



台灣化學纖維股份有限公司  
FORMOSA CHEMICALS & FIBRE CORPORATION

# 台灣化學纖維股份有限公司

## 化工三部

### 龍德PTA廠4-CBA品質控制優化

報告人：江慶堂  
2020年7月15日

【密】 【會後收回】

# 內 容

一、化三部AI推動規劃

二、4-CBA品質控制優化動機

三、模組開發應用成果

四、模組開發流程

五、結論及後續推動事項

## 化三部AI專案彙總

年效益單位：千元

類 別	AI專案數量			年效益 (已完成)
	委外	自行開發	合計	
(一)製程優化	7 (1)	3 (1)	10 (2)	81,516 (10,443)
(二)品質優化	1 (0)	4 (1)	5 (1)	33,682 (16,939)
(三)設備預警	1 (0)	2 (2)	3 (2)	-
(四)工廠安全	2 (0)	0 (0)	2 (0)	-
合 計	11 (1)	9 (4)	20 (5)	115,198 (27,382)

- 製程優化專案有10件，預期年效益81,516千元，已完成2件，年效益10,443千元，初期主要透過產學合作，目前以自行開發為主。

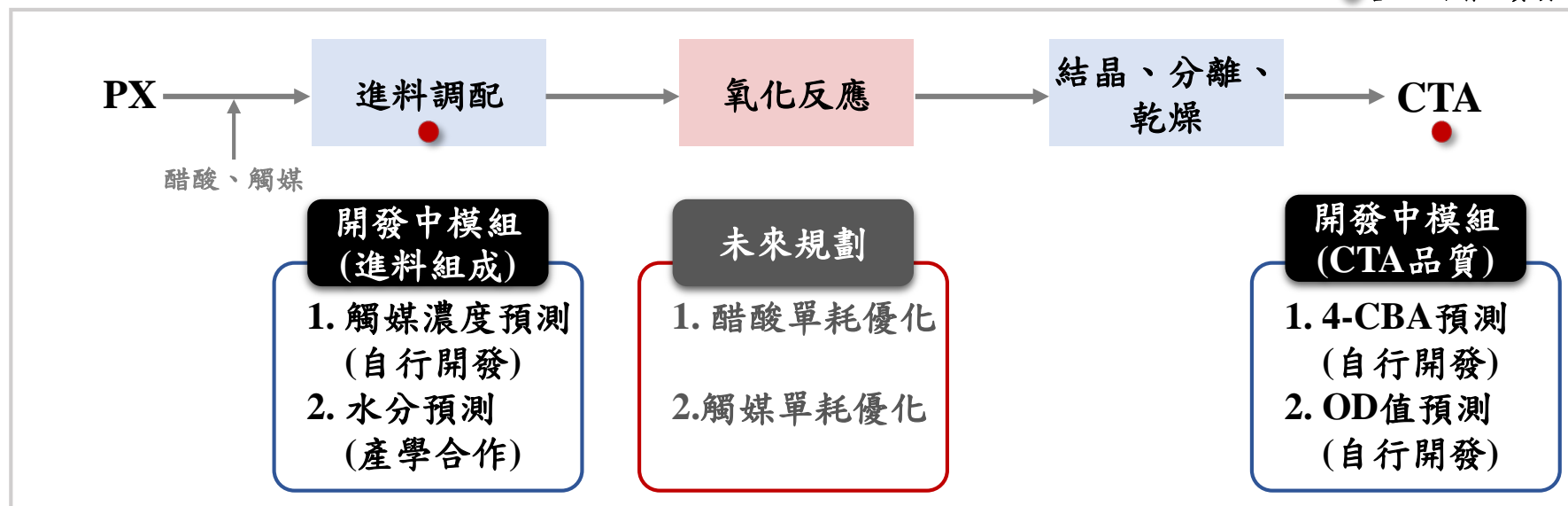
類別	項次	項目名稱	合作單位	預完/完成日	年效益(千元)
(一)製程優化	1	麥寮廠CTA蒸餾塔穩定控制(第一階段)	北科大	2018/10 完成	10,443
	2	麥寮廠CTA蒸餾塔穩定控制(第二階段)		2020/10	11,138
	3	麥寮廠結晶高壓蒸汽節能與粒徑分析	台科大	2020/8	26,935
	4	麥寮廠高壓過濾機(RPF)優化	自行開發	2020/8	-
	5	龍德廠CIA氧化塔反應穩定控制	北科大	2020/9	2,586
	6	龍德廠CTA蒸餾塔穩定控制	金波數位	2020/12	15,440
	7	醋酸廠成品塔及丙酸塔穩定控制	北科大	2020/9	958
	8	醋酸廠iEM監控分析系統診斷規劃	自行開發	2019/10 完成	-
	9	醋酸廠POx反應器進料單元最佳化操作	華貿企業	2021/6	13,292
	10	寧波廠冷卻水系統用電優化	自行開發	2021/6	724
小計					81,516

- 品質優化專案有5件，其中1案是委託長庚AI中心，其餘4案為自行開發，預期年效益33,682千元；設備預警有3件、工廠安全有2件。

類別	項次	項目名稱	合作單位	預完/完成日	年效益(千元)
(二)品質優化	1	麥寮廠PTA成品平均粒徑及細粒徑預測管控	長庚AI中心	2020/10	-
	2	麥寮廠4-CBA品質控制優化	自行開發	2020/9	16,743
	3	龍德廠4-CBA品質控制優化	自行開發	2020/5 (完成)	16,939
	4	龍德廠CTA V205觸媒組成預測管控	自行開發	2020/9	-
	5	龍德廠CTA品質OD控制優化	自行開發	2020/12	-
	小計				33,682
(三)設備預警	1	利用iEM軟體開發設備健康度監診	自行開發	2020/5 (完成)	-
	2	利用PRiSM軟體開發設備健康度監診	自行開發	2019/5 (完成)	-
	3	麥寮廠氫化塔進料泵軸封智能監控診斷	工研院	2021/3	-
(四)工廠安全	1	龍德電氣室高壓盤操作人員穿著安全防護監測	廣宣科技	2021/1	-
	2	醋酸廠氫氣管線洩漏監控系統	強將實業	2020/12	-
合計	20	四大類別自行開發合計共9件(年效益34,406千元)			115,198

## 氧化段製程

● 含人工取樣品質項目

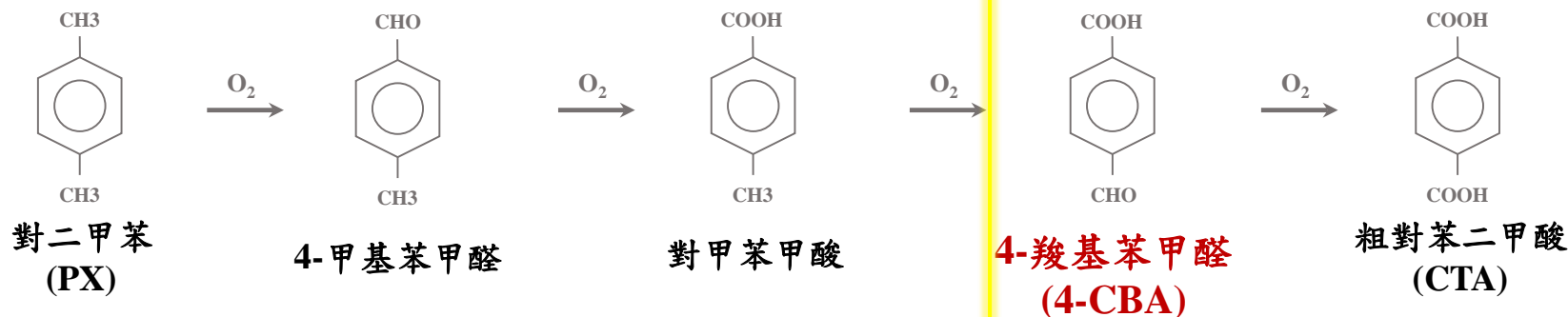


- 氧化反應為CTA製程核心，影響成品的品質與醋酸、觸媒單耗，但進料調配組成與CTA品質皆為人工取樣，每4小時只有一筆數據，因此本部須先開發預測模組，建立代替人工取樣的軟儀錶點，讓數據連續化。
- 目前正在開發4個品質預測模組，在進料調配單元，有觸媒濃度預測與水分預測；在CTA品質方面，有4-CBA預測與OD值(光學密度)預測。
- 後續將規劃整合，開發氧化反應單元的醋酸單耗與觸媒單耗優化模組。

❗ 為什麼要先進行氧化段的4-CBA品質控制優化？

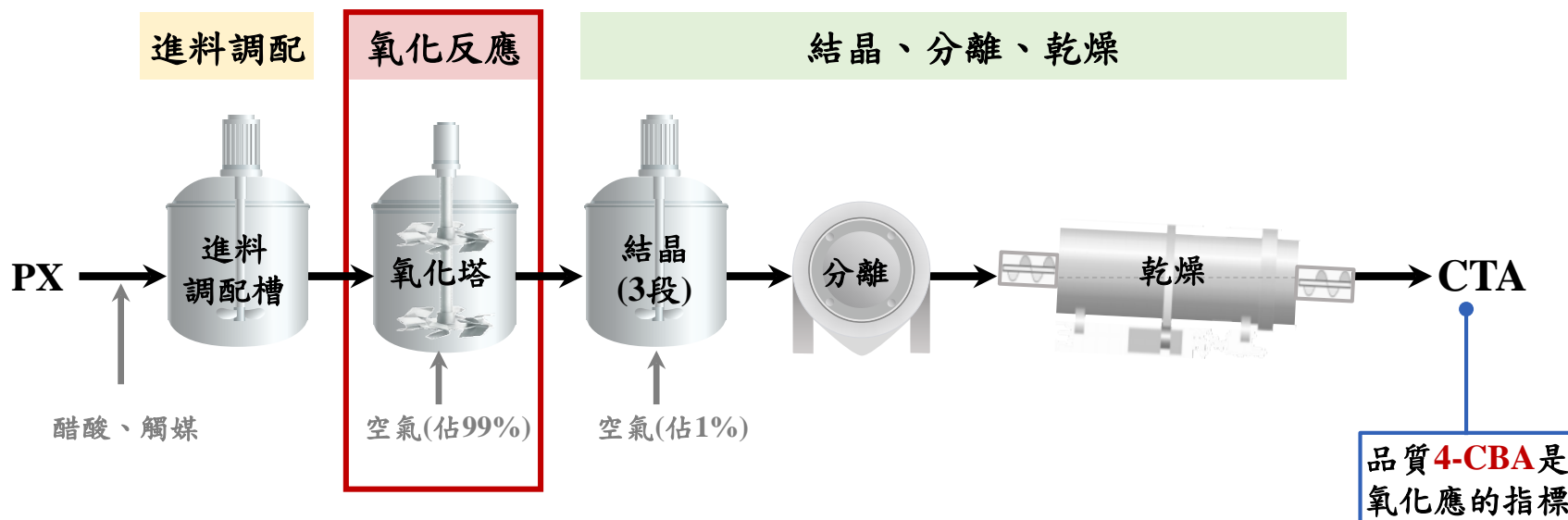
- 4-CBA(4-羧基苯甲醛)是PX氧化反應速率決定步驟的反應物，4-CBA含量高低可以做為鑑定反應好壞及穩定的指標。

