

南亞塑膠工業股份有限公司

化工二部

密

丁二醇醋酸回收區節能優化

報告人：陳振溶
2021年12月1日

報告摘要

- 一、丁二醇二課(BG2)蒸汽用量102.10噸/小時(9.70噸/噸)，其中醋酸回收區32.75噸/小時佔比32.1%最高，其次為水解反應區19.40噸/小時、佔比19.0%，因水解反應的加水量越多，反應越容易進行，但水解反應區與醋酸回收區需使用的蒸汽量就越大。建立這兩個製程區的AI模型，找出最小加水量及最少蒸汽耗用。
- 二、建立水解反應區AI模型，預測水解反應後丁二醇濃度，並找到符合管制標準的最佳操作條件。
 1. 水解反應的加水量減少1.7噸/小時，水解反應區蒸汽用量減少1.50噸/小時。
 2. 送到醋酸回收區處理的醋酸水量減少2.9噸/小時。
 3. 年效益12,828千元，模型於2021/1/31上線。
- 三、建立醋酸回收區AI模型，預測回收水中的醋酸濃度，並找到符合回收水品質且蒸汽用量最小的操作條件。
 1. 來自水解反應區的醋酸水量減少2.9噸/小時，醋酸脫水塔迴流量降低0.6噸/小時，醋酸回收區蒸汽用量減少3.95噸/小時。
 2. 年效益33,401千元，模型於2021/2/20上線。
- 四、由AI專人自行開發建置。

專案完成後，BG2合計可節汽5.45噸/小時，年效益46,229千元。

後續橫向展開至BG1，預估年效益23,114千元。全廠預估年效益69,343千元。

報告內容

一、丁二醇製程說明

二、改善動機

三、模型1：水解反應區AI模型

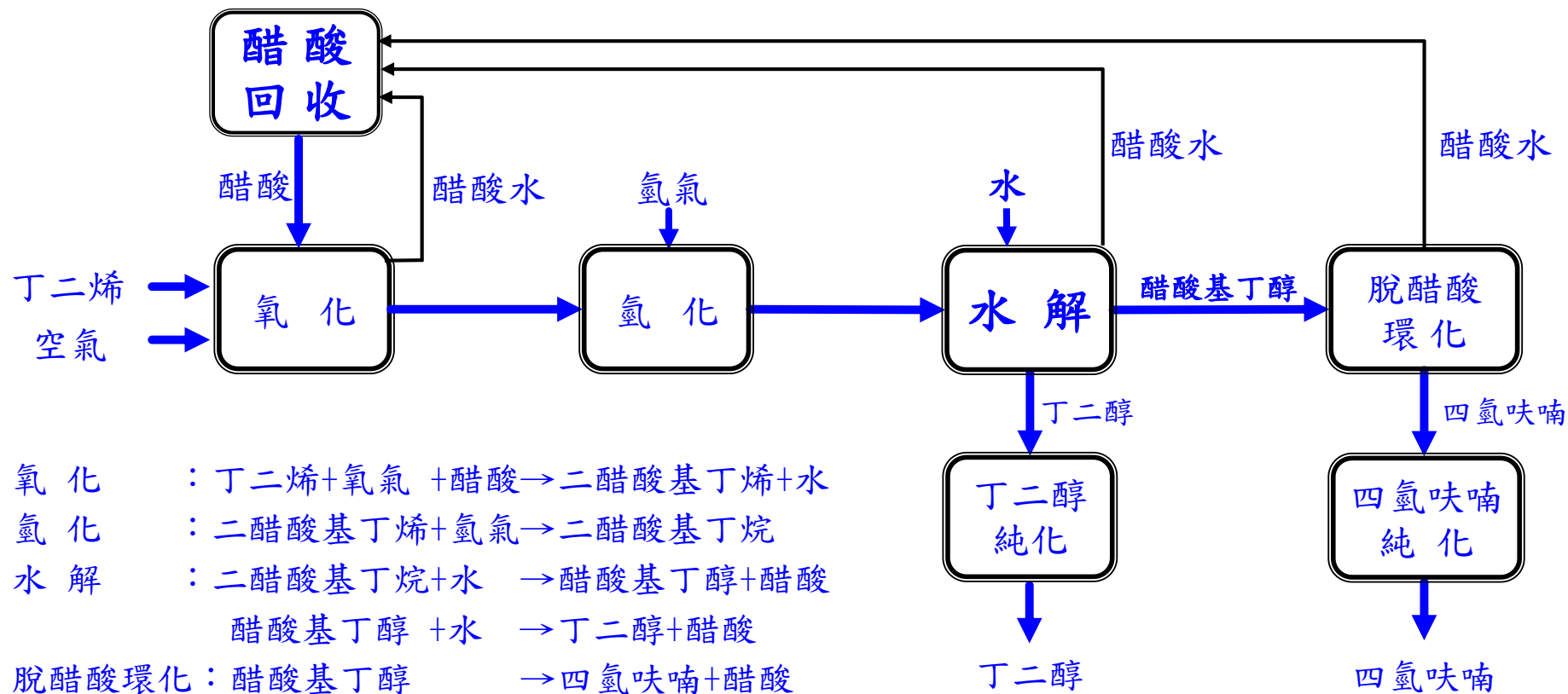
模型2：醋酸回收區AI模型

四、改善效益彙總

五、執行成果

六、後續工作

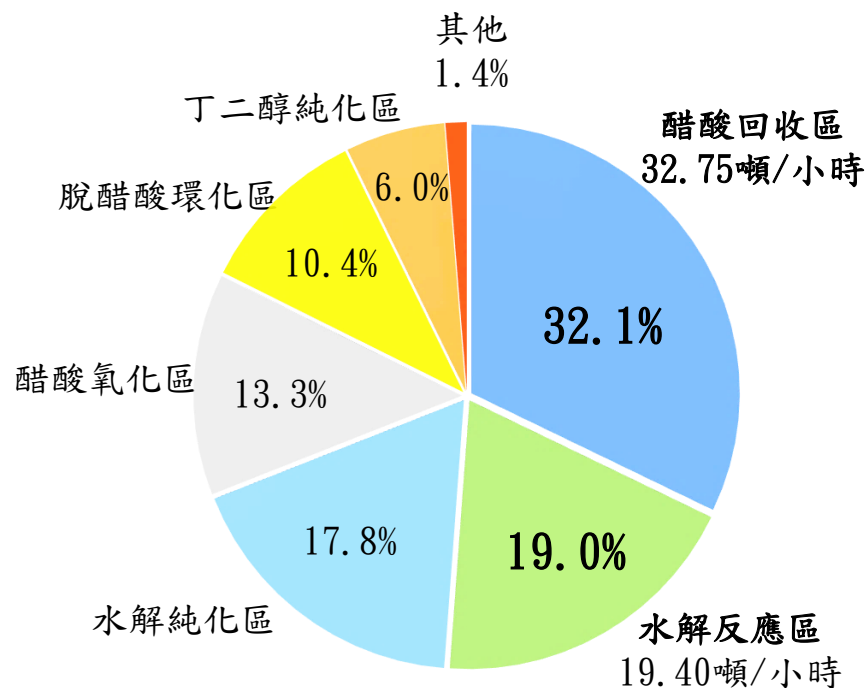
一、丁二醇製程說明



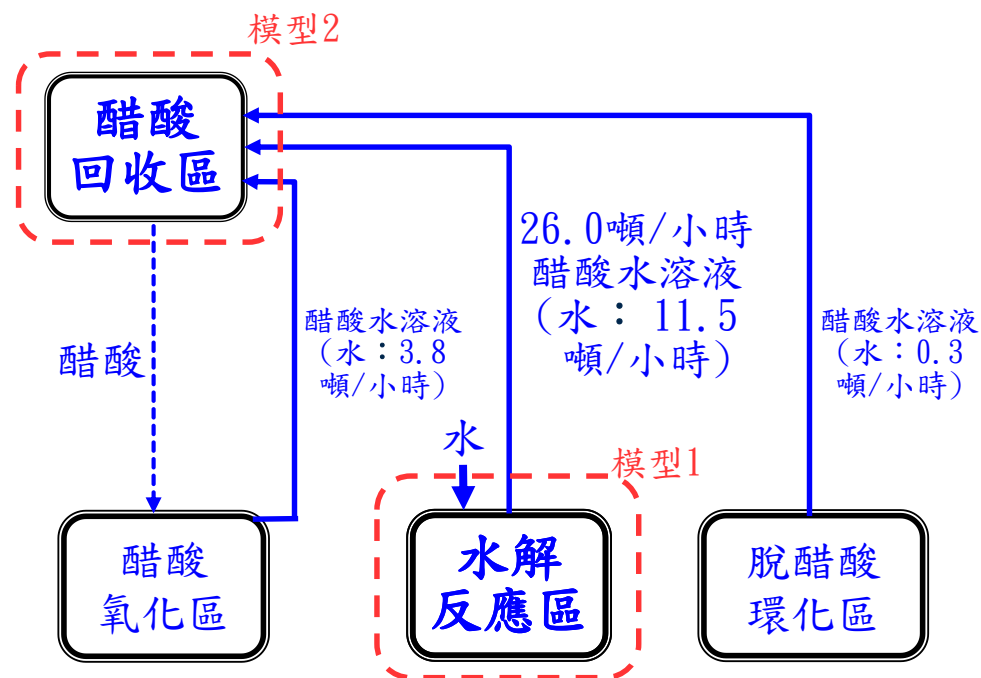
1. 丁二醇製程原料為丁二烯、空氣及過量醋酸，先由氧化反應生成中間物二醋酸基丁烯，再經氫化反應生成二醋酸基丁烷，進一步與過量水進行水解反應：
(1)單邊醋酸基水解生成醋酸基丁醇，再經脫醋酸環化反應生成四氫呋喃。
(2)雙邊醋酸基水解生成丁二醇。
2. 醋酸在製程前段參與反應，在後段會全部脫除，醋酸水需送至醋酸回收區純化再利用。

