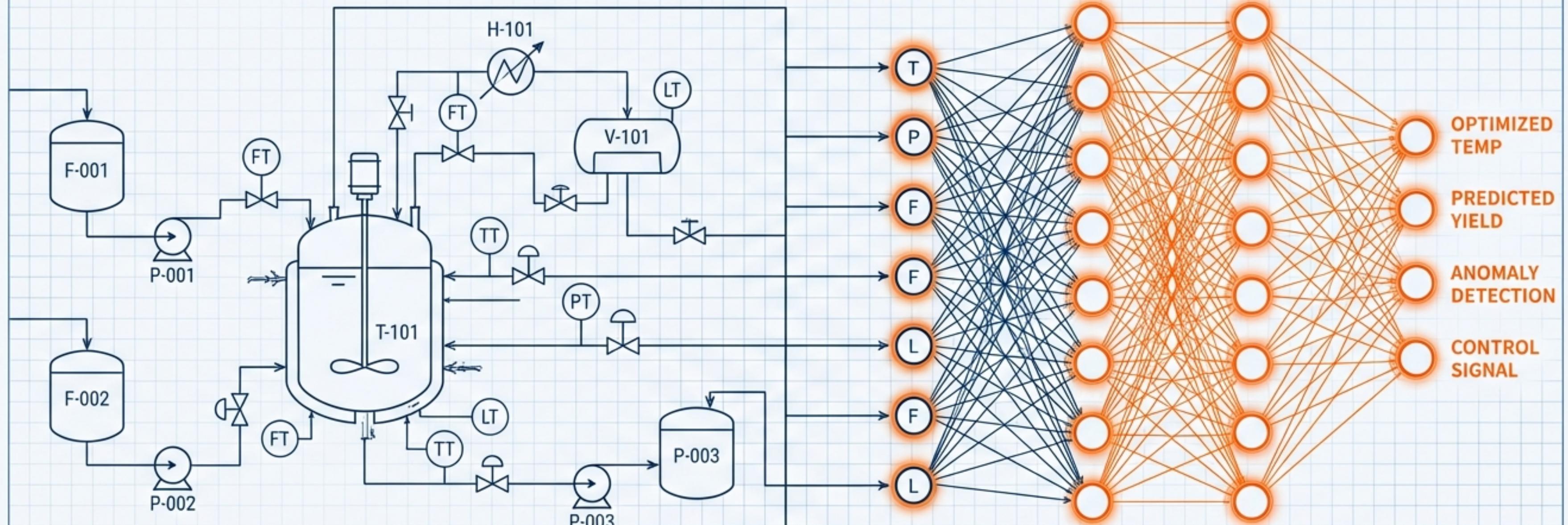


# AI 在化工上的應用：從原理到實踐

## Unit 10 彈性網絡回歸 (Elastic Net Regression)



授課教師：莊曜楨 助理教授

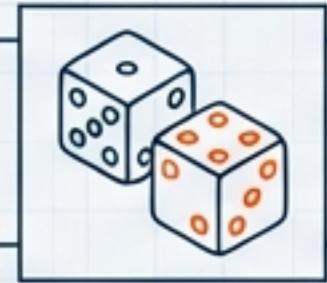
學期：114學年度第2學期

製作：逢甲大學 化工系 智慧程序系統工程實驗室

# 課程目標：解決化工數據的「多重共線性」挑戰

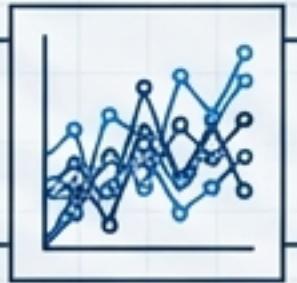


# 為什麼需要 Elastic Net？現有工具的侷限



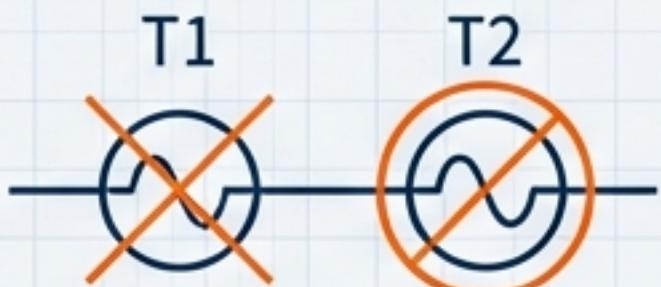
## Lasso (L1) 的缺陷

- 不穩定性 (Instability)
  - 場景：變數 A 與 B 高度相關 ( $r > 0.95$ )。
  - 後果：Lasso 會「隨機」保留其中一個，剔除另一個。
  - 化工情境：當 T1 (入口) 與 T2 (出口) 連動時，不應隨機丟棄。



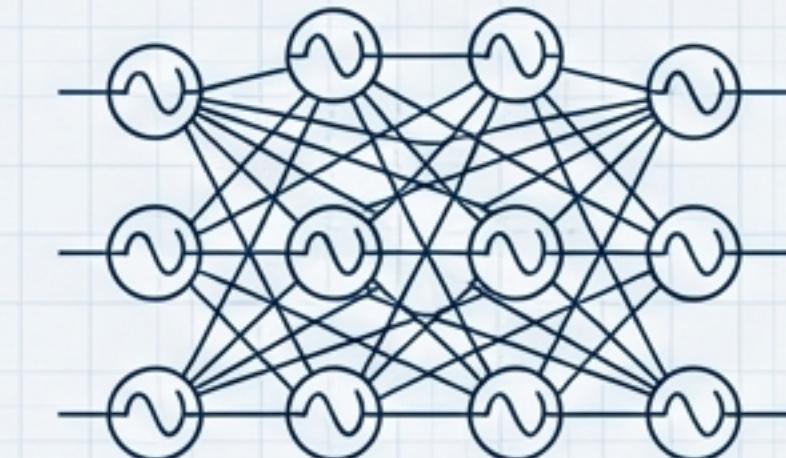
## Ridge (L2) 的缺陷

- 無法簡化模型 (No Selection)
  - 場景：所有變數係數皆收縮但不為零。
  - 後果：保留了所有變數，模型難以解釋。
  - 化工情境：當有 1000 個傳感器時，無法剔除無關變數。