### PX氧化反應式



- 氧化反應為劇烈放熱反應，**反應不穩定**造成氧化塔溫度晃動大，會**增加PX、醋酸燃燒損失**，並且伴隨生成的不純物含量較多，為確保品質，須提高醋酸母液purge量，**增加觸媒單耗**。

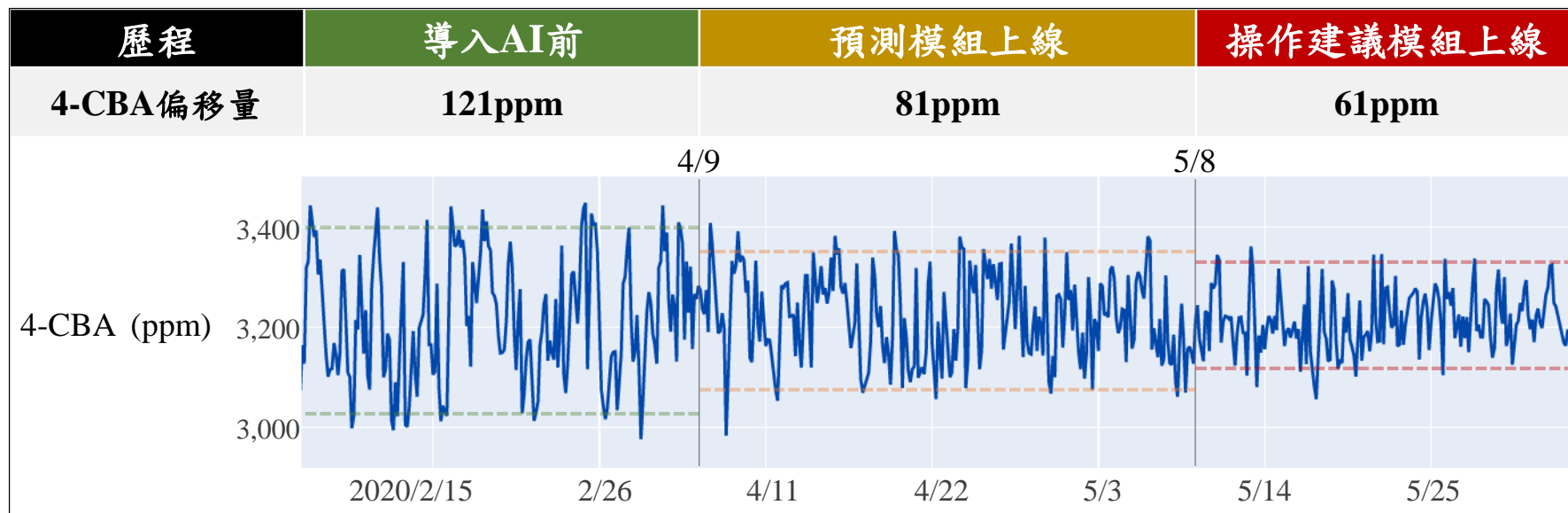
### 氧化段製程流程





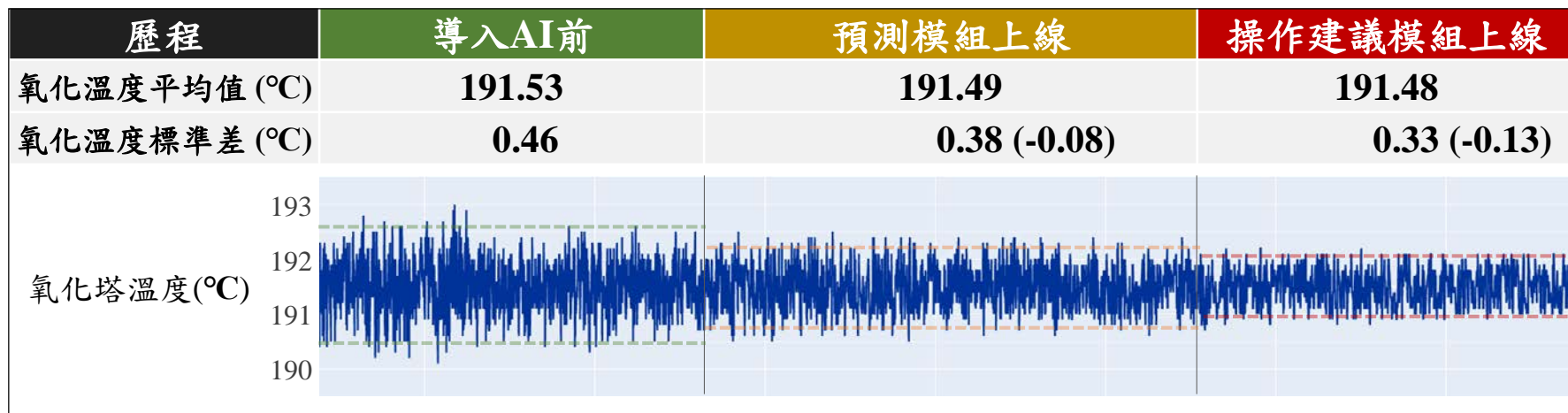
## ○【成果一】 4-CBA品質穩定度提升

1. **導入AI前**，盤控人員須根據每4小時取樣檢驗的結果，依照SOP調整製程，4-CBA平均**偏離量 121ppm**。
2. 第一個**預測模組**上線後，每30分鐘提供4-CBA預測值，盤控人員可即時依照SOP調整製程，平均**偏移量降為 81ppm**。
3. 第二個**操作建議模組**上線後，結合SOP提供製程條件量化的調整建議，平均**偏移量降為61ppm**。

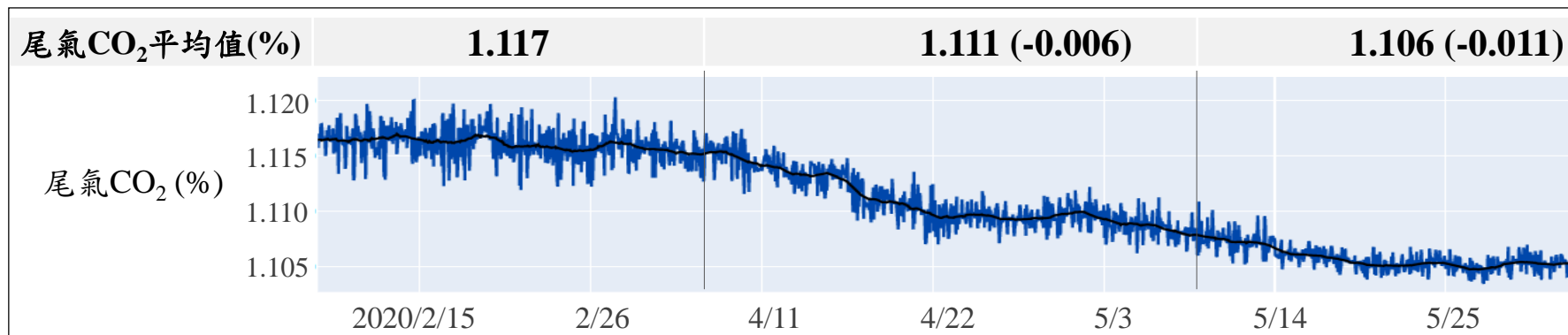


## ○ 氧化反應溫度穩定度提升

4-CBA偏移量降低，表示**反應穩定**，氧化塔溫度標準差由 $0.46^{\circ}\text{C}$ 降為 $0.33^{\circ}\text{C}$ 。

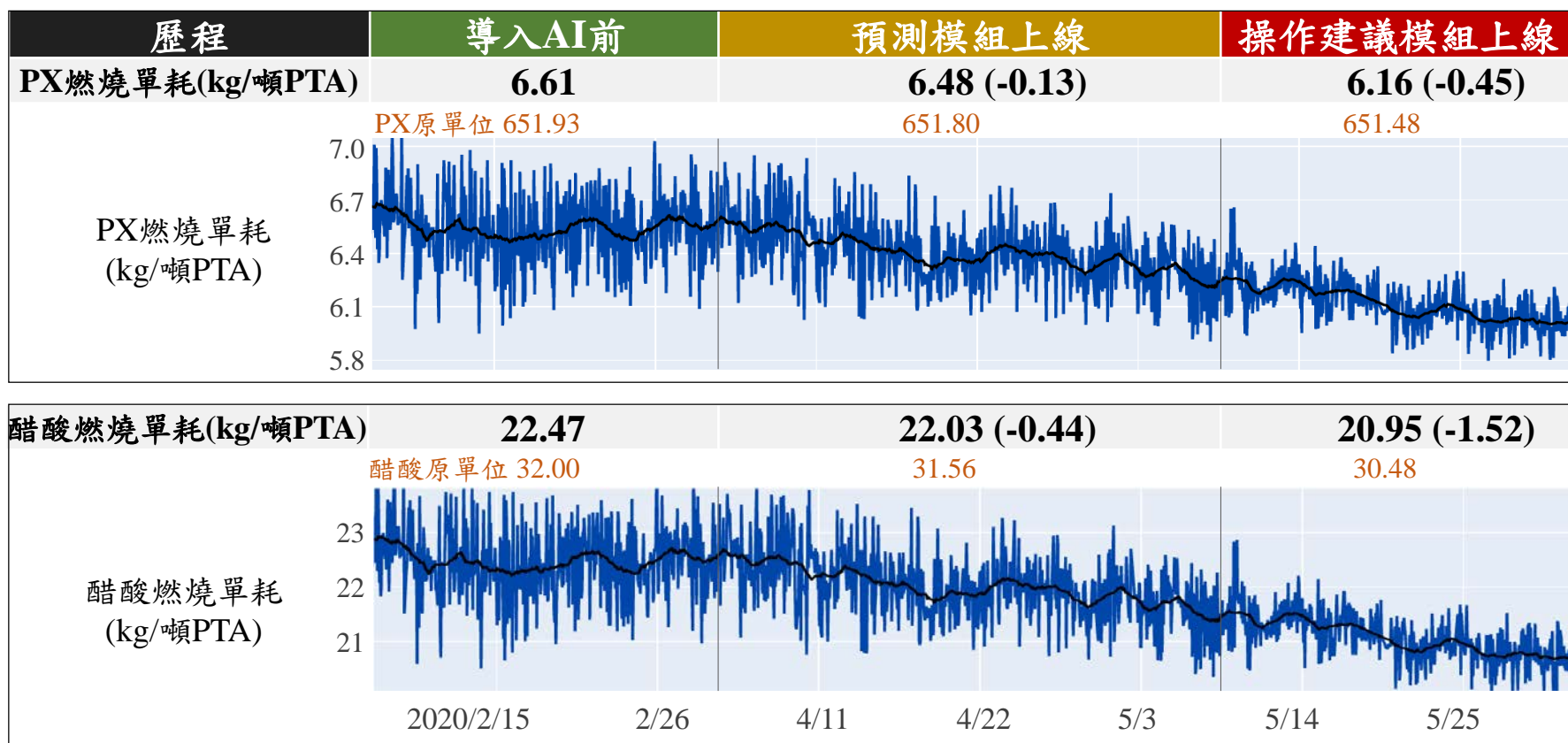


尾氣 $\text{CO}_2$ 由 $1.117\%$ 降為 $1.106\%$  ( $-0.011\%$ )，反映出**PX及醋酸燃燒損失減少**。



## ○【成果二】PX及醋酸燃燒單耗降低

折算PX燃燒單耗降低0.45 kg/噸PTA，年效益6,086千元；醋酸燃燒單耗降低1.52 kg/噸PTA，年效益10,853千元，合計年效益**16,939千元**。



