

УДК 681.5:665.64

DOI [https://doi.org/10.15589/znp2025.4\(502\).27](https://doi.org/10.15589/znp2025.4(502).27)

MATHEMATICAL MODEL OF CONTINUOUS CATALYTIC REFORMING PROCESS

МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ ПРОЦЕСУ КАТАЛІТИЧНОГО РИФОРМІНГУ З БЕЗПЕРЕРВНОЮ РЕГЕНЕРАЦІЄЮ

Viktor O. Ishchenko

gacc789@gmail.com

ORCID: 0009-0001-0344-8690

Vadym V. Bondar

v.v.bondar@kpi.ua

ORCID: 0009-0000-3320-4550

В. О. Іщенко,

асистент

В. В. Бондар,

аспірант

*National Technical University of Ukraine “Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute”, Kyiv**Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського», Київ*

Abstract. Purpose. Development of a comprehensive mathematical model of the continuous catalytic reforming (CCR) process suitable for integration into real-time predictive control systems. The research addresses the challenge of creating a computationally efficient model that accurately captures the complex interactions between reaction kinetics, catalyst deactivation dynamics, and regeneration processes while maintaining calculation speeds compatible with model predictive control (MPC) requirements.

Method. System analysis methods were applied for hierarchical decomposition of the technological object into interconnected subsystems: reactor section, catalyst circulation loop, and regeneration unit. Mathematical modeling of chemical kinetics was performed based on the component lumping scheme, aggregating complex hydrocarbon mixtures into representative pseudo-components. Kinetic parameters were identified using nonlinear regression analysis based on 147 experimental data points collected from published literature sources covering industrial CCR units. Statistical analysis including residual analysis, cross-validation, and sensitivity analysis was employed for model verification and uncertainty quantification.

Results. A comprehensive mathematical model of the CCR reactor section was developed, incorporating a kinetic model with 8 pseudo-components (paraffins, naphthenes, aromatics of different carbon numbers, and light gases) and 10 reaction pathways including dehydrogenation, isomerization, dehydrocyclization, and hydrocracking. The catalyst deactivation model accounts for coke formation kinetics and activity distribution along the reactor stack. Mean absolute error for octane number prediction was 0.48 points ($R^2 = 0.967$), for liquid product yield prediction – 0.31 wt.% ($R^2 = 0.958$). Computational time for typical MPC prediction horizon calculation is 2.1 seconds.

Scientific novelty. For the first time, an integrated CCR reforming model combining reaction kinetics, deactivation dynamics, catalyst activity gradient across reactors, and regeneration efficiency is proposed and optimized specifically for predictive control applications with guaranteed computational performance.

Practical importance. The developed model can be implemented in industrial MPC systems at catalytic reforming units for optimization of operating conditions, product quality control, and catalyst management.

Key words: catalytic reforming; continuous catalyst regeneration; mathematical modeling; model predictive control; reaction kinetics; catalyst deactivation; pseudo-component approach; model verification; process optimization.

Анотація. Мета. Розробка комплексної математичної моделі процесу каталітичного риформінгу з безперервною регенерацією каталізатора (CCR), придатної для інтеграції в системи предиктивного управління реального часу. Дослідження спрямоване на вирішення задачі створення обчислювально ефективної моделі, яка точно відображає складні взаємозв'язки між кінетикою реакцій, динамікою дезактивації каталізатора та процесами регенерації при збереженні швидкості розрахунків, сумісної з вимогами систем модельно-предиктивного управління (MPC).

Методика. Застосовано методи системного аналізу для ієрархічної декомпозиції технологічного об'єкта на взаємопов'язані підсистеми: реакторний блок, контур циркуляції каталізатора та блок регенерації. Математичне моделювання хімічної кінетики виконано на основі схеми агрегації (лампінгу) компонентів з об'єднанням

складних вуглеводневих сумішей у представницькі псевдокомпоненти. Кінетичні параметри ідентифіковано методом нелінійної регресії за 147 експериментальними точками, зібраними з літературних джерел щодо промислових установок CCR. Для верифікації моделі та оцінки невизначеності застосовано статистичний аналіз: аналіз залишків, крос-валідацію та аналіз чутливості.

Результати. Розроблено комплексну математичну модель реакторного блоку CCR, що включає кінетичну модель з 8 псевдокомпонентів (парафіни, нафтени, ароматичні вуглеводні різної молекулярної маси та легкі гази) та 10 реакційних шляхів: дегідрування, ізомеризація, дегідроциклізація та гідрокрекінг. Модель дезактивації каталізатора враховує кінетику коксоутворення та розподіл активності вздовж реакторної секції. Середня абсолютна похибка прогнозування октанового числа склала 0,48 пункти ($R^2 = 0,967$), виходу рідкого продукту – 0,31 % мас. ($R^2 = 0,958$). Час розрахунку типового горизонту прогнозування MPC становить 2,1 секунди.

Наукова новизна. Вперше запропоновано інтегровану модель CCR-риформінгу, що поєднує кінетику реакцій, динаміку дезактивації, градієнт активності каталізатора по реакторах та ефективність регенерації, оптимізовану для задач предиктивного управління з гарантованою обчислювальною продуктивністю.

Практична значимість. Розроблена модель може бути впроваджена в промислові системи MPC на установках каталітичного риформінгу для оптимізації режимних параметрів, контролю якості продукції та управління каталізаторним господарством.

Ключові слова: каталітичний риформінг; безперервна регенерація каталізатора; математичне моделювання; модельно-предиктивне управління; кінетика реакцій; дезактивація каталізатора; метод псевдокомпонентів; верифікація моделі; оптимізація процесу.

