

正丁醇精餾塔AI操作最佳化



台塑麥寮正丁醇廠

報告人：薛仰伸 2022.10.26

目錄大綱

1

執行摘要

2

麥寮正丁醇製程說明

3

改善動機

4

AI模型開發歷程

5

各階段詳細說明

6

效益說明

7

結論及後續推動事項

1.執行摘要

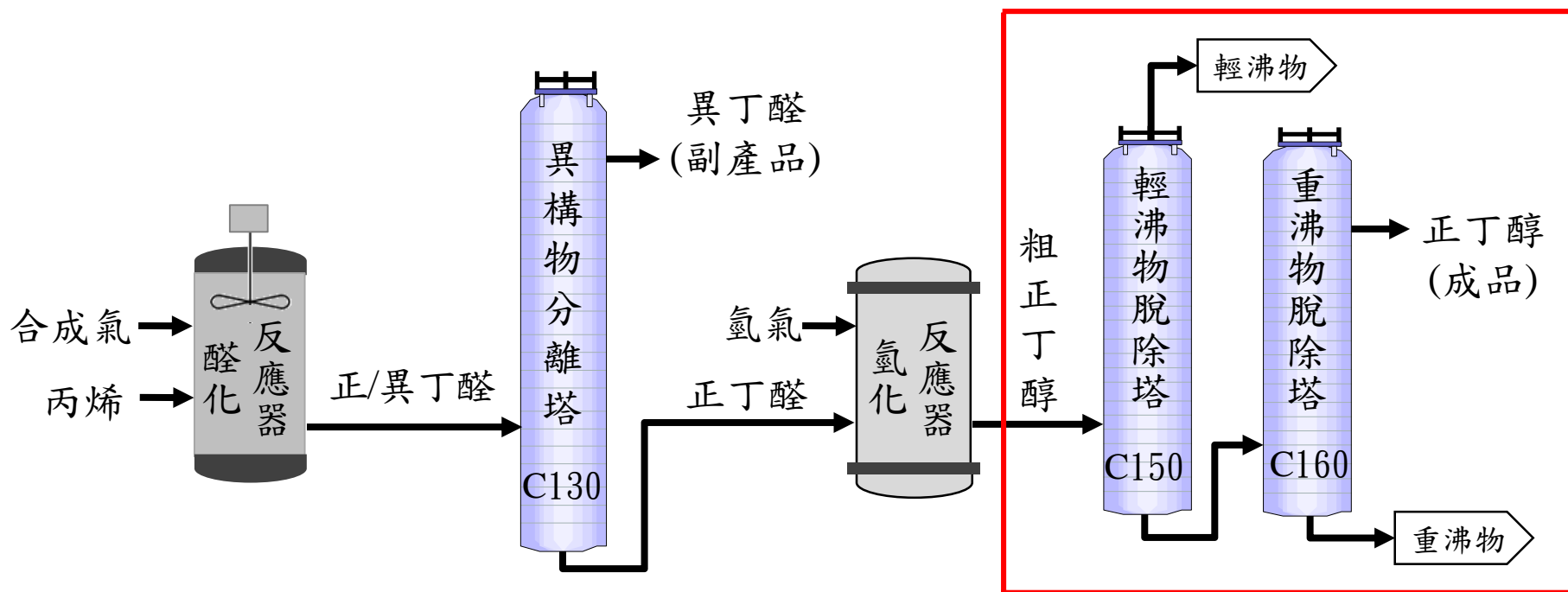
- 正丁醇精餾塔單元是將粗正丁醇以輕沸物脫除塔(C-150)及重沸物脫除塔(C-160)進行純化，產製純度99.8%以上的正丁醇成品。
- 過去依照人工檢驗數據及製程操作經驗，以9個單迴路控制正丁醇品質，部分控制迴路動態反應時間長達12小時以上，且製程系統屬於多變數關係，不易找出同時兼顧收率與節能的最佳操作條件。
- 開發AI品質預測模型與AI高階控制模組，計算最佳操作條件，達到增加收率、節能與自動控制之目標，已於2021年11月上線。
- 改善目標：

項目	節省蒸汽用量(噸/小時)		提升正丁醇收率(%)
	輕沸物脫除塔(C-150)	重沸物脫除塔(C-160)	
改善前	7.09	14.83	94.64
目標	<6.70	<14.00	>95.10
2021年11月實際	6.58	13.55	95.33

- 投資金額：8,470千元；年效益：65,387千元；回收年限：0.13年。

2.1 麥寮正丁醇製程說明

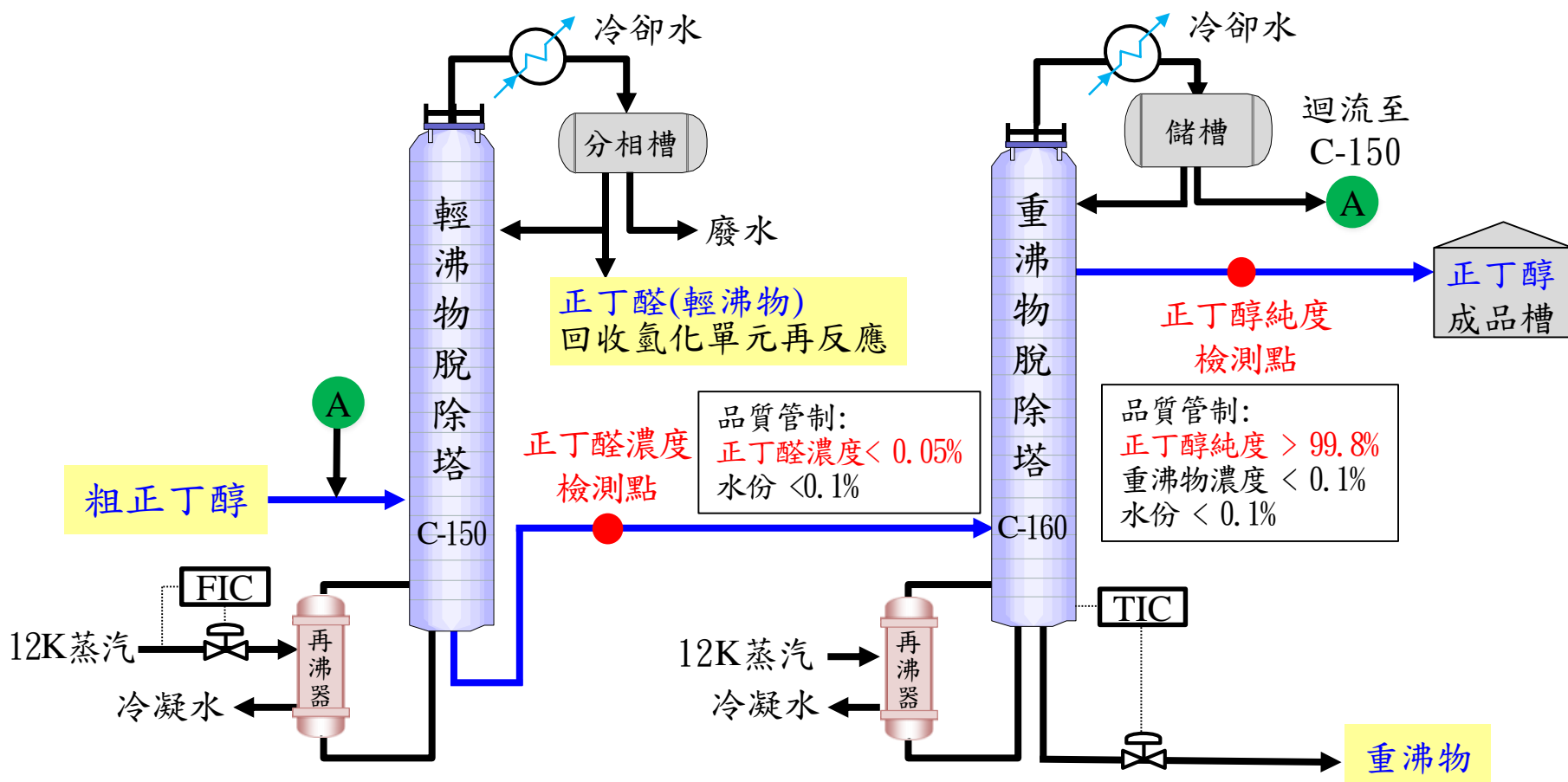
- 正丁醇製程包含醛化反應器、異構物分離塔、氫化反應器與正丁醇精餾塔等四大主要單元。
- 正丁醇是由合成氣與丙烯進行醛化反應，生成正/異丁醛，經異構物分離塔分離，分離後正丁醛與氫氣生成粗正丁醇，並以精餾塔單元進行純化，產製而成。
- 本次AI應用範圍：正丁醇精餾塔單元。



本次AI應用範圍

2.2 正丁醇精餾塔單元流程說明

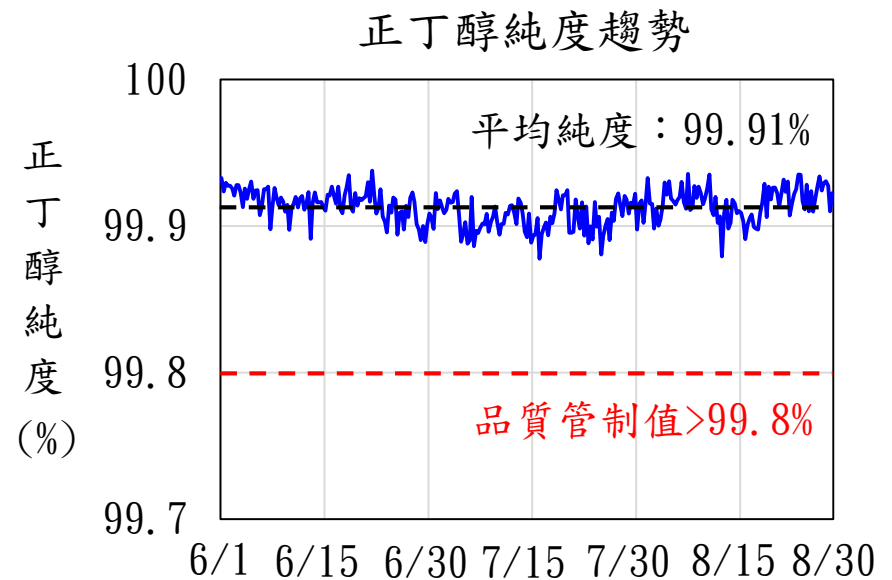
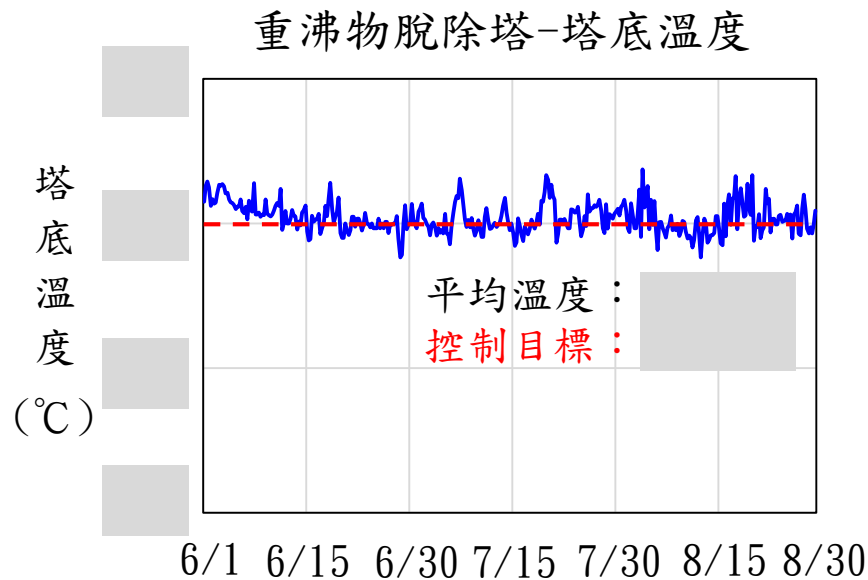
- 正丁醇精餾塔單元係用於純化粗正丁醇，其中輕沸物脫除塔(C-150)主要是將未反應丁醛、水份移除，重沸物脫除塔(C-160)是將重沸物移除，獲得純度99.8%以上的正丁醇成品。