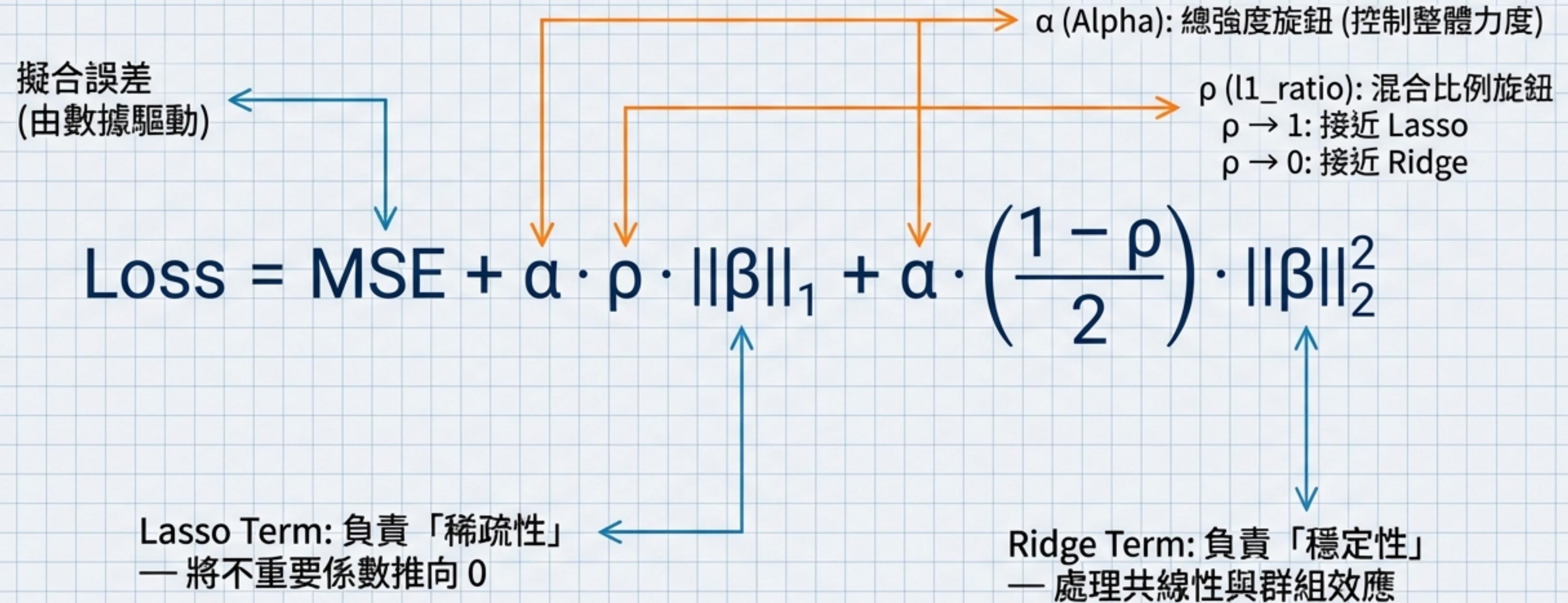


## Elastic Net 解決方案

結合 Lasso 的特徵選擇與 Ridge 的穩定性，完美適用於  $p > n$  (特徵多於樣本) 的化工場景。

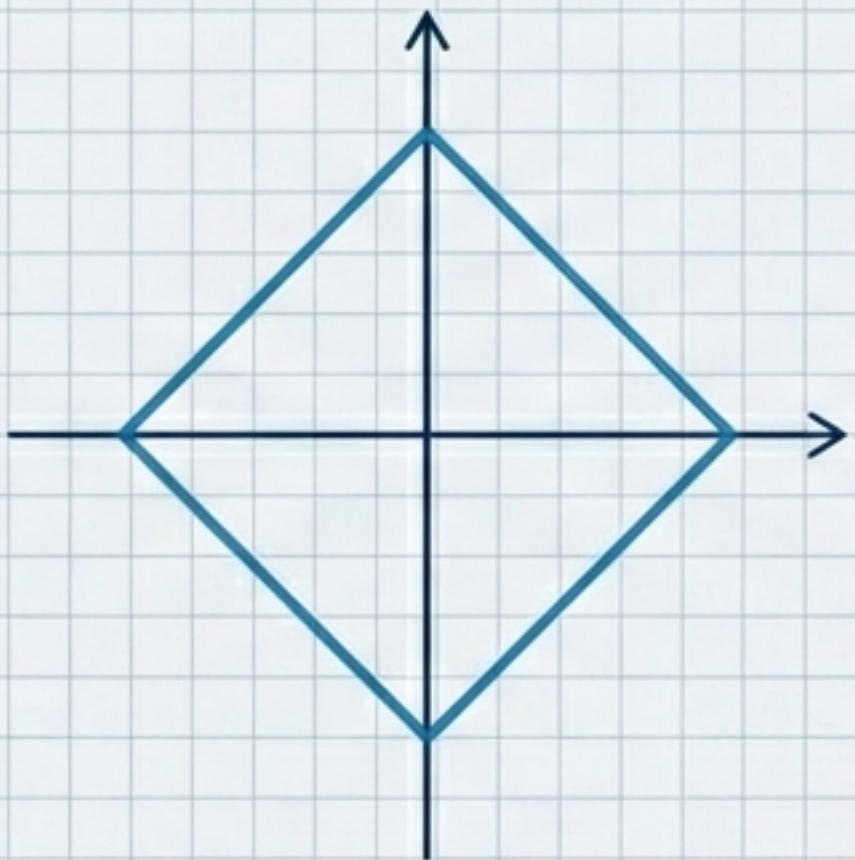


# 數學原理：混合正則化 (Hybrid Regularization)



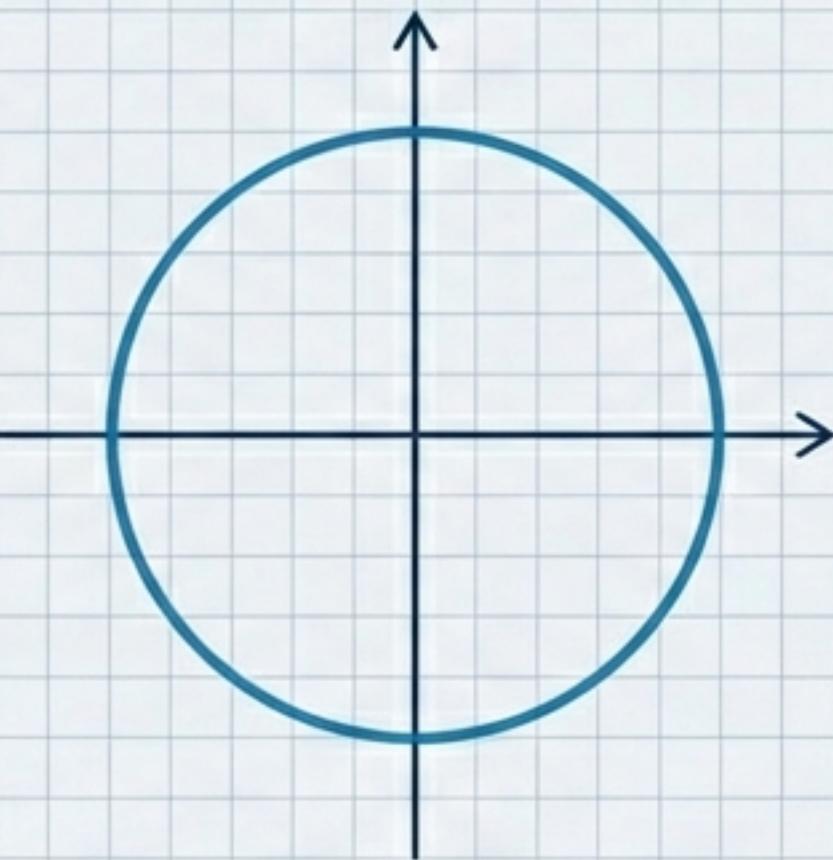
# 幾何解釋：雙重收縮 (Double Shrinkage)

