

南亞公司化工二部

②

## BPA再結晶回收優化報告

報告人: 薛勝宏

2022年7月18日

# 執行摘要

- 一、BPA4製程以結晶方式分離BPA與不純物，因不純物結晶母液中仍溶存有部分BPA (930公斤/小時)，續送入再結晶區，透過再次提濃析出BPA-酚共晶體進行回收，而富含不純物廢液則送高溫氧化器處理。
  - (一)BPA回收量原設計408公斤/小時，現況雖已提高到616公斤/小時，但廢液中仍有314公斤/小時送焚化處理，需持續改善。
  - (二)製程調整及取樣分析時間延遲長達8小時，無法有效掌握BPA-酚共晶體中不純物含量(影響產品品質)及BPA回收狀況。
- 二、建立兩個AI品質預測模型，分別預測【不純物濃度】及【BPA濃度】，在符合不純物濃度 $\leq 3\%$ 管制標準內，找到BPA回收量最大的操作條件。
  - (一)因現場品質數據209筆偏少，利用Aspen Plus模擬產出數據1,155筆，併同導入AI建模，提高模型精準度。
  - (二)改善後，BPA回收量由616 $\nearrow$ 654公斤/小時，廢液中BPA(送焚化)由314 $\searrow$ 276公斤/小時，減少38公斤/小時，減幅12.1%。  
BPA回收增加333噸/年，年效益15,354千元，模型2021年11月上線。
- 三、橫向展開BPA1/2/3及寧波BPA，全廠合計年效益52,737千元。

