

# 台化公司化工三部

## 醋酸廠POx反應器進料單元最佳化操作

報告人：曹永進

2022年10月19日

【密】 【會後收回】

## 報告摘要

- 一. 醋酸廠一氧化碳(CO)製程採部分氧化法(POx)，進料輕油及氧氣在高溫高壓條件下，進行部分氧化反應，生成一氧化碳及氫氣等成分的合成氣，若反應條件沒有最佳化，會影響一氧化碳產率，同時增加二氧化碳及灰分等副反應物生成，影響整廠效益。
- 二. POx反應的主要控制條件為氧氣及霧化蒸汽流量，在確保反應溫度及灰分濃度在安全管制範圍內，追求一氧化碳產率最佳化，但是操作上有以下問題點：進料輕油組成隨每批輕油而改變，氧氣及霧化蒸汽須配合調整，同時因製程緩衝空間小，需即時調整輕油進料負載來因應，現狀依原廠Linde操作手冊調整，氧氣及霧化蒸汽會有調整落後與不容易一次到位的問題，還有改善空間。
- 三. 擬藉由大數據分析及深度學習技術，開發「POx反應器進料單元最佳化操作」模組，在安全操作範圍內，提供最佳氧氣及霧化蒸汽流量建議，提高一氧化碳產率。
- 四. 進料單元最佳化模組，已於今年3月投入使用，模組投入後提高一氧化碳產率0.52%，並減少副反應物生成，年效益1,937萬元。

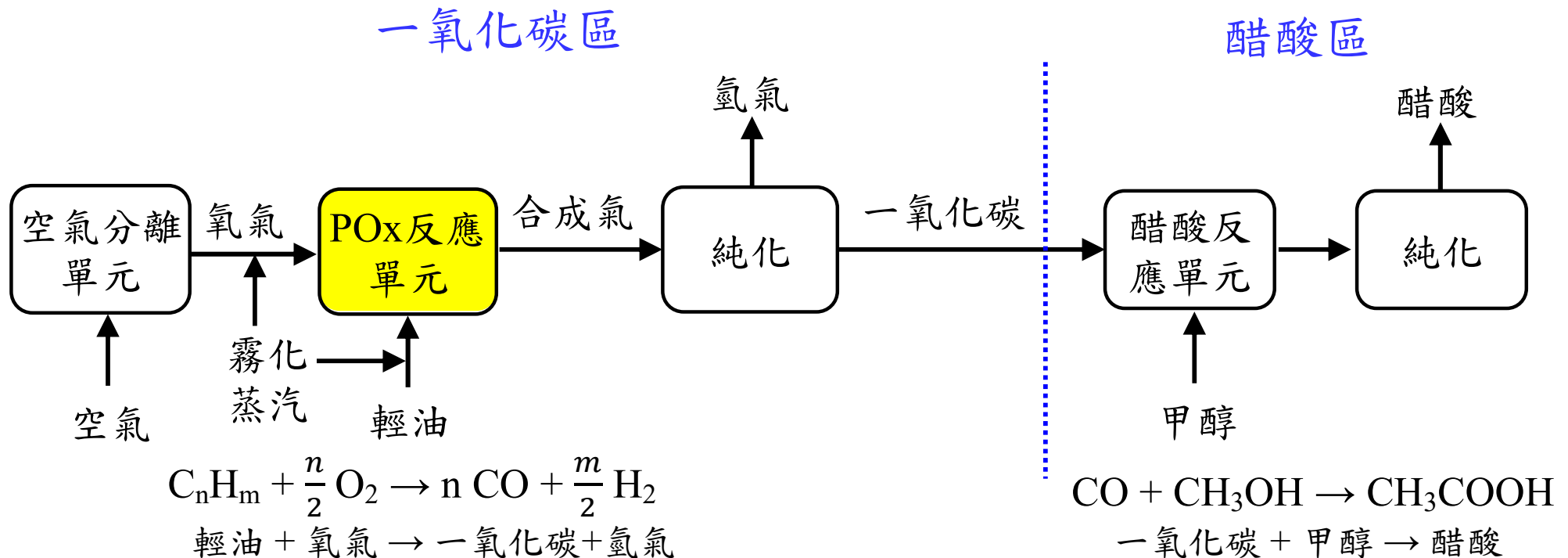
# 報告內容

- 一、改善動機
- 二、模組開發應用成果
- 三、模組開發流程
- 四、改善效益
- 五、結論與後續工作

# 一、改善動機

## 1. 醋酸廠製程說明：

- (1) 醋酸廠製程依產出的成品分為二區，一氧化碳(CO)區及醋酸(AA)區，如下圖所示。一氧化碳區是以輕油及空氣分離得到的氧氣進行部分氧化反應，生成合成氣，經純化後得到一氧化碳。  
醋酸區是以一氧化碳與甲醇進行反應，純化後得到醋酸。
- (2) 本案主要聚焦在一氧化碳區的POx反應單元，以提升一氧化碳產率為目標，由AI模組預測及試算最佳操作建議，指引盤控進行製程優化調整。