Lasso (L1)



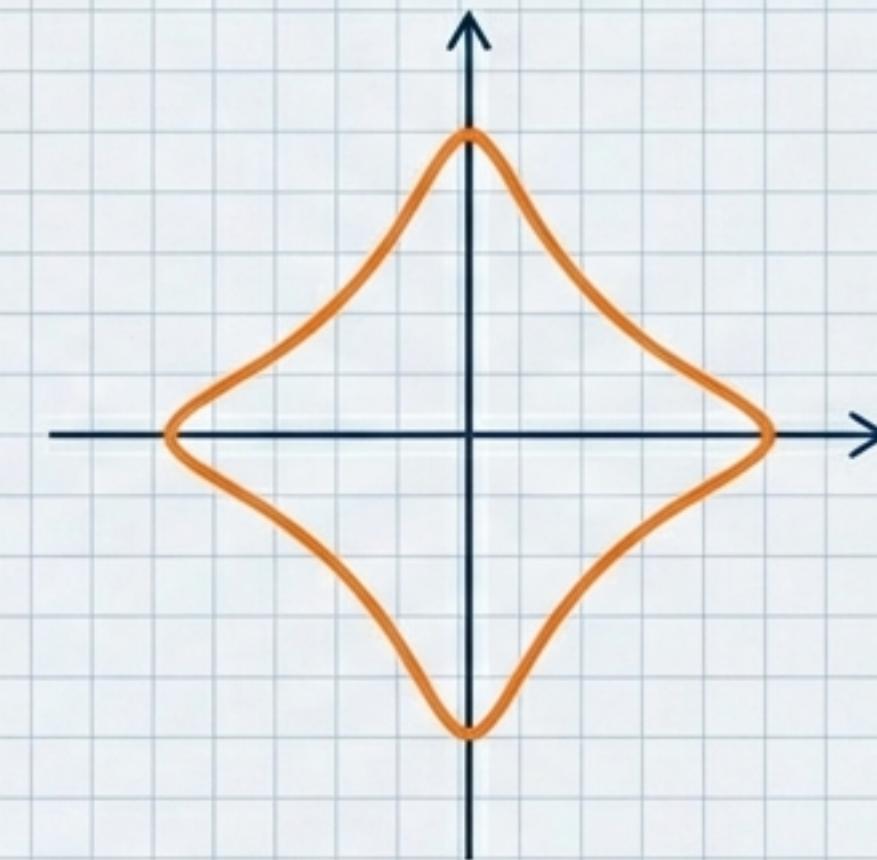
尖角產生稀疏解 (Sparse)

Ridge (L2)



平滑邊界提供穩定性 (Stable)

Elastic Net



雙重收縮 (Double Shrinkage)

形狀特性：Elastic Net 的約束區域結合了菱形的尖角（特徵選擇）與圓形的邊緣（群組效應）。

定理 (Zou & Hastie, 2005)：模型係數經歷了「雙重收縮」。第一次由 L2 穩定係數，第二次由 L1 進行篩選。

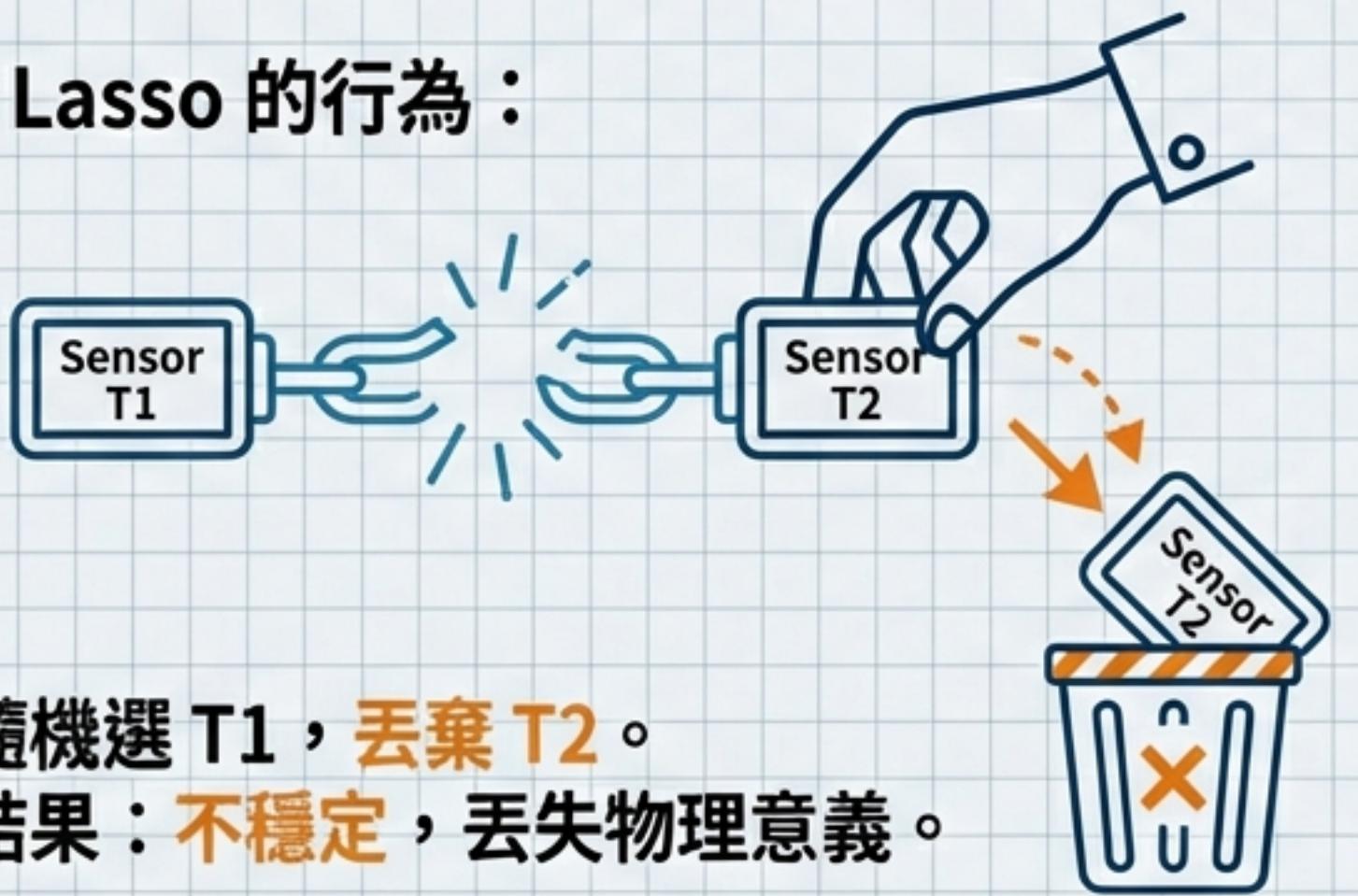
# 核心優勢：群組效應 (Grouping Effect)