# 報告內容

一、製程說明

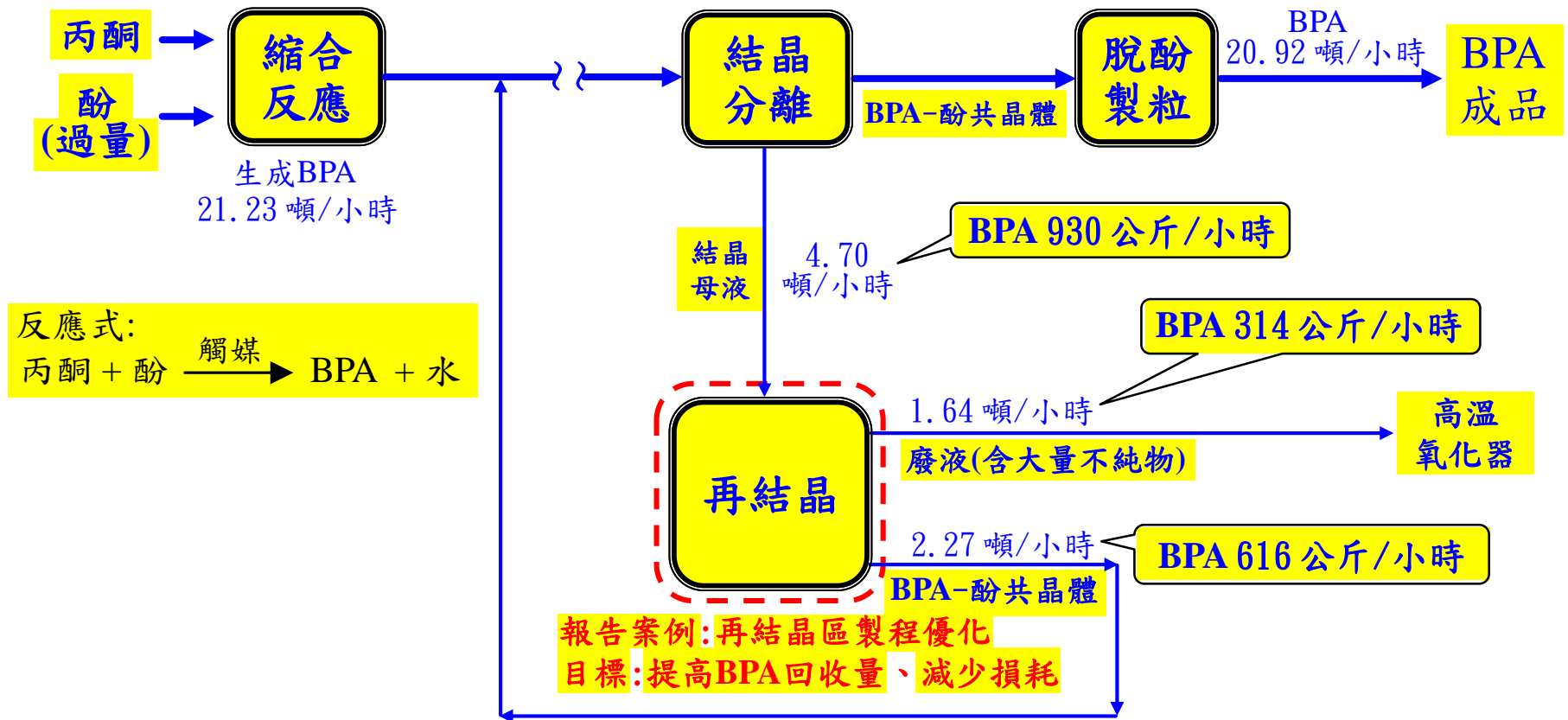
二、改善動機

三、AI模型開發歷程

四、全廠AI執行成果

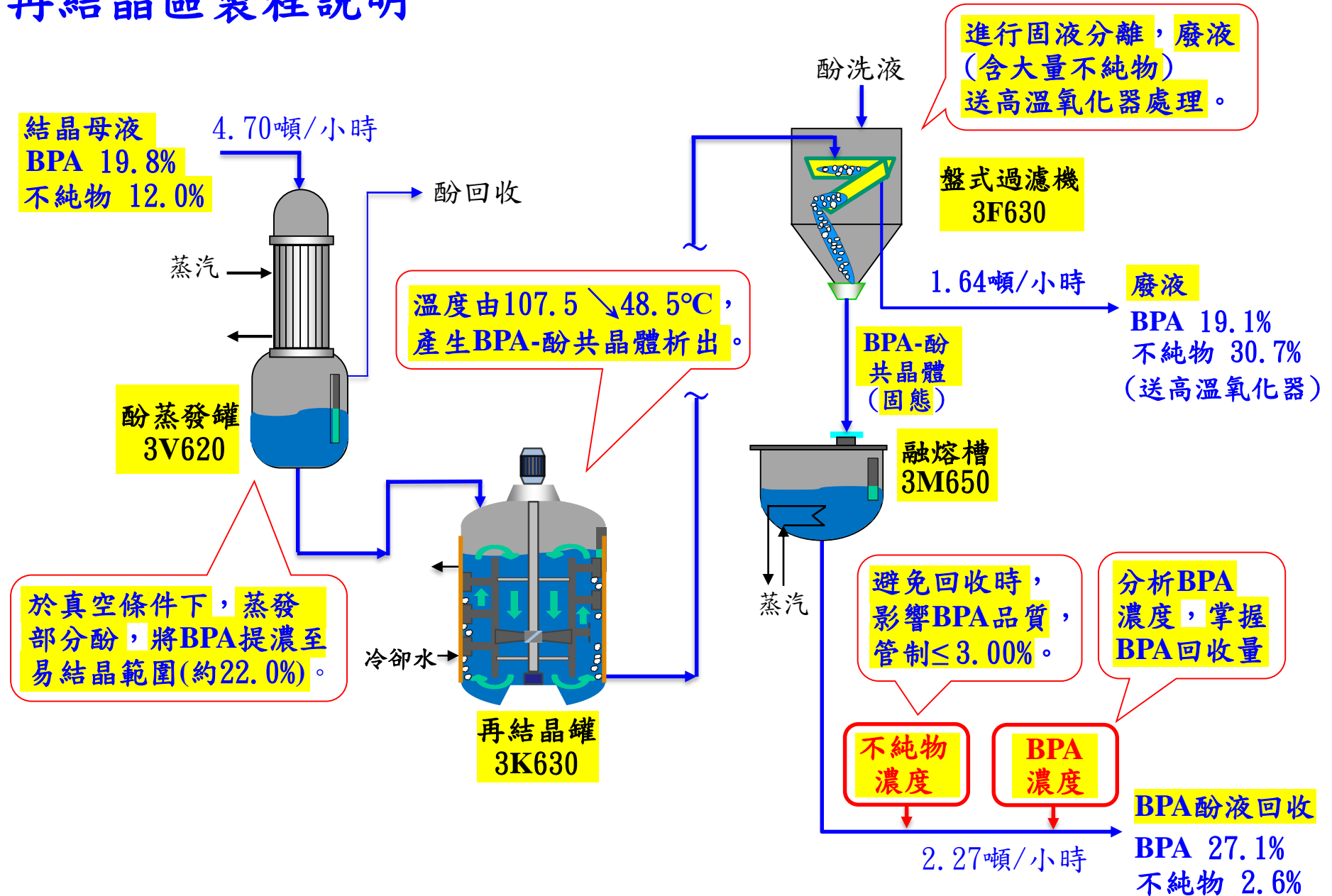
五、後續推動工作

# 一、BPA製程說明

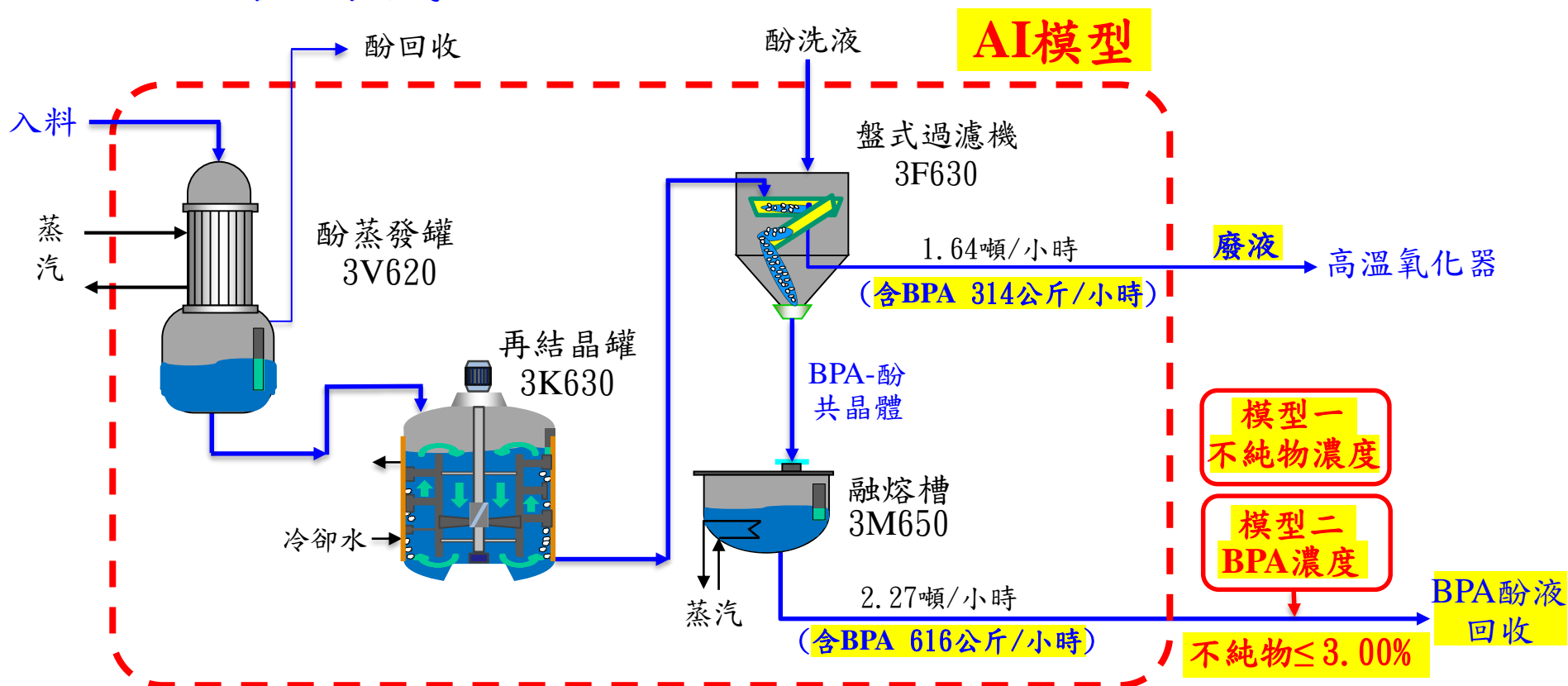


1. BPA製程係以丙酮及酚為原料，經反應生成BPA及水，伴隨產生少量不純物。
2. 反應出口的BPA溶液，進入結晶區以結晶方式得到BPA-酚共晶體，經固液分離後，送至後段脫酚製粒得到BPA成品。
3. 結晶母液中含有部分BPA(930公斤/小時)，續送入再結晶區，藉由再次結晶分離進行回收(616公斤/小時)，而廢液中則仍有314公斤/小時送至高溫氧化器處理。

# 再結晶區製程說明



## 二、改善動機



1. 再結晶區 **BPA回收量** 原設計408公斤/小時，現況雖已提升到616公斤/小時，但廢液中仍有 **BPA 314公斤/小時** 送高溫氧化器處理，需持續努力降量及回收。
2. 再結晶製程調整後滯留時間5小時，加上取樣分析3小時，時間延遲共8小時，無法有效掌握 **BPA-酚共晶體中不純物含量**、及 **BPA回收狀況**。
3. 建置兩個AI模型，分別預測【不純物濃度】及【BPA濃度】，透過操作條件指引程式，在不純物濃度 ≤ 3.00% 管制標準內，找出 **BPA回收量 (【BPA濃度】x 流量)** 最大的操作條件。

# 三、AI模型開發歷程

## 執行重點

數據收集  
與前處理

現場實際品質數據209筆偏少，利用Aspen Plus製程模擬產出1,155筆品質數據，合計1,364筆。

建立品質  
預測模型

模型一：【不純物濃度】預測模型。  
模型二：【BPA濃度】預測模型。

開發操作條件  
指引程式

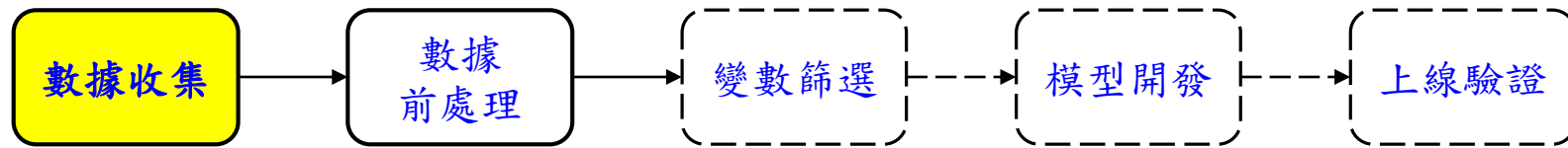
藉由電腦程式計算，找出在符合【不純物濃度】 $\leq 3.00\%$  管制標準下，BPA回收量（【BPA濃度】 $\times$  流量）最大的操作條件。