二、改善動機

各製程區蒸汽用量佔比



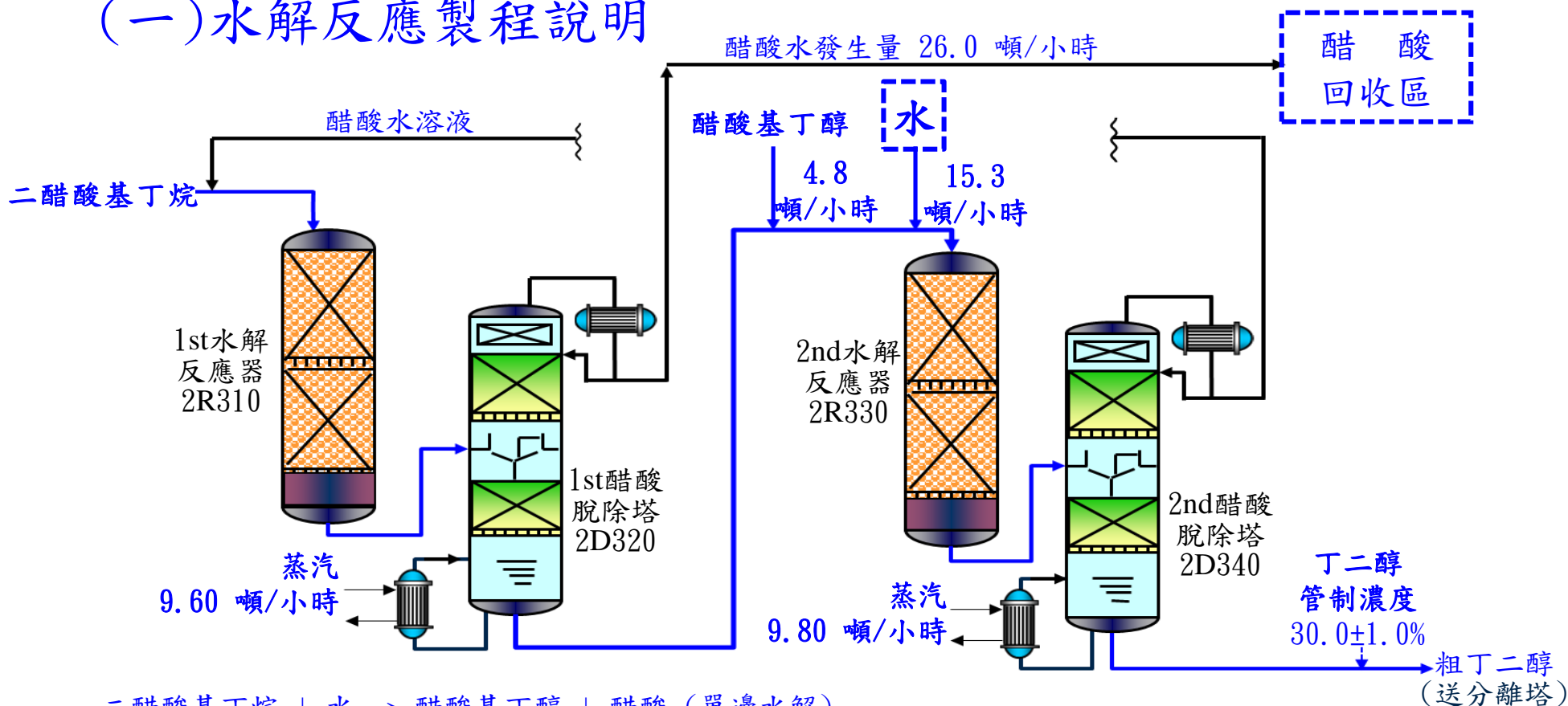
醋酸回收區入料水量比較



1. 統計丁二醇廠二課(BG2)製程區蒸汽用量以醋酸回收區32.75噸/小時(佔比32.1%)最大。
2. 醋酸回收區入料分別有醋酸氧化區、水解反應區及脫醋酸環化區，其中水解反應區醋酸水溶液含水量11.5噸/小時最高，影響醋酸回收區蒸汽耗用最大。
3. 運用AI技術建立水解反應區及醋酸回收區AI模型，找出最佳製程條件降低蒸汽耗用。

三、模型1：水解反應區AI模型

(一)水解反應製程說明



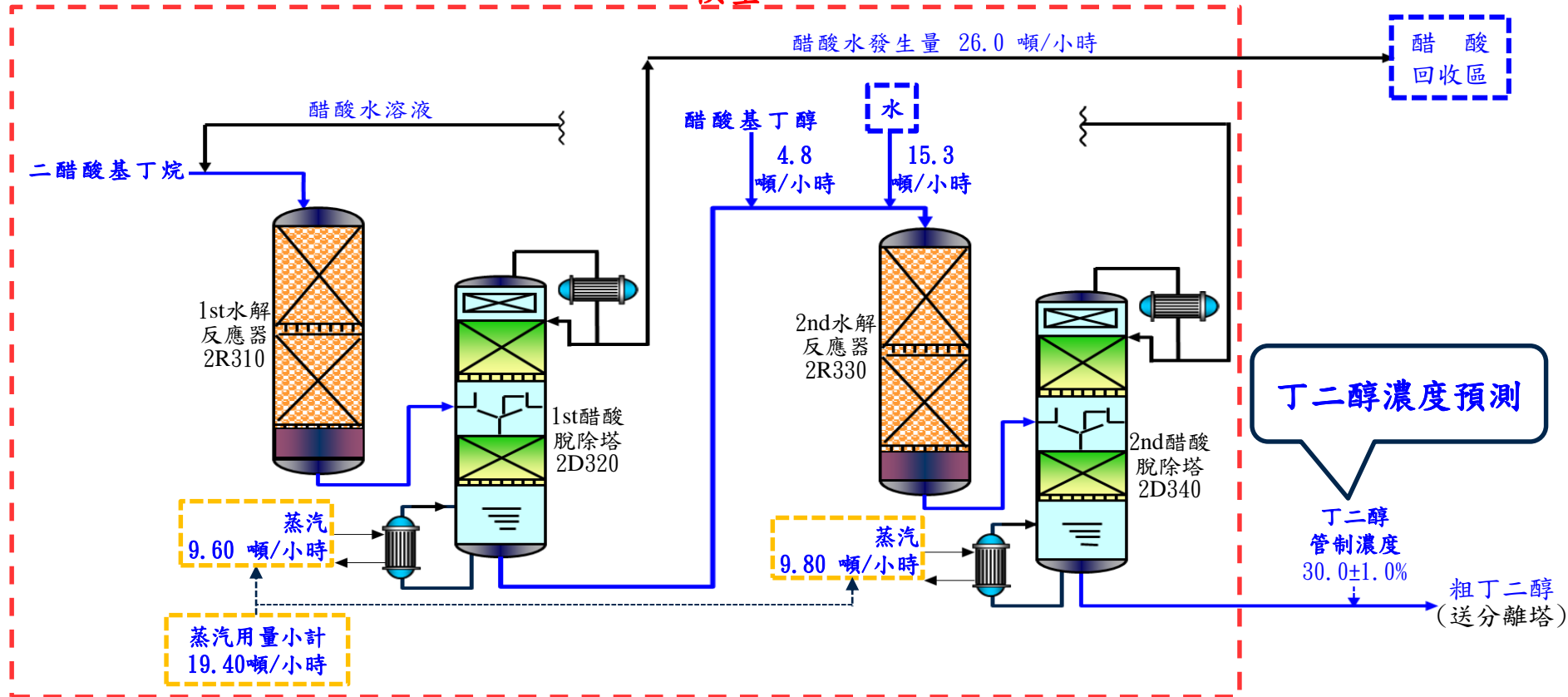
二醋酸基丁烷 + 水 → 醋酸基丁醇 + 醋酸 (單邊水解)

醋酸基丁醇 + 水 → 丁二醇 + 醋酸 (雙邊水解)

1. 水解反應區為兩段式水解反應，其中第一段反應主要將二醋酸基丁烷水解生成醋酸基丁醇(單邊水解物)，第二段反應再將醋酸基丁醇水解成丁二醇。
2. 反應器下游設置醋酸脫除塔，將副產物醋酸脫除，因雙邊水解反應速度慢，需在第二段反應前投入大量水及醋酸基丁醇(單邊水解物)，以利雙邊水解反應，提升丁二醇(雙邊水解物)產率。
3. 水解反應所生成副產物醋酸，最終藉由第一段醋酸脫除塔塔頂送至醋酸回收區處理。

(二)模型開發動機

AI模型



1. 若調整減少2nd水解反應器水投入量，則反應後粗丁二醇溶液需脫除醋酸水量即降低，可減少脫除塔蒸汽耗用，並減少醋酸水發生量(送醋酸回收區)。
2. 水解反應調整後因滯留時間長達600分鐘，採人工取樣分析(1次/日)，無法確保丁二醇濃度符合管制標準($30.0 \pm 1.0\%$)。
3. 建置AI模型預測丁二醇濃度(虛擬分析儀)，透過操作條件指引程式，在管制濃度條件下，找出最小水投入量(最低醋酸水發生量)及最少蒸汽耗用的最佳操作條件。

(三)AI模型開發歷程

執行重點

數據收集 與前處理

1. 收集水解反應區製程數據及人工取樣分析數據。
2. 將數據進行前處理，減少數據之雜訊，以提高模型準確度。

建立 品質預測 模型

模型1：水解反應後丁二醇濃度預測模型。

開發操作條件 指引程式

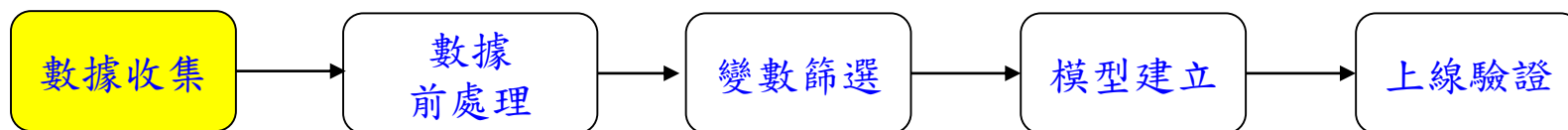
設定關鍵變數之合理範圍，藉由電腦模擬不同操作條件組合，在丁二醇濃度管制 $30.0 \pm 1.0\%$ 下，找出**最小水投入量**（**最低醋酸水發生量**）及**最少蒸汽耗用**的操作條件。

模型上線 運用

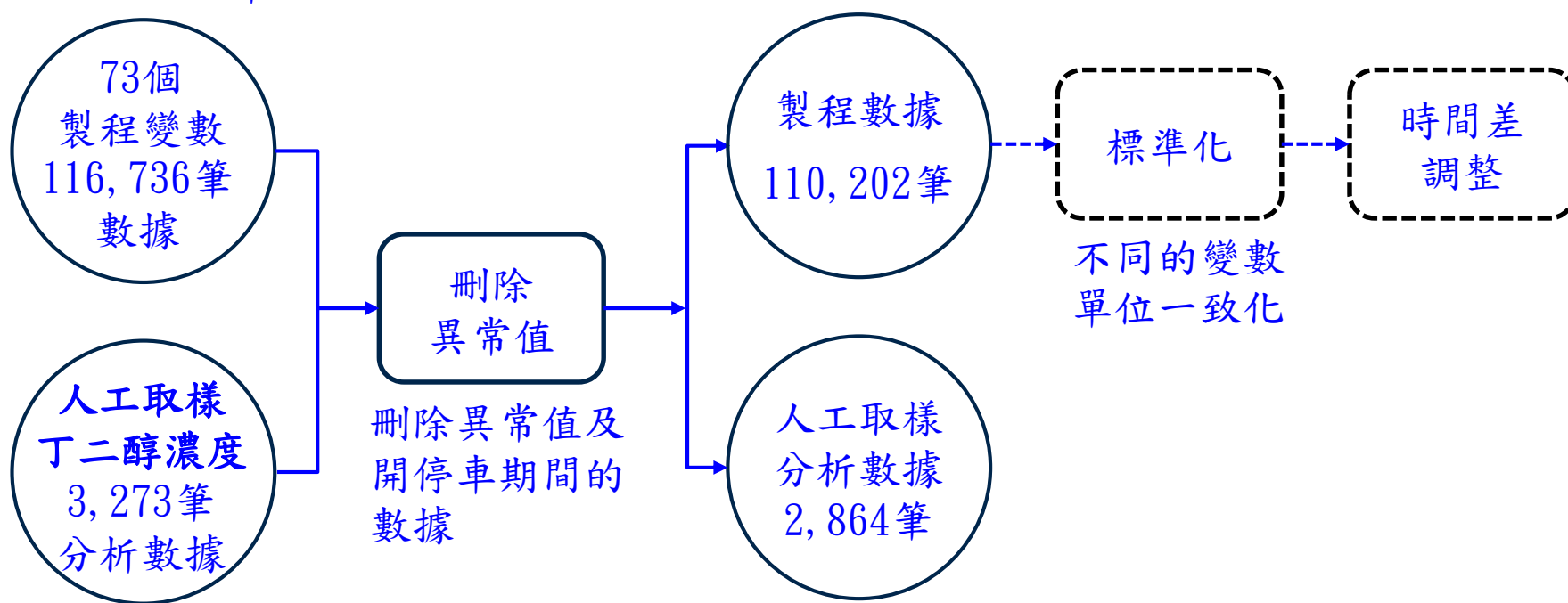
藉著即時演算，將丁二醇預測濃度及操作條件建議值呈現於即時生產管理系統及DCS畫面，提供盤控人員調整參考。