化工數據中，物理變數往往是連動的



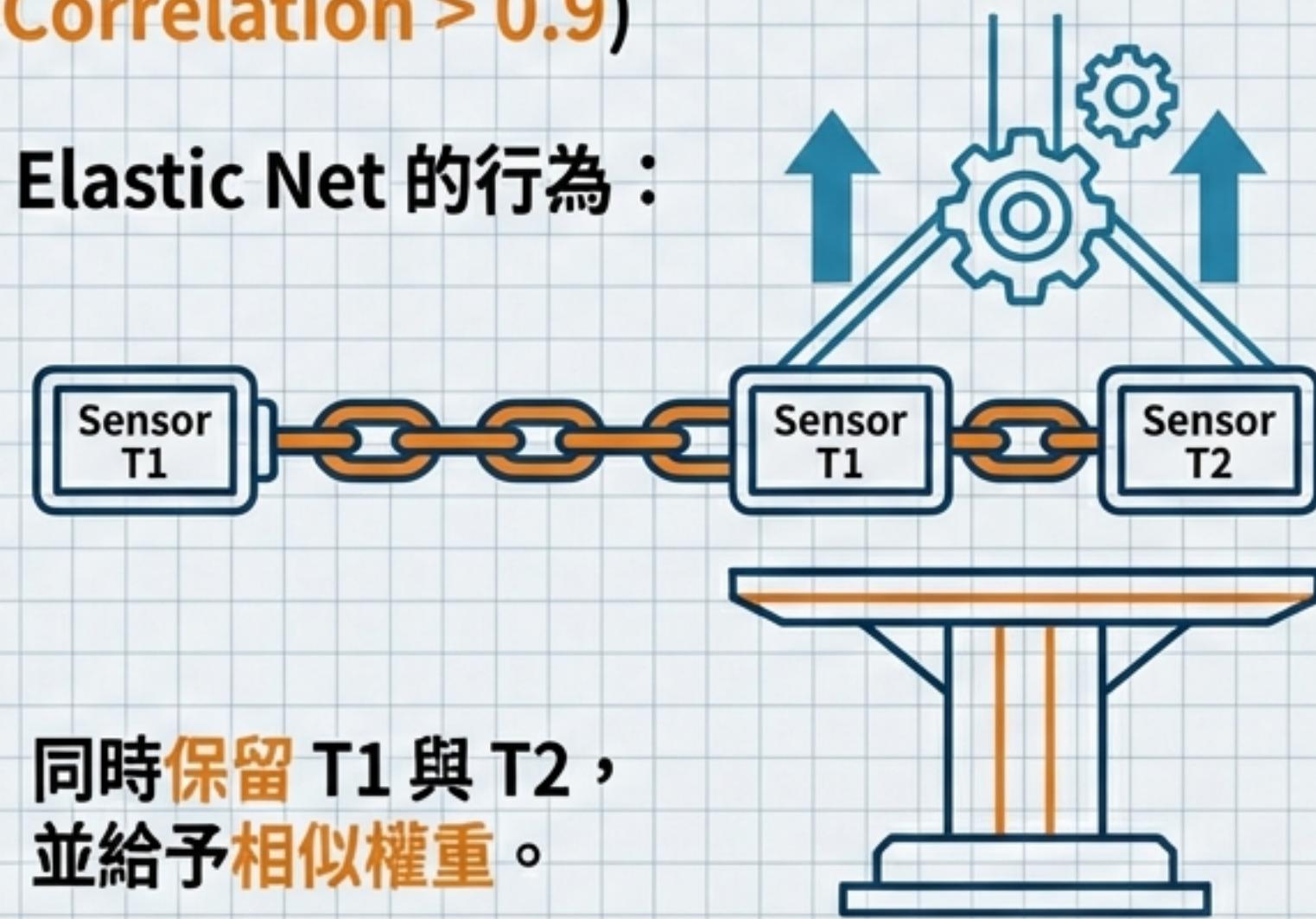
→ 物理變數高度連動 ( $\text{Correlation} > 0.9$ )

