

南亞塑膠工業股份有限公司 纖維事業部

酯化聚合反應條件優化

報告人：蘇正一
2020年12月25日

執行摘要

- 一、PET聚合體係由對苯二甲酸及乙二醇經酯化聚合反應製成：
 - (一)正常生產時，需人工取樣且各品質指標化驗分析時間長，無法即時回饋控制。
 - (二)改規格時，需依序調整製程變數及添加副料，交接降級時間長。

由製程專業知識及統計手法將70個製程變數篩選出關鍵變數，開發【AI品質預測模型】，預測「酯化率」、「二乙二醇含量」、「酸價」、「特性黏度」等四項重要品質指標，取代人工分析，即時回饋控制，提升製程品質能力；並輔以最佳化演算法，找出副料最佳添加方式，縮短改規格降級時間。

- 二、投資費用：45,436千元。

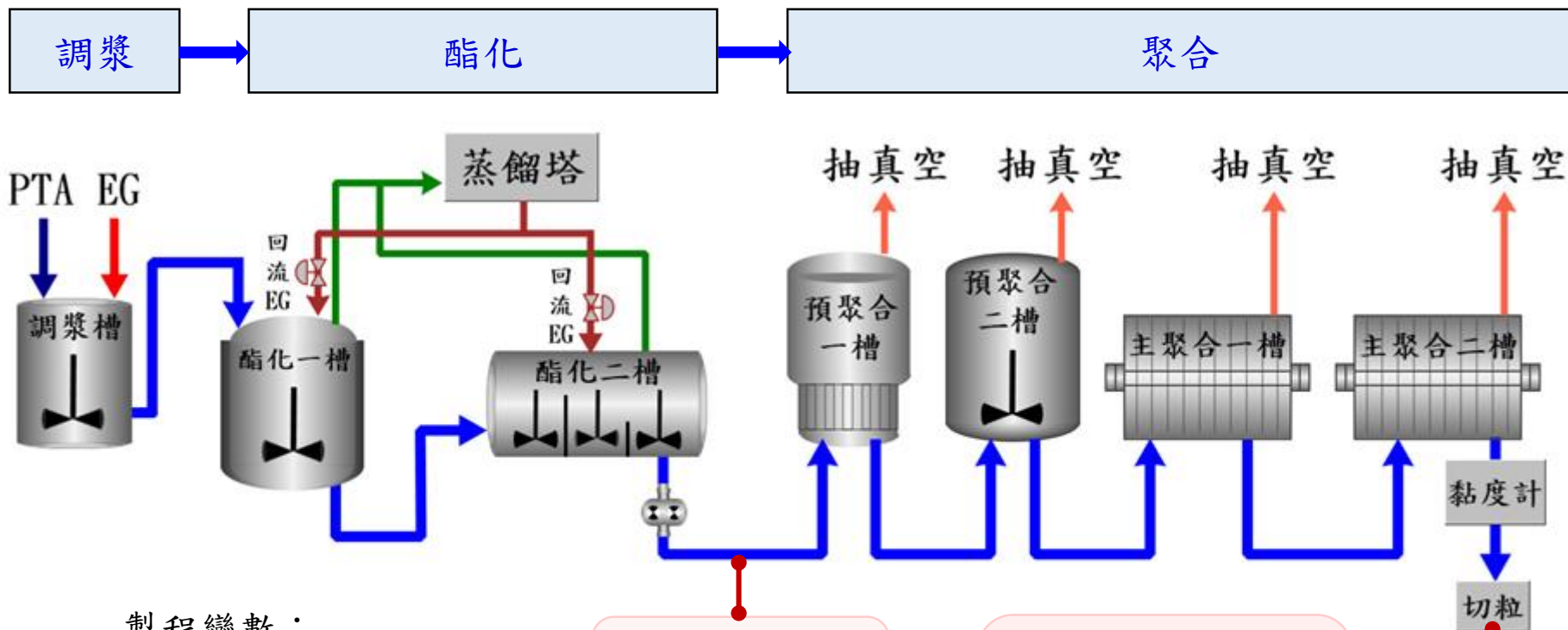
專案完成後，預估台灣及海外各廠21套生產線，合計可減少降級量13,897噸/年，人員精簡11人，年效益168,320千元。

回收年限：0.27年。

報告大綱

- 一、PET酯化聚合製程說明
- 二、改善動機
- 三、建立AI品質預測模型作回饋控制
- 四、AI推展計劃
- 五、AI執行效益
- 六、後續工作計劃

一、PET酯化聚合製程說明



製程變數：

1. 調漿酯化段:37個變數。
2. 聚合段:33個變數。

1. 取樣點

酯化率(C值)

2. 取樣點

二乙二醇含量(DEG)
酸價(COOH)
特性黏度(IV)

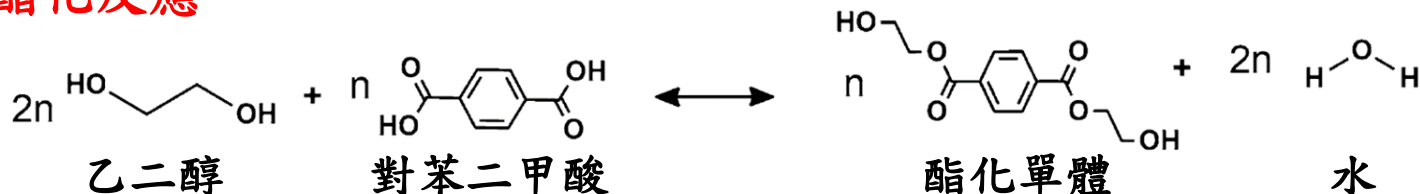
PET粒製程重要品質指標：

1. 調漿酯化段:酯化率(C值)。
2. 聚合段:二乙二醇含量(DEG)、酸價(COOH)、特性黏度(IV)。

一、PET酯化聚合製程說明(續)