模型上線  
應用

藉著即時演算，將【不純物濃度】、【BPA濃度】及操作條件建議值呈現於DCS畫面，供盤控人員調整參考。

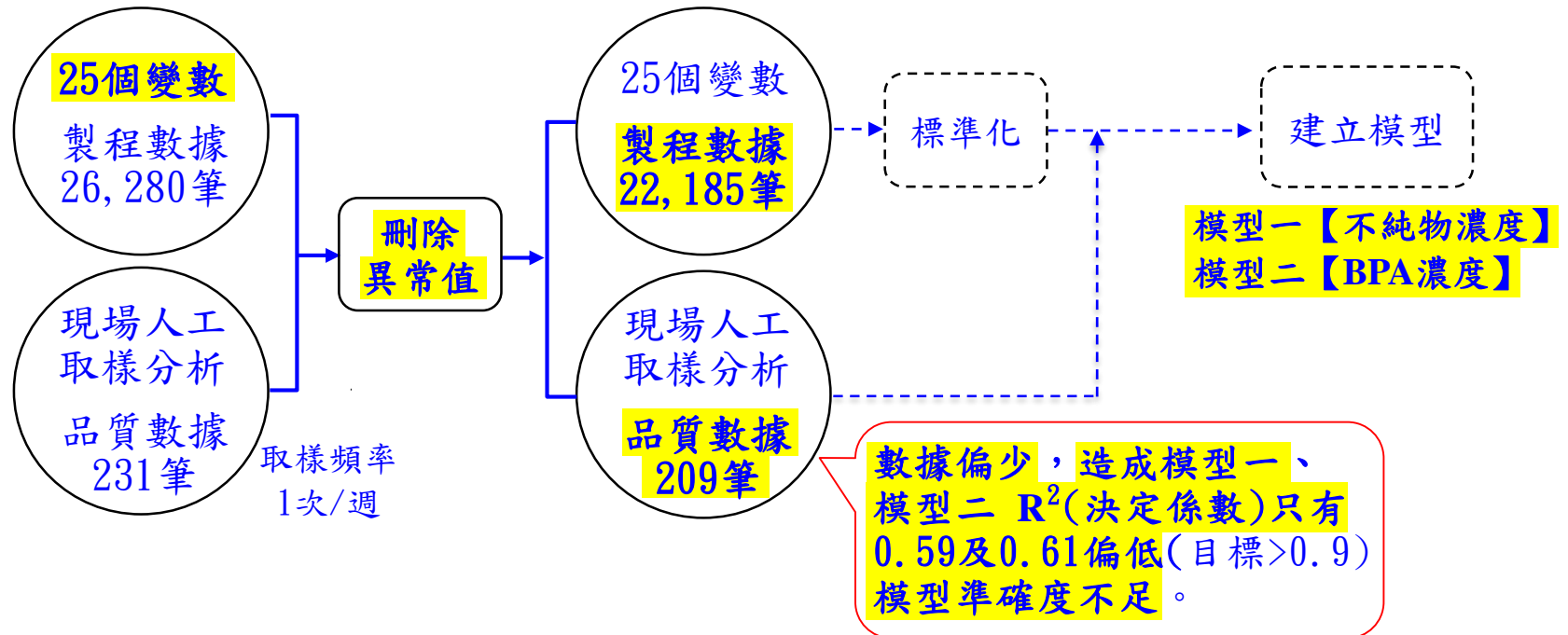
# (一)數據收集與前處理

## 1. 數據收集



### (1) 現場實際數據

2017年1月~2021年6月



再結晶製程變數共25個，收集2017/1~2021/6製程及品質數據，經刪除異常值及開停車期間數據，製程數據計22,185筆，品質數據計209筆。

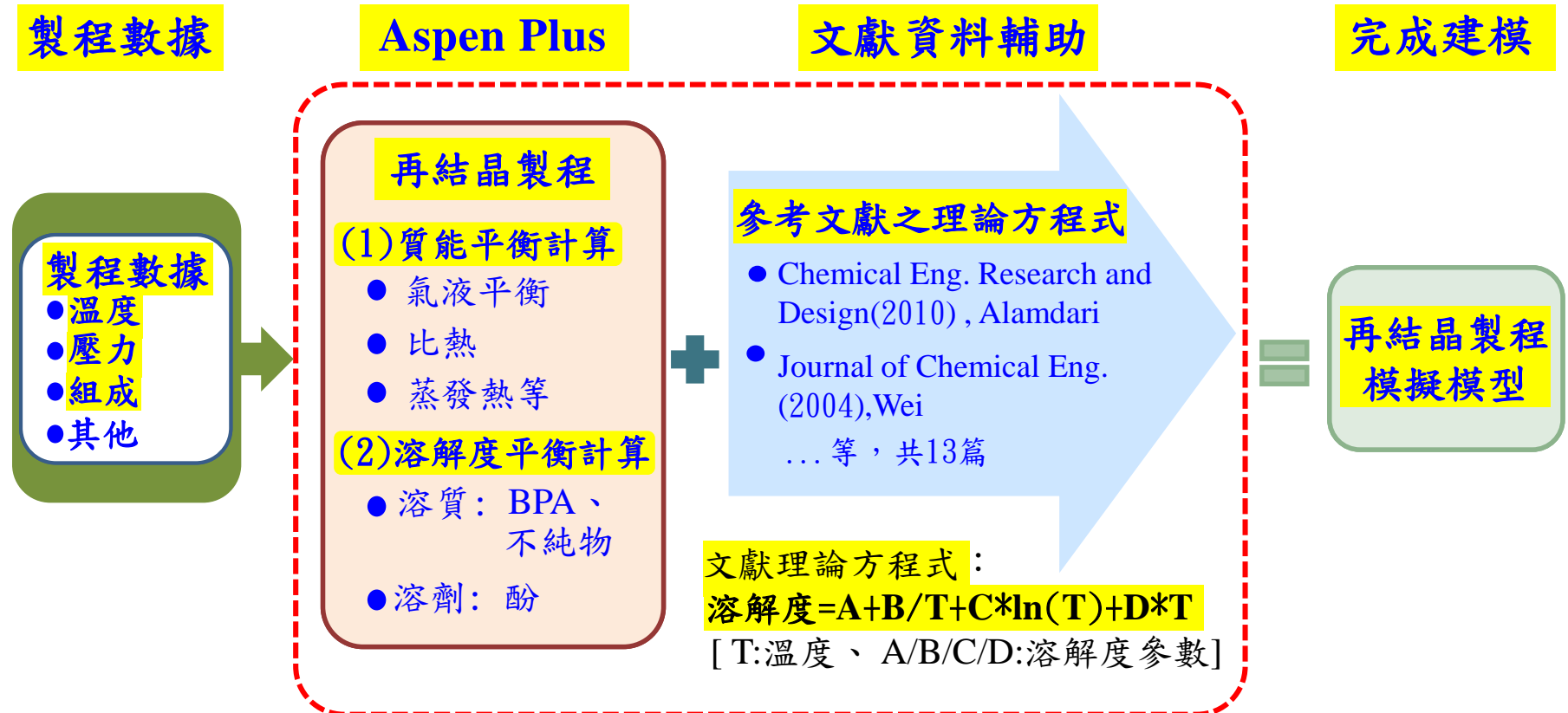


## (2)運用製程模擬模型產生品質數據

### a. 製程模擬模型建立

利用 Aspen Plus 軟體建立再結晶區製程模擬模型，可在既有製程操作條件下，產出具化工理論基礎的品質數據，解決現場實際品質數據不足的問題。

### 模型開發流程



## b. 製程模擬模型品質數據產出

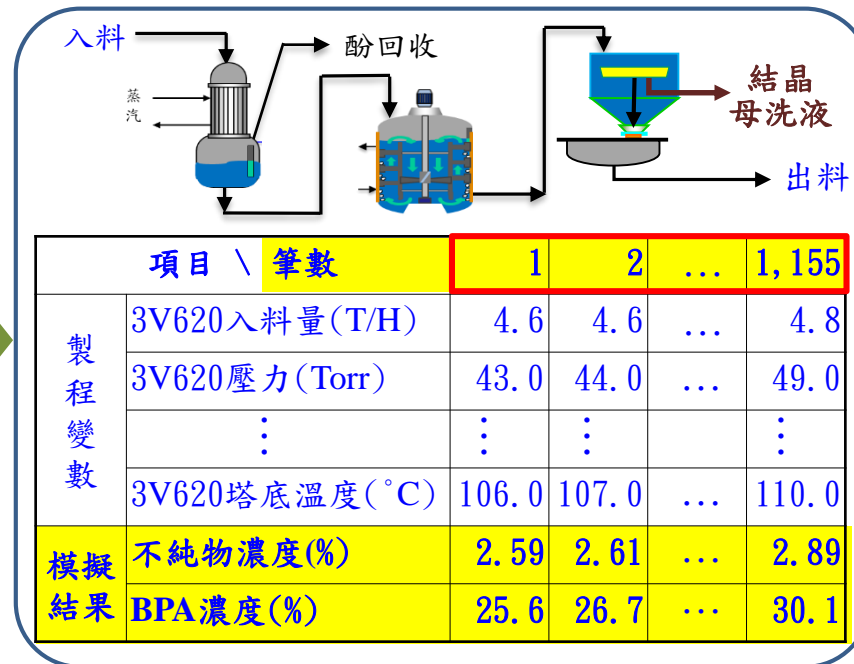
### Step1:

從過去22,185筆製程  
操作條件組合中，挑選  
1,155筆具差異性且  
無品質數據的操作條件

| 筆數    | 蒸發罐<br>3V620壓力<br>(Torr) | ... | 結晶罐<br>3K630溫度<br>(°C) |
|-------|--------------------------|-----|------------------------|
| 1     | 43.0                     | ... | 45.0                   |