ПОСТАНОВКА ПРОБЛЕМИ

Каталітичний риформінг є ключовим процесом нафтопереробки, що забезпечує виробництво високооктанових компонентів бензину та водню [1]. Установки з безперервною регенерацією каталізатора (CCR) набули поширення завдяки підтриманню високої активності каталізатора протягом експлуатації та можливості роботи в жорсткіших умовах [2].

Сучасні вимоги до енергоефективності обумовлюють необхідність впровадження предиктивного управління на основі моделей (MPC) [3]. Ключовою передумовою ефективного MPC є наявність адекватної математичної моделі, що забезпечує точність прогнозування при прийнятних обчислювальних витратах [4].

Існуючі детальні кінетичні моделі є занадто складними для контуру MPC через високі обчислювальні витрати [5]. Спрощені моделі часто не забезпечують необхідної точності при зміні режимів та врахуванні дезактивації каталізатора [6]. Це обумовлює актуальність розробки моделі CCR, оптимізованої за критерієм балансу точності та обчислювальної ефективності.

АНАЛІЗ ОСТАННІХ ДОСЛІДЖЕНЬ І ПУБЛІКАЦІЙ

Математичне моделювання риформінгу бере початок від робіт Smith [7], який запропонував трикомпонентну модель (парафіни, нафтени, ароматика). Подальший розвиток відбувався у напрямку збільшення деталізації: модель Krane з 20 псевдокомпонентами та модель Froment на основі елементарних стадій [8].

Роботи Iranshahi та співавторів [9] присвячені моделюванню установок CCR з урахуванням радіального потоку в реакторах. Автори досягли похибки прогнозування менше 2 %, проте обчислювальна складність моделей обмежує їх застосування в системах реального часу.

Моделювання дезактивації каталізаторів систематизовано у роботах Rodríguez та Ancheyta [10]. Модель Voorhies для паралельного коксування набула широкого застосування завдяки простоті та достатній точності [11].

Застосування MPC для процесів нафтопереробки досліджено в роботі Qin та Badgwell [12], яка засвідчила ефективність цього підходу для складних багатовимірних об'єктів. Гібридні підходи, що поєднують фізико-хімічні моделі з методами машинного навчання, представлено в роботах Schweidtmann [13] та Venkatasubramanian [14].

ВІДОКРЕМЛЕННЯ НЕВИРІШЕНИХ РАНІШЕ ЧАСТИН ЗАГАЛЬНОЇ ПРОБЛЕМИ

Аналіз літератури дозволив виявити невирішені проблеми: існуючі детальні моделі CCR не оптимізовані за критерієм обчислювальної ефективності для MPC; більшість моделей не враховує градієнт активності каталізатора по реакторах, характерний для систем CCR; недостатньо досліджено інтеграцію моделей кінетики, дезактивації та регенерації в єдину модель для задач управління.

МЕТА ДОСЛІДЖЕННЯ

Метою дослідження є розробка комплексної математичної моделі процесу каталітичного риформінгу з безперервною регенерацією каталізатора, що забезпечує точність, достатню для систем предиктивного управління, при часі розрахунку, прийнятному для управління в реальному часі.

МЕТОДИ, ОБ'ЄКТ ТА ПРЕДМЕТ ДОСЛІДЖЕННЯ

Об'єктом дослідження є процес каталітичного риформінгу на установці CCR типу UOP Platforming.

Предметом дослідження є математичні моделі кінетики реакцій та дезактивації каталізатора для задач автоматичного управління.

Застосовано такі методи дослідження: системний аналіз для декомпозиції технологічного об'єкта на підсистеми; математичне моделювання хімічної кінетики на основі схеми агрегації компонентів; чисельне інтегрування систем диференціальних рівнянь методом Рунге-Кутти 4-го порядку; нелінійна оптимізація методом Левенберга-Марквардта для ідентифікації кінетичних параметрів; статистичний аналіз для верифікації моделі.

Верифікація моделі виконувалась на основі 147 експериментальних точок, отриманих з 5 незалежних літературних джерел [9; 10; 15; 16; 17], що охоплюють широкий діапазон умов роботи промислових та пілотних установок CCR. Дані було розділено на навчальну (70 %) та тестову (30 %) вибірки з урахуванням стратифікації за джерелами. Обчислювальні експерименти виконувались у середовищі Python 3.10 з використанням бібліотек NumPy, SciPy та CasADi.

ОСНОВНИЙ МАТЕРІАЛ

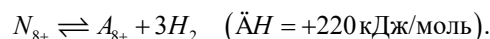
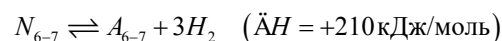
Установка CCR-риформінгу являє собою складну технологічну систему, що включає шість основних підсистем: підготовки сировини, реакторний блок, міжступеневого підігріву, сепарації та стабілізації, компримування водневмісного газу (BCG) та регенерації каталізатора. Реакторний блок складається з чотирьох послідовно з'єднаних адіабатичних реакторів радіального типу з рухомих шаром каталізатора, розташованих вертикально (stacked configuration). Каталізатор рухається зверху вниз під дією гравітації, проходячи послідовно всі реактори, після чого надходить до регенератора та повертається у верхній реактор.

Для формалізації об'єкта управління визначено множини змінних. Керовані змінні (CV) включають: октанове число риформату RON (95–102 пункти), вихід рідкого продукту C_{5+} (82–92 % мас.), вихід водню (2,5–4,0 % мас.), температуру виходу з останнього реактора (460–490 °C). Маніпульовані змінні (MV): температури входу в реактори T_1 – T_4 (480–530 °C), витрата рециркуляційного BCG, тиск у системі (0,35–0,50 МПа), швидкість циркуляції каталізатора (200–800 кг/год). Збурення (DV): витрата та склад сировини (вміст парафінів, нафтенів, ароматики), активність каталізатора.