※ PX與醋酸原單位包含氧化反應、燃燒損失、母液pruge損失、尾氣挾帶等，由CO<sub>2</sub>可推算燃燒損失單耗。

➤ 定義問題：

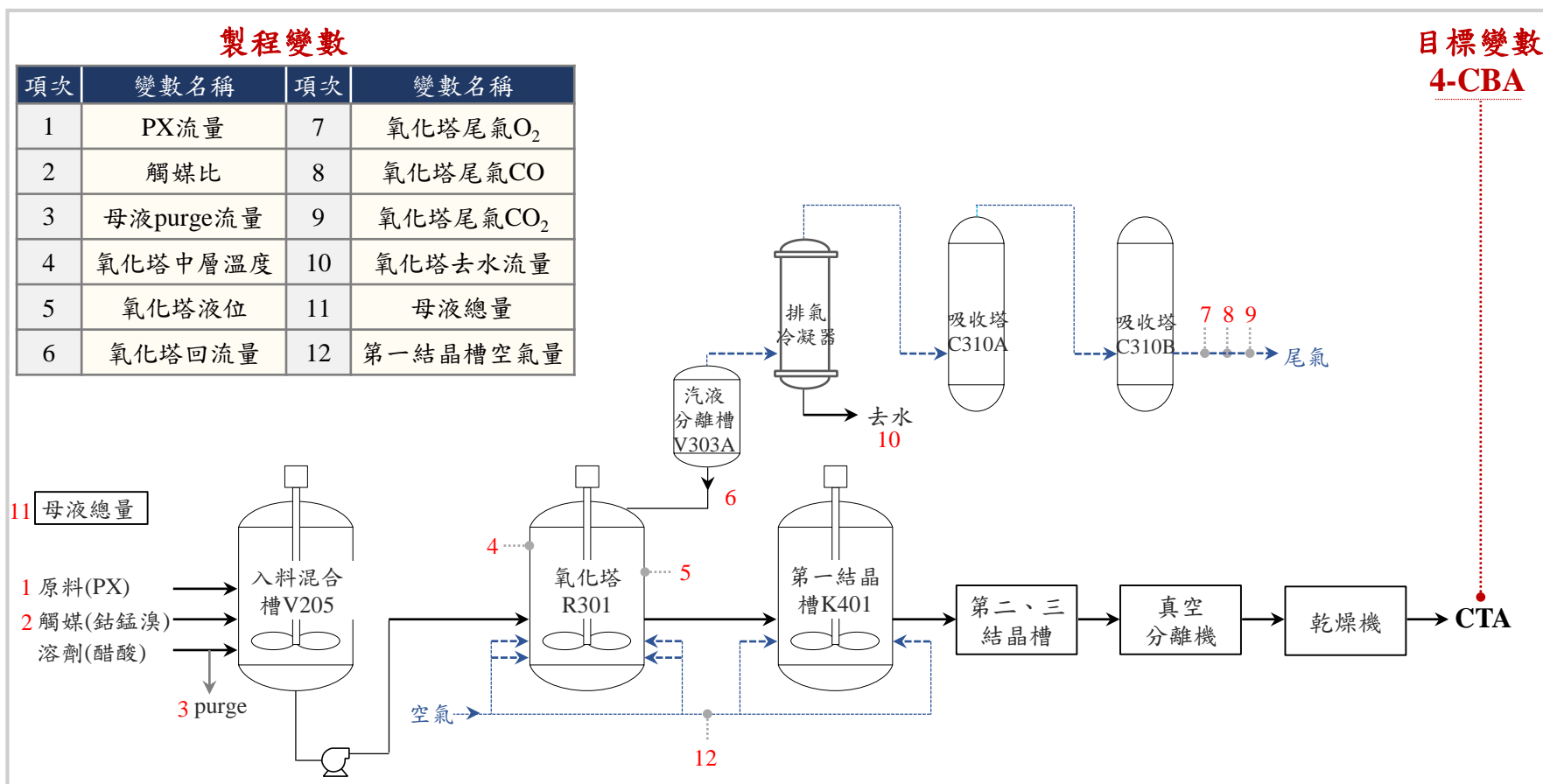
CTA粉品質主要指標4-CBA，目前每4小時由人工取樣送品管檢驗，盤控人員根據分析結果，依照SOP調整製程條件，**存在品管數據量不對等、調整時間落後及製程時間不對齊問題**，影響品質穩定度。

➤ 專案目標：

以4-CBA為目標，透過多變量分析，**發展AI預測及操作建議模組**，協助盤控人員提早因應調整，提升品質的穩定度，降低PX、醋酸燃燒損失。

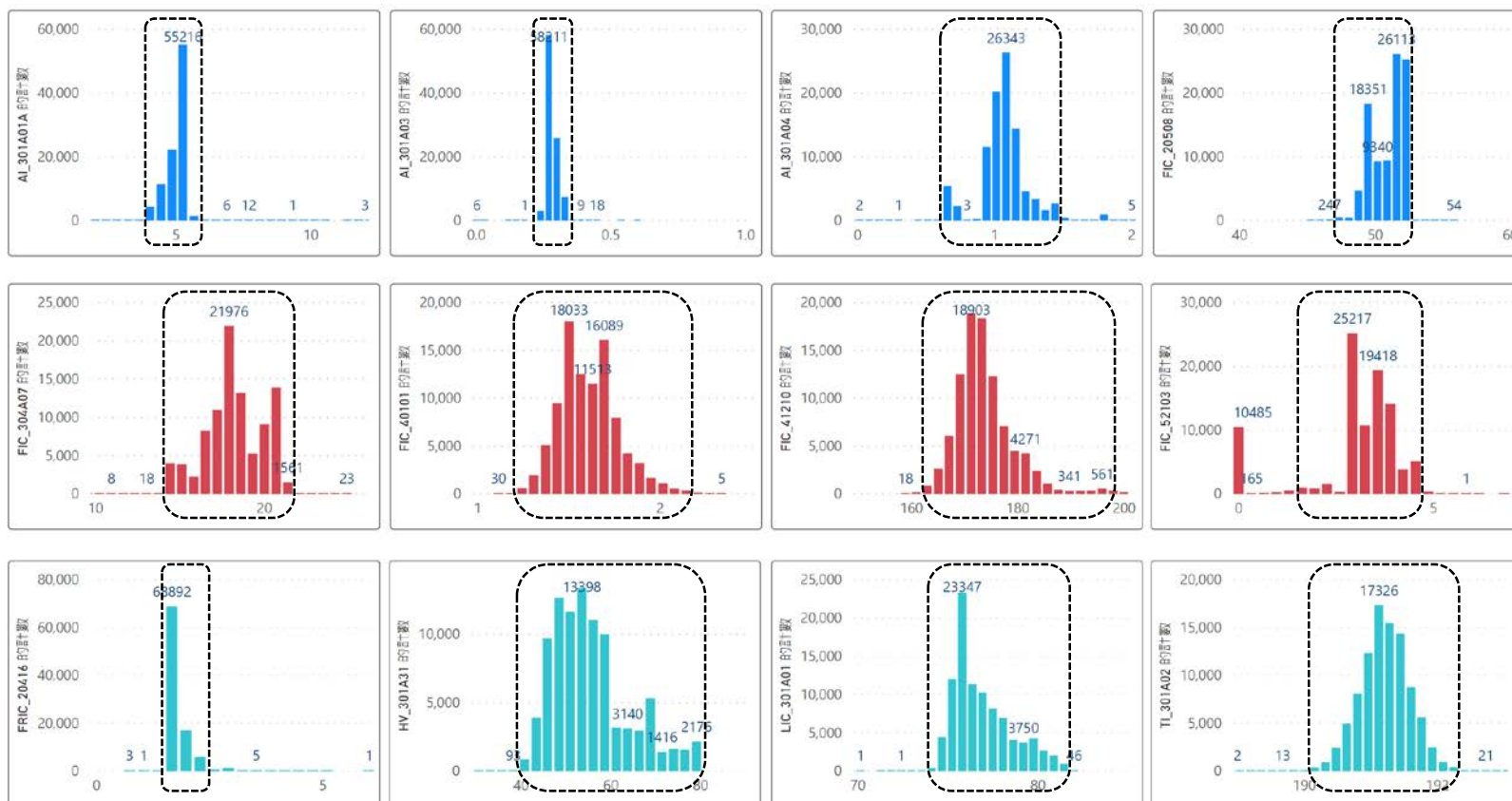
## 1. 數據收集：

收集2019/11至2020/1的4-CBA分析數據(每4小時一筆，共419筆)及氧化反應相關的12個製程變數數據(每分鐘一筆，共9.5萬筆)。



## 2. 異常值處理：

剔除製程異常或停開車產生的離群值，保留製程穩定時的數據，數據量由9.5萬筆降至8萬筆。



剔除3倍標準差以外的數據



### 3. 數據標準化：

因每個變數的單位尺度不同，使用Z分數進行標準化轉換，將原始數據轉為平均值等於0、標準差等於1的分佈型態，提高準確度。

原始儀錶點數據  
(每個變數落在不同範圍)

time	PTA3-DCS-FIC_40101.PV	PTA3-DCS-LIC_301A01.PV	PTA3-DCS-LIC_301B03.PV	PTA3-DCS-TI_301B11.PV
2019-12-31 23:01:00	1.463507	77.667190	77.755833	191.023709
2019-12-31 23:02:00	1.464478	77.796714	77.682159	190.994493
2019-12-31 23:03:00	1.469656	78.228240	78.141642	191.065570
2019-12-31 23:04:00	1.458934	78.724828	78.732147	191.145090
2019-12-31 23:05:00	1.411694	78.744752	78.712053	191.224611
2019-12-31 23:06:00	1.395878	78.608471	78.494589	191.304131
2019-12-31 23:07:00	1.444106	78.459902	78.300360	191.383651
2019-12-31 23:08:00	1.491995	78.299407	78.118770	191.452985
	⋮	⋮	⋮	⋮