Lasso 的行為：



隨機選 T1，丟棄 T2。  
結果：不穩定，丟失物理意義。

Elastic Net 的行為：



同時保留 T1 與 T2，  
並給予相似權重。

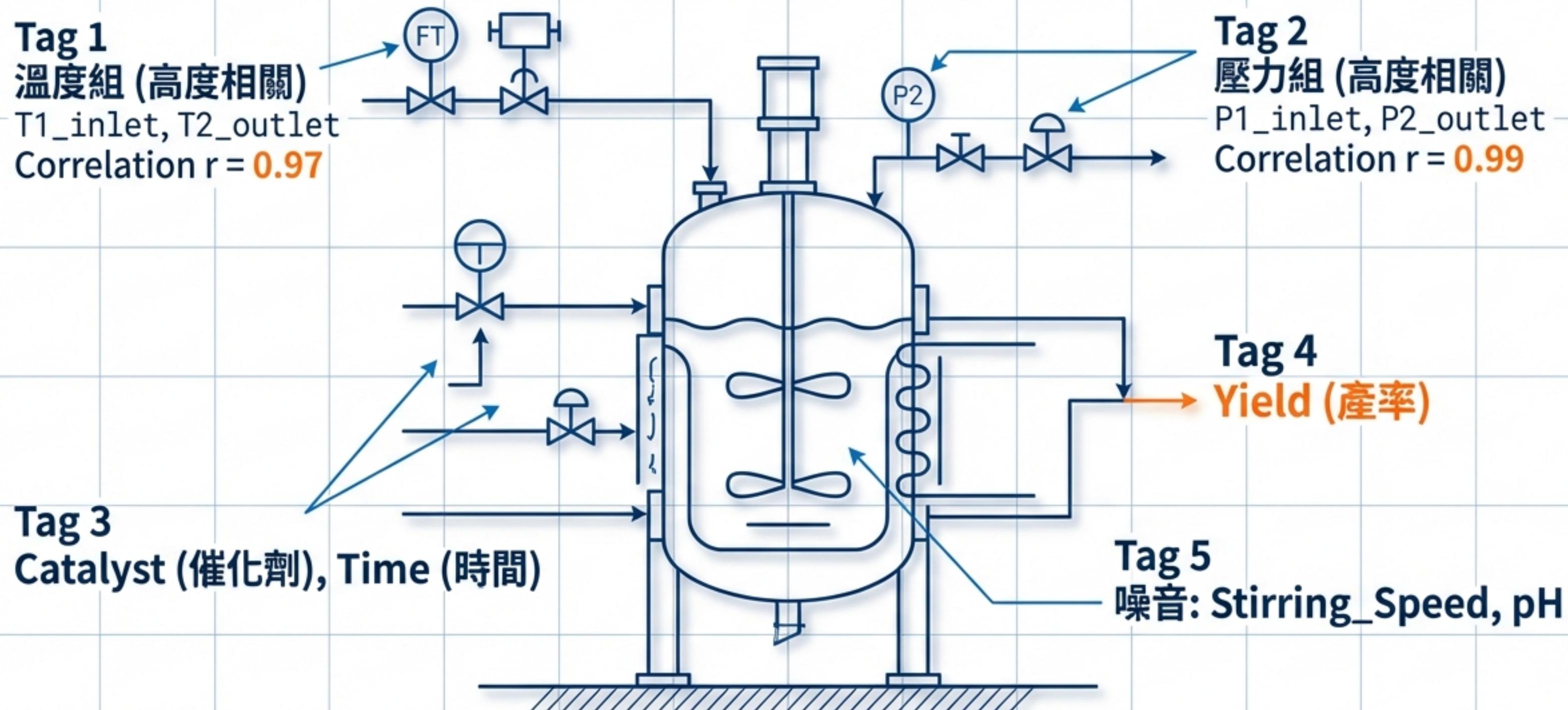
# 模型特性總體比較

	OLS	Ridge	Lasso	Elastic Net
特徵選擇 (Feature Selection)	✗	✗	✓	✓
多重共線性 (Multicollinearity)	敏感 Sensitive	穩健 Robust	不穩定 Unstable	穩健 Robust
群組效應 (Grouping Effect)	✗	✓	✗	✓ (改進版)
特徵數限制 (Limit)	無	無	最多 n 個	無限制

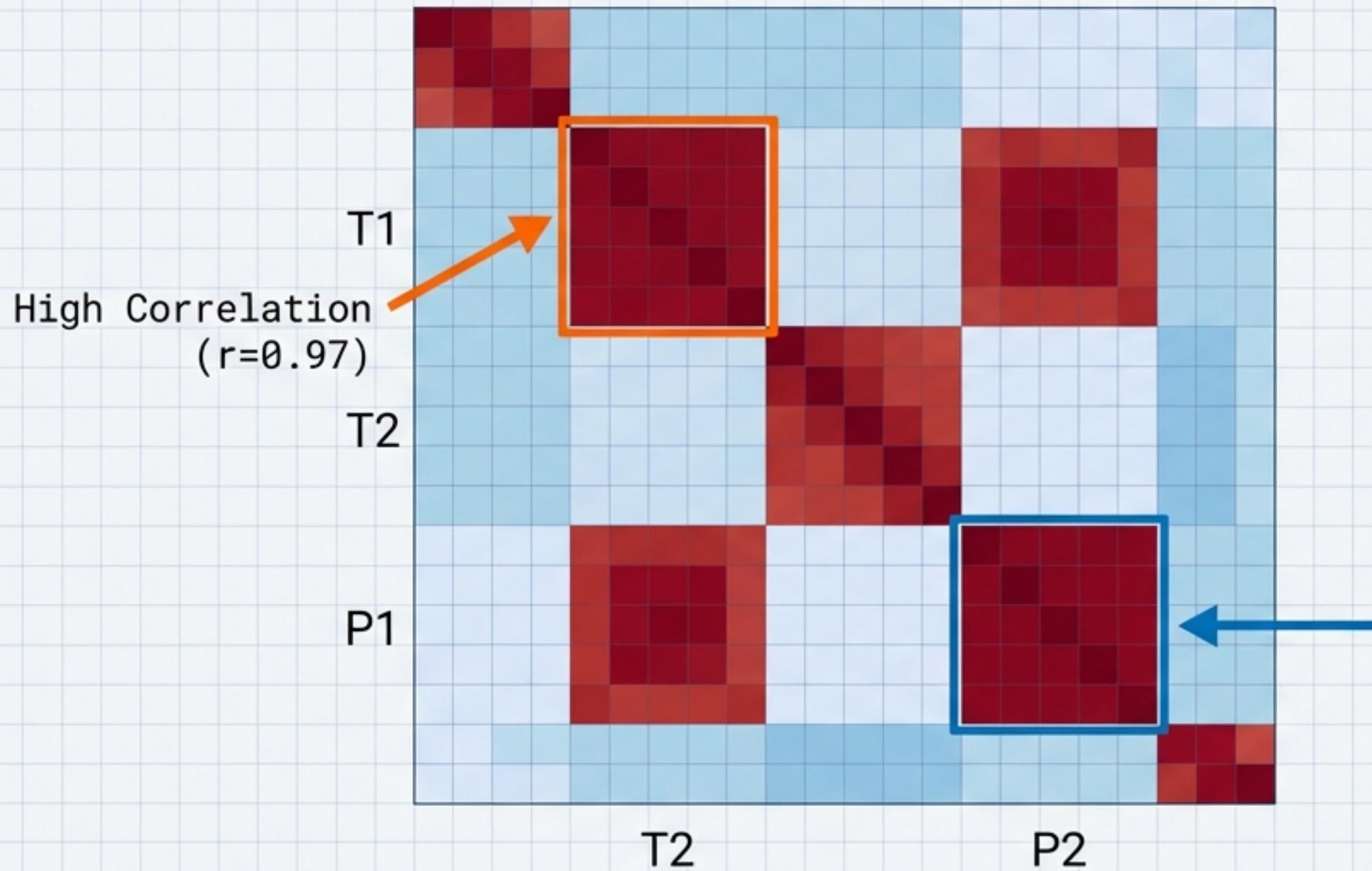
結論：當面對高度相關特徵或特徵數 > 樣本數時，Elastic Net 是唯一且最佳的選擇。

