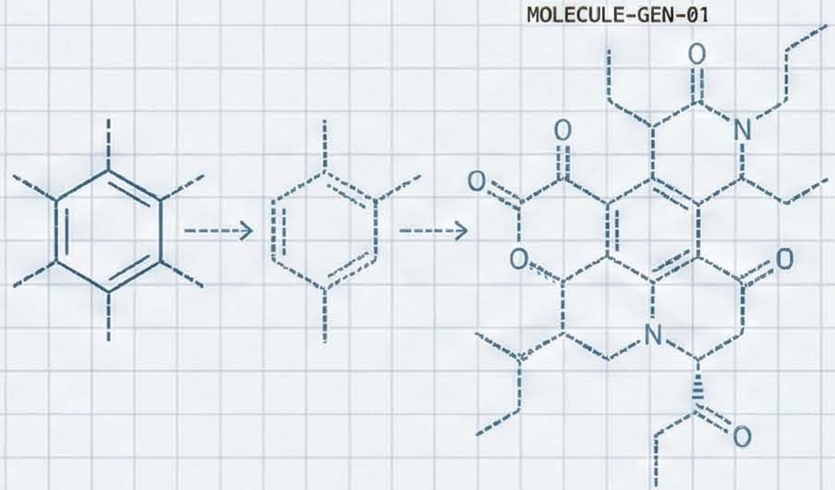
第四階段：未來擴建 (Phase IV: Future Expansion)

Part 5 : 強化式學習 (Reinforcement Learning)



Focus: 製程控制優化應用 (Process Control Optimization)

Part 6 : 生成式 AI (Generative AI)



Focus: 分子生成與逆向設計 (GAN, VAE, Diffusion Models)

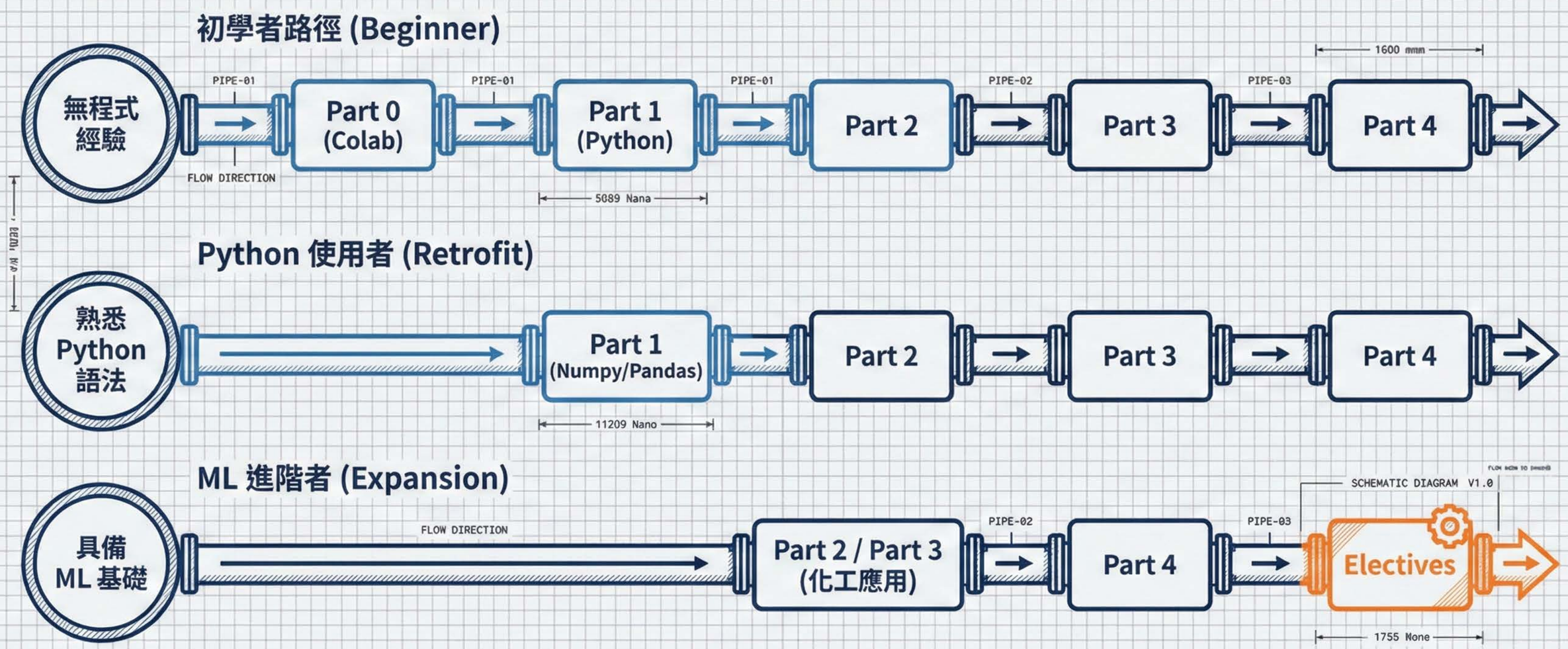
Part 7 : 大型語言模型 (LLMs)

Focus: Transformer 架構、提示工程、文獻知識萃取

探索 AI 技術的最前沿，從自動化控制到生成新分子結構。

NotebookLM

施工路徑圖 (Critical Path Method)