標準化轉換

數據標準化  
(各變數縮放至特定區間)

time	PTA3-DCS-FIC_40101.PV	PTA3-DCS-LIC_301A01.PV	PTA3-DCS-LIC_301B03.PV	PTA3-DCS-TI_301B11.PV
2019-12-31 23:01:00	-0.924609	-1.318849	-1.053741	-1.031830
2019-12-31 23:02:00	-0.912330	-0.962676	-1.250343	-1.146163
2019-12-31 23:03:00	-0.846890	0.223965	-0.024192	-0.868012
2019-12-31 23:04:00	-0.982393	1.589518	1.551597	-0.556818
2019-12-31 23:05:00	-1.579436	1.644306	1.497974	-0.245624
2019-12-31 23:06:00	-1.779325			
2019-12-31 23:07:00	-1.169807			
2019-12-31 23:08:00	-0.564552	0.419665	-0.085226	0.648096
	⋮	⋮	⋮	⋮

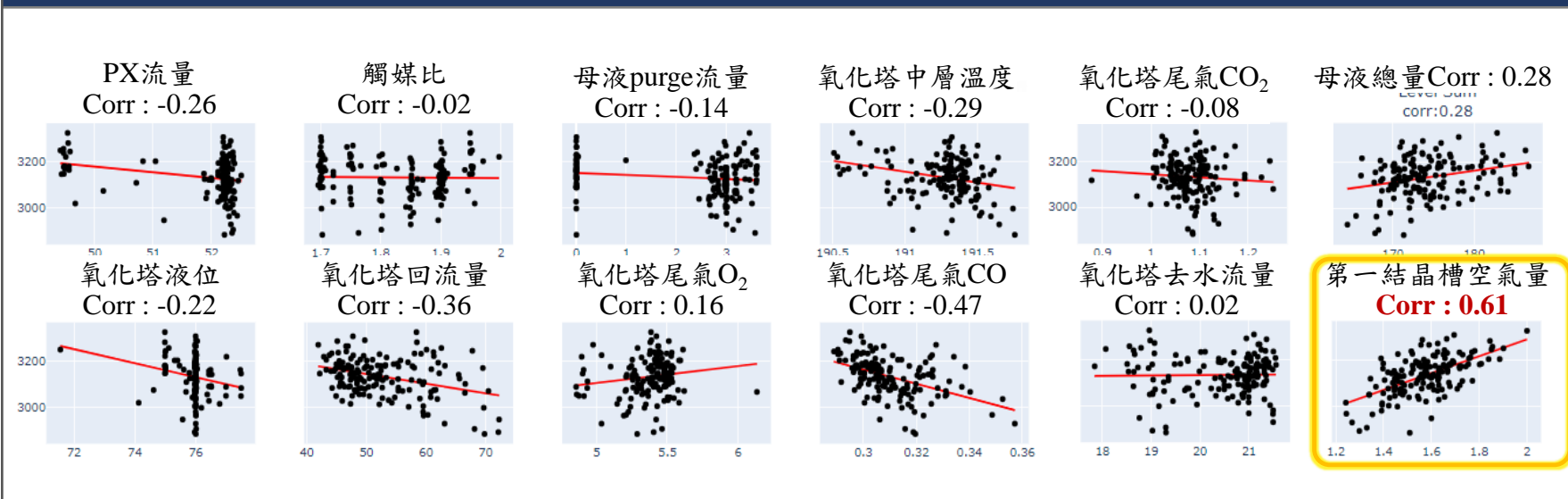
經轉換後，每個欄位(變數)數據皆為平均值等於0、標準差等於1的分佈。

## 數據探索分析

- 將選定的12個可能影響4-CBA變化的變數，進行探索性分析。
- 以皮爾森相關分析法，發現第一結晶槽空氣量(二次氧化)與4-CBA相關性最高，與製程操作經驗相符。
- 兩者相關係數為0.61，未達高度相關標準(相關係數0.7以上)，無法直接用於預測4-CBA。

各變數與4-CBA的散佈圖

時間：2019 /11~2020/1

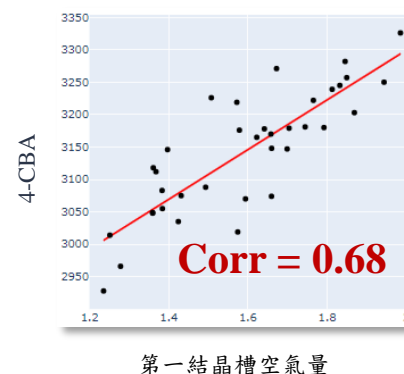
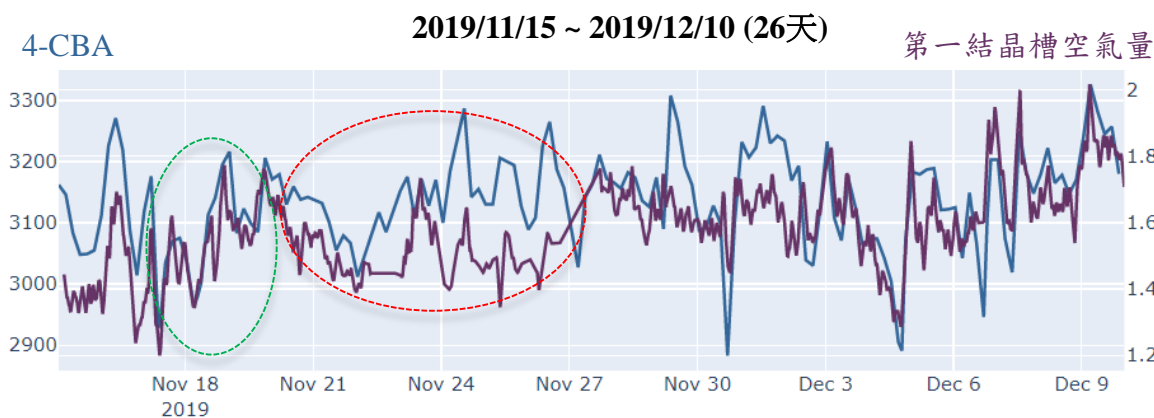




- 分析2019/11至2020/1數據，第一結晶槽空氣量與4-CBA整體的變化趨勢雖然同步，但相關係數只達0.61(中度相關)，**經過仔細觀察發現在不同時段存在不同差值**，才導致整體相關程度下降。
- **嘗試縮短時間分析**，先以26天的數據計算，相關係數可提升到0.68。

第一結晶槽空氣量、4-CBA趨勢圖(26天的時間區段)

空氣量與4-CBA相關程度

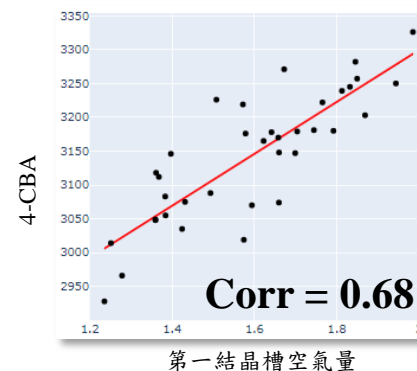
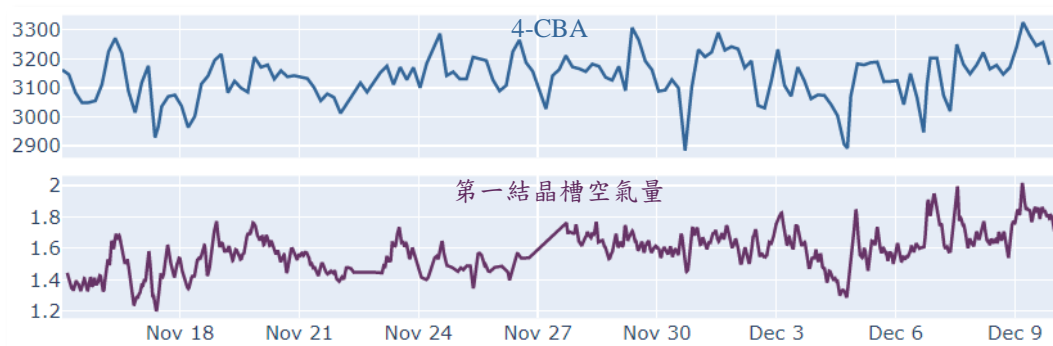


- 再進一步將時間段縮短為13天分析，相關係數可提升到0.7以上(分別為0.72及0.78)，達高度相關標準，可用來預測4-CBA。

第一結晶槽空氣量、4-CBA趨勢圖(26天的時間區段)

空氣量與4-CBA相關程度

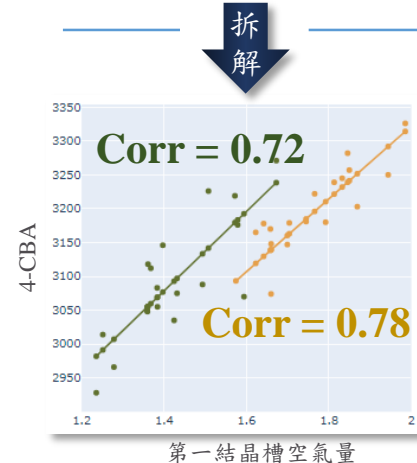
2019/11/15 ~ 2019/12/10 (26天)



拆解

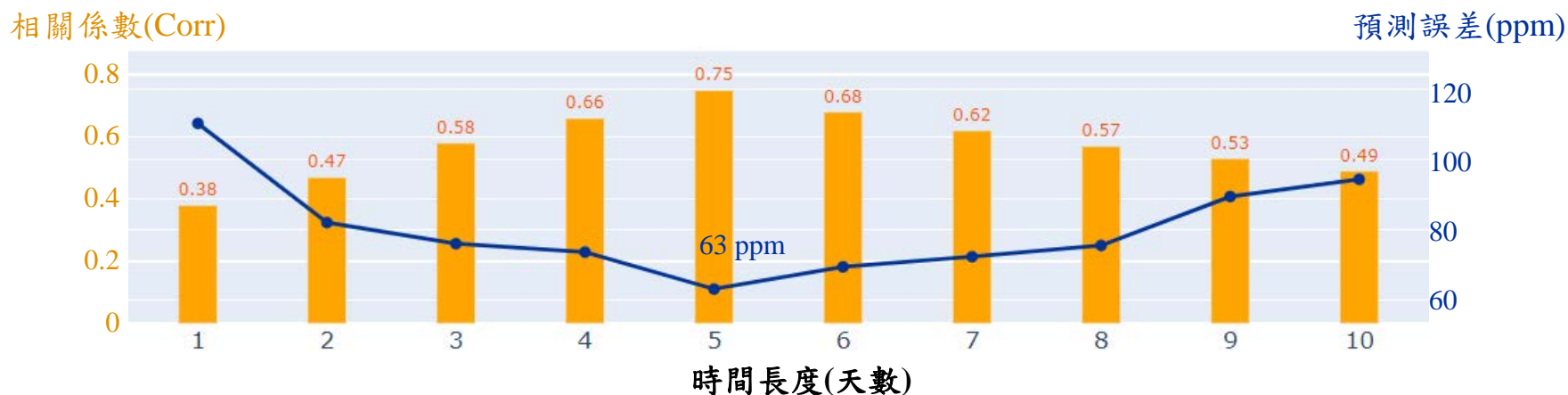
11/15 ~ 11/28 (13天)