# 實戰案例：化學反應器產率預測

挑戰：AI 能否在高度共線性干擾下，正確識別有效變數？



# 數據探索：識別多重共線性

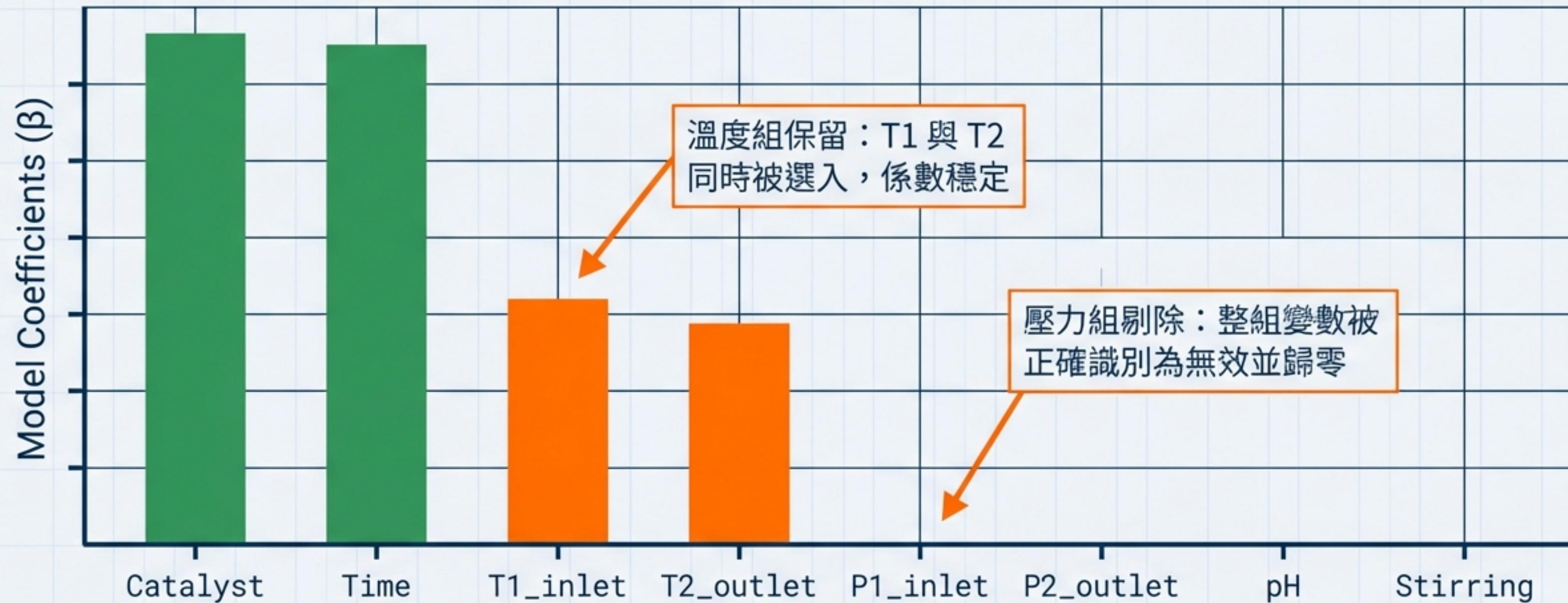


## 發現高度共線性 (High Multicollinearity)

這種強相關性會導致 OLS 失效，並讓 Lasso 變得不穩定。這正是測試 Elastic Net 群組效應的理想數據。

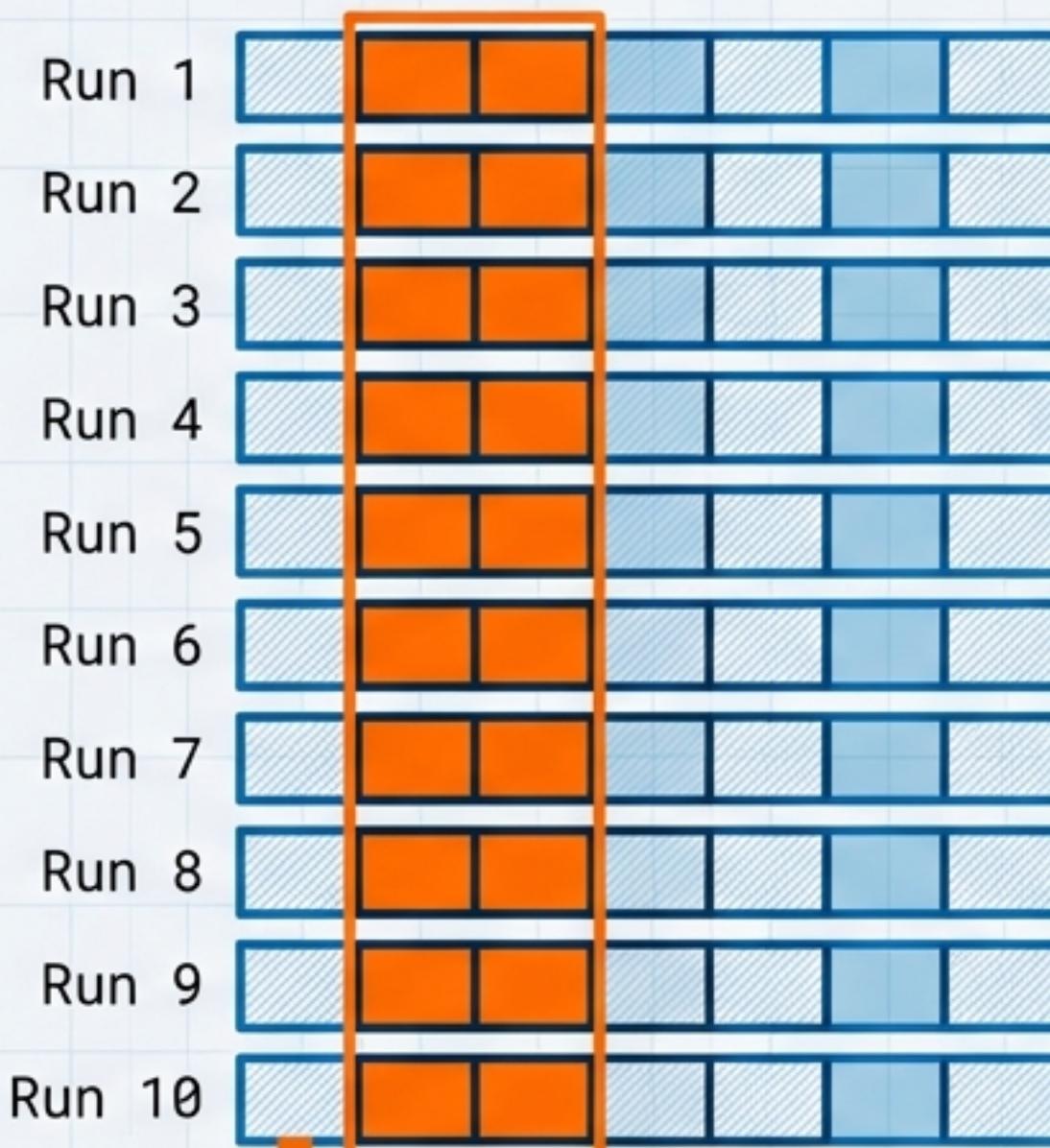