| 2     | 43.5                     | ... | 45.5                   |
| 3     | 43.5                     | ... | 46.0                   |
| ⋮     | ⋮                        |     | ⋮                      |
| 1,154 | 48.5                     | ... | 53.0                   |
| 1,155 | 49.0                     | ... | 55.0                   |

### Step2:

依挑選的操作條件，輸入  
再結晶製程模擬模型計算  
取得品質數據。



### Step3:

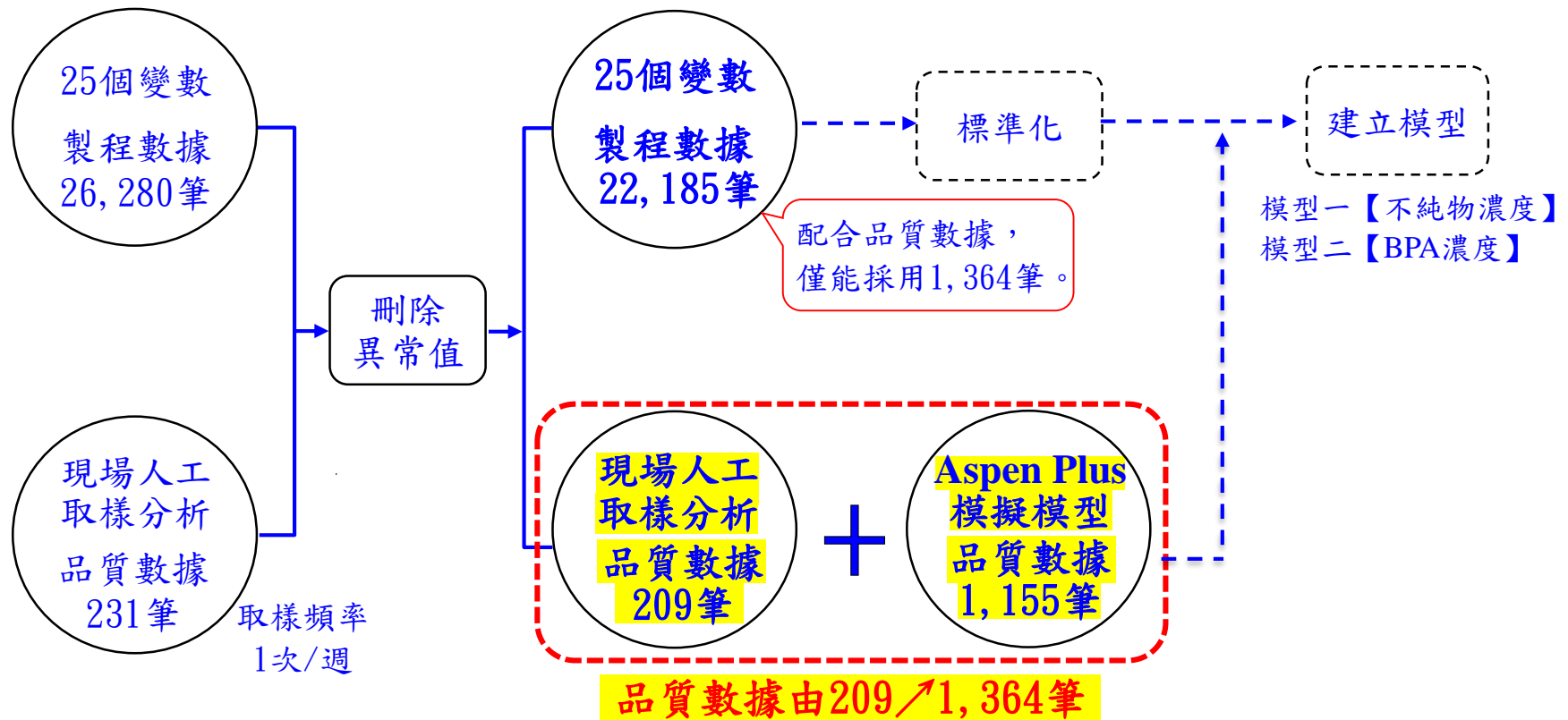
產出1,155筆  
不純物及BPA濃度  
品質模擬數據。



利用Aspen Plus軟體已建置的再結晶製程模型，將製程變數依不同操作條件組合的數據輸入，產出品質模擬數據1,155筆。

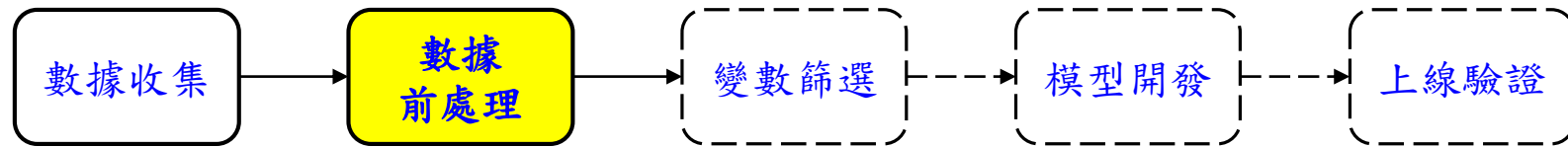
### c. 數據收集(改善後)：

實際 + 模擬 品質數據進行AI建模



實際取樣分析數據209筆，加上Aspen Plus軟體產生1,155筆，品質數據共計1,364筆、以及製程條件數據22,185筆，將80%數據作為建模使用，20%數據進行模型測試。

