

國科會工程處115年度學門主題式計畫 「AI大型語言模型推動化工數位轉型應用」 計畫徵求公告

壹、計畫背景

隨著生成式人工智慧（Generative AI, GenAI）與大型語言模型（Large Language Models, LLM）迅速發展，全球正迎來以語言驅動的智慧化轉型浪潮。根據 2024 年 Nature Chemical Engineering 的觀察，GenAI 正逐步整合化工產業中流程模擬、製程設計、自動化控制與風險評估等任務，展現提升製程效率與決策品質的高度潛力。而其中支撐 GenAI 的核心，即為具備語意理解與邏輯推理能力的 LLM，已成為驅動程序智慧化的關鍵技術。

國際間已逐步建立以「語言—模型—流程」為核心的智慧化技術架構，結合程序語意理解與推理機制，應用於流程建構、風險管理與永續分析等多項場景，顯著降低知識門檻並提升決策透明度與準確性。這顯示語言模型正加速邁向知識密集產業的深層應用，成為驅動智慧製程與低碳創新的關鍵動能。

台灣化工產業具備完整製程能力與工程基礎，然而在語言模型導入上仍處起步階段。實務上，製程經驗傳承與知識管理常面臨分散化與非結構化問題，異常應變與參數調節仍大量依賴人工判斷。面對碳敏感製程與複雜產品配方的升級需求，建構可解釋、邏輯一致的智慧決策系統已勢在必行。LLM 所具備的語意解析、任務轉譯與跨模組邏輯整合能力，提供實現語言驅動智慧製程的契機。

本主題式計畫即針對上述關鍵挑戰，聚焦於 LLM 在化工領域中的應用潛力，規劃四大研究主軸：語言驅動橋接層建構、智慧設計與控制優化、程序安全與永續應用、分子與反應條件推論。透過語意技術與工程模組的深度整合，建立從語料訓練、語義建模到場域驗證之完整鏈結，推動台灣化工產業於智慧製程與永續創新中實現技術自主與國際接軌。

貳、計畫目標與主要研究議題

本項學門主題式計畫之目標是針對 LLM 於化工領域的應用潛力與技術缺口，規劃四項研究主軸，聚焦智慧設計、智慧控制、安全永續、分子推論，主要研究議題建議如下(不僅限於以下內容，申請人可研提其他具有價值 AI 大型語言模型推動化工數位轉型應用議題)：

一、 LLM整合化工系統平台開發

本主軸聚焦於建立大型語言模型 (LLM) 與傳統化工工程軟體之間的整合平台，作為語言驅動的橋接核心。目標是實現各類資訊系統之間的語意連結與邏輯一致性，支援跨模組、跨工具的任務整合與智慧化自動推論，將自然語言指令轉化為模擬、控制、設計等可執行的操作命令，並建立模組之間通用的互通語言。主要之分項研究議題（包含但不限於）說明如下：

(一) LLM與化工模擬軟體之橋接

建立自然語言與化工模擬工具的雙向接口，自動執行模擬操作。

(二) LLM與製程控制系統之橋接

透過自然語言描述提升控制設計效率與靈活性。

(三) LLM與流程圖工具 (PFD/P&ID) 之橋接

將語言描述自動轉換為流程圖編輯與生成指令。

(四) LLM整合多方化工軟體與工具

以自然語言接口統一多種化工軟體與工具，支援協同操作與資料串聯。

二、 LLM應用於智慧化製程設計與控制優化

透過語言理解技術解析製程相關資料，整合結構化製程資料與模擬數據，實現語言驅動的製程設計與控制建議輔助決策。具體而言，模型將能透過程序語意抽取與轉換，支援流程圖 (PFD/P&ID) 自動建構、設備佈局生成與製程架構摘要；進一步結合控制邏輯與模擬輸出，提供操作參數推薦、調節策略與異常應對建議，提昇製程靈活性與智慧調節能力。主要之分項研究議題（包含但不限於）說明如下：

(一) 大型語言模型之程序圖建構與編輯

運用 LLM 自動生成具製程圖 (PFD/P&ID)。

(二) 大型語言模型之智慧製程設計

運用 LLM 依要求產量、純度與原料條件，自動推導製程設計。

(三) 大型語言模型之智慧設備設計

運用 LLM 依流體性質、流量與熱負荷，自動生成設備型式與設計參數。

(四) 大型語言模型之智慧製程控制

運用 LLM 解析操作文件與歷史資料，自動生成控制邏輯與調節策略。

三、 LLM協助製程安全與永續應用研究

針對製程工業的淨零轉型與智慧化需求，發展整合 LLM 的智慧決策輔助架構，應用於永續製程與能源系統設計、程序安全管理及 ESG 績效評估。核心在於結合 LLM 的語意理解與工程知識，涵蓋製程安全評估、風險推論、異常診斷、ESG 報告生成、生命週期評估（LCA）與技術經濟分析（TEA），建構貫穿製程設計、操作與環境績效的智慧永續管理平台。主要之分項研究議題（包含但不限於）說明如下：

