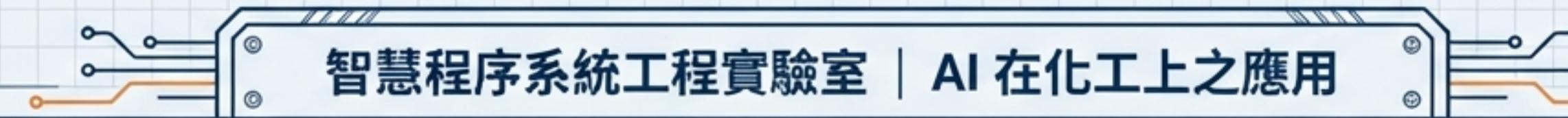
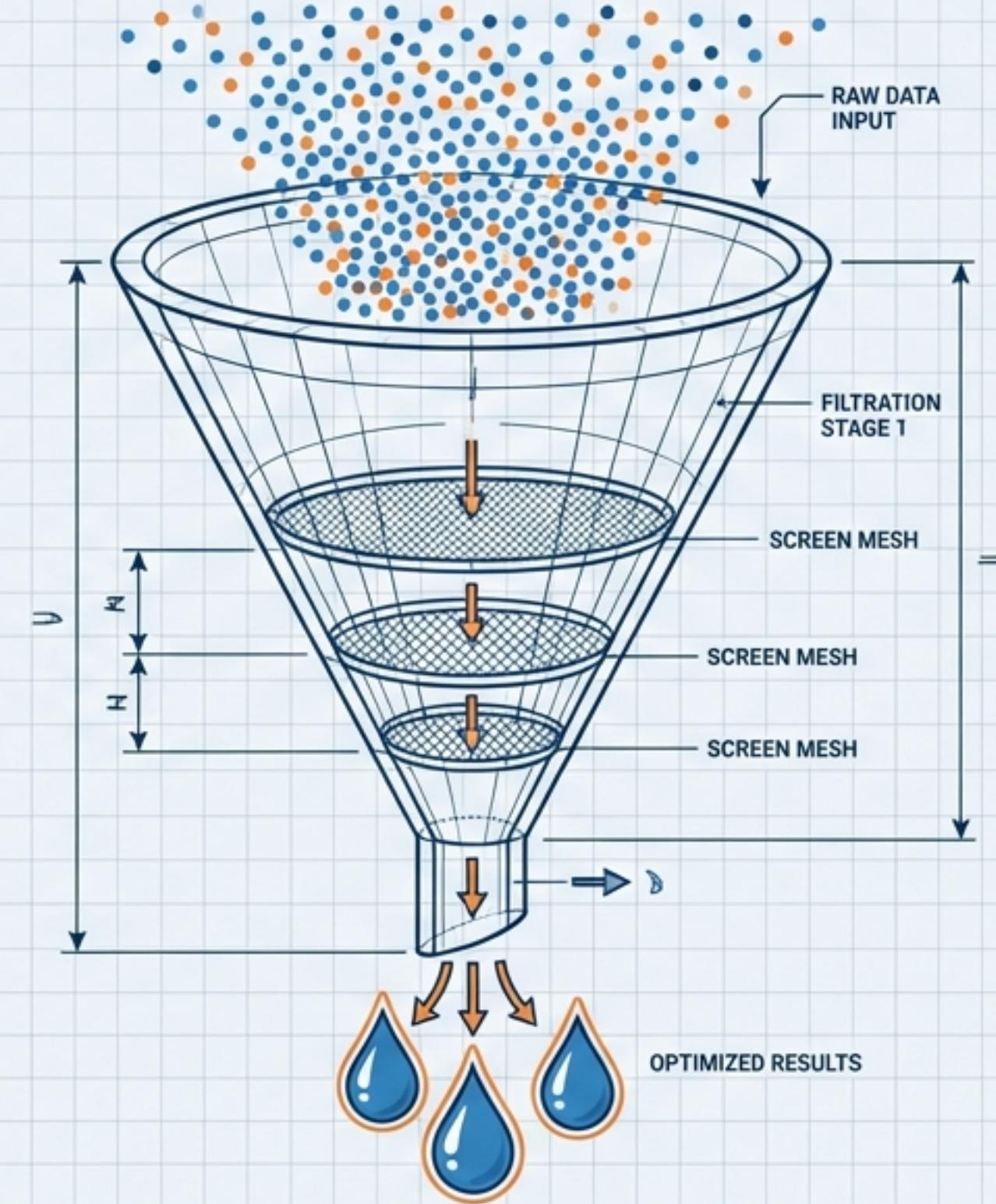