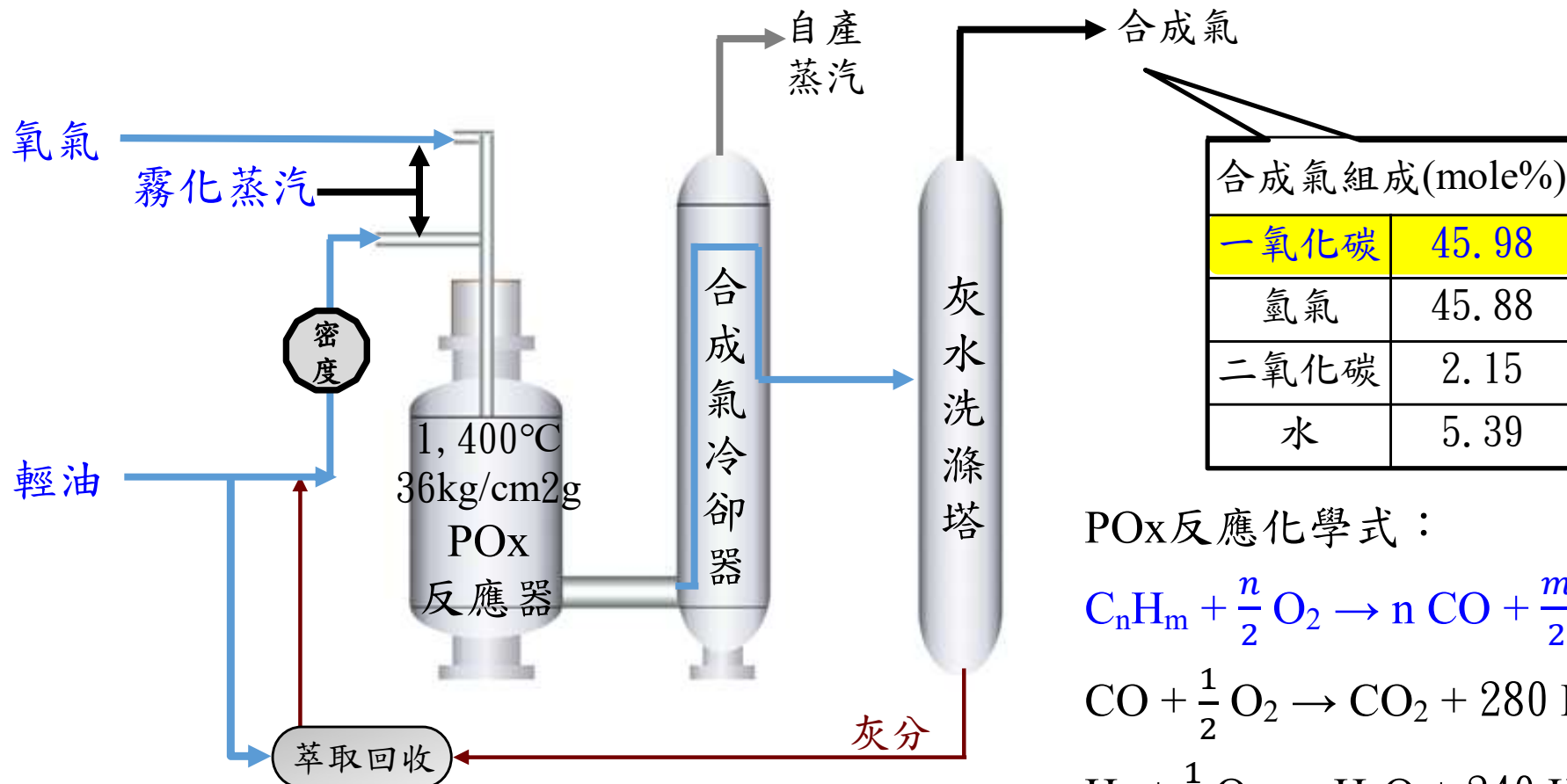


# 一、改善動機

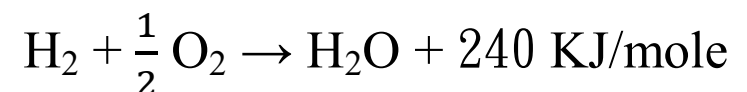
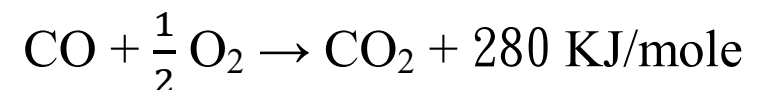
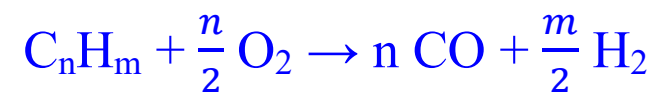
## 2. PO<sub>x</sub>反應單元製程說明：

進料輕油及氧氣在1,400°C及36kg/cm<sup>2</sup>g的條件下，進行部分氧化反應，生成合成氣，同時會有灰分(成分為碳)等副反應物生成。

操作上藉由調整氧氣及霧化蒸汽流量，在確保灰分濃度及反應溫度於安全管制範圍(<4%及<1,420°C)內，追求最佳的一氧化碳產率。



PO<sub>x</sub>反應化學式：



## 一、改善動機

### 3. PO<sub>x</sub>控制問題點：

#### (1) 進料輕油組成隨每批輕油而改變

隨著輕油密度的改變，氧氣及霧化蒸汽流量需配合即時調整，否則容易發生高溫跳俾或灰分偏高堵塞管路。

例如輕油密度升高，代表含碳量增加，若不做調整，會造成灰分上升，反應溫度下降，為避免灰分堵管，所以氧氣及霧化蒸汽流量需配合進行調整。

輕油密度變高 調整步驟	控制方式		現象			
	氧氣流量	霧化蒸汽	灰分	溫度	CO	CO <sub>2</sub>
不做調整	—	—	↑	↓	↑	↓

說明：灰分與二氧化碳濃度為線性負相關(二氧化碳降至1.84%時，灰分濃度會超出管制值4%)，灰分為品管分析點，一天僅分析一次，無法即時反應灰分濃度，因此以二氧化碳濃度為管制。

# 一、改善動機

## 3. PO<sub>x</sub>控制問題點(續)：

### (1) 進料輕油組成隨每批輕油而改變(續)

為避免輕油密度升高，氧氣不足，造成灰分堵管，請參考下表步驟1，應先調升氧氣流量，以降低灰分，但是會造成一氧化碳產率下降。

為追求一氧化碳產率，請參考下表步驟2，需調降霧化蒸汽流量，但會造成PO<sub>x</sub>反應溫度上升，接近管制上限(1,420°C)，又需調降氧氣流量，一氧化碳產率不易達到最佳化。

輕油密度變高 調整步驟	控制方式		調整後			
	氧氣流量	霧化蒸汽	灰分	溫度	CO	CO <sub>2</sub>
步驟1 (先調升氧氣流量)	↑(50Kg/hr)	—	↓	↑(9°C)	↓(0.1%)	↑
步驟2 (後調降霧化蒸汽)	—	↓(25Kg/hr)	↑	↑(1.3°C)	↑	↓

## 一、改善動機

### 3. PO<sub>x</sub>控制問題點(續)：

#### (2) 一氧化碳區為氣體製程，緩衝空間小

由於純化單元變溫吸附系統(TSA)再生步驟(如洩壓、升溫及充壓)及下游(醋酸區及PC廠)用量變化，會造成一氧化碳超壓排放或壓力不足，因此盤控人員需經常調整PO<sub>x</sub>進料輕油負載，約每小時需手動調整1次。

#### (3) 氧氣及霧化蒸汽流量調整，不易保持最佳化

由於輕油密度經常變化及反應器負載需經常調整，氧氣及霧化蒸汽流量需配合即時調整，達到一氧化碳的產率最佳化。但是實務上僅根據SOP調整，操作條件之間容易顧此失彼，不易長時間保持最佳化。