11/29 ~ 12/10 (13天)



## ○ 預測模組建立

- 分別測試以1天、2天、3天、...、10天的時間長度，計算第一結晶槽空氣量與4-CBA的相關係數，結果顯示時間長度過長或過短皆不佳，最終以5天為單位，相關係數最高，同時透過迴歸分析預測的誤差也最低。



- 依照上述測試的結果，設計滾動式模組，隨著時間遞延，持續不斷讀取最近5天的數據，組成訓練集動態更新參數。

# 四

## 模組開發流程

定義問題  
與目標

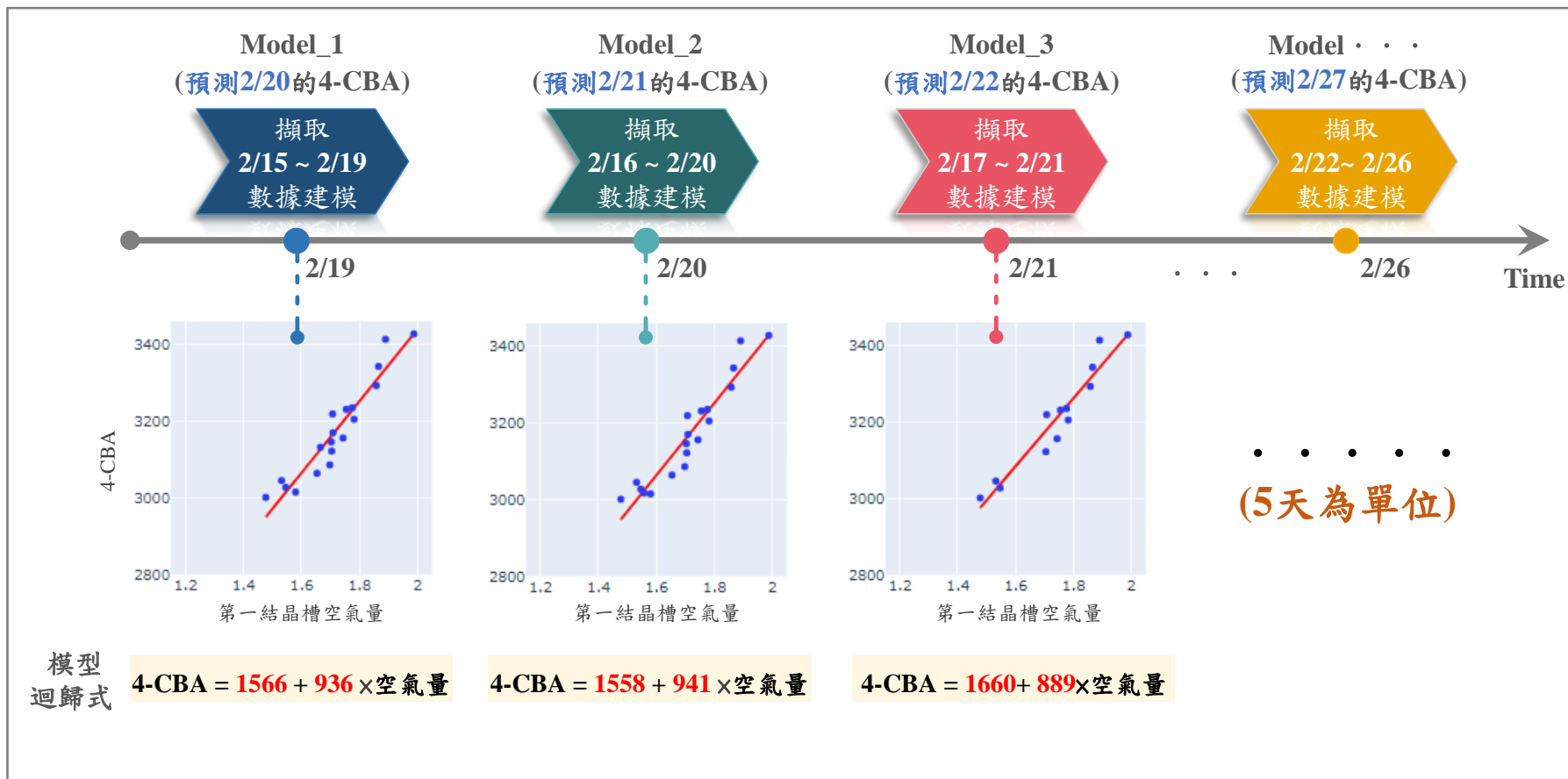
數據盤點  
與前處理

預測  
模組建立

操作建議  
模組建立

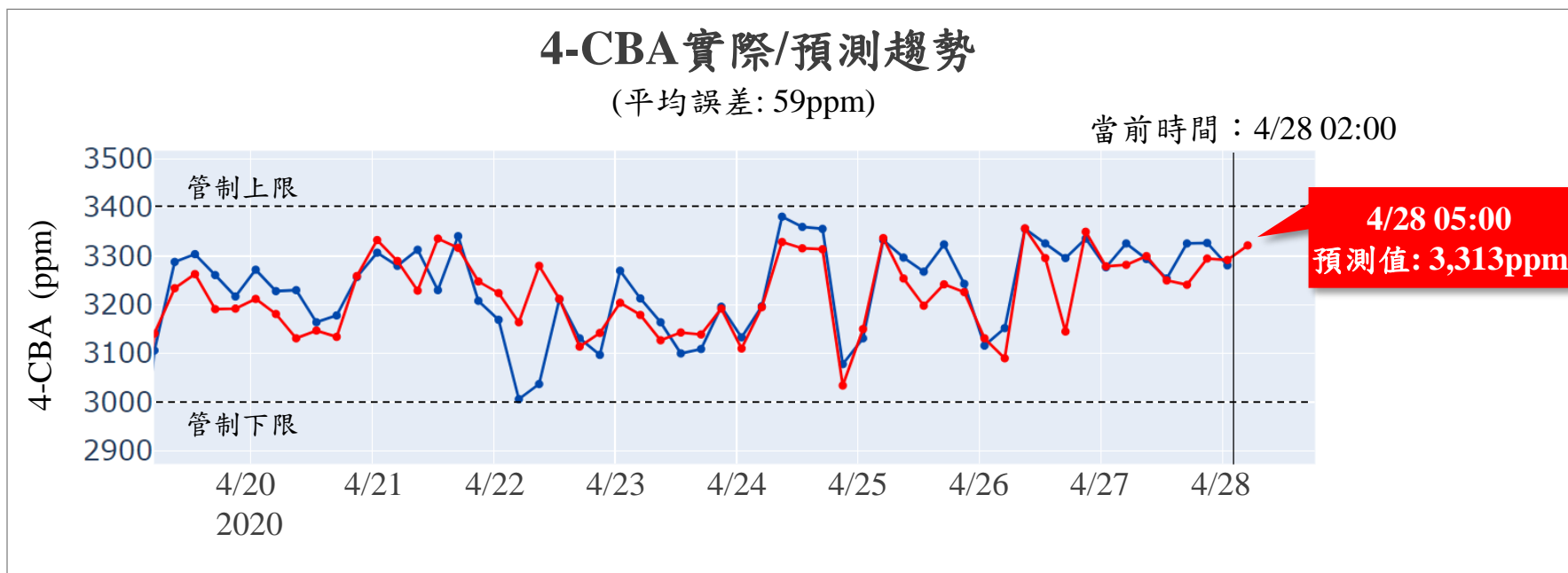
線上  
應用

### 滾動式建模



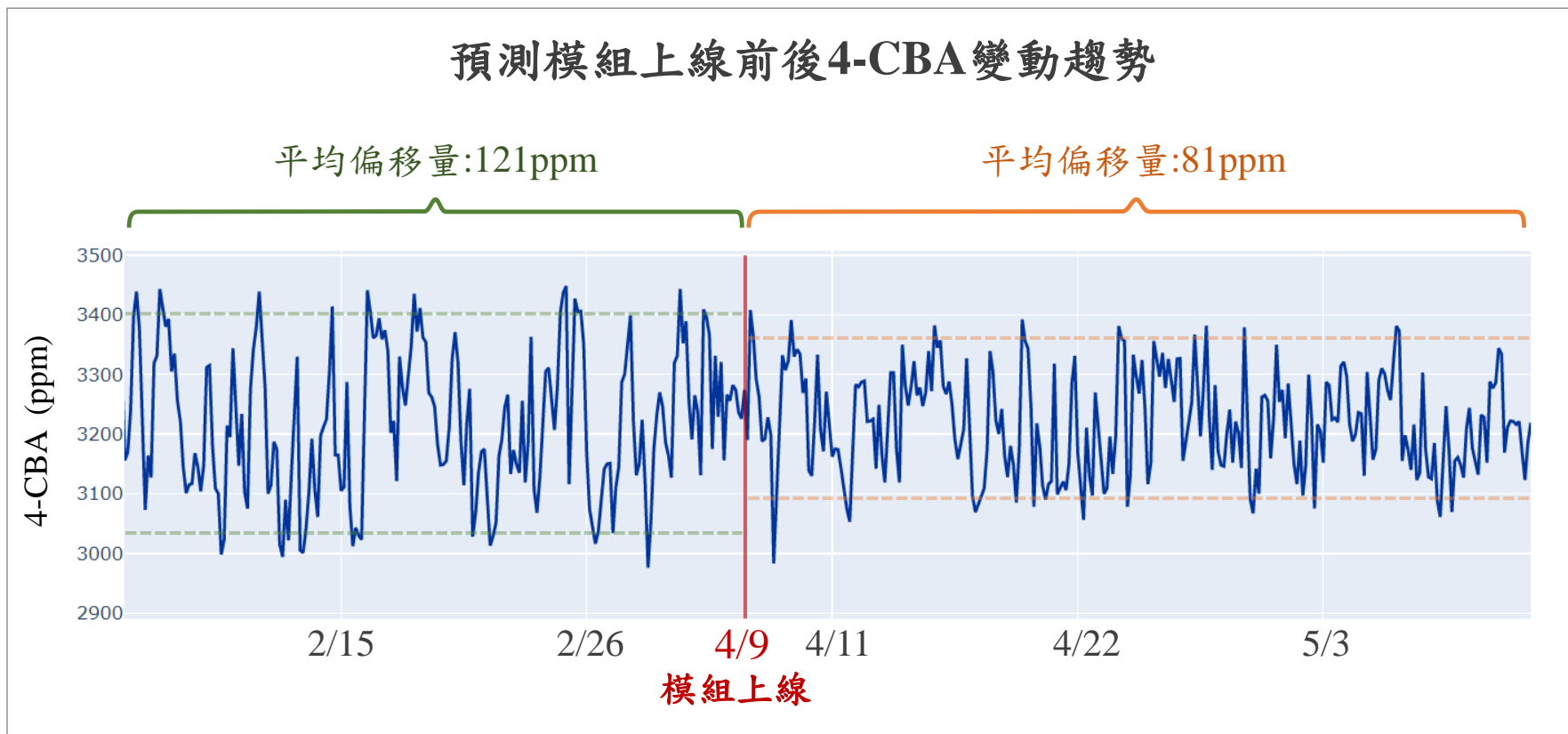
## ○ 模組準確度評估

- 預測模組讀取第一結晶槽空氣量，可提早預測 3 小時後(第一結晶槽至乾燥機出口取樣點的時間) 4-CBA 品質，並設定每 30 分鐘計算一次。
- 4/9~5/8 上線應用，4-CBA 實際和預測值的平均絕對誤差為 59ppm，趨勢正確率 77%，**預測模組已具備參考性**，可供製程做為調整依據。



