

AI應用於轉品別最佳化控制



台塑聚烯部LLDPE廠

報告人：陸頂立 2021.09.16

01

執行摘要

02

麥寮LLDPE廠製程說明

03

改善動機

04

解決方案

05

AI模型開發歷程

06

各階段詳細說明

07

效益說明

08

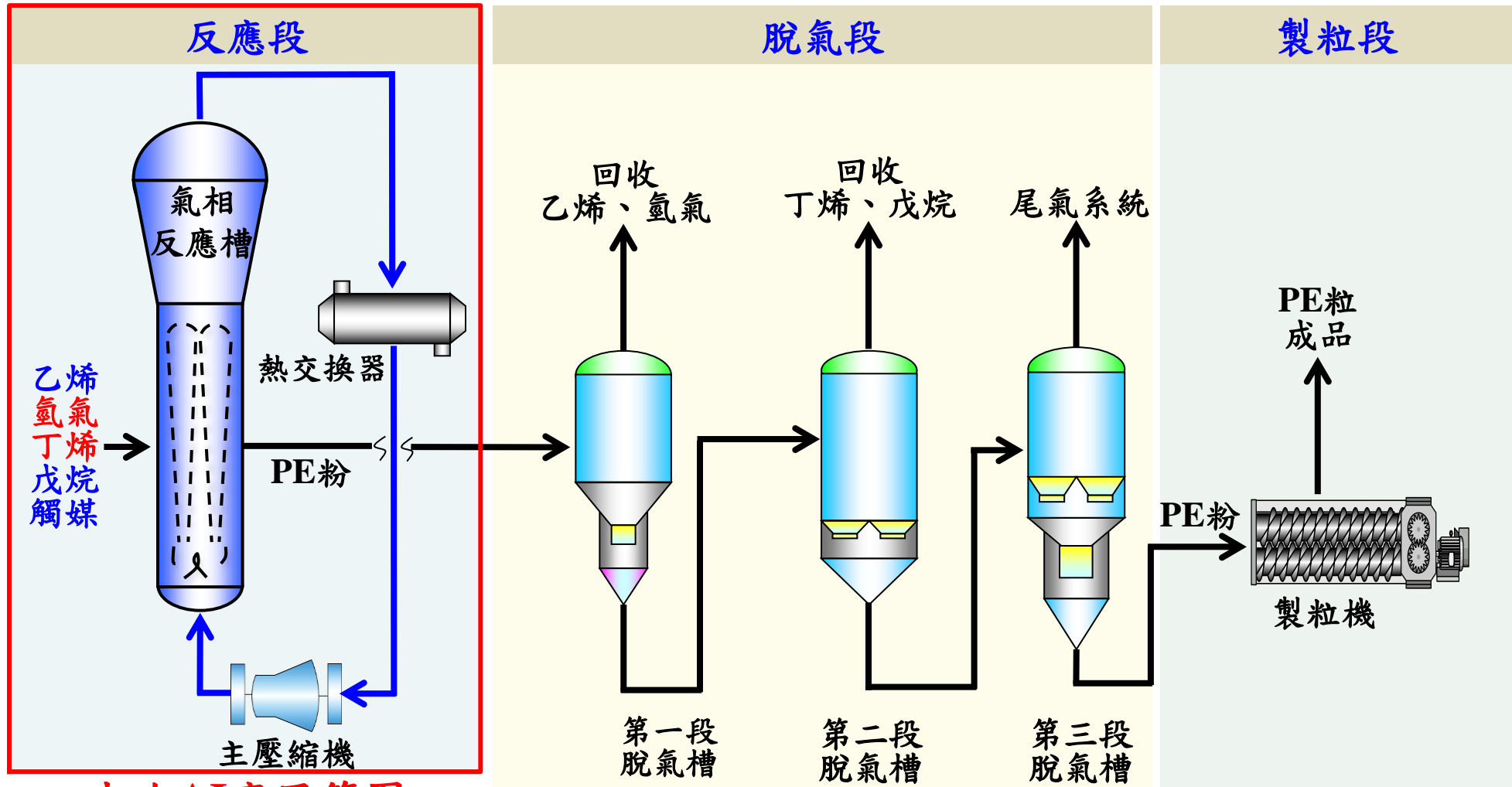
結論及後續推動事項

1. 執行摘要

- LLDPE廠氣相製程可生產LLDPE及HDPE兩種產品，為提高獲利，會隨市場變化，互相轉換品別，但轉品別過程中有以下問題：
 1. 轉HDPE過程需每小時取樣分析，直到符合品質標準，轉換時間長。
 2. 氣相製程粉體密度越高、熔融指數越低，靜電會越高，轉產HDPE時若控制參數未即時調整，反應槽較易形成塑片阻塞管路造成停車。
- 初期直接將製程數據提供給AI計算，但是誤差大，因此使用Aspen軟體產生更多數據，來減少誤差。
- 結合Aspen Polymers、Aspen Plus及Aspen Dynamics成功建立聚合反應模型，模擬出四種活性中心(Active centers)，並解析出每種活性中心獨特的動力方程式，來模擬產出大量製程數據，透過文獻理論公式產生熔融指數及密度的模擬值，導入嶺迴歸(Ridge)演算法，進行熔融指數及密度的預測，即時調整製程參數，縮短轉品別時間，減少次級品產生量，已於2021年2月上線。
- | 項目 | 反應條件調整頻率 | 轉品別時間(次級品數量) | 異常停車次數 |
|-----|----------|--------------|--------|
| 改善前 | 每小時1次 | ≥24小時(≥430噸) | 2次/年 |
| 目標 | 每10分鐘1次 | ≤20小時(≤360噸) | 0次/年 |
- 投資金額：1,365千元。
年效益：11,585千元。
回收年限：0.12年。

2. 麥寮LLDPE廠製程說明(1/3)

- 氣相法製程是將乙烯、氫氣、丁烯、戊烷及觸媒等主要原料投入氣相反應槽，進行聚合反應，經脫氣、製粒生成PE產品。
- LLDPE轉HDPE主要調整反應段氫氣及丁烯入料量。

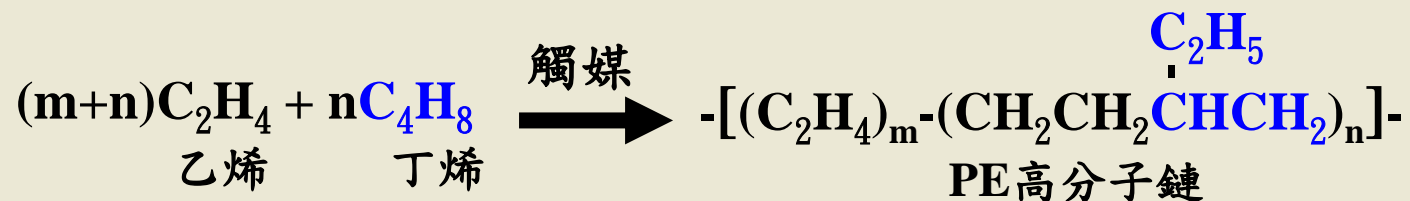


本次AI應用範圍

2. 麥寮LLDPE廠製程說明(2/3)

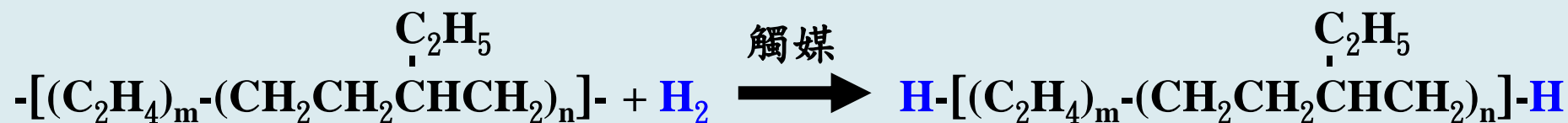
➤ LLDPE及HDPE聚合反應原理

(1) 聚合反應



說明：乙烯與丁烯在觸媒作用下進行聚合反應，以丁烯乙烯比控制密度。

(2) 高分子鏈轉移反應



說明：氫氣為高分子鏈轉移劑，以氫氣乙烯比控制熔融指數。

(3) LLDPE轉生產HDPE扁紗級

轉品別過程主要是調降丁烯乙烯比來提高密度，及調降氫氣乙烯比來降低熔融指數。

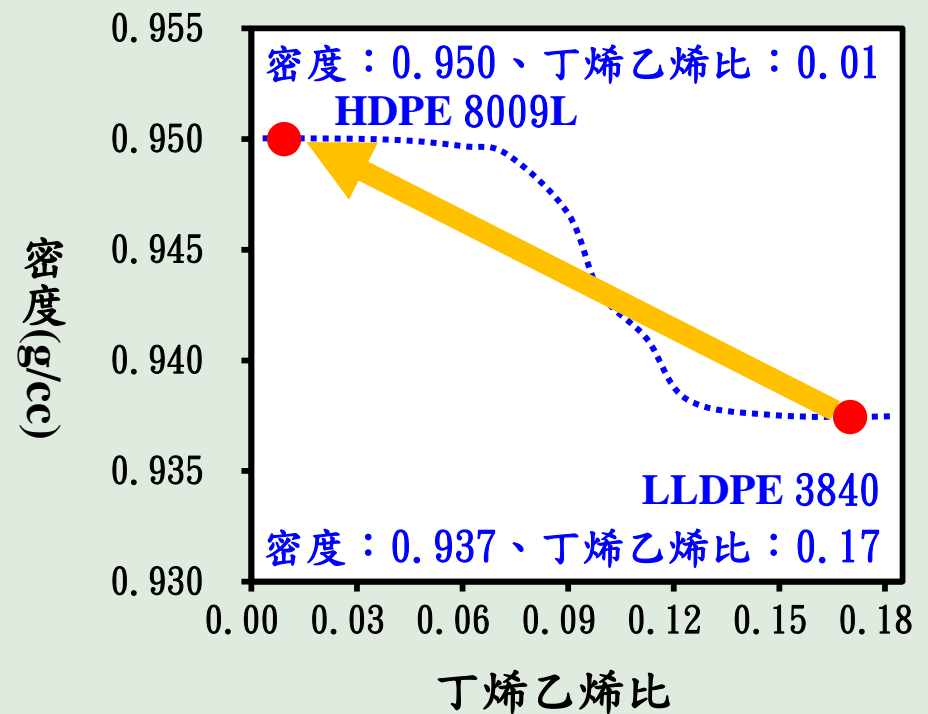
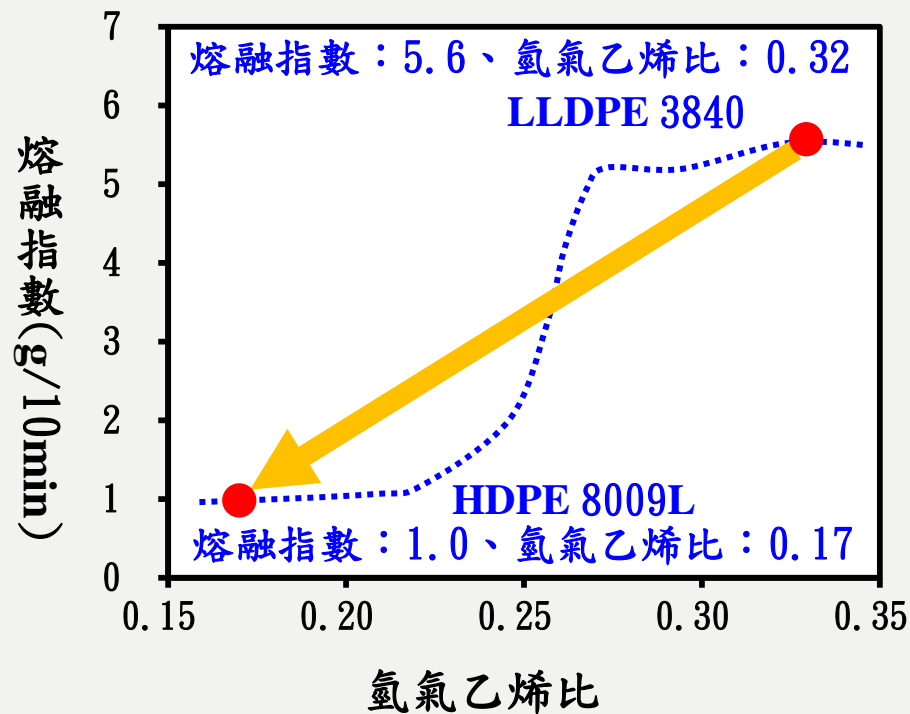
2. 麥寮LLDPE廠製程說明(3/3)

➤ 控制品質的製程參數

LLDPE與HDPE品別相互轉換時，逐步調整氫氣乙烯比控制熔融指數、丁烯乙烯比控制密度。

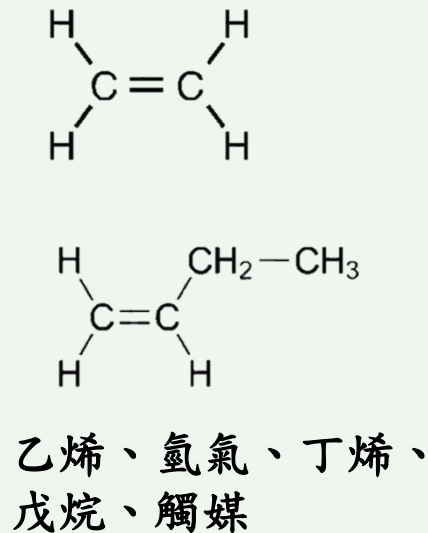
➤ 舉例說明：

由LLDPE 迴轉成型級3840轉品別至HDPE扁紗級 8009L，熔融指數由5.6調降至1.0、密度由0.937提高至0.950。

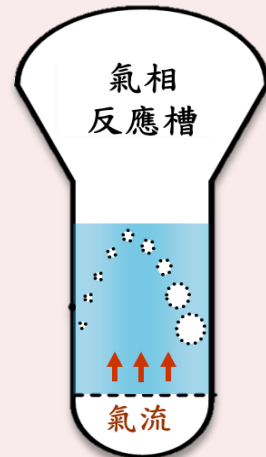


3. 改善動機(1/2)

- 因LLDPE吹膜料市場供給過剩，為提高獲利，轉生產HDPE扁紗級。
- 轉HDPE過程，因粉體密度升高、熔融指數降低，會產生靜電，若控制參數未即時調整，易形成塑片阻塞出料管路。
- LLDPE轉產HDPE過程需每小時取樣分析，再依檢驗結果來調整反應槽氫氣乙烯比及丁烯乙烯比，由於控制參數無法即時調整，每次轉品別時間 ≥ 24 小時。