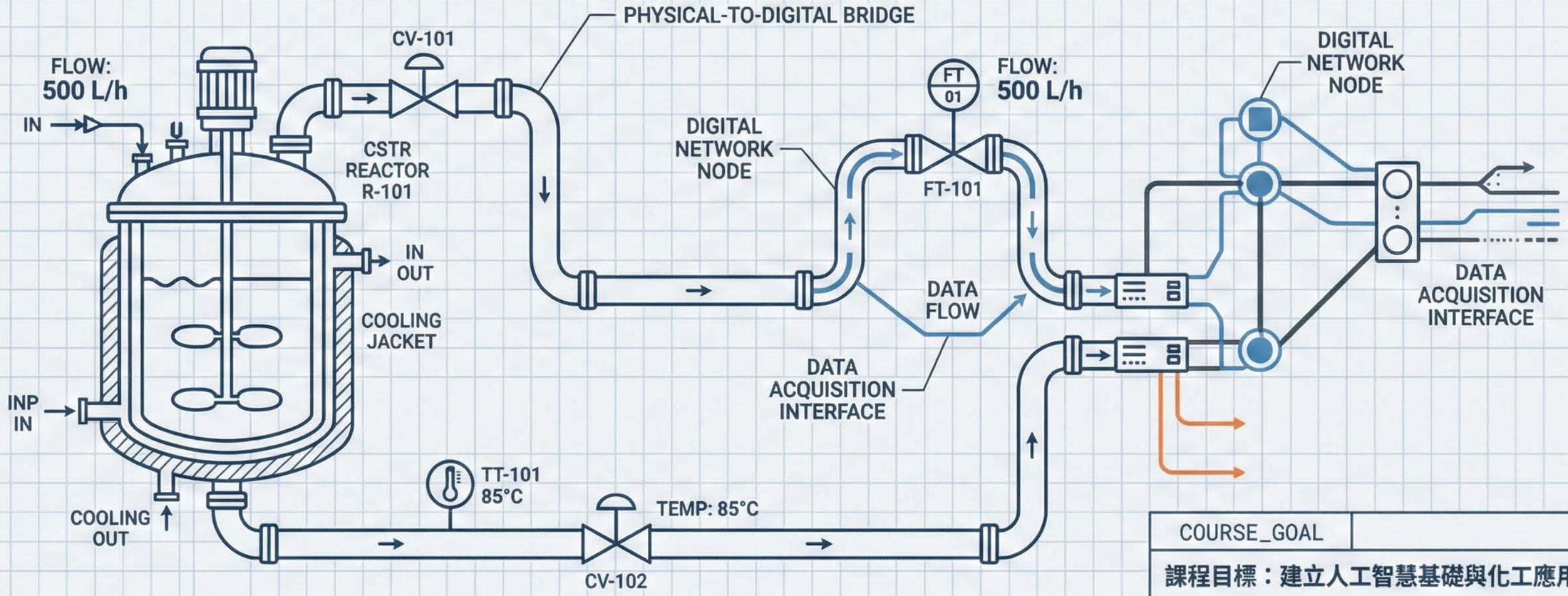


請根據您目前的技能水準，選擇最有效率的學習路徑。

NotebookLM

Unit 01: AI 與機器學習概論

Section 2-3: 技術原理與化工應用實務



COURSE_GOAL	
課程目標：建立人工智慧基礎與化工應用視野	
SYSTEM	
Chemical Engineering AI	

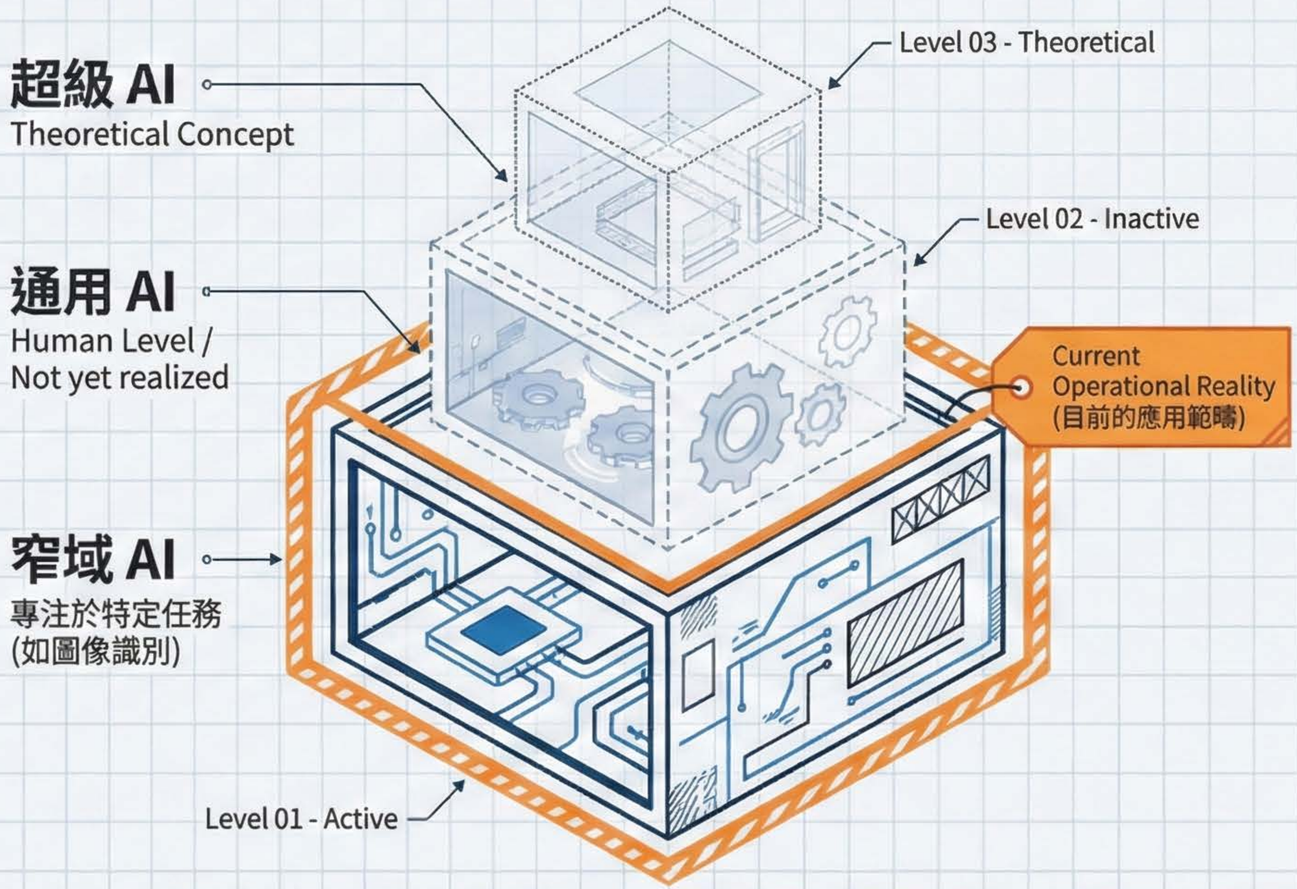
NotebookLM

什麼是人工智慧 (What is AI)? — 數位工程師的新工具

定義 (Definition): 讓機器展現類似人類智慧行為的技術

- ☑ 學習能力 (Learning)
- ☑ 推理能力 (Reasoning)
- ☑ 感知能力 (Perception)
- ☑ 語言理解 (Language Understanding)

☒ Elevation View: AI Capabilities Hierarchy ☒



Key Takeaway: 目前化工領域的應用皆屬於 窄域 AI

Date	Project Name	Rev:
Time ----	AI Fundamentals for Digital Engineers	A

NotebookLM

運作機制比較：傳統程式設計 vs 機器學習

以化工製程溫度控制為例

傳統程式設計 (Rule-Based)

Input Data
+ Rules
(由工程師制定)

Process:
If T > X,
Then Power = Y%

Output:
Answer /
Action

硬性規則
(Rigid Rules)

機器學習 (Machine Learning)

Input Data
+ Answers
(History)

Process:
ML Algorithm

Output:
Rules
(Model)

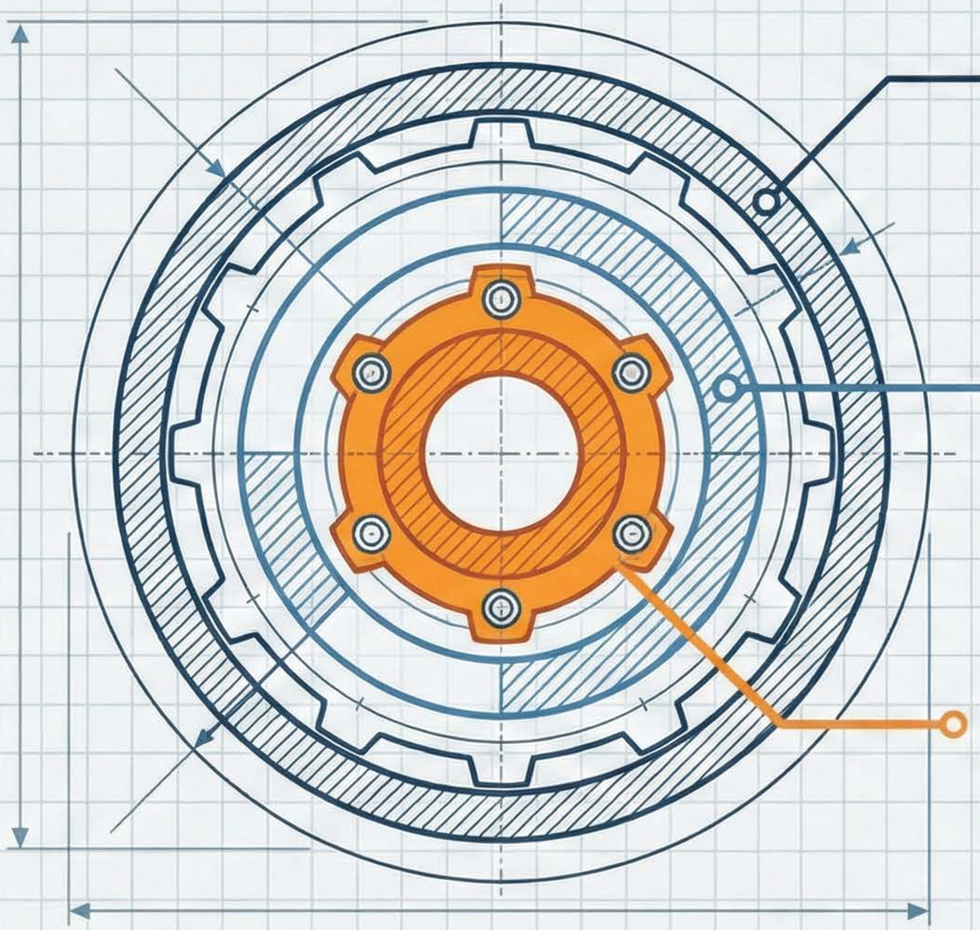
自動學習規律
(Automated Pattern Learning)

Key Takeaway:

Date	Project Name	Rev:
Time ----	AI Fundamentals for Digital Engineers	A

NotebookLM

技術層級架構 (Technical Hierarchy)



人工智慧
(Artificial Intelligence)
涵蓋所有智慧模擬技術

機器學習
(Machine Learning)
AI 的子集 - 從資料中學習規律

深度學習 (Deep Learning)
ML 的子集 - 使用深層神經網路
• 在影像、語音、自然語言處理表現卓越

AI: The Broad Concept

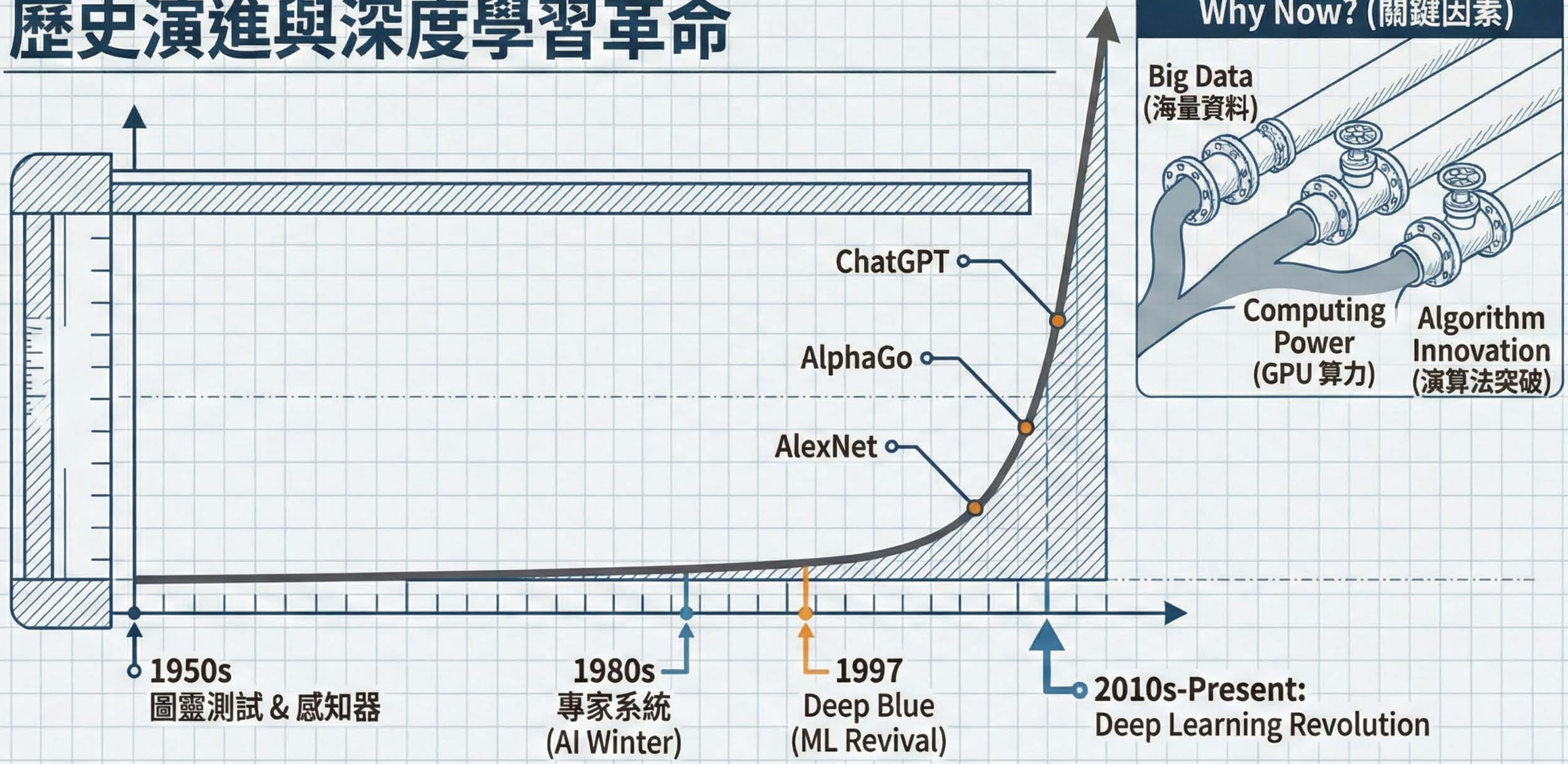
ML: The Method

DL: The Breakthrough Technique

Key Takeaway:

Date	Project Name	Rev:
Time ----	AI Fundamentals for Digital Engineers	A

歷史演進與深度學習革命



Key Takeaway:

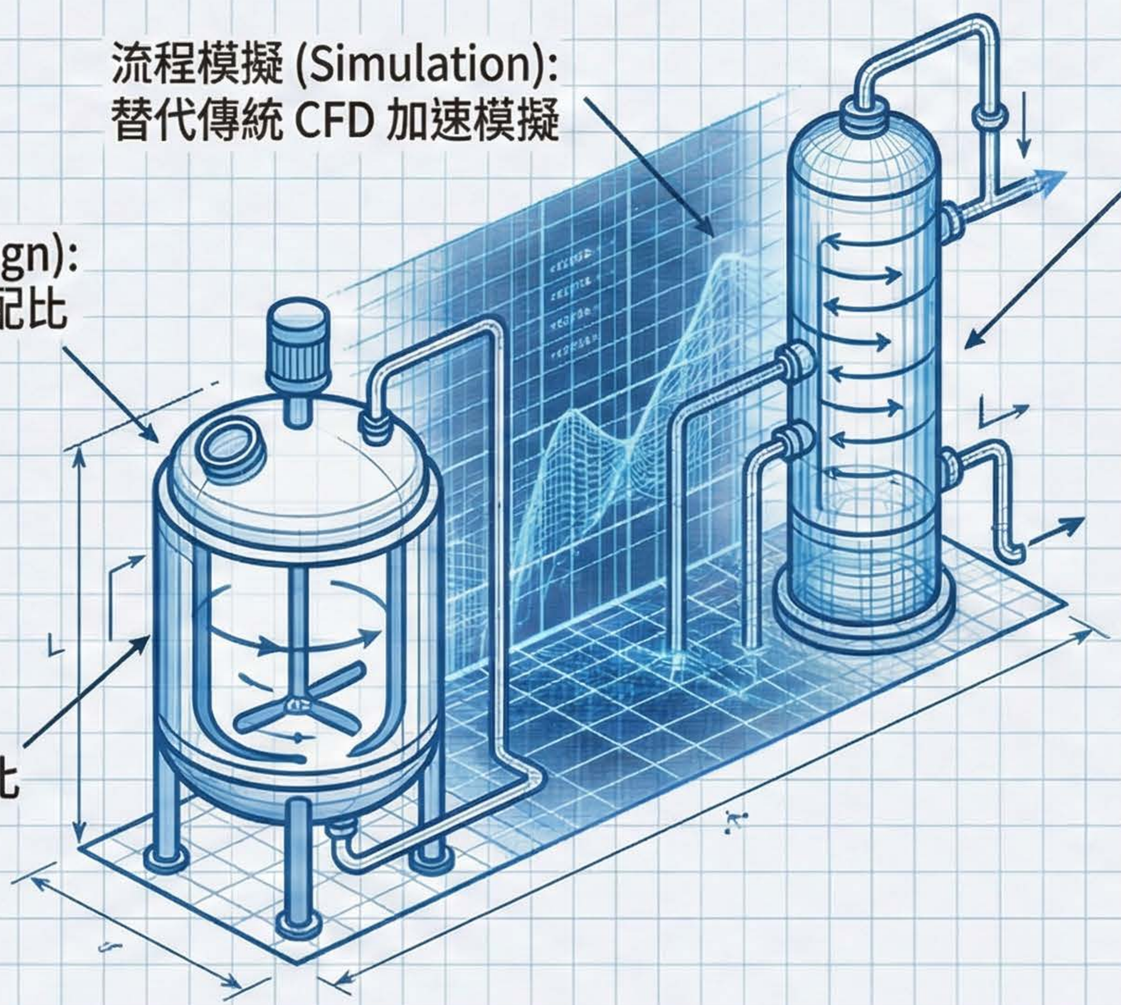
Date	Project Name	Rev:
Time ----	AI Fundamentals for Digital Engineers	A

應用領域 I: 製程設計與優化 (Process Design & Optimization)

流程模擬 (Simulation):
替代傳統 CFD 加速模擬

反應器設計 (Reactor Design):
優化溫度、壓力、催化劑配比

分離程序 (Separation):
蒸餾塔操作條件優化



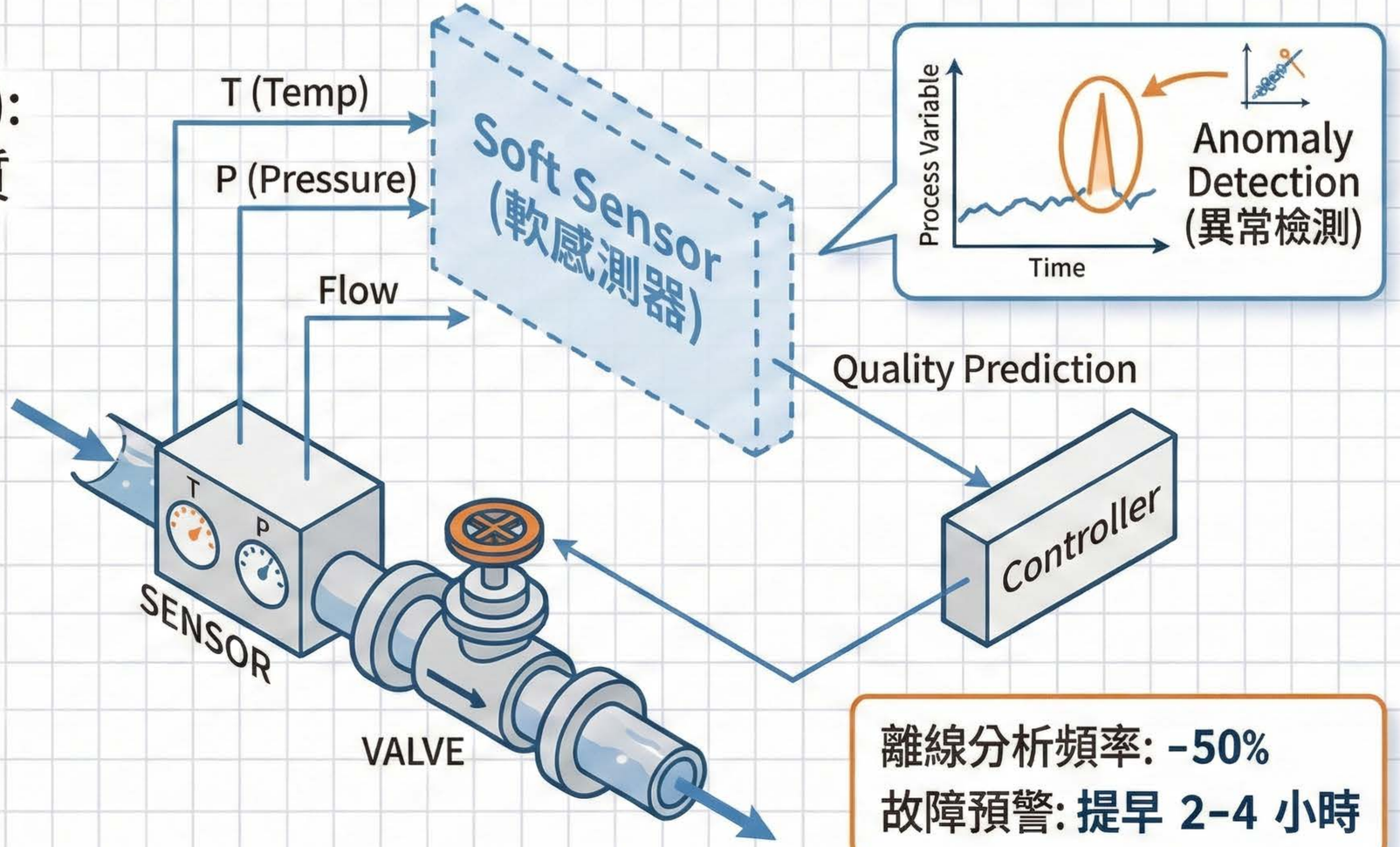
反應器 (Reactor):
優化溫度、壓力、化劑配比

Case Study Results:
產率提升 (Yield): +15%
實驗次數減少 (Experiments):
-80% (Bayesian Opt.)

NotebookLM

應用領域 II：製程監控與控制 (Monitoring & Control)

- 軟感測器 (Soft Sensors): 預測難以即時量測的品質 (Virtual Metrology)。
- 異常檢測 (Anomaly Detection): 提早預警設備故障。
- 先進控制 (APC): MPC & Reinforcement Learning.

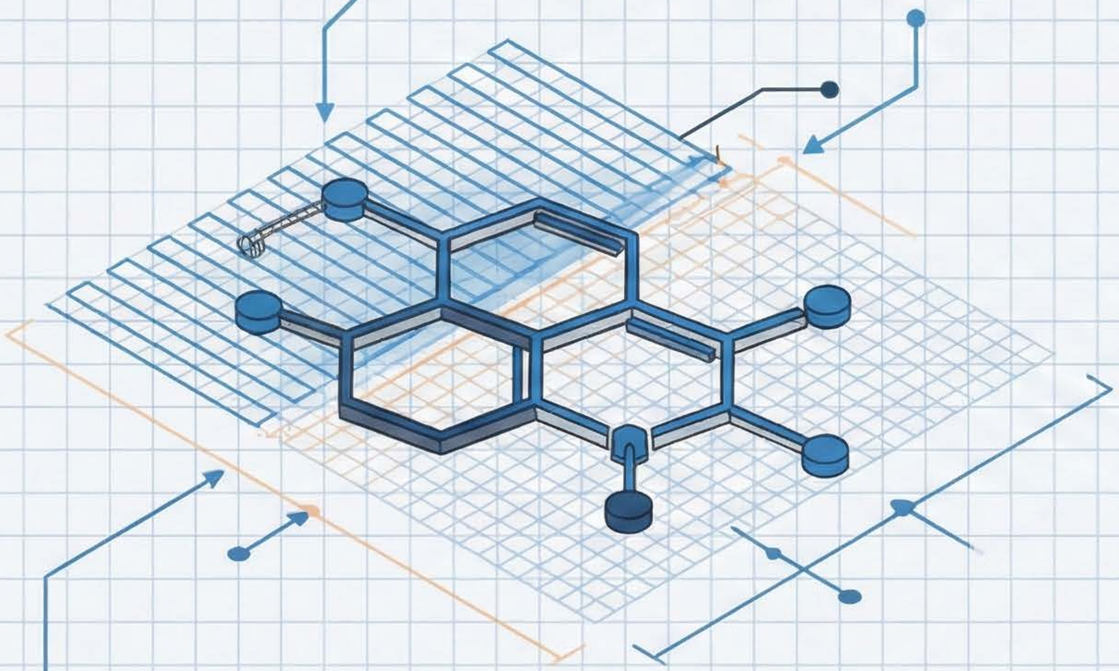


離線分析頻率: -50%
故障預警: 提早 2-4 小時

NotebookLM

應用領域 III: 分子設計與品質管理 (Molecular Design & Quality)