Динамічні характеристики основних каналів управління наведено в табл. 1. Аналіз свідчить про багатомасштабність процесу: постійні часу різних каналів відрізняються на порядки – від хвилин для температурних контурів до годин для контуру циркуляції каталізатора. Протифазний характер впливу температури на RON та C_{5+} (підвищення температури збільшує RON, але знижує вихід) відображає фундаментальний компроміс процесу риформінгу.

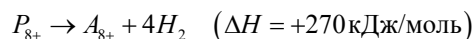
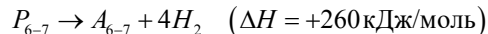
Для досягнення балансу між точністю моделі та обчислювальною ефективністю обрано схему агрегації з 8 псевдокомпонентів: легкі парафіни P_{6-7} , важкі парафіни P_{8+} , легкі нафцени N_{6-7} , важкі нафцени N_{8+} , легка ароматика A_{6-7} (бензол, толуол), важка ароматика A_{8+} (ксилоли), легкі гази G (C_1 – C_3) та водень H_2 . Система хімічних реакцій включає 10 реакцій чотирьох типів.

Реакції дегідрування нафтенів є основними цільовими реакціями, що забезпечують утворення ароматичних вуглеводнів:



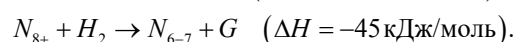
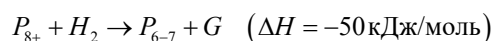
Ці реакції є оборотними, сильно ендотермічними та протікають переважно на металевих центрах каталізатора.

Реакції дегідроциклізації парафінів забезпечують додаткове утворення ароматики:



Ці реакції є значно повільнішими за дегідрування та потребують вищих температур.

Реакції гідрокрекінгу є небажаними побічними реакціями, що призводять до втрати цільових продуктів:



Гідрокрекінг є екзотермічним та інтенсифікується при підвищенні температури.

Швидкості реакцій описуються кінетичними рівняннями степеневого типу:

$$r_i = k_{i,0} \cdot \exp\left(-\frac{E_{a,i}}{RT}\right) \cdot \prod_j C_j^{n_{ij}} \cdot P_{H_2}^{m_i} \cdot a,$$

Таблиця 1. Динамічні характеристики основних каналів управління

Канал управління	Коефіцієнт підсилення K	Затримка τ , хв	Постійна часу T , хв
$T_{in} \rightarrow T_{out}$	0,85–0,95	2–5	8–17
$T_{in} \rightarrow RON$	0,3–0,5 пункт/°C	30–60	25–45
$T_{in} \rightarrow C_{5+}$	–0,1...–0,2 %/°C	20–40	15–35
$F_{kat} \rightarrow$ активність	—	60–180	120–240

де $k_{i,0}$ – передекспоненціальний множник, с^{-1} ; $E_{a,i}$ – енергія активації, кДж/моль ; R – універсальна газова стала, $\text{Дж/(моль} \cdot \text{К)}$; T – температура, К ; C_j – концентрація j -го компонента, моль/м^3 ; n_{ij} – порядок реакції за j -м компонентом; P_{H_2} – парціальний тиск водню, МПа ; m_i – порядок реакції за воднем (від’ємний для реакцій дегідрування); a – відносна активність каталізатора.

Рівняння матеріального балансу для адіабатичного реактора ідеального витіснення:

$$\frac{dC_i}{d\tau} = \sum_{k=1}^{N_r} v_{ik} \cdot r_k,$$

де τ – умовний час контакту, с ; v_{ik} – стехіометричний коефіцієнт i -го компонента в k -й реакції; N_r – кількість реакцій.

Рівняння теплового балансу:

$$\frac{dT}{d\tau} = \frac{-\sum_{k=1}^{N_r} \Delta H_k \cdot r_k}{\rho \cdot c_p},$$

де ΔH_k – тепловий ефект k -ї реакції, кДж/моль ; ρ – густина реакційної суміші, кг/м^3 ; c_p – питома теплоємність, $\text{кДж/(кг} \cdot \text{К)}$.

Умовний час контакту визначається як $\tau = 1/\text{LHSV}$, де LHSV – об’ємна швидкість подачі сировини, год^{-1} . Кінетичні параметри, ідентифіковані методом Левенберга-Марквардта за навчальною вибіркою, наведено в табл. 2.

Таблиця 2. Кінетичні параметри основних реакцій риформінгу

Реакція	$k_0, \text{с}^{-1}$	$E_0, \text{кДж/моль}$	Порядок за H_2
Дегідрування N_{6-7}	$1,2 \times 10^{12}$	150	–1,5
Дегідрування $N_{8+,8+}$	$1,5 \times 10^{12}$	155	–1,5
Дегідроциклізація P_{6-7}	$2,0 \times 10^{10}$	175	–0,5
Дегідроциклізація P_{8+}	$2,5 \times 10^{10}$	170	–0,5
Гідрокрекінг P_{8+}	$5,0 \times 10^{11}$	185	+0,5

Дезактивація каталізаторів риформінгу відбувається переважно внаслідок коксування – відкладення вуглецевих сполук на поверхні каталізатора. Для кількісного опису введено відносну активність a ($0 < a \leq 1$), динаміка якої описується моделлю паралельного коксування:

$$\frac{da}{dt} = -k_d^{\text{eff}} \cdot a^2 \cdot C_A \cdot P_{\text{H}_2}^{-1},$$

де k_d^{eff} – ефективна константа дезактивації; C_A – концентрація ароматики.

Для задач управління в реальному часі використано спрощену експоненційну модель:

$$a(t) = a_0 \cdot \exp(-k_d^{\text{eff}} \cdot t),$$

де ефективна константа дезактивації залежить від умов процесу:

$$k_d^{\text{eff}} = k_{d,0} \cdot \exp\left(-\frac{E_d}{RT_{\text{avg}}}\right) \cdot \left(\frac{P_{\text{H}_2}}{P_{\text{ref}}}\right)^{-0.7} \cdot \left(\frac{\text{LHSV}}{\text{LHSV}_{\text{ref}}}\right)^{0.5},$$

де T_{av}^g – середня температура в реакторах; P_{re}^f , $\text{LHSV}_{\text{re}}^f$ – референтні значення тиску та об’ємної швидкості.