投入原物料



停留時間
約3~4 hr

聚合反應



檢驗：
1. 熔融指數
2. 密度

PE粉取樣檢驗

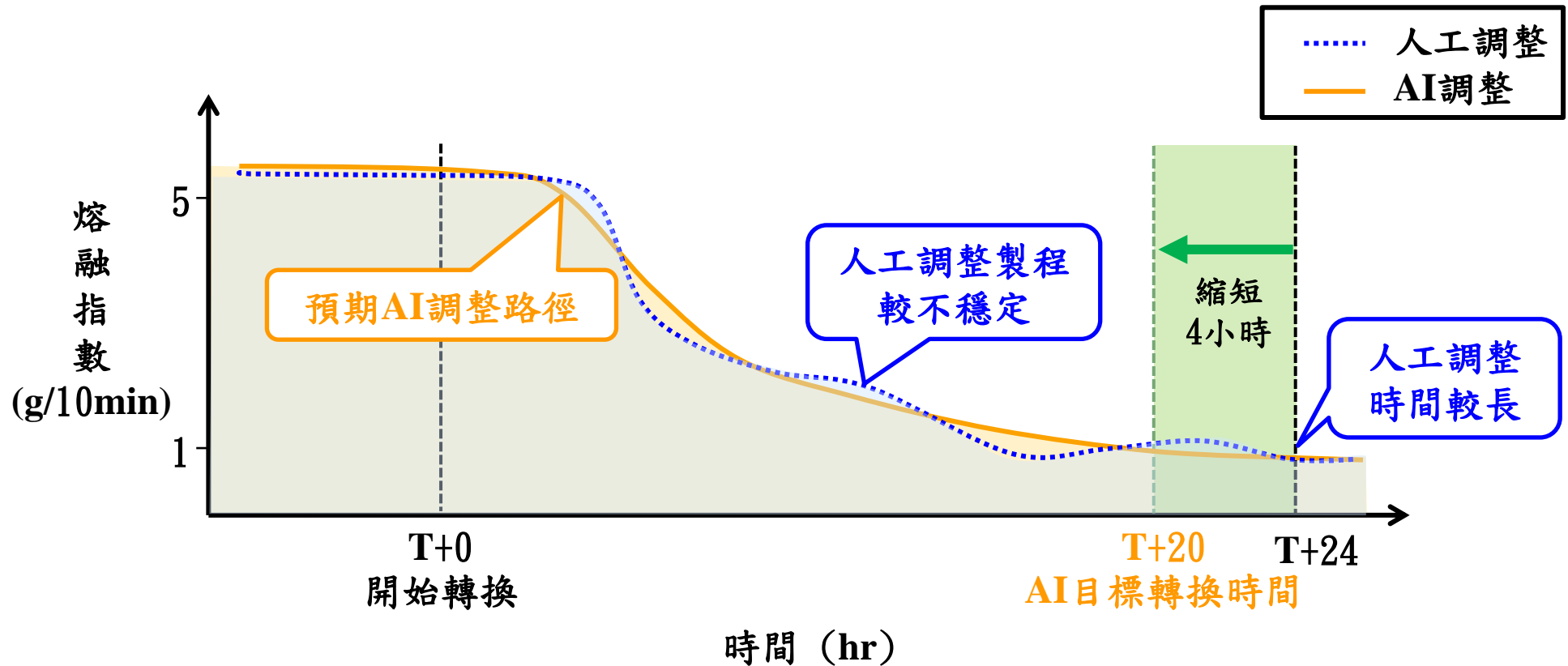


調整反應槽控制參數：
1. 氫氣乙烯比
2. 丁烯乙烯比

控制參數調整

3. 改善動機(2/2)

- 目前轉換品別過程，因為需等待檢驗數據回饋，再由人工調整氫氣乙烯比及丁烯乙烯比，約24小時才能完成轉換。
- 擬以AI演算法進行即時品質預測，目標縮短為20小時內完成轉換，減少中間品發生量。



4. 解決方案

- 本案含有聚合放熱反應，為求製程安全，先由試驗工場與長庚大學合作，利用Aspen模擬，以及文獻提供的熔融指數、密度之理論方程式，建立聚合反應模型，產出大量數據以克服數據不足問題，最後使用AI演算法進行即時品質預測，其AI模型建置方法再展開至LLDPE廠運用。
- LLDPE廠依下列4個步驟進行AI建模：



(1) 數據收集

從即時生產管理系統收集轉品別過程之操作條件、氣相組成數據。



(2) Aspen模擬

1. 聚合反應模擬：Aspen Polymers
 2. 穩態製程模擬：Aspen Plus
 3. 動態製程模擬：Aspen Dynamics
- } 聚合反應模型



(3) AI模型建立

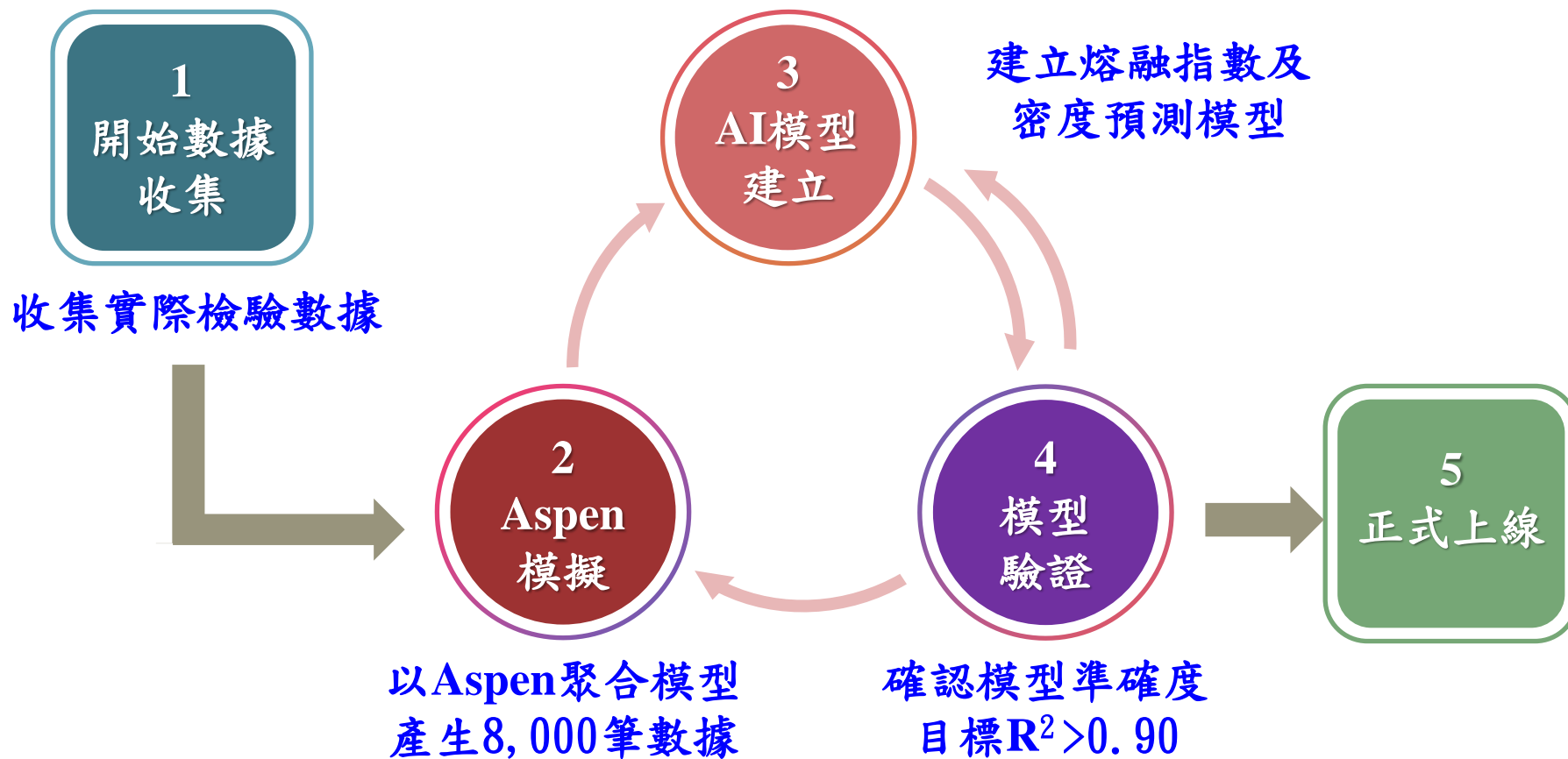
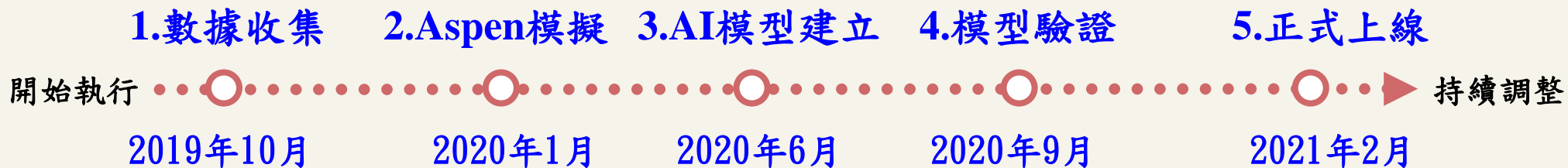
將聚合反應模型產生之數據導入AI演算法建模
(預測熔融指數、密度)



(4) 模型驗證

分析AI模型預測趨勢，驗證模型預測值與實際值的變化趨勢是否相近。

5. AI模型開發歷程

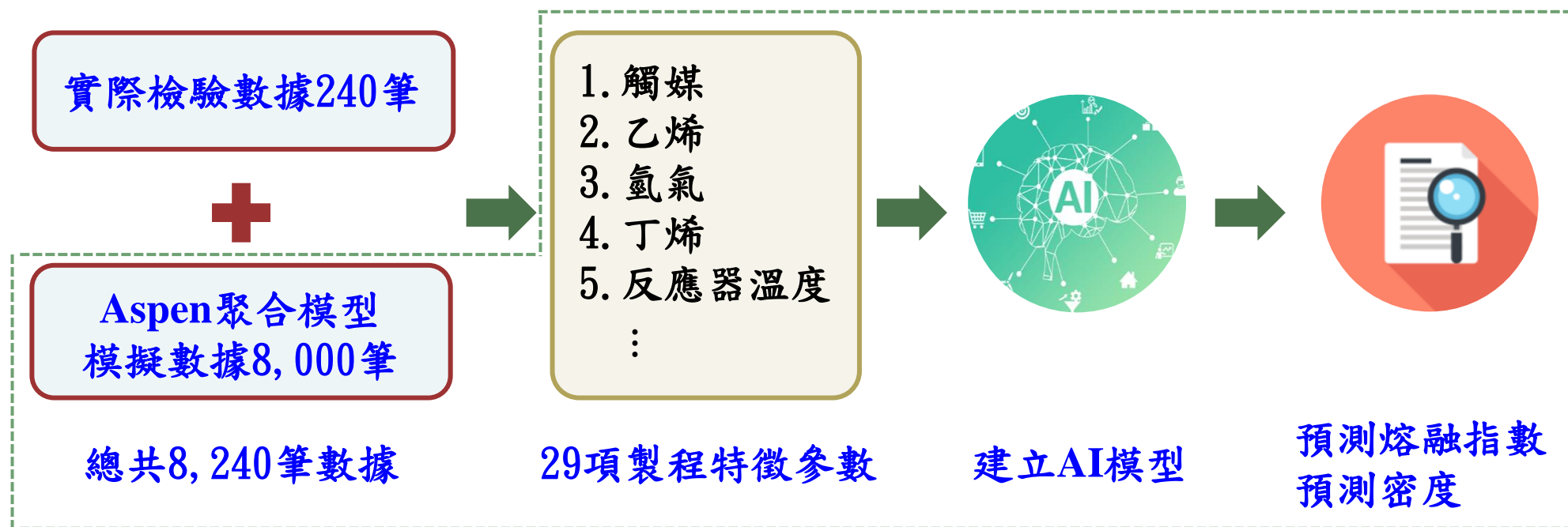


R²：愈接近1，代表模型預測值越接近實際值。

6.1 第一階段：數據收集

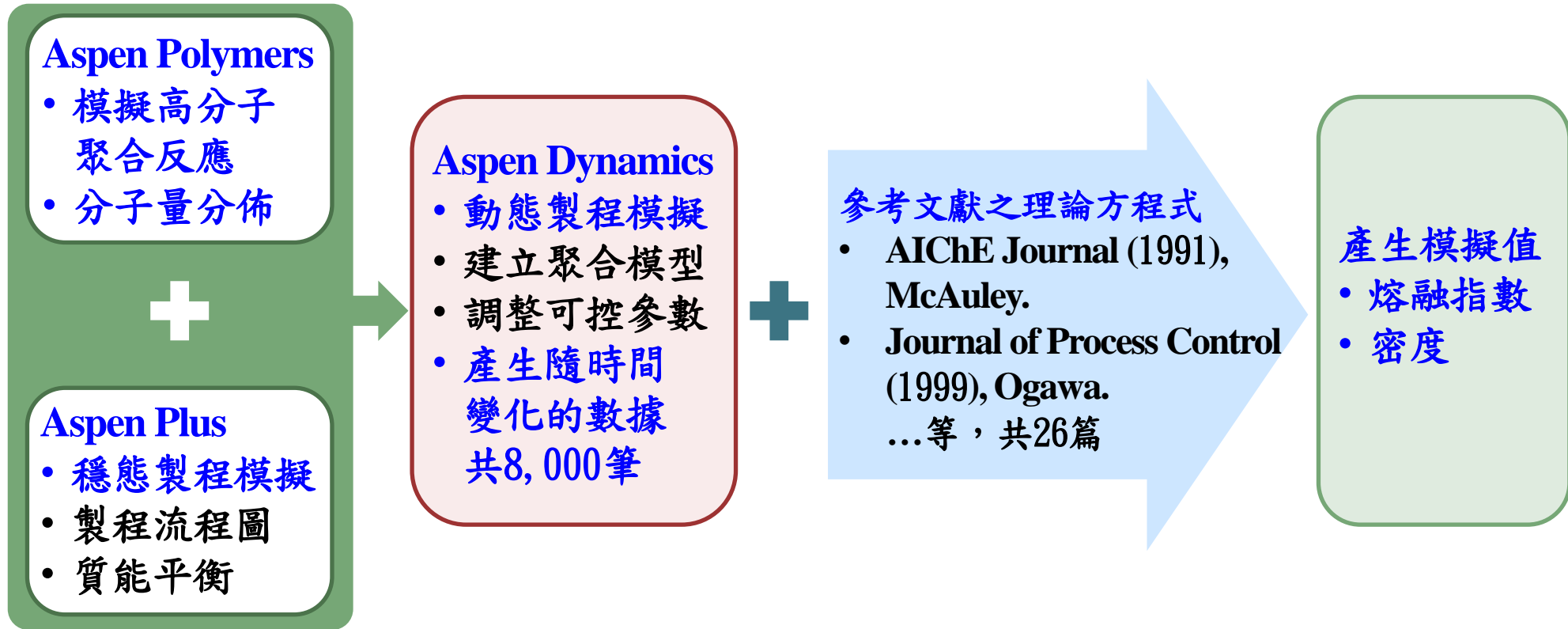
資料收集

- (1) 時間：2019年10月 ~ 2020年12月 (取5次轉品別數據)
- (2) 筆數：實際檢驗數據240筆及Aspen模擬數據8,000筆，共8,240筆資料
- (3) 特徵：共29項製程特徵參數
- (4) 訓練資料：4次轉品別數據及Aspen數據
- (5) 驗證資料：2020年9月轉品別數據
- (6) 預測目標：熔融指數、密度



6.2 第二階段：Aspen模擬(1/7)

➤ Aspen產生模擬數據之流程



文獻理論方程式：

熔融指數： $MI_C^{-0.286}(t) = \exp\left(-\frac{h}{\tau}\right) MI_C^{-0.286}(t-h) + [1 - \exp(-h/\tau)] MI_i^{-0.286}(t-h)$