## ○ 模組應用成果

- 預測模組上線後，盤控人員可即時預知 4-CBA 變化，並依SOP做調整，4-CBA 平均偏離量(與管制中心值3,200ppm差異)由121ppm降為81ppm。



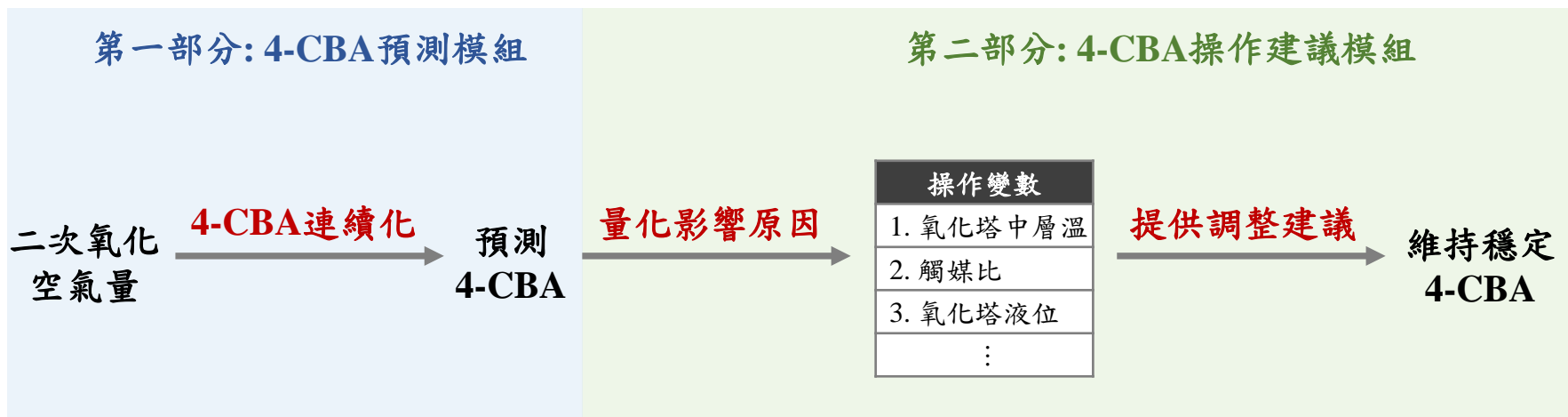
## 第一部分: 4-CBA預測模組

- 提前預測4-CBA變化，建立軟儀錶點將4-CBA品質連續化。
- 解決品管分析數據與製程條件時間不對齊的問題。

## 第二部分: 4-CBA操作建議模組

- 利用預測模組提供的4-CBA軟儀錶點，建立操作建議模組。
- 提供調整方向及調整量。

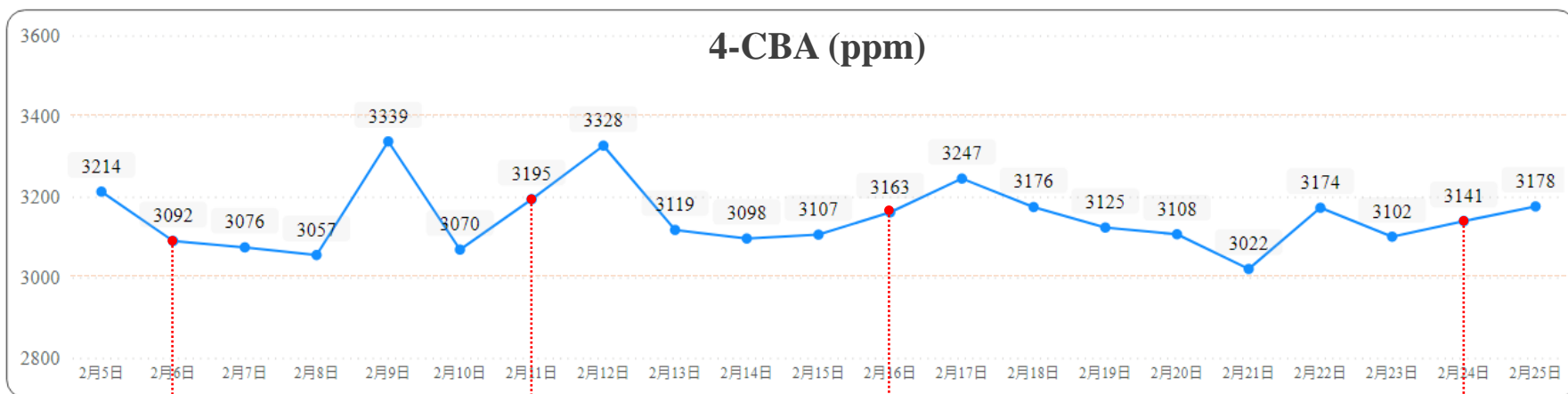
### 預測及操作建議模組架構





## 數據探索分析

- 氧化反應的製程變數是動態的組合，使用固定權重的模型無法描述實際製程特性，因此以**滾動方式進行迴歸分析**。
- 將12個變數，扣除二次氧化空氣量(預測模組)及4個不可控變數，剩下7個可控變數與4-CBA迴歸，結果顯示**權重的排序會隨時間改變**。



### 權重排序(2/6)

- 1.觸媒比
- 2.氧化塔中層溫度
- 3.PX流量
- 4.氧化塔液位
- 5.母液總量
- 6.母液purge流量
- 7.氧化塔尾氣O<sub>2</sub>

### 權重排序(2/11)

- 1.氧化塔中層溫度
- 2.母液總量
- 3.觸媒比
- 4.氧化塔尾氣O<sub>2</sub>
- 5.氧化塔液位
- 6.母液purge流量
- 7.PX流量

### 權重排序(2/16)

- 1.母液總量
- 2.氧化塔液位
- 3.氧化塔中層溫度
- 4.PX流量
- 5.母液purge流量
- 6.觸媒比
- 7.氧化塔尾氣O<sub>2</sub>

### 權重排序(2/24)

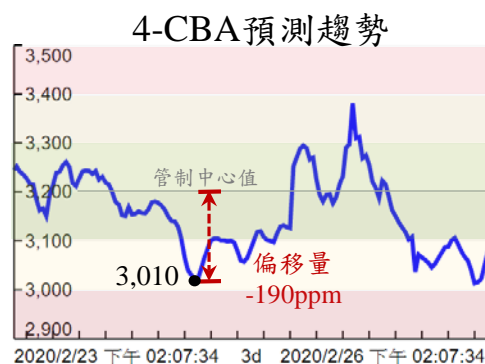
- 1.PX流量
- 2.氧化塔中層溫度
- 3.觸媒比
- 4.氧化塔液位
- 5.母液purge流量
- 6.氧化塔尾氣O<sub>2</sub>
- 7.母液總量



## ○ 操作建議模組建立

- 步驟一：透過預測模組計算4-CBA總偏移量，並標示預警狀態。
- 步驟二：使用PLSR(偏最小平方法迴歸)，計算7個可控變數各別偏移量。
- 步驟三：透過操作建議模組，提供變數調整方向及調整量。

### 步驟一



正常範圍  $|\text{偏移量}| \leq 50$

異常範圍  $|\text{偏移量}| \geq 200$

警戒範圍  $50 < |\text{偏移量}| < 200$

### 步驟二

可控變數	偏移量
PX流量	+14 ppm
觸媒比	-97 ppm
母液purge流量	+17 ppm
氧化塔中層溫度	-55 ppm
氧化塔液位	-42 ppm
氧化塔尾氣O <sub>2</sub>	-6 ppm
母液總量	-21 ppm
總偏移量: -190 ppm	

### 步驟三

可控變數	增加1單位	影響4-CBA
PX流量	0.1 T/H	↑ 1 ppm
觸媒比	0.05	↓ 23 ppm
母液purge流量	0.2 T/H	↑ 4 ppm
氧化塔中層溫度	0.1 °C	↓ 26 ppm
氧化塔液位	0.1 %	↓ 5 ppm
氧化塔尾氣O <sub>2</sub>	0.1 %	↓ 7 ppm
母液總量	1 T/H	↓ 7 ppm

➤ 步驟二：使用PLSR，計算7個可控變數各別偏移量

$$\text{總偏移量} = \sum_{i=1}^7 \beta_i \times X_i$$

可控變數名稱	$\beta_i$ (權重)		$X_i$ (標準化數值單位)		偏移量
PX流量	$\beta_1$	35.5	$X_1$	0.4	+14 ppm
觸媒比	$\beta_2$	-71.9	$X_2$	1.36	-97 ppm
母液purge流量	$\beta_3$	27.7	$X_3$	0.61	+17 ppm
氧化塔中層溫度	$\beta_4$	-23.8	$X_4$	2.32	-55 ppm
氧化塔液位	$\beta_5$	-47.6	$X_5$	0.88	-42 ppm
氧化塔尾氣O <sub>2</sub>	$\beta_6$	-13.4	$X_6$	0.45	-6 ppm
母液總量	$\beta_7$	19.1	$X_7$	-1.11	-21 ppm
		$\beta_i$ : 模型計算	$X_i$ : 標準化後的單位數		總偏移量: -190 ppm

- 權重 $\beta_i$ ：表示各變數影響4-CBA的強度，決定後續調整影響4-CBA的力道
- 標準化數值單位 $X_i$ ：表示各變數原始值經過標準化(Z分數)轉換後的數值
- 偏移量：表示各變數導致4-CBA偏離管制中心的量化值