3. 改善動機(1/3)

➤ 本案共有3個改善動機，分述如下：

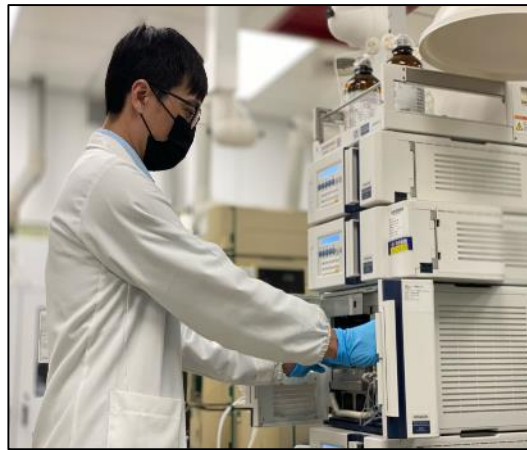
(1)過去依照SOP、檢驗數據及操作經驗進行調整控制，為確保品質合格，將重沸物脫除塔(C-160)塔底溫度穩定控制於142°C，正丁醇品質離管制標準仍有裕度空間，故朝向優化製程操作參數，來尋找更大的改善空間。



➤ 解決方案：使用Aspen軟體，建立精餾塔單元模型，探討效益最大化的操作改善空間。

3. 改善動機(2/3)

(2)產製正丁醇成品的過程中，依據檢驗品質數據，調整製程控制參數，目前檢驗頻率為8小時一次，無法即時得知品質變化趨勢。



現場取樣

實驗室檢驗分析

檢驗數據回饋控制室
調整控制

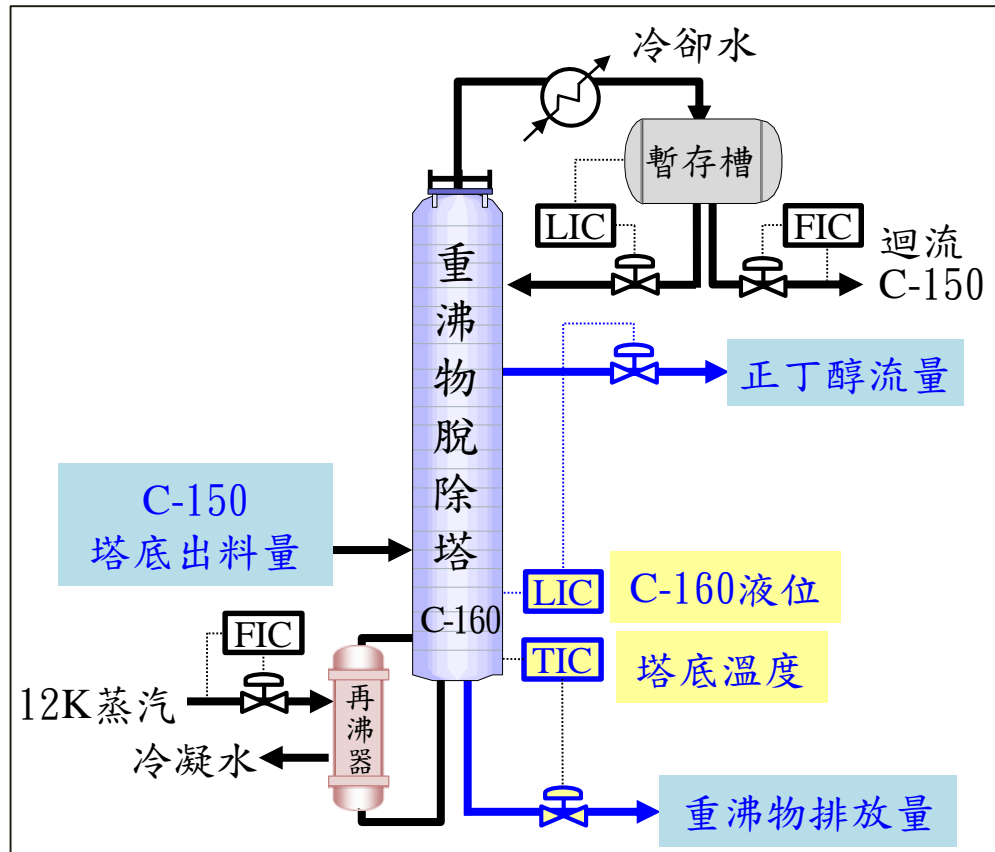


正丁醇廠
精餾段製程

➤ 解決方案：使用機器學習演算法，建立AI品質預測模型，預測品質變化，作為後續即時調整參考依據。

3. 改善動機(3/3)