密度： $\frac{1}{\rho_C(t)} = \exp\left(-\frac{h}{\tau}\right) \frac{1}{\rho_C(t-h)} + [1 - \exp(-h/\tau)] \frac{1}{\rho_i(t-h)}$

6.2 第二階段：Aspen模擬(2/7)

➤ Aspen Polymers功能介紹

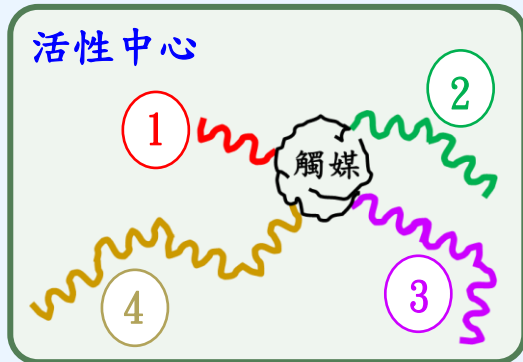
模擬高分子聚合反應、分子量分佈以及反應熱。

➤ LLDPE廠製程使用的Ziegler–Natta觸媒，其具有可生成多種PE分子鏈大小的活性中心(Active centers)，以構成整體PE粉體的熔融指數及密度。

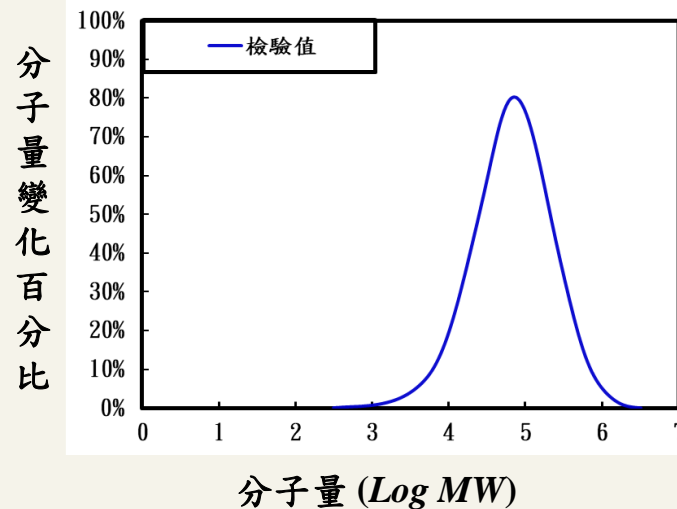
改善前	GPC檢驗儀器無法直接量測每種活性中心的分子量分佈。
改善後	運用Aspen Polymers可模擬出四種最符合實際分子量分佈的活性中心，並解析每種活性中心獨特的動力方程式後，能更有效掌握每種活性中心的特性並加以應用。

➤ 模擬步驟

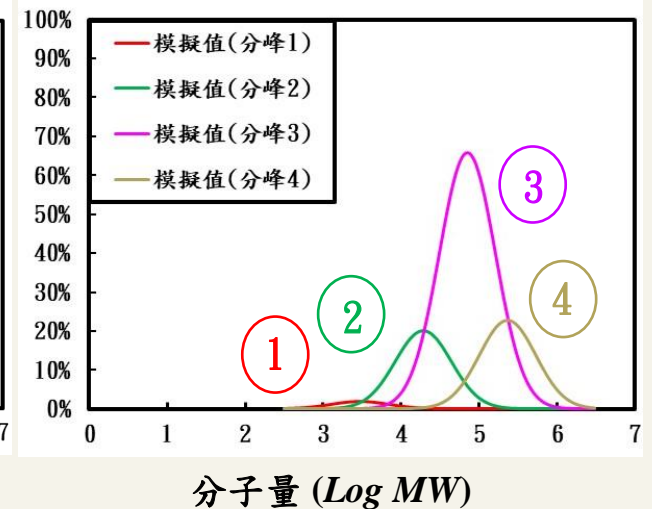
- (1)輸入觸媒聚合類型
- (2)輸入13個聚合反應方程式
- (3)解析分子量



GPC 檢驗數據



Aspen Polymers 模擬

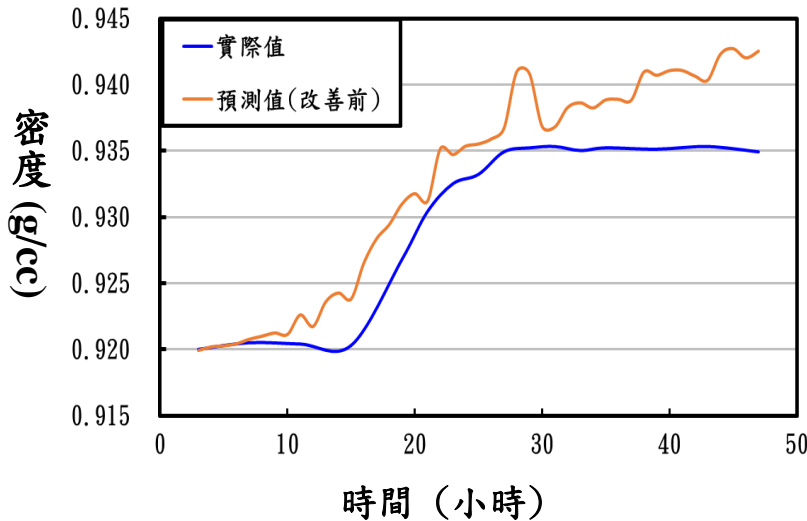
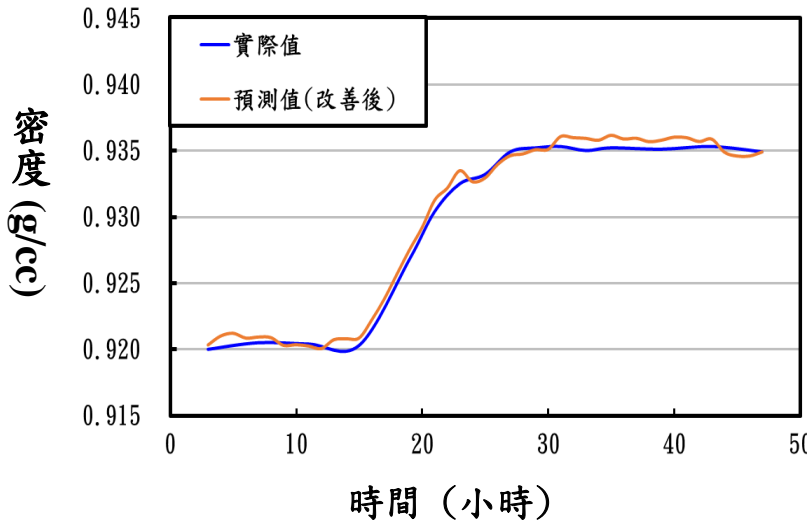


GPC：凝膠滲透層析儀，分析聚合物分子量分佈。改善前

改善後

6.2 第二階段：Aspen模擬(3/7)

➤ 預測結果差異

	改善前	改善後
內容	未解析活性中心，僅依照GPC檢測儀器的結果進行模擬。以預測密度為例，轉品別之過程與前後的預測值誤差大。	經由Aspen Polymers解析活性中心與動力方程式後，以預測密度為例，轉品別之過程與前後的預測值誤差小。
結果	 <p>Figure 1: Density (g/cc) vs Time (hours) - Before Improvement. The graph shows two curves: '實際值' (Actual Value, blue line) and '預測值(改善前)' (Prediction Before Improvement, orange line). The x-axis represents time in hours from 0 to 50, and the y-axis represents density in g/cc from 0.915 to 0.945. The actual value starts at 0.920, remains stable until 15 hours, then rises to 0.935 by 30 hours and stays there. The prediction starts at 0.920, rises earlier to 0.930 by 20 hours, peaks at 0.942 around 28 hours, and then fluctuates around 0.940.</p>	 <p>Figure 2: Density (g/cc) vs Time (hours) - After Improvement. The graph shows two curves: '實際值' (Actual Value, blue line) and '預測值(改善後)' (Prediction After Improvement, orange line). The x-axis represents time in hours from 0 to 50, and the y-axis represents density in g/cc from 0.915 to 0.945. The actual value starts at 0.920, remains stable until 15 hours, then rises to 0.935 by 30 hours and stays there. The prediction follows the actual value very closely, starting at 0.920, rising to 0.930 by 20 hours, and reaching 0.935 by 30 hours, with minimal deviation thereafter.</p>

6.2 第二階段：Aspen模擬(4/7)

➤ Aspen Plus功能介紹

建立原物料各項基本特性(化性、物性)，及模擬製程穩態質能平衡，如：蒸餾塔、壓縮機、熱交換器等。

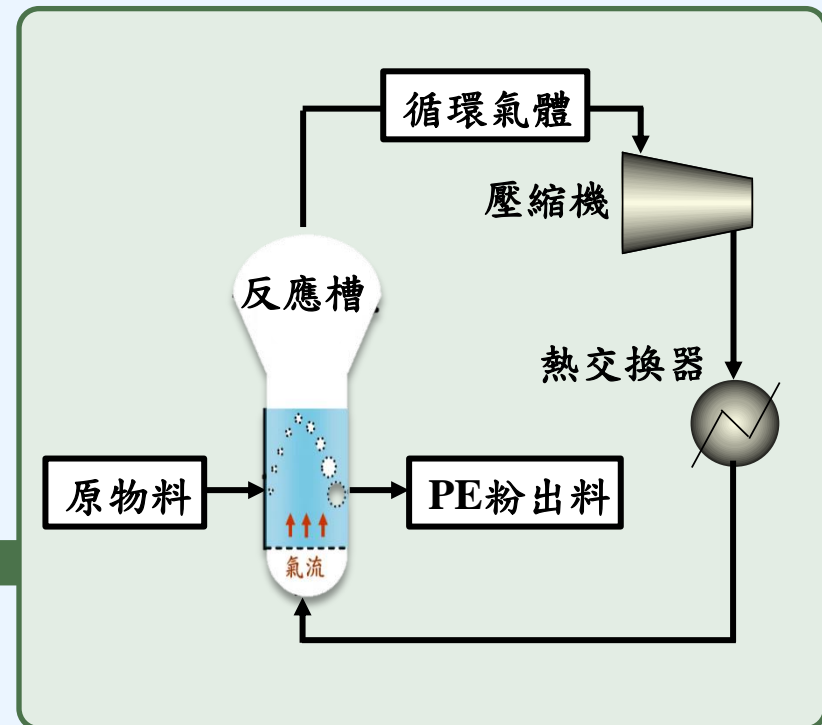
➤ 以LLDPE廠為例，建置穩態製程模擬系統後，計算氫氣乙烯比、丁烯乙烯比及質能平衡。

➤ 模擬步驟

Step1：輸入穩定生產時的製程資料

- (1)基本化學物性
- (2)反應溫度、壓力
- (3)進料流量

Step2：建立穩態製程模擬系統



Step3：產出模擬結果

- (1)氫氣乙烯比、
丁烯乙烯比
- (2)質能平衡
- (3)氣相組成
- ⋮

6.2 第二階段：Aspen模擬(5/7)

➤ Aspen Dynamics功能介紹

在Aspen Plus的架構下，可以模擬隨時間變化的製程操作參數，獲得數據資料。

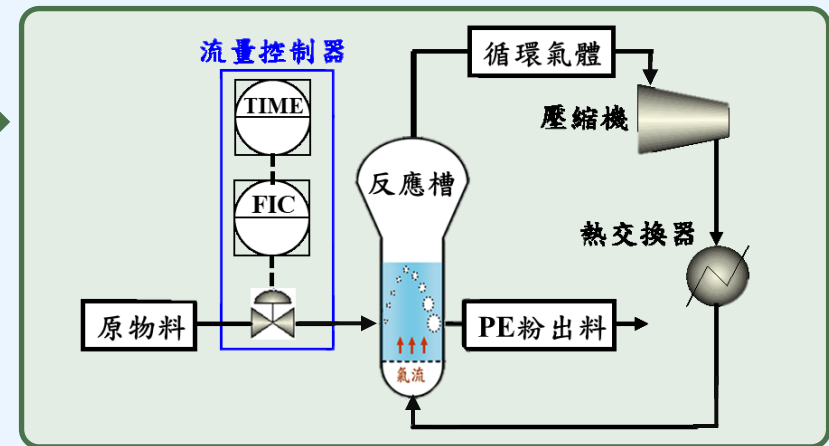
➤ 以LLDPE廠為例，在模擬系統加入流量控制器，並經過理論方程式計算熔融指數與密度。

➤ 模擬步驟

Step1：輸入製程條件

- (1) 流量控制器、溫度控制器、壓力控制器
- (2) 隨時間變化的製程參數
(進料流量、反應溫度、反應壓力...)

Step2：建立動態製程模擬系統



Step4：結合文獻之理論方程式

產生模擬值
熔融指數、密度

Step3：產出隨時間變化的模擬數據

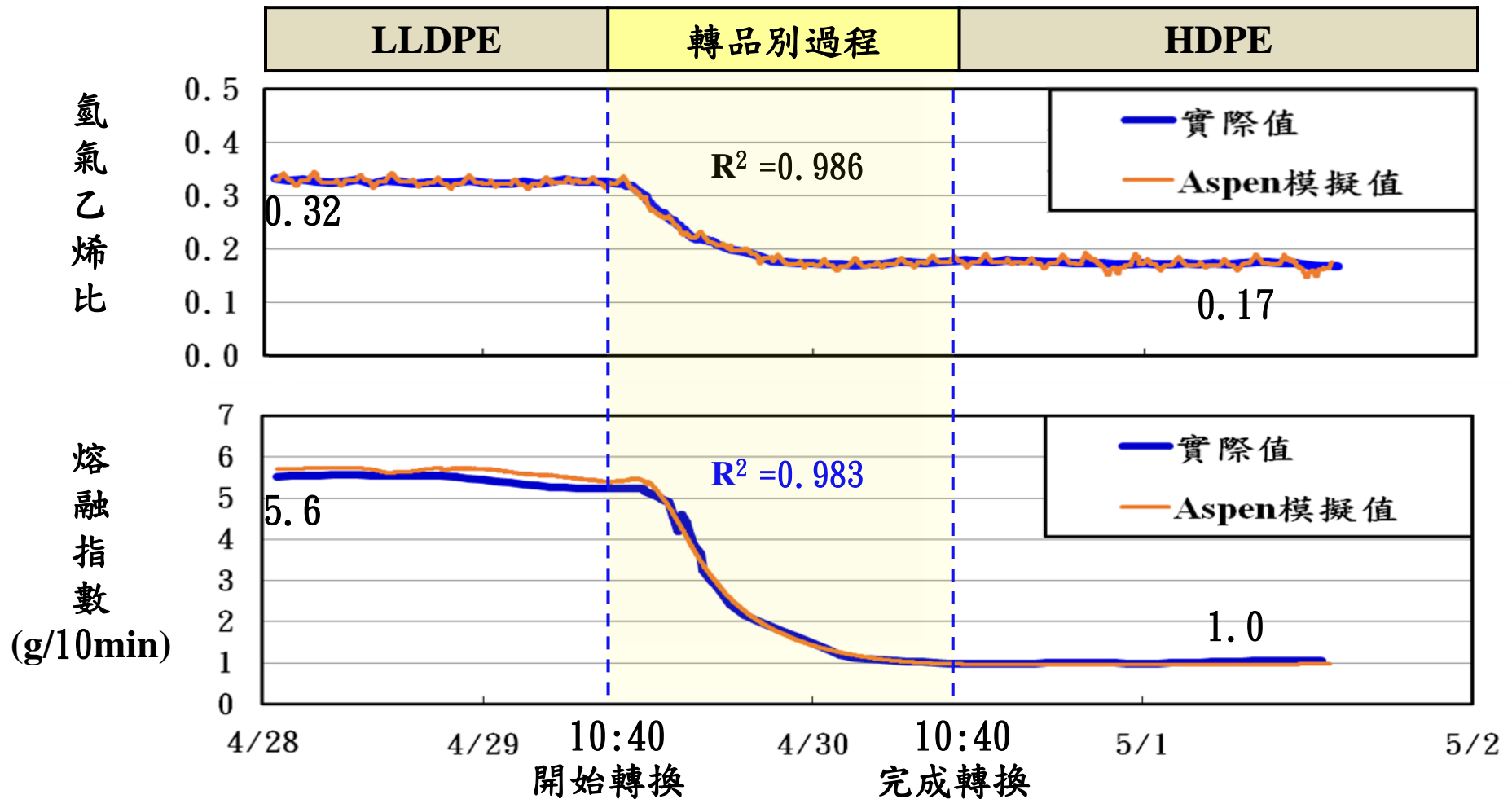
(1) 氫氣乙烯比、丁烯乙烯比
⋮

6.2 第二階段：Aspen模擬(6/7)