Характерною особливістю систем CCR є градієнт активності каталізатора по висоті реакторної системи, що виникає внаслідок безперервного руху каталізатора та його поступової дезактивації. Профіль активності в стаціонарному режимі визначається балансом між швидкістю дезактивації та швидкістю оновлення каталізатора:

$$a(z) = a_{\text{top}} \cdot \exp\left(-\frac{k_d^{\text{eff}}}{v_{\text{cat}}} \cdot z\right),$$

де z – координата по висоті реакторної системи; v_{cat} – лінійна швидкість руху каталізатора; a_{top} – активність після регенерації.

На рис. 1 представлено профілі активності каталізатора для різних швидкостей циркуляції. Аналіз показує, що при низькій швидкості циркуляції (300 кг/год) спостерігається значний градієнт активності: від 0,98 у першому реакторі до 0,75–0,80 у четвертому. Підвищення швидкості циркуляції до 700 кг/год забезпечує більш рівномірний профіль з активністю 0,95–0,97 по всій системі. Горизонтальною штриховою лінією позначено мінімально допустиму активність ($a_{\text{min}} = 0,70$), при досягненні якої необхідно збільшувати швидкість циркуляції або коригувати температурний режим.

Процес регенерації в системі CCR включає чотири послідовні стадії: випалювання коксу при температурі 470–530 $^{\circ}\text{C}$ в середовищі розбавленого кисню; окислювання при 500–530 $^{\circ}\text{C}$ для відновлення кислотної функції; сушіння при 480–520 $^{\circ}\text{C}$; відновлення воднем при 450–500 $^{\circ}\text{C}$ для переведення платини в металевий стан. Відновлення активності описується рівнянням:

$$a_{\text{reg}} = a_{\text{max}} \cdot (1 - \exp(-k_{\text{reg}} \cdot \tau_{\text{reg}})) \cdot \eta_{\text{regen}},$$

де a_{max} – максимально досяжна активність; τ_{re}^g – час регенерації; η_{reen}^g – ефективність регенерації, що поступово знижується з кількістю циклів.

ОБГОВОРЕННЯ ОТРИМАНИХ РЕЗУЛЬТАТІВ

Верифікація моделі виконувалась за трирівневою методикою: перевірка фізичної узгодженості (дотримання законів збереження), верифікація стаціонарних режимів та перевірка динамічних характеристик. Результати статистичної оцінки точності на тестовій вибірці (44 точки) наведено в табл. 3.

На рис. 2 представлено діаграму порівняння розрахункових та експериментальних значень

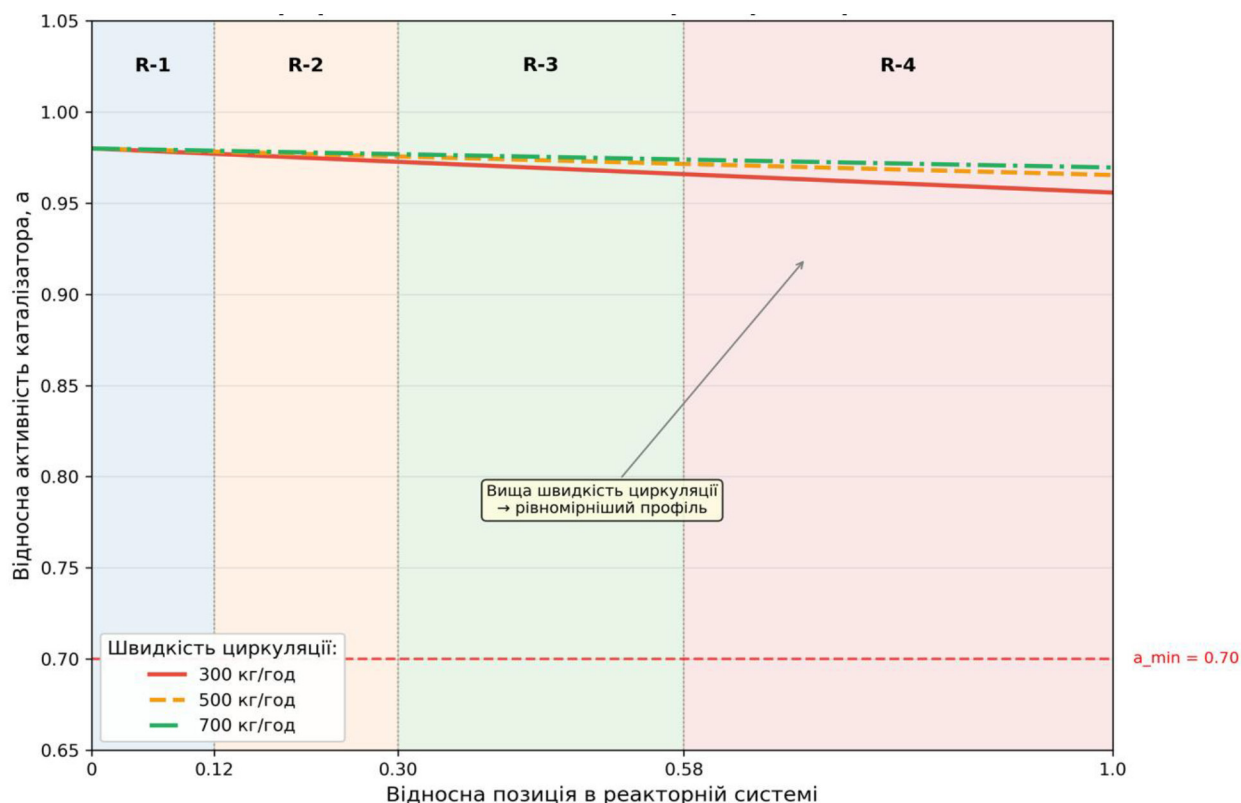


Рис. 1. Профіль активності каталізатора по реакторній системі CCR

октанового числа. Точки рівномірно розподілені вздовж діагоналі ідеальної відповідності ($y = x$) без видимого систематичного зміщення. Переважна більшість точок (93 %) знаходиться в межах ± 1 RON від діагоналі, що підтверджує високу точність моделі. Коефіцієнт детермінації $R^2 = 0,967$ свідчить про те, що модель пояснює понад 96 % варіації октанового числа.