## 一、改善動機

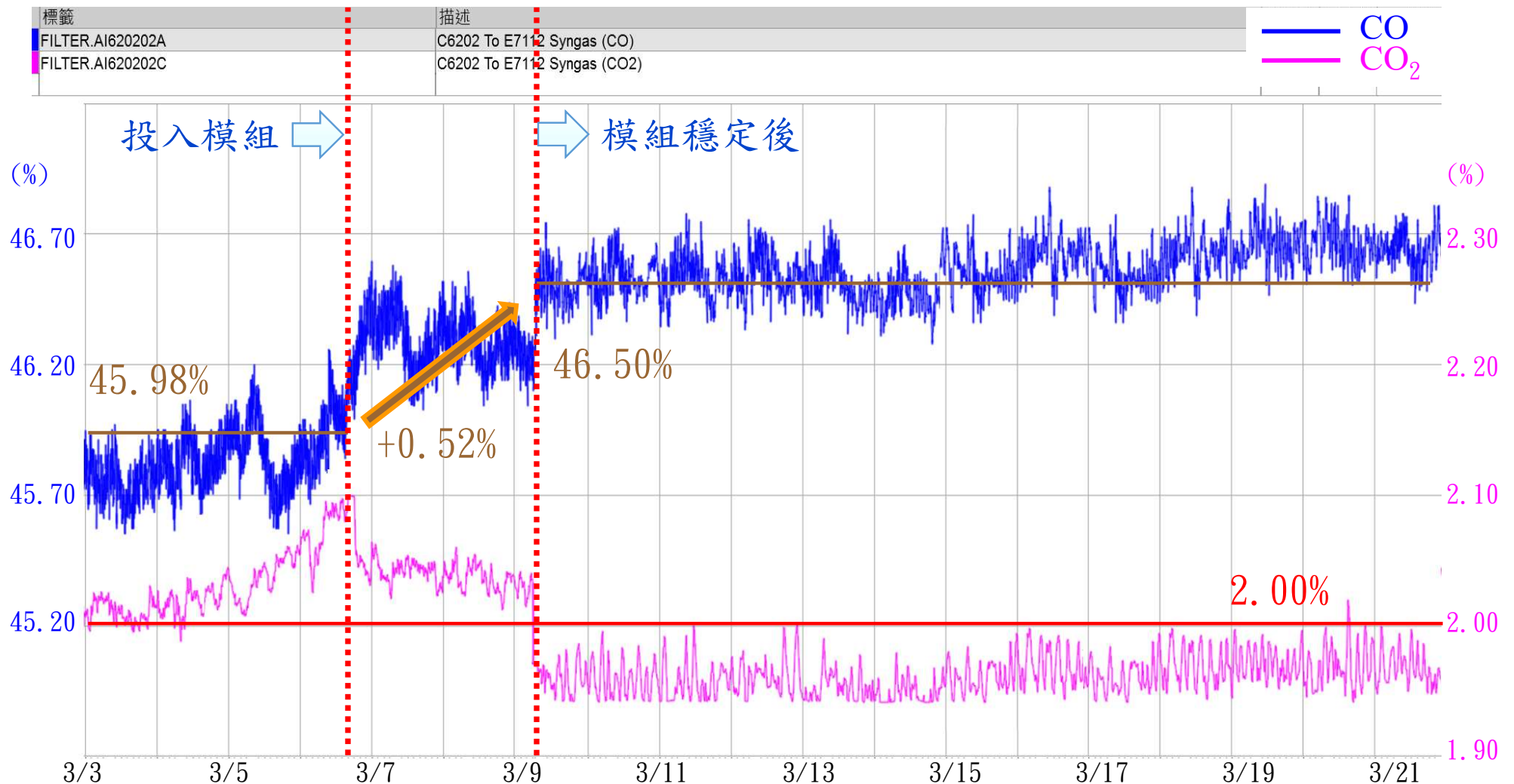
### 4. 問題點與改善對策說明：

問題點 (原操作管理模式)	改善對策 (發展預測模組)
由於POx反應器進料輕油密度經常變化及反應器負載需經常調整，目前是根據SOP調整，在安全操作範圍內來調整氧氣及霧化蒸汽流量，操作條件容易顧此失彼，不易長時間保持一氧化碳的產率最佳化。	<p>(1)<u>藉由大數據分析與深度學習技術，開發一氧化碳產率預測模組。</u></p> <p>(2)<u>建立操作建議模組，在安全操作範圍內，提供氧氣及霧化蒸汽流量操作建議，達到一氧化碳產率最佳化。</u></p>

## 二、模組開發應用成果

模組於2022年3月投入運轉：

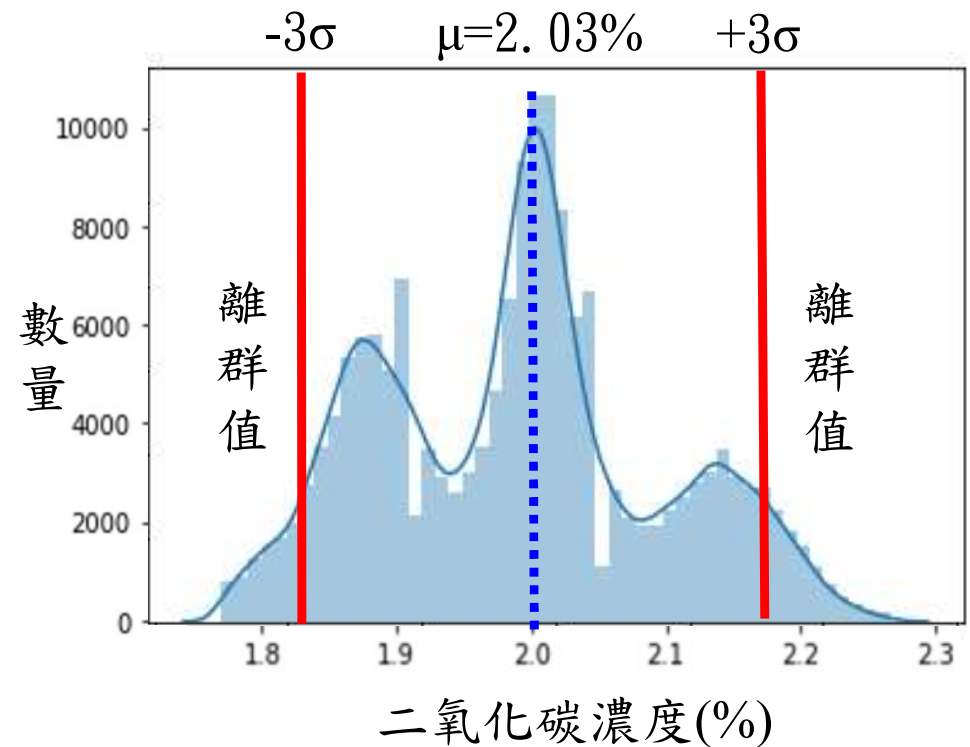
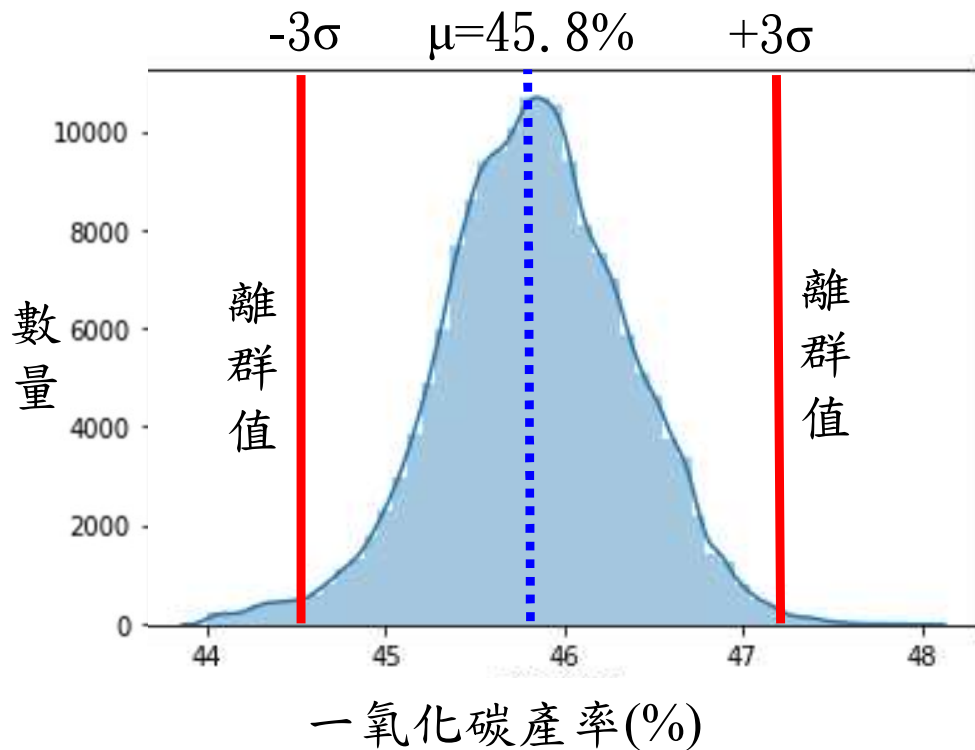
本案依據模組建議在安全操作範圍內調整，一氧化碳產率提高0.52% (45.98%提升至46.50%)，並減少二氧化碳生成，年效益1,937萬元。