➤ Aspen Dynamics 氫氣乙烯比、熔融指數模型驗證：

(1) 以2020/4/29轉產HDPE實際操作數據進行驗證。

(2) 轉品別過程氫氣乙烯比減少、熔融指數降低，符合實際值變化趨勢。

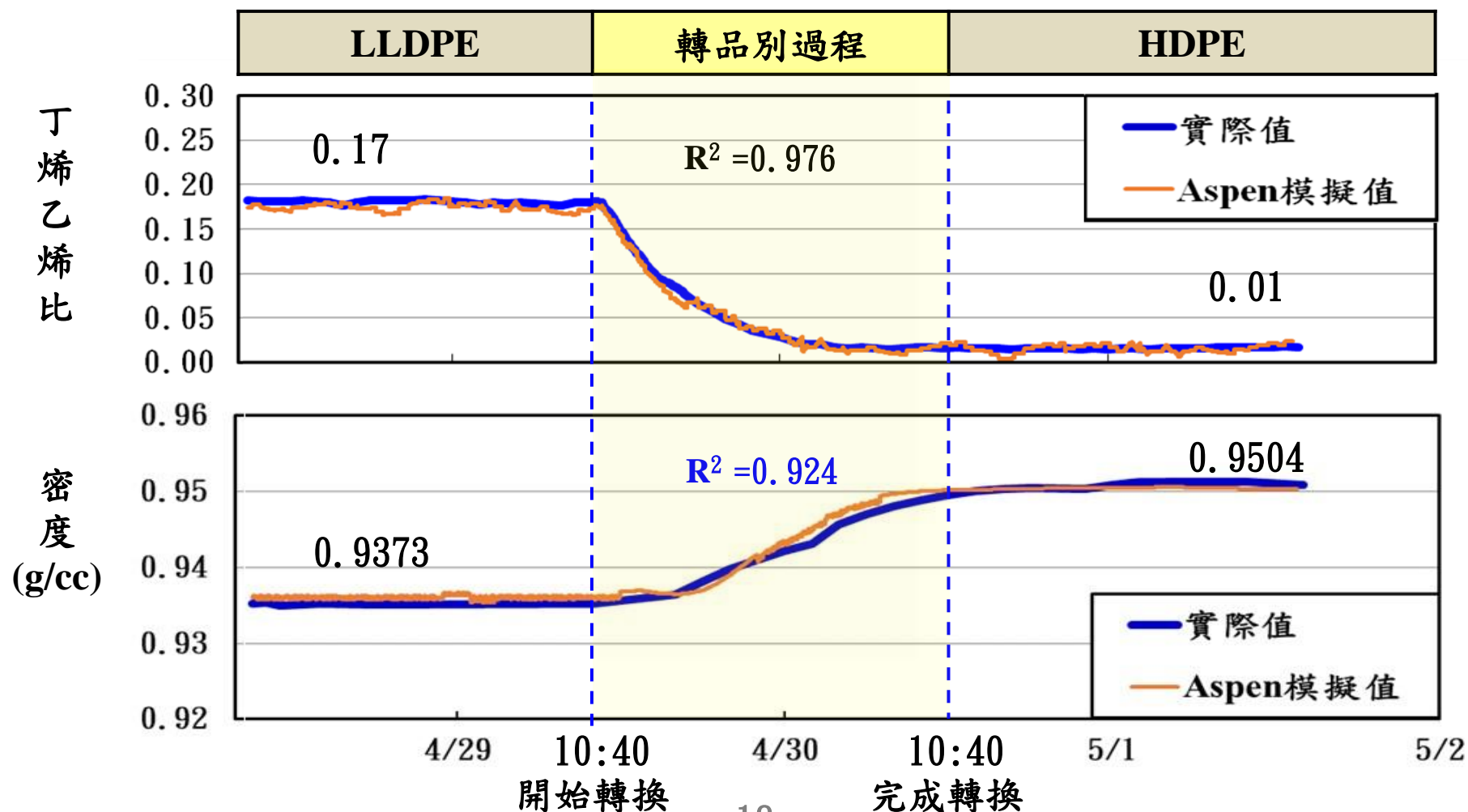


6.2 第二階段：Aspen模擬(7/7)

➤ Aspen Dynamics 丁烯乙烯比、密度模型驗證：

(1) 以2020/4/29轉產HDPE實際操作數據進行驗證。

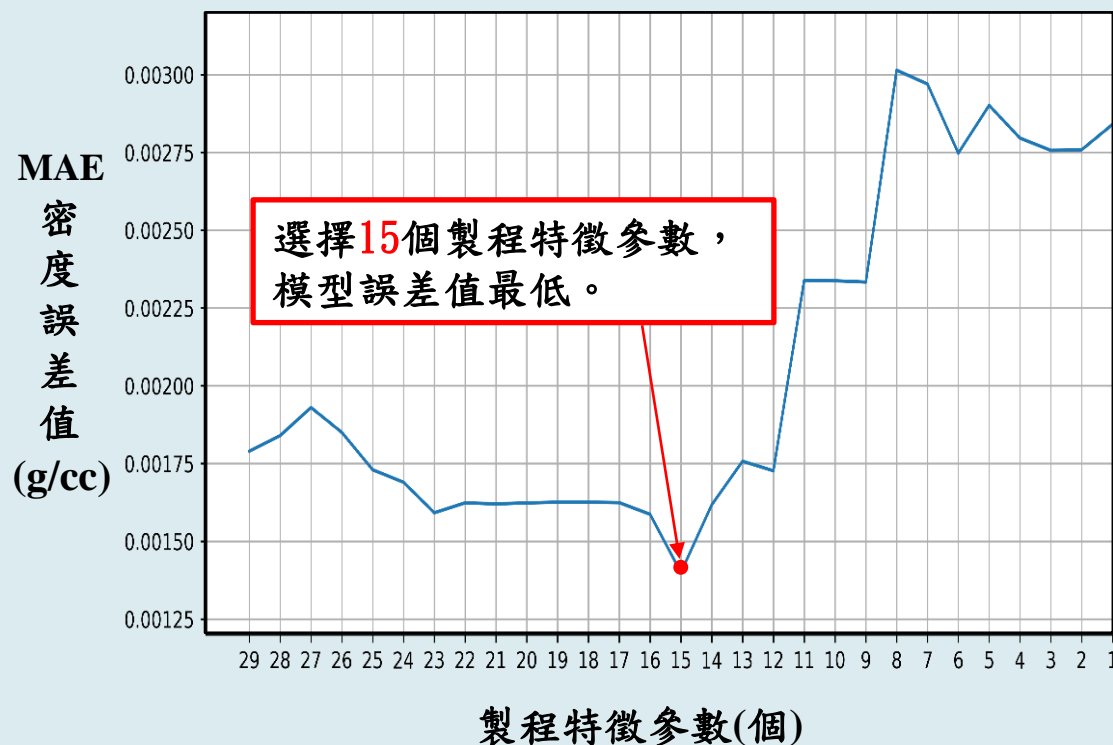
(2) 轉品別過程丁烯乙烯比減少、密度提高，與實際值變化趨勢一致。



AI演算法特徵篩選

➤ 遞迴特徵篩選法(Recursive Feature Elimination, RFE)：

29個製程特徵參數，以線性迴歸演算法進行訓練，每次訓練後，移除權重最低的製程特徵參數，再重新進行下一次訓練，找出MAE誤差值最小的製程特徵參數之個數，最後共篩選出15個，進行AI建模。



● 篩選出的15個製程特徵參數：

- ✓ 氫氣乙烯比、丁烯乙烯比
- ✓ 進料流量：
(觸媒、副觸媒、氫氣、
丁烯、乙烯)
- ✓ 反應器溫度、壓力、壓差
- ✓ 氣相組成：
(乙烯、氫氣、氮氣、
丁烯、戊烷)

MAE：平均絕對誤差(Mean Absolute Error)，數值愈小表示模型預測效果愈佳

- 由於預測目標屬於連續性數值預測，適用迴歸演算法進行預測，採用常見的6種迴歸演算法比較，以2020/9轉品別資料進行驗證。
- 擬採用嶺迴歸(Ridge)演算法作為主要預測模型。

項次	迴歸演算法	R ²		MAE	
		熔融指數	密度	熔融指數	密度
1	Ridge	0.954	0.946	0.286	0.0008
2	LASSO	0.946	0.772	0.379	0.0019
3	MLR	0.931	0.925	0.466	0.0010
4	SVM	0.925	0.562	0.520	0.0056
5	Random Forest	0.906	0.524	0.569	0.0049
6	PCA	0.940	0.920	0.421	0.0014

► 第一階段(Ridge演算結果)

先以15個特徵參數之實際檢驗數據240筆進行訓練，以熔融指數為例。

特徵參數 (X_i)	權重 (w_i)	是否符合 化工原理
丁烯乙烯比	1.94	是
氫氣乙烯比	1.80	
反應器溫度	1.63	
副觸媒	0.72	
觸媒	-0.67	
丁烯組成	0.63	
氫氣組成	-0.46	否(權重應為負值)
乙烯進料量	0.39	
氫氣組成	-0.41	否(權重應為正值)
反應器槽壓	0.35	是
氫氣進料量	0.15	
乙烯組成	-0.06	
反應器迴流量	0.06	否(權重應為負值)
戊烷組成	0.04	否(權重應為負值)
丁烯進料量	0.03	是

$$Y(\text{熔融指數}) = \sum_{i=1}^n w_i X_i + b$$

1. 權重(w_i)正負號表示特徵參數(X_i)與Y的相關性
 +：正相關表示特徵參數愈大，對應熔融指數愈高
 -：負相關表示特徵參數愈大，對應熔融指數愈低
2. 以氫氣組成為例，在轉品別過程中隨著氫氣組成提高，熔融指數應愈高，權重應為正值。
3. Ridge演算法雖估算結果與實際檢驗數據相近，但轉品別資料較少，導致有4個特徵參數的權重正負值與化工原理不符。

➤ 第二階段(Ridge演算結果)

- 利用Aspen產生8,000筆數據加入訓練，訓練後的結果，原本與化工原理不符的製程參數權重皆已獲得解決，詳如下表：

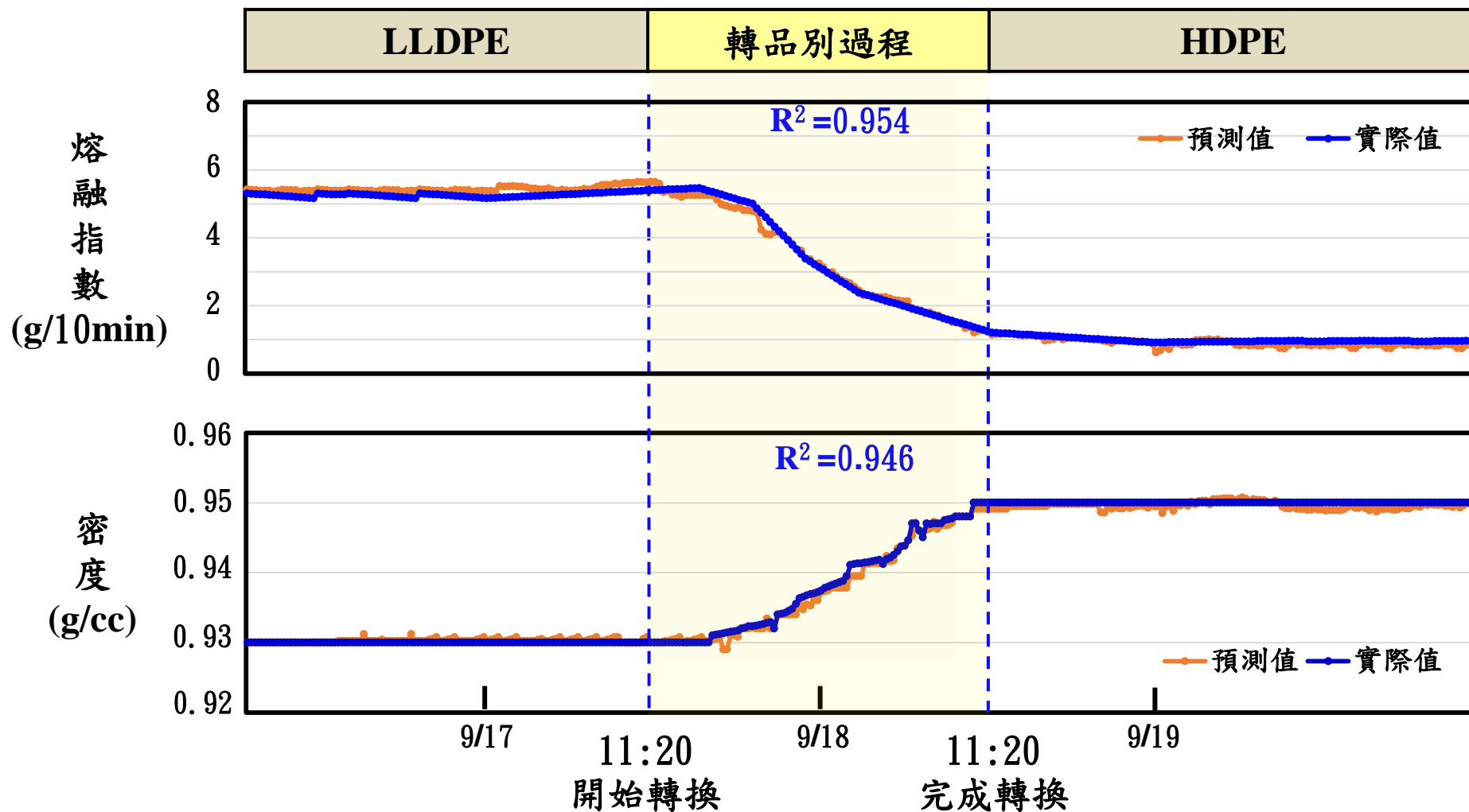
特徵(製程參數)	使用Aspen模擬數據前		使用Aspen模擬數據後	
	權重	化工原理	權重	化工原理
乙烯進料量	0.39	不符合	-0.43	符合
氫氣組成	-0.41	不符合	0.84	符合
反應器迴流量	0.06	不符合	-0.27	符合
戊烷組成	0.04	不符合	-0.30	符合