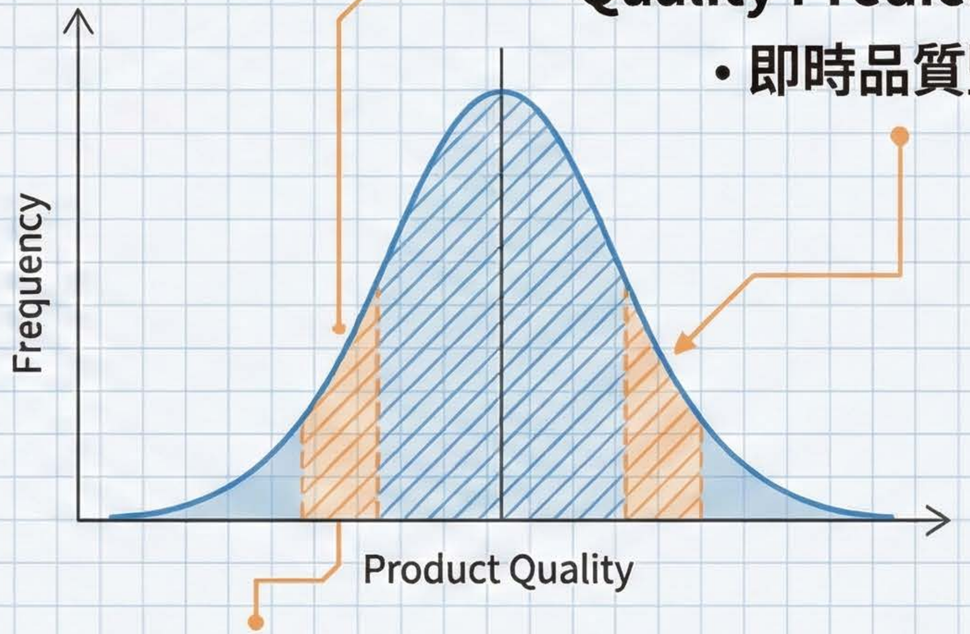
Molecular Design (R&D)



- 逆向設計: 目標性質 -> 分子結構
- 預測性質: 沸點, 毒性, 溶解度

Quality Prediction

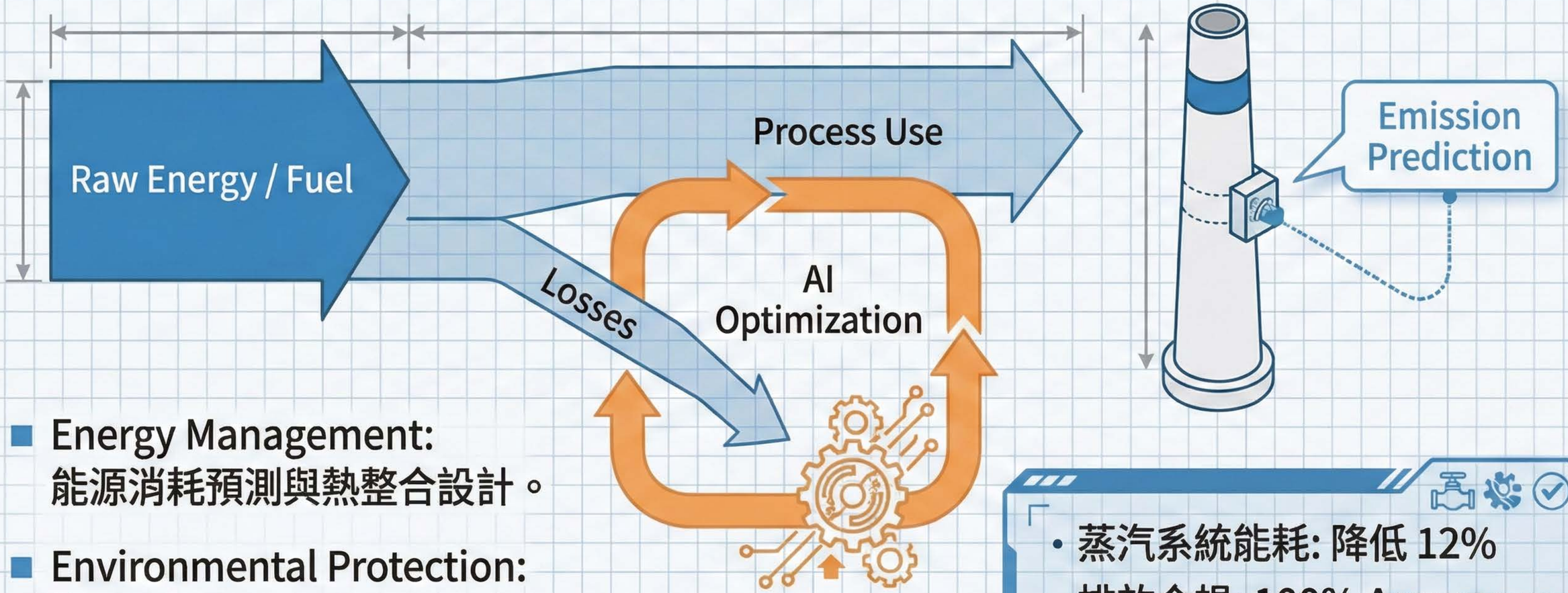
- 即時品質監控



- 溶解度預測準確率: 95%
- 新材料開發週期: 縮短 60%

NotebookLM

應用領域 IV： 能源與環境 (Energy & Environment)

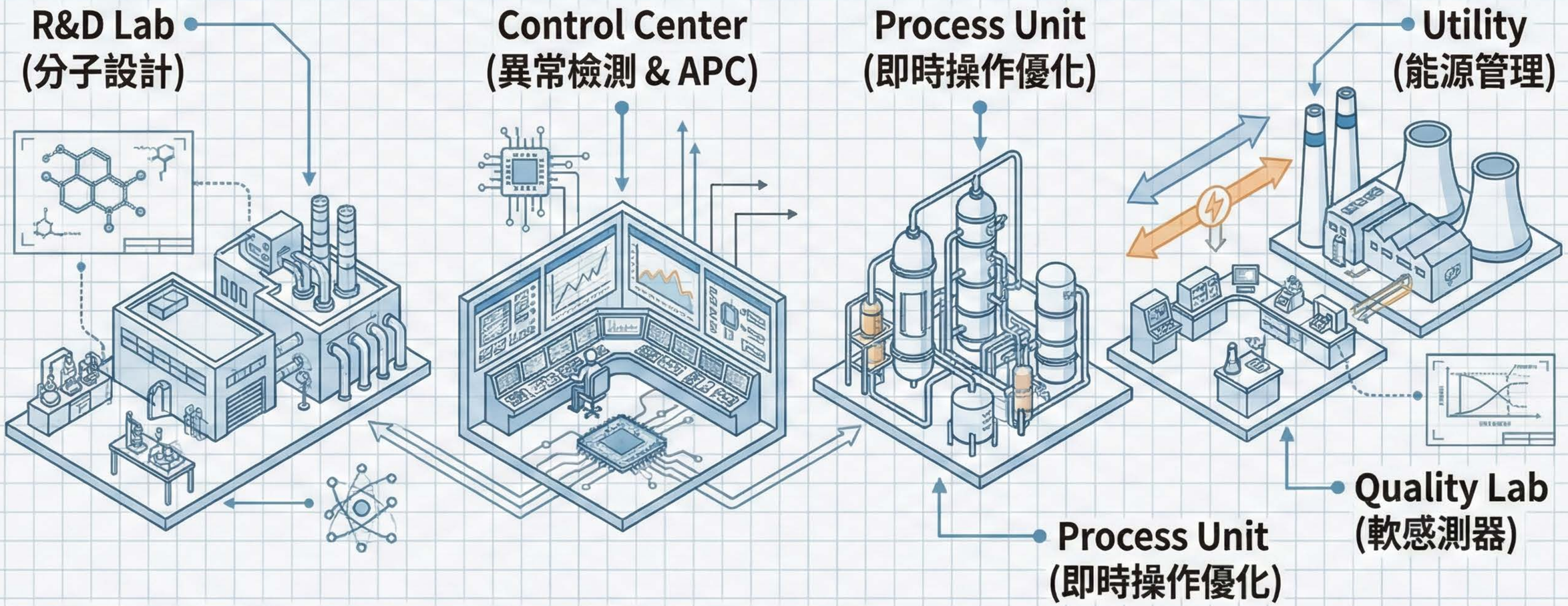


- Energy Management:
  能源消耗預測與熱整合設計。
- Environmental Protection:
  排放預測與綠色製程。

- 蒸汽系統能耗: 降低 12%
- 排放合規: 100% Assurance

NotebookLM

整合觀點：智慧化工廠藍圖 (The Smart Plant Blueprint)



AI 技術貫穿從研發到生產的完整生命週期 (Lifecycle)。

Date	Time	Project Name: AI Fundamentals for Digital Engineers	Rev. A

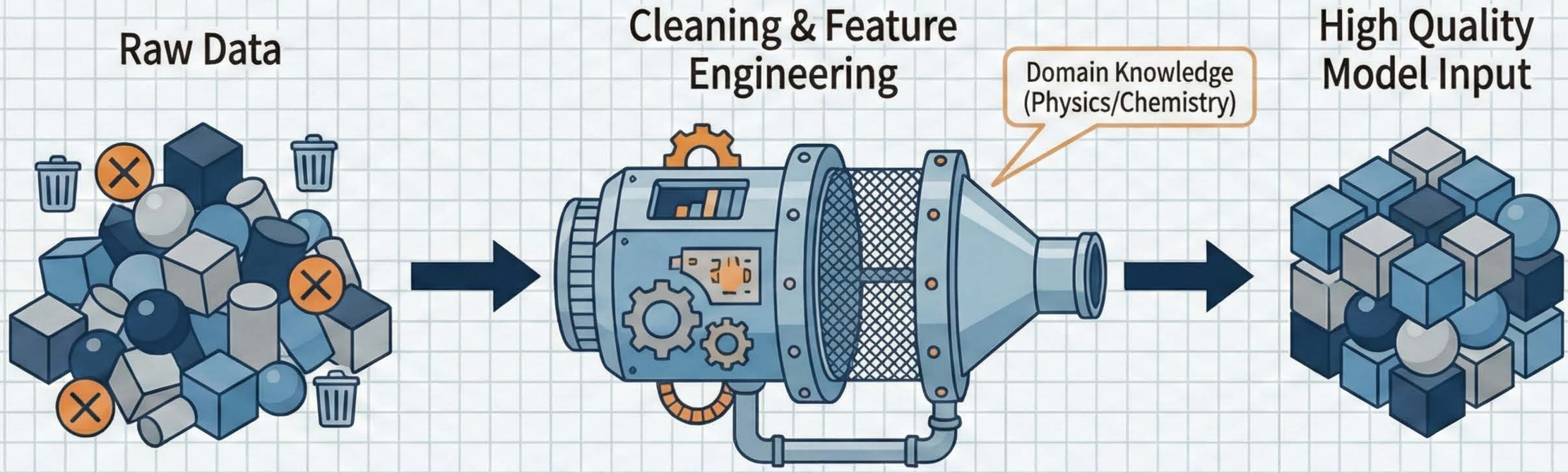
NotebookLM

工程評估： 價值與挑戰 (Value vs. Challenges)

VALUE (價值)	CHALLENGES (挑戰)
• Efficiency: 自動化決策	• Data Quality: Garbage In, Garbage Out
• Cost: 優化資源，減少浪費	• Domain Knowledge: 需結合化工專業
• Safety: 提早偵測異常	• Interpretability: 模型可解釋性 (Black Box)
• Innovation: 加速研發週期	• Deployment: 實驗室到工廠的落差