### 三、模組開發流程

定義問題目標 → 資料盤點清理 → 探索分析 → 模組開發 → 線上應用

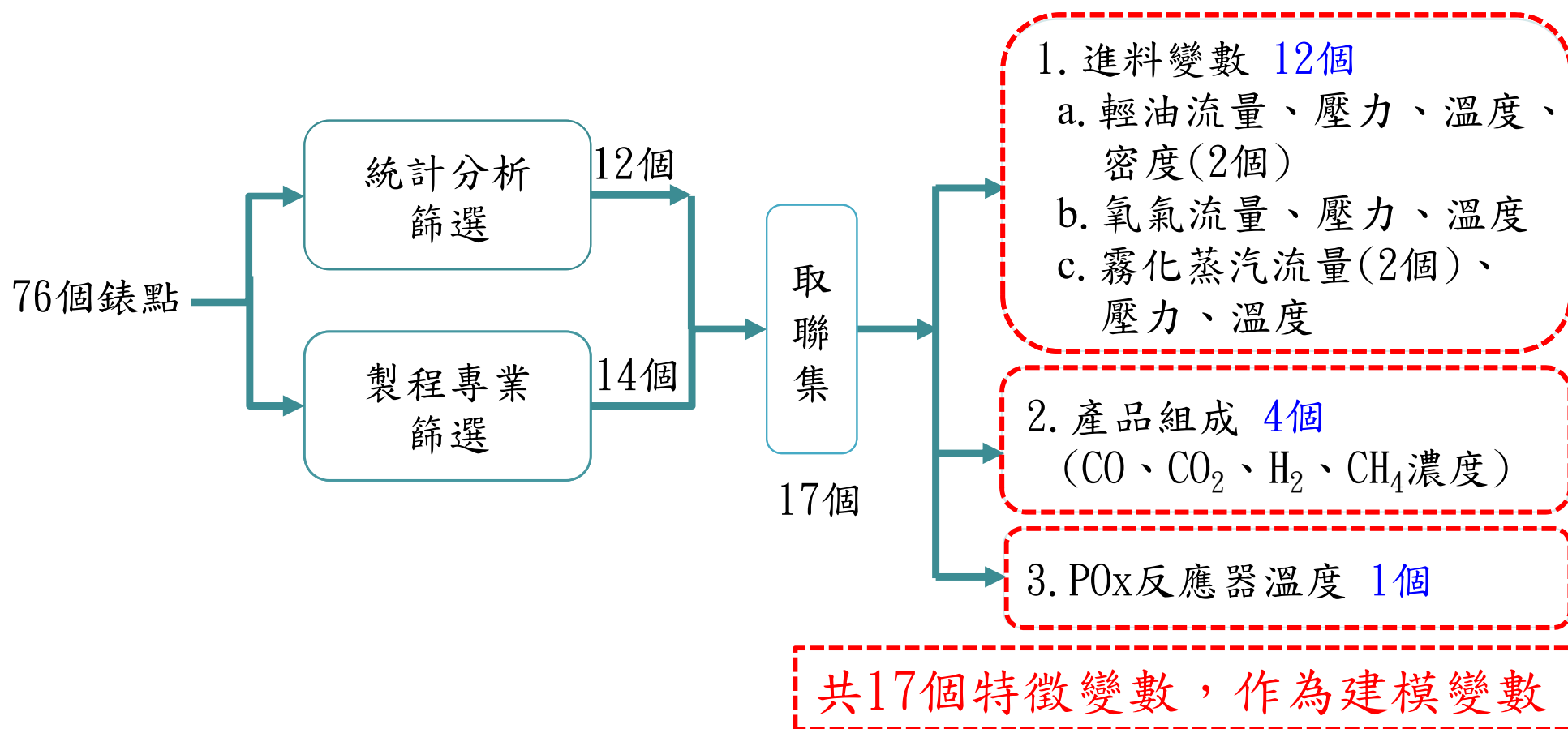
1. 使用2017年1月到2021年6月數據進行盤點與清理，蒐集製程PO<sub>x</sub>單元上下游錶點，共76個，配合氧氣控制閥應答時間，每10分鐘取一筆，共計236,500筆進行清理。
2. 以關鍵參數一氧化碳產率及二氧化碳濃度為基準，剔除停開車及三倍標準差的偏移數據，清理後有效數據降為203,400筆。



### 三、模組開發流程

定義問題目標 → 資料盤點清理 → **探索分析** → 模組開發 → 線上應用

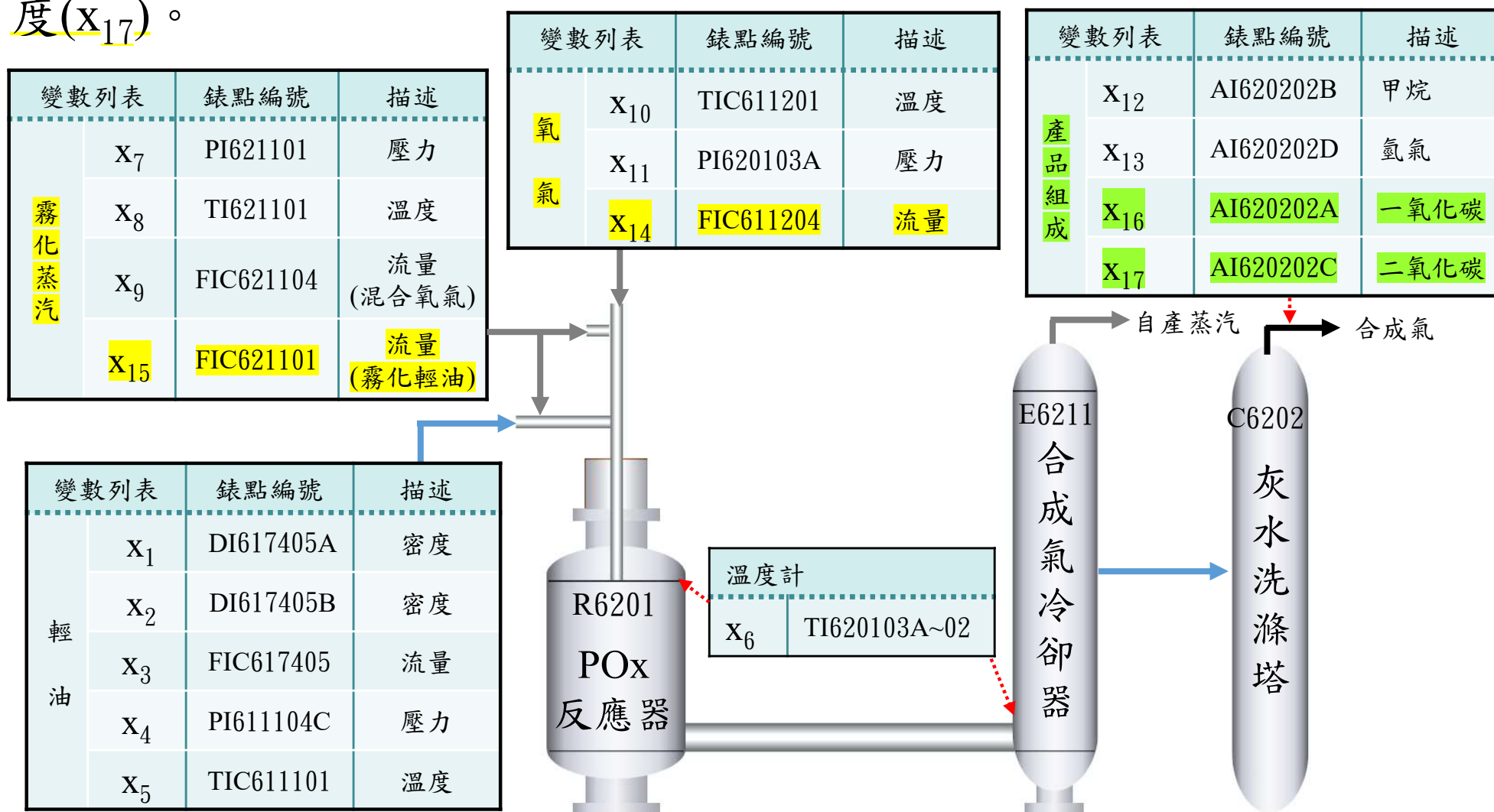
特徵變數探索分析：利用皮爾森相關係數分析( $\geq 0.6$ )，在76個錶點中篩選出12個做為特徵變數，搭配製程人員挑選的重要變數14個，取聯集後有17個特徵變數，分為三個類別：進料變數12個、產品組成4個及POx反應器溫度1個，共17個作為建模變數。