Для виявлення систематичних похибок виконано аналіз залишків, результати якого представлено на рис. 3. На панелі (а) показано залежність залишків від прогнозованих значень RON: точки розподілені випадково в межах $\pm 2\sigma$ без видимого патерну, що підтверджує гомоскедастичність моделі (однорідність дисперсії залишків). Середнє значення залишків близьке до нуля ($bias = -0,03$ RON), що свідчить про відсутність систематичного зміщення. На панелі (б) представлено гістограму розподілу залишків з накладеною кривою нормального розподілу. Тест Шапіро-Вілка ($p = 0,42$) не відхиляє гіпотезу нормальності, що підтверджує статистичну коректність моделі та валідність довірчих інтервалів.

Таблиця 3. Статистичні показники точності моделі

Вихідна змінна	MAE	RMSE	R^2
RON, пункти	0,48	0,62	0,967
C_{5+3} , % мас.	0,31	0,42	0,958
H_2 , % мас.	0,08	0,11	0,943
T виходу R-4, °C	2,1	2,8	0,982

Для визначення найбільш впливових параметрів моделі виконано глобальний аналіз чутливості методом Соболя, результати якого представлено на рис. 4. Індикси чутливості першого порядку (S_i) відображають прямий вплив параметра, тоді як повні індикси (S_i) враховують також ефекти взаємодії з іншими параметрами. Найбільший вплив на октанове число мають енергії активації реакцій дегідрування нафтенів ($S_i = 0,32$) та дегідрокіклізації парафінів ($S_i = 0,24$), які разом визначають понад 55 % варіації виходів моделі. Це узгоджується з фізикою процесу: саме ці реакції є основними джерелами утворення ароматичних вуглеводнів з високим октановим числом. Параметри гідрокрекінгу ($S_i = 0,18$) мають помірний вплив, переважно на вихід рідкого продукту. Параметри дезактивації ($S_i = 0,08$) є менш впливовими на короткострокових горизонтах, проте їх значущість зростає при тривалому моделюванні.

Оцінка обчислювальної ефективності показала: розрахунок одного стаціонарного режиму займає 0,15 с; динамічне моделювання 1 години процесу – 0,8 с; розрахунок горизонту прогнозування MPC (60 хв, 12 кроків) – 2,1 с. Це підтверджує придатність моделі для систем управління в реальному часі з типовим періодом оновлення 1–5 хвилин.

Порівняння з результатами інших досліджень підтверджує конкурентоспроможність запропонованого підходу. Точність прогнозування RON (MAE = 0,48) є співставною з детальними моделями Iranshahi [9]