NotebookLM

核心原則：資料品質決定模型上限

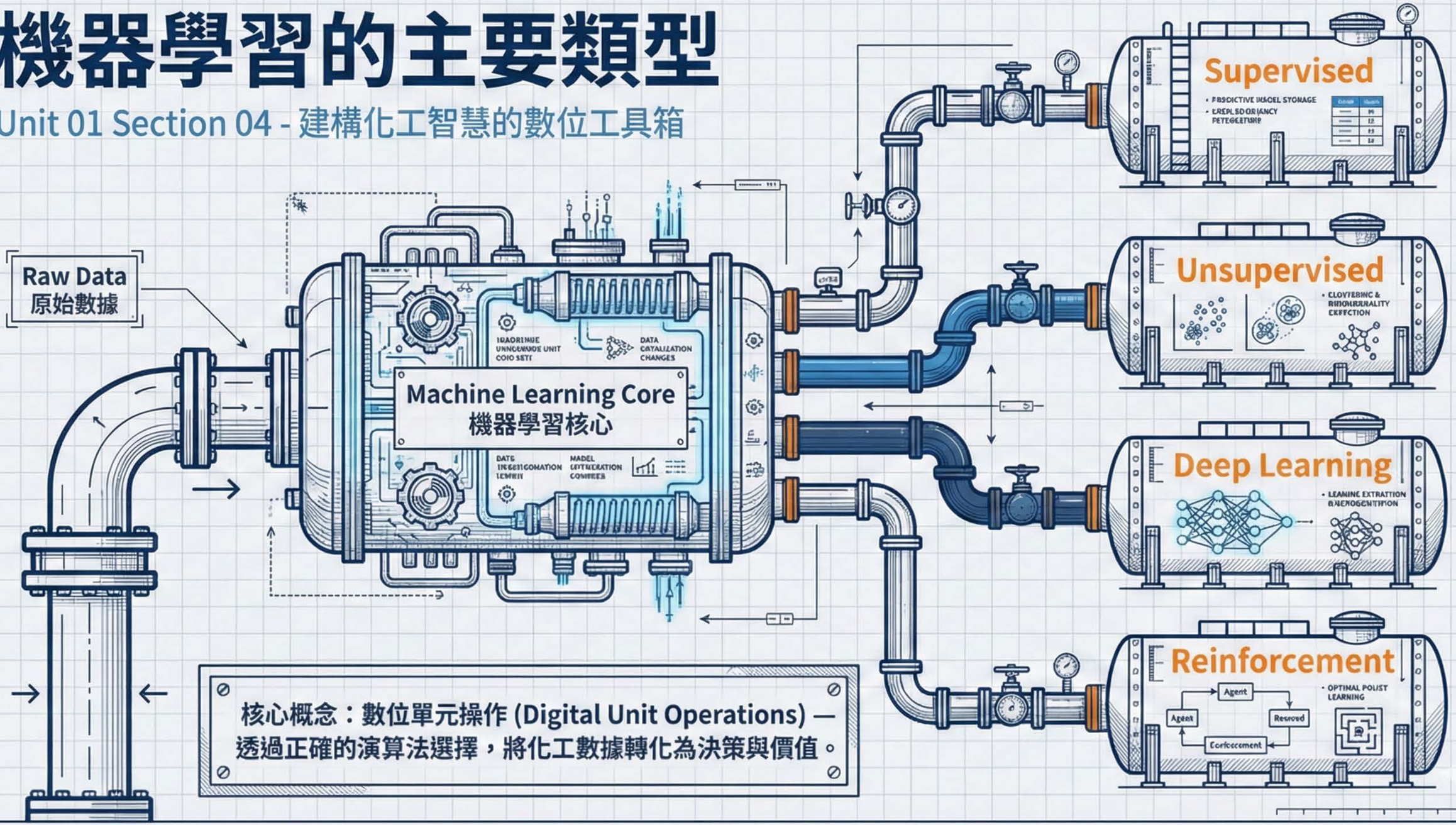


Garbage In, Garbage Out

- ☑ 準確性 (Accuracy)
- ☑ 完整性 (Completeness)
- ☑ 代表性 (Representativeness)