Unit 09

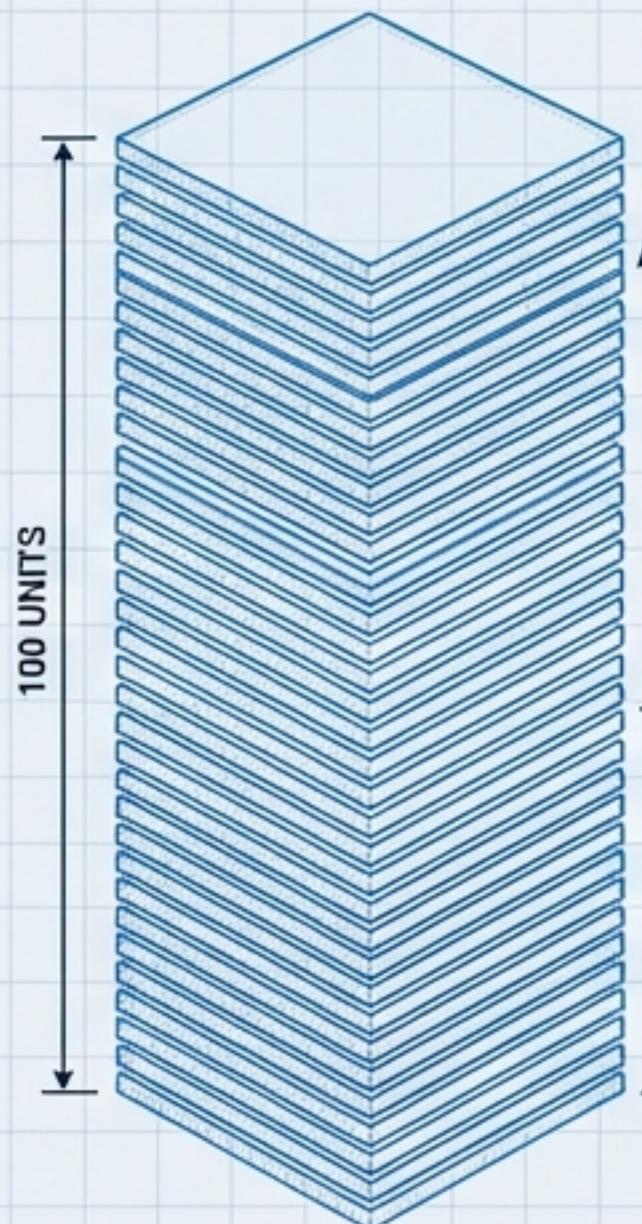
溶劑篩選案例研究 (Solvent Screening Case Study)

結合 AI 與化學工程的系統化決策流程



挑戰：如何在百種候選中找到最佳平衡？

INPUT SPECIFICATIONS



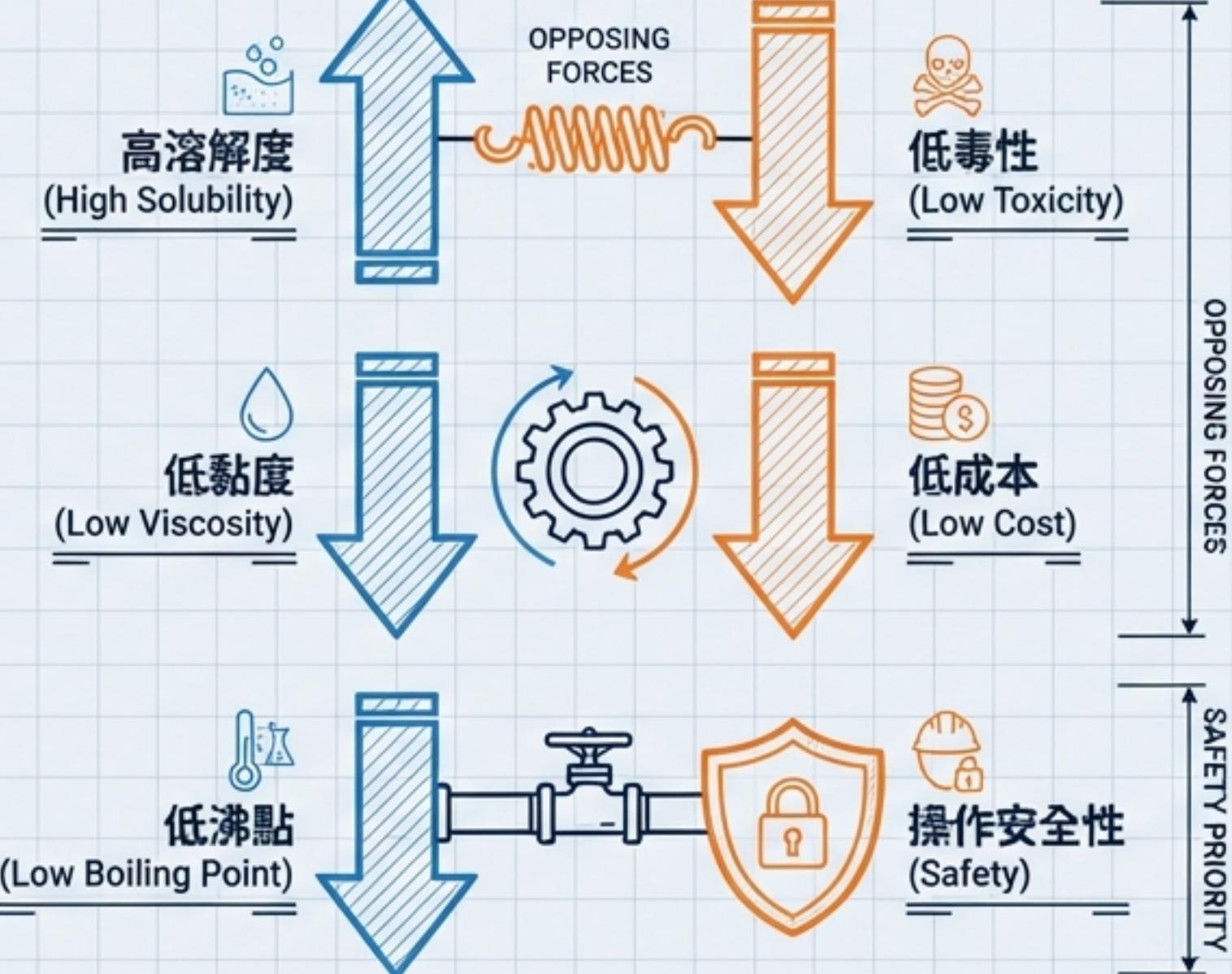
輸入：100 種候選溶劑
(Candidate Solvents)

VARIABLE LIST

變數：10 個物化性質

- Solubility
- Viscosity
- Toxicity
- Cost
- ...