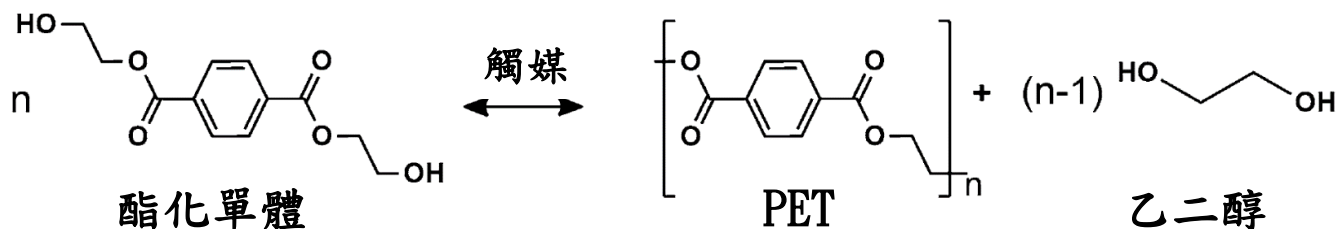
PET主要化學反應如下：

(一) 酯化反應



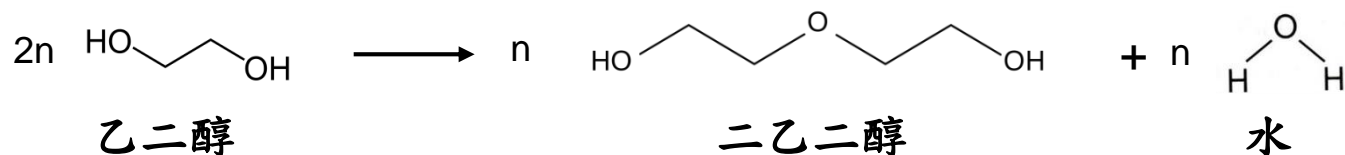
說明：對苯二甲酸與乙二醇混合調漿後，進行酯化脫水反應。

(二) 聚合反應



說明：觸媒催化進行聚合反應，真空脫除乙二醇，製成PET聚合體。

(三) 副反應生成二乙二醇



說明：酯化聚合過程，乙二醇反應形成副產物二乙二醇。

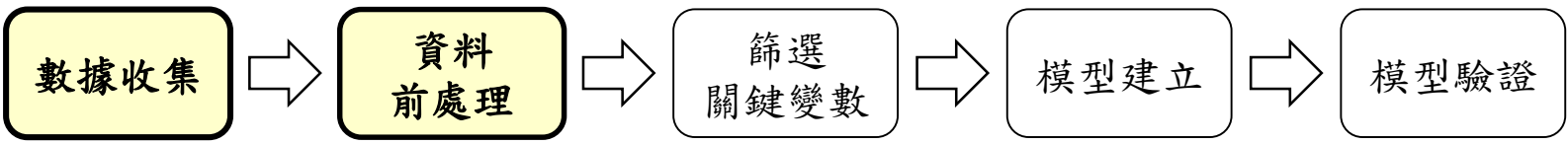
二、改善動機

運用AI技術建立品質預測模型，即時回饋控制重要製程變數，穩定生產品質，減少人工分析及品質降級損失。

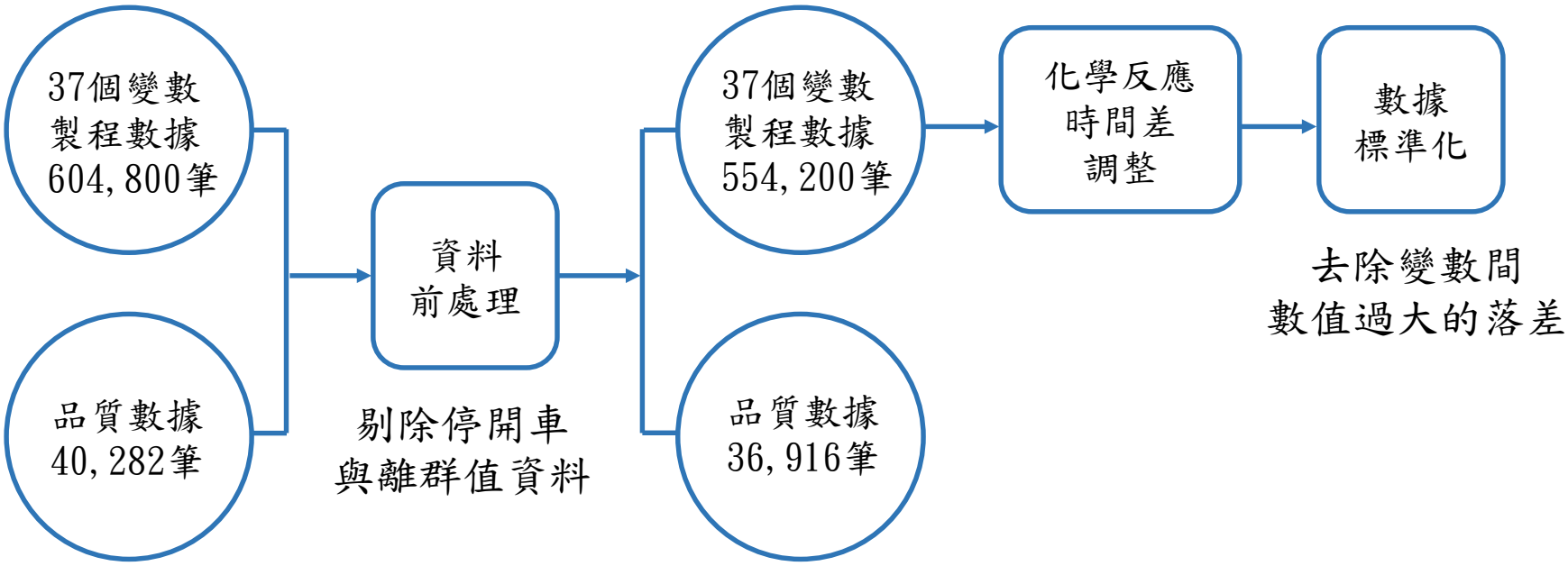
品質指標	說明	品質分析管理
酯化率 (C值)	酯化反應後的PTA轉化率。 C值低，低聚物含量高；C值高，聚合速率慢。	取樣頻率：1次/4hr 分析時間：2hr/次
二乙二醇 (DEG) 含量	酯化聚合段乙二醇反應形成的副產物。 DEG含量較高，染色深度較深，但耐熱性較差。	取樣頻率：1次/4hr 分析時間：4hr/次
酸價 (COOH)	代表PET聚合體殘留的COOH含量； 與酯化率密切相關，酸價影響聚合反應速度及產品耐熱性。	取樣頻率：1次/8hr 分析時間：2.5hr/次
特性黏度 (IV)	代表PET聚合體的分子鏈長度(聚合度)。 IV依下游產品加工需求管制。	取樣頻率：1次/8hr 分析時間：4hr/次

三、建立AI品質預測模型作回饋控制

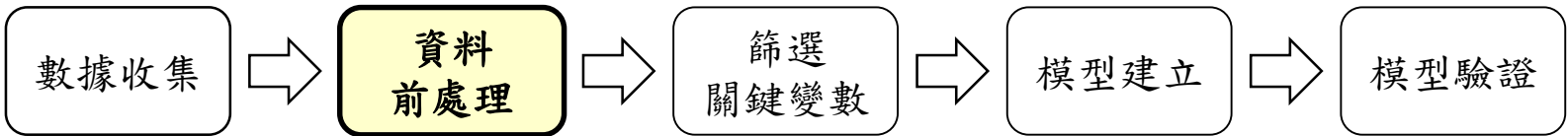
(一)以酯化率預測模型為例，說明AI建模流程：



收集2018年4月至2019年6月製程與品質數據，剔除後總共554,200筆製程數據、36,916筆品質數據作為建模數據，其中90%為訓練資料，10%為驗證資料。