- 結果說明：加入Aspen模擬數據後， R^2 及MAE均有明顯改善。

預測目標	評估指標	使用Aspen模擬數據前	使用Aspen模擬數據後
熔融指數	R^2	0.823	0.954
	MAE	0.790	0.286
密度	R^2	0.809	0.946
	MAE	0.0016	0.0008

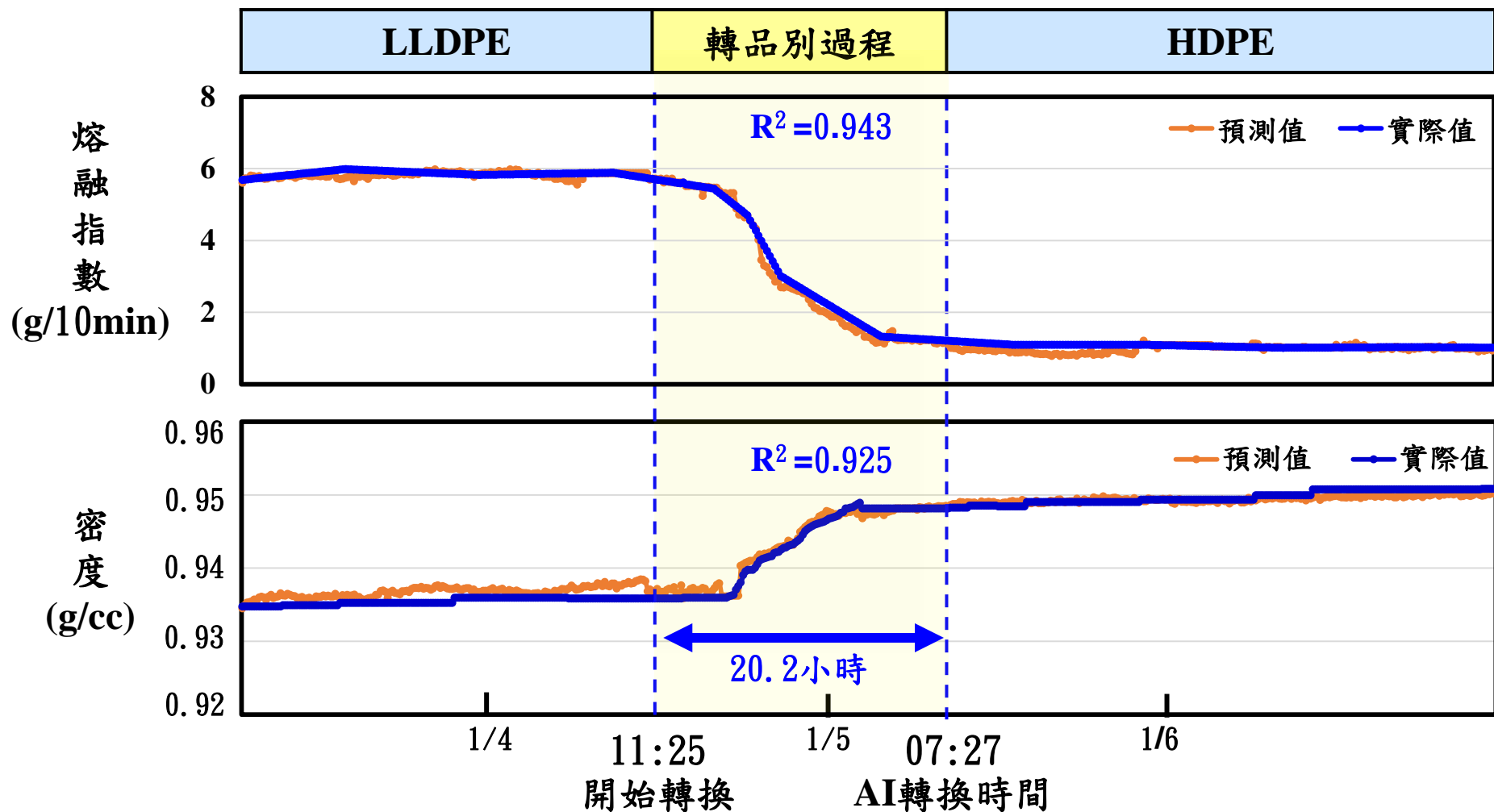
6.4 第四階段：AI模型驗證

- 先以歷史數據(2020/9/17 ~ 2020/9/19)驗證模型。
- 驗證結果：預測值與實際值的變化趨勢相近。



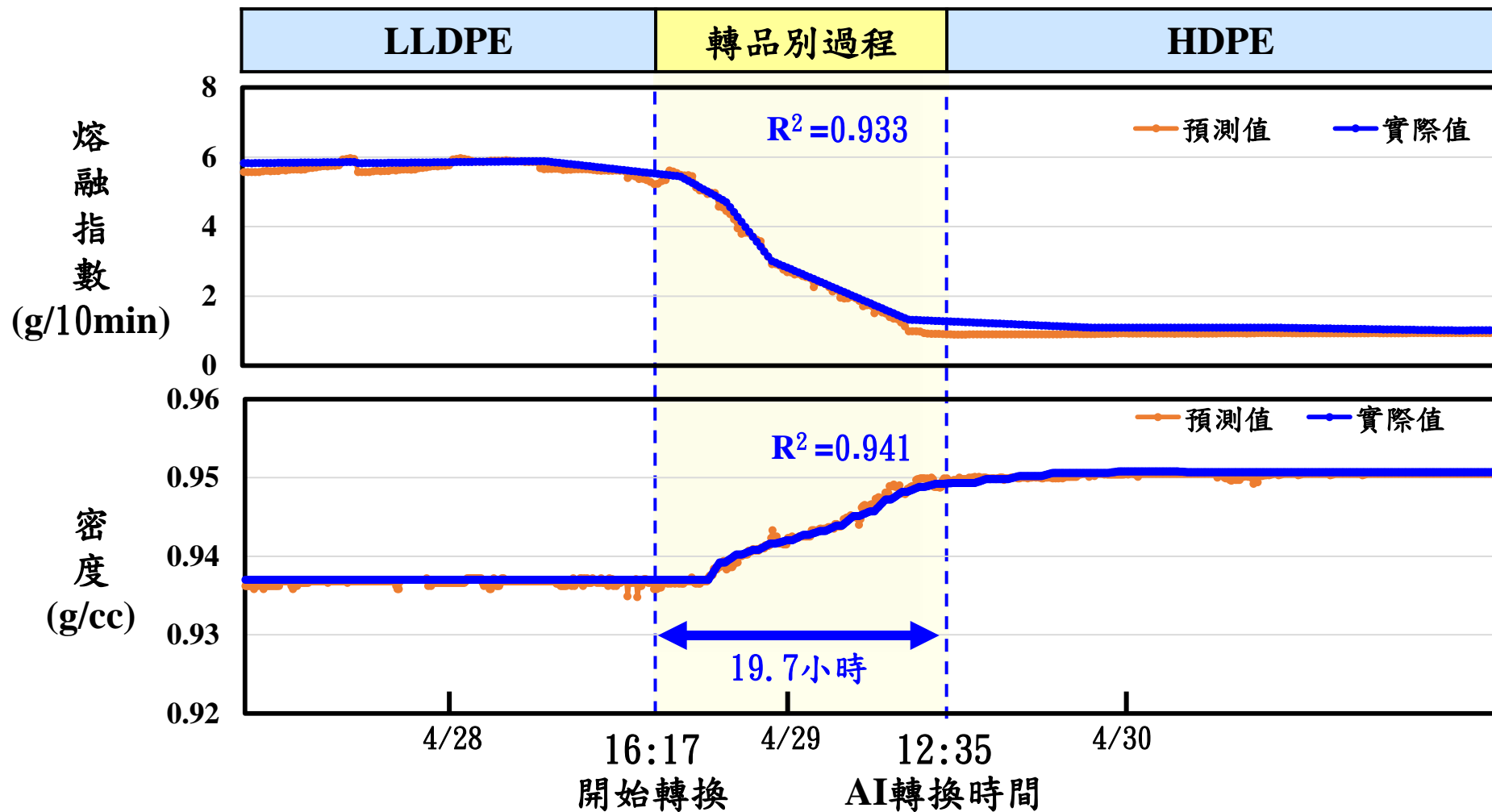
6.5 第五階段：上線驗證

- AI模型上線驗證時間為2021/1/4 ~ 2021/1/6。
- 驗證結果：轉換時間由24小時降為20.2小時，實際產生中間品數量364噸，與設定目標相近，AI模型於2月正式上線。



6.5 第五階段：上線驗證

- AI模型上線驗證時間為2021/4/28 ~ 2021/4/30。
- 驗證結果：轉換時間為19.7小時，中間品數量355噸，達成設定目標。



7. 效益說明

➤ 投資費用：

產學案Aspen模擬 & AI建模費用：1,365千元

➤ 效益計算：

單位：千元/年

①預估每次轉換可降低中間品 (75噸/次 * 10次/年 * 價差2千元/噸)	1,500
②提升轉品別製程操作穩定性，避免塑片阻塞造成停車損失 (3,029千元/次 * 2次/年)	6,058
③平行展開至本廠其它品別 (1,360噸/年*價差2千元/噸)	2,720
④應用於試驗工場新產品測試，減少因轉換程序失敗之原物料 損失(575千元/次 * 2次/年)	1,150
⑤降低人工檢驗頻率及人力費用	157
總計	11,585

➤ 回收年限：0.12年

8. 結論及後續推動事項

➤ 結論：

- (1)為克服聚合反應數據不足問題，本案首次結合Aspen Polymers、Aspen Plus及Aspen Dynamics，成功建立聚合反應模型，產出大量數據供AI模型訓練。
- (2)運用Aspen Polymers模擬出四種最符合實際分子量分佈的活性中心，解析每種活性中心獨特的動力方程式，能更有效掌握各種活性中心的特性並加以應用。
- (3)使用遞迴特徵篩選法，找出誤差值最小的特徵參數來進行AI建模。
- (4)採用嶺迴歸演算法進行即時品質預測，上線測試結果達設定目標。

➤ 後續推動事項：

- (1)本案導入Aspen Polymers模擬化學聚合反應之操作條件，此經驗可提供給其他具有聚合反應之廠處參考。
- (2)對現場操作人員教育訓練，參考AI演算預測結果進行調整，降低人工操作偏移。

部門	單位	主題	應用技術	預完日	預估效益 (千元/年)
聚烯 事業部	麥寮 HDPE廠	AI應用於轉規格別 最佳化控制	嶺迴歸(Ridge)演算法、 Aspen Polymers、Aspen Plus 及Aspen Dynamics	2022/10/E	2,000
	林園 HDPE廠			2022/10/E	1,000

報告完畢 恭請訓示



附件：英文專有名詞資料表

英文名詞	英文全名	中文名稱	說明
Aspen Polymers	Aspen Polymers	-	模擬高分子聚合物熱力學及物理性質、不同聚合反應之機制模擬、分子量計算等，如PE、PP、EVA、NYLON。
Aspen Plus	Aspen Plus	-	常用於化學品物理性質及熱力學模擬，以及化工製程和設備的最佳化操作條件開發。
Aspen Dynamics	Aspen Dynamics	-	以Aspen Plus模型為基礎，根據模型時間的變化，調整製程可控變數，產生有時間變化的模擬數據。
Active center	Active center	活性中心	存在於觸媒，PE、PP等聚合物從此處開始生長。
R^2	R squared	決定係數	決定係數愈接近1，代表模型預測值越接近實際值。
Z-N Catalyst	<u>Ziegler-Natta</u> Catalyst	齊格勒-納塔觸媒	生產PE、PP聚合物的觸媒，由齊格勒、納塔此兩位科學家所發現。
GPC	<u>Gel Permeation</u> <u>Chromatography</u>	凝膠滲透層析儀	根據溶質分子大小進行分離的技術，用於測量聚合物分子量。
MAE	<u>Mean Absolute</u> <u>Error</u>	平均絕對誤差	多筆實際值與預測值誤差的絕對值平均。

附件：英文專有名詞資料表

英文名詞	英文全名	中文名稱	說明
RIDGE	RIDGE	嶺迴歸	利用權重係數調整方法，可以避免模型過擬合的線性迴歸方法。
LASSO	LASSO	套索算法	
MLR	<u>M</u> ultiple <u>L</u> inear <u>R</u> egression	多重線性迴歸	探討多個預測變數及一個依變數之間的關係。
SVM	<u>S</u> upport <u>V</u> ector <u>M</u> achine	支持向量迴歸	一種藉由找出預測值與實際值偏離最小的迴歸方法，在SVM中，偏差不大的數據會被視為正確預測。
Random Forest	Random Forest	隨機森林	重複且隨機的從訓練資料中取樣本建立多個決策樹模型，整合多個決策樹結果給出估算值。
PCA	<u>P</u> rincipal <u>C</u> omponent <u>A</u> nalysis	主成分分析	將變數的高維空間投影至特徵向量的低維空間，進而降低變數維度並能維持原有的資訊量。

附件

附件：改善動機

- 從LLDPE轉產HDPE時，需線上轉換反應槽粉床，並以粉床之密度、熔融指數來調整操作條件：

品別	使用觸媒	軟化溫度°C
HDPE扁紗級	D觸媒	125
LLDPE迴轉成型級	S觸媒	100
LLDPE薄膜級	S觸媒	95

- 若轉換過程太快，反應槽內粉體容易因高低密度粉體物理性質差異，相互摩擦產生高靜電，進而團聚形成粉塊，粉塊內部反應過度而超過軟化溫度，最終熔融生成塑塊，需停俾清槽。
- 若轉換過程太慢，會造成中間品過多。

附件：效益計算

➤ 提升轉品別階段製程操作穩定性，減少停車損失6,058千元/年

A. 原物料排放損失

項目	單位	損失數量	單價	金額
乙烯	KG	9,360	43.49	407,066
丁烯	KG	6,926	44.7	309,592
戊烷	KG	7,300	38.58	281,634
氫氣	KG	114	132.01	15,049
氮氣	KG	10,021	1.16	11,624
			小計	1,024,966

B. 停開車公用流體增加

項目	單位	增加耗用	單價	金額
蒸汽	MT	209	727.88	152,127
氫氣	KG	458,000	1.16	531,280
電力	KWH	333,000	1.77	589,410
工業水	MT	0	11.5	0
			小計	1,272,817

C. 停車產生次級品損失

項目	單位	損失數量	差價	金額
PE粉下腳品	公噸	10	40,265	402,650
PE塊下腳品	公噸	5	33,965	169,825
PE粒次級品	公噸	44	2,000	88,000
			小計	660,475

D. 製程設備損失、搶修費用

項目	金額
墊片	17,028
人孔拆裝工資	54,033
小計	71,061

E. 平均異常停車次數

年度	轉換次數	異常停車次數
2018	5	2
2019	4	1
2020	5	2
平均異常停車次數		2次/年

節省費用總額：

$$1,024,996(A)+1,272,817(B)+660,475(C)+71,061(D)=3,029\text{千元/次} \times 2\text{次/年} = 6,058\text{千元/年}$$