TARGET CONSTRAINTS



目標：篩選出 Top 5 最佳候選溶劑供實驗驗證。

數據基礎：特徵工程與複合指標定義



Standardization

數據標準化 (Z-score)：消除量綱差異（如沸點 200°C vs 黏度 0.5 cP）。

$$X_{\text{scaled}} = \frac{X - \mu}{\sigma}$$

Engineering Indices (The Secret Sauce)

性能指數 (PI)

$$\left[\frac{\text{Solubility}}{\text{Viscosity} \times \text{Toxicity}} \right]$$

目的：尋找高溶解、低黏、低毒的平衡。

經濟指數 (EI)

$$\left[\frac{\text{Solubility}}{\text{Cost}} \right]$$

目的：單位成本下的溶解能力。

安全指數 (SI)

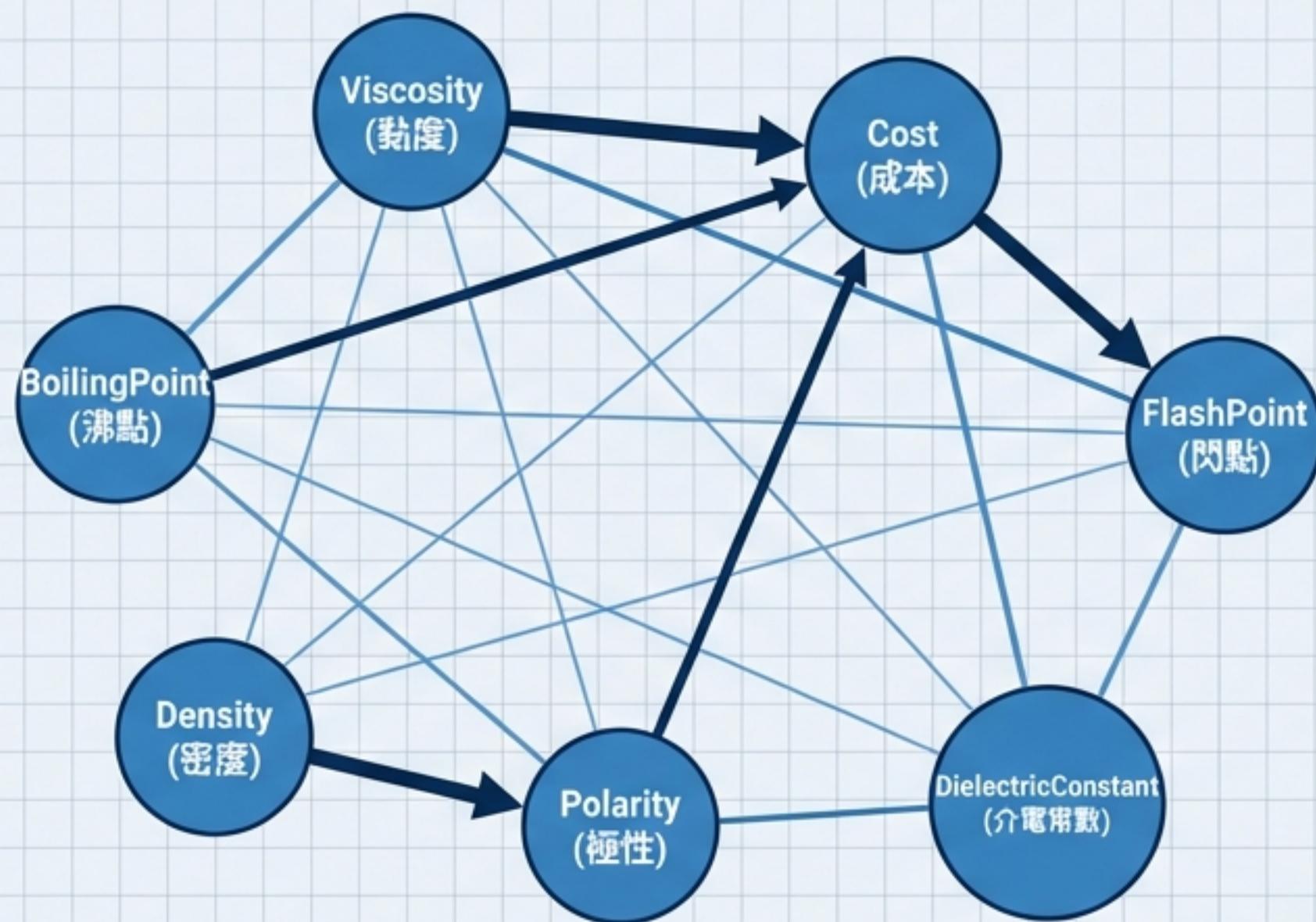
$$\left[\frac{\text{FlashPoint}}{\text{Toxicity}} \right]$$

目的：高閃點且低毒性。



探索性分析：數據揭示的物理關聯

物理關聯網絡 (Physical Correlation Network)