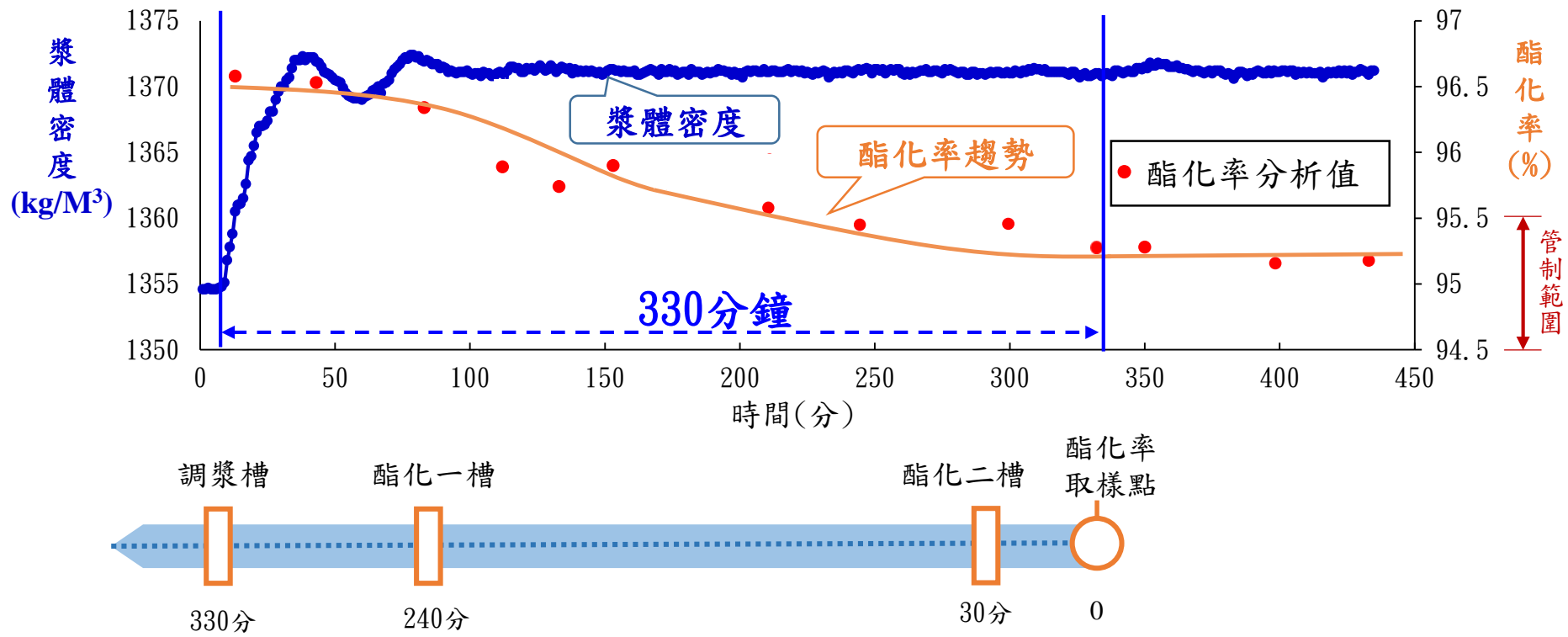
三、建立AI品質預測模型作回饋控制



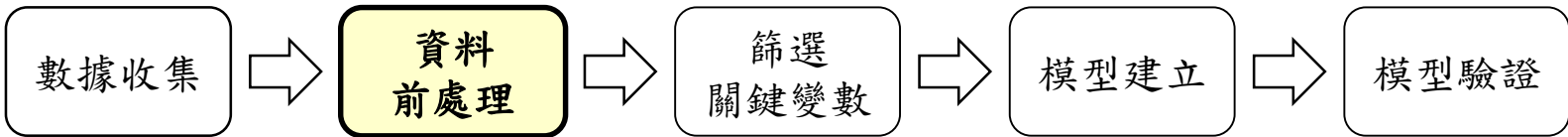
1. 化學反應時間差調整

(1) 以生產實際案例說明化學反應時間差：

以耐熱瓶粒改產非耐熱瓶粒，酯化率由96.5%降至95.0±0.5%，觀察漿體密度調整後，酯化率變化趨勢，經330分鐘酯化率達到新平衡點。



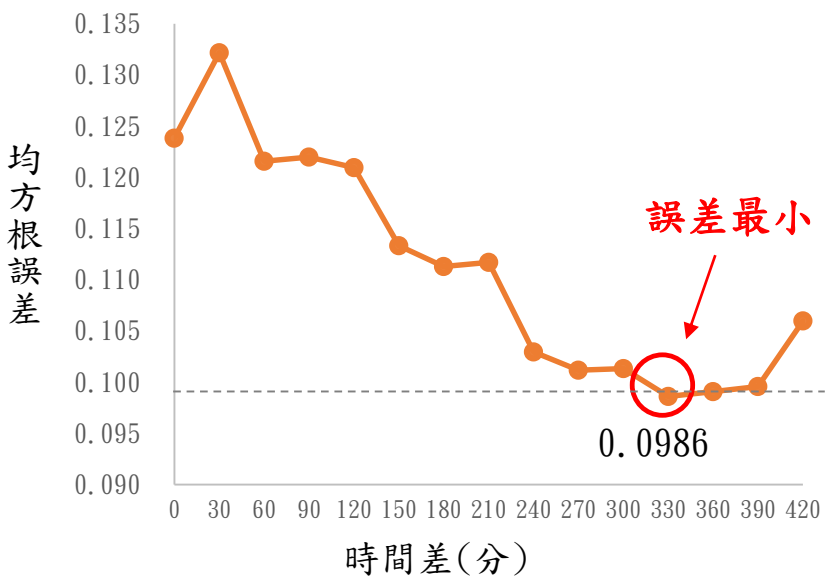
三、建立AI品質預測模型作回饋控制



1. 化學反應時間差調整

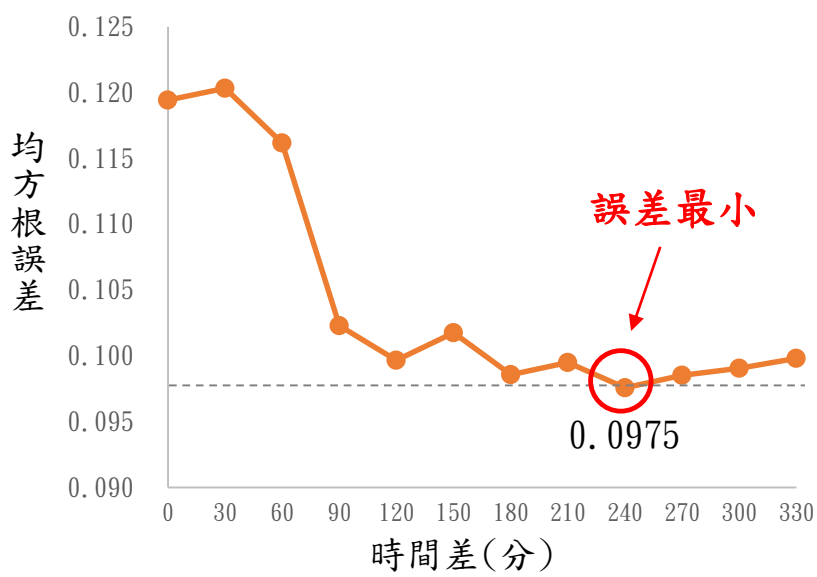
(2)另以XGBoost模型預測誤差做驗證，測試從0到420分鐘(30分鐘為間隔)共15個時間差，驗證結果如下：