1. 數據收集與前處理

(1) 數據收集

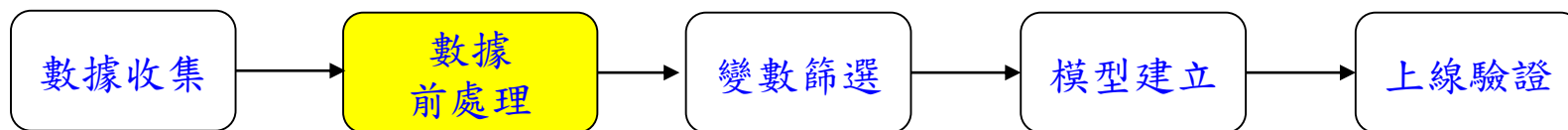


2013~2019年



水解反應區製程變數共73個，收集2013~2019年製程及人工取樣分析丁二醇濃度數據，經刪除異常值及開停車期間數據，製程數據110,202筆、人工取樣分析數據2,864筆，將80%數據做建模使用，20%數據做模型測試。

(2)數據前處理：標準化



原始數據共110,202筆
(單位、數值範圍不同)

時間	2nd水解反應器 入料溫度(°C) 2TC-311	...	2nd醋酸脫除塔 迴流量(噸/小時) 2FC-341
2013-1-1 00:00:00	49.6	...	4.185
2013-1-2 00:00:00	49.5	...	4.297
2013-1-3 00:00:00	49.4	...	4.681
⋮	⋮		⋮
2019-12-4 00:00:00	50.1	...	3.597
2019-12-5 00:00:00	50.0	...	3.684

標準化
轉換



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

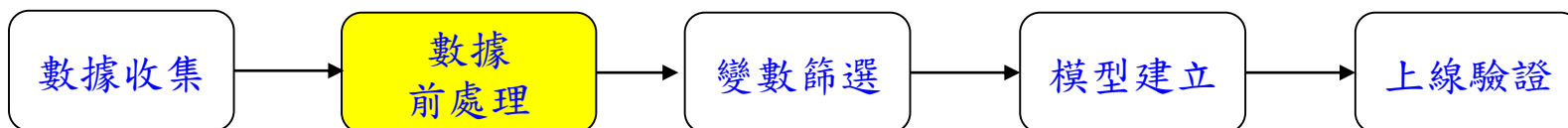
X: 製程變數
max: 最大值
min: 最小差

數據標準化共110,202筆
(無單位，且分布在0到1之間)

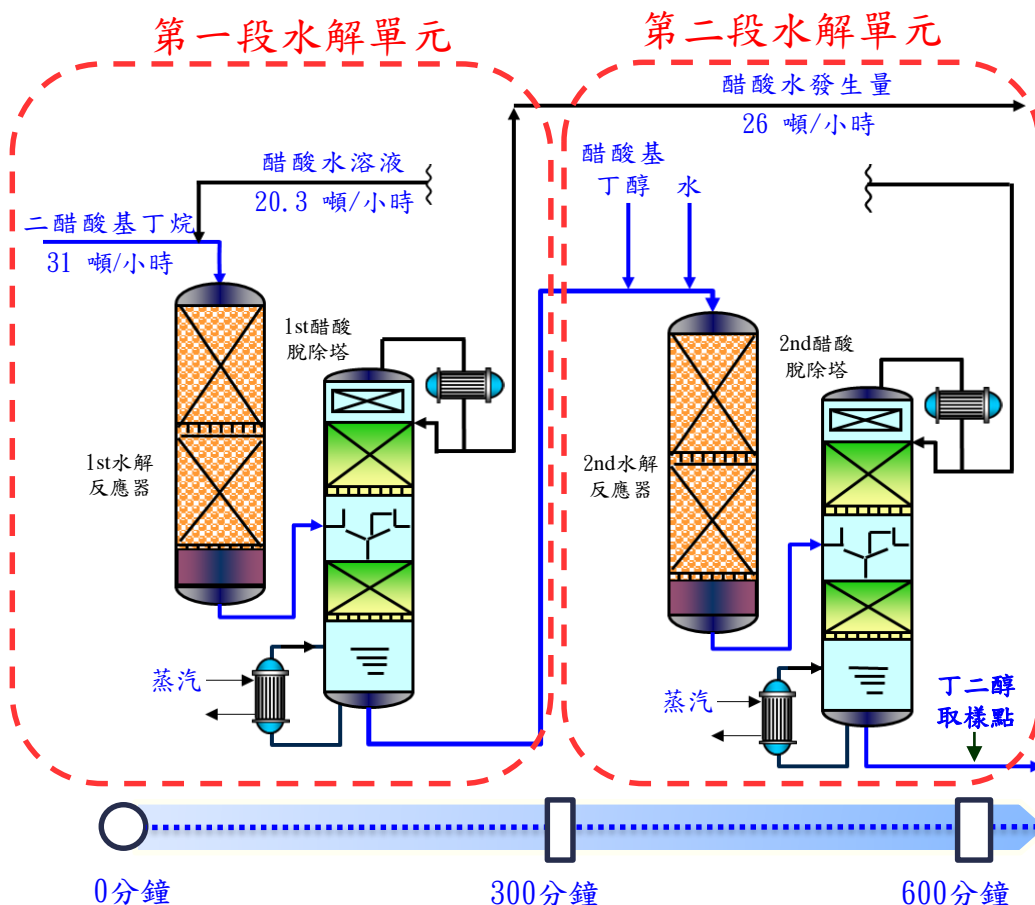
時間	2nd水解反應器 入料溫度 2TC-311	...	2nd醋酸脫除塔 迴流量 2FC-341
2013-1-1 00:00:00	0.4396	...	0.7164
2013-1-2 00:00:00	0.4267	...	0.7291
2013-1-3 00:00:00	0.4189	...	0.7383
⋮	⋮		⋮
2019-12-4 00:00:00	0.6137	...	0.3381
2019-12-5 00:00:00	0.5984	...	0.3497

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。

(2)數據前處理：時間差調整



製程變數 X_i	與取樣分析時間差
X_1 : 1st水解反應器入料溫度	600 分鐘
X_2 : 1st水解反應器入料量	600 分鐘
X_3 : 2nd醋酸脫除塔塔頂流量	600 分鐘
⋮	⋮
X_{33} : 2nd水解反應器入料溫度	300 分鐘
X_{34} : 2nd水解反應器入料量	300 分鐘
X_{35} : 2nd水解反應器水投入量	300 分鐘
⋮	⋮
X_{72} : 2nd醋酸脫除塔塔底溫度	0 分鐘
X_{73} : 2nd醋酸脫除塔塔底流量	0 分鐘



經計算水解反應入料與取樣分析丁二醇濃度時間差，第一段水解反應單元、第二段水解反應單元各變數依其對應的時間差，分別進行600分鐘及300分鐘調整。

2. 建立品質預測模型

(1) 變數篩選



$$\text{水解反應後丁二醇預測濃度} = a_1X_1 + \cdots + a_{60}X_{60} + a_{61}X_{61} + \cdots + a_{73}X_{73} + b$$

排名	製程變數	模型係數(a_i)
1	2nd水解反應器入料溫度	9.11759
2	1st醋酸脫除塔蒸汽用量	-7.19523
3	2nd醋酸脫除塔蒸汽用量	-1.36799
⋮	⋮	⋮
60	中間產物分離塔塔底溫度	0.05435
61	1st醋酸脫除塔塔頂真空	0.00000
⋮	⋮	⋮
72	2nd醋酸脫除塔塔頂真空	0.00000
73	中間產物分離塔塔頂真空	0.00000

表示變數對丁二醇濃度影響程度

正值：與丁二醇濃度為正相關

負值：與丁二醇濃度為負相關

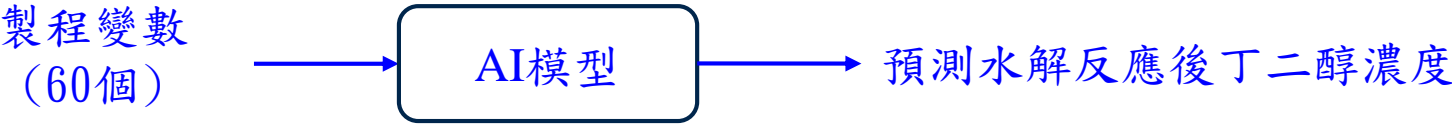
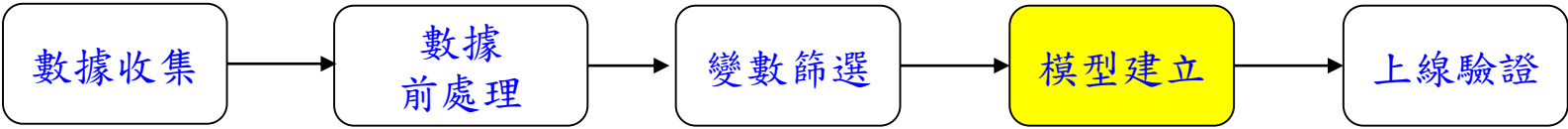
係數絕對值大：影響程度高

係數絕對值小：影響程度低

將模型係數為0之變數剔除。

水解反應區製程變數為73個，利用Lasso演算法計算出的模型係數，判斷變數對出口丁二醇濃度的影響程度，將模型係數為0之變數剔除，篩選出60個變數作為後續建模依據。

