

АВТОМАТИЗАЦІЯ ТЕХНОЛОГІЧНИХ ПРОЦЕСІВ

УДК 681.5:665.64

ЦАПАР В. С. *, ТКАЧУК С. М., БОНДАР В. В.
Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»

НЕЛІНІЙНЕ ПРЕДИКТИВНЕ УПРАВЛІННЯ ПРОЦЕСОМ КАТАЛІТИЧНОГО РИФОРМІНГУ НА ОСНОВІ ГІБРИДНОЇ МОДЕЛІ

Досліджено проблему підвищення ефективності управління процесом каталітичного риформінгу з безперервною регенерацією каталізатора (CCR). Актуальність роботи зумовлена тим, що традиційні системи управління на основі ПІД-регуляторів не забезпечують оптимальної роботи установки через значну інерційність процесу, транспортні затримки, нелінійність характеристик та змінність параметрів внаслідок дезактивації каталізатора. Метою роботи є розробка системи нелінійного предиктивного управління (NMPC) на основі гібридної моделі, що поєднує фізичну кінетичну модель процесу з нейромережевим компонентом для корекції похибок прогнозування.

Розроблено комплексну математичну модель процесу CCR-риформінгу, що включає кінетичну модель з 8 псевдокомпонентами та 12 реакціями, модель дезактивації каталізатора та модель розрахунку октанового числа за адитивною формулою. Запропоновано архітектуру гібридної моделі з послідовною інтеграцією компонентів, де нейромережа типу багатошарового перцептрона (MLP) з двома прихованими шарами (64 та 32 нейрони) компенсує систематичні похибки фізичної моделі. Гібридна модель забезпечує підвищення точності прогнозування октанового числа на 25% порівняно з базовою фізичною моделлю.

Синтезовано систему NMPC з квадратичною функцією цілі, що мінімізує відхилення керованих змінних від завдання та штрафувє різкі зміни керуючих впливів. Задача оптимізації включає обмеження на діапазон температур, тиск та швидкість зміни керуючих впливів. Для програмної реалізації використано мову Python з бібліотеками CasADi для символьних обчислень та автоматичного диференціювання, IPOPT для розв'язання задачі нелінійного програмування методом внутрішньої точки. Реалізовано механізм адаптації моделі для компенсації дрейфу внаслідок дезактивації каталізатора.

Результати імітаційного моделювання для установки потужністю 1,5 млн т/рік підтверджують переваги розробленої системи NMPC: зниження середньої абсолютної похибки октанового числа на 57% порівняно з PID-управлінням та на 36% порівняно з лінійним MPC; скорочення часу перехідних процесів у 2,8 рази; зниження максимального відхилення при збуреннях складу сировини на 63%. Практичне значення роботи полягає у можливості застосування розроблених алгоритмів для підвищення ефективності управління промисловими установками CCR-риформінгу.

Ключові слова: каталітичний риформінг, предиктивне управління, нелінійна оптимізація, гібридна модель, нейронна мережа, машинне навчання, soft-сенсор, CasADi

DOI: 10.20535/2617-9741.1.2026.354345

*Corresponding author: cwst@ukr.net

Received 05 February 2026; Accepted 03 March 2026

Постановка проблеми. Каталітичний риформінг є одним із ключових процесів сучасної нафтопереробної промисловості. Основним призначенням процесу є перетворення низькооктанових нафтових фракцій (нафти) у високооктанові компоненти автомобільного бензину та виробництво водню, необхідного для процесів гідроочищення нафтопродуктів. За різними оцінками, на установках риформінгу переробляється від 15% до 25% сирової нафти, що надходить на нафтопереробні заводи [1].

Серед різних типів установок риформінгу найбільш прогресивними є установки з безперервною регенерацією каталізатора (Continuous Catalytic Reforming, CCR). На відміну від напівперіодичних установок, де регенерація каталізатора виконується під час планових зупинок (кожні 6–12 місяців), установки CCR забезпечують безперервну циркуляцію каталізатора через систему регенерації. Це дозволяє підтримувати

високу активність каталізатора протягом усього періоду експлуатації та працювати в більш жорстких умовах (нижчий тиск, вища температура), що забезпечує вищий вихід високооктанових продуктів [2].

Ефективність роботи установок CCR суттєво залежить від якості системи автоматичного управління. Основними керованими змінними є октанове число риформату (RON) та вихід рідкого продукту (C₅₊). Керуючими впливами є температури на вході в реактори та тиск у системі. Характерними особливостями процесу як об'єкта управління є: значна інерційність (постійні часу 25–45 хв); транспортні затримки (30–60 хв); суттєва нелінійність характеристик; змінність параметрів внаслідок дезактивації каталізатора.