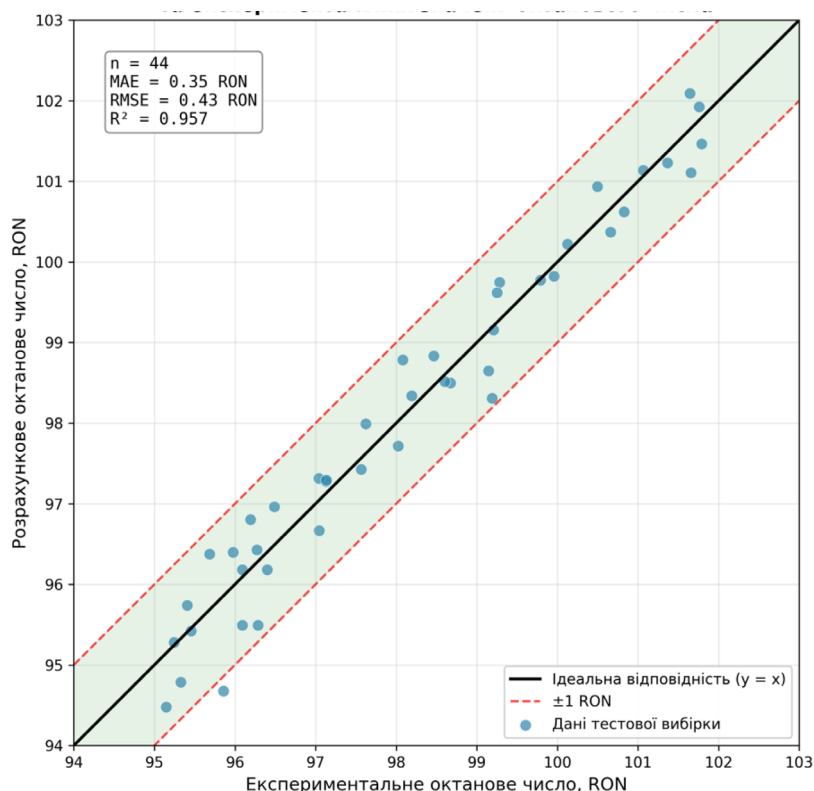


Рис. 2. Порівняння розрахункових та експериментальних значень октанового числа

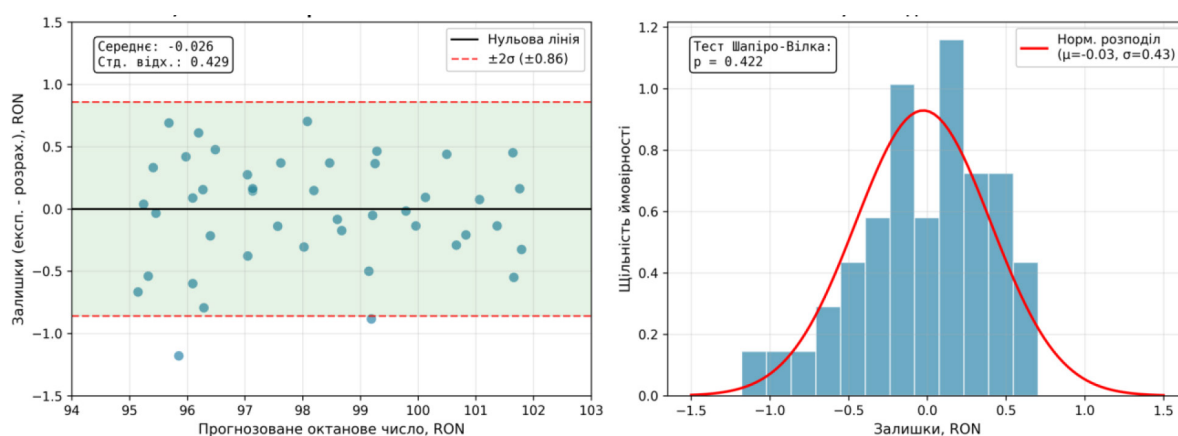


Рис. 3. Діаграма залишків для октанового числа: а) залишки vs прогнозовані значення; б) розподіл залишків

(похибка 0,3–0,5 пункти), при значно вищій обчислювальній ефективності. Схема агрегації з 8 псевдокомпонентів виявилась оптимальною: порівняно з трикомпонентною моделлю Сміта точність покращилась на 35–40 %, тоді як збільшення кількості псевдокомпонентів до 15 і більше дає лише маргінальне покращення (5–10 %) при суттєвому зростанні обчислювальних витрат.

Урахування градієнта активності каталізатора по реакторній системі є важливою особливістю запропонованої моделі, що відрізняє її від більшості існуючих моделей для систем управління. Ігнорування цього ефекту призводить до систематичної похибки прогнозування виходу продуктів до 1,5–2,0 % мас.

Обмеженням дослідження є верифікація переважно на літературних даних без прямого доступу до промислової установки. Проте використання даних з 5 незалежних джерел та порівняння з результатами комерційного симулятора Aspen HYSYS (відхилення RON менше 0,3 пункти) підвищує достовірність отриманих результатів.

ВИСНОВКИ

Розроблено комплексну математичну модель процесу каталітичного риформінгу з безперервною регенерацією каталізатора, оптимізовану для систем предиктивного управління. Модель включає кінетичний блок на основі схеми агрегації з 8 псевдокомпонентів

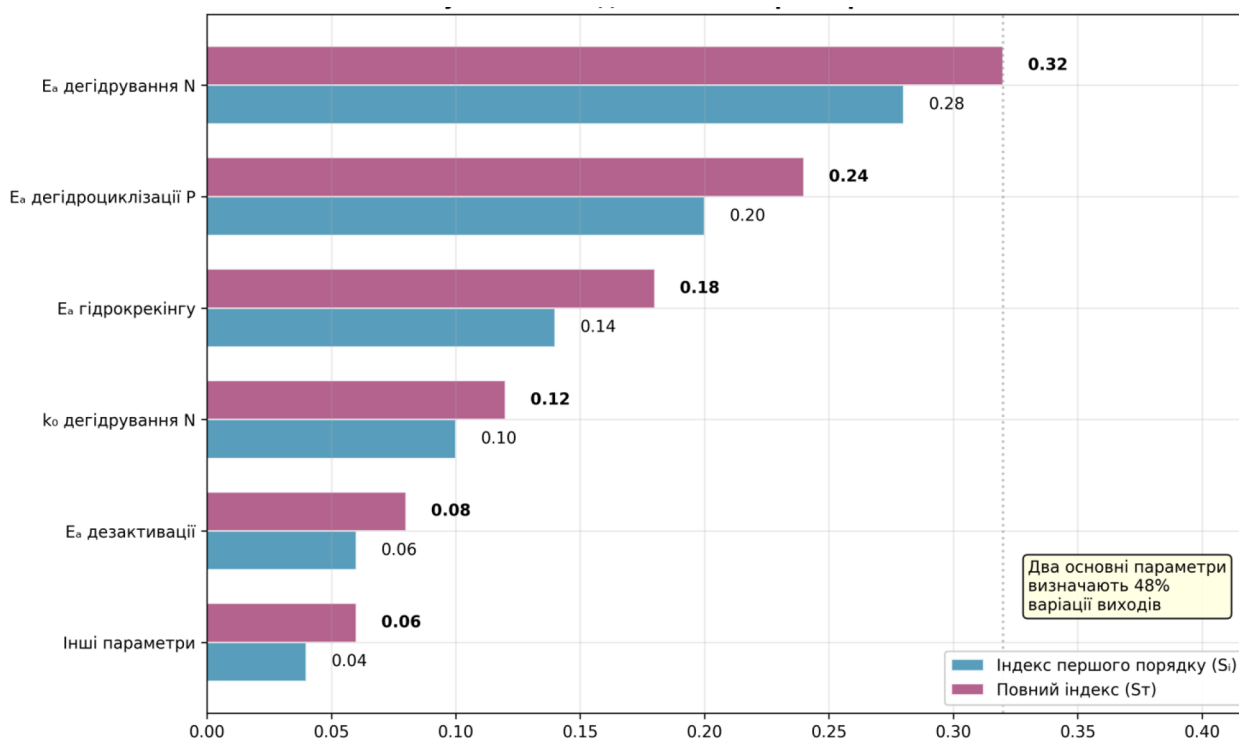


Рис. 4. Індеси чутливості Соболя для параметрів моделі

та 10 реакцій, модель дезактивації за механізмом паралельного коксування та модель градієнта активності каталізатора по реакторній системі.