(3)正丁醇精餾塔單元透過9個單迴路控制，調整正丁醇品質，實際狀況，單一控制變數同時受多個操作變數影響，以C-160為例：



單迴路設計（一對一控制）

操作變數

控制變數

重沸物排放量

C-160塔底溫度

正丁醇流量

C-160液位

多變數影響（多對多影響）

重沸物排放量

C-160塔底溫度

正丁醇流量

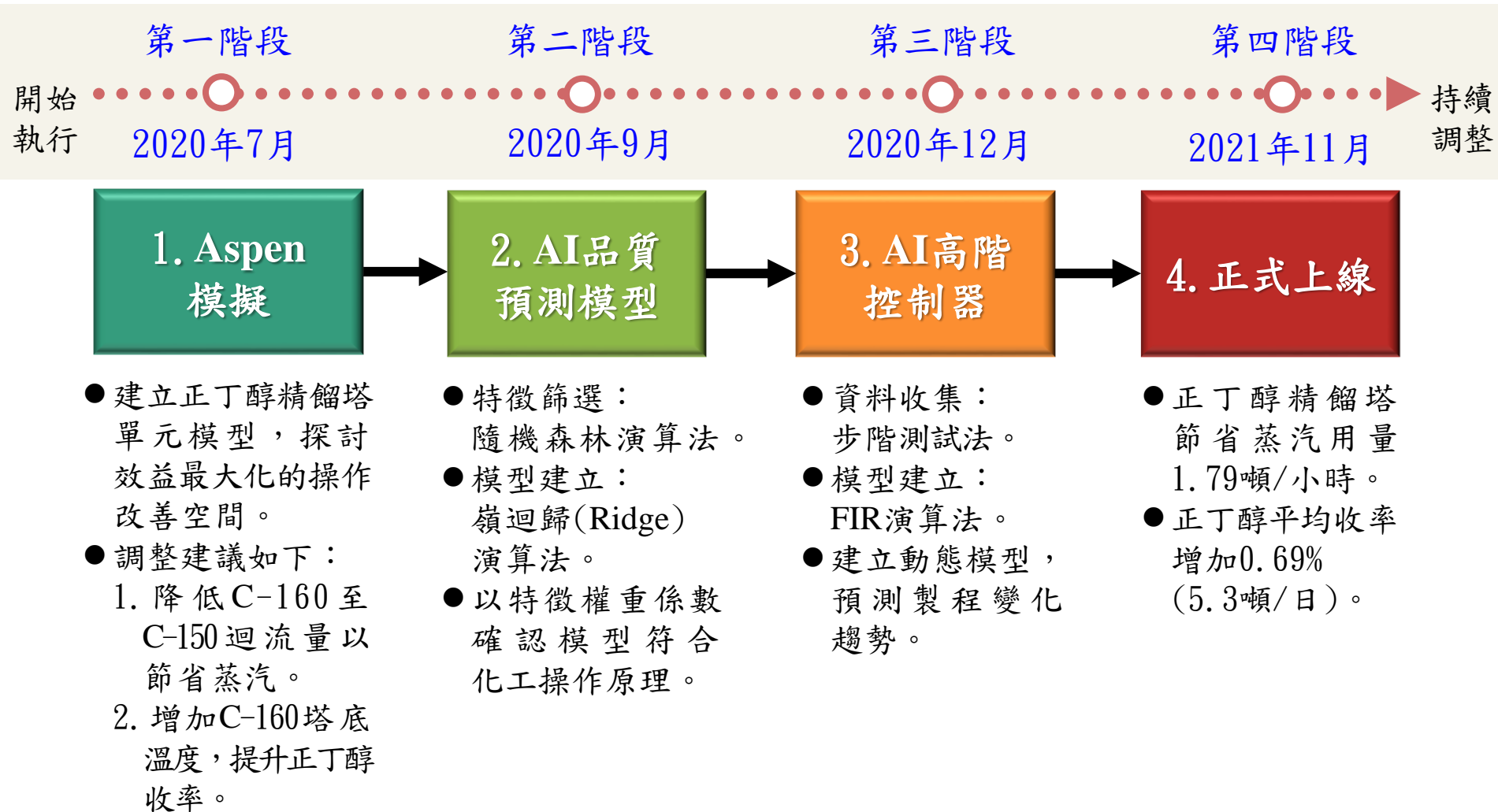
C-160液位

C-150
塔底出料量

➤ 解決方案：導入AI高階控制器，可進行多變數的趨勢預測與控制，縮小製程變異並移動至最佳操作條件，達節能與提升收率的目標。

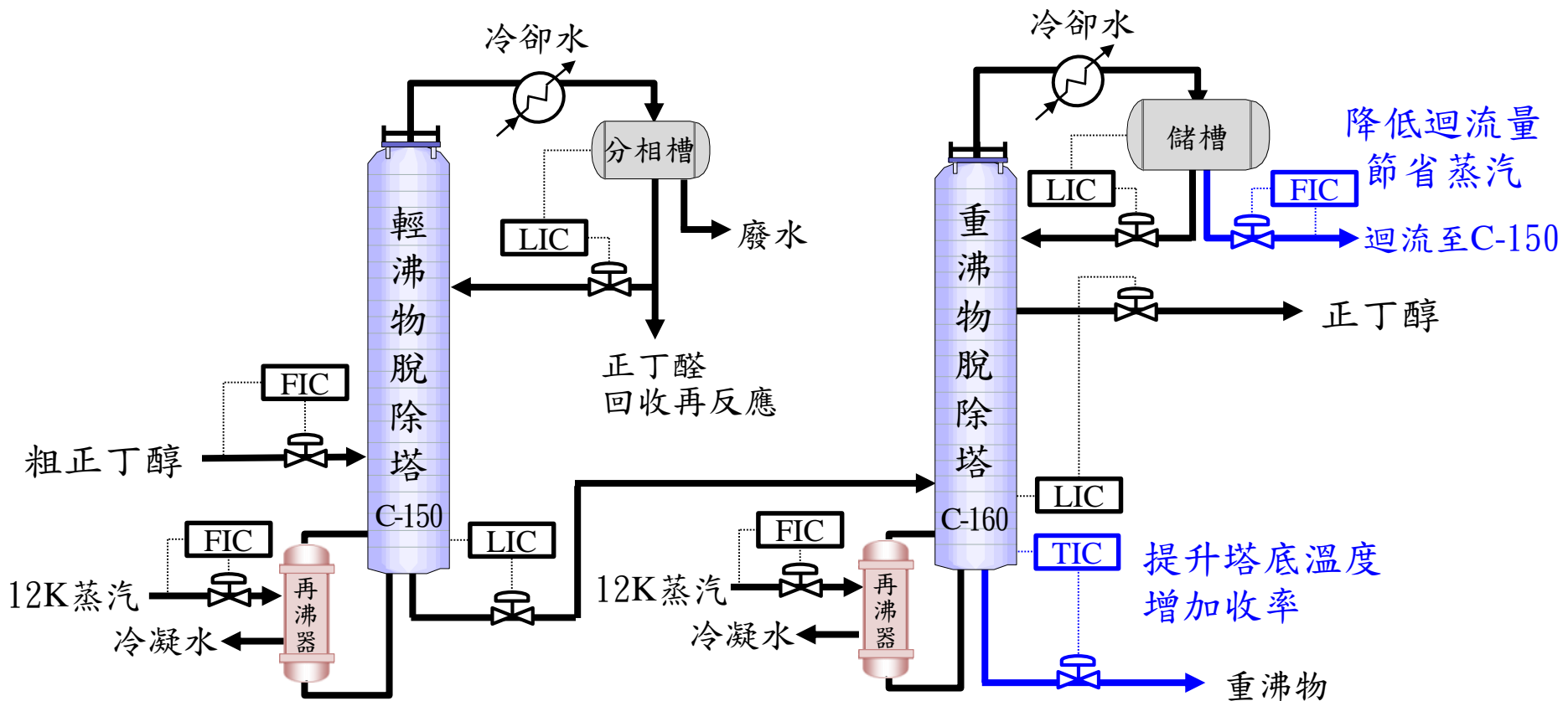
4. AI模型開發歷程

- 結合Aspen模擬、AI品質模型進行AI高階控制，在符合品質管制標準前提下，實現提升收率、節能及自動控制之目標。



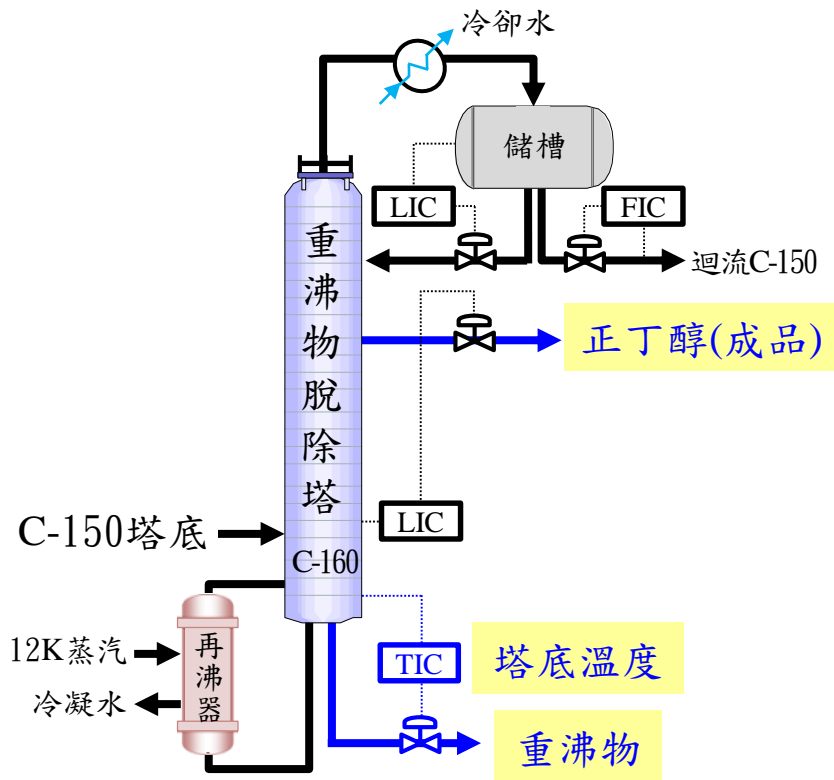
5.1 第一階段：Aspen模擬(1/3)

- 探討效益最大化的操作改善空間，使用Aspen軟體建立正丁醇精餾塔模型，模擬操作參數與產物之間關聯性。
- Aspen模擬結果，正丁醇精餾塔單元可再調整的重要控制參數為「C-160至C-150迴流量」及「C-160塔底溫度」。



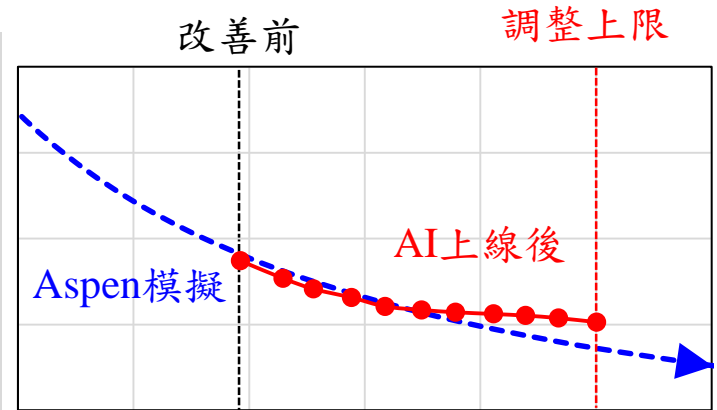
5.1 第一階段：Aspen模擬(2/3)

- 提升收率模擬結果：減少重沸物排放量，因塔底重沸物濃度提高，使C-160塔底溫度上升，進而提升收率。

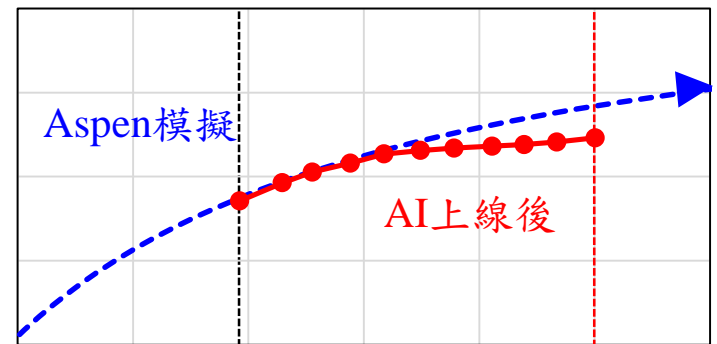


- 塔底溫度如超過 °C，重沸物過度濃稠，導致流速過慢，出料控制閥無法準確調整流量，造成溫度不易控制。

重沸物排放量
(噸/小時)



正丁醇流量
(噸/小時)

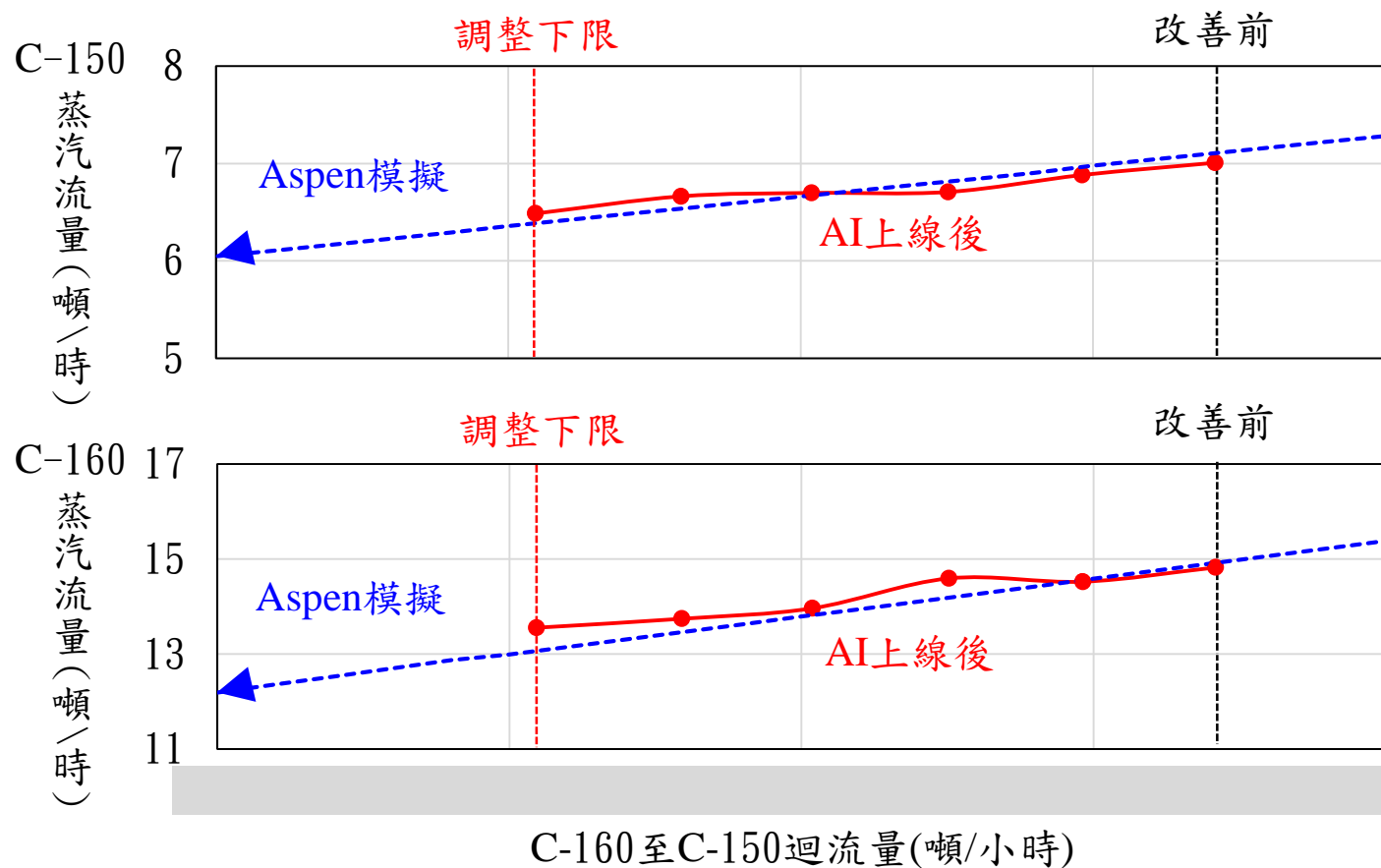


C-160塔底溫度(°C)

5.1 第一階段：Aspen模擬(3/3)

➤ 節省蒸汽模擬結果：

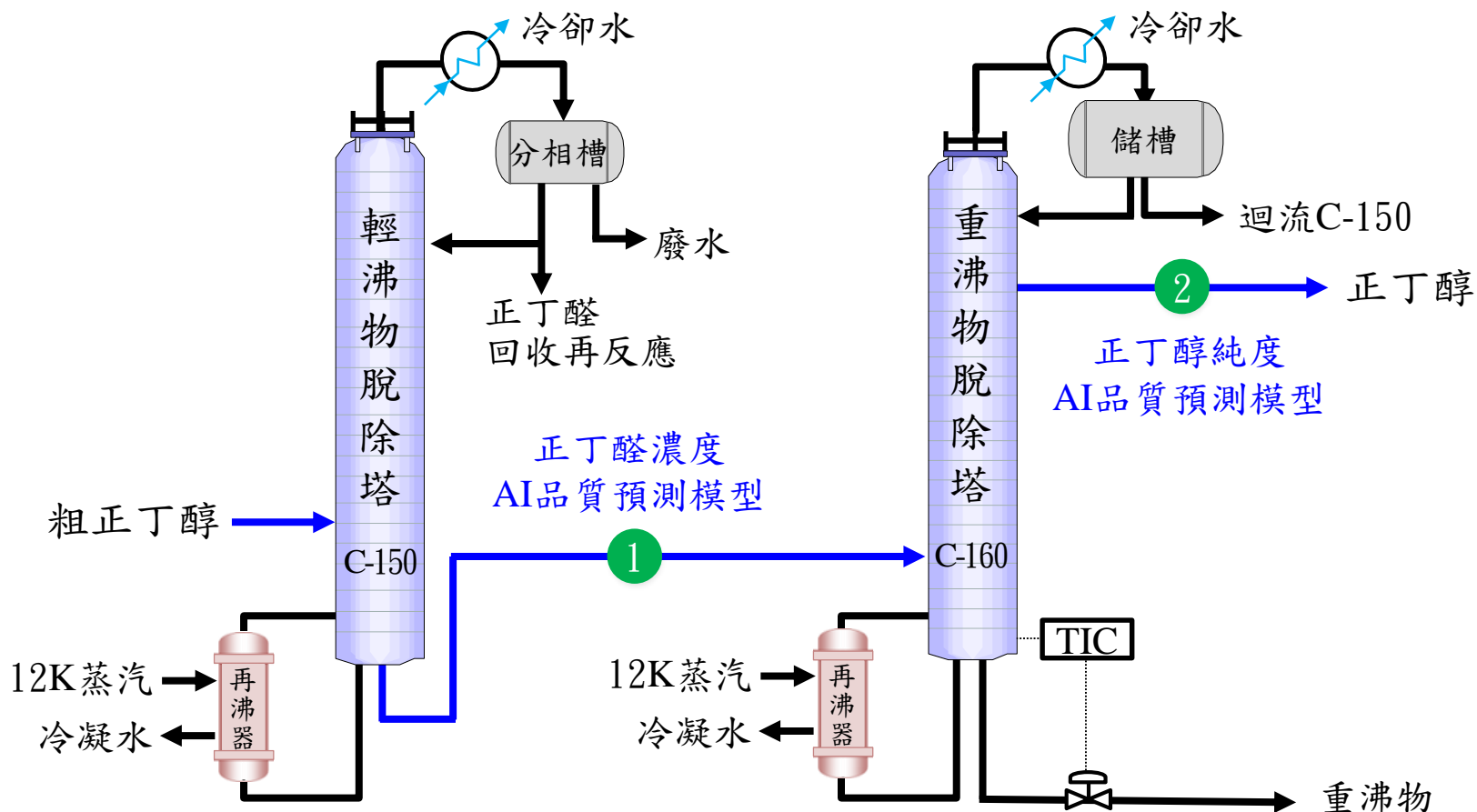
降低C-160至C-150迴流量，可降低兩塔操作負荷，減少蒸汽用量。
實際操作上，C-160至C-150迴流量最低流量限制為 噸/小時，
如設定過低，恐造成C-160塔頂輕沸物蓄積，影響正丁醇品質。