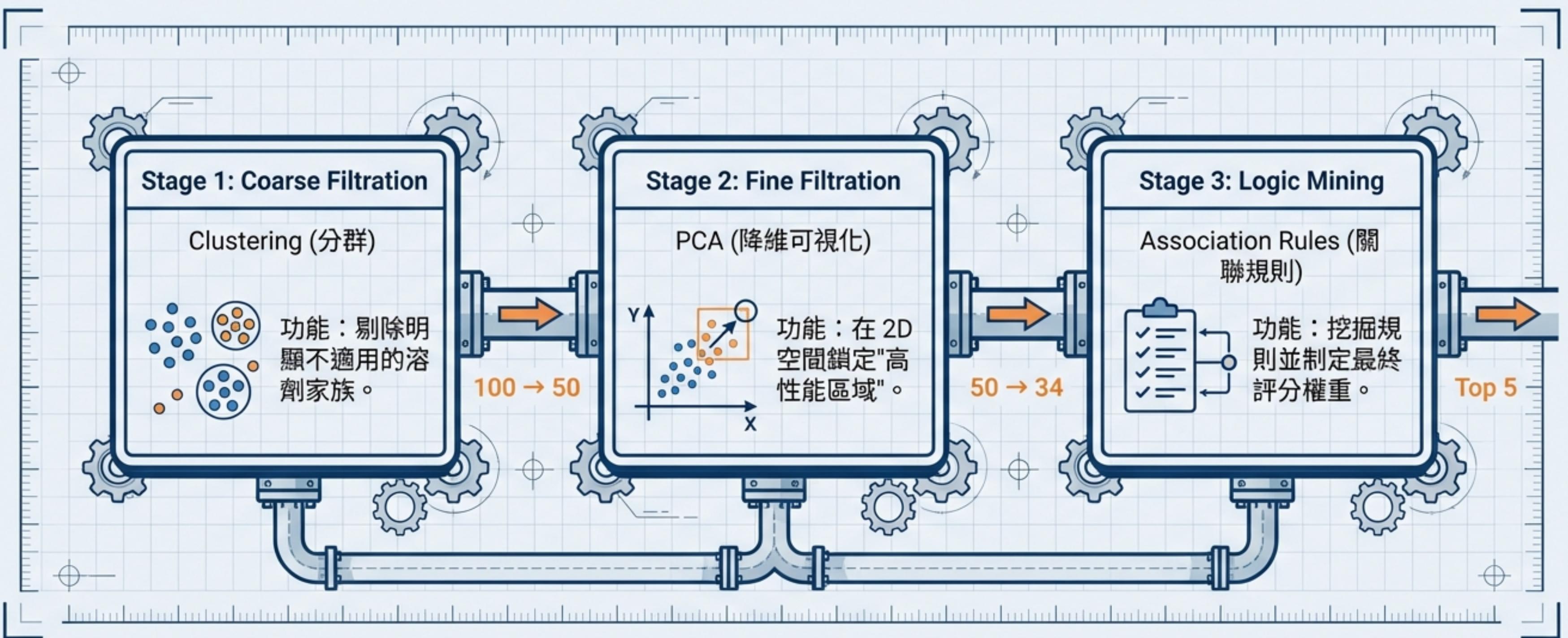


Key Insights (關鍵見解)

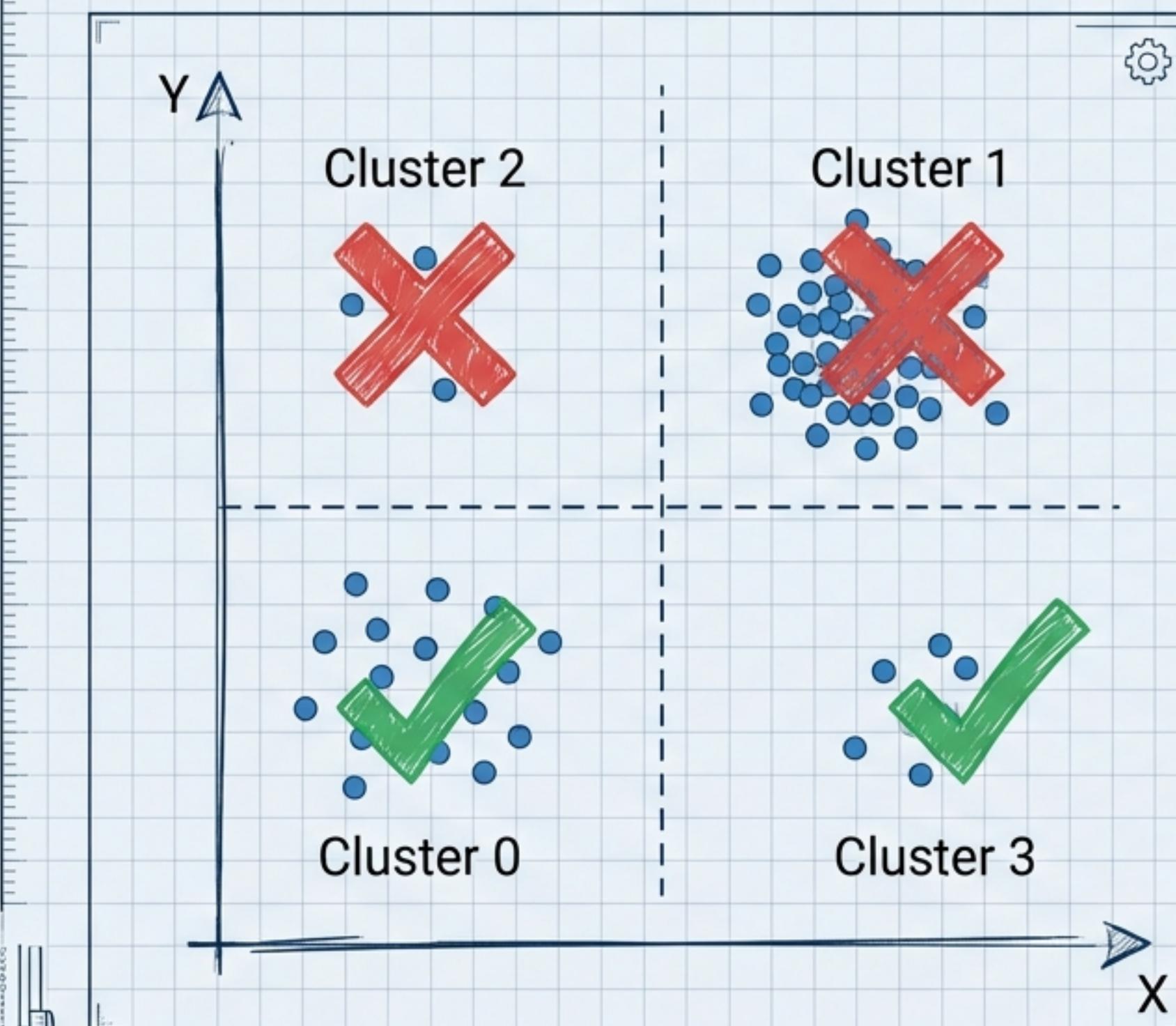
- Cost Drivers (成本驅動因素):**
 - 黏度與成本高度正相關 ($r=0.864$)。
 - 沸點與成本高度正相關 ($r=0.804$)。
 - 結論：高黏度、高沸點的'重質溶劑'通常較昂貴。
- The 'Heavy' Group (重質溶劑組):**
 - 沸點 \leftrightarrow 黏度 \leftrightarrow 閃點 形成連動體系。
- Polarity System (極性體系):**
 - 密度 \leftrightarrow 極性 \leftrightarrow 介電常數 高度相關。