## 2. 數據前處理:標準化



原始數據共1,364筆  
(單位、數值範圍不同)

| 筆數    | 蒸發罐<br>3V620壓力<br>(Torr) | ... | 結晶罐<br>3K630溫度<br>(°C) |
|-------|--------------------------|-----|------------------------|
| 1     | 43.0                     | ... | 45.0                   |
| 2     | 43.5                     | ... | 45.5                   |
| 3     | 43.5                     | ... | 46.0                   |
| ⋮     | ⋮                        |     | ⋮                      |
| 1,363 | 48.5                     | ... | 53.0                   |
| 1,364 | 49.0                     | ... | 55.0                   |

標準化  
轉換



極小極大手法

$$X^* = \frac{X - \min}{\max - \min}$$

X: 製程變數  
max: 最大值  
min: 最小值

數據標準化共1,364筆  
(無單位，且數值皆在0到1之間)

| 筆數    | 蒸發罐<br>3V620壓力 | ... | 結晶罐<br>3K630溫度 |
|-------|----------------|-----|----------------|
| 1     | 0.000          | ... | 0.000          |
| 2     | 0.083          | ... | 0.050          |
| 3     | 0.083          | ... | 0.100          |
| ⋮     | ⋮              |     | ⋮              |
| 1,363 | 0.917          | ... | 0.800          |
| 1,364 | 1.000          | ... | 1.000          |

每個變數的單位、數值大小不同，使用極小極大手法(MinMax scaler)進行標準化轉換，將數據轉換在同一基準下(最大值為1，最小值為0)，可避免數值大小差異影響模型準確度。

## (二)建立品質預測AI模型

### 1. 變數篩選(以【模型一:不純物濃度】為例)



篩選前:  $Y(\text{不純物濃度}) = a_1X_1 + \dots + a_{13}X_{13} + a_{14}X_{14} + \dots + a_{25}X_{25} + b$

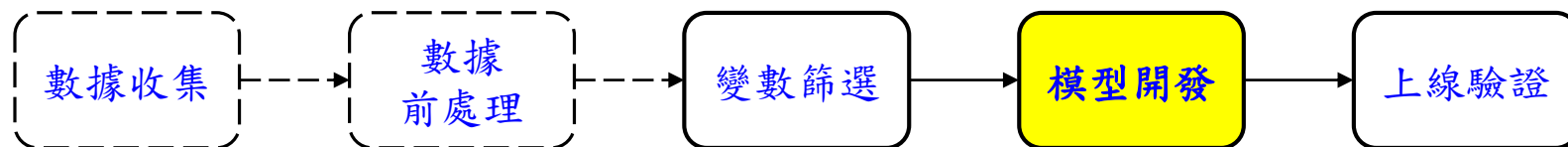
篩選後:  $Y(\text{不純物濃度}) = a_1X_1 + \dots + a_{13}X_{13} + a_{14}X_{14} + b$

| 排名 | 製程變數                       | 模型係數( $a_i$ ) | 代表變數對【不純物濃度】影響程度 |
|----|----------------------------|---------------|------------------|
| 1  | 再結晶罐3K630溫度(3TIC-6304)     | 7.175         | 正值: 與不純物濃度正相關    |
| 2  | 酚蒸發罐3V620入料流量(3FIC-6202)   | 6.512         | 負值: 與不純物濃度負相關    |
| 3  | 酚蒸發罐3V620塔底溫度(3TIC-6205)   | -6.003        | 絕對值大: 影響程度高      |
| ⋮  | ⋮                          | ⋮             | 絕對值小: 影響程度低      |
| 13 | 再結晶罐3K630液位(3LIC-6302)     | 1.022         |                  |
| 14 | 酚蒸發罐3V620液位(3LIC-6204)     | 0.941         |                  |
| 15 | 再結晶罐3K630攪拌機電流(3II-AG630)  | 0.000         |                  |
| ⋮  | ⋮                          | ⋮             |                  |
| 24 | 3V620塔頂冷凝液暫存槽溫度(3TI-6252)  | 0.000         |                  |
| 25 | 3V620塔頂冷凝液暫存槽液位(3LIC-6251) | 0.000         |                  |

將模型係數為0之變數剔除

- (1) 製程變數25個, 以Lasso演算法計算出每個變數的模型係數, 判斷變數對【不純物濃度】的影響程度, 將模型係數為0之變數剔除, 篩選出14個變數作為後續建模依據。
- (2) 【模型二:BPA濃度】預測模型以相同手法進行變數篩選, 最終篩選出13個變數。  
篩選後:  $Y(\text{BPA濃度}) = c_1X_1 + \dots + c_{12}X_{12} + c_{13}X_{13} + d$

## 2. 模型開發



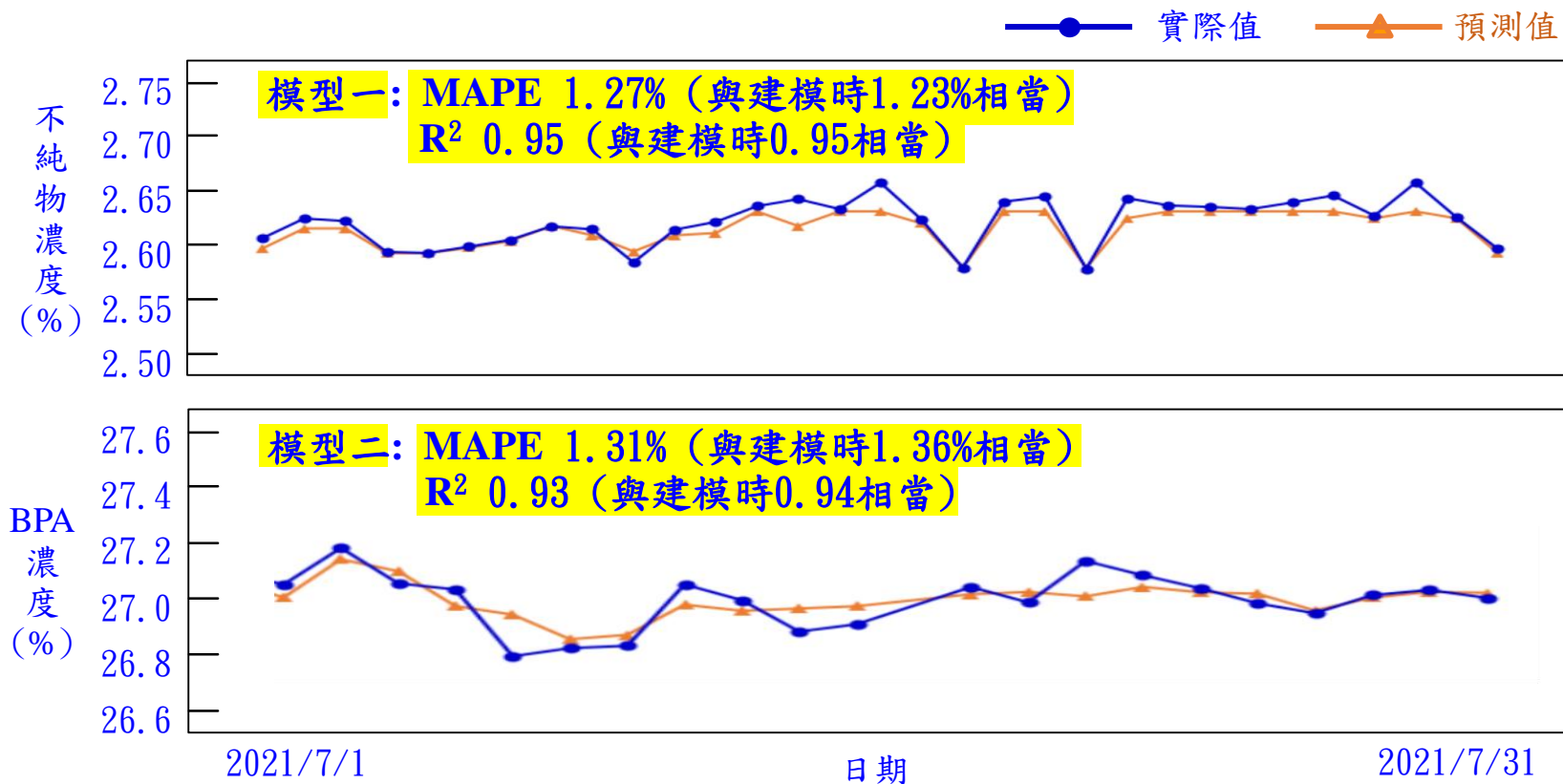
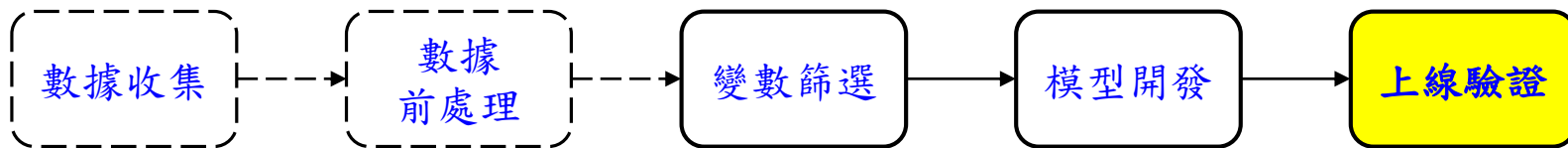
模型一：製程變數 (14個) → AI演算法 → 預測不純物濃度