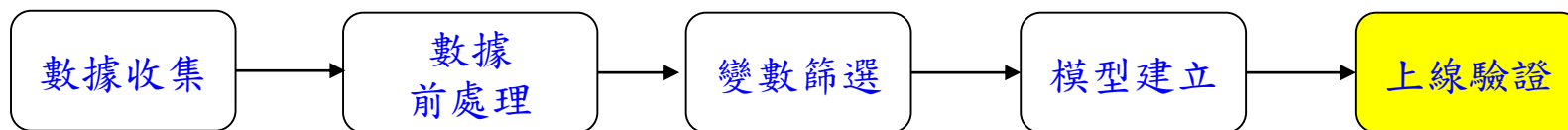
(2)模型建立



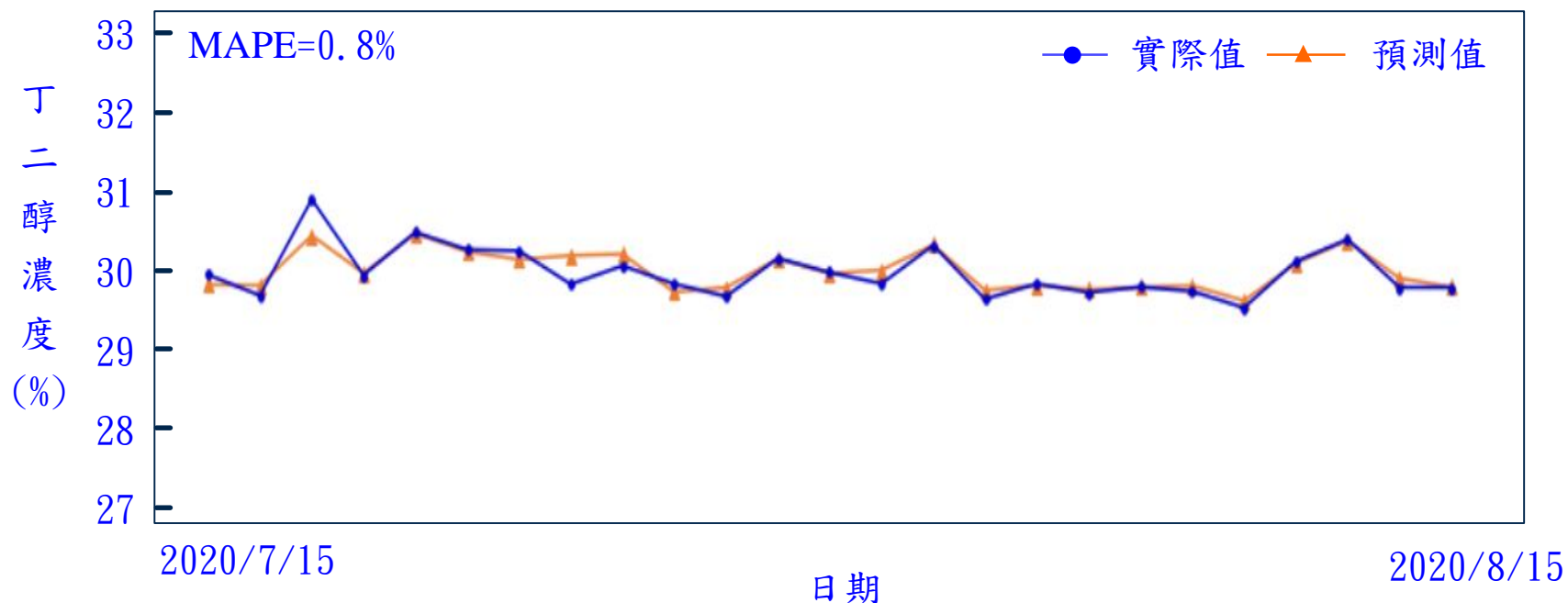
演算法	Lasso (套索迴歸)	SVM (支援向量機)	XGBoost (極限梯度提升)
模型類別	線性	非線性	非線性
MAPE (平均絕對百分比誤差)	2.2%	8.9%	0.9%
RMSE (均方根誤差)	1.42	3.21	1.2
R ² (決定係數)	0.68	0.33	0.80

以3種演算法進行建模，經評估XGBoost演算法的建模指標，MAPE為0.9%最低，R²為0.80最高，故選用XGBoost作為丁二醇濃度預測模型的演算法。

(3) 上線驗證



丁二醇濃度預測模型驗證結果



1. 採用2020年7月15日至8月15日之人工取樣丁二醇濃度分析數據進行模型上線驗證，**MAPE為0.8%**，與建模時0.9%相當，代表此模型可預測丁二醇濃度。
2. 後續將以此模型開發操作條件指引程式，取得最佳條件供盤控人員參考調整。

3. 開發操作條件指引程式

(1) 篩選可控關鍵變數

項次	變數重要性(%)	TAG編號	中文說明
1	100.0	2FC-625	2nd水解反應器水投入量
2	90.6	2FC-326	1st醋酸脫除塔蒸汽用量
3	81.3	2FC-373C	2nd水解反應器醋酸基丁醇(單邊水解物)進料
4	68.9	2TC-331	2nd水解反應器入料溫度
5	37.1	2FC-346	2nd醋酸脫除塔蒸汽用量
6	9.8	2TC-311	1st水解反應器入料溫度
7	1.2	2FC-311	1st水解反應器循環量
⋮	⋮	⋮	⋮
32	0.5	2LC-320	2nd醋酸脫除塔餾出液緩衝槽液位

模型變數重要性
影響程度較高

1. 經變數篩選的60個變數中，可控變數共有32個，以XGBoost演算法的變數重要性排序，篩選**可控關鍵變數**，作為上線優化調整。
2. 檢視模型變數重要性，排**前6名**可控變數**影響程度較高**，檢討後選擇項次1-6共6個作為**關鍵變數**上線調整。

(2)設定合理操作區間及找出較佳條件

關鍵可控變數				條件設定			現狀	模型計算 較佳條件
				操作範圍	間距	操作點		
X ₁	2FC-625	2nd水解反應器水投入量	噸/小時	13.5 ~ 15.5	0.1	21個	15.3	13.6
X ₂	2FC-373C	2nd水解反應器醋酸基丁醇(單邊水解物)進料	噸/小時	4.5 ~ 7.5	0.1	31個	4.8	7.0
X ₃	2TC-311	1st水解反應器入料溫度	℃	51.0 ~ 52.0	0.1	11個	52.0	51.9
X ₄	2TC-331	2nd水解反應器入料溫度	℃	50.0 ~ 51.0	0.1	11個	50.8	50.6
X ₅	2FC-326	1st醋酸脫除塔蒸汽用量	噸/小時	8.70 ~ 9.70	0.1	11個	9.60	8.90
X ₆	2FC-346	2nd醋酸脫除塔蒸汽用量	噸/小時	8.90 ~ 9.90	0.1	11個	9.80	9.00
管制標準	水解反應後丁二醇濃度		%	30.0±1.0			30.1	29.1
目標	2nd水解反應器水投入量		噸/小時	極小化(望小)			15.3	13.6
	水解反應區蒸汽用量		噸/小時	極小化(望小)			19.40	17.90

1. 6個可控關鍵變數依據以往的操作範圍，設定合理的調整間距共有9,531,291種操作條件組合。
2. 由指引程式篩選符合丁二醇濃度管制標準條件下，找到一組最小水投入量(最低醋酸水發生量)及最少蒸汽耗用的最佳操作條件。
3. 經模型計算結果顯示，透過提升2nd水解反應器醋酸基丁醇進料4.8↗7.0噸/小時，可降低2nd水解反應器水投入量15.3↘13.6噸/小時，減少蒸汽用量及醋酸水發生量(送醋酸回收區處理)。

(2)設定合理操作區間及找出較佳條件(續)

項目	管制標準	2FC-625	2FC-373C	2TC-311	2TC-331	2FC-326	2FC-346
描述	水解反應後 丁二醇濃度 (%)	2nd水解反應器 水投入量 (噸/小時)	2nd水解反應器 醋酸基丁醇進料 (噸/小時)	1st水解反應器 2R310入料溫度 (℃)	2nd水解反應器 2R330入料溫度 (℃)	1st醋酸脫除塔 2D320蒸汽用量 (噸/小時)	2nd醋酸脫除塔 2D340蒸汽用量 (噸/小時)
操作範圍	29.0 ~ 31.0	13.5 ~ 15.5	4.5 ~ 7.5	51 ~ 52	50 ~ 51	8.70 ~ 9.70	8.90 ~ 9.90
調整間距	-	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1
1	26.9	13.5	4.5	51.0	50.0	8.70	8.90
:	:	:	:	:	:	:	:
1, 073, 353	28.9	13.6	6.9	51.9	50.6	8.90	9.00
:	:	:	:	:	:	:	:
1, 073, 374	28.9	13.5	7.0	51.9	50.6	8.90	9.00
1, 073, 375	29.0	13.6	7.0	52.0	50.7	8.90	9.10
1, 073, 376	29.1	13.6	7.0	51.9	50.6	8.90	9.00
1, 073, 377	29.3	13.6	7.1	51.9	50.6	9.00	9.10
:	:	:	:	:	:	:	:
(現狀)2, 018, 649	30.1	15.3	4.8	52.0	50.8	9.60	9.80
:	:	:	:	:	:	:	:
6, 744, 958	30.9	14.4	7.3	51.9	50.6	9.50	9.60
6, 744, 959	31.1	14.5	7.3	51.9	50.6	9.50	9.60
:	:	:	:	:	:	:	:
9, 531, 291	32.1	15.5	7.5	52.0	51.0	9.70	9.90