5.2 第二階段：AI品質預測模型

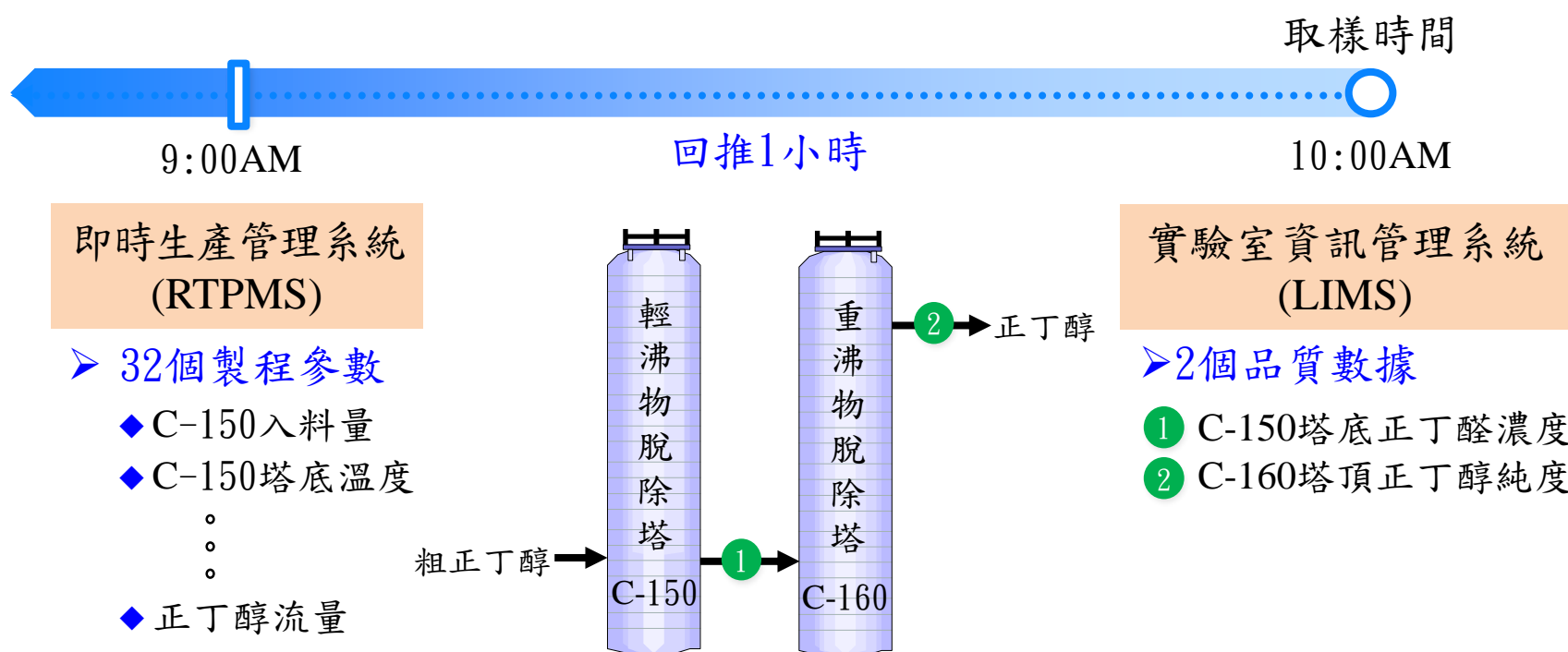
➤ 開發目標：

為符合品質規範下達操作最佳化，由AI即時預測品質數據，提供後續控制模型的操作依據，**本案共建置2個AI品質預測模型。**



Step1. 收集製程與品質數據

- 收集時間：2020年8月~2021年4月
- 資料數量：1,958組操作數據

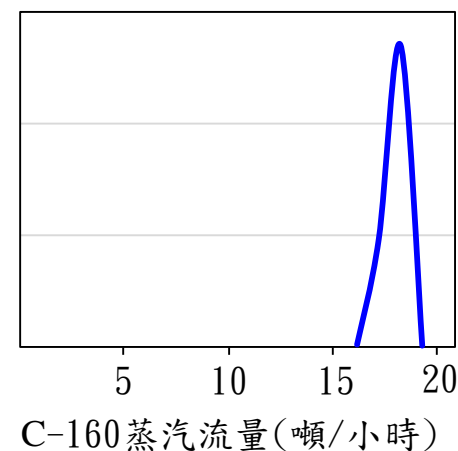
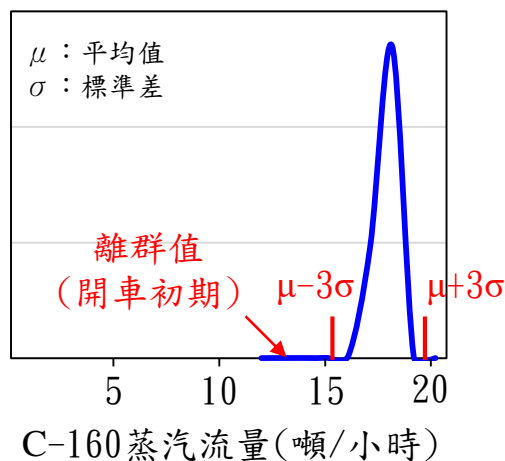
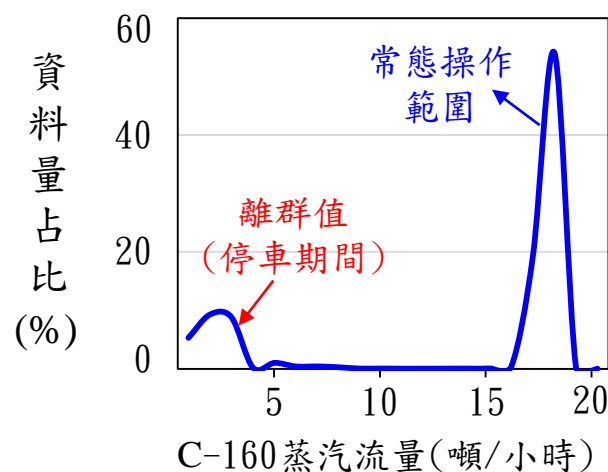


- 以② C-160塔頂正丁醇純度品質預測模型為例，進行細部開發說明。

Step2. 資料前處理

- 問題點：原僅刪除製程停車數據，仍有部分離群值無法剔除，影響模型準確度。
- 改善方案：經檢討，該離群值多為開車初期數據，將3倍標準差以外的數據視為異常值剔除，改善後有效資料共1,632組操作數據。

C-160蒸汽流量-資料量占比分布圖



Step3. 特徵篩選(1/4)

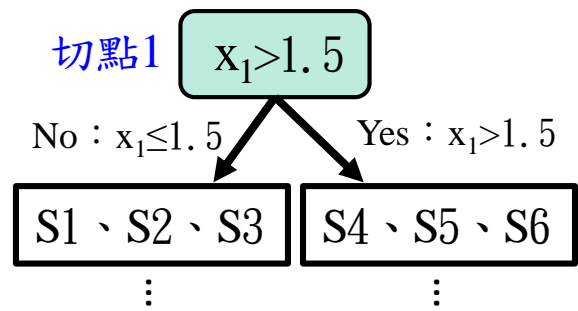
- 以隨機森林演算法，獲得每個特徵(x)的重要程度，僅保留對正丁醇純度(y)影響較大的特徵來建立模型。
- 以6個樣本計算單棵決策樹的特徵重要度：

樣本數

32個特徵							目標
項目	x ₁	x ₂	x ₃	x ₄	...	x ₃₂	y
S1	1	0.5	1	2		1	1
S2	1	1	3	3		1.2	2
S3	1	1	2	4		3	2.5
S4	2	1	1	5		4	4
S5	2	1	1	6		1	6
S6	2	1	2	7		1	7
平均值	1.5	0.92	1.67	4.5		1.87	3.75

無切點模型誤差： $\sum_{i=1}^6 |\bar{y} - y_{Si}|$

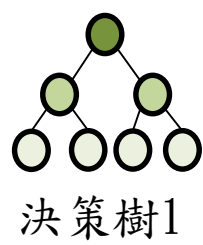
$|3.75-1|+|3.75-2|+\dots+|3.75-7|=11.5$



切點1模型誤差：5

$|\bar{y}_{(S1,S2,S3)} - y_{S1}| + \dots + |\bar{y}_{(S1,S2,S3)} - y_{S3}| = 1.67$
 $|\bar{y}_{(S4,S5,S6)} - y_{S4}| + \dots + |\bar{y}_{(S4,S5,S6)} - y_{S6}| = 3.33$

x_1 誤差改善量: $11.5 - 5 = 6.5$



決策樹以二分法尋找資料切點，計算絕對誤差和來訓練模型，決策樹會自行計算最佳切點，可最大幅度降低訓練誤差。

Step3. 特徵篩選(2/4)

➤ 以6個樣本計算單棵決策樹的特徵重要度：

樣本數

32個特徵							目標
項目	x ₁	x ₂	x ₃	x ₄	...	x ₃₂	y
S1	1	0.5	1	2		1	1
S2	1	1	3	3		1.2	2
S3	1	1	2	4		3	2.5
S4	2	1	1	5		4	4
S5	2	1	1	6		1	6
S6	2	1	2	7		1	7
平均值	1.5	0.92	1.67	4.5		1.87	3.75

➤ 決策樹特徵重要度計算方式：

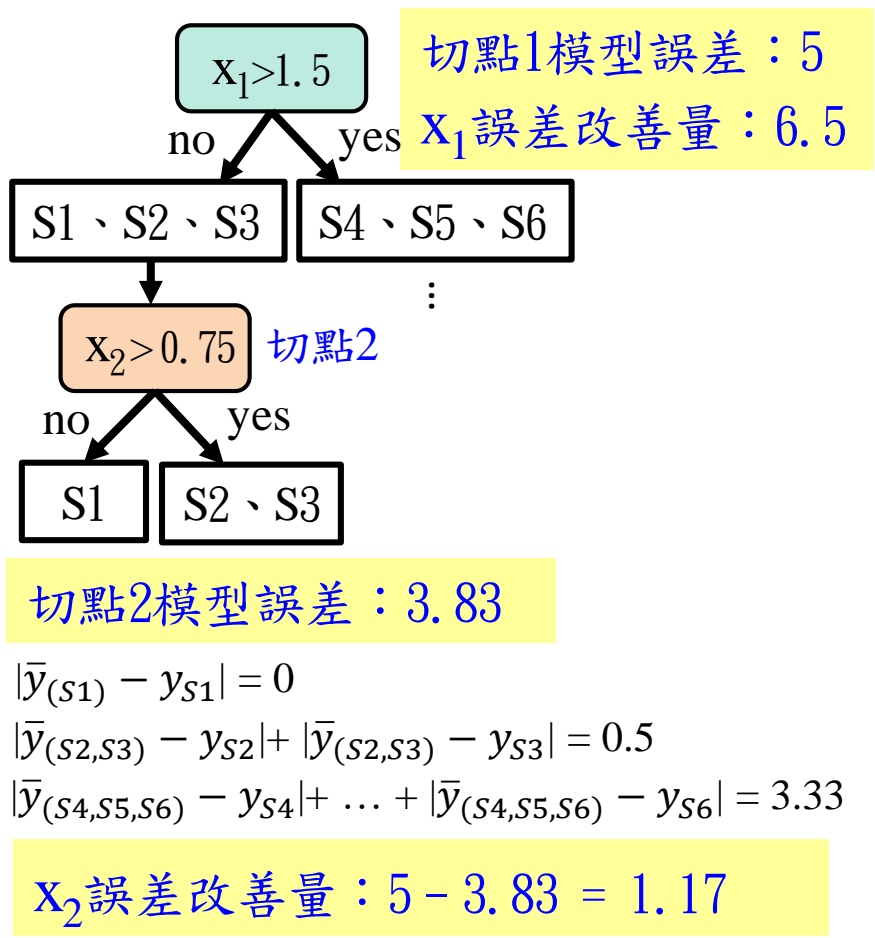
特徵	x ₁	x ₂	合計
誤差改善量	6.5	1.17	7.67
特徵重要度	0.85	0.15	1