漿體密度



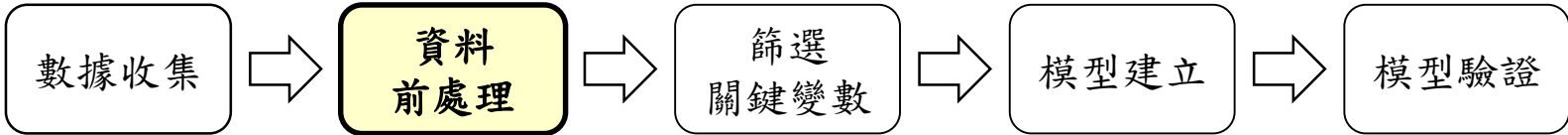
漿體密度於時間差330分鐘誤差最小

酯化一槽溫度



酯化一槽溫度於時間差240分鐘誤差最小

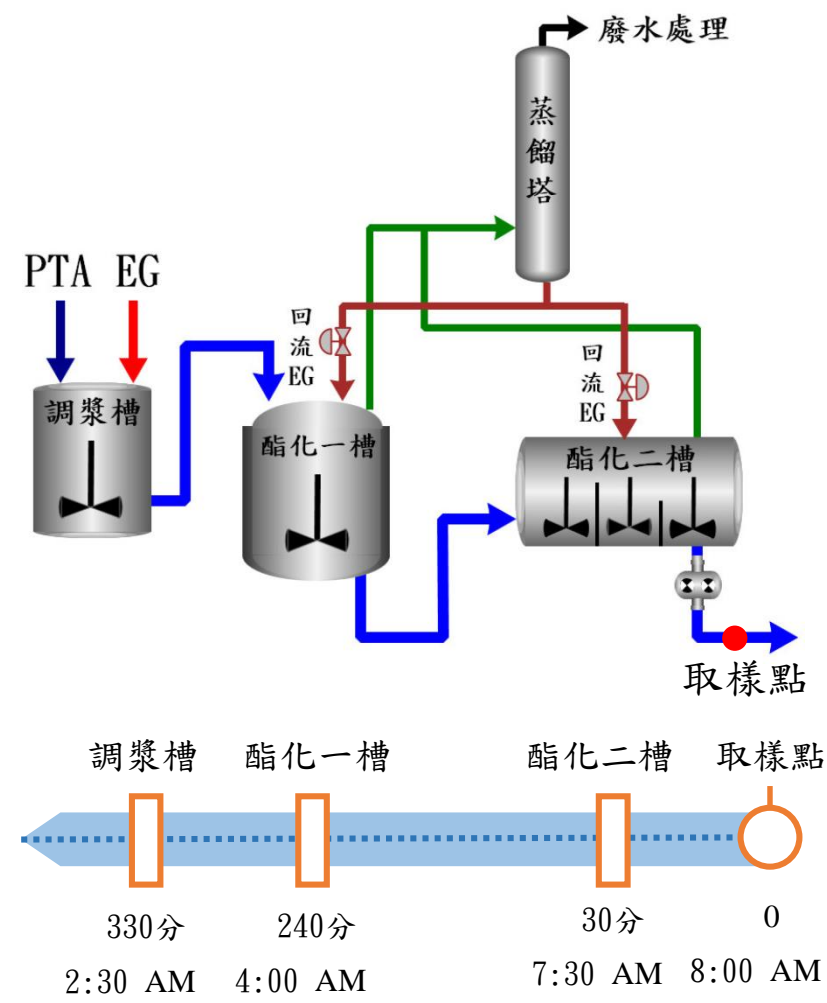
三、建立AI品質預測模型作回饋控制



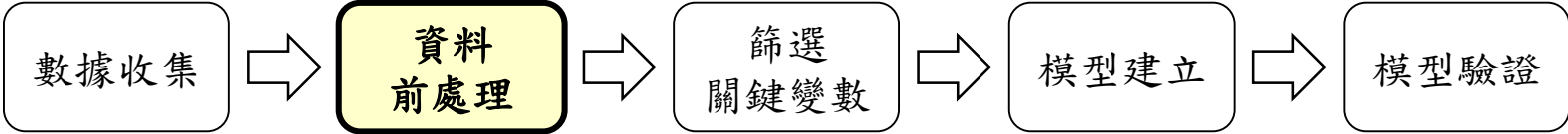
1. 化學反應時間差調整

(3)各製程變數化學反應時間差如下：

項次	製程變數	與取樣點分析時間差
1	DRC004:漿體密度	330 分
2	TIC003:調漿槽溫度	330 分
⋮		⋮
17	FIC020:酯化一槽回流EG量	240 分
18	LIC020:酯化一槽液位	240 分
19	TIC020:酯化一槽溫度	240 分
⋮		⋮
35	LIC023:酯化二槽液位	30 分
36	TIC023:酯化二槽溫度	30 分
37	MS026:酯化單體輸送泵浦轉速	0 分



三、建立AI品質預測模型作回饋控制



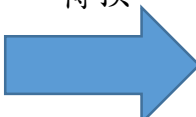
2. 數據標準化

各變數的原始數據單位、數值不同，使用標準化轉換，將數據轉換在同一基準下，可避免數值大小影響模型準確度。

原始數據共36,916筆(單位、數值範圍不同)

時間	漿體密度 (KG/M ³) DRC004	調漿槽 溫度(°C) TIC003	酯化一槽 溫度(°C) TIC020
2018/8/14 16:00	1358.5	68.0	260.2
2018/8/14 16:01	1358.6	68.0	260.1
2018/8/14 16:02	1358.4	68.0	260.1
⋮	⋮	⋮	⋮
2019/6/16 16:00	1334.4	74.3	256.6
2019/6/17 16:00	1336.5	68.4	257.0

標準化
轉換


$$X^* = \frac{X - \mu}{\sigma}$$

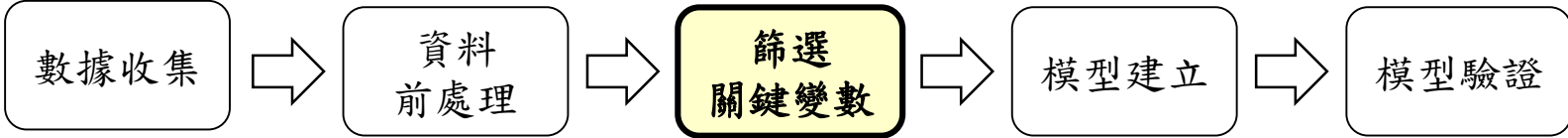
X: 製程變數
μ: 平均數
σ: 標準差

數據標準化共36,916筆(無單位)

時間	漿體密度 DRC004	調漿槽 溫度 TIC003	酯化一槽 溫度 TIC020
2018/8/14 16:00	3.67	0.57	-0.18
2018/8/14 16:01	3.69	0.57	-0.22
2018/8/14 16:02	3.64	0.57	-0.22
⋮	⋮	⋮	⋮
2019/6/16 16:00	-2.54	1.49	-1.86
2019/6/17 16:00	-2.00	0.63	-1.68

各變數數據平均值皆為 0，標準差皆為 1

三、建立AI品質預測模型作回饋控制



1. 變數篩選：37個製程變數篩選出9個關鍵變數

項次	製程變數	相關係數絕對值	Lasso迴歸係數
1	DRC004	0.888	-0.70929
2	TIC003	0.718	0.06903
⋮	⋮	⋮	⋮
8	LIC023	0.477	0.03713
9	MS026	0.386	-0.02188
10	T0201	0.722	-
⋮	⋮	⋮	⋮
23	T0238	0.768	-
24	LIC003	0.049	-
⋮	⋮	⋮	⋮
34	MA020	0.005	-
35	PI004	0.152	0
36	PIC020	0.161	0
37	PIC023	0.103	0

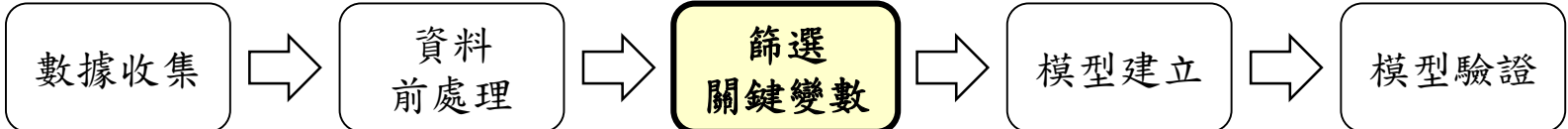
步驟①：剔除高度相關的變數
剔除14個彼此高度相關的變數，
保留具代表性的製程變數。