符合丁二醇濃度在管制標準29.0~31.0%，共有5,671,584組條件，再以最小水投入量及最少蒸汽耗用，找到一組(第1,073,376組)最佳的操作條件。

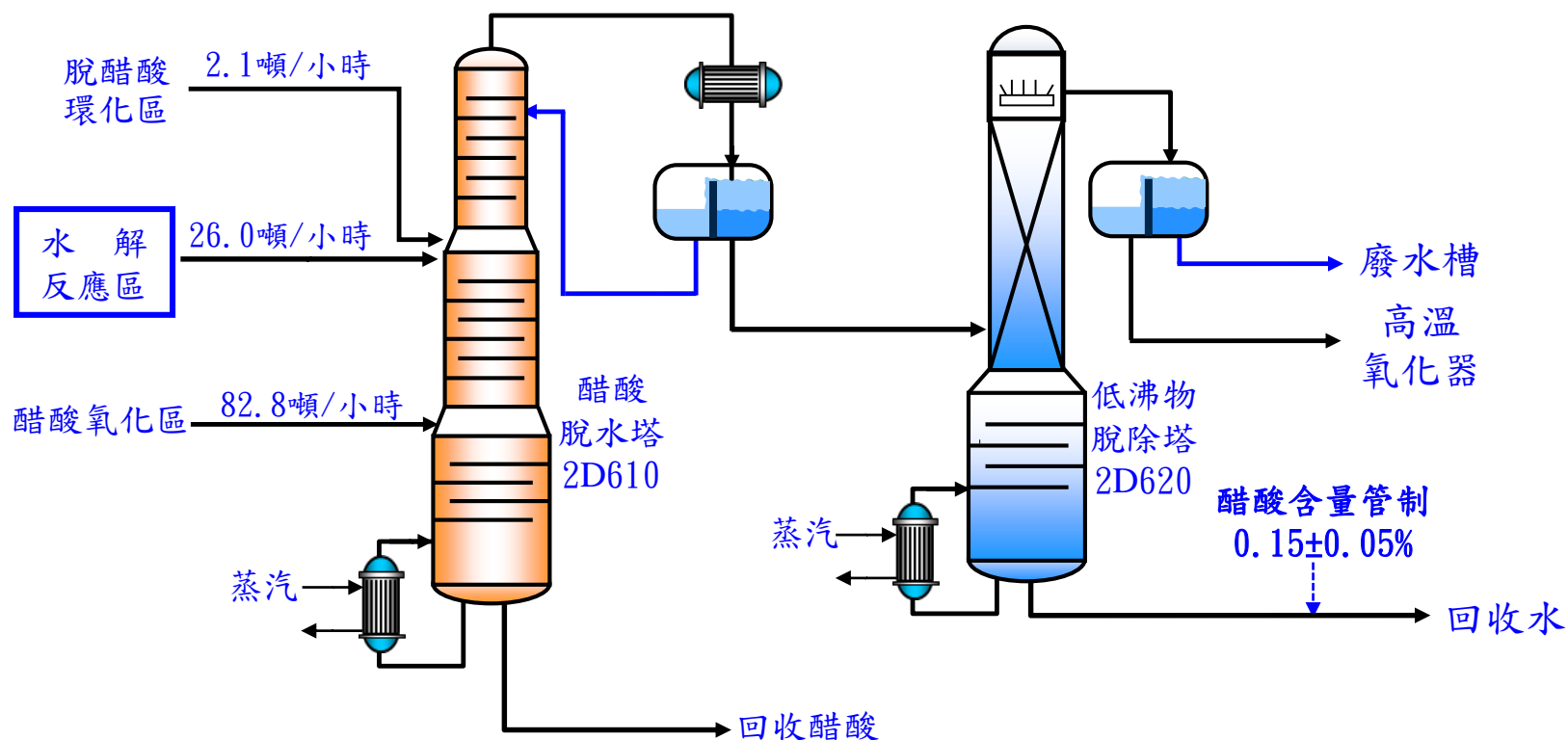
4. 模型上線應用

代號	可控關鍵變數	單位	調整後 (A)	模型計算 較佳條件 (B)	調整前 (C)	比目標 (A-B)	比調整前 (A-C)
X ₁	2nd水解反應器水投入量	噸/小時	13.6	13.6	15.3	-	-1.7
X ₂	2nd水解反應器醋酸基丁醇 (單邊水解物)進料	噸/小時	7.0	7.0	4.8	-	+2.2
X ₃	1st水解反應器入料溫度	℃	51.9	51.9	52.0	-	-0.1
X ₄	2nd水解反應器入料溫度	℃	50.6	50.6	50.8	-	-0.2
X ₅	1st醋酸脫除塔蒸汽用量	噸/小時	8.90	8.90	9.60	-	-0.70
X ₆	2nd醋酸脫除塔蒸汽用量	噸/小時	9.00	9.00	9.80	-	-0.80
管制 標準	水解反應後丁二醇濃度	%	29.2	29.1	30.1	+0.1	-0.9
目標	2nd水解反應器水投入量	噸/小時	13.6	13.6	15.3	-	-1.7
	水解反應區蒸汽用量	噸/小時	17.90	17.90	19.40	-	-1.50
調整 結果	醋酸水發生量	噸/小時	23.1	-	26.0	-	-2.9

- (1) 製程調整前先進行變更管理(MOC)，檢討其合理性及適用性。調整後丁二醇濃度由30.1\29.2%，與模型預測值29.1%相差0.1%，誤差值與建模相當，蒸汽用量由19.40\17.90噸/小時，減少1.5噸/小時，年效益12,828千元。
- (2) 因送醋酸回收區的醋酸水發生量由26.0\23.1噸/小時，後續由醋酸回收區AI模型(模型2)，找出醋酸水溶液入料減少後、蒸汽用量最低的操作條件。

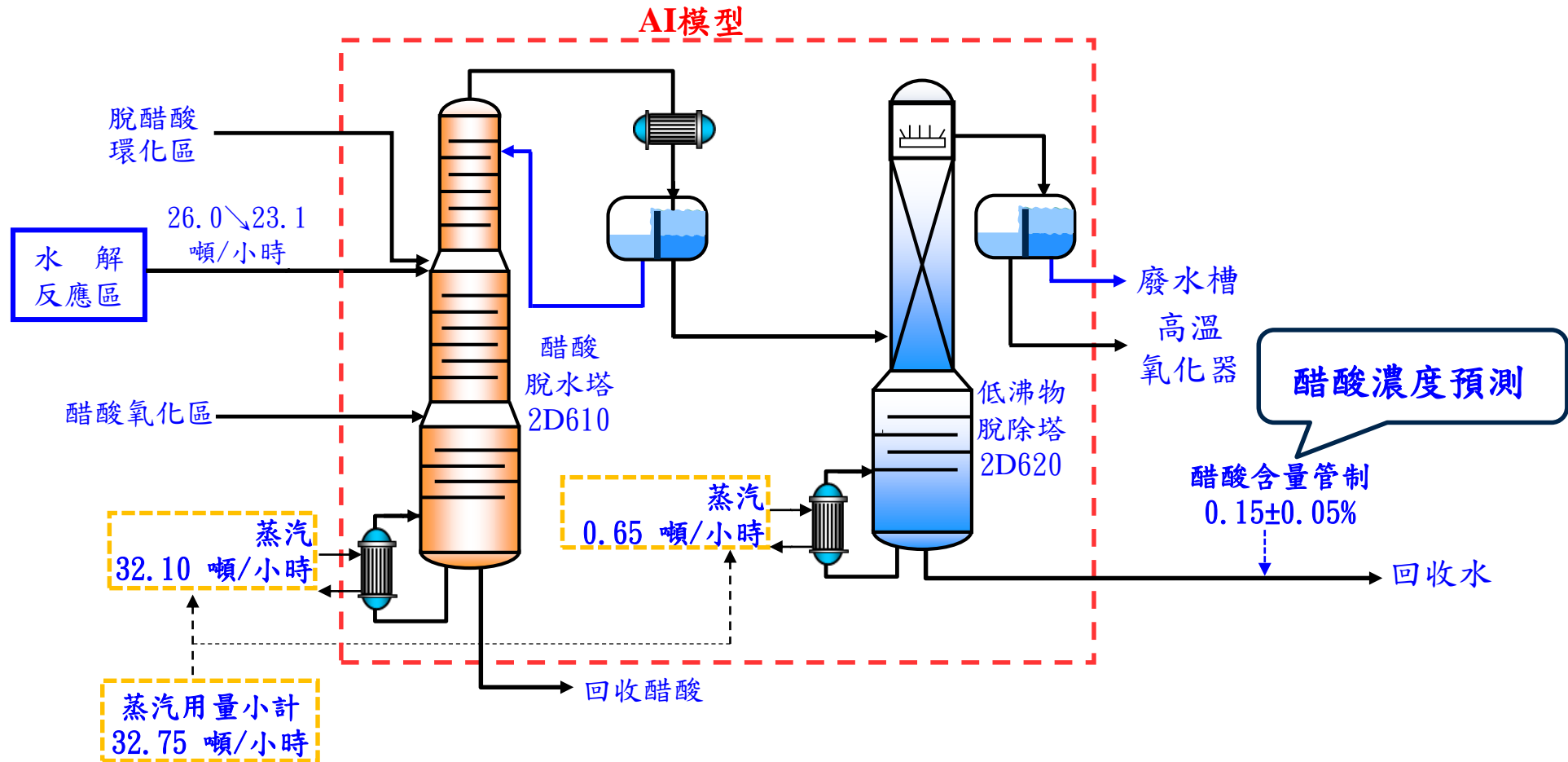
模型2：醋酸回收區AI模型

(一)醋酸水回收製程說明



1. 醋酸回收區接收脫醋酸環化反應、水解反應及醋酸氧化反應所產生的醋酸水溶液，將醋酸純化回收再利用。
2. 醋酸水溶液進入醋酸脫水塔純化，由塔底回收醋酸，塔頂水送至低沸物脫除塔，去除水中低沸物，由塔底回收水。

(二)模型開發動機



1. 醋酸回收區蒸汽用量32.75噸/小時(佔比32.1%)最大，故導入AI優化改善。
2. 醋酸回收區入料至出料的時間較人工取樣分析時間短，無法有效掌握回收水品質狀況。
3. 建置AI模型預測低沸物脫除塔塔底回收水醋酸濃度(虛擬分析儀)，透過操作條件指引程式自動計算，找出水解反應區送來的醋酸水量減少後，符合管制濃度、最少蒸汽耗用的操作條件。

(三)AI模型開發歷程

執行重點

數據收集 與前處理

1. 收集水解反應區製程數據及人工取樣分析數據。
2. 將數據進行前處理，減少數據之雜訊，以提高模型準確度。

建立 品質預測 模型

模型2：回收水醋酸濃度預測模型。

開發操作條件 指引程式

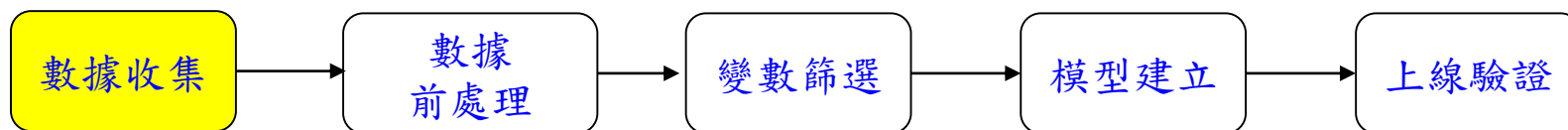
設定關鍵變數之合理範圍，藉由電腦模擬不同操作條件組合，在塔底回收水醋酸含量管制 $0.15 \pm 0.05\%$ 下，找出最少蒸汽耗用的操作條件。