# 模型結果：群組特徵篩選

自動從 10 個特徵中篩選出 8 個關鍵特徵



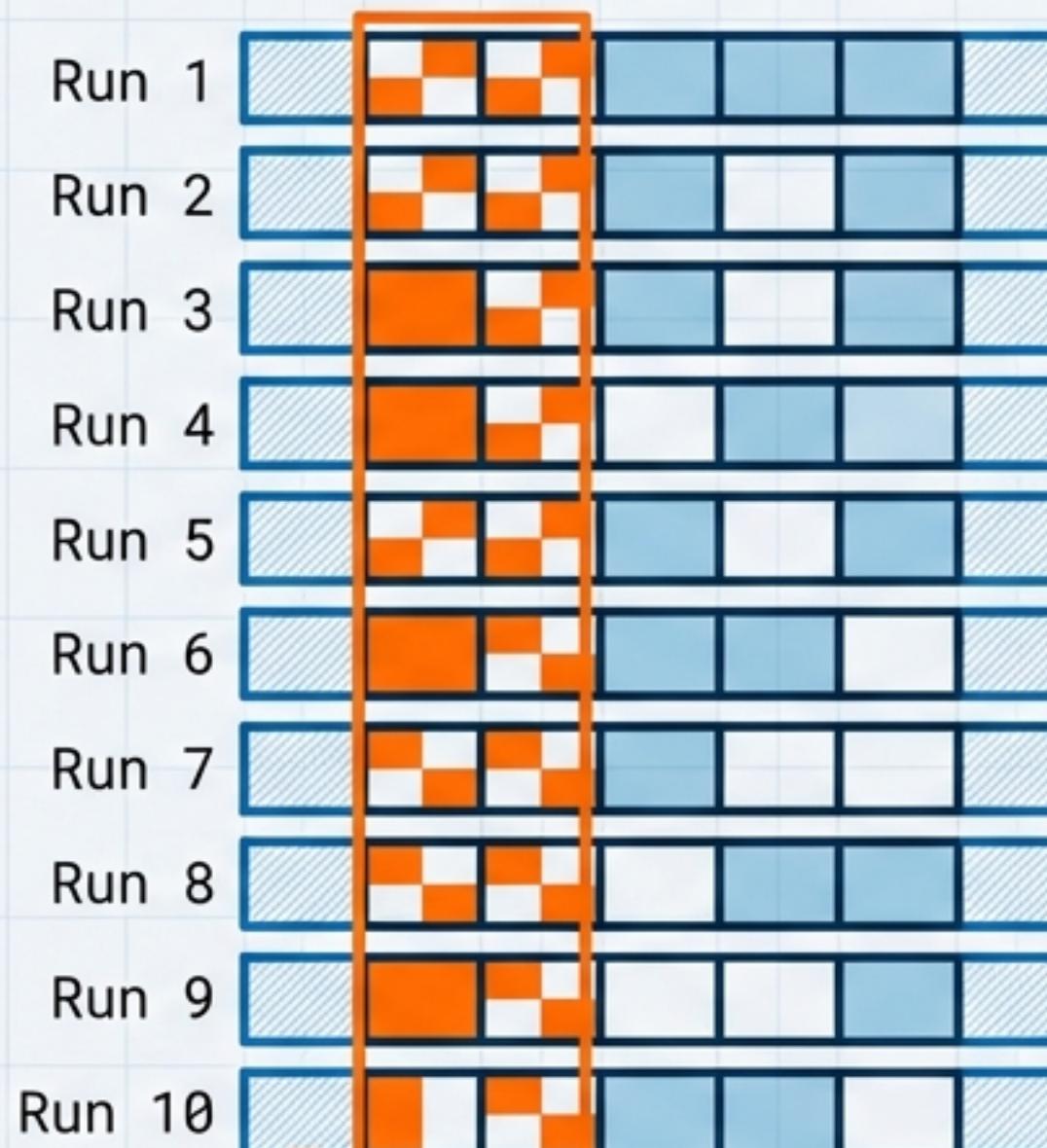
# 穩定性驗證：Elastic Net vs Lasso

Elastic Net (Stable)



100% Selection Consistency  
(T1/T2 Selected)

Lasso (Unstable)



Random/Unstable Selection  
(T1 or T2 or Neither)