Верифікація на 147 експериментальних точках з 5 незалежних джерел підтвердила високу точність моделі: середня абсолютна похибка прогнозування октанового числа склала 0,48 пункти при коефіцієнті детермінації $R^2 = 0,967$; для виходу рідкого продукту – 0,31 % мас. ($R^2 = 0,958$). Аналіз залишків засвідчив відсутність систематичних похибок та нормальність розподілу.

Час розрахунку горизонту прогнозування MPC (60 хв) становить 2,1 с, що підтверджує придатність

моделі для систем управління в реальному часі з періодом оновлення 1–5 хвилин.

Аналіз чутливості методом Соболя визначив пріоритетні параметри для адаптації моделі: енергії активації реакцій дегідрування нафтенів та дегідроциклізації парафінів, що визначають понад 55 % варіації виходів.

Подальші дослідження спрямовані на розробку гібридних моделей з компонентами машинного навчання для підвищення адаптивності та інтеграцію моделі в систему багатокритеріального предиктивного управління з економічним критерієм оптимізації.

REFERENCES

- [1] Rahimpour, M. R., Jafari, M., & Iranshahi, D. (2013). Progress in catalytic naphtha reforming process: A review. *Applied Energy*, 109, 79–93. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2013.03.080>
- [2] Gupta, A., & Gupta, S. K. (2022). Catalyst regeneration techniques in naphtha reforming: Short review. *Chemical and Process Engineering*, 41(2), 101–108. <https://doi.org/10.24425/cpe.2022.140813>
- [3] Ellis, M., Durand, H., & Christofides, P. D. (2014). A tutorial review of economic model predictive control methods. *Journal of Process Control*, 24(8), 1156–1178. <https://doi.org/10.1016/j.jprocont.2014.03.010>
- [4] Ellis, M., Durand, H., & Christofides, P. D. (2014). A tutorial review of economic model predictive control methods. *Journal of Process Control*, 24, 1156–1178. <https://doi.org/10.1016/j.jprocont.2014.03.010>
- [5] Grossmann, I., & Harjunkski, I. (2019). Process systems engineering: Academic and industrial perspectives. *Computers & Chemical Engineering*, 126, 403–418. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2019.04.028>
- [6] Ancheyta-Juárez, J., & Villafuerte-Macías, E. (2000). Kinetic modeling of naphtha catalytic reforming reactions. *Energy & Fuels*, 14(5), 1032–1037. <https://doi.org/10.1021/ef0000274>
- [7] Guan, B., Zhuang, Z., Zhu, L., Xu, L., Chang, S., Ma, J., Wang, R., Yang, D., Zhu, T., Qu, H., Tan, B., & Huang, Z. (2025). Research on the high-efficiency catalytic removal reaction model of N_2O in ammonia engine exhaust gas. *Research Square*. <https://doi.org/10.21203/rs.3.rs-8402978/v1>
- [8] Yakubu, O., Adeloye, O., & Igbagara, P. (2022). Simulation of packed bed reactors for naphtha reforming unit. *International Journal of Engineering Research Updates*, 3(2), 53–63. <https://doi.org/10.53430/ijeru.2022.3.2.0060>

- [9] Rashed, F., & Elfarah, T. (2024). Catalytic reforming of heavy naphtha: Modeling and simulate. *International Science and Technology Journal*, 35, 1–15. <https://doi.org/10.62341/fstt1144>
- [10] Amadou, D., Awali, A., Zinab, S., & Salam, M. (2025). Characterisation of the FCC catalyst for fluid catalytic cracking of atmospheric residue: Application to the SORAZ FCC catalyst. *International Research Journal of Pure and Applied Chemistry*, 26(4), 145–152. <https://doi.org/10.9734/irjpac/2025/v26i4936>
- [11] Anarase, B. (2003). A survey of industrial model predictive control technology. *Control Engineering Practice*, 11(7), 733–764.
- [12] Schweidtmann, A., & Mitsos, A. (2019). Global deterministic optimization with artificial neural networks embedded. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 180(3), 925–948. <https://doi.org/10.1007/s10957-018-1396-0>
- [13] Venkatasubramanian, V. (2019). The promise of artificial intelligence in chemical engineering: Is it here, finally? *AIChE Journal*, 65(2), 466–478. <https://doi.org/10.1002/aic.16489>
- [14] Rashed, F., & Elfarah, T. (2024). Catalytic reforming of heavy naphtha: Modeling and simulate. *International Science and Technology Journal*, 35, 1–15. <https://doi.org/10.62341/fstt1144>
- [15] Li, J., Tan, Y., & Liao, L. (2005). Modeling and optimization of a semi-regenerative catalytic naphtha reformer. *Proceedings of the 2005 IEEE International Conference on Control Applications*, 867–872. <https://doi.org/10.1109/CCA.2005.1507238>
- [16] Mohammadiarani, H., Shirvani, M., Safdarian, K., & Dorostkar, E. (2009). Lumping procedure for a kinetic model of catalytic naphtha reforming. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, 26(4), 723–732. <https://doi.org/10.1590/S0104-66322009000400011>
- [17] Kubakh, S. O., & Tsapar, V. S. (2024). Analiz isnuichykh system keruvannia tekhnolohichnym rezhymom protsesu naftererobky [Analysis of existing control systems for technological regime of oil refining process]. *Visnyk NTUU "KPI imeni Ithoria Sikorskoho". Seriya: Khimichna inzheneriia, ekolohiia ta resursozberezhennia – Bulletin of NTUU "Igor Sikorsky KPI". Series: Chemical Engineering, Ecology and Resource Conservation*, (3), 57–73. <https://doi.org/10.20535/2617-9741.3.2024.312421> [in Ukrainian].
- [18] Buhaieva, L. M., Abramova, A. O., & Kramarenko, D. P. (2024). Kompiuterne modeliuvannia protsesu vyrobnytstva biodyzelia u mikroreaktori [Computer modeling of biodiesel production process in a microreactor]. *Vcheni zapysky TNU imeni V. I. Vernadskoho. Seriya: Tekhnichni nauky – Scientific Notes of TNU named after V. I. Vernadsky. Series: Technical Sciences*, 35(74), 58–64. <https://doi.org/10.32782/2663-5941/2024.2/08> [in Ukrainian].