模型上線 運用

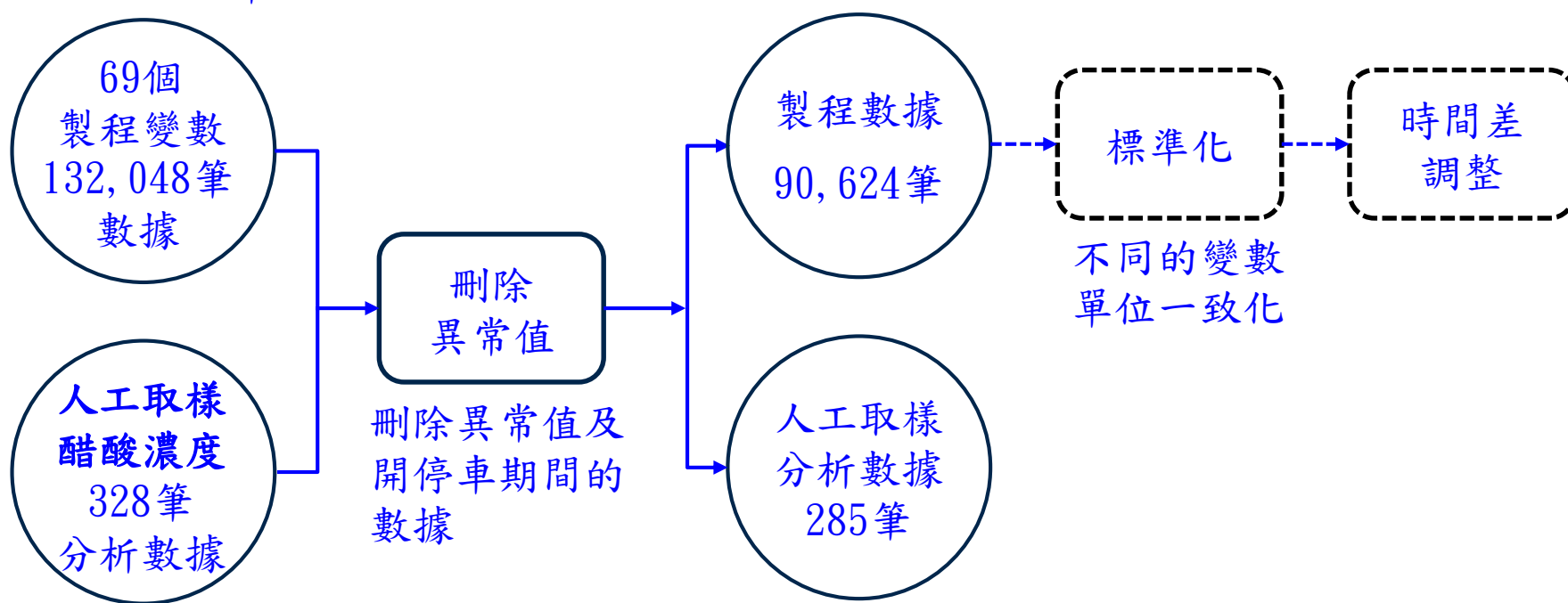
藉著即時演算，將回收水醋酸預測濃度及操作條件建議值呈現於即時生產管理系統及DCS畫面，提供盤控人員調整參考。

1. 數據收集與前處理

(1) 數據收集

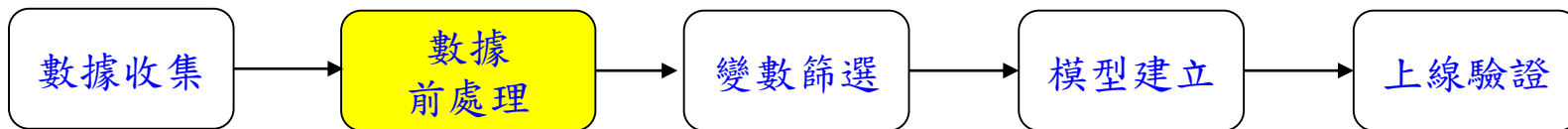


2013~2019年



醋酸回收區製程變數共69個，收集2013~2019年製程及人工取樣分析醋酸濃度數據，經刪除異常值及開停車期間數據，製程數據90,624筆、人工取樣分析數據285筆，將80%數據做建模使用，20%數據做模型測試。

(2)數據前處理：標準化



原始數據共90,624筆
(單位、數值範圍不同)

時間	醋酸脫水塔 第10層溫度(°C) 2TI-6101	...	低沸物脫除塔 蒸汽用量(噸/小時) 2FC-626
2013-1-1 00:00:00	89.3	...	0.60
2013-1-2 00:00:00	90.5	...	0.63
2013-1-3 00:00:00	90.1	...	0.62
⋮	⋮		⋮
2019-12-4 00:00:00	90.1	...	0.66
2019-12-5 00:00:00	89.2	...	0.67

標準化
轉換



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

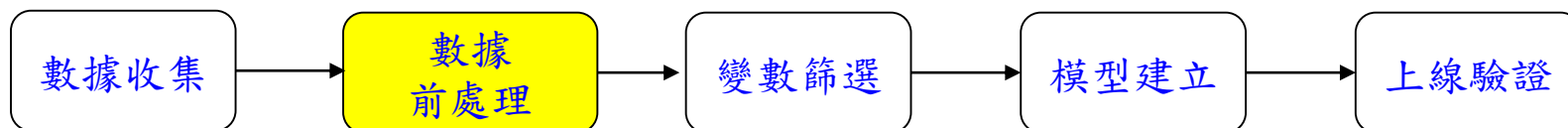
X: 製程變數
max: 最大值
min: 最小差

數據標準化共90,624筆
(無單位，且分布在0到1之間)

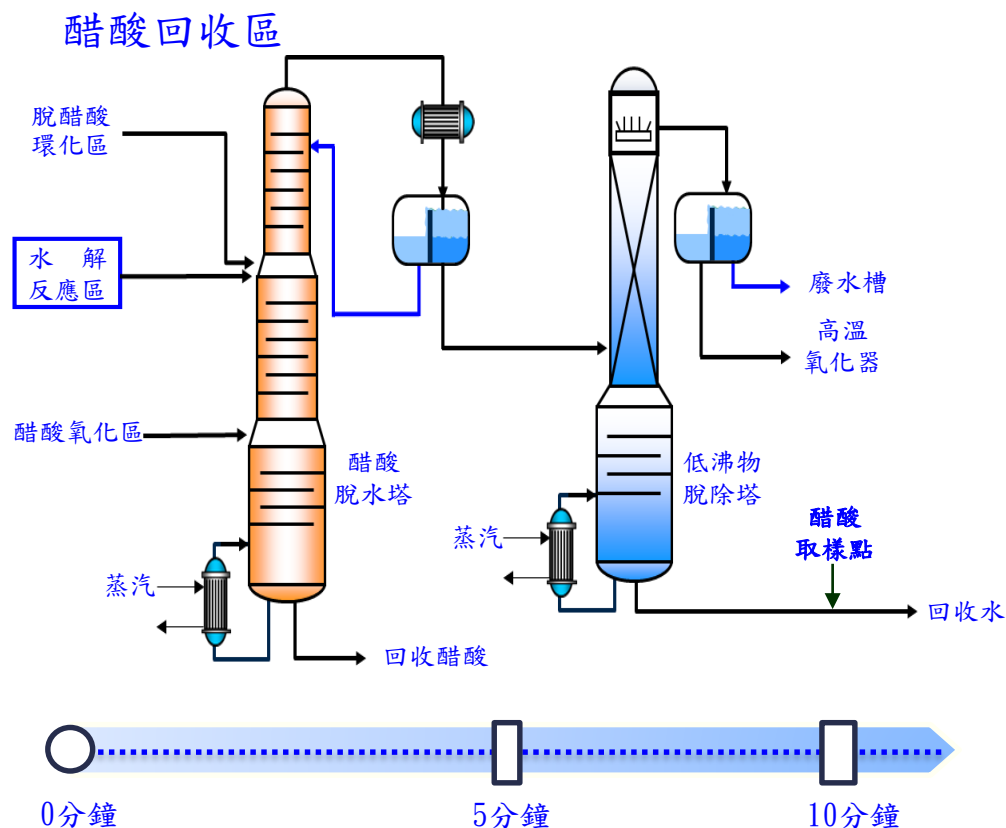
時間	醋酸脫水塔 第10層溫度 2TI-6101	...	低沸物脫除塔 蒸汽用量 2FC-626
2013-1-1 00:00:00	0.5513	...	0.3791
2013-1-2 00:00:00	0.5789	...	0.4186
2013-1-3 00:00:00	0.5632	...	0.4067
⋮	⋮		⋮
2019-12-4 00:00:00	0.5632	...	0.5728
2019-12-5 00:00:00	0.5427	...	0.5889

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。

(2)數據前處理：時間差調整



製程變數 X_i	與取樣分析時間差
X_1 ：醋酸脫水塔第10層溫度	10 分鐘
X_2 ：醋酸脫水塔第20層溫度	10 分鐘
X_3 ：醋酸脫水塔第28層溫度	10 分鐘
⋮	⋮
X_{33} ：醋酸脫水塔塔頂出料量	5 分鐘
X_{34} ：醋酸脫水塔塔頂 油水分離槽液位	5 分鐘
X_{35} ：醋酸脫水塔塔頂出料量溫度	5 分鐘
⋮	⋮
X_{68} ：低沸物脫除塔塔底流量	0 分鐘
X_{69} ：低沸物脫除塔塔底溫度	0 分鐘



經計算醋酸回收區入料與取樣分析醋酸濃度時間差，醋酸脫水塔進出料各變數依其對應的時間差，分別進行10分鐘及5分鐘調整。

2. 建立品質預測模型

(1) 變數篩選



$$\text{回收水醋酸預測濃度} = a_1X_1 + \cdots + a_{52}X_{52} + a_{53}X_{53} + \cdots + a_{69}X_{69} + b$$

排名	製程變數	模型係數(a_i)
1	醋酸脫水塔蒸汽用量	-6.25597
2	醋酸脫水塔塔底流量	5.11223
3	低沸物脫除塔蒸汽用量	-0.65721
⋮	⋮	⋮
52	低沸物脫除塔塔底液位	0.07524
53	醋酸脫水塔塔底泵浦電流	0.00000
⋮	⋮	⋮
68	醋酸脫水塔塔頂往 醋酸丁酯暫存槽流量	0.00000
69	自產1K蒸汽壓力	0.00000

表示變數對回收水醋酸濃度影響程度

正值：與醋酸濃度為正相關

負值：與醋酸濃度為負相關

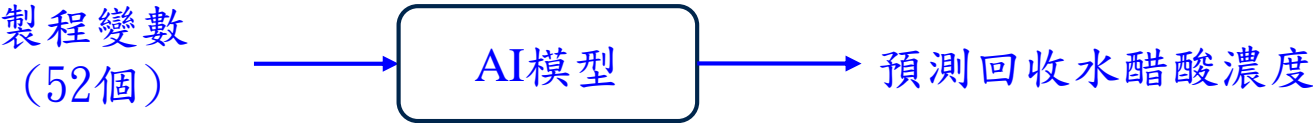
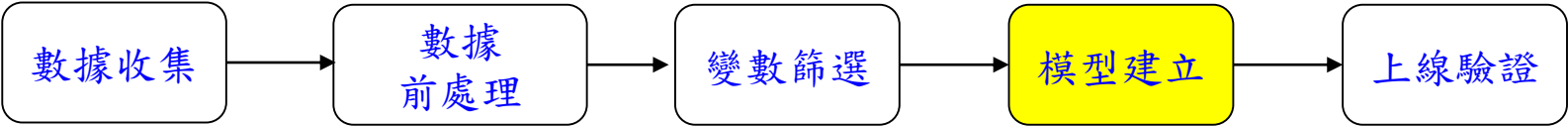
係數絕對值大：影響程度高