## 三、模組開發流程

定義問題目標 → 資料盤點清理 → **探索分析** → 模組開發 → 線上應用

17個建模變數在製程分布如下圖，包含2個操作變數，氧氣流量( $x_{14}$ )及霧化蒸汽流量( $x_{15}$ )；2個目標變數，一氧化碳產率( $x_{16}$ )及二氧化碳濃度( $x_{17}$ )。





## 三、模組開發流程

定義問題目標 → 資料盤點清理 → 探索分析 → **模組開發** → 線上應用

1. 一氧化碳產率預測模組開發，評估下列三種常用演算法及結果比較：

演算法名稱	(1)偏最小平方法 PLS	(2)深層神經網路 Deep ANN	(3) <u>序列對序列</u> Seq2Seq
模型類別	線性模型	神經網路模型	<u>時間序列模型</u>
演算法說明	藉由輸入當下特徵變數，經回歸方程式得到即時預測值。	藉由輸入當下特徵變數，透過神經網路進行運算，得到即時預測值。	<u>輸入資料為時序資料，透過神經網路進行運算，得到即時或未來的預測值。</u>
決定係數 $R^2$	0.745	0.941	<u>0.998</u>
均方根誤差	0.268	0.050	<u>0.023</u>

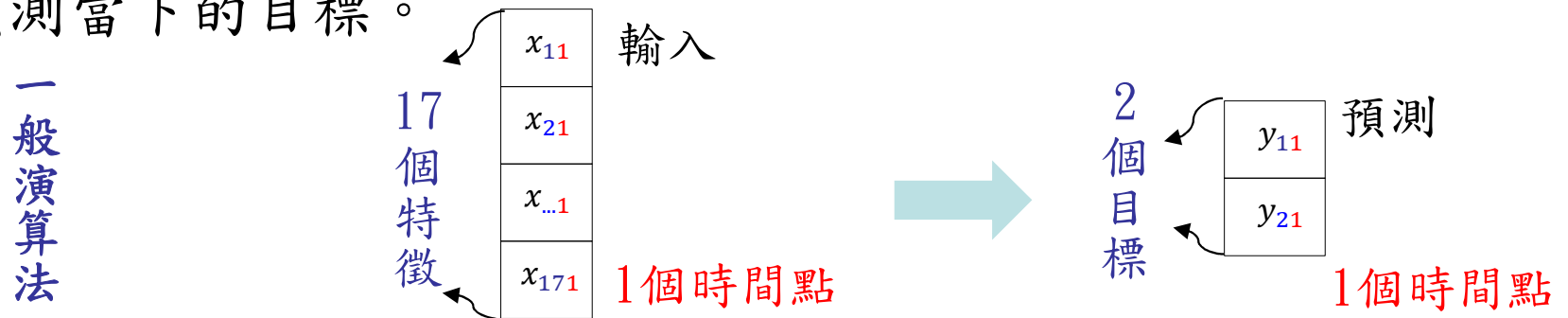
POx反應快，且溫度接近上限(依經驗，溫度越高可得較佳的一氧化碳產率)，操作上需準確預知未來趨勢，以提早因應。(1)及(2)演算法為一般演算法，沒有考慮時序變化；(3)序列對序列演算法有考慮每個特徵變數及目標變數隨時間變化的趨勢，可有效控制溫度超限及解決系統調整落後問題。

### 三、模組開發流程

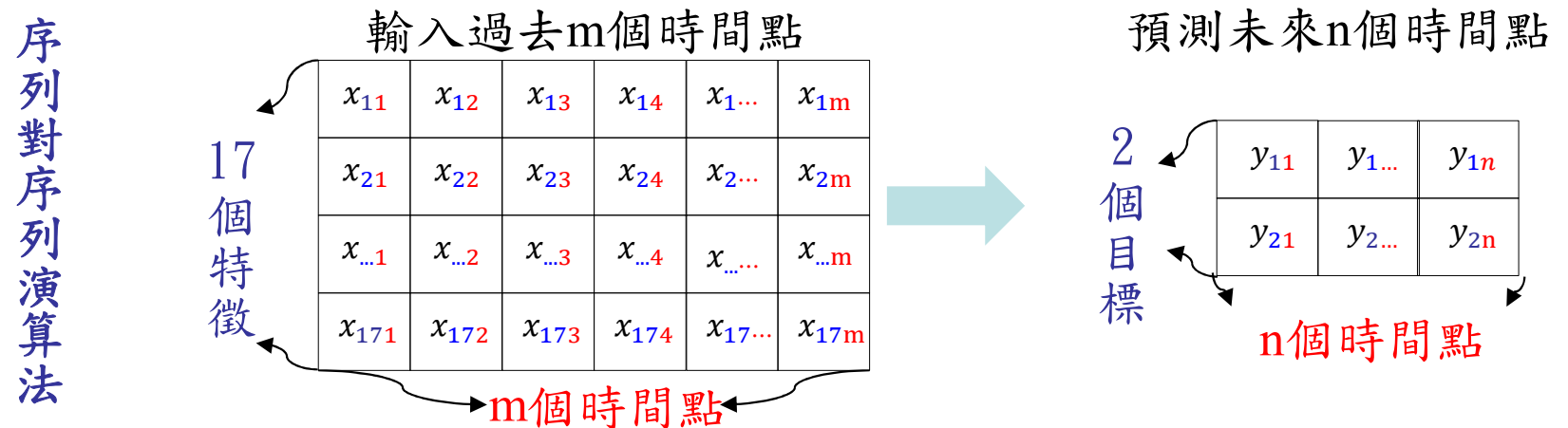
定義問題目標 → 資料盤點清理 → 探索分析 → **模組開發** → 線上應用

2. 一般演算法與序列對序列演算法的比較：

(1) 一般演算法特徵變數只有一個維度，不考慮相對時間的變化關係，只能預測當下的目標。



(2) 序列對序列演算法(Seq2Seq)，每個特徵變數增加時間變化，擴充為兩個維度，由過去m個時間點的輸入，預測未來n個時間點的目標，可解決應答慢的問題。



## 三、模組開發流程



3. 一氧化碳產率預測模組開發說明：

(1) 本案經測試多種序列對序列演算法不同時間點個數組合，其中以組合2，輸入過去11個(m)時間點與預測未來3個(n)時間點，決定係數最高0.998及均方根誤差0.023最低，最適合本案開發。

項 目	組合1	組合2	組合3	組合4	組合5	組合6
輸入過去 時間點個數 (m)	6	11	16	6	11	16
預測未來 時間點個數 (n)	3	3	3	6	6	6
決定係數 $R^2$	0.939	0.998	0.974	0.928	0.965	0.971
均方根誤差 RMSE	0.047	0.023	0.038	0.051	0.043	0.029