附件：效益計算

➤ 平行展開至本廠其它品別

預估效益：1,360噸/年*價差2,000元/噸=2,720千元

相互轉換品別	轉品別次數	2020年合計中間品數量 (噸)	預估AI降低數量 (噸)
3214 ↔ 3224	22	7,997	1,360
3214 ↔ 3470	1		
3214 ↔ 3840	1		
3224 ↔ 3470	10		
3224 ↔ 3840	5		
3470 ↔ 3490	12		
3470 ↔ 3840	5		
3470 ↔ 7200	1		
3470 ↔ 8009	1		
3840 ↔ 8009	-		
7200 ↔ 8050	1		
8009 ↔ 8050	1		
合計	67		

1. 依3840轉8009L降低中間品數量占比 $75/430=0.174$ ，以17%估算平行展開至其它品別之中間品降低量。
2. 預估效益部分，已扣除3840/8009L互轉之中間品降低量，以免重複計算效益

附件：效益計算

➤ 平行展開至林園及麥寮HDPE廠

A. 麥寮HDPE廠

轉品別50次/年*20噸/次*價差2,000元/噸=2,000千元

B. 林園HDPE廠

轉品別50次/年*10噸/次*價差2,000元/噸=1,000千元

節省費用總額：2,000 (A)+ 1,000(B) = 3,000千元/年

附件：效益計算

➤ 降低人工檢驗頻率及人力費用

A. LLDPE廠人力成本(轉品別期間)：

每次轉品別所需時間	$3(\text{班/天}) \times 1(\text{員}) \times 8(\text{次/班}) \times 10(\text{分/次}) = 240(\text{分/次})$
每年轉品別次數	10次/年
每年總時數	$240(\text{分/次}) / 60(\text{分/時}) \times 10(\text{次/年}) = 40(\text{時/年})$
每年總天數	$40(\text{時/年}) / 8(\text{時/天}) = 5(\text{天/年})$
人力成本	月薪50,000(元/月) * 5(天/年) / 30(天/月) = 8,333(元/年)
取樣次數減半	節省費用 $8,333 / 2 \approx 4,000$ 元/年

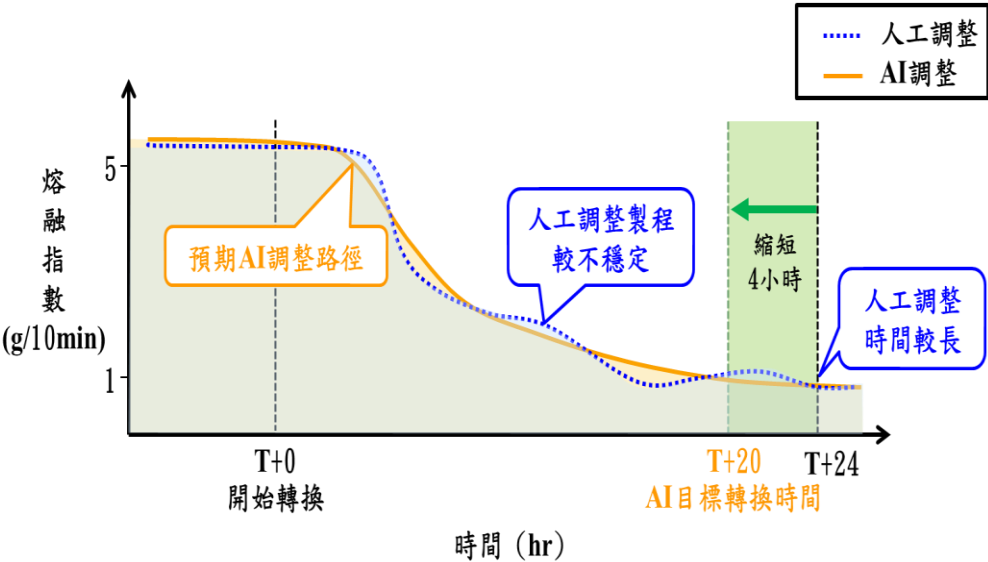
B. 檢驗中心人力成本：(轉品別期間)：

每次轉品別所需時數	$3(\text{班/天}) \times 1(\text{員}) \times 8(\text{次/班}) \times 60(\text{分/次}) = 1,440(\text{分/次})$
每年轉品別次數	10次/年
每年總時數	$1440(\text{分/次}) / 60(\text{分/時}) \times 10(\text{次/年}) = 240(\text{時/年})$
每年總天數	$240(\text{時/年}) / 8(\text{時/天}) = 30(\text{天/年})$
人力成本	熔融指數 MI: 月薪50,000(元/月) * 30(天/年) / 30(天/月) = 50,000(元/年) 密度: 月薪50,000(元/月) * 30(天/年) / 30(天/月) * 2倍人力 = 100,000(元/年)
取樣次數減半	節省費用 $150,000 / 2 = 75,000$ 元/年

C. 檢驗費用：(轉品別期間)：

熔融指數	$217\text{元/次} \times 12\text{次/轉品別} \times 10\text{次轉品別/年} = 26,040\text{元/年}$
密度	$433\text{元/次} \times 12\text{次/轉品別} \times 10\text{次轉品別/年} = 51,960\text{元/年}$

節省費用總額: 4,000 (A)+ 75,000 (B)+ 26,040 (C)+ 51,960(C) = 157千元/年



人工調整曲線數據

時間	品別	熔融指數
16-Sep-20 19:40:00	3840	5.69
16-Sep-20 19:50:00	3840	5.70
16-Sep-20 20:00:00	3840	5.70
16-Sep-20 20:10:00	3840	5.70
16-Sep-20 20:20:00	3840	5.70
16-Sep-20 20:30:00	3840	5.70
16-Sep-20 20:40:00	3840	5.71
16-Sep-20 20:50:00	3840	5.71
16-Sep-20 21:00:00	3840	5.71
16-Sep-20 21:10:00	3840	5.72
16-Sep-20 21:20:00	3840	5.72
16-Sep-20 21:30:00	3840	5.72
16-Sep-20 21:40:00	3840	5.72
16-Sep-20 21:50:00	3840	5.72
16-Sep-20 22:00:00	3840	5.73
16-Sep-20 22:10:00	3840	5.73
16-Sep-20 22:20:00	3840	5.73
⋮	⋮	⋮

➤ 理論方程式說明

熔融指數公式 $MI_C^{-0.286}(t) = \exp\left(-\frac{h}{\tau}\right) MI_C^{-0.286}(t-h) + [1 - \exp(-h/\tau)] MI_i^{-0.286}(t-h)$

密度公式 $\frac{1}{\rho_C(t)} = \exp\left(-\frac{h}{\tau}\right) \frac{1}{\rho_C(t-h)} + [1 - \exp(-h/\tau)] \frac{1}{\rho_i(t-h)}$

公式符號說明：

MI_C ：粉體熔融指數

τ ：粉體於反應槽內滯留時間

ρ_C ：粉體密度

t ：時間

\exp ：指數函數

MI_i ：反應槽內粉體初始熔融指數

h ：人工取樣時間

ρ_i ：反應槽內粉體初始密度

附件：聚合反應方程式

➤ 13個聚合反應方程式，敘述如下：

乙烯

- 鏈引發：乙烯接上觸媒的活性中心，形成乙烯聚合物片段，表示開始聚合生長。
- 鏈增長：新的乙烯接在乙烯聚合物片段，繼續生長。
- 鏈增長：新的丁烯接在乙烯聚合物片段，繼續生長。
- 鏈轉移：乙烯聚合物片段的活性中心轉移到另一個新的聚合物，使得聚合終止。

丁烯

- 鏈引發：丁烯接上觸媒的活性中心，形成丁烯聚合物片段，表示開始聚合生長。
- 鏈增長：新的乙烯接在丁烯聚合物片段，繼續生長。
- 鏈增長：新的丁烯接在丁烯聚合物片段，繼續生長。
- 鏈轉移：丁烯聚合物片段的活性中心轉移到另一個新的聚合物，使得聚合終止。

氫氣

- 鏈轉移：乙烯聚合物片段轉移到氫氣，使得聚合終止。
- 鏈轉移：丁烯聚合物片段轉移到氫氣，使得聚合終止。

觸媒

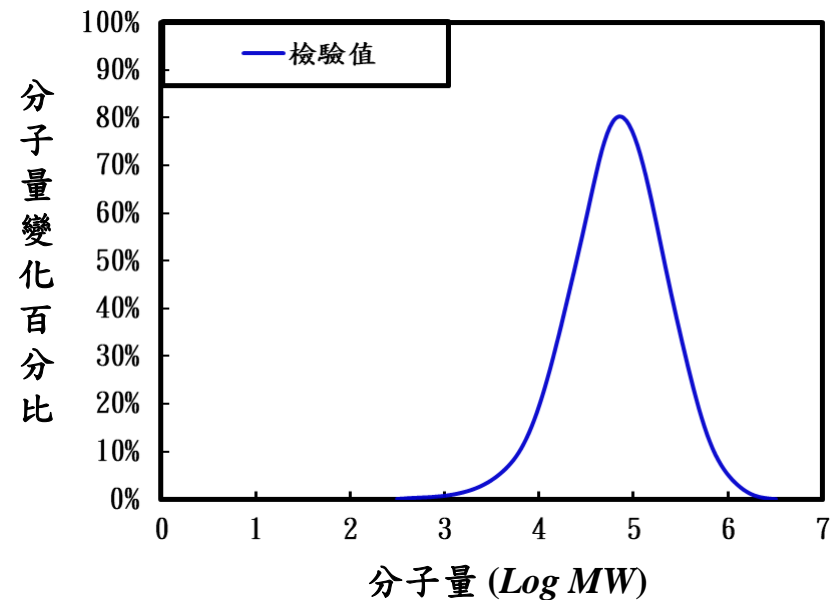
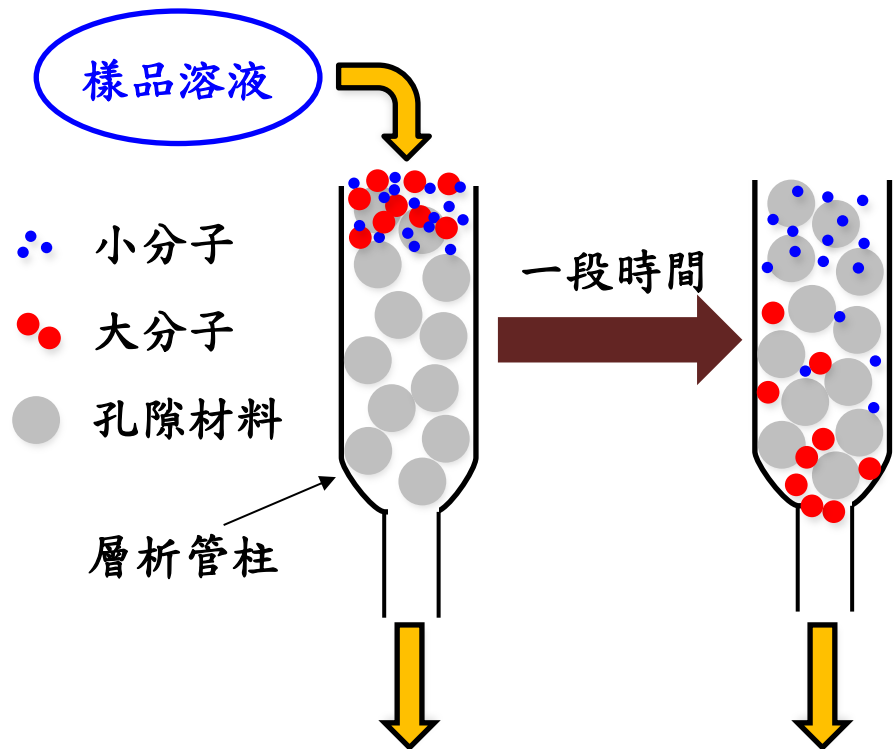
- 以副觸媒來活化觸媒的活性中心。
- 以丁烯來活化觸媒的活性中心。
- 觸媒失活，使得聚合終止。

附件：凝膠層析色譜(GPC)

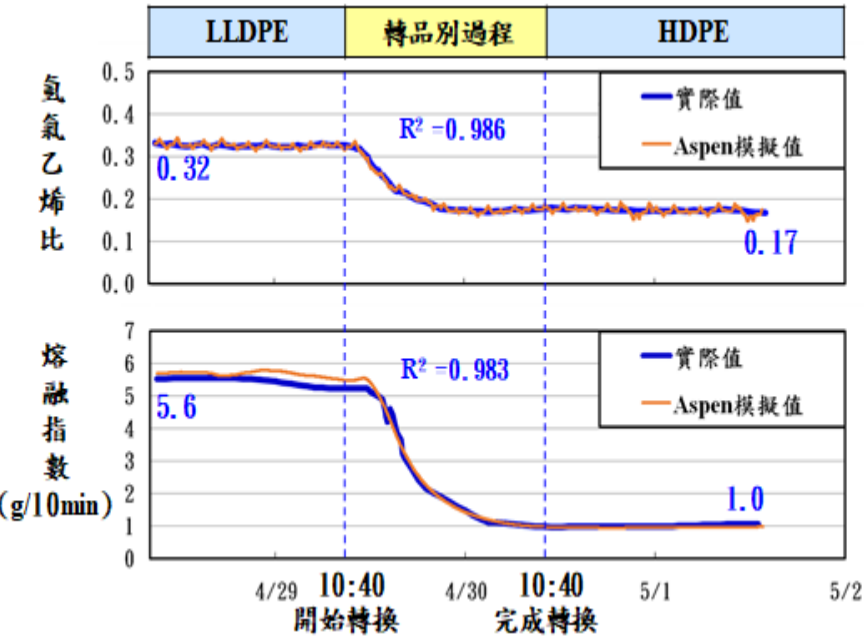
➤ 凝膠層析色譜(Gel Permeation Chromatography, GPC)

PE、PP等聚合物是由許多不同大小的分子組合而成，可以透過分子量分佈圖來瞭解聚合物的特性。

GPC檢測儀器可以獲得分子量分佈圖，原理是將溶解的樣品溶液通過填滿孔隙材料的管柱，樣品的分子大小會影響與孔隙材料的相互作用力，分子越小則越容易進入孔隙、運動速度越慢，因此利用此特性可以檢測樣品的分子量分佈。



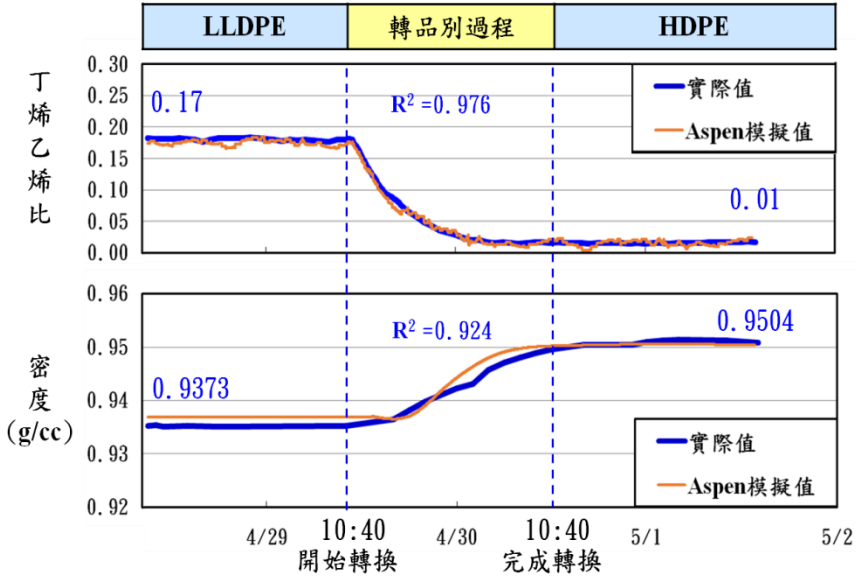
附件：Aspen模擬(1/2)