### ➤ 步驟三：透過操作建議模組提供變數調整方向及調整量

※ 依照各變數SOP調整的幅度，計算影響4-CBA的量。

可控變數名稱	$\beta_i$ (權重)	$X_i$ (標準化數值1單位)	影響4-CBA
PX流量	$\beta_1$	35.5	$X_1$ 1 +35.5 ppm
觸媒比	$\beta_2$	-71.9	$X_2$ 1 -71.9 ppm
母液purge流量	$\beta_3$	27.7	$X_3$ 1 +27.7 ppm
氧化塔中層溫度	$\beta_4$	-23.8	$X_4$ 1 -23.8 ppm
氧化塔液位	$\beta_5$	-47.6	$X_5$ 1 -47.6 ppm
氧化塔尾氣O <sub>2</sub>	$\beta_6$	-13.4	$X_6$ 1 -13.4 ppm
母液總量	$\beta_7$	19.1	$X_7$ 1 +19.1 ppm

由模組的權重得知，每個變數調整標準化數值1單位，可影響4-CBA的量

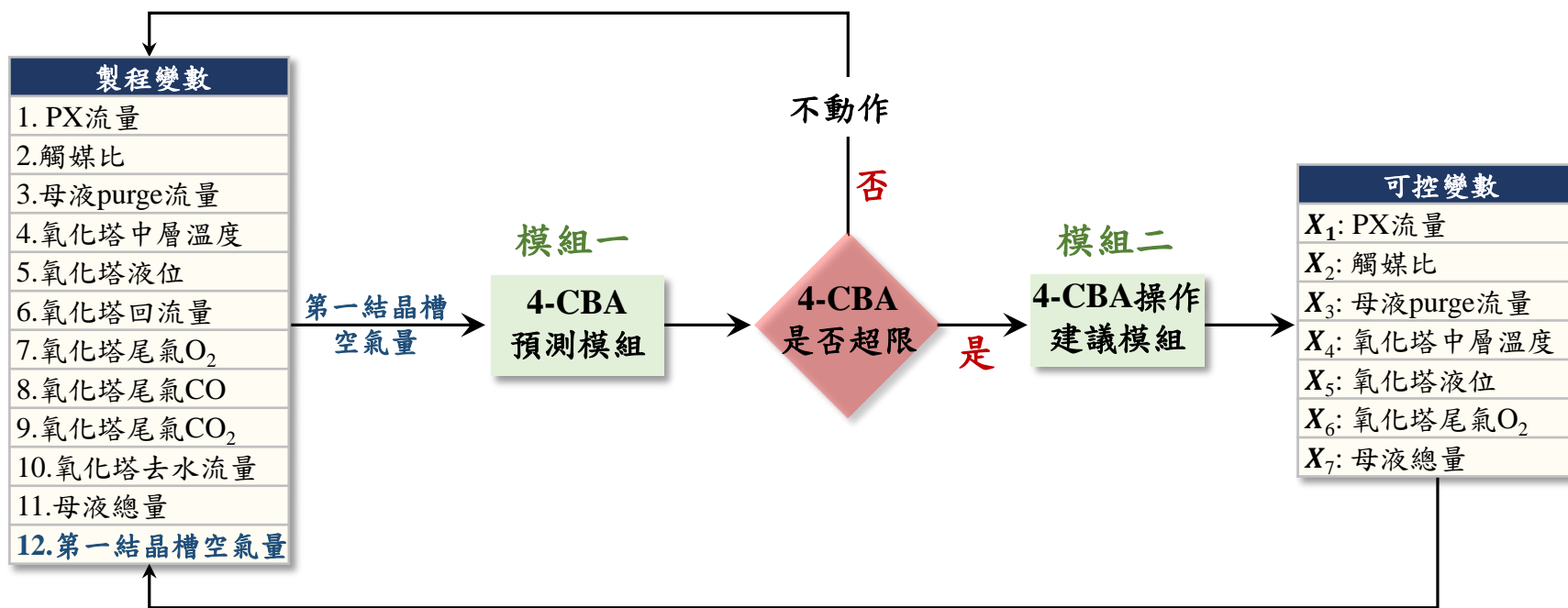


$X_i$ (原始數值1單位)	影響4-CBA
$X_1$ 0.1 T/H	↑ 1 ppm
$X_2$ 0.05	↓ 23 ppm
$X_3$ 0.2 T/H	↑ 4 ppm
$X_4$ 0.1 °C	↓ 26 ppm
$X_5$ 0.1 %	↓ 5 ppm
$X_6$ 0.1 %	↓ 7 ppm
$X_7$ 1 T/H	↓ 7 ppm

依照各變數SOP原始數值調整的幅度為單位進行轉換，計算影響4-CBA的量

## ○ 模組應用架構

- 藉由4-CBA預測模組(模組一)，判斷4-CBA是否超限。
- 當4-CBA超限時，利用操作建議模組(模組二)，提供調整方向及調整量。
- 盤控依建議值進行調整，並回饋給預測模組，再次進行判斷，形成loop持續不斷更新。



## ○ 模組上線應用說明

➤ 將預測及操作建議模組導入RTPMS，建置網頁畫面。

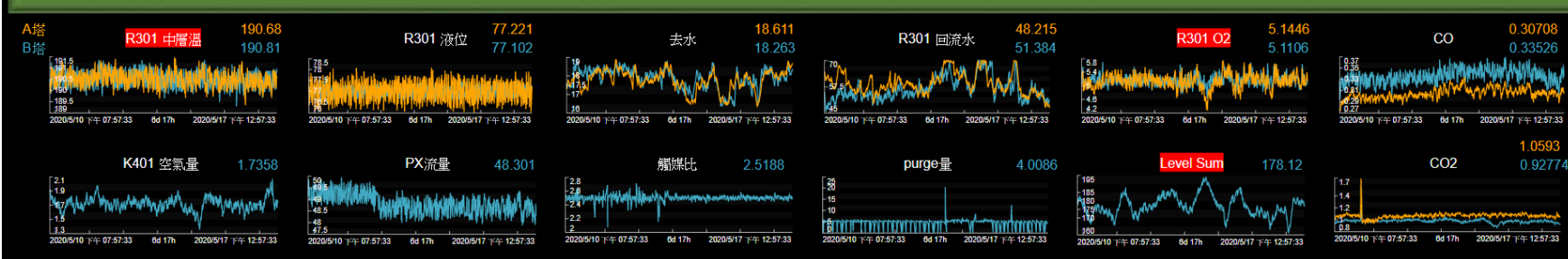
### 一、實際/預測趨勢：預測3小時後4-CBA的數值變化



### 二、量化分析：計算各變數偏移量/操作建議



### 三、各變數趨勢圖：顯示各項操作條件的變化



➤ 以下圖為例說明：

當前時間為2020/5/17 中午12:00，預測2020/5/17 下午03:00的 4-CBA值為 3,142ppm，偏離管制中心 -58ppm。



# 四

## 模組開發流程

定義問題  
與目標

數據盤點  
與前處理

預測  
模組建立

操作建議  
模組建立

線上  
應用

模組將總偏移量 -58ppm，解析7個可控變數各自的貢獻值，讓盤控了解目前4-CBA偏移的原因是由哪些可控變數的變動造成，並在下方趨勢圖中以紅色燈號警示。





當連續兩筆預測值皆高於3,250ppm或低於3,150ppm時(偏移量超出管制中心值 $\pm 50$ ppm)，初期模組以調整氧化塔溫度為優先因應對策，提供操作建議，避免影響其他品質項目。

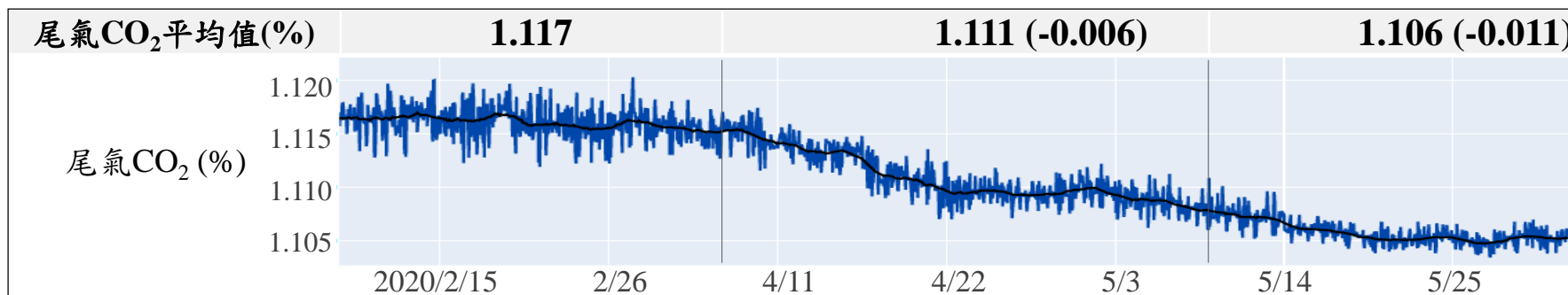
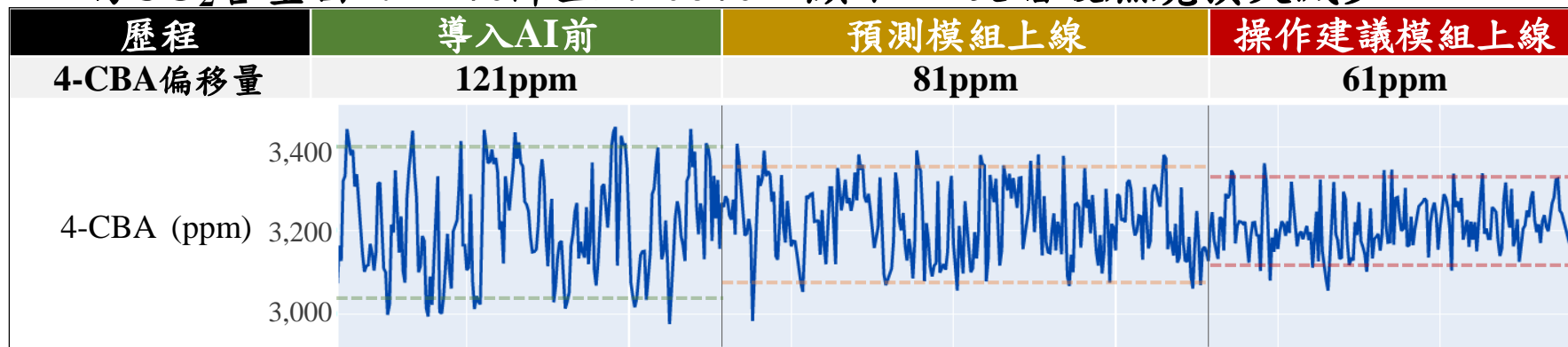
如下圖所示：連續兩筆預測值低於3,150ppm，建議氧化塔溫度調降0.2度，可提升4-CBA 47ppm