步驟②：剔除相關係數影響小的變數
剔除11個與酯化率相關係數
絕對值低(<0.05)的製程變數。

步驟③：剔除Lasso迴歸影響小的變數
剔除3個Lasso迴歸係數等於0的
製程變數。

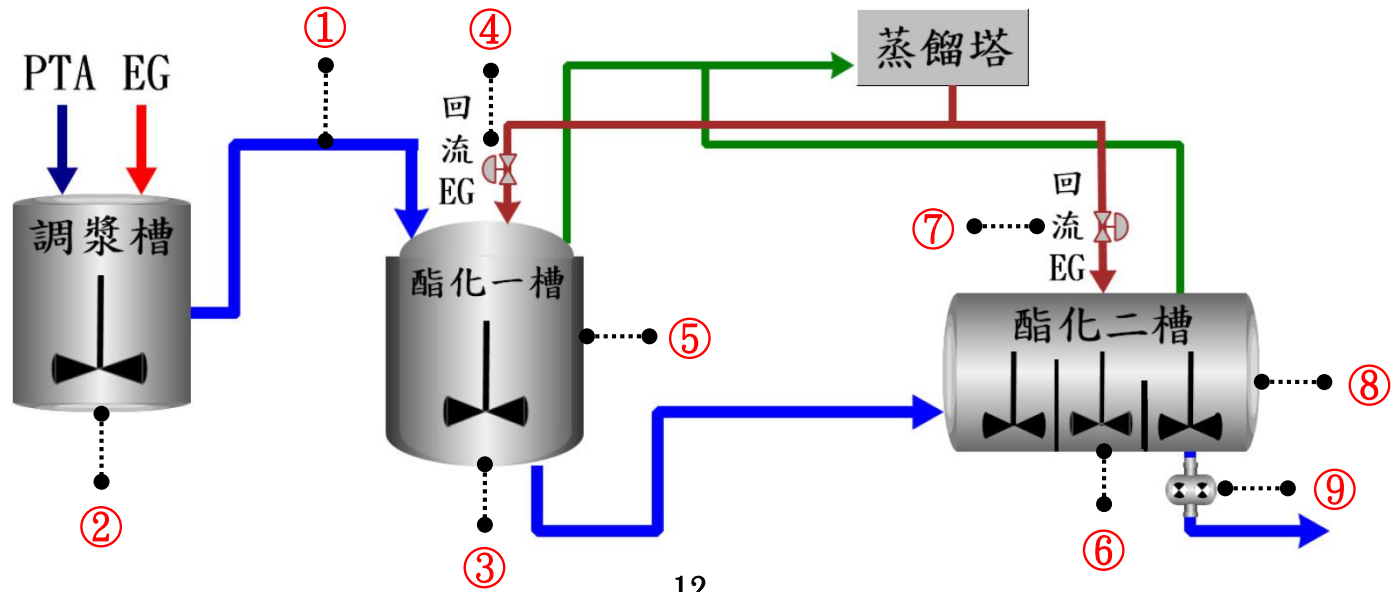
經過以上3個步驟篩選，最後選擇9個
關鍵變數。

三、建立AI品質預測模型作回饋控制

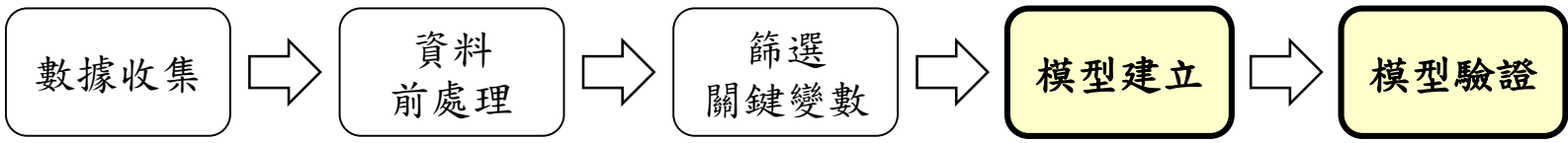


2. 篩選完成變數列表

項次	製程變數	製程變數說明	時間差(分)
1	DRC004	漿體密度	330
2	TIC003	調漿槽溫度	330
3	TIC020	酯化一槽溫度	240
4	FIC020	酯化一槽回流EG量	240
5	LIC020	酯化一槽液位	240
6	TIC023	酯化二槽溫度	30
7	FIC023	酯化二槽回流EG量	30
8	LIC023	酯化二槽液位	30
9	MS026	酯化單體輸送泵浦轉速	0

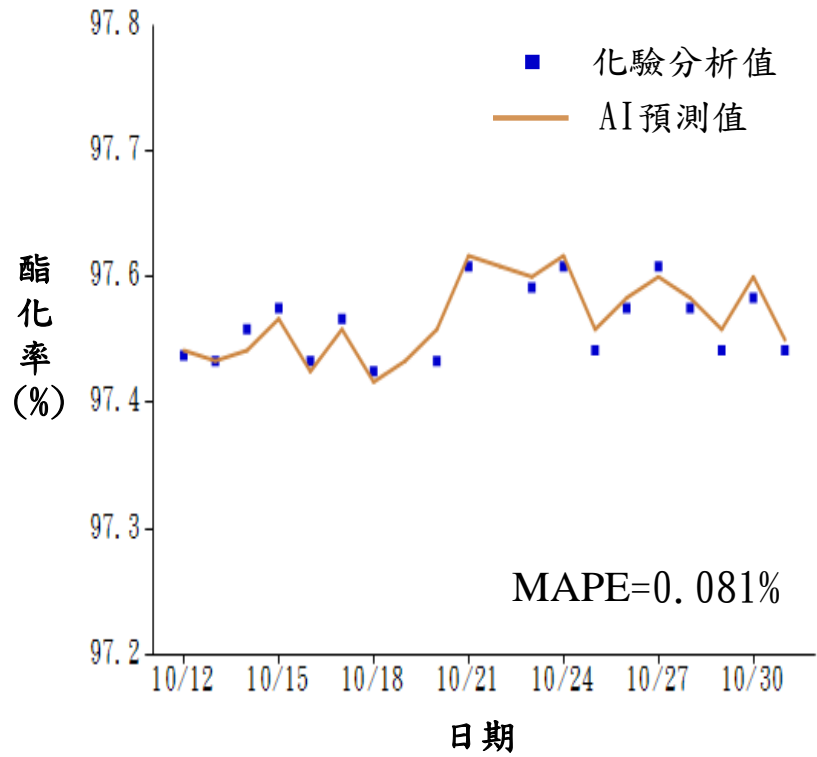


三、建立AI品質預測模型作回饋控制



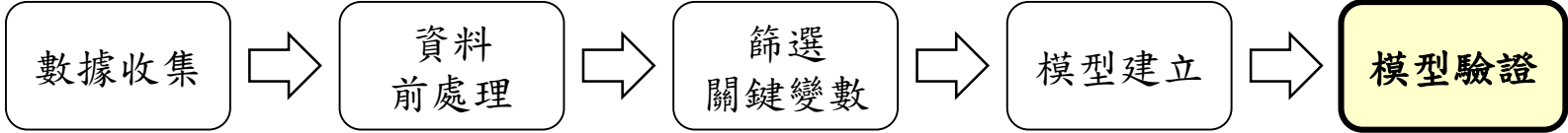
- 1. 酯化率預測模型以**XGBoost**模型之決定係數最高(0.96)，且平均絕對百分比誤差(MAPE)最小(0.061%)。
- 2. 以2019年10月的數據進行測試，**MAPE**為0.081%與建模時相當。

模型名稱	脊迴歸 (Ridge)	套索迴歸 (Lasso)	極限梯度 提升決策樹 (XGBoost)
決定係數 (R ²)	0.80	0.80	0.96
均方根誤差 (RMSE)	0.2010	0.2009	0.0859
平均絕對百分比誤差 (MAPE)	0.1564	0.1562	0.0610



說明：決定係數愈接近1.0，代表模型愈有預測能力。
均方根誤差、平均絕對百分比誤差越小越好。

三、建立AI品質預測模型作回饋控制



關鍵變數與酯化率變化趨勢如下表，經比對化工原理，兩者趨勢一致，模型可上線使用。

XGBoost 重要性排名	製程變數	製程變數說明	模型趨勢 正負向	化工原理 正負向
1	TIC023	酯化二槽溫度	+	+
2	DRC004	漿體密度	—	—
3	TIC003	調漿槽溫度	+	+
4	TIC020	酯化一槽溫度	+	+
5	MS026	酯化單體輸送泵浦轉速	—	—
6	FIC023	酯化二槽回流EG量	+	+
7	FIC020	酯化一槽回流EG量	+	+
8	LIC023	酯化二槽液位	+	+
9	LIC020	酯化一槽液位	+	+