係數絕對值小：影響程度低

將模型係數為0之變數剔除。

醋酸回收區製程變數為69個，利用Lasso演算法計算出的模型係數，判斷變數對回收水醋酸濃度的影響程度，將模型係數為0之變數剔除，篩選出52個變數作為後續建模依據。

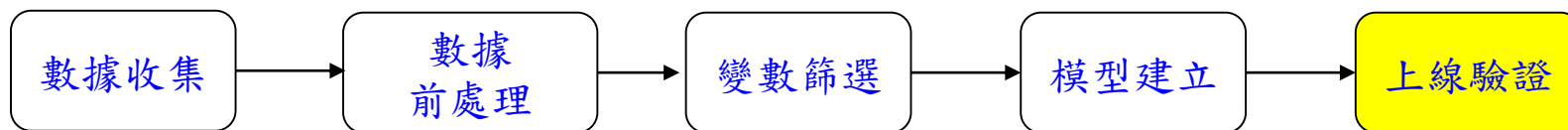
(2)模型建立



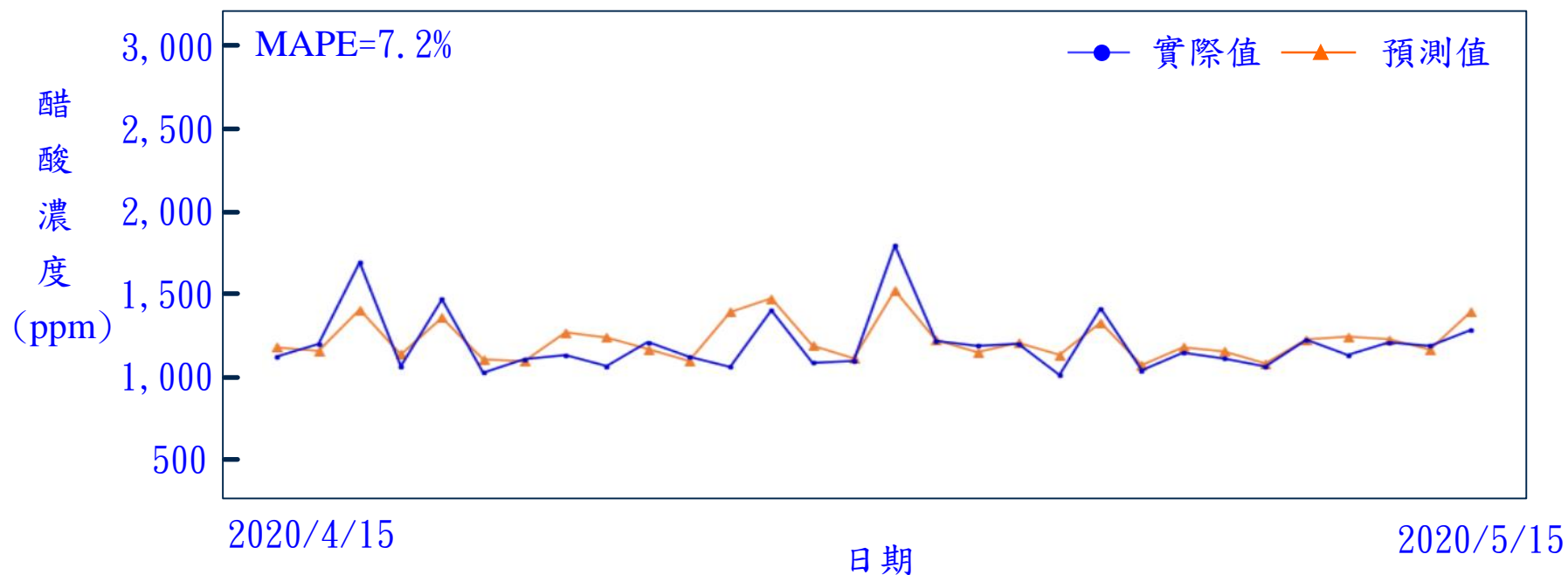
演算法	Lasso (套索迴歸)	SVM (支援向量機)	XGBoost (極限梯度提升)
模型類別	線性	非線性	非線性
MAPE (平均絕對百分比誤差)	22.4%	46.2%	6.9%
RMSE (均方根誤差)	0.02	0.3	0.01
R ² (決定係數)	0.43	0.25	0.90

以3種演算法進行建模，經評估XGBoost演算法的建模指標，MAPE為6.9%最低，R²為0.90最高，故選用XGBoost作為回收水醋酸濃度預測模型的演算法。

(3)上線驗證



回收水醋酸濃度預測模型驗證結果



1. 採用2020年4月15日至5月15日之人工取樣回收水醋酸濃度分析數據進行模型上線驗證，**MAPE為7.2%**，與建模時6.9%相當，代表可預測醋酸即時濃度。
2. 後續將以此模型開發操作條件指引程式，取得最佳條件供盤控人員參考調整。

3. 開發操作條件指引程式

(1) 篩選可控關鍵變數

項次	變數重要性 (%)	TAG編號	中文說明
1	100.0	2FC-616	醋酸脫水塔蒸汽用量
2	86.4	2FC-614	醋酸脫水塔油相迴流量
3	75.1	2LC-617	醋酸脫水塔油水分離槽油側液位
4	68.4	2LC-620	低沸物脫除塔油水分離槽水側液位
5	53.9	2FC-626	低沸物脫除塔蒸汽用量
6	36.2	2LC-625	低沸物脫除塔塔底液位
7	12.3	2LC-610	醋酸脫水塔油水分離槽水側液位
8	0.7	2FC-612	醋酸脫水塔塔頂往醋酸回收槽(開車用)
⋮	⋮	⋮	⋮
30	0.2	2FC-619	醋酸脫水塔冷凝水補充量

模型變數重要性
影響程度較高

1. 經變數篩選的52個變數中，可控變數共有30個，以XGBoost演算法的變數重要性排序，篩選可控關鍵變數，作為上線優化調整。
2. 檢視模型變數重要性，排前7名可控變數影響程度較高，檢討後選擇項次1-7共7個作為關鍵變數上線調整。

(2)設定合理操作區間及找出較佳條件

關鍵可控變數				條件設定			現狀	模型計算 較佳條件
				操作範圍	間距	操作點		
-	2FC-320	水解反應區醋酸水發生量	噸/小時	26.0噸/小時↘23.1噸/小時				
X ₁	2FC-614	醋酸脫水塔油相迴流量	噸/小時	45.4 ~ 47.4	0.2	11個	46.0	45.4
X ₂	2LC-617	醋酸脫水塔油水分離槽 油側液位	%	78 ~ 83	1	6個	80	80
X ₃	2LC-620	低沸物脫除塔油水分離槽 水側液位	%	48 ~ 53	1	6個	51	51
X ₄	2LC-625	低沸物脫除塔塔底液位	%	73 ~ 78	1	6個	75	75
X ₅	2LC-610	醋酸脫水塔油水分離槽 水側液位	%	47 ~ 52	1	6個	50	50
X ₆	2FC-616	醋酸脫水塔蒸汽用量	噸/小時	27.60 ~ 32.60	0.1	51個	32.10	28.20
X ₇	2FC-626	低沸物脫除塔蒸汽用量	噸/小時	0.55 ~ 0.70	0.01	16個	0.65	0.60
管制 標準	回收水醋酸濃度		%	0.15±0.05			0.19	0.18
目標	醋酸回收區蒸汽用量		噸/小時	極小化(望小)			32.75	28.80

1. 7個可控關鍵變數依據以往的操作範圍，設定合理的調整間距共有11,632,896種操作條件組合。
2. 由指引程式篩選符合回收水醋酸濃度管制標準條件下，找到一組蒸汽用量最小的最佳操作條件。
3. 受醋酸水發生量減少影響，經模型評估可調降醋酸脫水塔油相迴流量，以降低蒸汽耗用。

(2)設定合理操作區間及找出較佳條件(續)

項目	管制標準	2FC-614	2LC-617	2LC-620	2LC-625	2LC-610	2FC-616	2FC-626
描述	回收水 醋酸濃度 (%)	醋酸脫水塔 油相迴流量 (噸/小時)	醋酸脫水塔 油水分離槽 油側液位 (%)	低沸物脫除塔 油水分離槽 水側液位 (%)	低沸物脫除塔 油水分離槽 水側液位 (%)	醋酸脫水塔 油水分離槽 水側液位 (%)	醋酸脫水塔 蒸汽用量 (噸/小時)	低沸物脫除塔 蒸汽用量 (噸/小時)
操作範圍	0.10 ~ 0.20	45.4 ~ 47.4	78 ~ 83	48 ~ 53	73 ~ 78	47 ~ 52	27.60 ~ 32.60	0.55 ~ 0.70
調整間距	-	0.2	1	1	1	1	0.1	0.01
1	0.28	45.4	78	48	75	47	28.10	0.60
:	:	:	:	:	:	:	:	:
3, 707, 353	0.27	45.4	78	48	73	47	27.60	0.55
3, 707, 354	0.22	45.6	78	48	75	47	28.10	0.60
:	:	:	:	:	:	:	:	:
3, 728, 956	0.21	45.4	80	51	75	50	28.20	0.60
3, 728, 957	0.19	45.6	80	51	75	50	28.30	0.60
3, 728, 958	0.18	45.6	80	51	75	50	28.20	0.60
3, 728, 959	0.17	45.8	80	51	75	50	28.30	0.61
:	:	:	:	:	:	:	:	:
5, 396, 914	0.10	46.4	80	51	75	50	29.70	0.62
5, 396, 915	0.09	46.6	80	51	75	50	29.70	0.62
:	:	:	:	:	:	:	:	:
11, 632, 896	0.04	47.4	83	53	78	52	32.60	0.70