## ○ 模組應用效益

- 4-CBA品質穩定度提升，偏移量由121ppm降至61ppm，同時氧化塔尾氣的CO<sub>2</sub>含量由1.117%降至1.106%，顯示PX及醋酸燃燒損失減少。



PX原單位(kg/噸PTA)	651.93	651.80 (-0.13)	651.48 (-0.45)
醋酸原單位(kg/噸PTA)	32.00	31.56 (-0.44)	30.48 (-1.52)

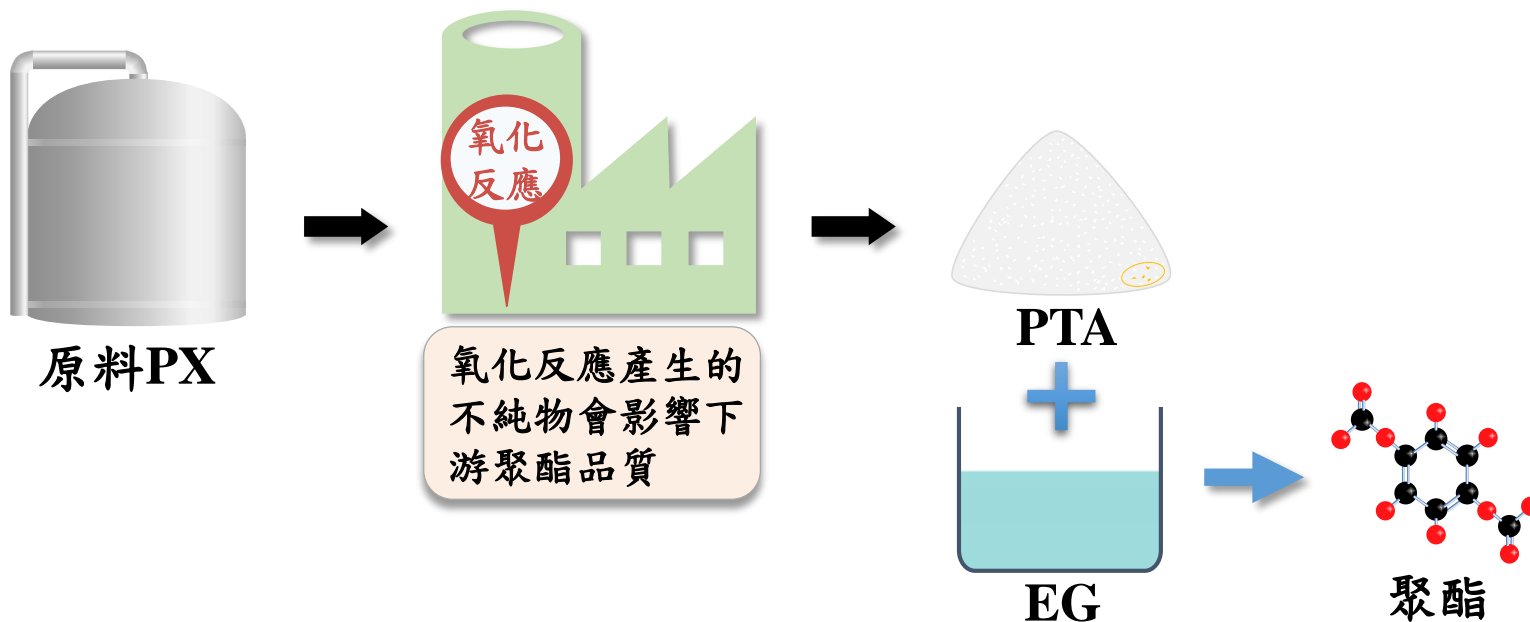
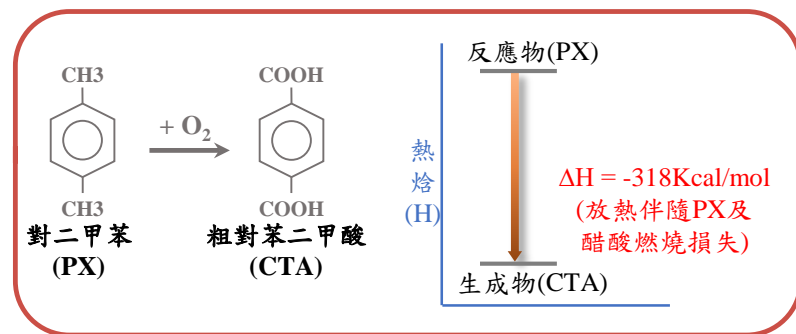
- 一. AI模組導入後，氧化反應穩定性提高，PX單耗降低0.45 KG/噸、醋酸單耗降低1.52 KG/噸PTA，年效益16,939千元。
- 二. 麥寮、寧波PTA廠，亦將比照導入4-CBA控制優化模組，達到穩定品質及降低單耗的目的。
- 三. 化三部AI專案已由初期產學合作轉為自行開發為主，建立自有的技術能力，確保模組開發效率以及可靠性。目前優先進行品質預測，解決數據不連續，與調整時間延遲落後的問題，後續將規劃整合，透過AI進一步優化氧化反應製程，降低醋酸、觸媒等單耗，降低成本來提升產品競爭力。

報告完畢

恭請指導

# 氧化段的4-CBA控制優化提高PTA粉品質穩定度

氧化為劇烈放熱反應，反應強度不同，產生的不純物種類及含量皆不同，這些不純物會影響下游聚酯斷絲率、成品色相等。氧化段的4-CBA可做為整體不純物的主要指標，藉由穩定4-CBA以提升PTA品質及客戶用料滿意度。

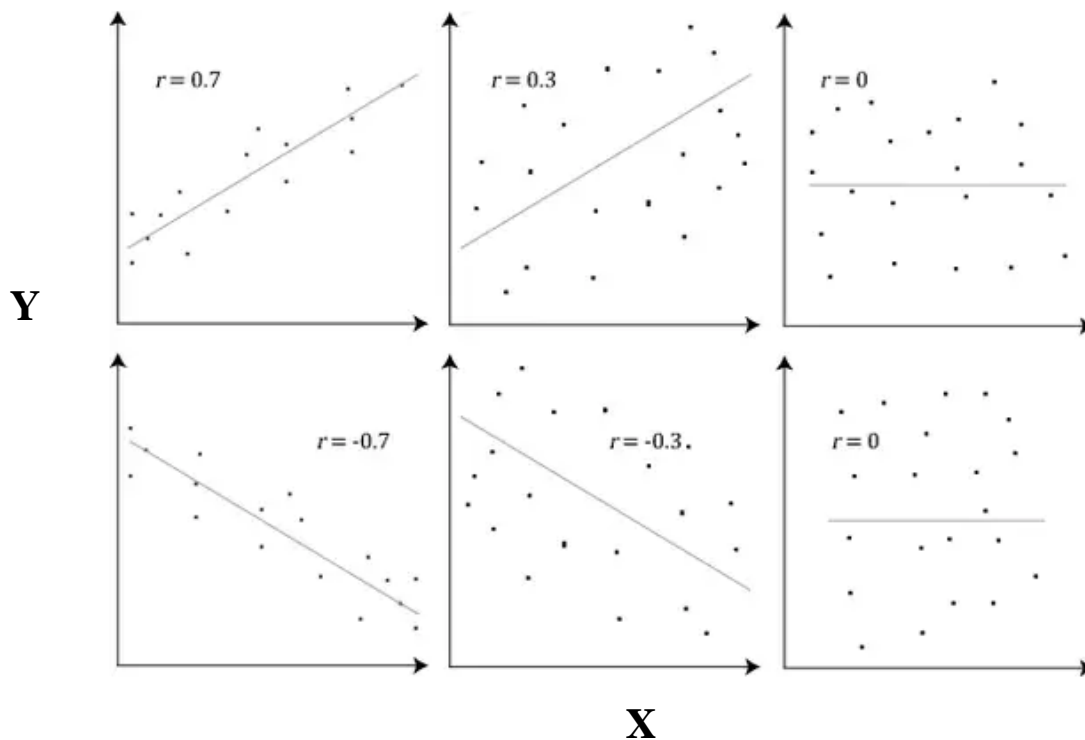


# CTA氧化塔反應不純物含量一般基準

不純物項目	簡稱	含量基準(ppm)
4-羧基苯甲醛	4-CBA	< 5,000
4,4-二羧基芪	4,4-DCS	< 2
2,6-二羧基蒽醌	2,6-DCA	< 3
2,6-二羧基芴酮	2,6-DCF	< 40
2,7-二羧基芴酮	2,7-DCF	< 8
3,5-二羧基芴酮	3,5-DCF	< 8
9-芴酮-2-羧酸	9F-2CA	< 8
9-芴酮-4-羧酸	9F-4CA	< 4
其他芴酮	Fluorenone	< 60
4,4二羧基聯苯	4,4-DCB	< 16
2,5,4-三羧基聯苯	2,5,4-TCB	< 40
鄰苯二甲酸	PA	< 1,500
間苯二甲酸	IPA	< 4,500
苯甲酸	BA	< 6,000
偏苯三酸	TMA	< 1,500
對-甲苯甲酸	PTAC	< 4,000
4,4-二羧基苯偶醌	4,4-DCBZ	< 4
4,4-二羧基二苯甲酮	4,4-DCBP	< 160
2,5,4-三羧基二苯甲酮	2,5,4-TCBP	< 80

# Pearson correlation

皮爾遜積矩相關係數( $\rho_{X,Y}$ )用於度量兩個變數X和Y之間的相關程度，其值介於-1與1之間，常用在機器學習或是統計分析上，主要衡量兩變數間線性關聯性的高低程度，探討變數間是否存在「線性」關係。



$$\rho_{X,Y} = \frac{E[(X - \mu_X)(Y - \mu_Y)]}{\sigma_X \sigma_Y}$$

相關係數 $ \rho_{X,Y} $	相關程度
0.16以下	非常低
0.16~0.29	低
0.30~0.49	中低
0.50~0.69	中
0.70~0.89	高
0.90~1.00	非常高

## PLSR(Partial least squares regression)

- 在進行迴歸分析時，通常都是多個變數 $X$ 對一個目標 $Y$ 的影響，但當涉及多個複雜的分析是多個 $X$ 對多個 $Y$ 的影響、資料存在多重共線性問題、或是樣本數量較少時，普通的多元線性迴歸無法有良好的表現，PLSR(偏最小平方法迴歸)則能很好的解決這些問題。
- PLSR集合了主成分分析、相關性分析、多元線性迴歸三者於一，可以理解為：將多個 $X$ 和多個 $Y$ ，分別濃縮為成分( $X$ 對應主成分 $U$ ， $Y$ 對應主成分 $V$ )，然後借助於典型相關原理，可分析 $X$ 與 $U$ 的關係， $Y$ 與 $V$ 的關係；以及結合多元線性迴歸原理，分析 $X$ 對於 $V$ 的關係，從而研究到 $X$ 對於 $Y$ 的關係。