模型二：製程變數 (13個) → AI演算法 → 預測BPA濃度

| 演算法          |                              | Lasso<br>(套索迴歸) | Ridge<br>(脊迴歸) | SVM<br>(支援向量機) | XGBoost<br>(極限梯度提升) |
|--------------|------------------------------|-----------------|----------------|----------------|---------------------|
| 模型類別         |                              | 線性              | 線性             | 線性             | 非線性                 |
| 模型一<br>不純物濃度 | <b>MAPE</b><br>平均絕對百分比誤差     | 1.71%           | 1.57%          | 1.83%          | 1.23%               |
|              | <b>R<sup>2</sup></b><br>決定係數 | 0.83            | 0.81           | 0.82           | 0.95                |
| 模型二<br>BPA濃度 | <b>MAPE</b><br>平均絕對百分比誤差     | 1.69%           | 1.60%          | 2.11%          | 1.36%               |
|              | <b>R<sup>2</sup></b><br>決定係數 | 0.85            | 0.80           | 0.79           | 0.94                |

以4種演算法進行建模評估，經測試XGBoost模型：MAPE分別為1.23%、1.36%最低，R<sup>2</sup>為0.95、0.94最高，故選其作為模型一【不純物濃度】及模型二【BPA濃度】的演算法。

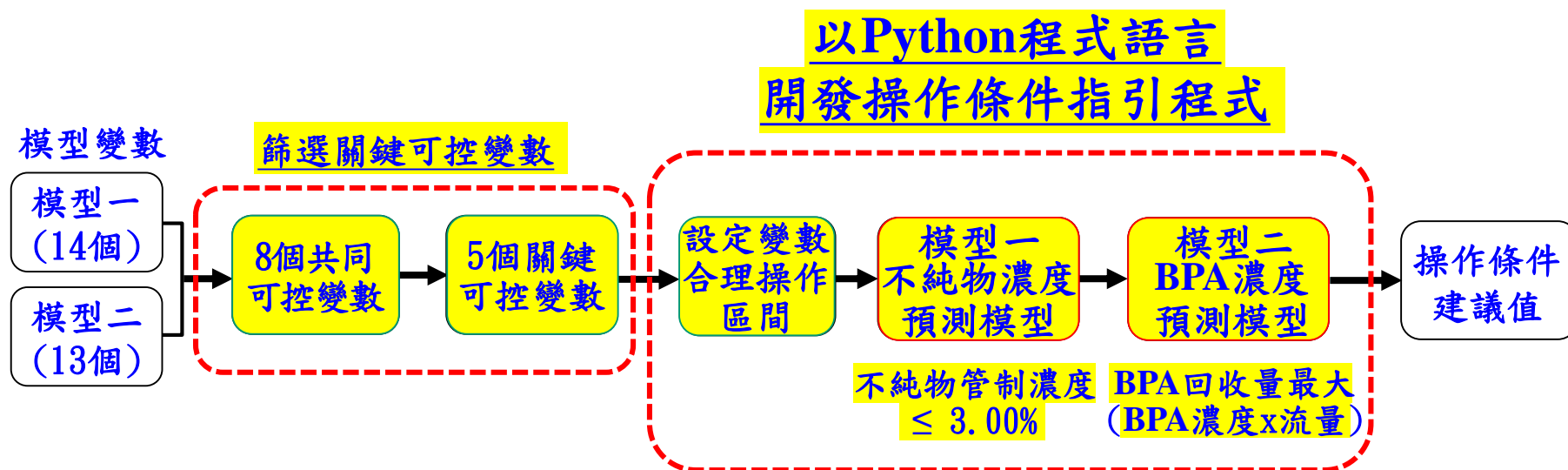
### 3. 上線驗證



以2021年7月的實際數據，進行模型上線驗證，MAPE為1.27%、1.31%， $R^2$ 為0.95、0.93，與建模時MAPE為1.23%、1.36%， $R^2$ 為0.95、0.94相當，代表兩個模型可分別預測【不純物濃度】及【BPA濃度】。

## (三)開發操作條件指引程式

### 1. 開發流程



- (1) 從模型一及模型二篩選出8個共同可控變數，再選出5個關鍵可控變數。
- (2) 以Python程式語言開發操作條件指引程式，設定關鍵可控變數的合理操作範圍，依各種操作條件組合，自動帶入【模型一】及【模型二】計算，在符合不純物濃度 $\leq 3.00\%$ 管制標準內，找出BPA回收量(BPA濃度 $\times$ 流量)最大的操作條件建議值。



## 2. 篩選關鍵可控變數

| 項目        | 變數重要性係數      |              | TAG編號  | 中文說明                    |
|-----------|--------------|--------------|--------|-------------------------|
|           | 模型一<br>不純物濃度 | 模型二<br>BPA濃度 |        |                         |
| 可控<br>變數  | 1            | 0.2081       | 0.1881 | 3FIC-6301 酚蒸發罐3V620出料流量 |
|           | 2            | 0.1744       | 0.1954 | 3FIC-6202 酚蒸發罐3V620入料流量 |
|           | 3            | 0.1709       | 0.1649 | 3TIC-6304 再結晶罐3K630溫度   |
|           | 4            | 0.1578       | 0.1512 | 3PIC-6203 酚蒸發罐3V620壓力   |
|           | 5            | 0.1520       | 0.1624 | 3TIC-6205 酚蒸發罐3V620塔底溫度 |
|           | 6            | 0.0908       | 0.0615 | 3LIC-6302 再結晶罐3K630液位   |
|           | 7            | 0.0541       | 0.0634 | 3LIC-6204 酚蒸發罐3V620液位   |
|           | 8            | 0.0450       | 0.0344 | 3FIC-6403 盤式過濾機廢液出料流量   |
| 不可控<br>變數 | 9            | 0.0345       | 0.0284 | 3TI-6312 3K630入料溫度      |
|           | ⋮            | ⋮            | ⋮      | ⋮                       |
|           | 13           | 0.0151       | 0.0135 | 3PI-6403 3V640壓力        |
|           | 14           | 0.062        | —      | 3II-F630 3F630攪拌機電流     |