符合回收水醋酸濃度在管制標準0.10~0.20%，共有1,667,958組條件，找到一組(第3,728,958組)最少蒸汽用量的操作條件。

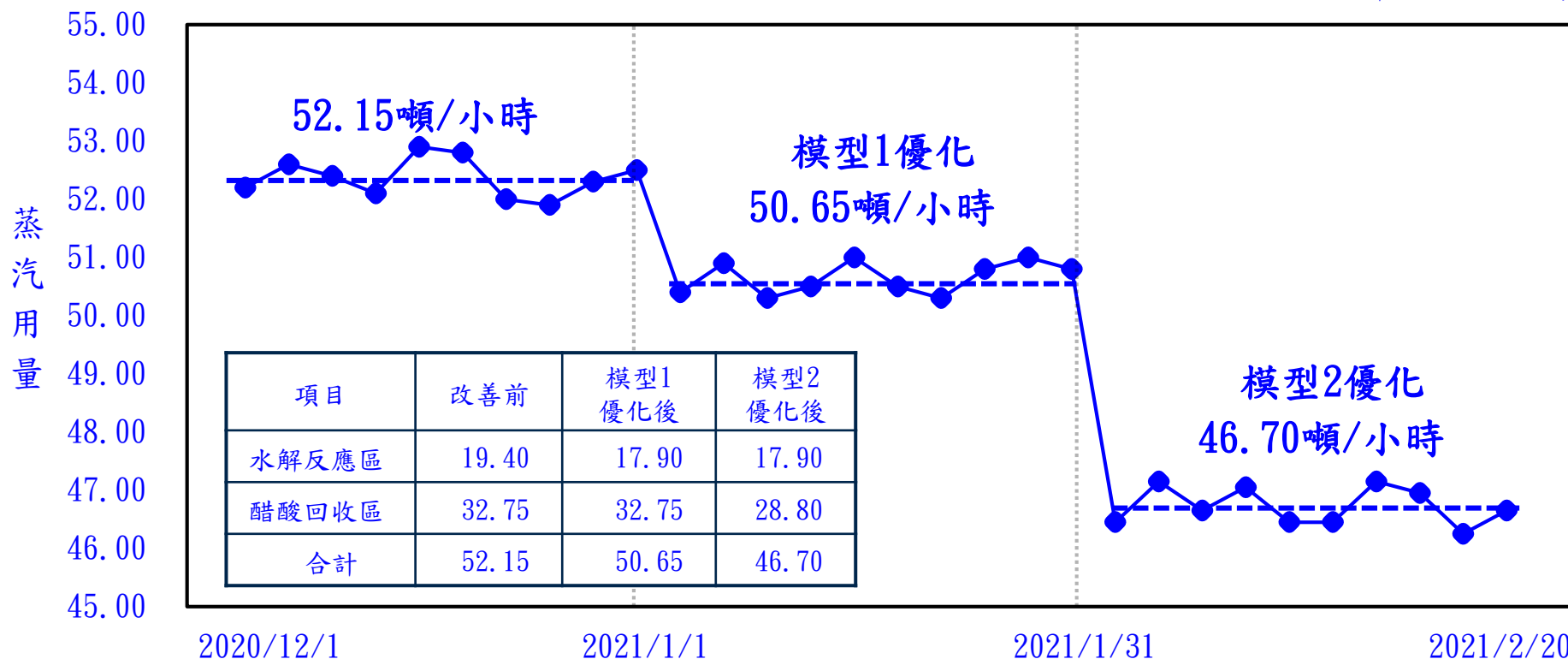
4. 模型上線應用

代號	可控關鍵變數	單位	調整後 (A)	模型計算 較佳條件 (B)	調整前 (C)	比目標 (A-B)	比調整前 (A-C)
X ₁	醋酸脫水塔油相迴流量	噸/小時	45.4	45.4	46.0	-	-0.6
X ₂	醋酸脫水塔油水分離槽 油側液位	%	80	80	80	-	-
X ₃	低沸物脫除塔油水分離槽 水側液位	%	51	51	51	-	-
X ₄	低沸物脫除塔塔底液位	%	75	75	75	-	-
X ₅	醋酸脫水塔油水分離槽 水側液位	%	50	50	50	-	-
X ₆	醋酸脫水塔蒸汽用量	噸/小時	28.20	28.20	32.10	-	-3.90
X ₇	低沸物脫除塔蒸汽用量	噸/小時	0.60	0.60	0.65	-	-0.05
管制 標準	回收水醋酸濃度	%	0.17	0.18	0.19	-0.01	-0.02
目標	醋酸回收區蒸汽用量	噸/小時	28.80	28.80	32.75	-	-3.95

製程調整前先進行變更管理(MOC)，檢討其合理性及適用性。調整後回收水醋酸濃度由0.19↘0.17%，與模型預測值0.18%相差0.01%，誤差值與建模相當，蒸汽用量由32.75↘28.80噸/小時，減少3.95噸/小時，年效益33,401千元。

四、改善效益彙總

單位：噸/小時



1. 模型1優化後兩區總蒸汽用量由52.15↘50.65噸/小時。
2. 模型2優化後兩區總蒸汽用量由50.65↘46.70噸/小時。
3. 合計蒸汽用量由52.15↘46.70噸/小時，減量5.45噸/小時，年效益46,229千元。

五、執行成果

項次	項目名稱	原料節省	節汽	年效益 千元	完成日 (預完日)
1	水解反應區AI模型	-	1.50噸/小時	12,828	2021/1/31
2	醋酸回收區AI模型	-	3.95噸/小時	33,401	2021/2/20
3	醋酸氧化區AI模型	丁二烯67噸/年	1.40噸/小時	14,787	2021/4/30
4	氫化反應區AI模型	丁二烯93噸/年 氫氣4噸/年	-	4,233	2021/6/30
5	水解純化區AI模型	-	1.10噸/小時	9,478	2021/7/31
6	丁二醇純化區AI模型	-	0.40噸/小時	3,446	2021/8/31
7	脫醋酸環化區AI模型	丁二烯80噸/年	0.40噸/小時	6,806	2021/9/30
8	副產品醋酸回收區AI模型	醋酸40噸/年	0.10噸/小時	2,087	(2021/12/31)
合計可節省丁二烯240噸/年、醋酸40噸/年、氫氣4噸/年、 節汽8.85噸/小時、減碳排20,298噸/年。				年效益：87,066千元	

1. BG2依製程分區共建置8個AI模型，已完成項次1至7，其中項次1、2為本次專案報告內容，分別可節汽1.50噸/小時、3.95噸/小時，項次8預定12/31完成。
2. 全部完成後，合計年效益87,066千元。

六、後續工作

- (一)水解反應區及醋酸回收區操作建議值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，其他6個製程區亦比照水解反應區及醋酸回收區之作法，預計2021/12/31完成。
- (二)可再橫向展開至BG1建置各區AI模型，預估年效益43,533千元，預計2022/6/30完成。BG1/2合計改善年效益130,599千元。
- (三)醋酸回收區雖透過AI模型找出較佳操作條件，但蒸汽用量仍偏高。評估增設醋酸水萃取系統，先移除水4.7噸/小時，再進入醋酸脫水塔純化，預估可再減少蒸汽用量6.60噸/小時，並於系統上線後收集數據及修正AI模型。

附錄-專有名詞中英文對照表

英文縮寫	英文全名	中文名稱	說明
1,4BG	1, 4 Butylene glycol	丁二醇	產品
1,4DAB	1, 4 Diacetoxybutane	1, 4 二醋酸基丁烷	中間產品
1,4DABE	1, 4 Diacetoxybutene	1, 4 二醋酸基丁烯	中間產品
Aspen Plus	Advanced system for process engineering plus	先進過程工程系統	美國Aspen Tech公司開發的一套化工程序設計模擬軟體
AcOH	Acetic Acid	醋酸	原料
BD	1, 3 Butadiene	1, 3 丁二烯	原料
Feature_importance	Feature_importance	模型重要性	演算法計算各變數重要性的量化指標
HAB	Hydroxy-acetoxybutane	醋酸基丁醇	中間產品

【註】請依字母A-Z順序排列。

附錄-專有名詞中英文對照表

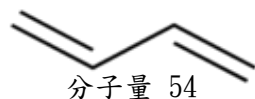
英文縮寫	英文全名	中文名稱	說明
Lasso	Least absolute shrinkage and selection operator	套索迴歸	當變數之間有共線性現象，藉加入L1正則項修正模型的一種機器學習演算法
MAPE	Mean absolute percentage error	平均絕對百分比誤差	預測值與觀測值誤差百分率的平均值，屬迴歸模型的評估指標越趨近0越準確
RMSE	Root mean square error	均方根誤差	預測值與觀測值相差的樣本標準差，屬迴歸模型的評估指標越趨近0越準確
R ²	Coefficient of determination	決定係數	迴歸模型裡可解釋離差平方和與總離差平方和的比值，越趨近1解釋能力越佳
SVM	Support vector machine	支援向量機	分類系列演算法，透過線性分類器建立演算法
THF	Tetrahydrofuran	四氫呋喃	產品
XGBoost	Extreme Gradient Boosting	極限梯度提升	決策樹系列演算法，導入正則項(L1及L2)修正模型的一種機器學習演算法

【註】請依字母A~Z順序排列。

附錄-丁二烯法製備1, 4BG流程示意圖:

1, 3BD

1, 3丁二烯
1, 3-Butadiene



醋酸氧化反應

空氣, 醋酸

T: 60~76°C

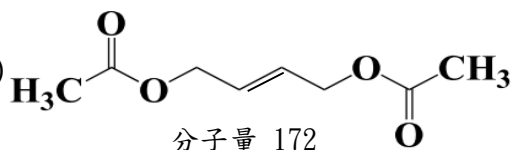
P: 60kg/cm²G(BG2)

Pd cat

1, 4DABE

1, 4二醋酸基丁烯

1, 4-Diacetoxybutene + 2H₂O



氫化反應

氫氣

T: 40~60°C

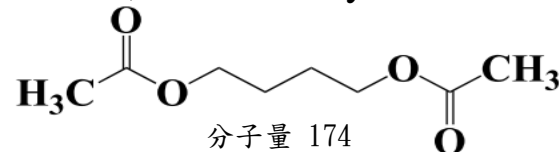
P: 20kg/cm²G(BG2)

Pd cat

1, 4DAB

1, 4二醋酸基丁烷

1, 4-Diacetoxybutane



雙邊水解反應

水(H₂O)

T: 50°C

SK1BH/WA20樹脂

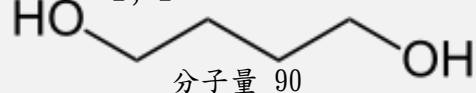
單邊水解反應

水(H₂O)

1, 4BG; 1, 4BDO

1, 4丁二醇

1, 4-Butanediol



THF

四氫呋喃

Tetrahydrofuran

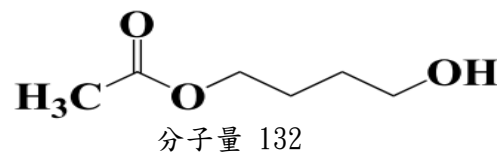


分子量 72

1, 4HAB

1, 4醋酸基丁醇

1-Acetoxy-4-hydroxybutane



去醋酸環化反應

T: 87°C

P: 3kg/cm²G

SK1BH/WA20樹脂

附錄-醋酸脫水塔組成分析

(一)確認醋酸脫水塔進料各組成來源並查詢相關熱力學參數，做為計算基準

1. 常壓下各物質沸點

項次	組成	化學式	常壓下沸點(°C)	備註
1	水	H ₂ O	100.0	反應原料
2	醋酸	CH ₃ COOH	118.0	反應原料
3	醋酸丁烯	CH ₃ COOCH ₂ CH=CHCH ₃	112.0	共沸劑
4	醋酸丁酯	CH ₃ COOCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃	126.0	共沸劑

2. 物質添加共沸劑後，常壓下共沸組成沸點

項次	組成/共沸組成	共沸比例(wt/wt)	常壓下沸點/共沸點(°C)	備註
1	醋酸丁烯/水	0.8094/0.1906	86.3	共沸劑 (醋酸脫水塔迴流)
2	醋酸丁酯/水	0.7298/0.2702	90.5	共沸劑 (醋酸脫水塔迴流)
3	水	—	100.0	醋酸脫水塔 塔頂水相出料
4	醋酸	—	118.0	醋酸脫水塔 塔底主要成分

報告完畢

恭請指導