(一) HAZOP 報告解析與風險推論

自動解析報告並建立風險語意圖譜進行事件關聯分析。

(二) 製程異常診斷與應變

結合即時數據進行異常診斷並提出應變策略。

(三) ESG 報告生成與追溯

自動生成符合國際標準的 ESG 報告並提供數據追溯功能。

(四) LCA 與永續製程設計

運用 LLM 進行 LCA 與 TEA 分析，支援永續製程方案評估與設計。

四、LLM輔助分子、熱力學與反應設計應用

以 LLM 為基礎，將結構、機理與物性資訊結合為「語意-結構」對應關係，建構製程語意與結構化分子資訊的對應模型，用於分析化學反應描述、合成方法與熱力學條件，並推論分子物性、反應熱及合成路徑。透過整合知識圖譜與語料強化技術，結合文獻資料與實驗數據，發展支援程序導向的分子逆設計與替代材料推薦機制，以協助尋找綠色溶劑、低碳原料與環保催化劑，促進綠色製程開發與低碳材料應用，作為永續產品與材料設計的決策輔助工具。主要之分項研究議題（包含但不限於）說明如下：

(一) 語言模型與知識圖譜驅動之自動化分子物性預測與推論平台

運用 LLM 與知識圖譜，自動蒐集與整理分子物性資料並建立性質關聯模型，提供物性預測與篩選應用。

(二) 語言模型驅動之分子逆設計與合成路徑推論技術

依目標物性或應用場景，自動生成候選分子並推導合成路徑。

(三) 語言模型驅動之反應機構解析與速率常數預測技術

自動解析反應機制並預測速率常數、反應路徑或中間體推論。

(四) 語言與結構資料驅動之催化劑與反應條件智慧推薦技術

結合 LLM 與結構資料，自動推薦催化劑與反應條件。

參、計畫書撰寫說明

- 一、本項學門主題式計畫申請時應以三年期單一整合型計畫之方式提案(計畫期程為 115 年 8 月 1 日至 118 年 7 月 31 日)，且至少需包含 3 件子計畫(含總計畫主持人執行之子計畫)以上，並由總計畫主持人任職之機構提出申請。計畫書需清楚說明總計畫與各子計畫間整合之分工合作架構、關聯性與必要性；三年期計畫之技術發展路程(Roadmap)、查核點、與技術評量指標；並說明每年期末將達成並可供查核之技術量化規格、展演情境或技術指標。
- 二、本項學門主題式計畫以強化產學合作、落實產業應用為目標，故學界研究團隊提案時必須邀請國內業界參與共同執行，並提供「合作企業參與計畫意願書」(格式詳如附件 2，請附於 CM04「四、整合型研究計畫項目及重點說明」之後)，請具體敘明合作企業參與方式、合作內容...等。
- 三、計畫書中須詳述擬研發之目標技術，其國內外現況以及與標竿技術之比較，並提供智財背景調查和競爭力分析等。
 - 1.目標技術之國內發展現況、國際發展現況、與國際標竿技術之比較(需有明確規格與數據)。
 - 2.擬研發目標技術的創新與突破之處、進步性。藉由本項整合型計畫之投入，目標技術預期可提升程度(分年達成目標以及三年全程之最終目標)、與國際標竿技術之比較(需有明確規格與數據)。
 - 3.請說明技術應用情境、利基市場。計畫團隊技術推動需符合第一年概念驗證(Proof of Concept)達到 TRL 2 或 3；第二年技術須達到 TRL 4 或 5；第三年要完成落地部署與技術轉移，至少達到 TRL 6。
- 四、單一整合型計畫之申請經費以每年 1000 萬元為上限。基於資源有限，本項學門主題式計畫以不補助購置大型硬體設備或軟體為原則，請強化現有設備及平台之共用與協調支援，以使有限資源發揮最大效益。此外，鼓勵業界及校方投入資源，與國科會共同推動。
- 五、申請團隊之研究如需進行國際合作研發，必須填寫國際合作研究計畫資料表(申請書表 IM01-IM03)，說明所洽談合作計畫內容與共同研發之進行方式、智財歸屬情形。
- 六、有關計畫書表 CM03「三、研究計畫內容」之篇幅上限調整為至多 40 頁。超頁部分不予審查。