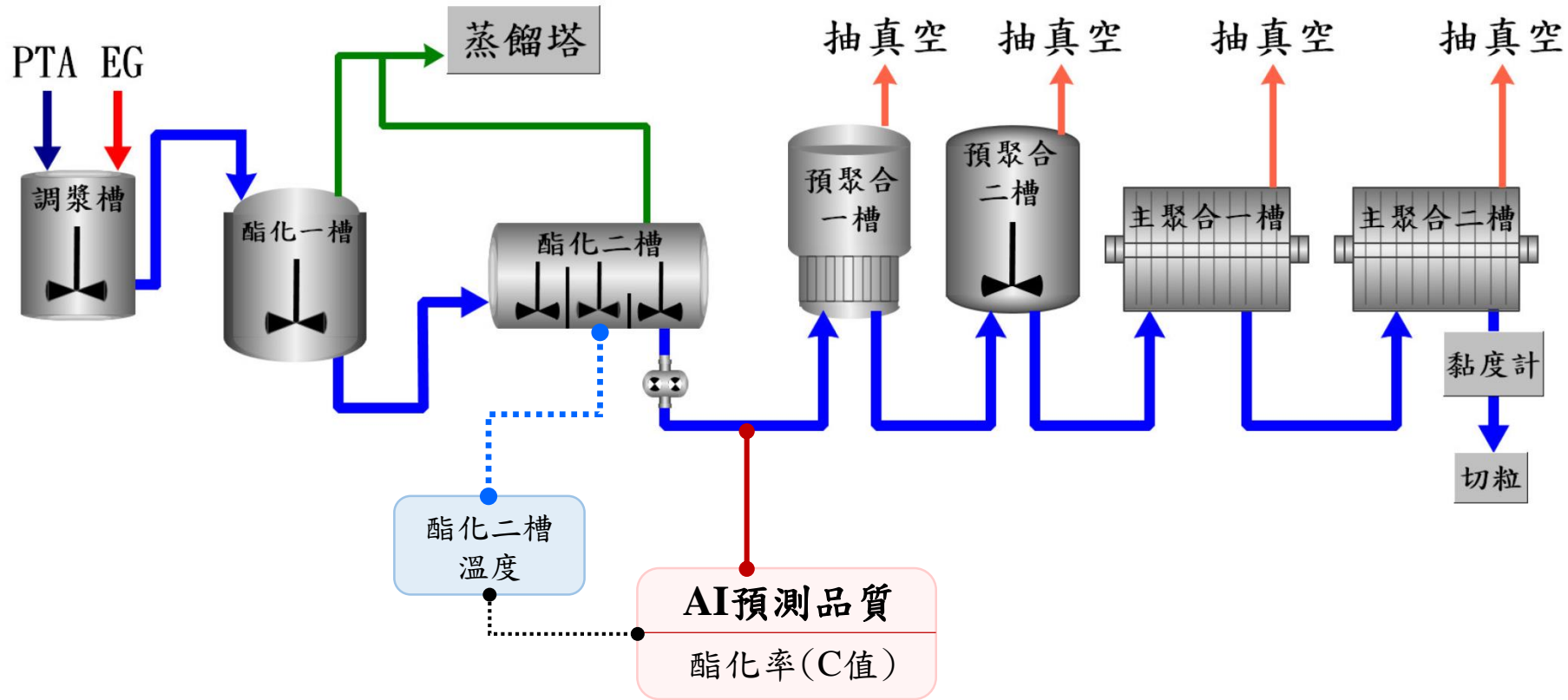
說明:運用實驗設計方法，在可操作的條件範圍內，計算XGBoost模型各變數的正負向趨勢。

三、建立AI品質預測模型作回饋控制

(二)即時回饋控制：以酯化率為例

依據AI模型的變數重要性，選擇酯化二槽溫度為控制點，並設定調整範圍之上下限。

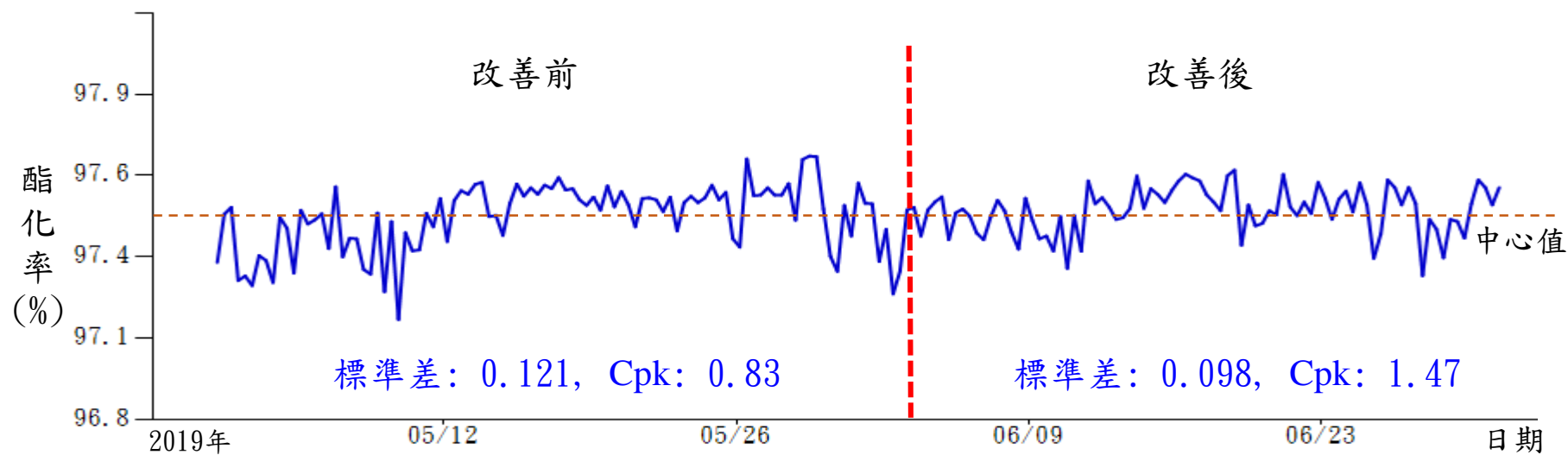
品質指標	控制點	調整範圍
酯化率(C值)	酯化二槽溫度	中心值 $\pm 1^{\circ}\text{C}$



三、建立AI品質預測模型作回饋控制

(三)AI回饋控制改善前後製程能力比較圖

品質指標	項目	酯化率
	管制標準	97.5±0.5 %
製程能力 (Cpk)	改善前	0.83
	改善後	1.47



說明：
透過AI解析續改善調漿槽溫度穩定性提升製程能力；
2020年3月Cpk已達2.08。

三、建立AI品質預測模型作回饋控制

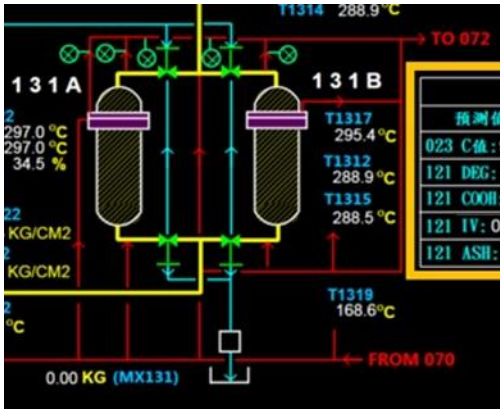
(四)另外三項品質指標比照酯化率(C值)品質預測模型方式建立，彙總如下：

品質指標	二乙二醇含量 (DEG)	酸價 (COOH)	特性黏度 (IV)
製程變數個數	70	70	70
關鍵變數個數	14	11	4
資料筆數	41, 316	19, 734	40, 918
最佳模型	XGBoost	XGBoost	Lasso
決定係數(R ²)	0. 97	0. 95	0. 87
均方根誤差(RMSE)	0. 030	0. 262	0. 003
平均絕對百分比誤差(MAPE)	0. 525	0. 365	1. 332
回饋控制點	酯化二槽 DEG外加量	酯化二槽溫度	主聚合二槽 真空度

三、建立AI品質預測模型作回饋控制

(五)DCS即時顯示品質指標預測值與製程品質能力(Cpk)

將AI預測值即時顯示在DCS上，並依據AI預測值自動調整製程條件，以提升製程品質能力，並可改善後段製程生產效率、染色等加工性。



品質指標	DCS顯示值	標準值	Cpk
酯化二槽C值	97.4	97.5 ± 0.5 %	2.03
主聚合槽DEG	2.61	2.60 ± 0.10 mole%	2.08
主聚合槽酸價	29.7	30.0 ± 4.0 µeq/g	1.92
主聚合槽黏度	0.639	0.639 ± 0.004 dl/g	2.11

說明：
製程品質能力(Cpk)改善，A級收率預計可提升0.4%，減少降級量5,415噸/年。

三、建立AI品質預測模型作回饋控制

(六)應用：縮短改規格時間

1. 改規格時需依序調整各製程變數及添加副料，以致交接降級時間長。

因此運用下列方法縮短改規格時間：

(1)前述品質預測模型。

(2)以最佳化演算法找出副料最佳的添加方式。

2. 各規格間主要配方差異如下：

副料種類	間苯二甲酸 (PIA)	二氧化鈦 (TiO ₂)	二乙二醇 (DEG)	磺酸鈉苯二甲酸甲基酯 (DMS)
副料用途	調整結晶度	調整消光度	各種特殊粒依不同含量添加改質	
添加位置	調漿槽	酯化槽		
規 格	1. 光度別：全光、有光、半光、鈍光。 2. 機能別：高收縮粒、陽離子可染粒、工業絲粒、難燃粒、 瓶用原粒等。			