特徵重要度=各別誤差改善量/總誤差改善量

$x_1 = 6.5 / 7.67 = 0.85$

$x_2 = 1.17 / 7.67 = 0.15$

無切點模型誤差： $\sum_{i=1}^6 |\bar{y} - y_{Si}| = 11.5$



Step3. 特徵篩選(3/4)

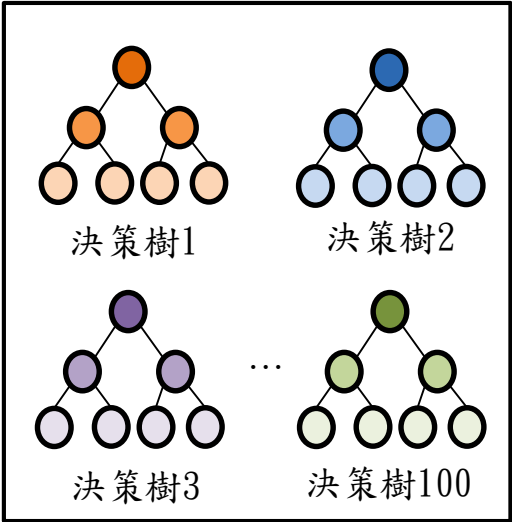
➤ 計算隨機森林特徵重要度

資料集1, 632組

點位名稱	代號
	y
	x ₁
	x ₂
	x ₃
	x ₄
	x ₅
	x ₆
	x ₇
⋮	⋮
共32個特徵	x ₃₂

每次隨機抽樣700組訓練資料，建立1棵決策樹，共建立100棵決策樹。

隨機森林模型



統計隨機森林模型，各特徵誤差改善量的占比，獲得最終特徵重要度。

誤差改善量

編號	x ₁	x ₂	...	x ₃₂	合計
決策樹1	6.5	2.3	...	0.2	40.9
決策樹2	3.2	4.3	...	0.5	39.2
⋮					
決策樹100	2.5	6.4	...	0.3	41.5
總和	1,057	976	...	40	4,066
特徵重要度	0.26	0.24	...	0.01	1

$$x_{n,improvement} = \sum_{i=1}^{100} x_{n,i}$$

誤差改善量

n：特徵數量，i：決策樹數量

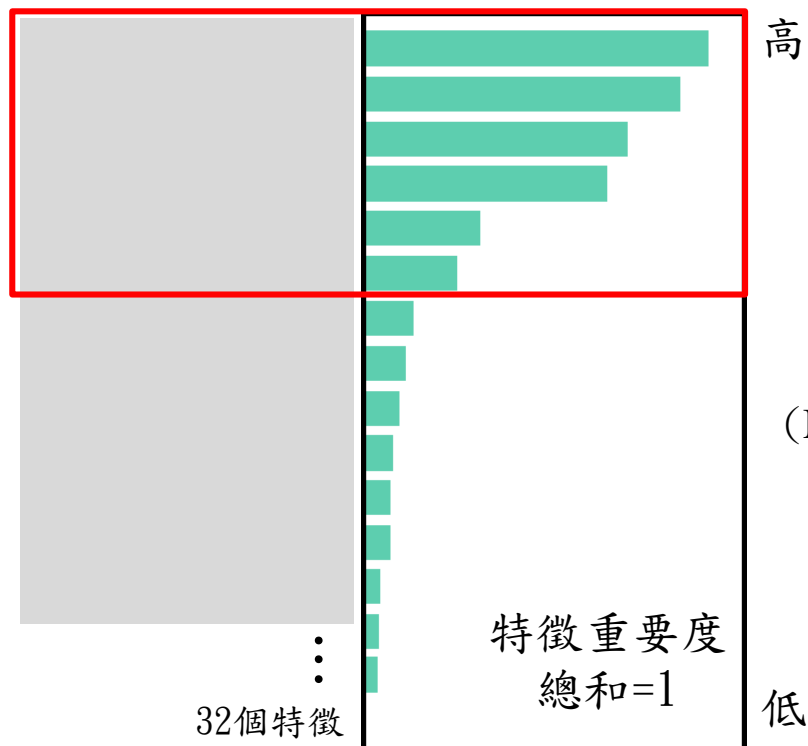
$$x_{n,importance} = \frac{x_{n,improvement}}{\sum_{n=1}^{32} x_{n,improvement}}$$

特徵重要度

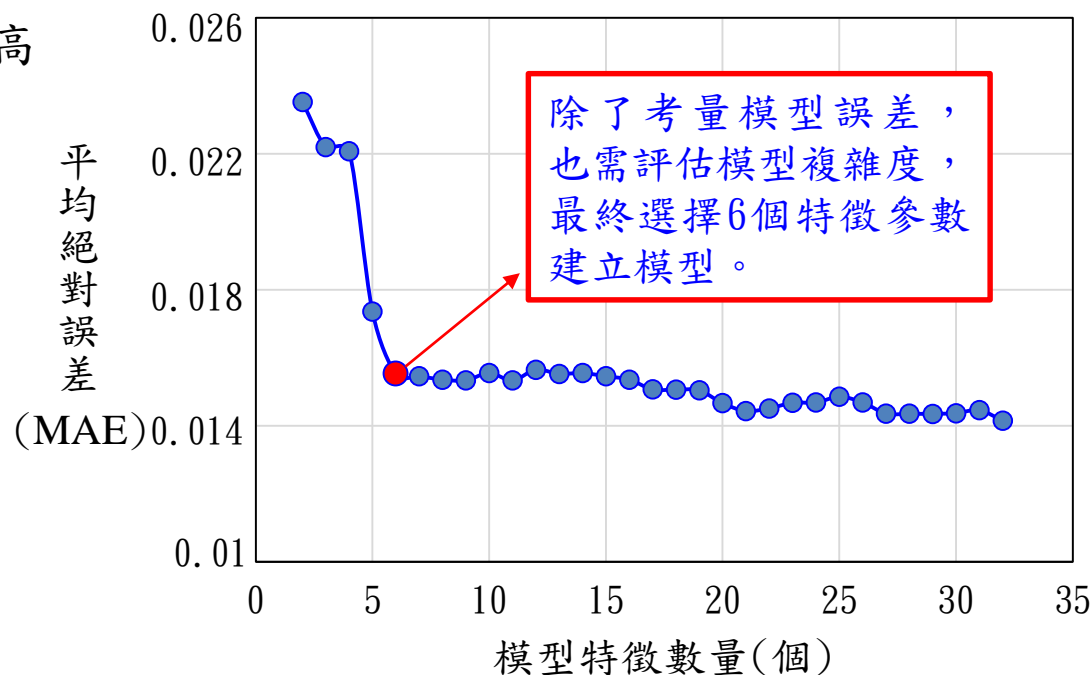
Step3. 特徵篩選(4/4)

- 以迴歸演算法針對32個特徵進行多次訓練，根據特徵重要度分析結果，由高至低逐次增加特徵來訓練模型，最終採用6個特徵進行AI建模。

隨機森林特徵重要度排序



C-160正丁醇品質預測模型



Step4. 1 演算法選擇

- ▶ 本案屬於製程優化的數值預測，選擇5種常見演算法進行訓練評比，最終選定嶺迴歸(Ridge)為品質預測模型演算法。
- ▶ 與總管理處統計應用於製程優化成功開發案例之主要演算法相符。

C-160正丁醇品質預測模型 測試結果

項次	演算法	MAE (%)
1	嶺迴歸(Ridge)	0.022
2	線性迴歸(Linear Regression)	0.032
3	隨機森林(Random Forst)	0.027
4	極限梯度提升(XGBoost)	0.025
5	深度神經網路(DNN)	0.042
MAE目標		<0.035%

※ MAE：平均絕對誤差(Mean Absolute Error)

※ MAE目標制定原則：模型的訓練資料為原始檢驗數據，該資料本身存在檢驗誤差，因此該模型MAE目標是以檢驗誤差作為標準來設定。

Step4. 2 模型化工原理驗證

$$y \text{ (正丁醇純度)} = \sum_{i=1}^n w_i X_i + b$$

(常數項)

權重(w_i)正負號表示特徵(X_i)與品質的相關性

- + 表示該特徵(X_i)與品質(y)為正相關。
- 表示該特徵(X_i)與品質(y)為負相關。

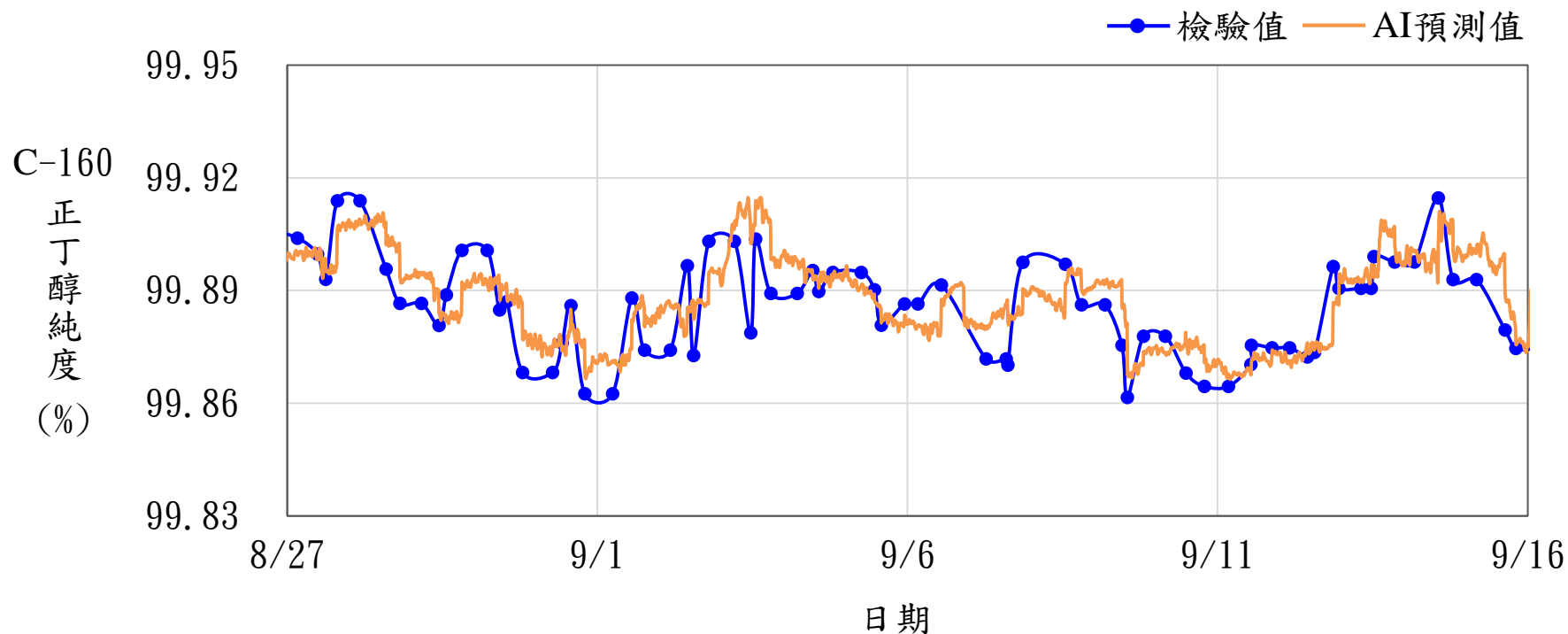
➤ Ridge模型演算結果：6個特徵均符合化工操作原理。

項次	製程變數(X_i)	權重(W_i)	是否符合 化工原理
1		0.023	是
2		-0.002	是
3		-0.012	是
4		-0.017	是
5		-0.019	是
6		0.006	是