出入料影響產量  
不列入選擇

篩選5個作為  
模型一、模型二  
關鍵可控變數

出料影響產量  
不列入選擇

模型一、模型二之模型變數分別有14及13個，其中共同可控變數有8個，以XGBoost演算法的變數重要性係數排序，檢視模型變數重要性，其中入料及出料流量因會影響產量，予以剔除，檢討後選擇項次3-7共5個，作為關鍵可控變數上線調整。

### 3. 設定合理操作區間及找出最佳條件

| 關鍵可控變數         |                   |       | 條件設定          |     |     | 現狀    | 模型計算<br>較佳條件 |
|----------------|-------------------|-------|---------------|-----|-----|-------|--------------|
|                |                   |       | 操作範圍          | 間距  | 操作點 |       |              |
| X <sub>1</sub> | 再結晶罐3K630溫度       | °C    | 45.0 ~ 55.0   | 0.5 | 21個 | 48.5  | 46.0         |
| X <sub>2</sub> | 酚蒸發罐3V620壓力       | Torr  | 43.0 ~ 49.0   | 1.0 | 7個  | 46.5  | 46.0         |
| X <sub>3</sub> | 酚蒸發罐3V620塔底溫度     | °C    | 106.0 ~ 110.0 | 0.5 | 9個  | 107.5 | 108.0        |
| X <sub>4</sub> | 再結晶罐3K630液位       | %     | 40.0 ~ 60.0   | 1.0 | 21個 | 55.0  | 48.0         |
| X <sub>5</sub> | 酚蒸發罐3V620液位       | %     | 40.0 ~ 60.0   | 1.0 | 21個 | 52.0  | 50.0         |
| 管制<br>標準       | 不純物濃度             | %     | ≤ 3.00%       |     |     | 2.63  | 2.82         |
| 目標值            | BPA回收量 (BPA濃度x流量) | 公斤/小時 | 極大化(望大)       |     |     | 616   | 654          |

- (1) 將5個關鍵可控變數設定合理的調整間距，共獲得583,443種操作條件組合。
- (2) 由操作指引程式篩選，在符合不純物濃度≤3.00%管制標準內，找到一組BPA回收量(BPA濃度x流量)最大的操作條件。
- (3) 經模型計算結果顯示，透過降低再結晶罐溫度及酚蒸發罐壓力等操作，BPA回收量預估可由616↗654公斤/小時。

## 4. 操作條件指引程式執行結果彙總

| 項目                | X <sub>1</sub>          | X <sub>2</sub>            | X <sub>3</sub>            | X <sub>4</sub>         | X <sub>5</sub>         | 管制標準                | 目標值                 |                   |
|-------------------|-------------------------|---------------------------|---------------------------|------------------------|------------------------|---------------------|---------------------|-------------------|
| 描述                | 再結晶罐<br>3K630溫度<br>(°C) | 酚蒸發罐<br>3V620壓力<br>(Torr) | 酚蒸發罐<br>3V620塔底<br>溫度(°C) | 再結晶罐<br>3K630液位<br>(%) | 酚蒸發罐<br>3V620液位<br>(%) | 模型一<br>不純物濃度<br>(%) | 模型二<br>BPA濃度<br>(%) | BPA回收量<br>(公斤/小時) |
| 操作範圍              | 45.0~55.0               | 43.0~49.0                 | 106.0~110.0               | 40.0~60.0              | 40.0~60.0              | ≤3.00               | -                   | 望大                |
| 調整間距              | 0.5                     | 1.0                       | 0.5                       | 1.0                    | 1.0                    | -                   | -                   | -                 |
| 1                 | 55.0                    | 49.0                      | 106.0                     | 40.0                   | 60.0                   | 2.55                | 25.3                | 562               |
| :                 | :                       | :                         | :                         | :                      | :                      | :                   | :                   | :                 |
| 253, 468          | 48.5                    | 46.5                      | 107.0                     | 55.0                   | 52.0                   | 2.62                | 27.0                | 613               |
| 253, 469<br>(現狀)  | 48.5                    | 46.5                      | 107.5                     | 55.0                   | 52.0                   | 2.63                | 27.1                | 616               |
| :                 | :                       | :                         | :                         | :                      | :                      | :                   | :                   | :                 |
| 372, 553          | 46.0                    | 46.0                      | 107.5                     | 48.0                   | 50.0                   | 2.81                | 30.3                | 641               |
| 372, 554<br>(推薦值) | 46.0                    | 46.0                      | 108.0                     | 48.0                   | 50.0                   | 2.82                | 30.6                | 654               |
| 372, 555          | 46.0                    | 46.0                      | 108.0                     | 48.0                   | 49.0                   | 2.91                | 30.4                | 651               |
| 372, 556          | 46.0                    | 46.0                      | 108.0                     | 48.0                   | 48.0                   | 2.98                | 30.5                | 653               |
| 372, 557          | 45.0                    | 46.0                      | 108.0                     | 48.0                   | 48.0                   | 3.02                | 30.8                | 659               |
| :                 | :                       | :                         | :                         | :                      | :                      | :                   | :                   | :                 |
| 583, 443          | 45.0                    | 43.0                      | 110.0                     | 60.0                   | 40.0                   | 3.71                | 33.9                | 707               |

- (1)從模型一、模型二共同關鍵可控變數X<sub>1</sub>~X<sub>5</sub>，設定合理操作範圍及調整間距，可獲得583, 443種條件組合。
- (2)透過操作指引程式篩選，在符合不純物濃度≤3.00%管制標準內，共有372, 556種條件組合。
- (3)指引程式續依【模型二：BPA濃度】及流量，計算並找到一組(第372, 554組)BPA回收量最大的操作條件。