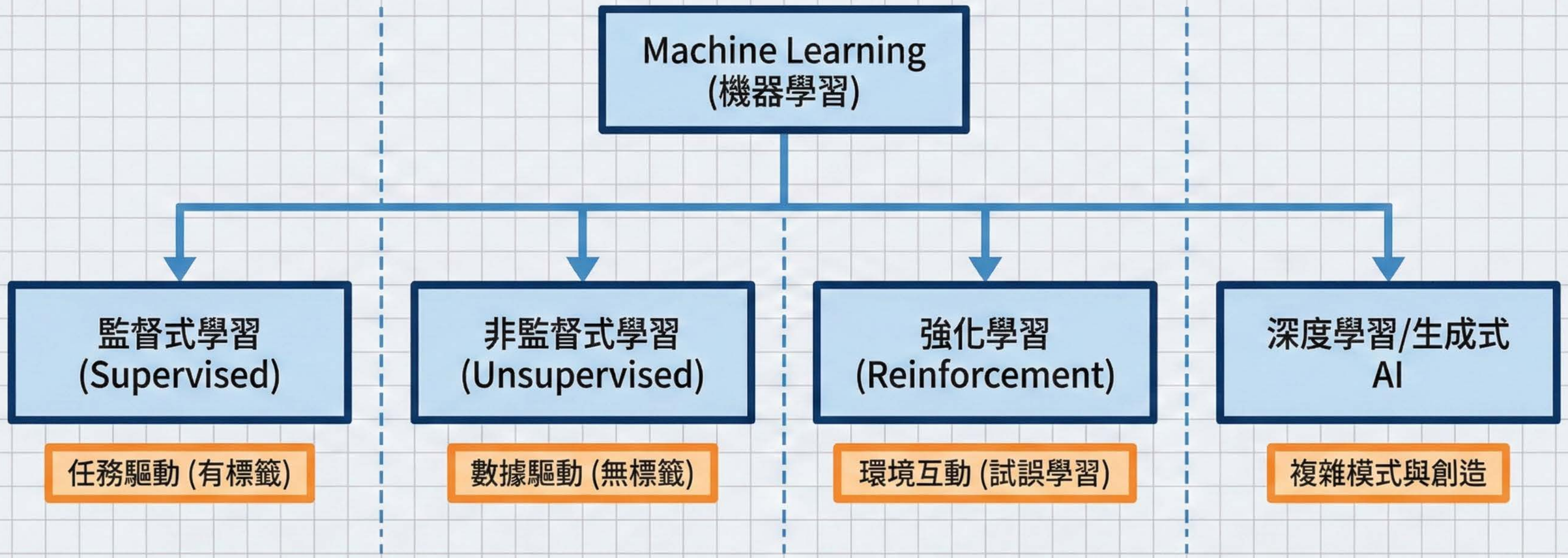
機器學習的主要類型

Unit 01 Section 04 - 建構化工智慧的數位工具箱



核心概念：數位單元操作 (Digital Unit Operations) —
透過正確的演算法選擇，將化工數據轉化為決策與價值。

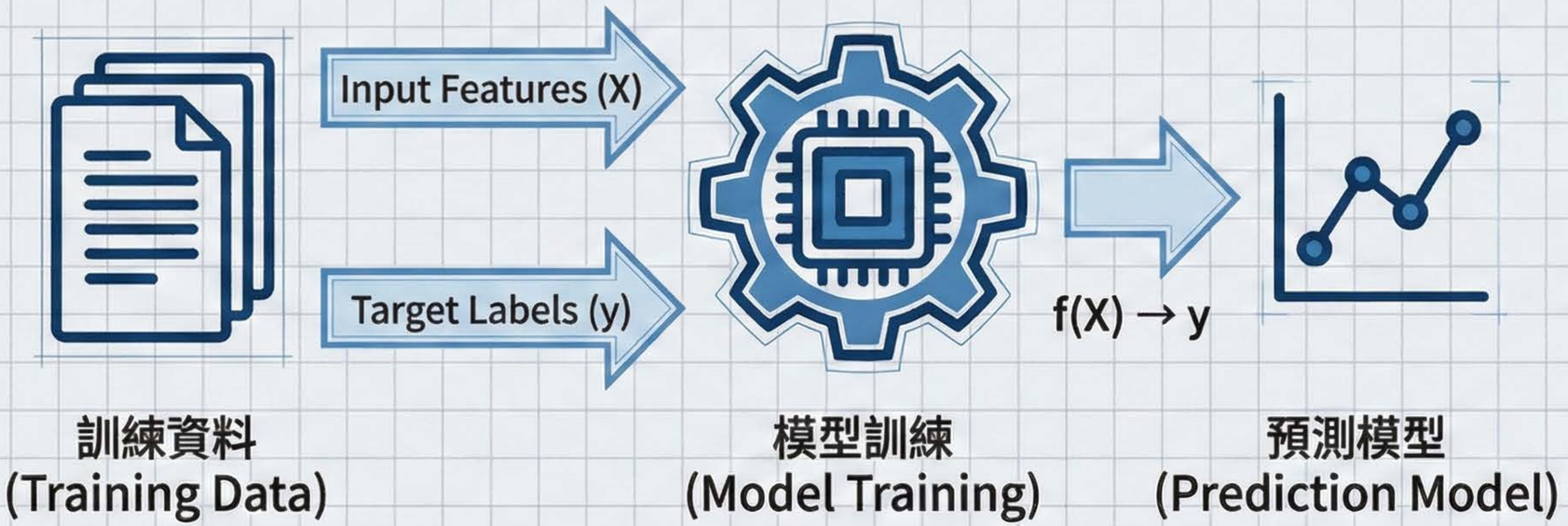
機器學習地圖：從資料到決策



化工應用全景：目前的化學工程應用已涵蓋所有四類範疇，從基礎預測到自主控制。

NotebookLM

監督式學習(Supervised Learning)：從範例中學習



定義：
從已標記的訓練資料中學習輸入與輸出之間的對應關係。

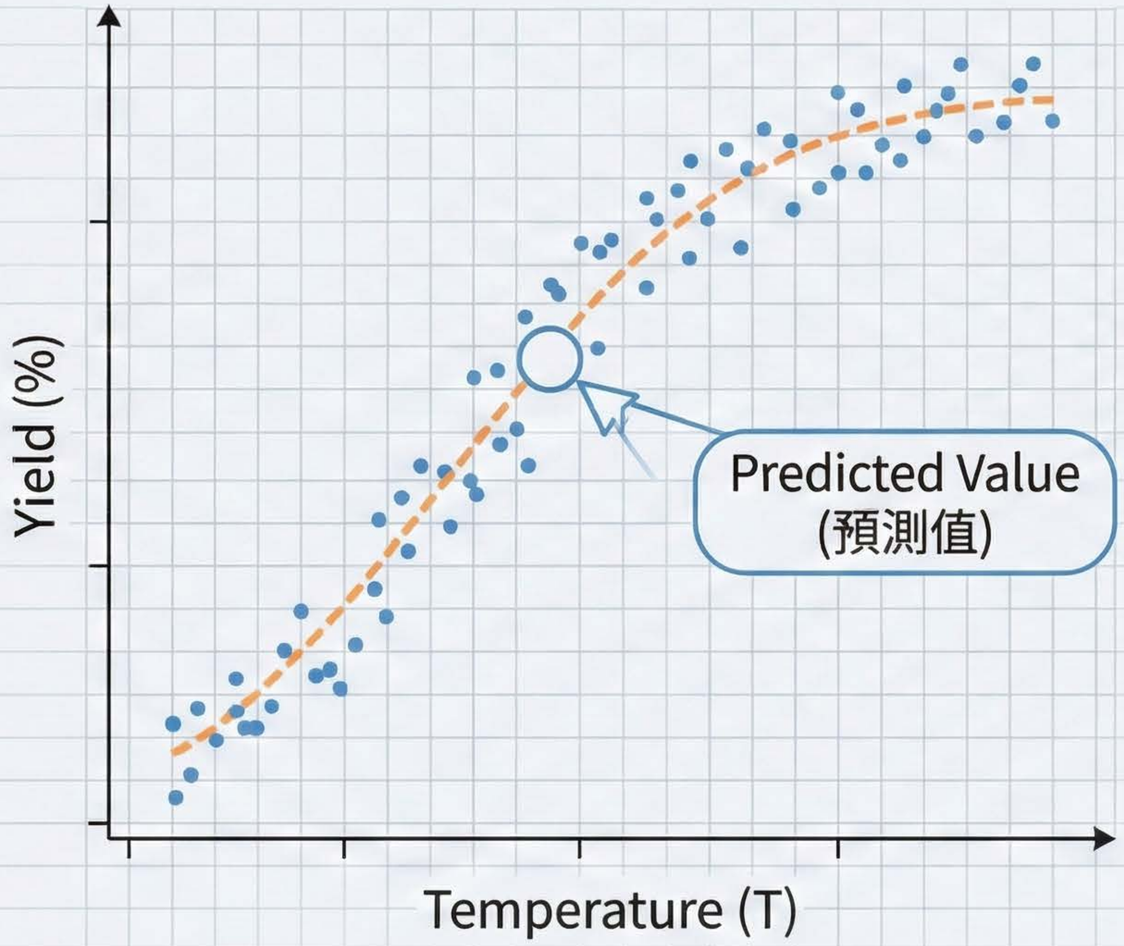
比喻：
如同學生參考教科書後的解答進行學習，修正錯誤以提升準確率。

Key Components

- ☑ 輸入特徵 (Input Features)：製程參數、原料性質
- ☑ 對應標籤 (Target Labels)：產率、品質、故障代碼

NotebookLM

任務一：回歸 (Regression) - 預測連續數值



ChemE Applications

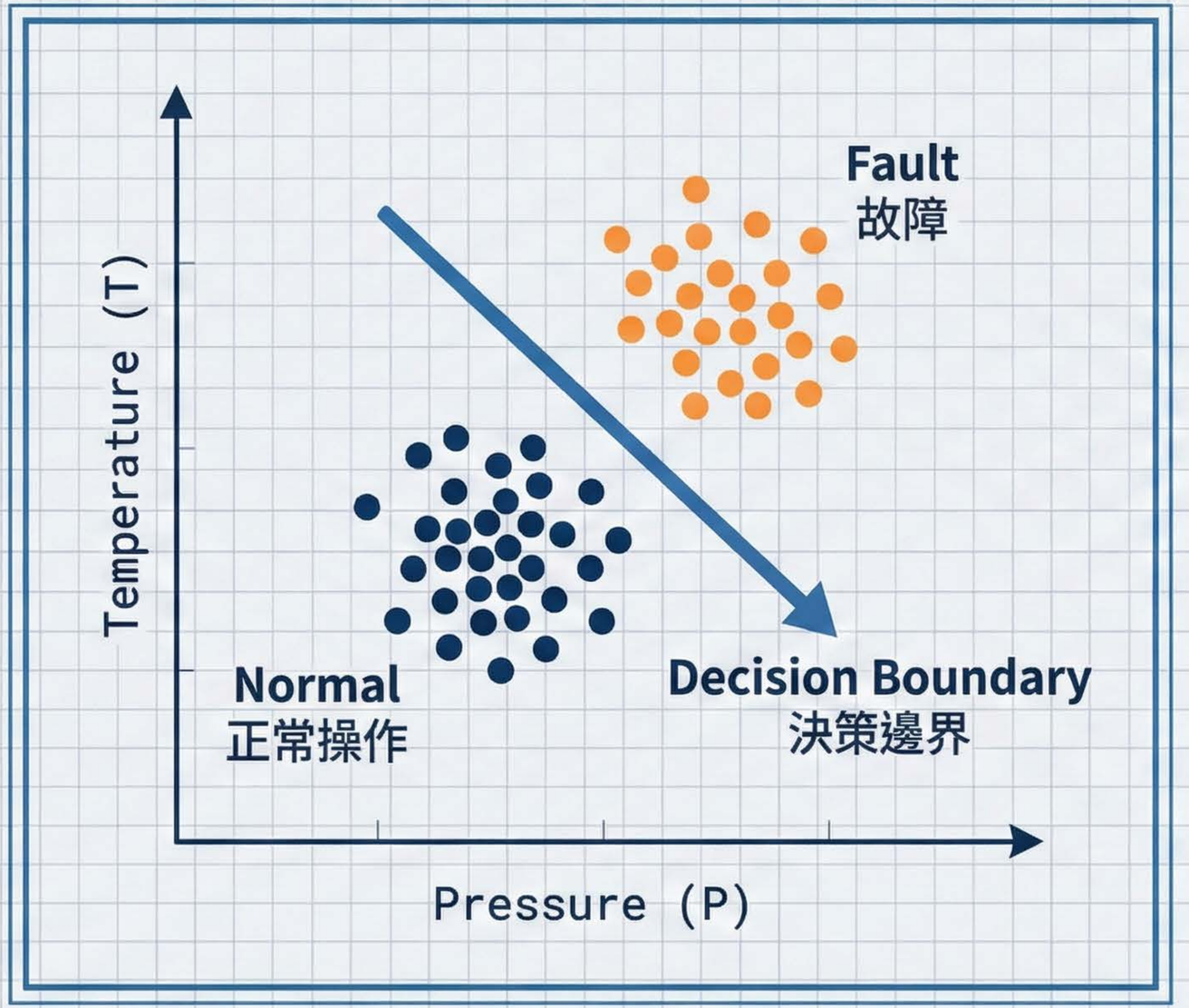
- 預測反應產率 (Reaction Yield)
- 預測產品品質：黏度、密度、純度
- 預測能源消耗 (Energy Consumption)

Toolbox (Algorithms)

`Linear Regression` `SVR` `Random Forest`

NotebookLM

任務二：分類 (Classification) - 判斷離散類別



ChemE Applications

- 產品品質等級分類：優 / 良 / 差
- 故障類型診斷 (Fault Diagnosis)
- 反應成功 / 失敗預測

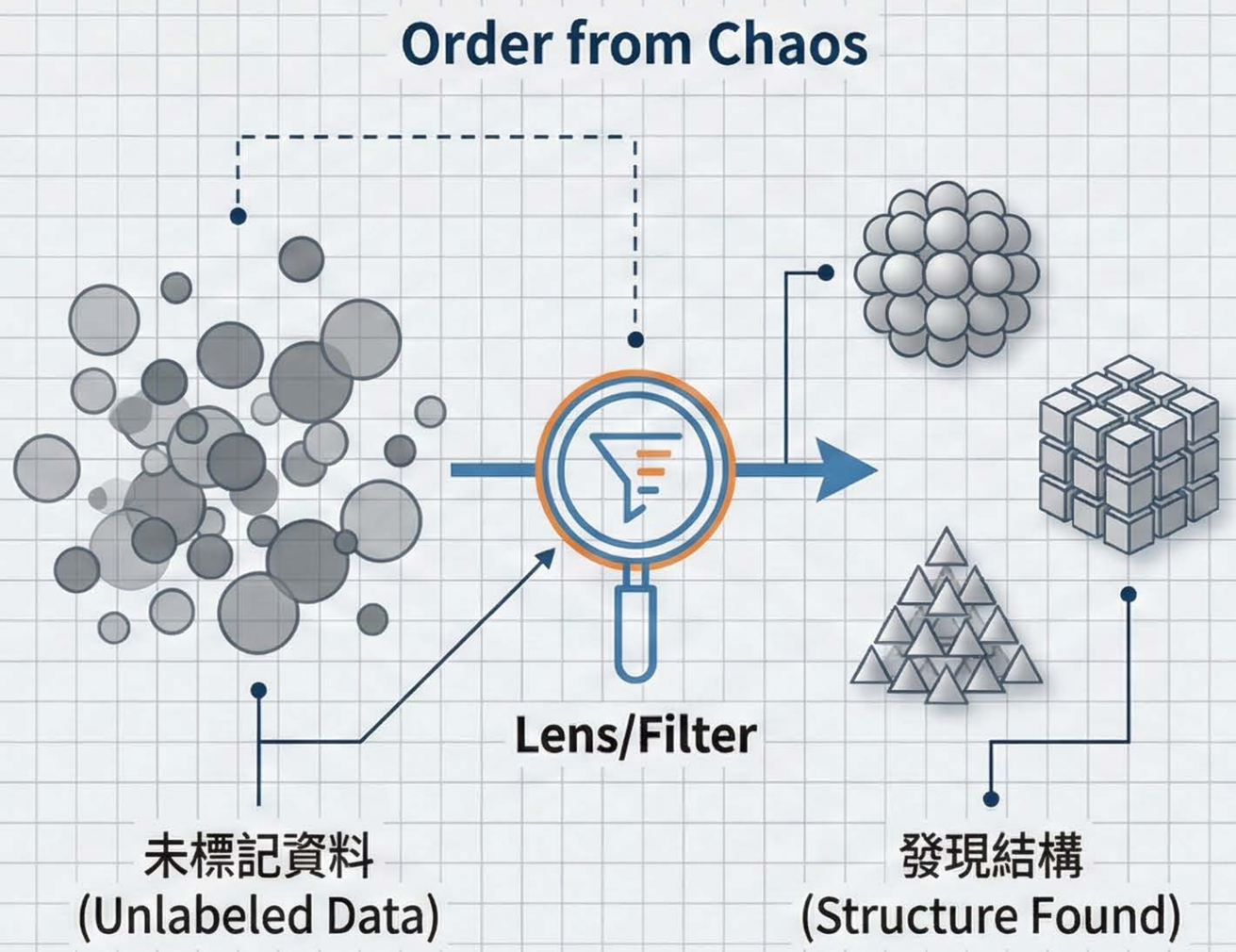
Toolbox (Algorithms)