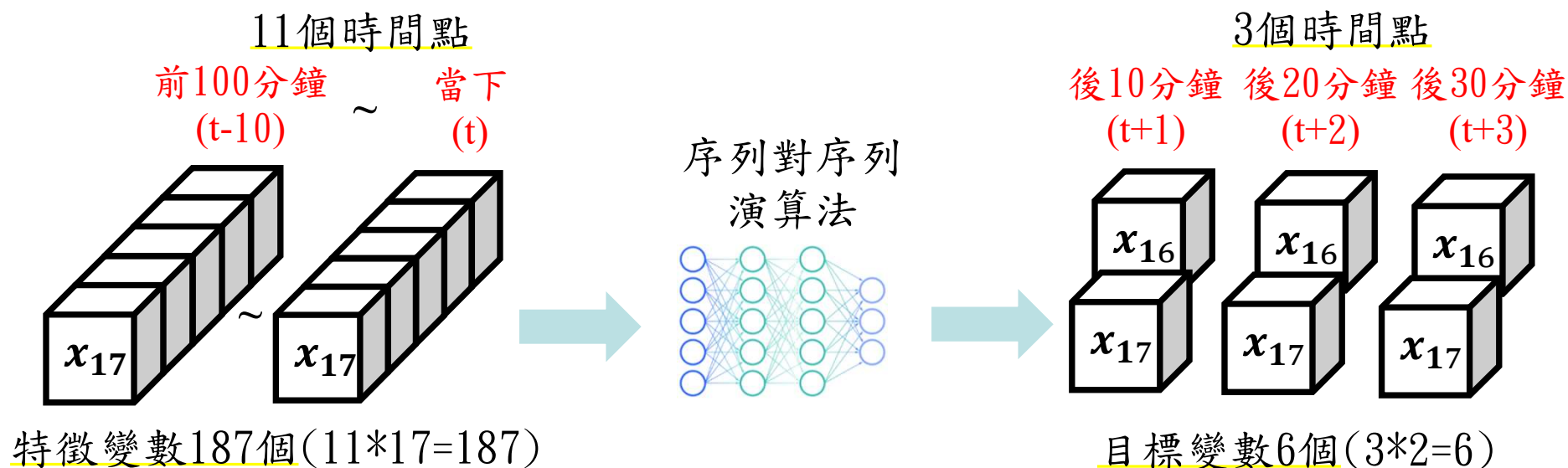
### 三、模組開發流程

定義問題目標 → 資料盤點清理 → 探索分析 → **模組開發** → 線上應用

3. 一氧化碳產率預測模組開發說明(續)：

(2) 模組訓練時，各變數 $x_1 \sim x_{17}$ 取11個時間點(當下時間(t)到前100分鐘的資料，每10分鐘取1點)，計187個特徵變數。

另變數 $x_{16} \sim x_{17}$ 取3個時間點(當下之後30分鐘資料)，計6個目標變數，進行訓練。



(3) 模型有考慮每個特徵變數及目標變數隨時間變化的趨勢，可協助確定操作條件與預測目標方向的正確性，線上測試結果決定係數為0.990，均方根誤差為0.043，符合驗證基準。

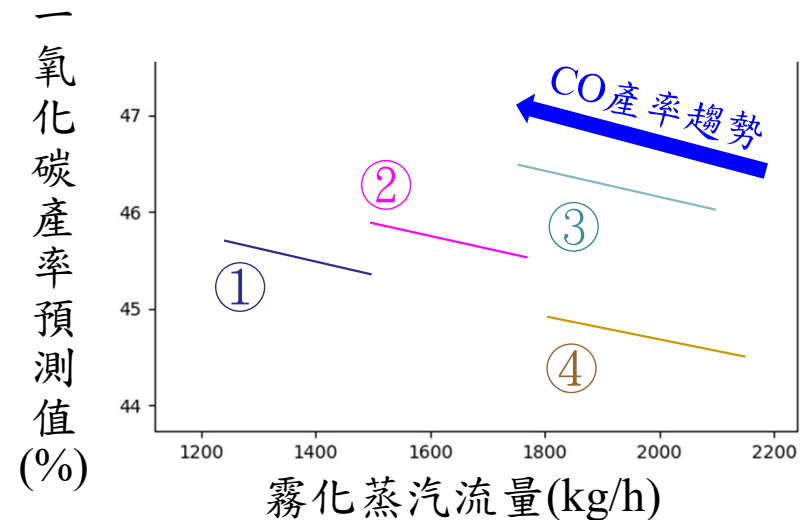
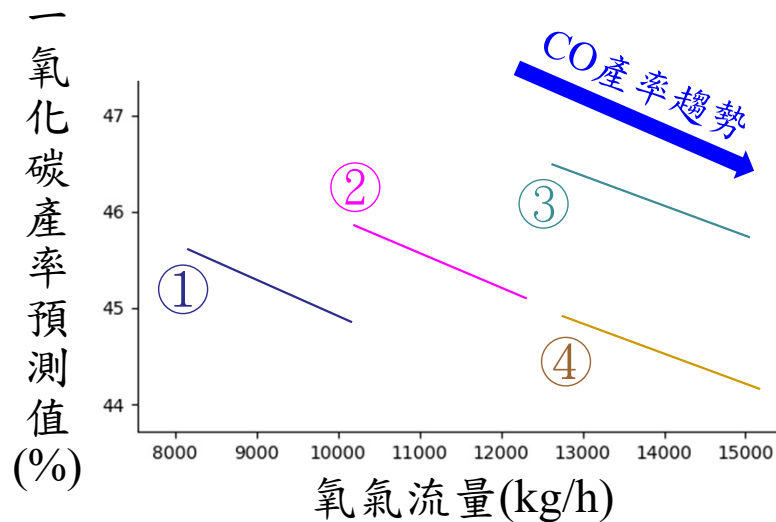
### 三、模組開發流程

定義問題目標 → 資料盤點清理 → 探索分析 → **模組開發** → 線上應用

#### 3. 一氧化碳產率預測模組開發說明(續)：

(4) 操作方向性測試：依照原廠Linde操作手冊及本廠操作經驗，氧氣及霧化蒸汽流量對於一氧化碳產率均為負相關。  
模組建立後，在4個不同負載及輕油密度條件下進行測試，結果與操作手冊一致。