氫氣乙烯比 實際值		氫氣乙烯比 Aspen模擬值	
時間	數值	時間	數值
28-Apr-20 09:00:00	0.333	28-Apr-20 09:00:00	0.332
28-Apr-20 10:00:00	0.330	28-Apr-20 09:02:00	0.332
28-Apr-20 11:00:00	0.330	28-Apr-20 09:04:00	0.332
28-Apr-20 12:00:00	0.326	28-Apr-20 09:06:00	0.332
28-Apr-20 13:00:00	0.325	28-Apr-20 09:08:00	0.332
28-Apr-20 14:00:00	0.328	28-Apr-20 09:10:00	0.332
28-Apr-20 15:00:00	0.331	28-Apr-20 09:12:00	0.332
⋮	⋮	⋮	⋮

MI 實際值		MI Aspen模擬值	
時間	數值	時間	數值
28-Apr-20 09:00:00	5.53	28-Apr-20 09:00:00	5.70
28-Apr-20 10:00:00	5.53	28-Apr-20 09:02:00	5.70
28-Apr-20 11:00:00	5.54	28-Apr-20 09:04:00	5.70
28-Apr-20 12:00:00	5.55	28-Apr-20 09:06:00	5.70
28-Apr-20 13:00:00	5.56	28-Apr-20 09:08:00	5.70
28-Apr-20 14:00:00	5.56	28-Apr-20 09:10:00	5.70
28-Apr-20 15:00:00	5.55	28-Apr-20 09:12:00	5.70
⋮	⋮	⋮	⋮

附件：Aspen模擬(2/2)



丁烯乙 烯比 實際值		丁烯乙 烯比 Aspen模擬值	
時間	數值	時間	數值
28-Apr-20 09:00:00	0.182	28-Apr-20 09:00:00	0.174
28-Apr-20 10:00:00	0.181	28-Apr-20 09:02:00	0.174
28-Apr-20 11:00:00	0.181	28-Apr-20 09:04:00	0.174
28-Apr-20 12:00:00	0.181	28-Apr-20 09:06:00	0.174
28-Apr-20 13:00:00	0.182	28-Apr-20 09:08:00	0.174
28-Apr-20 14:00:00	0.181	28-Apr-20 09:10:00	0.174
28-Apr-20 15:00:00	0.180	28-Apr-20 09:12:00	0.174
⋮	⋮	⋮	⋮

密度 實際值		密度 Aspen模擬值	
時間	數值	時間	數值
28-Apr-20 09:00:00	0.9352	28-Apr-20 09:00:00	0.9368
28-Apr-20 10:00:00	0.9353	28-Apr-20 09:02:00	0.9368
28-Apr-20 11:00:00	0.9350	28-Apr-20 09:04:00	0.9368
28-Apr-20 14:00:00	0.9352	28-Apr-20 09:06:00	0.9368
28-Apr-20 18:00:00	0.9351	28-Apr-20 09:08:00	0.9368
29-Apr-20 10:00:00	0.9352	28-Apr-20 09:10:00	0.9368
29-Apr-20 16:00:00	0.9364	28-Apr-20 09:12:00	0.9368
⋮	⋮	⋮	⋮

➤數據收集

(1)時間：2019年10月～2020年12月(取5次轉品別數據)

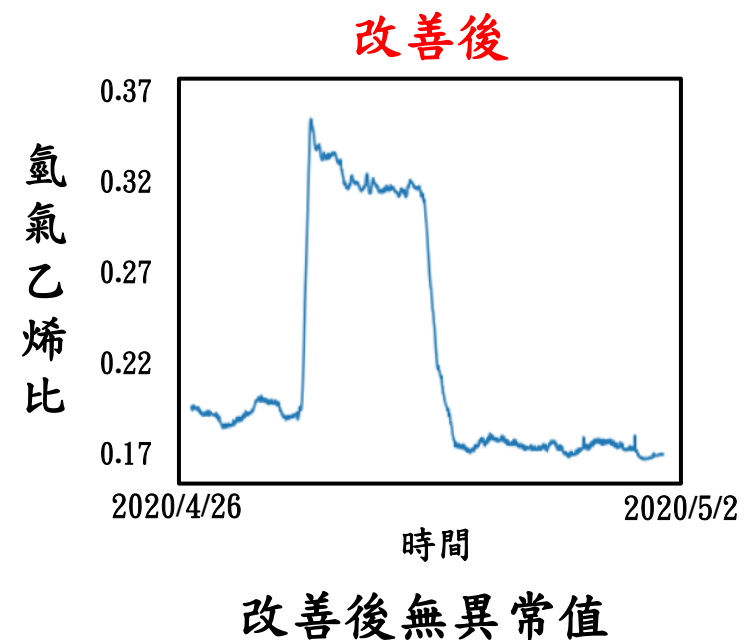
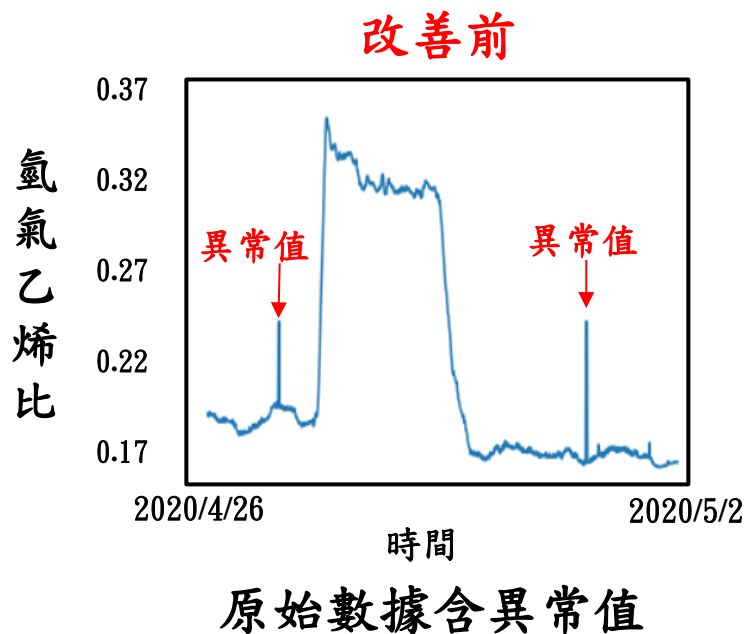
(2)筆數：實際檢驗數據240筆及Aspen模擬數據8,000筆，共8,240筆資料

項目	耗時	檢驗頻率 (小時/次)	數據量 (時間長/檢驗頻率)
LLDPE 3840	24小時	2小時	12
轉品別過程	24小時	1小時	24
HDPE 8009L	24小時	2小時	12
小計(每次)			48
總計(5次)			240

➤ 資料前處理問題點與改善方案：

(1)問題點：觀察熔融指數收集數據發現有異常值，若異常值納入建模，將導致預測效果不佳。

(2)改善方案：本案使用移動平均值來修正異常值。



附件：Ridge演算法說明

➤ Ridge演算法說明

熔融指數估計公式：

$$Y(\text{熔融指數}) = \sum_{j=1}^j w_j X_j + b$$

w : 權重

X_1 : 特徵

b : 截距

線性迴歸誤差計算公式：

$$\sum_{i=1}^m (y_i - \hat{y}_i)^2 = \sum_{i=1}^m \left(y_i - \sum_{j=1}^j w_j \times x_{ij} \right)^2$$

y_i : 熔融指數真實值

\hat{y}_i : 熔融指數預測值

m : 資料筆數

i : 資料數量

j : 特徵數量

Ridge誤差計算公式：

$$\sum_{i=1}^m (y_i - \hat{y}_i)^2 = \sum_{i=1}^m \left(y_i - \sum_{j=1}^j w_j \times x_{ij} \right)^2 + \lambda \sum_{j=1}^j w_j^2$$

懲罰項: 類似特徵篩選概念，可以降低非重要特徵的權重值。

Reference : Technometrics, Vol. 12, No. 1 (Feb., 1970), pp. 55-67

Arthur E. Hoerl and Robert W. Kennard, University of Delaware, USA

附件：加入Aspen數據後的訓練結果(MI)

➤ Ridge加入Aspen大量數據後的訓練結果(MI)(依權重排列)

特徵參數 (Xi)	權重 (Wi)	是否符合 化工原理
丁烯乙烯比	1.94	是
氫氣乙烯比	1.80	
反應器溫度	1.63	
副觸媒	0.72	
觸媒	-0.67	
丁烯組成	0.63	
氫氣組成	-0.46	
乙烯進料量	0.39	否(權重應為負值)
氫氣組成	-0.41	否(權重應為正值)
反應器槽壓	0.35	是
氫氣進料量	0.15	
乙烯組成	-0.06	
反應器迴流量	0.06	否(權重應為負值)
戊烷組成	0.04	否(權重應為負值)
丁烯進料量	0.03	是



特徵參數 (Xi)	權重 (Wi)	是否符合 化工原理
氫氣乙烯比	2.75	是
反應器溫度	1.64	
氫氣進料量	1.20	
氫氣組成	0.84	
丁烯乙烯比	0.82	
觸媒	-0.76	
氫氣組成	-0.72	
丁烯組成	0.44	
乙烯進料量	-0.43	
反應器槽壓	0.40	
戊烷組成	-0.30	
乙烯組成	-0.29	
反應器迴流量	-0.27	
丁烯進料量	0.24	
副觸媒	0.06	

附件：加入Aspen數據後的訓練結果(MI)

➤ Ridge加入Aspen大量數據後的訓練結果(MI)

特徵參數 (Xi)	權重 (Wi)		是否符合 化工原理	
	訓練前	訓練後	訓練前	訓練後
丁烯乙烯比	1.94	0.82	是	是
氫氣乙烯比	1.80	2.75		
反應器溫度	1.63	1.64		
副觸媒	0.72	0.06		
觸媒	-0.67	-0.76		
丁烯組成	0.63	0.44		
氫氣組成	-0.46	-0.72		
乙烯進料量	0.39	-0.43	否(權重應為負值)	是
氫氣組成	-0.41	0.84	否(權重應為正值)	是
反應器槽壓	0.35	0.40	是	是
氫氣進料量	0.15	1.20		
乙烯組成	-0.06	-0.29		
反應器迴流量	0.06	-0.27	否(權重應為負值)	是
戊烷組成	0.04	-0.30	否(權重應為負值)	是
丁烯進料量	0.03	0.24	是	是

附件：加入Aspen數據後的訓練結果(密度)

➤ Ridge加入Aspen大量數據後的訓練結果(密度)(依權重排列)

特徵參數 (Xi)	權重 (Wi)	是否符合 化工原理
反應器溫度	0.0080	是
丁烯乙烯比	-0.0053	
丁烯組成	-0.0046	
戊烷組成	0.0044	
乙烯進料量	0.0032	
反應器迴流量	-0.0021	
反應器槽壓	0.0017	
氫氣進料量	-0.0017	
氫氣組成	0.0015	
乙烯組成	-0.0014	否(權重應為正值)
丁烯進料量	-0.0011	是
氫氣乙烯比	0.0007	否(權重應為負值)
觸媒	0.0003	是
副觸媒	0.0001	否(權重應為負值)
氫氣組成	0.0001	否(權重應為負值)



特徵參數 (Xi)	權重 (Wi)	是否符合 化工原理
丁烯乙烯比	-0.0167	是
反應器溫度	0.0120	
丁烯進料量	-0.0095	
丁烯組成	-0.0088	
乙烯進料量	0.0070	
戊烷組成	0.0050	
反應器槽壓	0.0039	
反應器迴流量	-0.0039	
觸媒	0.0031	
副觸媒	-0.0027	
氫氣進料量	-0.0017	
氫氣組成	0.0016	
氫氣乙烯比	-0.0011	
乙烯組成	0.0008	
氫氣組成	-0.0003	

附件：加入Aspen數據後的訓練結果(密度)

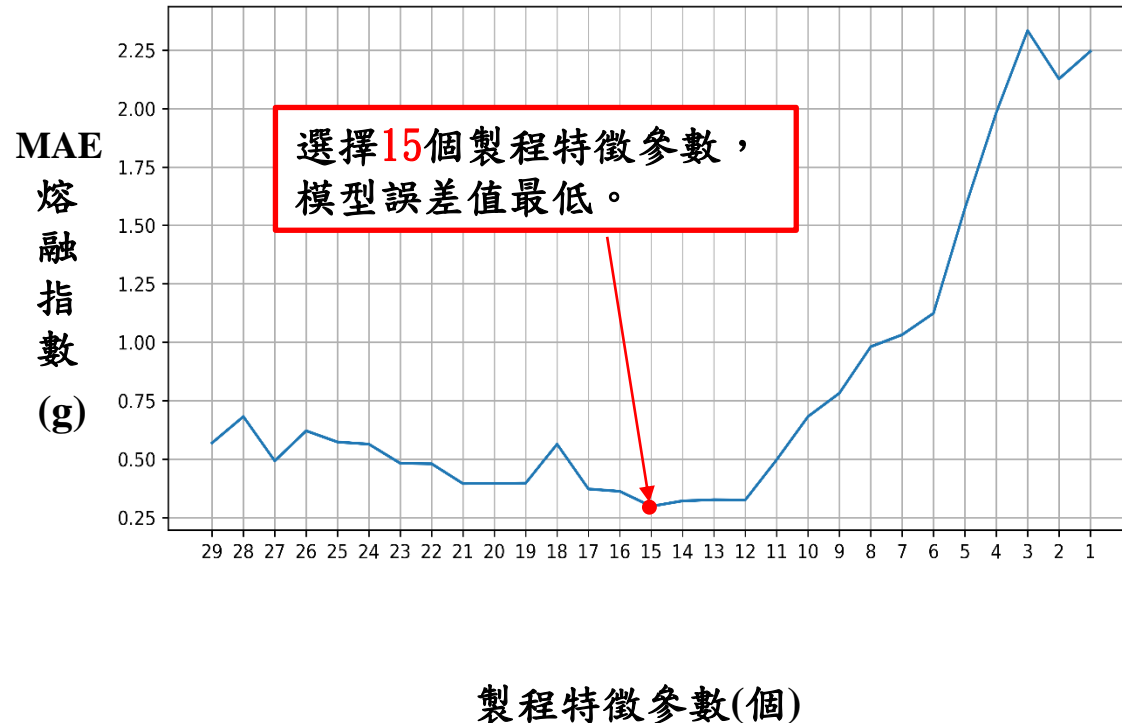
➤ Ridge加入Aspen大量數據後的訓練結果(密度)

特徵參數 (Xi)	權重 (Wi)		是否符合 化工原理	
	訓練前	訓練後	訓練前	訓練後
反應器溫度	0.0080	0.0120	是	是
丁烯乙烯比	-0.0053	-0.0167		
丁烯組成	-0.0046	-0.0088		
戊烷組成	0.0044	0.0050		
乙烯進料量	0.0032	0.0070		
反應器迴流量	-0.0021	-0.0039		
反應器槽壓	0.0017	0.0039		
氫氣進料量	-0.0017	-0.0017		
氫氣組成	0.0015	0.0016		
乙烯組成	-0.0014	0.0008	否(權重應為正值)	
丁烯進料量	-0.0011	-0.0095	是	
氫氣乙烯比	0.0007	-0.0011	否(權重應為負值)	
觸媒	0.0003	0.0031	是	
副觸媒	0.0001	-0.0027	否(權重應為負值)	
氫氣組成	0.0001	-0.0003	否(權重應為負值)	