Summary: 發現 12 組強相關關係，驗證了數據的物理合理性，並指出降維分析 (PCA) 的必要性。

解決方案：多階段智慧過濾漏斗 (Intelligent Filtration System)



階段 1：分群篩選 (Clustering) — 剔除不良家族



Method: K-Means (K=4), Silhouette Score 0.356

Rejection Logic (剔除)

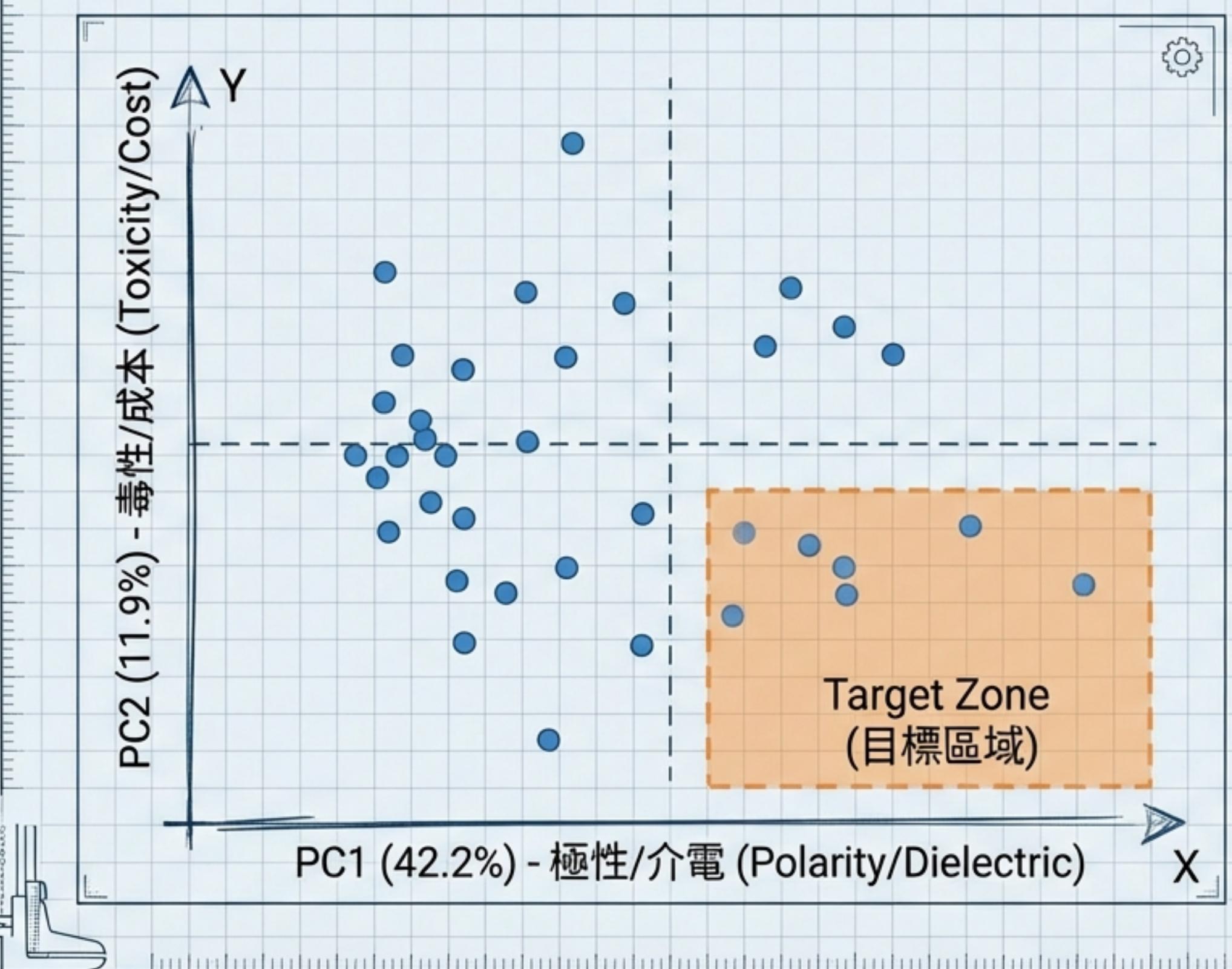
- 排除 Cluster 1: 高黏度 (8.37 cP)、高成本 (\$9.25)、高沸點 (179°C)。
理由：回收困難，操作性差。
- 排除 Cluster 2: 極高極性 (Polarity 8.14)。
理由：與水互溶性過高，不利萃取。

Selection Logic (保留)

- 保留 Cluster 0 & 3: 包含低黏度、適中沸點與低毒性的溶劑。

Outcome: 篩選效率 50% (100 → 50)。

階段 2：PCA 降維 — 鎖定“黃金區域”



Selection Criteria (篩選標準):