三、建立AI品質預測模型作回饋控制

(六)應用：縮短改規格時間

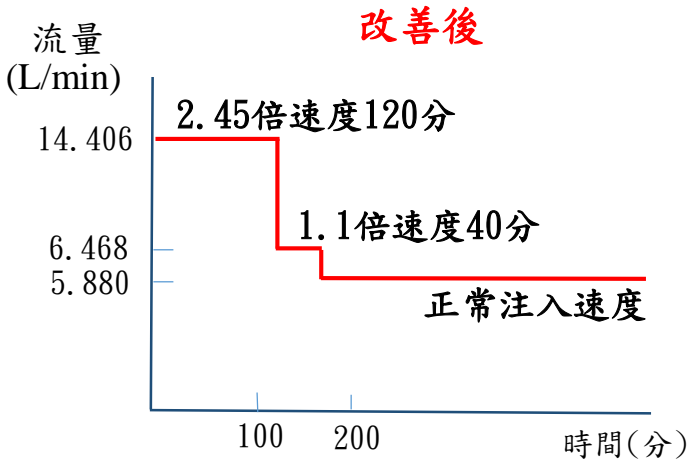
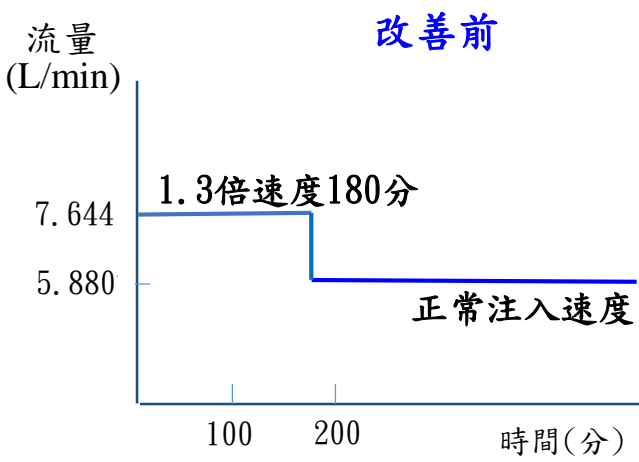
3. 運用最佳化演算法尋找副料最佳注入條件
以全光粒改鈍光粒，TiO₂由0%提升至2.35%為例：

(1)改善前後TiO₂注入條件比較表

正常速度：5.880 公升/分

項目	注入方式	第一段注入條件	第二段注入條件	達標時間
改善前	單段	7.644 公升/分 x 180分 (1.3倍速度)	—	860分
改善後	兩段	14.406 公升/分 x 120分 (2.45倍速度)	6.468 公升/分 x 40分 (1.1倍速度)	387分

(2)添加方式

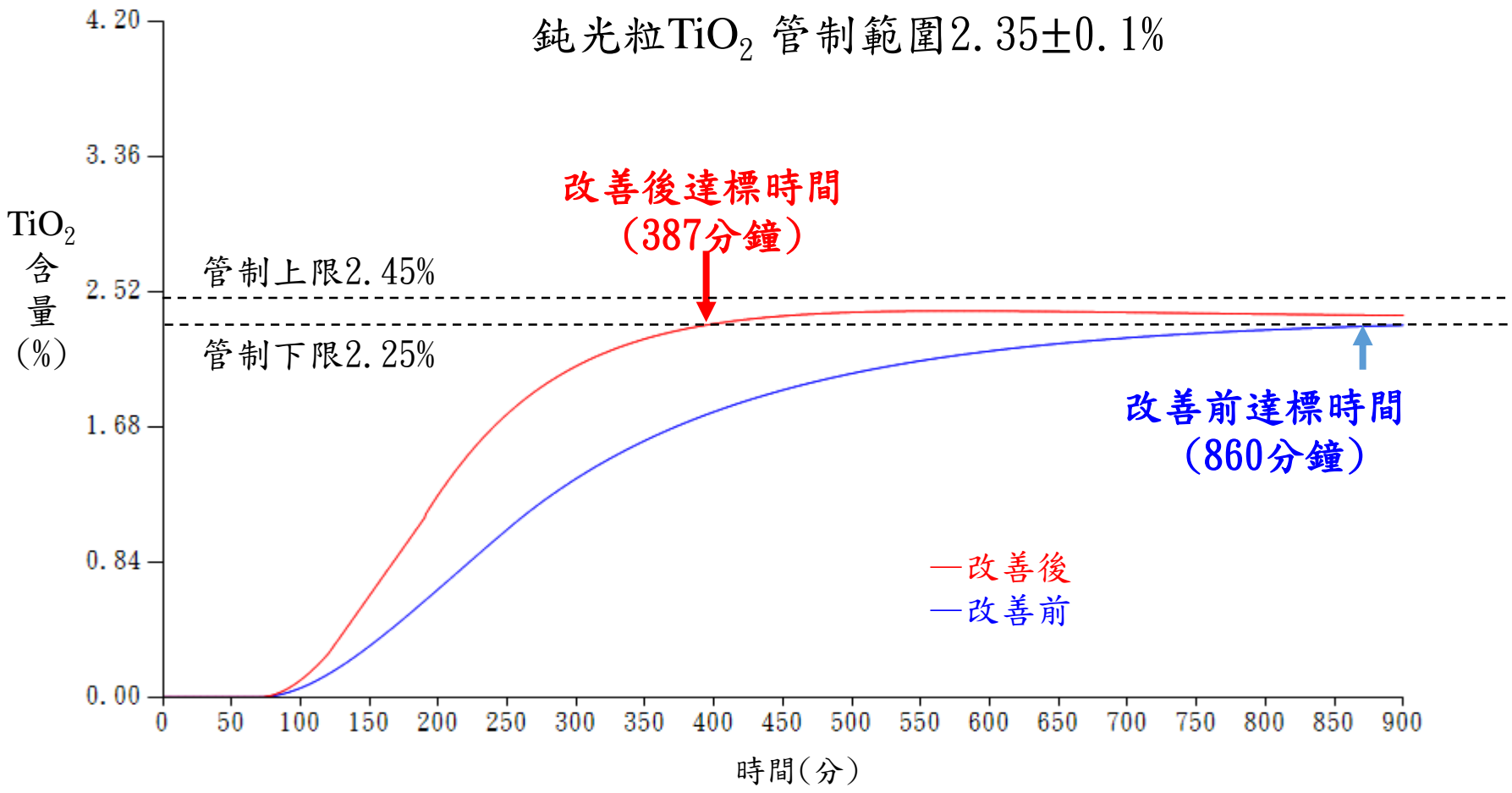


三、建立AI品質預測模型作回饋控制

(六)應用：縮短改規格時間

3. 運用最佳化演算法尋找副料最佳注入條件

(3)主聚合槽TiO₂含量平衡曲線



三、建立AI品質預測模型作回饋控制

(六)應用：縮短改規格時間

4. 執行過程及結果

改善方向	降級時間		
	改善前	改善後	差異
應用品質指標預測模型	18小時	12小時	6小時
尋找副料最佳的添加方式	14.3小時	6.5小時	7.8小時
改規格降級時間(合併效益)	18小時	12小時	6小時