AI演算法特徵篩選

➤ 遞迴特徵篩選法(Recursive Feature Elimination,RFE)：

29個製程特徵參數，以線性迴歸演算法進行訓練，每次訓練後，移除權重最低的製程特徵參數，再重新進行下一次訓練，找出MAE誤差值最小的製程特徵參數之個數，最後共篩選出15個，進行AI建模。



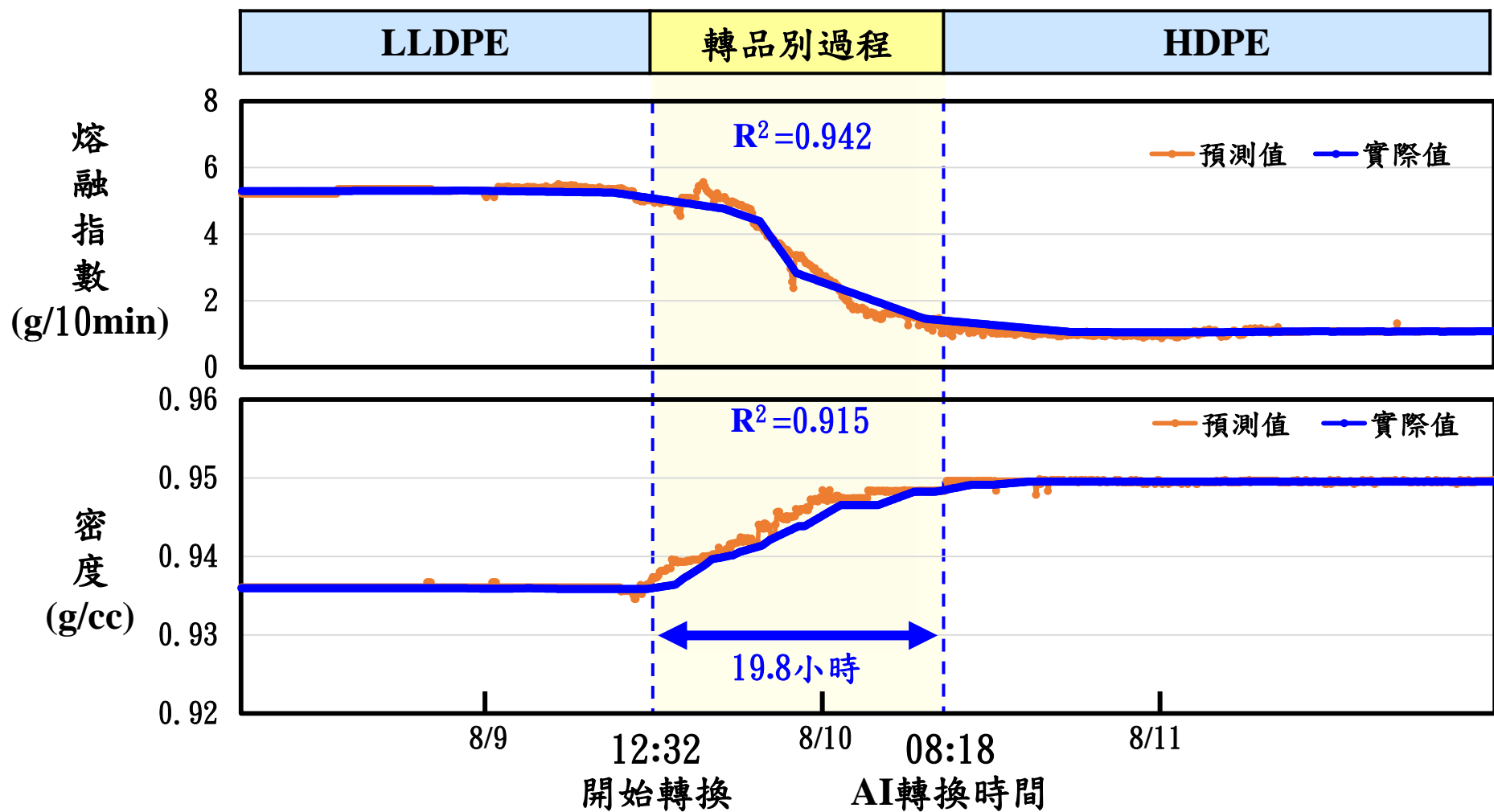
● 篩選出的15個製程特徵參數：

- ✓ 氫氣乙烯比、丁烯乙烯比
- ✓ 進料流量：
(觸媒、副觸媒、氫氣、
丁烯、乙烯)
- ✓ 反應器溫度、壓力、壓差
- ✓ 氣相組成：
(乙烯、氫氣、氮氣、
丁烯、戊烷)

MAE：平均絕對誤差(Mean Absolute Error)，數值愈小表示模型預測效果愈佳

附件：上線驗證

- AI模型上線驗證時間為2021/8/9 ~ 2021/8/11。
- 驗證結果：轉換時間為19.8小時，中間品數量356噸，達成設定目標。



➤ Aspen Plus 較常使用的化工操作單元，如以下所示：

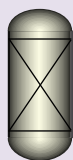
分離/純化



蒸發器



分相器



萃取塔



吸收塔

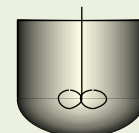


蒸餾塔

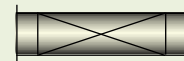
反應器



批次
(Batch)



連續式
(CSTR)



管式
(PFR)

熱交換器



空冷器



殼管式

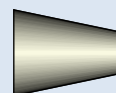


基本型
(不考慮結構)

輸送裝置



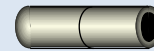
泵



壓縮機



閥件

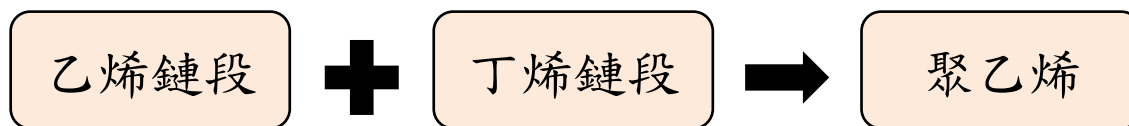


管件

(1) Aspen Plus的物性資料庫可分為，純物質與混合物的物性資料：

純物質	混合物
結構 分子量 蒸氣壓 生成熱 溶點/沸點 黏度/密度 電荷/偶極矩 溶化熱/汽化熱 臨界壓力 臨界溫度	分子間作用力 汽-液相平衡 液-液相平衡 相對揮發度 共沸物組成 黏度 密度

(2) Aspen Polymers的物性資料庫可分為，聚合物與聚合物鏈段：
聚合物是由許多的單體鏈段所組成。例如聚乙烯：



➤ 以聚乙烯氣相製程為範例

Components × +

☒ Selection

Petroleum

Nonconventional

☒ Enterprise Database

Comments

Select components

	Component ID		Type	Component name	Alias
▶	CAT 觸媒		Conventional	TITANIUM-TETRACHLORIDE	TICL4
▶	TEAL 副觸媒		Conventional	TRIETHYL-ALUMINUM	C6H15AL
▶	E2 乙烯		Conventional	ETHYLENE	C2H4
▶	BUTENE 丁烯		Conventional	1-BUTENE	C4H8-1
▶	H2 氫氣		Conventional	HYDROGEN	H2
▶	E-SEG 乙烯鏈段		Segment	ETHYLENE-R	C2H4-R
▶	B-SEG 丁烯鏈段		Segment	1-BUTENE-R	C4H8-R-1
▶	N2 氮氣		Conventional	NITROGEN	N2
▶	ISOPENT 異戊烷		Conventional	2-METHYL-BUTANE	C5H12-2
▶	N-PENTAN 正戊烷		Conventional	N-PENTANE	C5H12-1
▶	PE 聚乙烯		Polymer	POLY(ETHYLENE)	PE
▶	WATER 水		Conventional	WATER	H2O
▶					

Find

Elec Wizard

SFE Assistant

User Defined

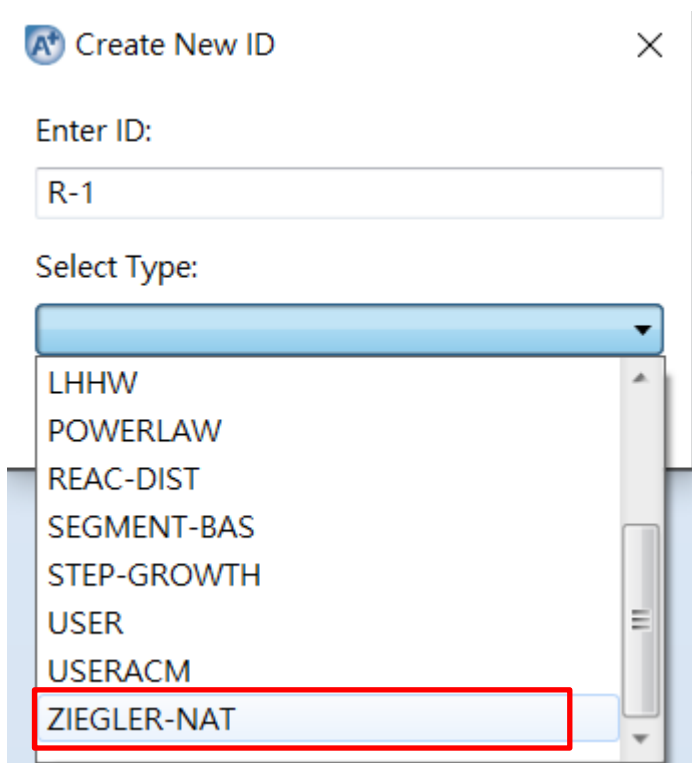
Reorder

Review

附件：Aspen Polymers反應式設定

➤ 以聚乙烯氣相製程為範例：

Step 1: 選擇反應式類別 (本案為齊格勒-納塔聚合反應)



Create New ID

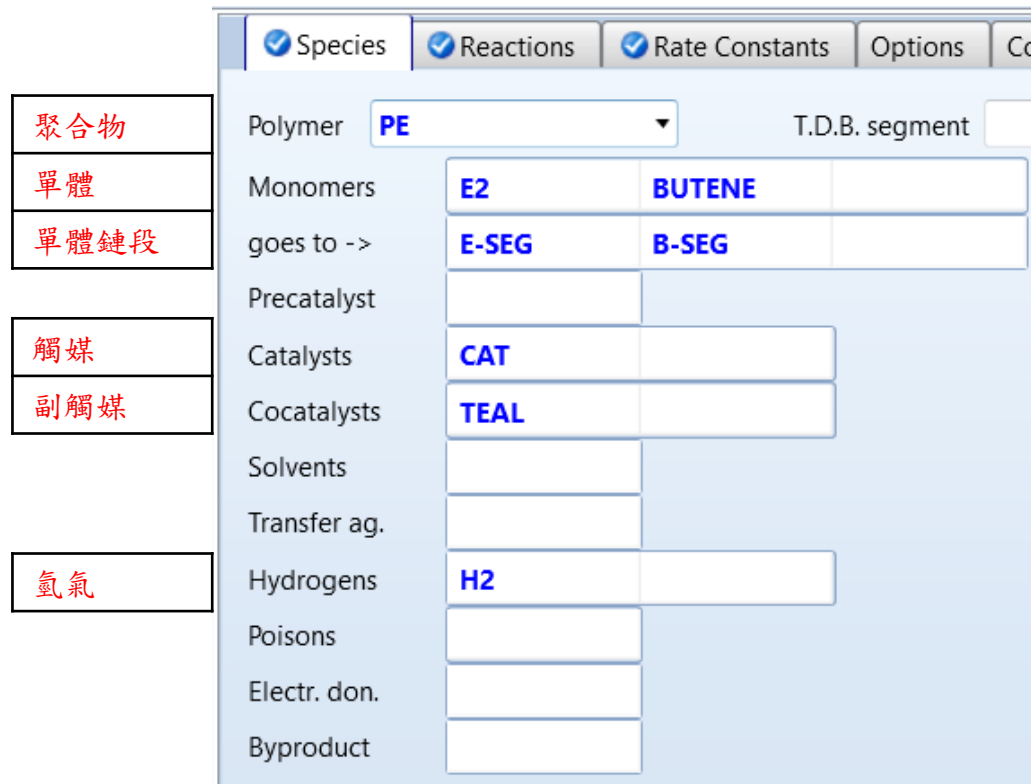
Enter ID:

R-1

Select Type:

- LHHW
- POWERLAW
- REAC-DIST
- SEGMENT-BAS
- STEP-GROWTH
- USER
- USERACM
- ZIEGLER-NAT**

Step 2: 設定聚合反應之物質資料



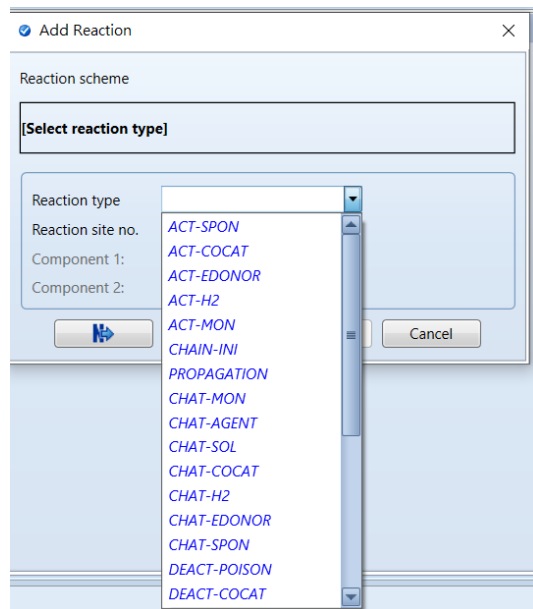
Species Reactions Rate Constants Options Co

Polymer **PE** T.D.B. segment

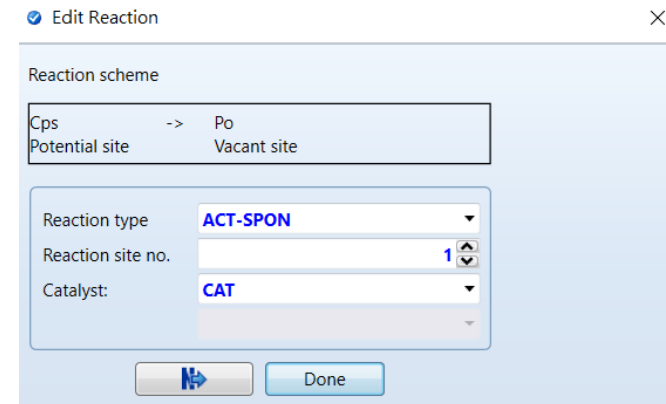
Monomers	E2	BUTENE
goes to ->	E-SEG	B-SEG
Precatalyst		
Catalysts	CAT	
Cocatalysts	TEAL	
Solvents		
Transfer ag.		
Hydrogens	H2	
Poisons		
Electr. don.		
Byproduct		

Step 2: 增設反應式

- (1) 選擇反應式之細部類別。
(起始反應、鏈轉移、
鏈增長、終止反應...)



- (2) 設定反應物與生成物



- (3) 設定觸媒的活性中心和
反應速率常數