①與②的條件：不同負載，密度相近；③與④的條件：不同密度，負載相近。

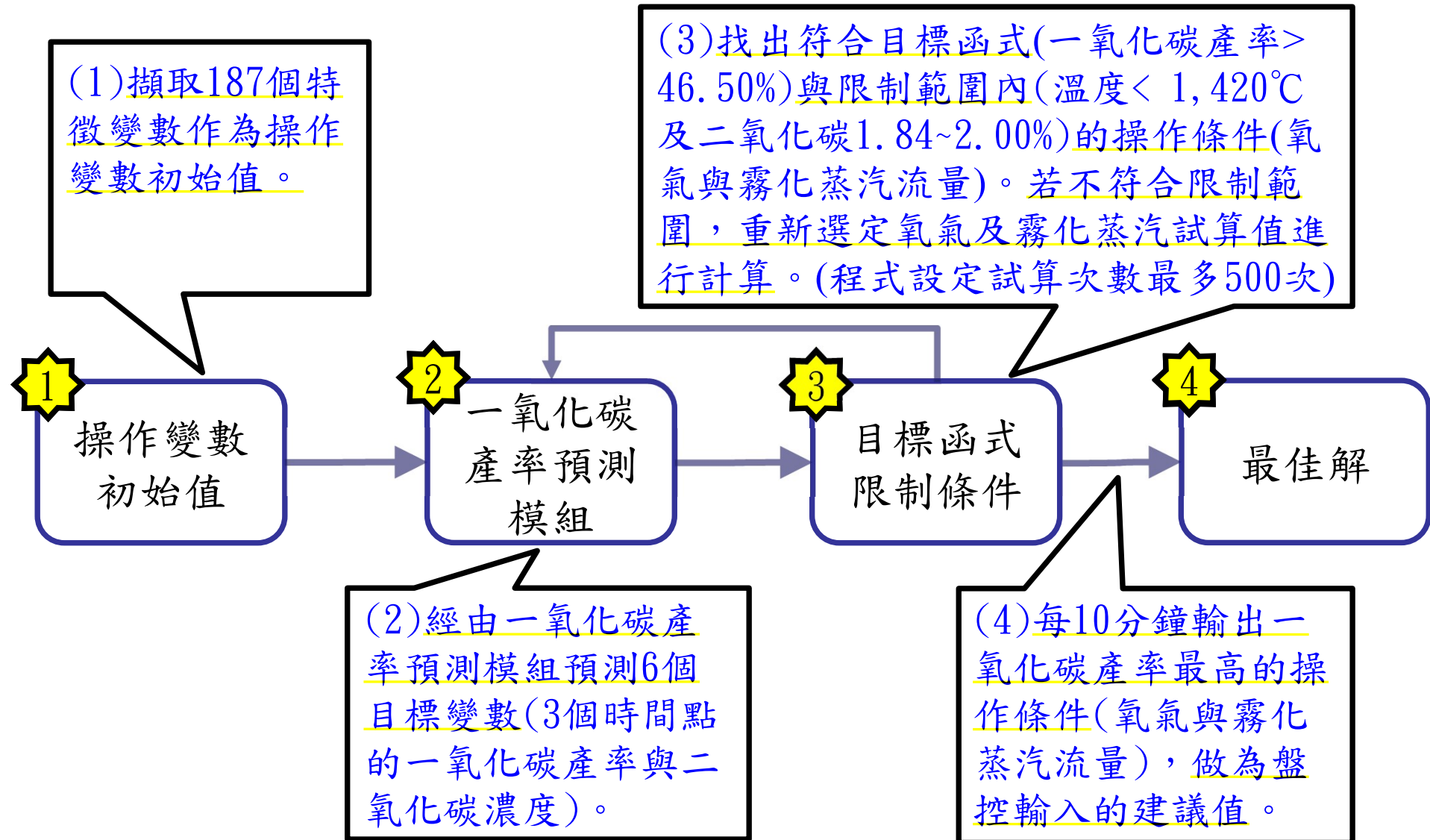


左圖為測試增加氧氣流量，右圖為測試降低霧化蒸汽流量，測試結果均與一氧化碳產率為負相關。

### 三、模組開發流程

定義問題目標 → 資料盤點清理 → 探索分析 → 模組開發 → 線上應用

#### 1. PO<sub>x</sub>反應器進料單元最佳化模組應用說明：(模組每10分鐘預測一次)



# 三、模組開發流程

定義問題目標 → 資料盤點清理 → 探索分析 → 模組開發 → 線上應用

## 2. POx進料單元最佳化模組操作介面：



醋酸廠POx反應器進料單元最佳化操作模組

製程流程圖



(1)推薦功能控制變數：模組每10分鐘提供氧氣及霧化蒸汽流量的建議值，讓盤控人員輸入控制。

(2)未來方向預測：模組每10分鐘預測未來30分鐘的CO產率及CO<sub>2</sub>濃度。

(3)模型準確度：模組誤差範圍需在1%以內，超出1%要進行修模。

目標：一氧化碳產率

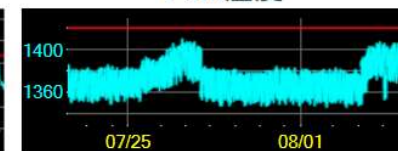


操作管制條件

二氧化碳



POx溫度



推薦功能控制變數

變數名稱	即時值	建議值
輕油流量	13548 kg/hr	
輕油密度	645.4 kg/m3	
氧氣流量	15206 kg/hr	15234 kg/hr
蒸汽流量	1517 kg/hr	1542 kg/hr

預測模型軟儀表

變數名稱	即時值	預測值	預測值	預測值
	t	t+1	t+2	t+3
一氧化碳	46.62 %	46.63 %	46.62 %	46.63 %
二氧化碳	1.94 %	1.94 %	1.95 %	1.95 %

均方根誤差 (RMSE)