說明：

(1)續應用於其他更改規格之製程條件調整及改善副料添加方式，縮短降級時間。

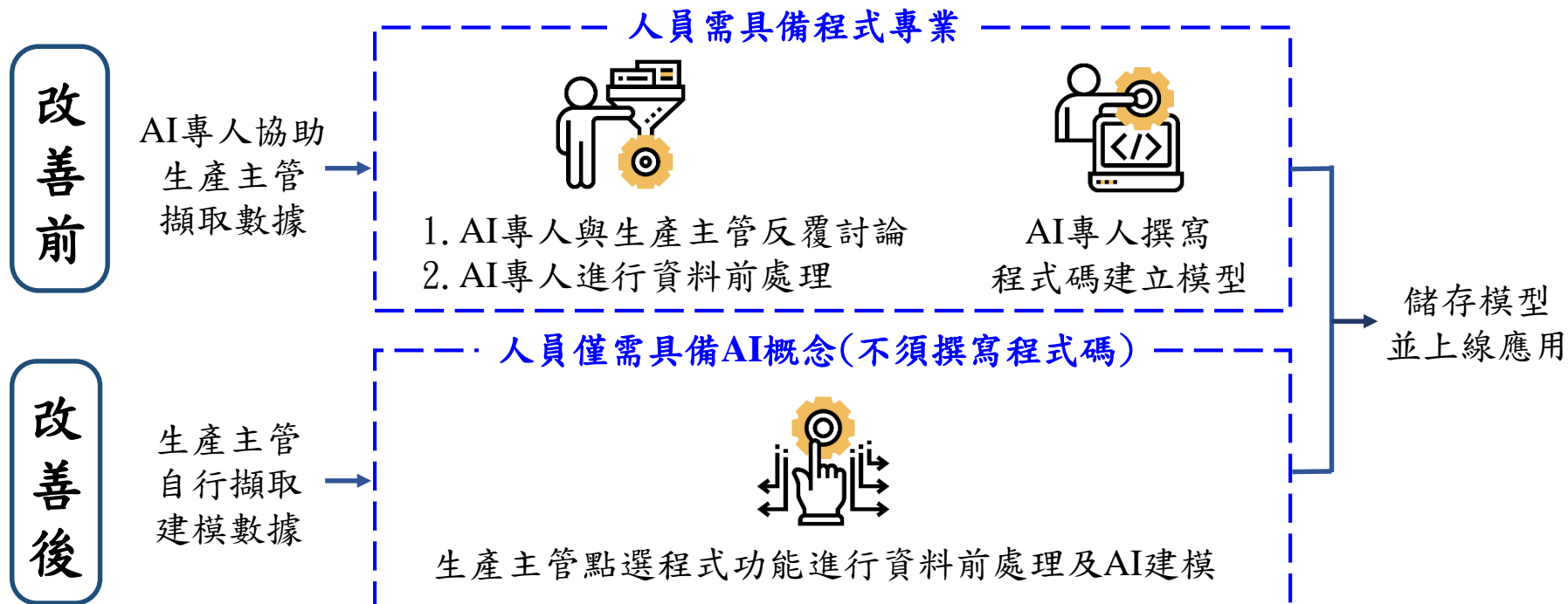
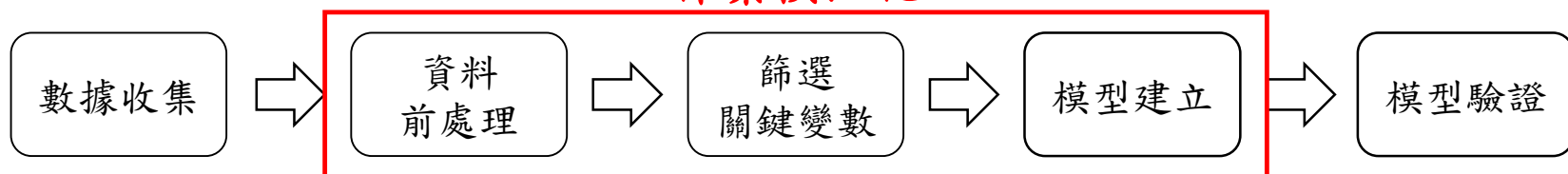
(2)海內外各廠區比照推動，預期改規格降級量減少8,482噸/年(28%)。

四、AI推展計劃

(一)AI作業模組化

為加速推展到海內外廠區，資料前處理及AI建模工作由AI專人開發公用模組供生產主管自行完成AI建模工作，以簡化工作流程及縮短建模時間，AI工程師擔任輔導諮詢角色，從旁協助。

AI作業模組化



四、AI推展計劃

(二)海內外各廠區展開計劃如下：

開發 時程 廠區	2018		2019				2020				2021	
	Q3	Q4	Q1	Q2	Q3	Q4	Q1	Q2	Q3	Q4	Q1	Q2
台灣廠												
	理論推導與建立模型						品質指標預測橫向展開					
								改規格AI建模橫向展開				
越南廠												
			建立模型					品質指標預測橫向展開				
									改規格AI建模橫向展開			
南卡廠												
				建立模型						品質指標預測橫向展開		
										改規格AI建模橫向展開		

五、AI執行效益

各廠區降級量預計減少13,897噸/年，人員精簡11人，合計效益預計168,320千元/年，彙總如下：

(一)運用AI預測品質指標，作即時回饋控制，A級收率提升0.4%，降級量預估減少如下：

單位：噸/年、NTD千元/年

廠區(套數)	台灣廠(7套)	越南廠(2套)	南卡廠(12套)	合計
降級量減少	1,784	207	3,424	5,415
年效益	12,488	1,236	45,454	59,178

(二)聚合改規格運用AI品質指標作回饋控制並尋找最佳副料添加方式，預估減少改規格降級量28%如下：

單位：噸/年、NTD千元/年

廠區	台灣廠	越南廠	南卡廠	合計
降級量減少	1,774	453	6,255	8,482
年效益	12,418	2,718	83,036	98,172

(三)人員精簡：

運用AI改善後，可即時回饋控制，穩定品質，減少分析頻率，預估可精簡化驗分析人員計11人(台灣廠4人、越南廠4人及南卡廠3人)，預計年效益10,970千元。

六、後續工作計劃

(一)續優化AI預測模型及減少降級量：

1. 優化AI模型並應用副料調整最佳化演算法，再縮短改規格時間；
預定2021年3月完成，預估年效益32,724千元。
2. 整合客戶需求，減少粒規格數，集中生產，由34項減少至28項(減少6項)，降低改規格次數，減少降級量1,040噸/年，
預定2021年6月完成，預估年效益12,037千元。

(二)其他製程(紡絲、假撚)AI運用：

1. 紡絲：建立紡絲設備製程穩定度指標、紡絲噴絲頭壓力預測絲束黏度模型，監控紡絲製程，穩定品質減少斷絲，預計可提升A級率0.5%，預估年效益18,429千元。
2. 假撚：建立假撚斷絲原因自動判斷模型，以假撚斷絲圖形及張力數據，由AI自動判斷斷絲原因，可即時處理減少斷絲，預計可提升A級率1.0%，預估年效益30,752千元。

報告完畢
恭請指示

附件、專有名詞中英文對照表

項次	英文縮寫	英文全名	中文名稱	說明
1	DCS	Distributed Control System	分散控制系統	生產製程所使用的電腦化控制系統，由分散在系統中不同節點的處理器所組成的控制系統。
2	Linear	Linear Regression Model	線性迴歸模型	用線性函式去擬合一組資料並使得損失最小的模型。
3	Ridge	Ridge Regression Model	脊迴歸模型	加入L2正則項，有助於處理多重共線性問題。
4	Lasso	Lasso Regression Model	套索迴歸模型	加入L1正則項，有助於變數選擇。
5	XGBoost	eXtreme Gradient Boosting Model	極限梯度提升模型	決策樹演算法集大成的最終學習模型。
6	R^2	Coefficient of Determination	決定係數或判定係數	迴歸模型裡可解釋離差平方和與總離差平方和的比值。
7	RMSE	Root Mean Square Error	均方根誤差	均方根誤差代表預測的值和觀察到的值之差的樣本標準差，又稱標準誤差，均方根誤差是一項迴歸指標。
8	MAPE	Mean Absolute Percentage Error	平均絕對百分比誤差	預測值與觀測值誤差百分率的平均值，平均絕對百分比誤差是一項迴歸指標。