<Logistic Regression>

<SVM> <KNN>

NotebookLM

非監督式學習 (Unsupervised Learning)：探索未知結構



定義：
從未標記的資料中發現隱藏的結構與模式。

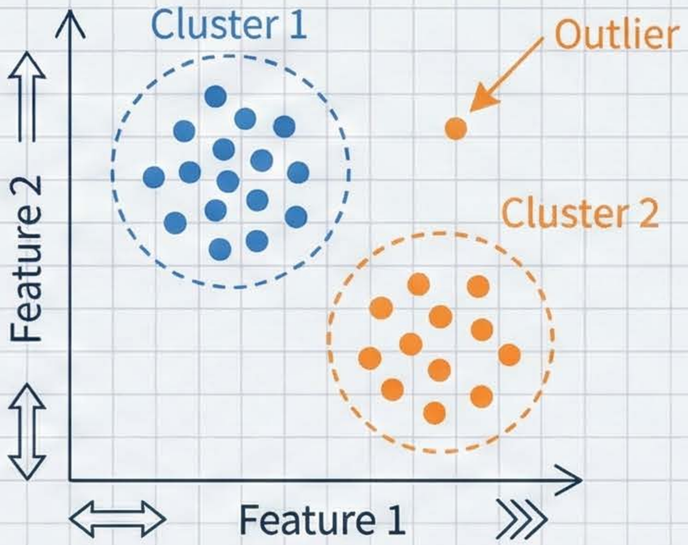
特點：
訓練資料只有輸入特徵 (X) ，沒有標籤（No Labels）。

比喻：
如同探險家在沒有地圖的情況下探索未知領域，自行繪製地圖。

適用於探索性資料分析 (EDA)，挖掘化工廠歷史數據中的隱藏規律。

NotebookLM

數據簡化：分群 (Clustering) 與降維 (Dimensionality Reduction)



1. 分群 (Clustering)

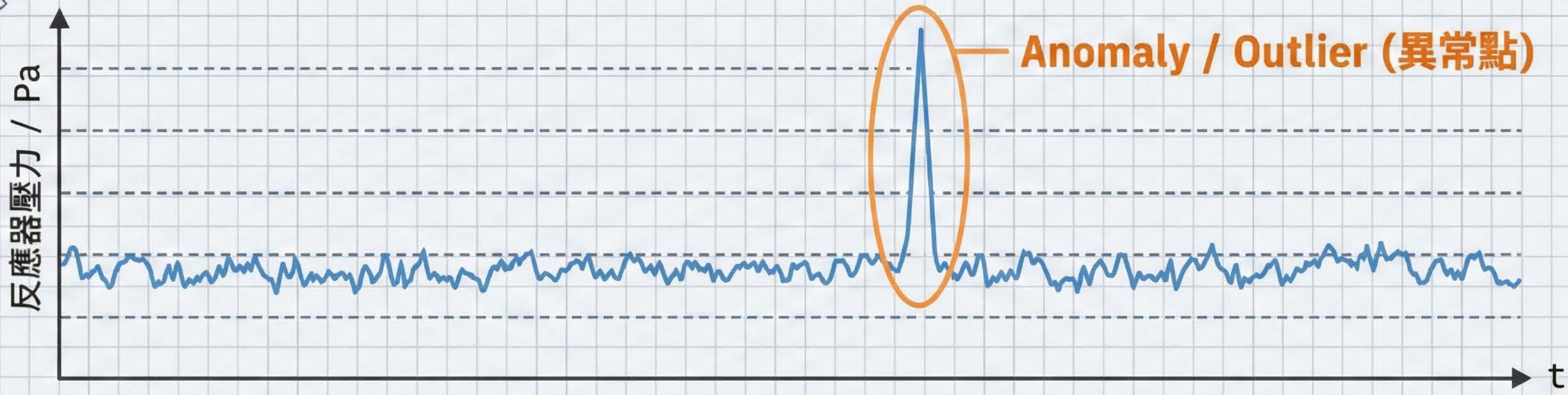
- 目標：將相似的資料點歸類分組。
- 應用場景：識別不同的操作模式 (Stable vs Unstable Regimes)。
- <K-Means>

2. 降維 (Dimensionality Reduction)

- 目標：減少特徵維度，同時保留重要資訊。
- 應用場景：高維度感測器數據視覺化 (100+ Sensors → 2D Plot)。
- <PCA>

NotebookLM

異常檢測 (Anomaly Detection)：製程安全的守門員



核心任務：
識別不尋常的資料點 (Outliers)。

應用場景：

- 即時偵測製程異常狀態 (Process Anomaly)
- 設備故障早期預警 (Early Warning)

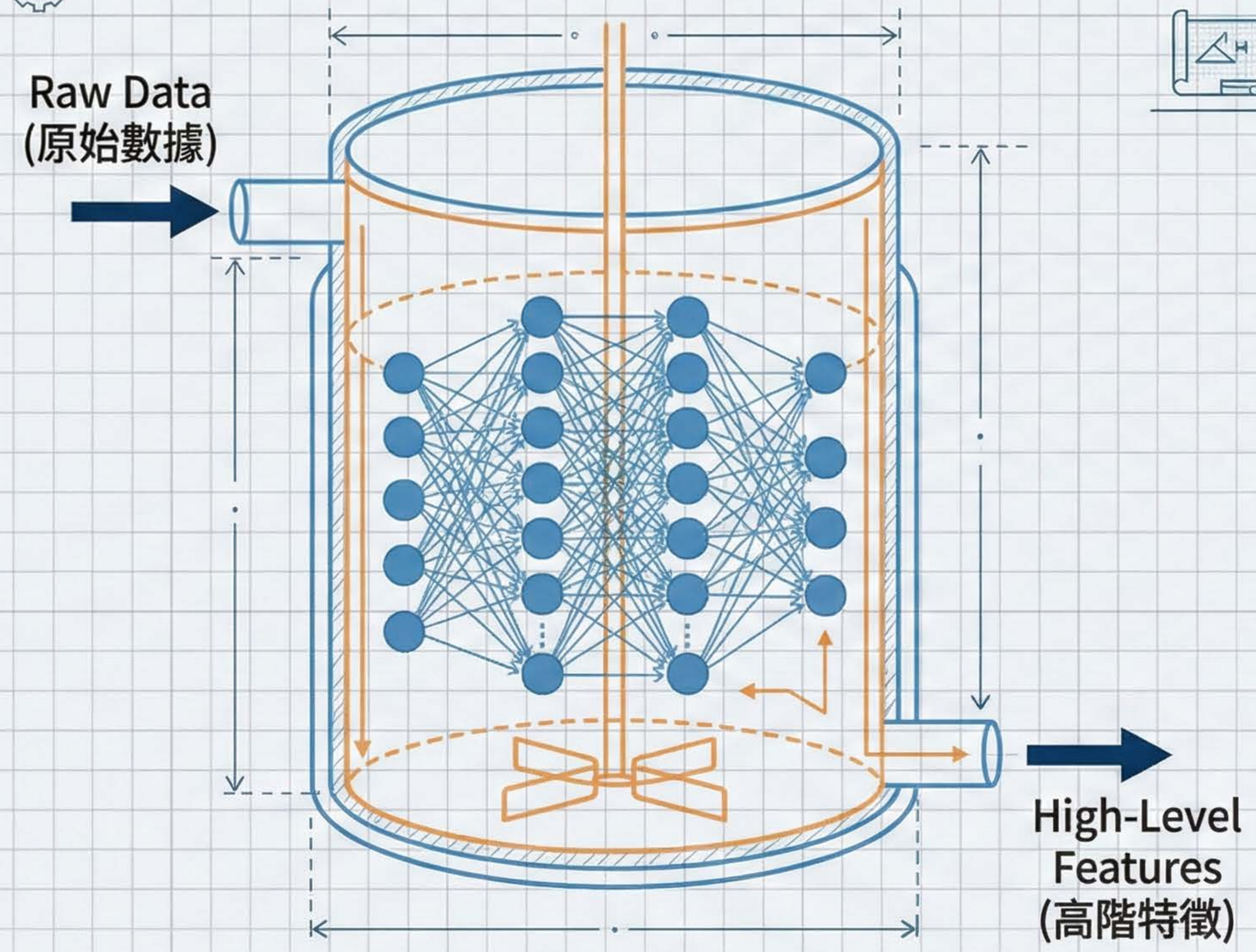
工具箱 (Toolbox)

</> Isolation Forest

</> One-Class SVM

NotebookLM

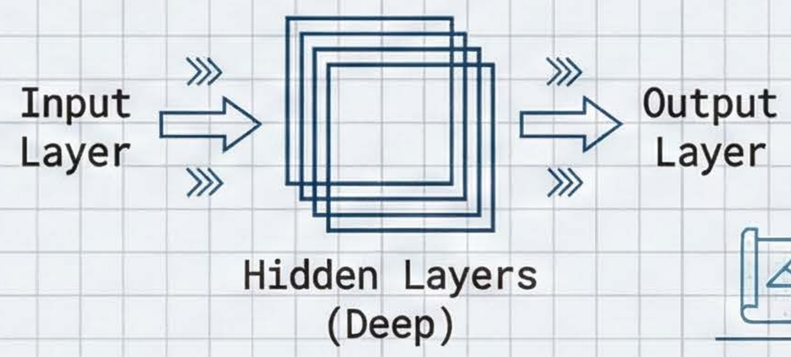
深度學習 (Deep Learning)：自動特徵提取



核心概念 (Core Concepts)

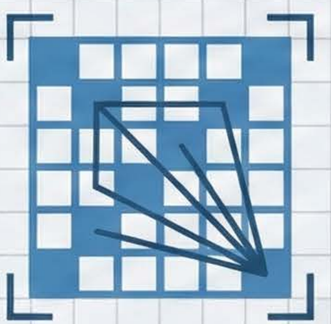
定義：使用多層神經網路自動學習資料的層次化特徵表示。

- **不需人工特徵工程 (No Manual Feature Engineering)**
  神經網路直接從資料中學習物理現象 (The network learns the physics directly from data)。



深度學習的專用架構 (Specialized Architectures)

卷積神經網路 (CNN)



資料類型 (Data Type) :
影像 (Images)

ChemE 應用 (ChemE App) :

- 顯微影像分析
- 晶體形態識別 (Crystal Morphology)

循環神經網路 (RNN)

資料類型 (Data Type) :
時間序列 (Time-Series)

ChemE 應用 (ChemE App) :