Step4.3 線上驗證結果

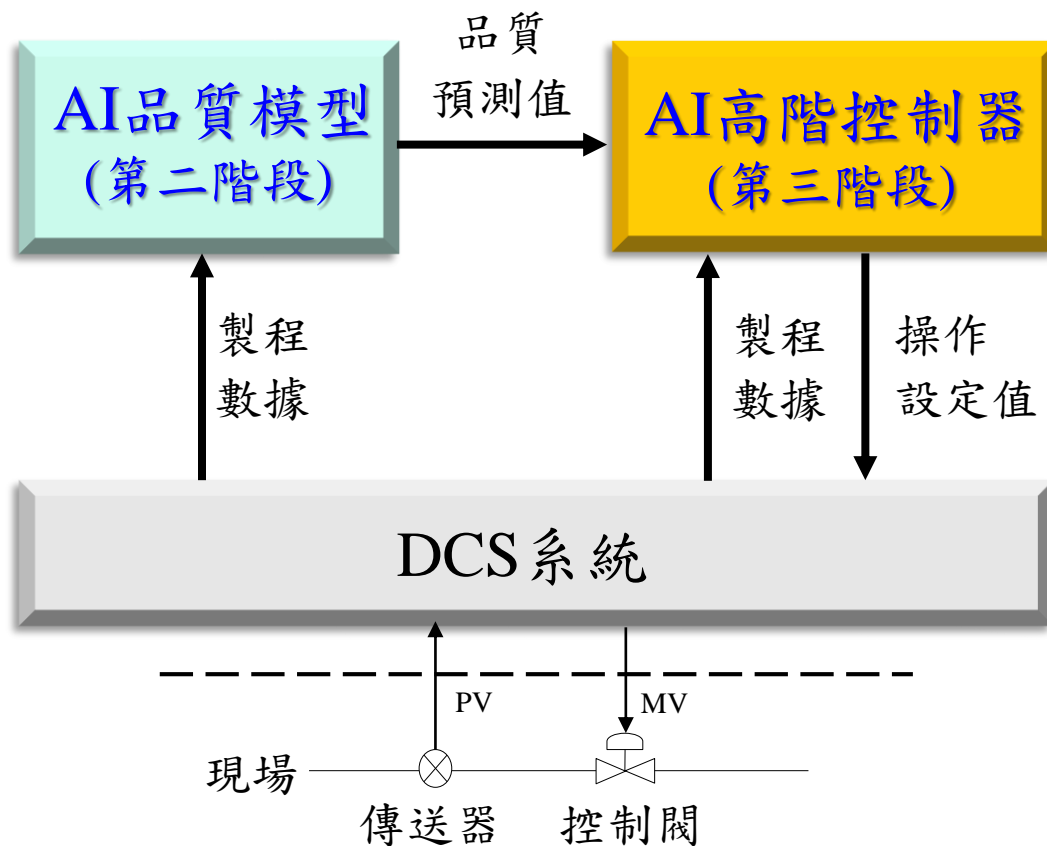
➤ 驗證時間：2021/8/27~2021/9/16。

➤ 驗證結果：品質變化趨勢相近，MAE為0.021%，符合目標
<0.035%。



5.3 第三階段：AI高階控制器(1/2)

- 將AI品質模型計算後的品質預測值，寫入AI高階控制器 (Advanced Process Control, APC)，作為調整控制的參考依據。

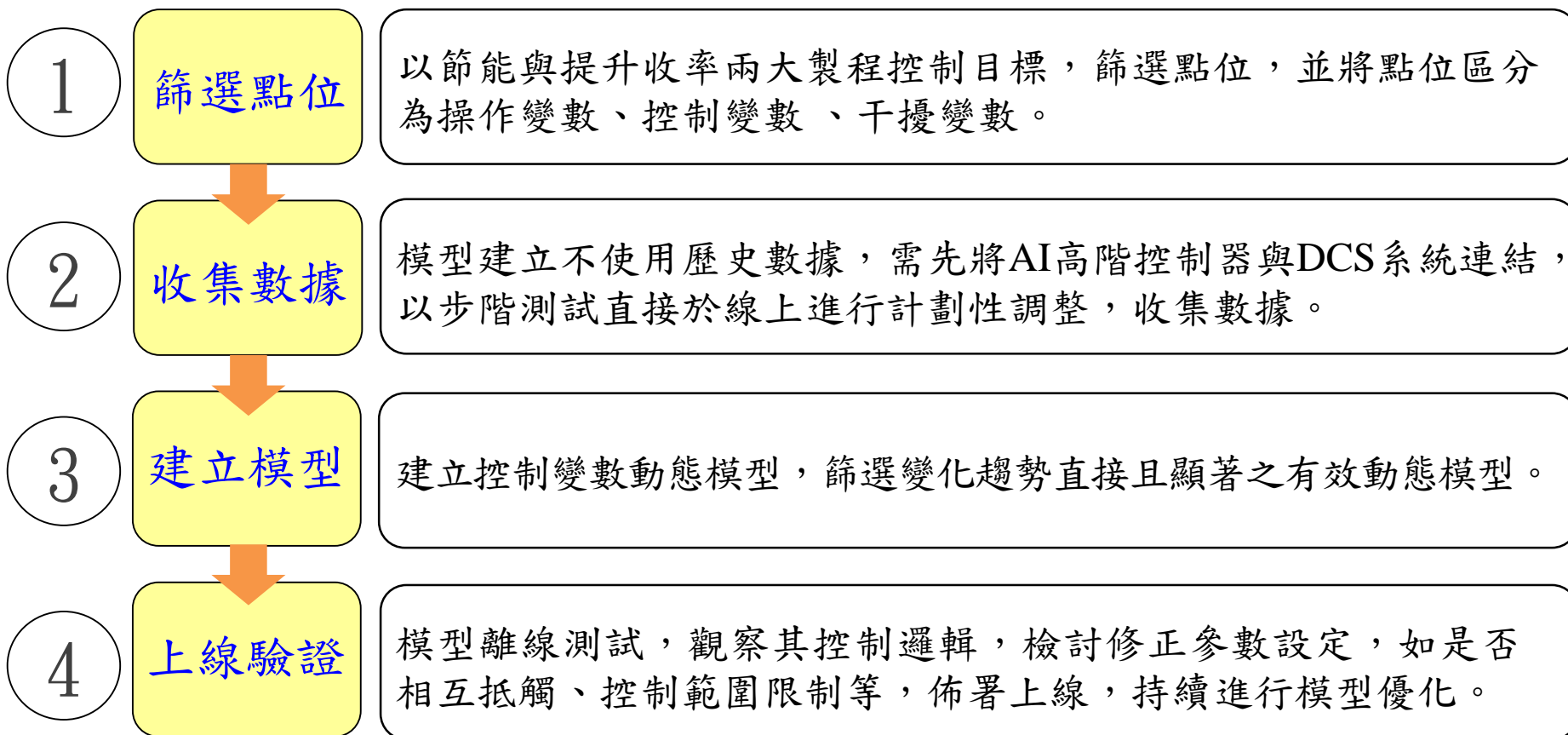


AI高階控制器功能：

- 計算多變數間影響程度及時間，可於多個控制迴路中，找到最佳操作條件。
- 預測製程變化趨勢，提供穩定控制方式。

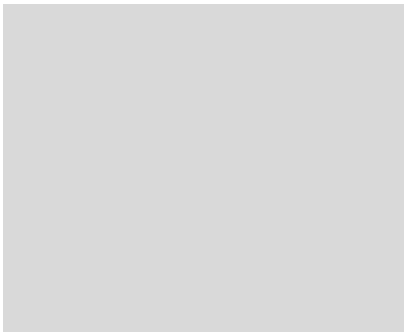
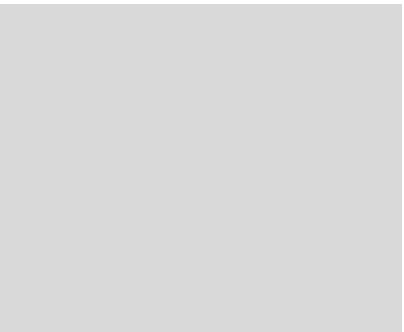
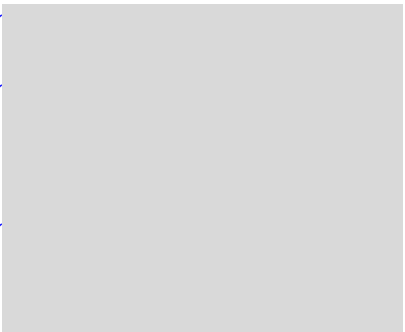
5.3 第三階段：AI高階控制器(2/2)

◆ 開發流程



➤ 篩選點位：

精餾塔單元包含32個製程變數，根據製程領域知識與操作經驗，挑選與「節能」與「提升收率」較相關的23個變數，依變數特性分類如下：

類別	操作變數(7個)	控制變數(11個)	干擾變數(5個)
目的	調整控制點	控制的目標	干擾影響控制變數 但無法操作
點位	<div> <div>✓</div> <div>✓</div> <div>✓</div> <div>✓</div> </div> 	<div> <div>✓</div> <div>✓</div> <div>✓</div> <div>✓</div> </div> 	<div> <div>✓</div> <div>✓</div> <div>✓</div> </div> 

➤ 以操作變數進行步階測試(Step Test)收集數據：

(1)於DCS系統上調整操作變數，收集各變數間的變化趨勢。

(2)時間：2020/6/23~2020/9/4，每15秒一組，合計約42萬組操作數據。

- 使用FIR演算法建立模型：
- 考慮自變數(x)在多個時間序列下與應變數(y)之關係，建立模型。
- $$y_t = b_1 x_{t-1} + b_2 x_{t-2} + b_3 x_{t-3} \dots + e_t$$
- 塔底溫度 多個時間序列的C-160正丁醇流量 誤差項
- 以11個控制變數為主體，建立132個FIR模型，組合成動態矩陣模組。