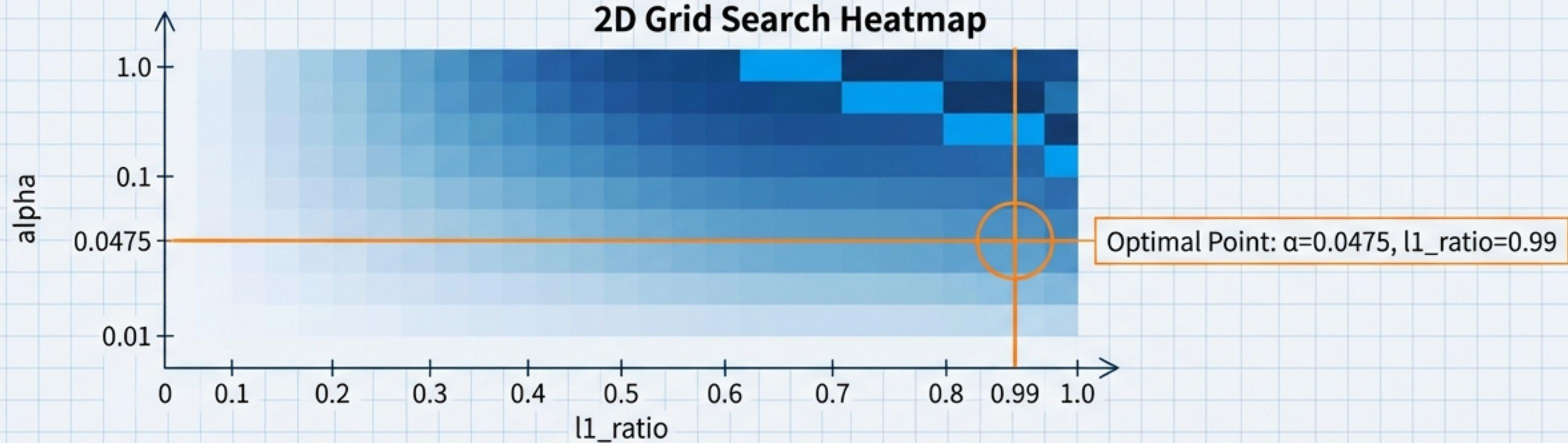
## 穩定性驗證

在 10 次隨機實驗中，Elastic Net 對於溫度組的選擇率為 **100%**。

交叉驗證 (5-Fold CV) 顯示  **$R^2 = 0.917 \pm 0.012$** 。

極低的標準差意味著模型適合部署於工廠控制系統 (DCS)。

# 關鍵參數調優： $\alpha$ 與 $l1\_ratio$

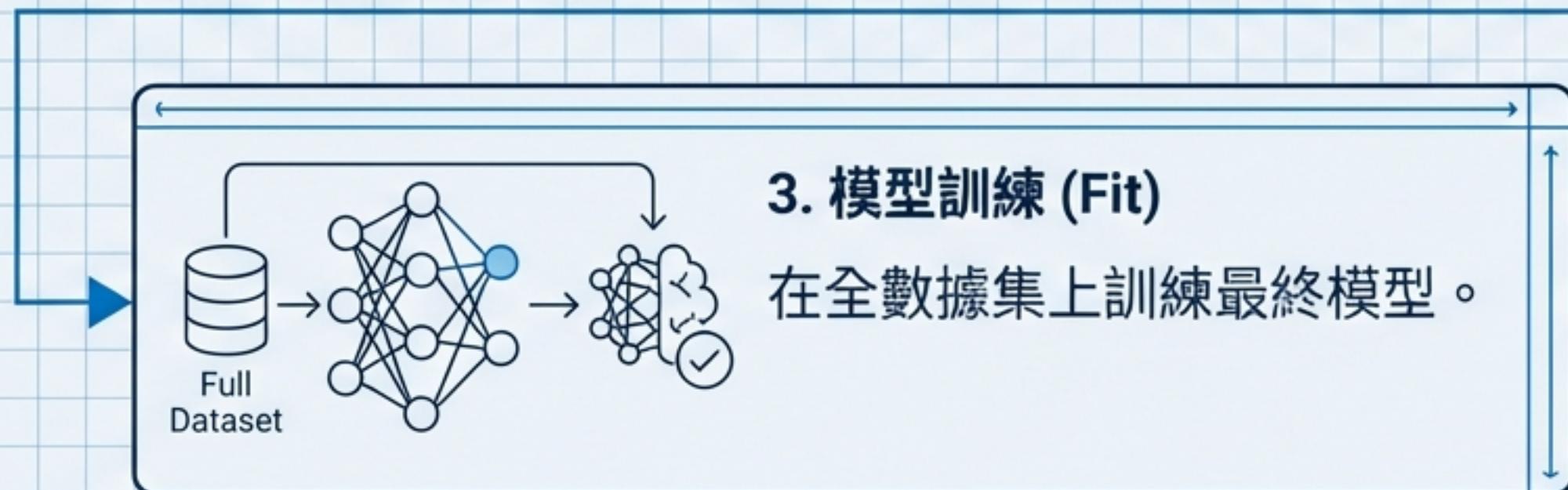
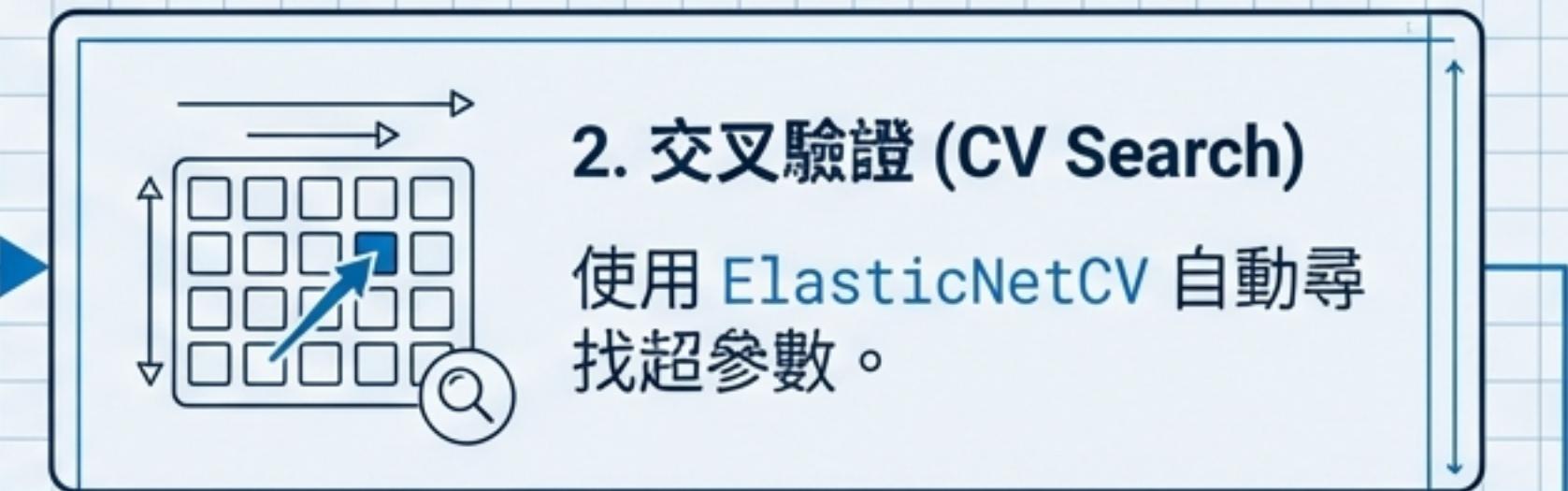


## $l1\_ratio$ Interpretation Guide

$l1\_ratio$ Value	Interpretation (中文)
$l1\_ratio \approx 1.0$	接近 Lasso (本案例)。數據需要強特徵選擇。
$l1\_ratio \approx 0.1$	接近 Ridge。適用於共線性極強場景。
$l1\_ratio = 0.5$	平衡混合。

```
model = ElasticNetCV(l1_ratio=[.1, .5, .7, .9, .99], cv=5)
```

# 實作流程：從數據到部署

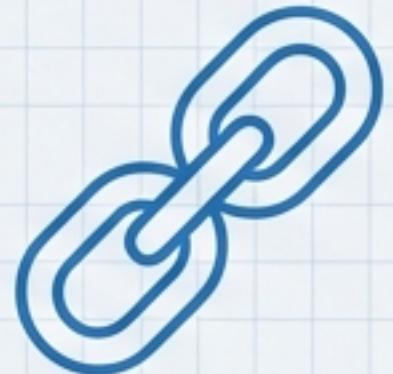


# 課程總結：Elastic Net 的核心價值



## 混合強大 (Hybrid Power)

結合 L1 的稀疏性與 L2 的  
穩定性，最佳化模型結構  
。



## 群組效應 (Grouping)

解決化工數據中常見的傳  
感器冗餘 (Redundancy)  
問題。



## 應用場景 (Application)

適用於  $p > n$  或高度共線  
性的複雜製程數據。

**Case Result:** 成功將誤差控制在  $RMSE = 3.24$ ，與真實值高度吻合。

# 下一步與學習路徑



## Call to Action

請完成 Python 作業：Unit10\_ElasticNet\_Regression.ipynb  
親手實作反應器數據的特徵篩選。

“

「AI 不會取代化工工程師；  
但懂得使用 AI 的化工工程師將取代不懂的人。」

”