負載





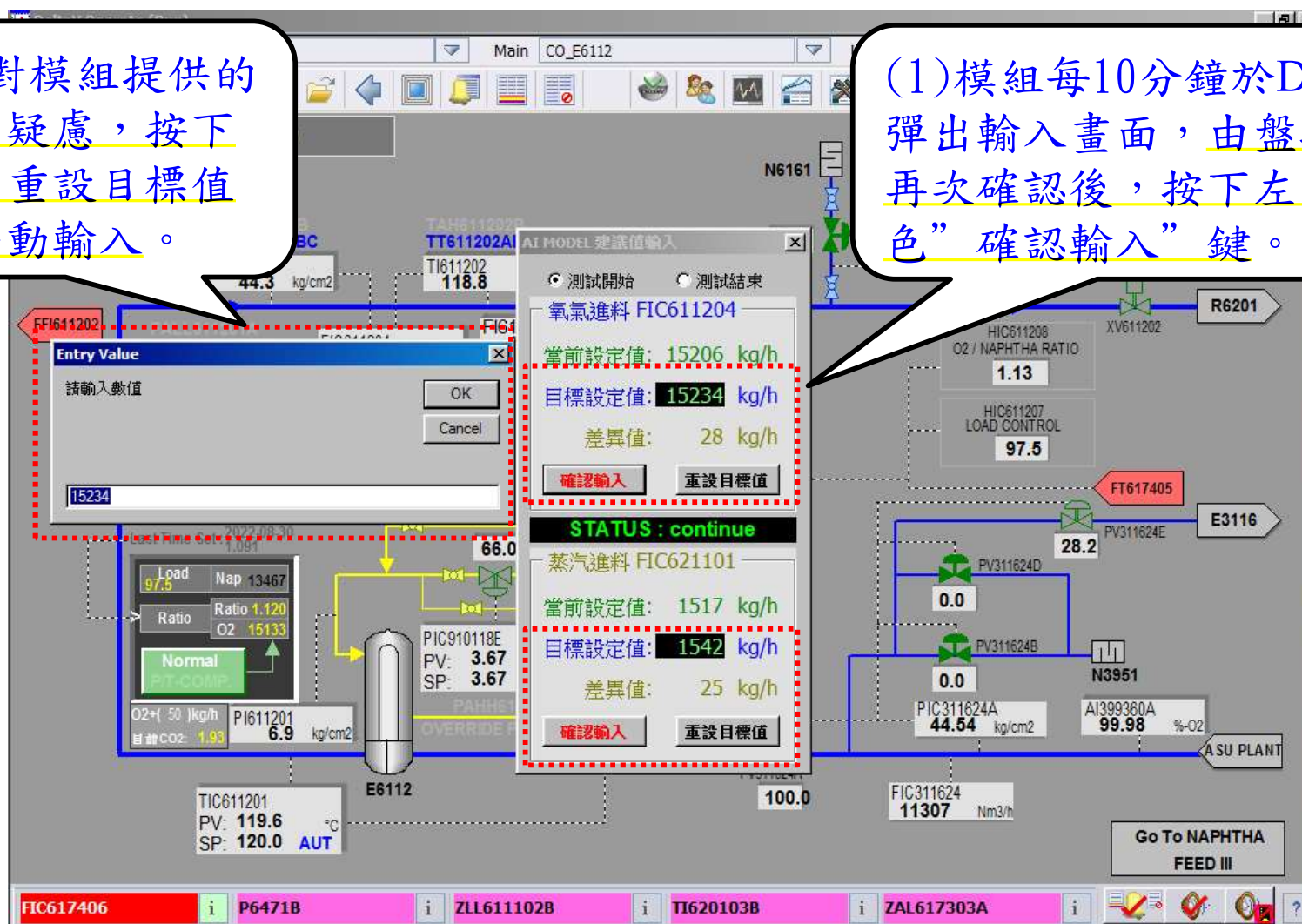
### 三、模組開發流程

定義問題目標 → 資料盤點清理 → 探索分析 → 模組開發 → 線上應用

3. 將最佳化模組提供的建議值，直接連結到DCS畫面。

(2) 盤控員對模組提供的建議值如有疑慮，按下右邊黑色”重設目標值”鍵改成手動輸入。

(1) 模組每10分鐘於DCS彈出輸入畫面，由盤控員再次確認後，按下左邊紅色”確認輸入”鍵。

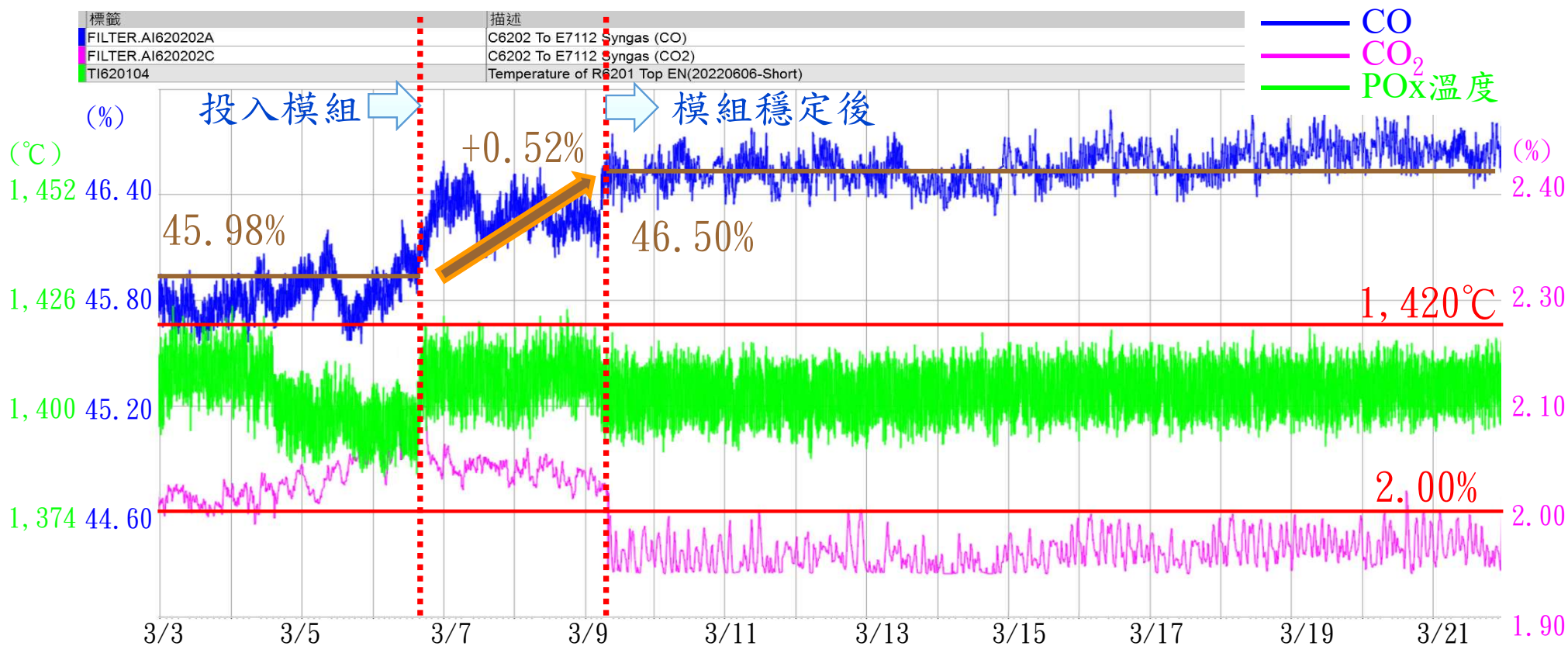


## 三、模組開發流程

定義問題目標 → 資料盤點清理 → 探索分析 → 模組開發 → 線上應用

4. 模組於2022年3月投入運轉結果：

一氧化碳產率提高0.52% (45.98%提升至46.50%)，並降低二氧化碳濃度至2.00%以下(2.03%降至1.97%)，確保溫度在1,420°C以下的安全範圍內。已初步達成提升一氧化碳產率的目標，但是波動幅度仍大，模組仍有繼續改善空間。



## 四、改善效益

### 改善效益：

最佳化模組於今年3月投入後，盤控人員根據建議值調整，產出合成氣中的一氧化碳產率提高0.52%（45.98提升至46.50%），一氧化碳產量增加864噸/年、霧化蒸汽用量減少376噸/年，年效益為19,379千元，說明如下：

#### 1. 效益增加：

$$(1) 864 \text{ 噸/年} * 21,607 \text{ 元/噸} = 18,668 \text{ 千元/年}$$

(CO增加量 \* CO售價)

$$(2) 376 \text{ 噸/年} * 1,892 \text{ 元/噸} = 711 \text{ 千元/年}$$

(蒸汽減用量 \* 蒸汽單價)

$$2. \text{ 合計年效益: } 18,668 + 711 = 19,379 \text{ 千元}$$

$$3. \text{ 投資金額: } 1,790 \text{ 千元, 回收年限: } 0.09 \text{ 年。}$$

## 五、結論與後續工作

1. 模組上線測試後產率有達到設定目標，因輕油組成變化大，一氧化碳產率波動幅度仍大，需持續收集優化數據，進行修模改善，一旦穩定後，開發安全防呆機制設計(如限制調整範圍)，將氧氣及霧化蒸汽流量的推薦值傳送至DCS，進行自動控制。
2. 推動模擬工廠建構，持續開發一氧化碳區純化單元(包括二氧化碳去除及變溫吸附單元)預測模組，醋酸區反應及純化單元預測模組，及跨單元預測模組整合開發，朝完善模擬工廠前進。



## 附錄1：英文專有名詞資料表

英文縮寫	英文全名	中文名稱	說明
PLS	Partial Least Squares	偏最小平方法	偏最小平方法結合主成分分析以及相關分析的多元線性迴歸。藉由使用主成分分析將自變數降維，提出重要訊息，並考慮自變數兩兩的相關性，來建置線性迴歸模型。
Deep ANN	Deep Artificial Neural Network	深層神經網路	神經網路模仿生物神經網路的結構，由大量的人工神經元連結進行計算。神經網路基本包含三層神經元(輸入、輸出、隱藏層)，而複數個隱藏層的神經網路通常被稱為深度神經網路。
Seq2seq (S2S)	Sequence to Sequence	序列對序列	序列對序列模型為新一代遞迴神經網路(RNN)演算法，主要由兩個RNN所組成，第一個RNN將輸入資料轉換為一個狀態的向量，第二個RNN將向量轉換成輸出，並使用前一步的輸出作為下一步的輸入。

## 附錄2：英文專有名詞資料表

英文縮寫	英文全名	中文名稱	說明
RNN	Recurrent Neural Network	循環神經網路	循環神經網路是專門設計來解決時間相關問題的一種神經網路。預測時該神經網路會比對過去的資料，得出相對應的預測值。
$R^2$	Coefficient of Determination	決定係數	可直接判斷模組預測值與實際值得相似程度。0.7以上可接受。
RMSE	Root Mean Square Error	均方根誤差	代表預測值與實際值的平均差值。越低越好。

報告完畢

恭請指導