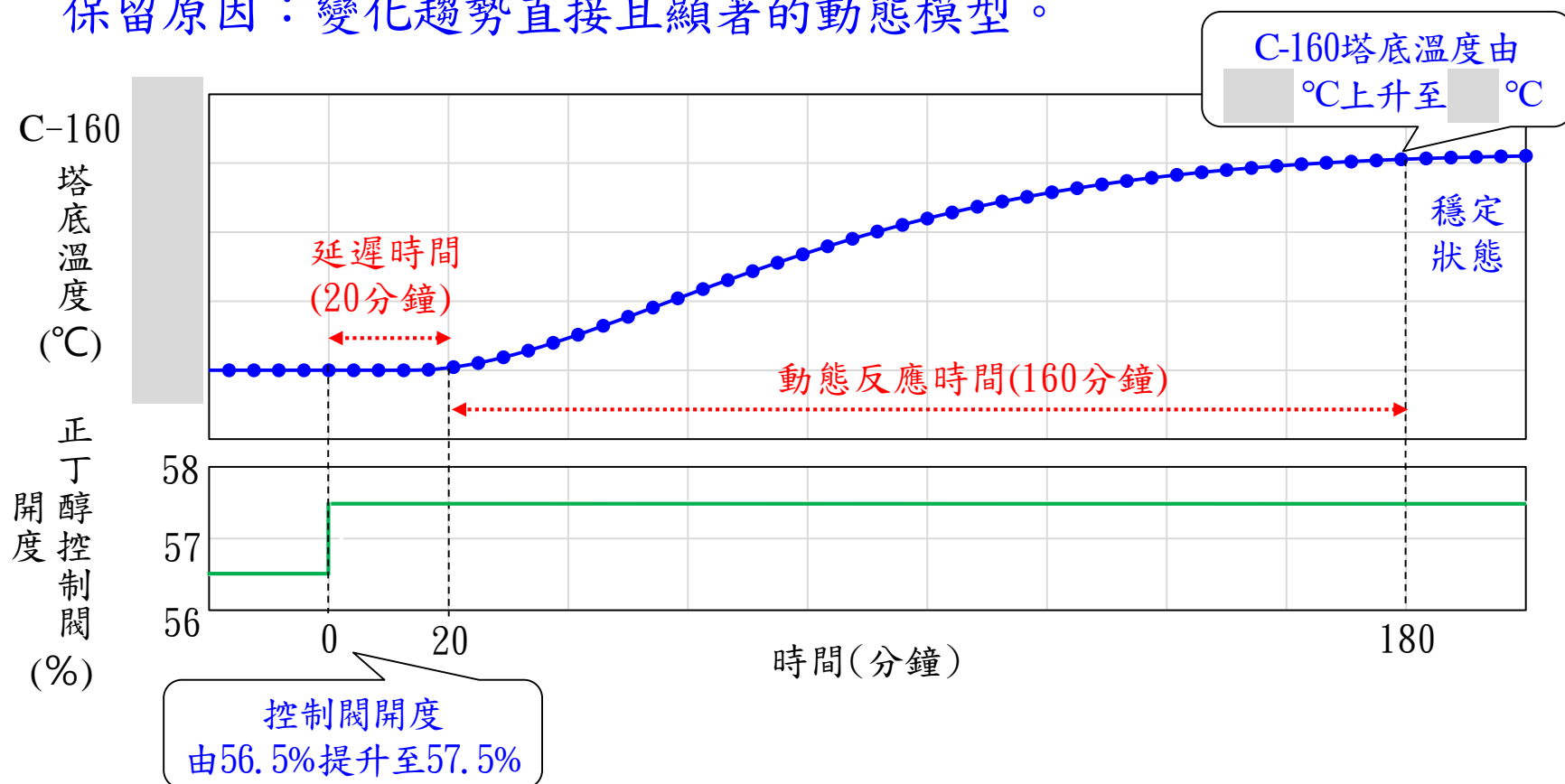


➤ 篩選模型：

評估每個動態模型變數間的影響程度，並確認方向性是否正確，最終從132個FIR模型中，保留43個有效之動態模型。

➤ 保留模型：C-160正丁醇出料控制閥開度與塔底溫度。

保留原因：變化趨勢直接且顯著的動態模型。



➤ 設定AI可控範圍

基於製程安全前提，製程主管依據製程know-how、Aspen模擬結果及現場操作經驗，現場盤控人員設定各操作變數上下限，AI僅能於範圍內自動調整控制。

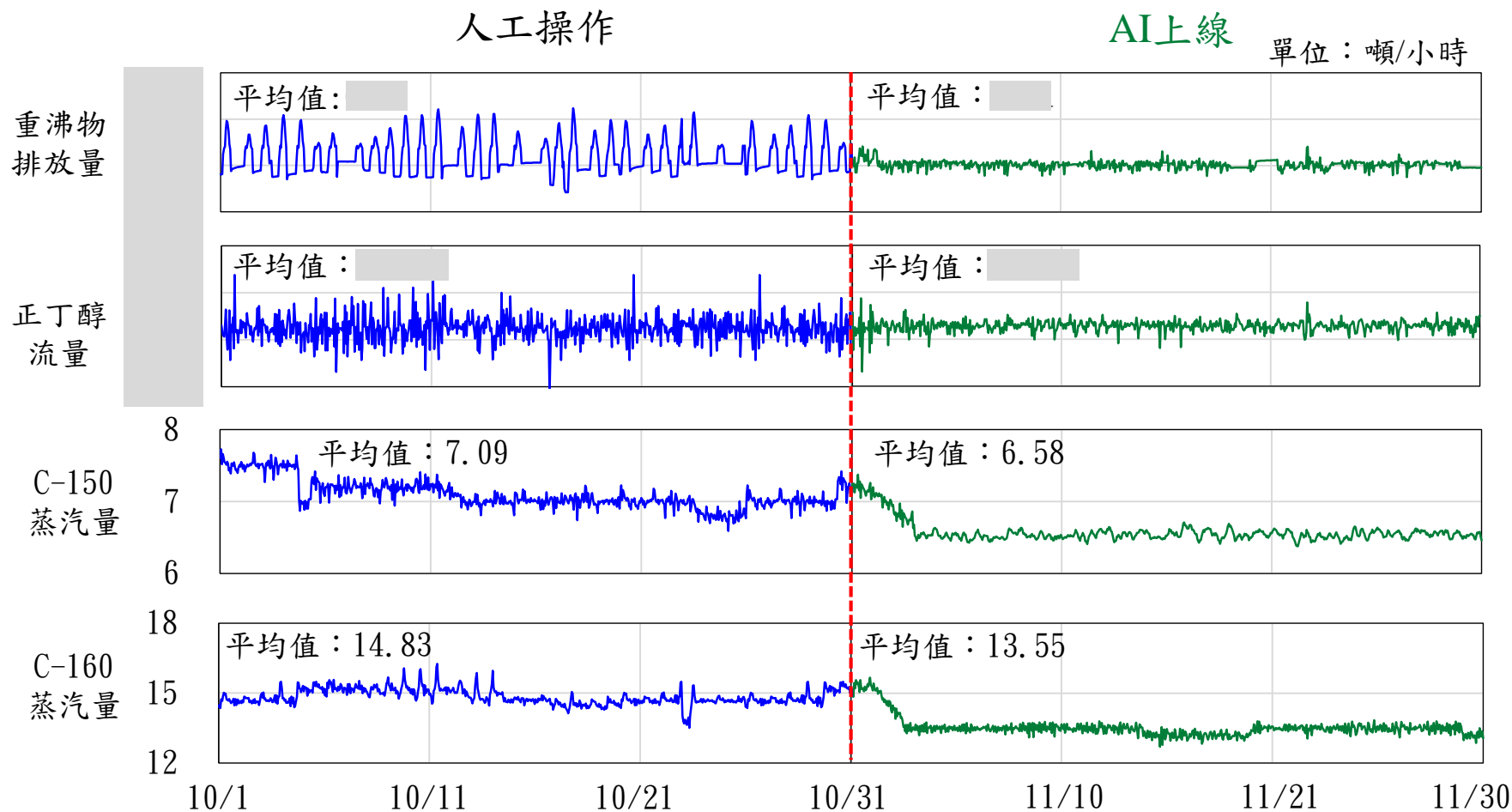
DCS操作範圍設定畫面

AI高階控制器狀態：Active 通訊狀態：正常 APC切換：APC ON

操作變數		目前	變數切換	控制下限	控制上限
01			● ON		
02			● ON		
03			● ON		
04			● ON		
05			● ON		
06			● ON		
07			● ON		

設定AI可控範圍

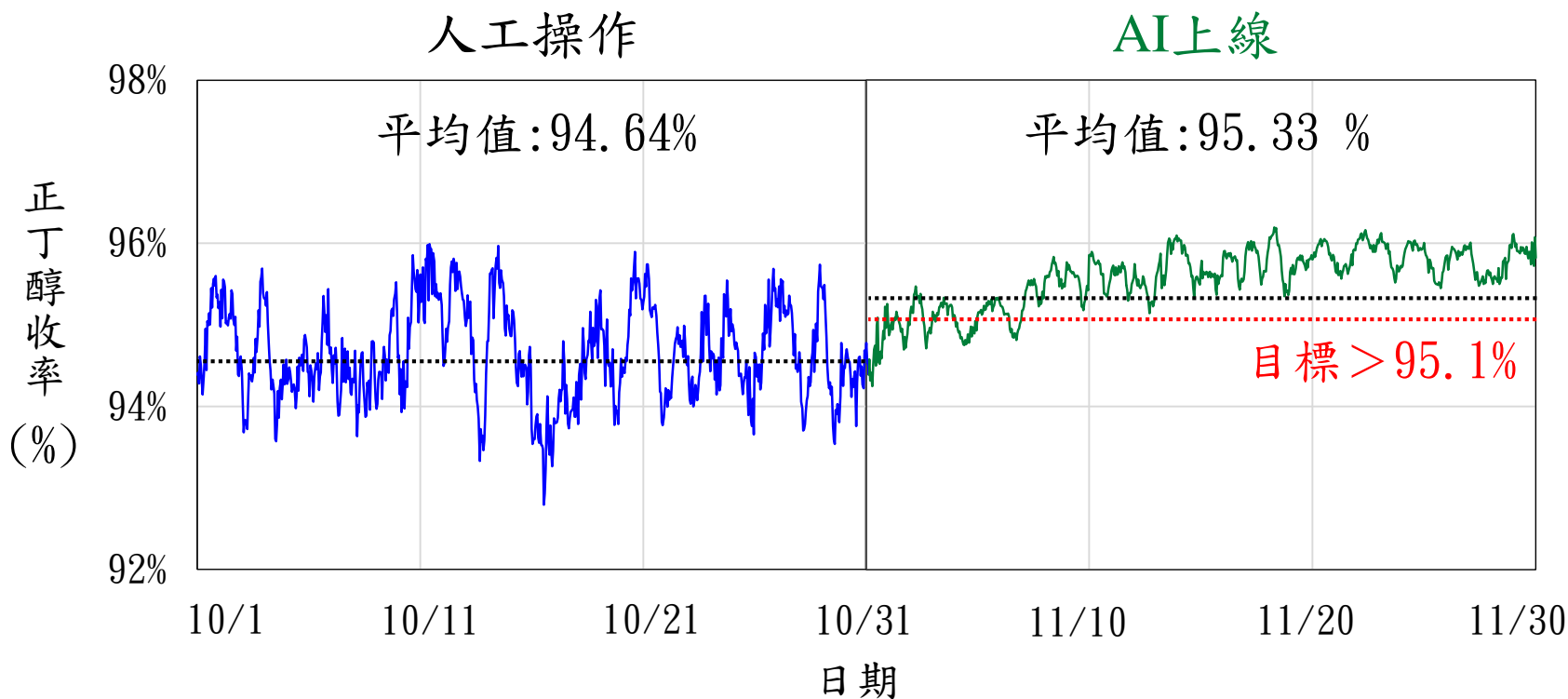
- AI每30秒計算一次最佳操作條件，同時對多個點位進行微幅調整。
- 收率：減少重沸物排放量，正丁醇產量增加。
- 節汽：減少C-160至C-150迴流量，降低蒸汽用量。



5.4第四階段：模組正式上線(1/2)