肆、計畫申請及審查考核

一、計畫申請

- (一) 申請機構、計畫主持人及共同主持人必須符合「國家科學及技術委員會補助專題研究計畫作業要點」相關規定。
- (二) 計畫主持人以申請 1 件本項學門主題式計畫為限。
計畫主持人除了申請本項學門主題式計畫之外，亦可再同時申請學門大批專題研究計畫，惟請留意計畫內容之差異性，並應將本項學門主題式計畫列為第一優先執行。
- (三) 計畫主持人及團隊成員以化工學門為主，並鼓勵跨領域合作，共同組成研究團隊。請於表 CM04「四、整合型研究計畫項目及重點說明」中說明總計畫主持人及各子計畫主持人之所屬學門、專長領域與分工合作規劃。
- (四) 除 CM05「五、申請補助經費」之外，請一併上傳 CM05-2，以便審查委員瞭解總計畫及各項子計畫之經費編列情形。
- (五) 研究主持費：本專案計畫之計畫主持人，本會得核給研究主持費最高每個月新台幣 2 萬元，計畫主持人於計畫執行期間僅得支領 1 份研究主持費，同一執行期限若同時執行 2 件以上，以最高額度計算，並得於不同計畫內採差額方式核給。
- (六) 申請程序：
 1. 請計畫主持人及團隊成員依「國家科學及技術委員會補助專題研究計畫作業要點」及國家科學及技術委員會專題研究計畫申請書格式，研提計畫申請書(請於國科會網站(<https://www.nstc.gov.tw/>)登入「學術研發服務網」，完成線上申請作業)。計畫申請人之任職機構應於國科會規定之申請截止日期前函送達國科會提出申請(請彙整造冊後專案函送)，逾期恕不受理。
 2. 線上申請時，計畫類別請選「專題類-隨到隨審計畫」項下之「一般研究計畫」，研究型別請選「整合型計畫」；計畫歸屬請選「工程處」，學門代碼請選「E91 學門主題式計畫」項下之「E9105 AI 大型語言模型推動化工數位轉型應用」。
 3. 請於計畫名稱前加註「學門主題式計畫：」，以便於識別為申請本項學門主題式計畫。

- (七) 經審查後未獲推薦之計畫申請案，不得轉入學門大批專題研究計畫中審查，亦不接受申覆。

二、計畫審查

- (一) 審查作業包括初審及複審，如有必要，將安排計畫主持人、共同主持人或合作企業出席審查會議，簡報計畫內容、針對審查意見進行回覆說明，或至申請機構實地訪查。
- (二) 除「國家科學及技術委員會補助專題研究計畫作業要點」所列審查重點、以及工程處「專題研究計畫審查意見表」所列審查項目之外，本專案計畫審查重點包含：
1. 對目標技術之國內外發展現況、標竿技術規格與技術缺口之掌握，擬開發之目標技術是否確為業界所需之關鍵技術，技術發展里程、查核點、評量指標、分年執行內容及階段性里程碑(Milestone)、最終效益之妥適性。
 2. 國內外標竿技術規格之掌握與比較，研發成果超越標竿技術規格之可行性。
 3. 研發成果落實於產業應用之可行性，對國內產業之具體助益等是否明確。
 4. 計畫團隊近五年在學術面及產業應用面之成果；若曾執行過前期智慧製造專案計畫或其他專案計畫，其執行成效如何；與過往研究成果之差異性與進步性；是否符合跨領域合作之精神，是否涵蓋 AI 及所需相關專長之學者。
 5. 合作企業之代表性、參與本專案計畫之實質投入程度、對於學界團隊研發成果之技術承接與開展能力。
 6. 計畫所涵蓋之研究主軸越多、整合性越高，愈能展現本計畫推動智慧化與 AI 應用於產業的整體效益與擴散潛力，為審查評分之加分重點。

三、計畫考核

- (一) 國科會每年辦理期中考評及期末考評，考評結果將做為是否核給下一年度計畫之參考依據。此外，國科會得依據審查結果，調整計畫內容及經費(含刪除或調整計畫共同主持人、刪減經費等)或提前終止計畫。
- (二) 期中考評與期末考評之重點包含：計畫執行進度與成果、研究議題及應用情境之重要性、系統整合與應用之成熟度、研發技術相較國內外標竿

技術之進步性、研發成果落實產業應用或社會民生應用之可行性、實際場域應用之規劃及實測情形、合作企業之實質參與程度...等。

- (三) 請依國科會通知，繳交計畫執行進度與成果，參加計畫審查會議、計畫觀摩、技術媒合、成果展示等相關活動，配合辦理實地訪視等。
- (四) 依「國家科學及技術委員會補助專題研究計畫作業要點」，於期中各年計畫執行期滿前 2 個月至國科會網站線上繳交進度報告，全程計畫執行期滿後 3 個月內至國科會網站線上繳交研究成果報告以及辦理經費結報。
- (五) 每季或不定期(依國科會通知)繳交執行進度或績效指標達成情形等資料。