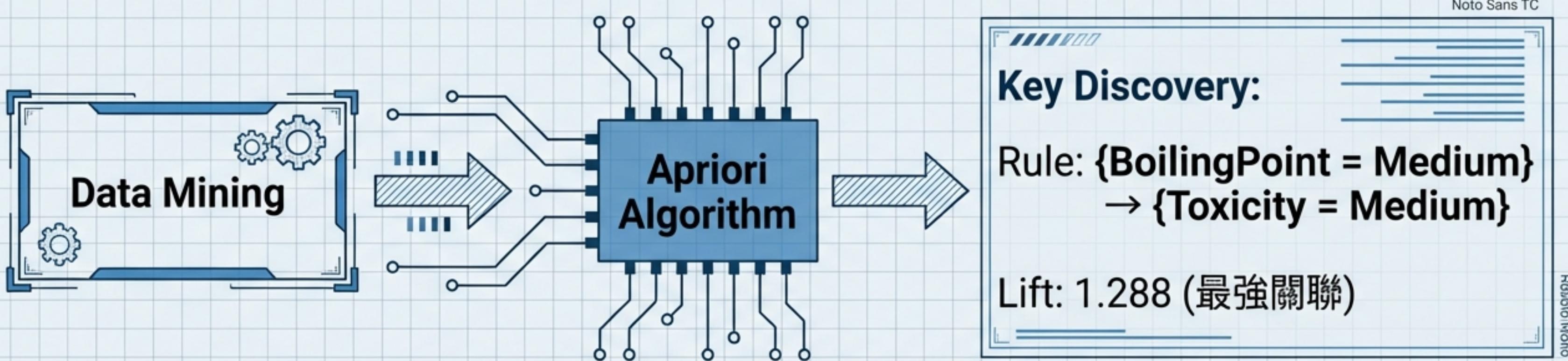
- High Performance Index ($PI > 25$)
- Low Toxicity (≤ 5)

Outcome:

進一步移除 16 種邊緣溶劑
($50 \rightarrow 34$)。

利用視覺化直觀識別兼顧性能與安
全的候選者。

階段 3：關聯規則 (Association Rules) – 挖掘決策邏輯



Insight: “中等”是關鍵。追求極端物理性質往往帶來副作用，中等沸點 (80-120°C) 能在回收效率與安全性取得平衡。

Composite Score Formula:

40% 性能指數 (PI) [Priority] + 30% 經濟指數 (EI) [Cost] + 30% 安全指數 (SI) [Risk]

最終結果：Top 5 候選溶劑規格表

Noto Sans TC

Rank	ID	Score	Solubility	Cost	Toxicity	Comment
1	S064	0.68	77.74	\$1.84	Level 2	綜合冠軍
2	S069	0.57	85.79	\$1.65	Level 4	<p>Winner Profile (S064):</p> <ul style="list-style-type: none">• 毒性級別：2 (極低)• 成本：\$1.84/kg (極具競爭力)• 特點：各項指標無明顯短板，最佳平衡解。
3	S058	0.57	78.09	\$2.86	Level 2	
4	S067	0.47	89.01	\$4.50	Level 4	
5	S052	0.47	100.28	\$2.11	Level 3	

深度分析：為何 S064 優於性能最強的 S067？



Noto Sans TC

The Balanced Choice: S064

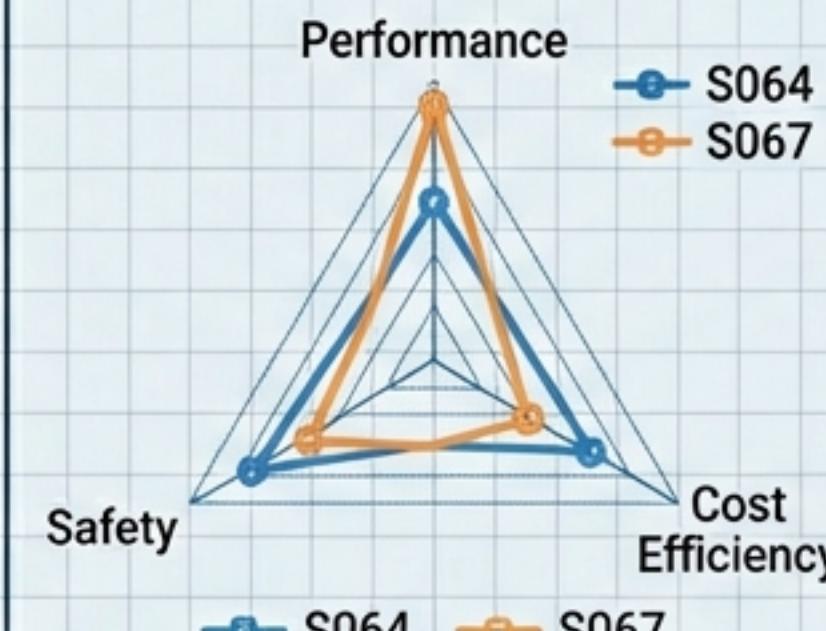
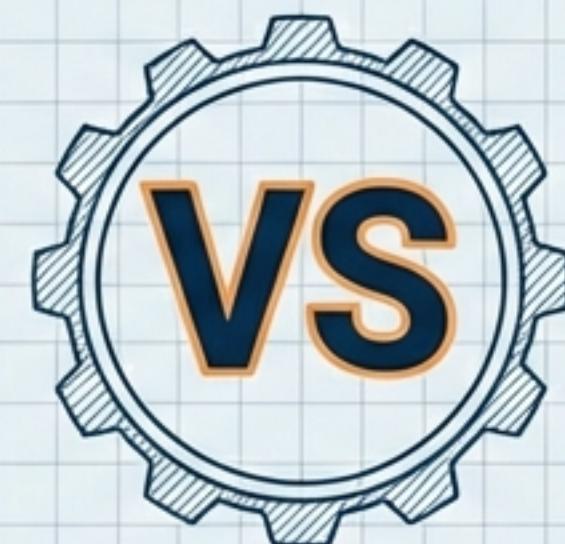
Composite Score: 0.68