➤ 提升收率驗證結果：

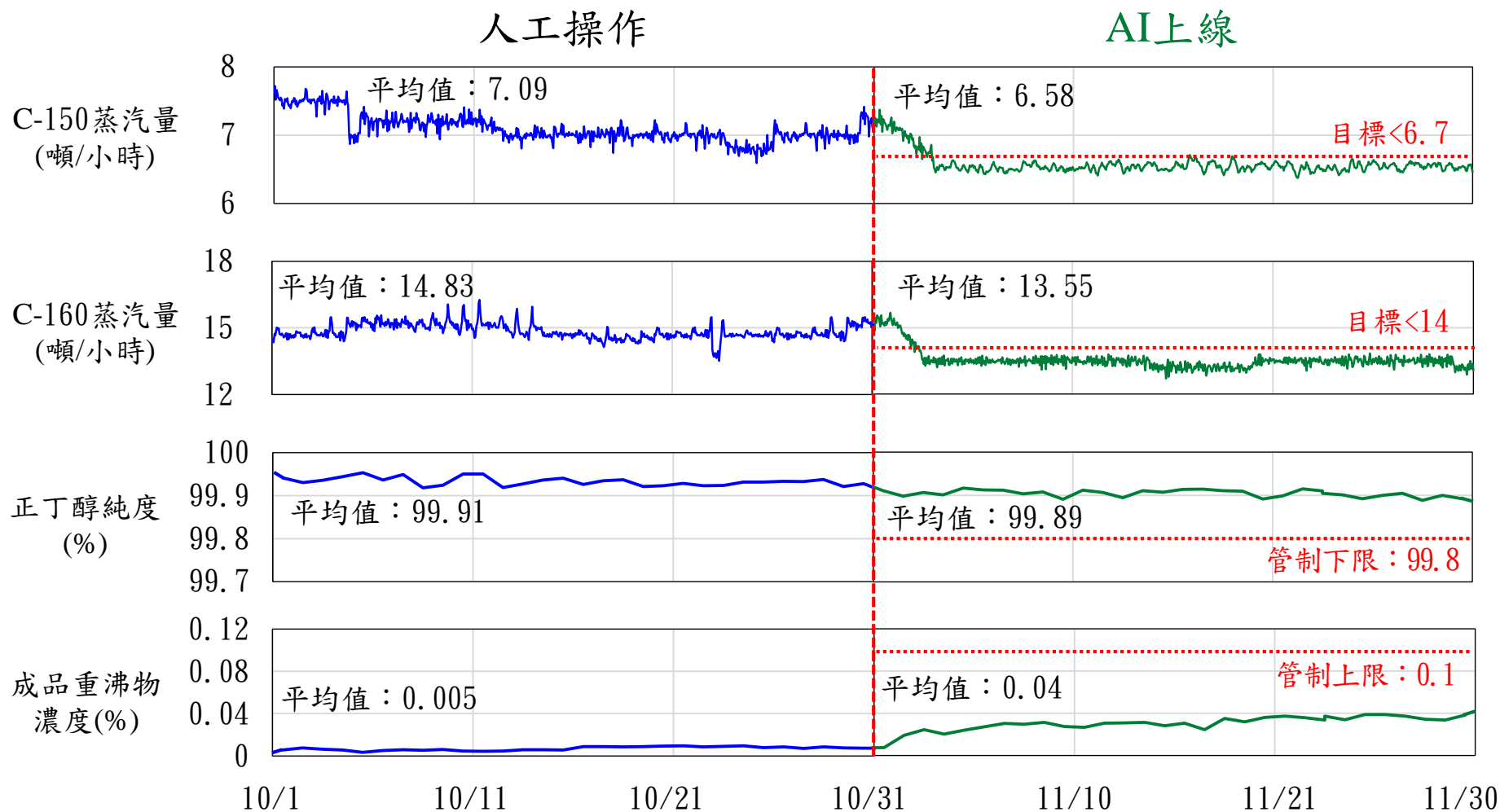
AI上線後正丁醇產量可增加5.3噸/日；平均收率由94.64%
提升至95.33%(增加0.69%)。



5.4 第四階段：模組正式上線(2/2)

➤ 節省蒸汽驗證結果：

C-150 蒸汽量減少 0.51 噸/小時，C-160 蒸汽量減少 1.28 噸/小時。



6. 效益說明(1/2)

➤ 本案已於2021年11月正式上線，效益說明如下：

① 投資費用：8,470千元

a. 軟體：2,230千元

b. 硬體：700千元

c. 設計：5,540千元

② 年效益：65,387千元/年

a. 提升收率：50,340 千元/年



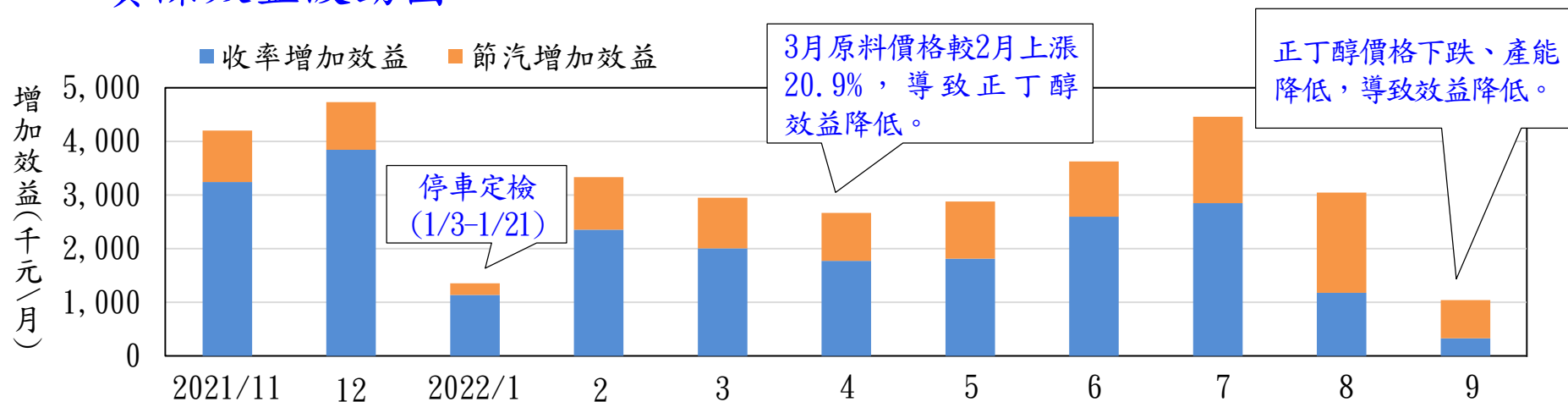
b. 節省蒸汽量：15,047千元/年



③ 回收年限：0.13年

6. 效益說明(2/2)

► 實際效益波動圖



正丁醇月產量(噸)											
正丁醇月增加產量(噸)											
原料單價(千元/噸)											
正丁醇單價(千元/噸)											
收率增加效益A(千元)	3,245	3,843	1,139	2,355	2,009	1,773	1,814	2,600	2,851	1,181	331
節省蒸汽量(噸)											
節汽增加效益B(千元)	961	893	219	979	945	896	1,066	1,026	1,608	1,864	711
總效益A+B(千元)	4,206	4,736	1,358	3,334	2,954	2,669	2,880	3,626	4,459	3,045	1,042

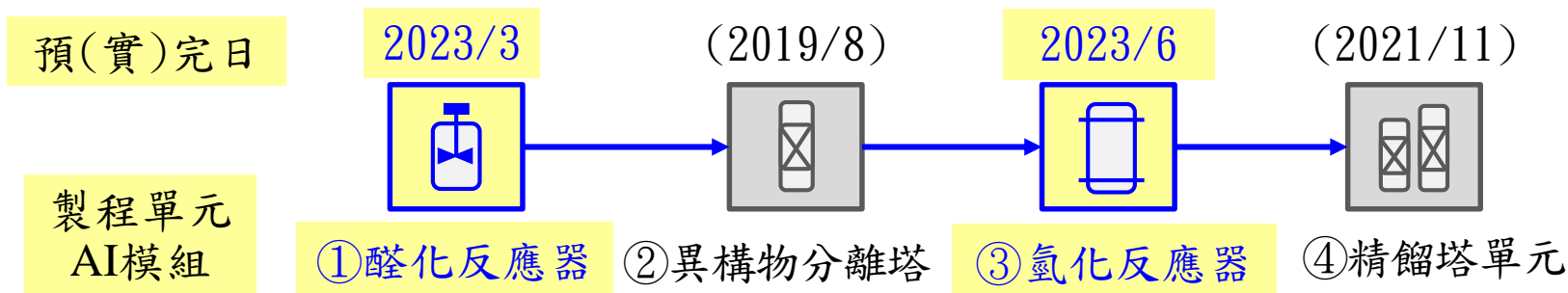
7. 結論及後續推動事項(1/2)

- 2020/7 Aspen模擬正丁醇精餾塔單元，探索提升收率與節能的調整方向。
2020/9開發AI品質預測模型。
2020/12開發AI高階控制模組，計算最佳操作條件。
2021/11正式上線，已節省蒸汽用量1.79噸/小時，正丁醇平均收率增加0.69%(5.3噸/日)。
- 後續推動事項：AI高階控制模組已展開應用於其他製程系統，合計12案，預估總效益110,068千元，已完成3案，年效益90,794千元。

進度	部門	主題	完成日	預估效益 (千元/年)
已 完 成	麥寮 NBA廠	異構物分離塔(C-130)操作最佳化	2019/8	20,909
		正丁醇精餾塔(C-150、C-160)操作最佳化	2021/11	65,387
	仁武台麗朗	DMF蒸餾塔操作最佳化	2022/3	4,498
開 發 中	麥寮 NBA廠	醛化反應器(R-111/R-112)操作最佳化	2023/3	4,700
		氫化反應器(R-142A/R-142B)操作最佳化	2023/6	2,300
		跨單元整合模組	2023/12	4,930
	麥寮 AE廠	BA區酸脫除塔(C-402)操作最佳化	2023/12	1,015
		BA區單位用量最佳化	2023/12	613
	林園 AE廠	丙烯酸水分離塔(C-805)操作最佳化	2023/8	1,657
		丙烯酸丁酯精餾塔(C-906、C-907)操作最佳化	2023/12	2,207
	仁武 台麗朗	DMSO蒸餾塔操作最佳化	2023/9	1,294
		RM蒸餾塔(C-792)操作最佳化	2024/9	558
合計				110,068

7. 結論及後續推動事項(2/2)

- 製程單元AI優化控制模組：
2019年8月完成異構物分離塔單元。
2021年11月完成精餾塔單元。
預計分別於2023年3月及6月完成醛化反應器及氫化反應器單元。



- 跨單元整合：
整合上下游AI模組，統籌各單元間關聯性，計算最佳化操作條件，進一步降低原料與能源單耗，全案預計2023年12月開發完成。
預估效益：節省蒸汽1,600噸/年，正丁醇產量增加600噸/年，合計年效益4,930千元/年。



報告完畢 恭請總裁訓示



附件：英文專有名詞資料表(1/2)

英文名詞	英文全名	中文名稱	說明
Aspen	Advanced System for Process Engineering	-	美國 Aspen Tech 公司開發的一套化工程序設計模擬軟體，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。
APC	Advanced Process Control	高階程序控制	由英國 AVEVA Group plc(劍維集團)開發的一套模型預測先進製程控制軟體，朝向提升品質、產量和減少能耗來提高生產過程的優化控制程序。
CV	Controlled Variable	控制變數	被控制的變數，如塔底溫度。
DCS	Distributed Control System	分散式控制系統	工廠或是製程中使用的電腦化控制系統，一般其中會有數個控制迴路，自主的控制器分散在系統中，無須中央操作員的監控。
Decision tree	Decision tree	決策樹	資料透過對每個節點設定分類的規則生成一個樹狀圖，來輔助我們做決策與分析。
DNN	Deep Neural Networks	深度神經網路	以神經網路為基礎架構，藉由加深隱藏層來取代傳統特徵工程的演算法。
Feature	Feature	特徵	將變數轉換為更具代表性或解釋性的資訊。
FV	Feedforward Variable	干擾變數	對控制變數有影響，但無法操作的變數。
FIR	Finite impulse response	有限脈衝響應	考慮自變數(x)在多個時間序列下與應變數(y)之關係的演算法。

附件：英文專有名詞資料表(2/2)

英文名詞	英文全名	中文名稱	說明
LASSO	Least Absolute Shrinkage and Selection Operator	脊迴歸	一種正規化函數，可同時進行變數篩選與複雜度調整。LASSO的懲罰項(L1)的效果可以強制令不重要的解釋變數，權重係數為0，進而篩選變數。
MAE	Mean Absolute Error	平均絕對誤差	多筆實際值與預測值誤差的絕對值平均。
MV	Manipulate Variables	操作變數	可操作的變數，使控制變數可在期望範圍內。
Parameter	Parameter	參數	理論模型的設定條件。
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。
RIDGE	RIDGE	嶺迴歸	一種正規化函數，可經懲罰項(L2)同時執行縮小權重係數達到降低雜訊的迴歸分析方法，常用於解決存在多重共線性問題的資料集。
Step test	Step test	步階測試	分析系統的階躍響應，有助於了解系統的特性，透過計劃性調整變數，經長時間穩態後，可獲得系統延遲時間；動態變化時間等資訊，也可了解系統的穩定性。
Variable	Variable	變數	觀測值的統稱，依據特性或類型進行分類，如因變數、自變數、控制變數、干擾變數等。
XGBoost	EXtreme Gradient Boosting	極限梯度提升	將多個弱分類器組合後，形成一個強大的分類器的機器學習演算法。