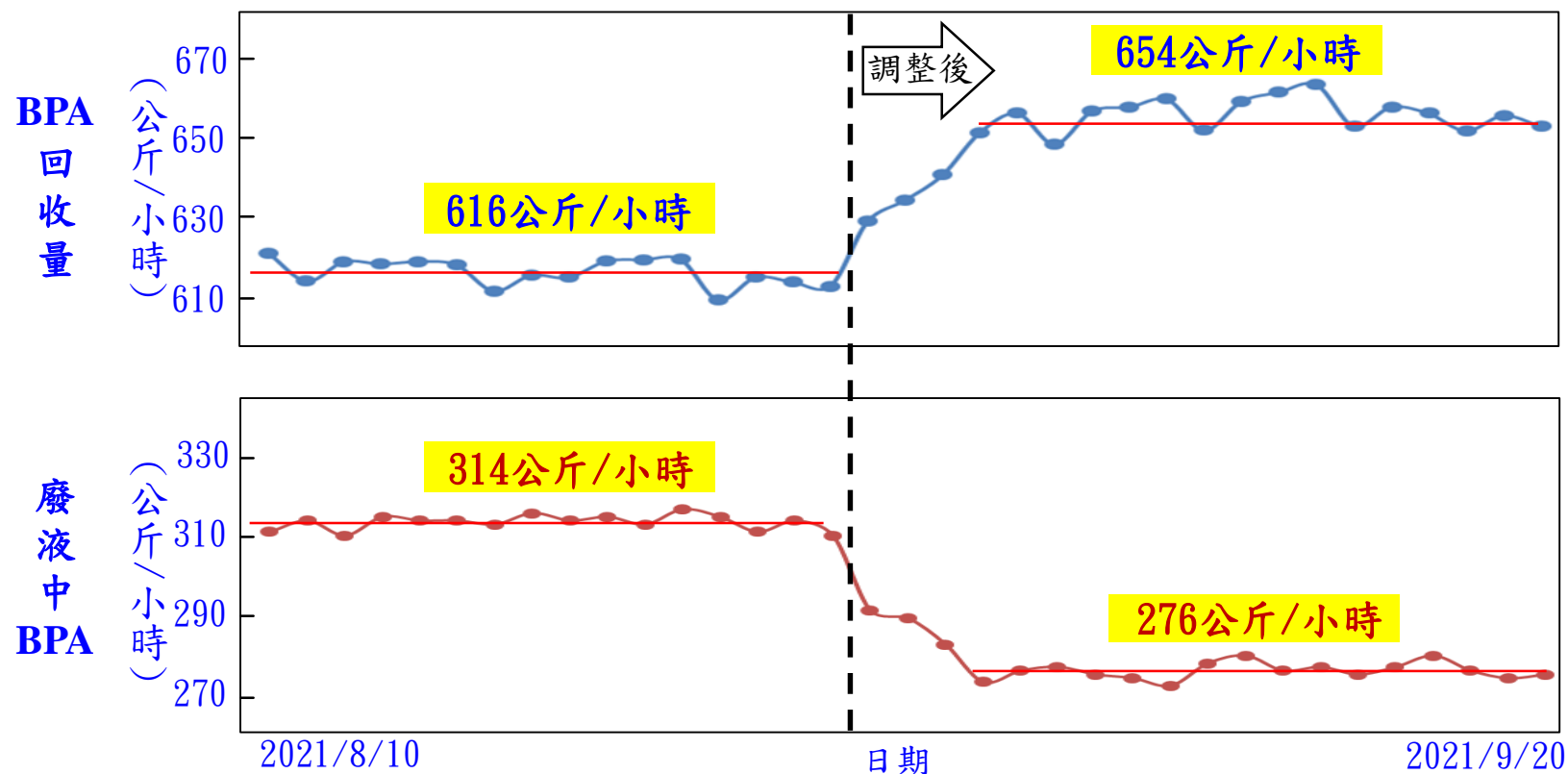
## (四)模型上線應用

### 1. 上線成果

| 項次             | 關鍵可控變數              | 單位    | 調整後<br>(A) | 模型預測<br>(B) | 調整前<br>(C) | 比預測<br>(A-B) | 比調整前<br>(A-C) |
|----------------|---------------------|-------|------------|-------------|------------|--------------|---------------|
| X <sub>1</sub> | 再結晶罐3K630溫度         | °C    | 46.0       | 46.0        | 48.5       | -            | -2.5          |
| X <sub>2</sub> | 酚蒸發罐3V620壓力         | Torr  | 46.0       | 46.0        | 46.5       | -            | -0.5          |
| X <sub>3</sub> | 酚蒸發罐3V620塔底溫度       | °C    | 108.0      | 108.0       | 107.5      | -            | 0.5           |
| X <sub>4</sub> | 再結晶罐3K630液位         | %     | 48.0       | 48.0        | 55.0       | -            | -7.0          |
| X <sub>5</sub> | 酚蒸發罐3V620液位         | %     | 50.0       | 50.0        | 52.0       | -            | -2.0          |
| 管制標準           | 不純物濃度               | %     | 2.80       | 2.82        | 2.63       | -0.02        | 0.17          |
| 目標             | BPA回收量 (BPA濃度 x 流量) | 公斤/小時 | 654        | 654         | 616        | -            | 38            |

製程調整前先進行變更管理(MOC)，檢討其合理性及適用性。製程變數依模型建議調整後，不純物濃度由2.63↗2.80%，與模型預測值2.82%相差0.02%，誤差值與建模相當，BPA回收量由616↗654公斤/小時。

## 2. 改善效益



- (1) 調整後，BPA回收量由616↗654公斤/小時，廢液中BPA(送焚化)由314↘276公斤/小時，減少38公斤/小時，減幅12.1%，BPA回收增加333噸/年，相當可節省原料酚283.0噸/年，丙酮86.6噸/年，年效益15,354千元。
- (2) 橫向展開至其他套別(共建置5個AI模型)，全部完成後可節省原料酚971.8噸/年，丙酮297.5噸/年，預估年效益52,737千元。

### 3. 線上應用

再結晶回收優化操作介面已於2021年11月完成上線，如下圖。

#### ① 模型精確度

#### ② 操作調整指引

#### ④ 預測趨勢圖



#### ③ 優化目標推薦值

## 四、全廠AI執行成果

| 製程                                       | 項次 | 項目名稱       | 原料節省(噸/年) |       | 節汽<br>(噸/小時) | 年效益<br>(千元)   | 完成日<br>(預完日) |
|--|----|------------|-----------|-------|--------------|---------------|--------------|
|  |    |            | 酚         | 丙酮    |              |               |              |
| 陶氏製程                                     | 1  | 脫酚純化區AI模型  | -         | -     | 0.1          | 1,150         | (2022/7/31)  |
|  | 2  | 水系結晶區AI模型  | 86.1      | 26.4  | -            | 4,673         | (2022/8/31)  |
|  | 3  | 再結晶區AI模型   | 107.6     | 33.0  | -            | 5,841         | (2022/9/20)  |
|  | 4  | 酚系結晶區AI模型  | 68.9      | 21.1  | -            | 3,740         | (2022/10/20) |
|  | 5  | 萃取回收區AI模型  | -         | -     | 0.2          | 2,300         | (2022/11/20) |
|  | 6  | 反應區AI模型    | 151.7     | 46.5  | -            | 8,234         | (2022/12/31) |
| 出光製程                                     | 1  | 酚水分離區AI模型  | -         | -     | 2.3          | 23,967        | 2021/6/30    |
|  | 2  | 第一段結晶區AI模型 | 949.7     | 294.4 | -            | 51,634        | 2021/12/31   |
|  | 3  | 重組反應區AI模型  | 607.8     | 187.5 | -            | 33,020        | 2022/1/12    |
|  | 4  | 縮合反應區AI模型  | 861.3     | 263.7 | -            | 46,741        | 2022/2/28    |
|  | 5  | 第二段結晶區AI模型 | -         | -     | 0.4          | 4,600         | (2022/7/31)  |
|  | 6  | 再結晶區AI模型   | 864.2     | 264.5 | -            | 46,899        | (2022/9/30)  |
|  | 7  | 脫水脫酚區AI模型  | -         | -     | 1.0          | 10,950        | (2022/10/31) |
|  | 8  | 脫酚製粒區AI模型  | -         | -     | 0.5          | 5,200         | (2022/12/31) |
|  | 9  | 丙酮回收區AI模型  | -         | -     | 0.7          | 7,775         | (2022/10/31) |
| 合計可節省酚3,697.3噸/年、丙酮1,137.1噸/年、節汽5.2噸/小時。 |    |            |           |       |              | 年效益：256,724千元 |              |

1. 全廠AI案件依製程分區，陶氏製程(BPA1)計建置6個AI模型，出光製程(BPA2/3/4及寧波BPA)計各建置9個AI模型，合計共42案，預定2022/12/31全部完成。
2. 全部完成後，合計年效益256,724千元。

## 五、後續推動工作

- (一) 為克服現場品質數據不足問題，本案結合Aspen Plus模擬再結晶區製程，產出大量品質數據供AI模型訓練，此經驗可提供其他具有結晶純化之廠處參考。
- (二) 全廠AI案件合計共42案，目前已完成29案，已上線至即時生產管理系統及DCS畫面，供盤控人員作調整參考，其餘13案預定2022/12/31全部完成。
- (三) 本案再結晶回收優化後，廢液中BPA由314\276公斤/小時，擬增設水解反應系統，將廢液中BPA水解還原為原料酚及丙酮，BPA可再由276\83公斤/小時，預估年效益140,621千元。  
橫向展開，全廠預估年效益561,553千元，已於今年6月提出環評變更申請，預定2025年12月完成。



報告完畢

恭請指導