Cost: \$1.84 / kg

Safety: High (Toxicity 2)

→ 評論：適合大規模工業應用，風險低，效益高。

Head-to-Head



The High Performer: S067

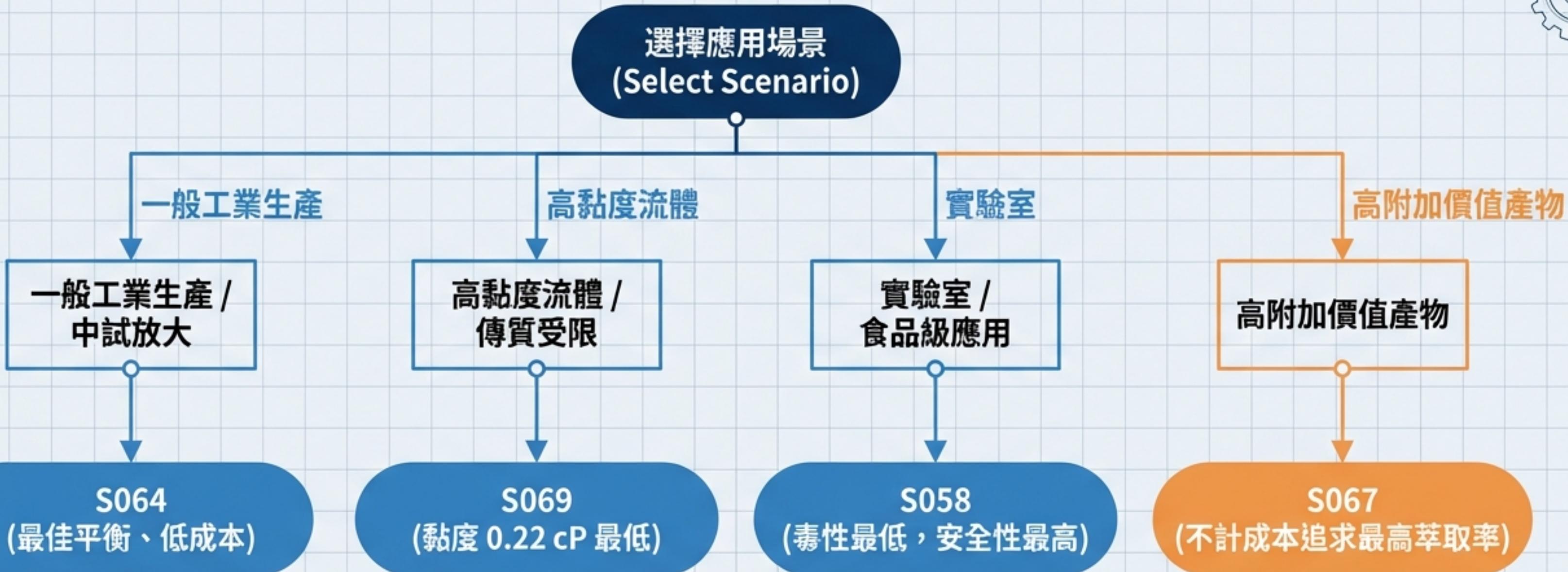
Composite Score: 0.47

Cost: \$4.50 / kg (貴 2.4 倍!)

Safety: Low (Toxicity 4)

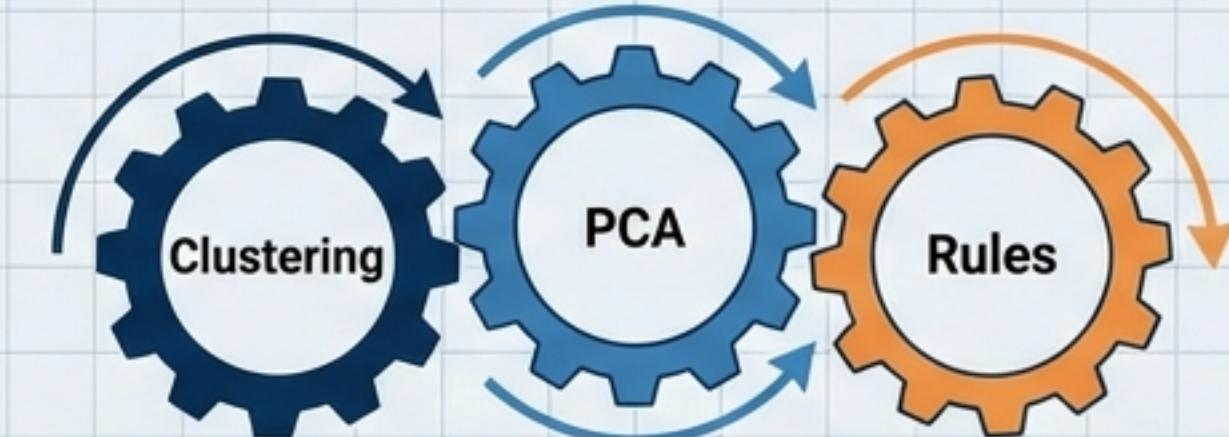
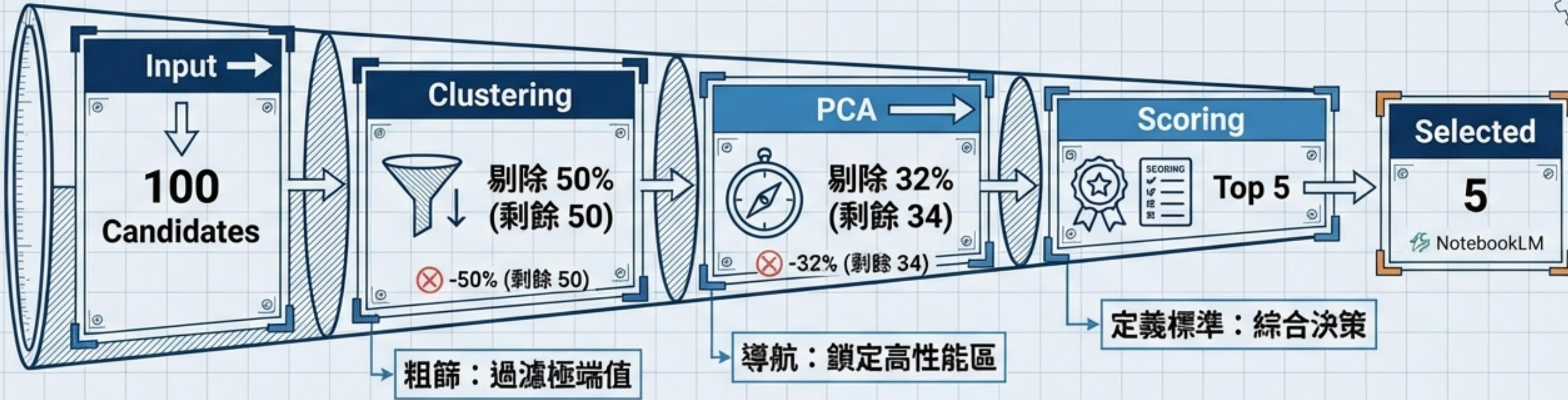
→ 評論：雖然 PI 指數最高 (111.26)，但成本與安全性拉低了總分。