- 預測批次反應軌跡 (Batch Trajectories)
- 感測器日誌

Transformer

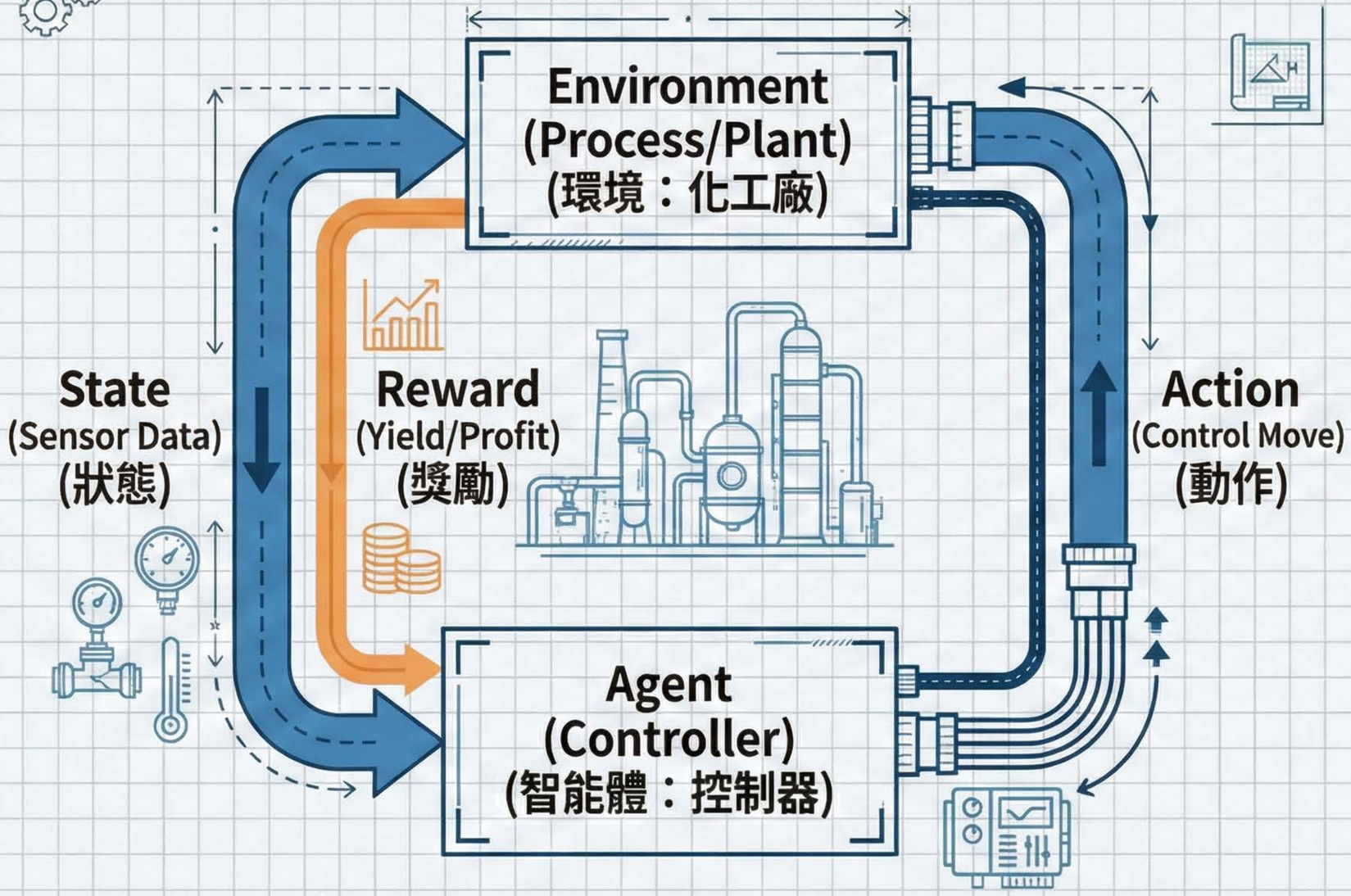
資料類型 (Data Type) :
序列 (Sequences)

ChemE 應用 (ChemE App) :

- 分子性質預測
- SMILES 字串生成

NotebookLM

強化學習 (Reinforcement Learning)：製程控制優化



核心概念 (Core Concept)

透過試錯 (Trial and Error) 學習最大化累積獎勵。

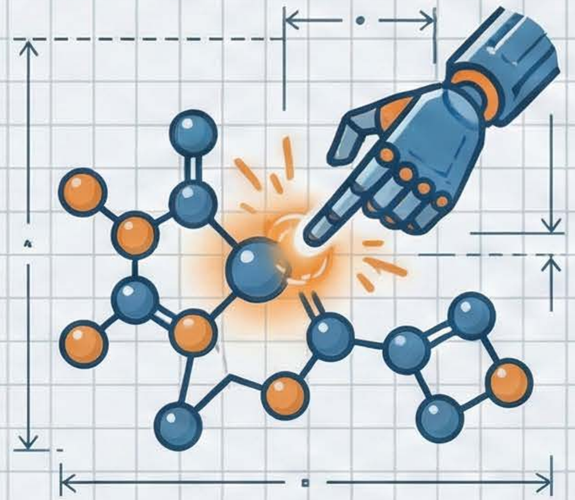
ChemE Use Cases

- 製程控制策略優化 (Beyond PID)
- 批次操作最佳化
- 能源管理決策

NotebookLM

生成式 AI (Generative AI) 與 大型語言模型 (LLM)

Generative AI



目標 (Goal) :

- 創造新資料 (Creating New Data)

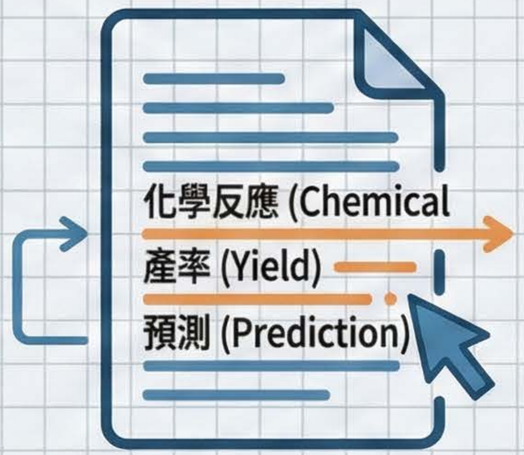
ChemE 應用 (ChemE App) :

- 新分子結構生成 (De Novo Drug Design)、製程資料擴增。

模型 (Models) :

- GAN、VAE

Large Language Models (LLMs)



目標 (Goal) :

- 知識理解與生成 (Knowledge & Text)

ChemE 應用 (ChemE App) :

- 文獻知識萃取、實驗報告自動生成、化學反應預測。

模型 (Models) :

- GPT-4、Llama

NotebookLM

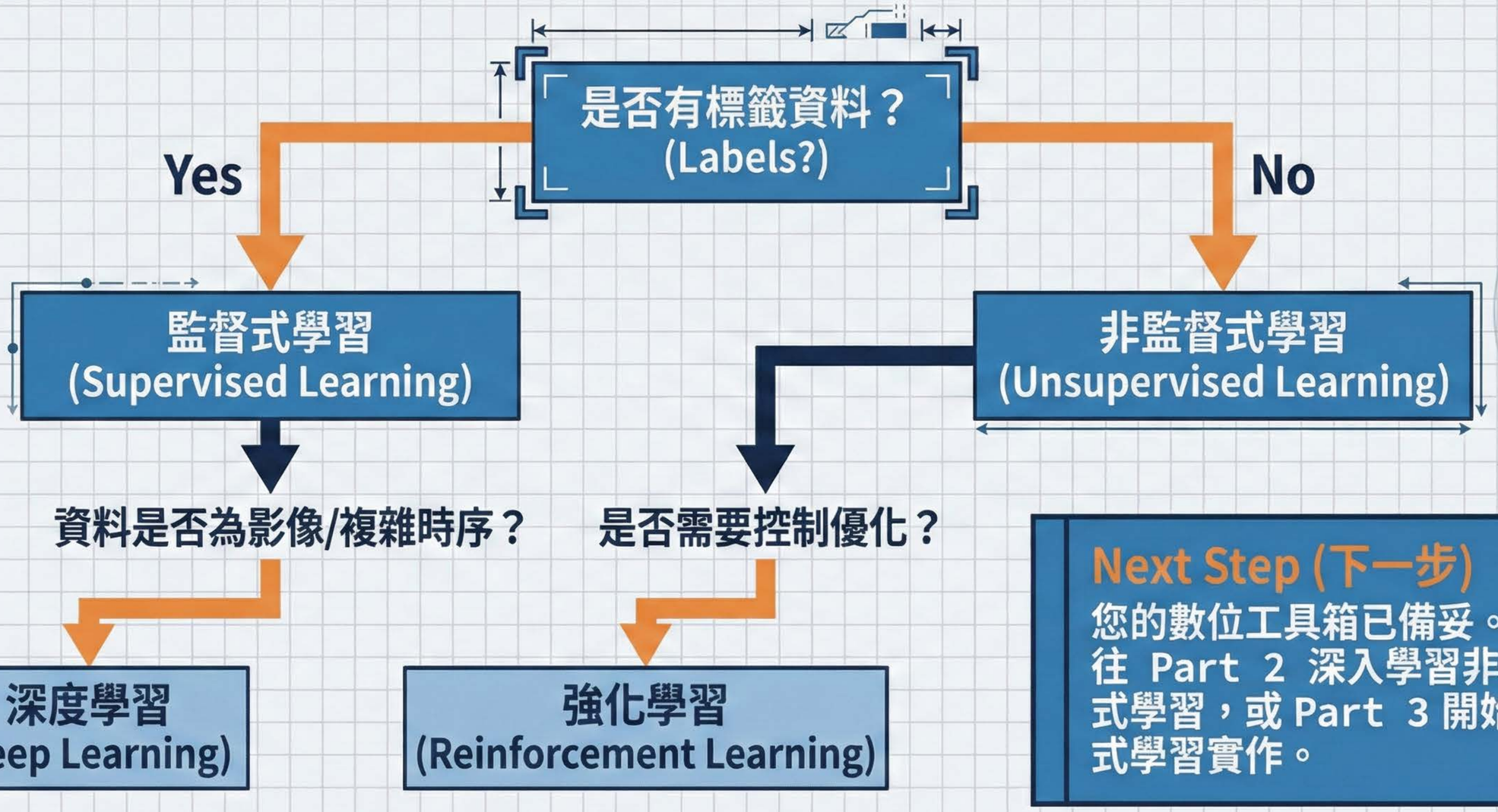
機器學習類型總結 (Summary Matrix)

學習類型 (Type)	資料標籤 (Labels)	主要目標 (Goal)	化工應用範例 (Example)
監督式 (Supervised)	有標籤	預測輸出	產品品質預測、故障分類
非監督式 (Unsupervised)	無標籤	發現模式	操作模式識別、異常檢測
深度學習 (Deep)	有/無	複雜模式	影像分析、時序預測
強化學習 (RL)	獎勵訊號	決策優化	製程控制、操作優化
生成式 (GenAI)	無標籤	生成新資料	分子設計、資料擴增

Noto Sans TC

NotebookLM

如何選擇合適的工具？(Selection Guide)



Next Step (下一步)

您的數位工具箱已備妥。請前往 Part 2 深入學習非監督式學習，或 Part 3 開始監督式學習實作。

NotebookLM