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- [1] Rahimpour, M. R., Jafari, M., & Iranshahi, D. (2013). Progress in catalytic naphtha reforming process: A review. *Applied Energy*, 109, 79–93. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2013.03.080>
- [2] Gupta, A., & Gupta, S. K. (2022). Catalyst regeneration techniques in naphtha reforming: Short review. *Chemical and Process Engineering*, 41(2), 101–108. <https://doi.org/10.24425/cpe.2022.140813>
- [3] Ellis, M., Durand, H., & Christofides, P. D. (2014). A tutorial review of economic model predictive control methods. *Journal of Process Control*, 24(8), 1156–1178. <https://doi.org/10.1016/j.jprocont.2014.03.010>
- [4] Ellis, M., Durand, H., & Christofides, P. D. (2014). A tutorial review of economic model predictive control methods. *Journal of Process Control*, 24(8), 1156–1178. <https://doi.org/10.1016/j.jprocont.2014.03.010>
- [5] Grossmann, I., & Harjunkski, I. (2019). Process systems engineering: Academic and industrial perspectives. *Computers & Chemical Engineering*, 126, 403–418. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2019.04.028>
- [6] Ancheyta-Juárez, J., & Villafuerte-Macías, E. (2000). Kinetic modeling of naphtha catalytic reforming reactions. *Energy & Fuels*, 14(5), 1032–1037. <https://doi.org/10.1021/ef0000274>
- [7] Guan, B., Zhuang, Z., Zhu, L., Xu, L., Chang, S., Ma, J., Wang, R., Yang, D., Zhu, T., Qu, H., Tan, B., & Huang, Z. (2025). Research on the high-efficiency catalytic removal reaction model of N₂O in ammonia engine exhaust gas. *Research Square*. <https://doi.org/10.21203/rs.3.rs-8402978/v1>
- [8] Yakubu, O., Adeyoye, O., & Igbagara, P. (2022). Simulation of packed bed reactors for naphtha reforming unit. *International Journal of Engineering Research Updates*, 3(2), 53–63. <https://doi.org/10.53430/ijeru.2022.3.2.0060>
- [9] Rashed, F., & Elfarah, T. (2024). Catalytic reforming of heavy naphtha: Modeling and simulate. *International Science and Technology Journal*, 35, 1–15. <https://doi.org/10.62341/fstt1144>
- [10] Amadou, D., Awali, A., Zinab, S., & Salam, M. (2025). Characterisation of the FCC catalyst for fluid catalytic cracking of atmospheric residue: Application to the SORAZ FCC catalyst. *International Research Journal of Pure and Applied Chemistry*, 26(4), 145–152. <https://doi.org/10.9734/irjpac/2025/v26i4936>
- [11] Anarase, B. (2003). A survey of industrial model predictive control technology. *Control Engineering Practice*, 11(7), 733–764.
- [12] Schweidtmann, A., & Mitsos, A. (2019). Global deterministic optimization with artificial neural networks embedded. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 180(3), 925–948. <https://doi.org/10.1007/s10957-018-1396-0>
- [13] Venkatasubramanian, V. (2019). The promise of artificial intelligence in chemical engineering: Is it here, finally? *AIChE Journal*, 65(2), 466–478. <https://doi.org/10.1002/aic.16489>
- [14] Rashed, F., & Elfarah, T. (2024). Catalytic reforming of heavy naphtha: Modeling and simulate. *International Science and Technology Journal*, 35, 1–15. <https://doi.org/10.62341/fstt1144>

- [15] Li, J., Tan, Y., & Liao, L. (2005). Modeling and optimization of a semi-regenerative catalytic naphtha reformer. *Proceedings of the 2005 IEEE International Conference on Control Applications*, 867–872. <https://doi.org/10.1109/CCA.2005.1507238>
- [16] Mohammadiarani, H., Shirvani, M., Safdarian, K., & Dorostkar, E. (2009). Lumping procedure for a kinetic model of catalytic naphtha reforming. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, 26(4), 723–732. <https://doi.org/10.1590/S0104-66322009000400011>
- [17] Кубах, С. О., & Цапар, В. С. (2024). Аналіз існуючих систем керування технологічним режимом процесу нафтопереробки. *Вісник НТУУ «КПІ імені Ігоря Сікорського». Серія: Хімічна інженерія, екологія та ресурсозбереження*, (3), 57–73. <https://doi.org/10.20535/2617-9741.3.2024.312421>
- [18] Бугаєва, Л. М., Абрамова, А. О., & Крамаренко, Д. П. (2024). Комп'ютерне моделювання процесу виробництва біодизеля у мікрореакторі. *Вчені записки ТНУ імені В. І. Вернадського. Серія: Технічні науки*, 35(74), 58–64. <https://doi.org/10.32782/2663-5941/2024.2/08>

© Іщенко В. О., Бондар В. В.

Дата надходження статті до редакції: 14.11.2025

Дата затвердження статті до друку: 03.12.2025

Опубліковано: 30.12.2025

Стаття поширюється на умовах ліцензії CC BY 4.0