決策建議：基於應用場景的操作指引



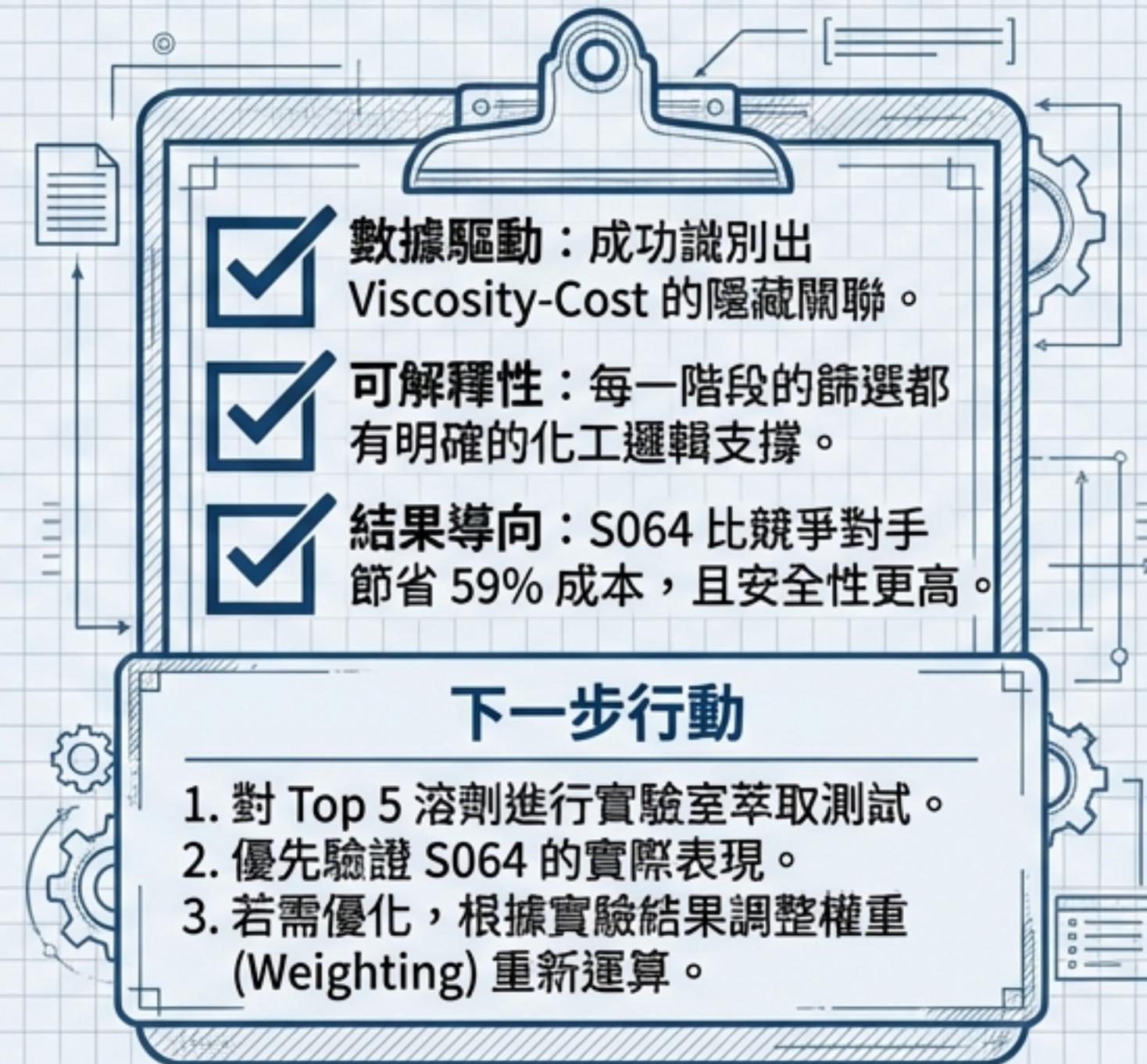
沒有完美的溶劑，只有最適合製程約束的溶劑。

流程回顧：95% 的篩選效率



三者結合實現了單一方法無法達到的精準度。

總結與下一步行動



“AI 提供地圖 (Map)，工程師掌握指南針 (Compass)。”