Традиційні системи управління на основі ПІД-регуляторів не забезпечують оптимальної роботи установки за наявності зазначених особливостей. Типова варіабельність RON при ПІД-управлінні становить $\pm 0,5$ – $1,0$ пункту, що змушує оператора встановлювати завищене значення октанового числа для гарантованого виконання специфікації [3].

Загальною науковою проблемою є підвищення ефективності управління процесом CCR-риформінгу в умовах нелінійності, інерційності та нестационарності об'єкта шляхом застосування сучасних методів предиктивного управління на основі нелінійних моделей.

Аналіз попередніх досліджень. Проблеми управління процесами каталітичного риформінгу присвячено значну кількість досліджень. Серед сучасних підходів найбільш перспективним є предиктивне управління на основі моделей (Model Predictive Control, MPC). У роботі [1] представлено комплексний огляд промислових застосувань технології MPC, що підтверджує її ефективність для управління нафтохімічними процесами.

Фундаментальні аспекти теорії предиктивного управління викладено в монографії [2], де детально розглянуто математичні основи формулювання задачі оптимізації та питання стійкості. Кінетичне моделювання процесу риформінгу досліджено в роботах [3, 4]. Модель дезактивації каталізатора розглянуто в [5].

Останніми роками значного розвитку набули гібридні моделі, що поєднують фізичні закономірності з методами машинного навчання. У роботі [6] показано, що комбінування першопринципних моделей з емпіричними компонентами дозволяє досягти вищої точності при збереженні інтерпретованості. Концепція physics-informed neural networks отримала широке визнання після публікації [8].

Невирішеною частиною наукової проблеми залишається розробка адаптивної системи NMPC для процесу CCR-риформінгу на основі гібридної моделі з послідовною інтеграцією фізичного та ML-компонентів.

Мета дослідження — розробка системи нелінійного предиктивного управління процесом каталітичного риформінгу на основі гібридної моделі та її програмна реалізація засобами Python.

Наукова новизна дослідження полягає у розробці архітектури гібридної моделі процесу CCR-риформінгу з послідовною інтеграцією фізичної кінетичної моделі з 8 псевдокомпонентами та нейромережевого компонента типу MLP, що забезпечує підвищення точності прогнозування октанового числа на 25% при збереженні фізичної інтерпретованості.

Виклад основного матеріалу

Математична модель процесу. Для побудови системи предиктивного управління необхідна математична модель процесу, що адекватно описує його динаміку та забезпечує можливість прогнозування поведінки об'єкта на заданому горизонті. При виборі структури моделі необхідно забезпечити компроміс між точністю опису та обчислювальною складністю, оскільки модель використовується для розв'язання задачі оптимізації в реальному часі.

Технологічна схема процесу. Установка каталітичного риформінгу з безперервною регенерацією каталізатора (CCR) складається з чотирьох послідовно з'єднаних радіальних реакторів, розташованих вертикально один над одним. Сировина (гідроочищена нафта) змішується з водневмісним газом і послідовно проходить через реактори зверху вниз. Між реакторами встановлено проміжні підігрівачі для компенсації ендотермічного ефекту реакцій. Каталізатор (Pt/Re на носії Al₂O₃) рухається через реактори зверху вниз під дією сили тяжіння та безперервно виводиться з нижнього реактора на регенерацію.

Кінетична модель. Для опису кінетики процесу використано модель з агрегацією компонентів сировини у 8 псевдокомпонентів [3]: n-парафіни (n-P), ізо-парафіни (i-P), нафтені з 5-членним циклом (N5), нафтені з 6-членним циклом (N6), ароматичні вуглеводні (A), бензол (Bz), легкі гази C₁–C₄ (LG) та водень (H₂). Така агрегація дозволяє суттєво спростити модель порівняно з детальним покомпонентним описом (сотні індивідуальних речовин) при збереженні адекватного відображення основних закономірностей процесу.

Між псевдокомпонентами відбувається 12 ключових реакцій, які можна об'єднати в такі групи: дегідрування нафтенів C₆ з утворенням ароматики (N6 → A + 3H₂) — основна цільова реакція; дегідрування нафтенів C₅ (N5 → A + 3H₂); ізомеризація нафтенів (N5 ↔ N6); ізомеризація парафінів (n-P ↔ i-P); дегідродіциклізація парафінів (n-P → N6 + H₂); гідрокрекінг парафінів (n-P + H₂ → LG); гідроделалкілування (A → Bz + LG); коксування.

Матеріальний баланс для і-го псевдокомпонента в реакторі описується системою диференціальних рівнянь у квазістаціонарному наближенні:

$$\frac{dC_i}{dV} = \frac{\rho_{cat}}{F_{mol}} \cdot \sum_{k=1}^{12} \nu_{ik} \cdot r_k, \quad i = 1, \dots, 8 \quad (1)$$

де C_i - молярна концентрація і-го псевдокомпонента, моль/м³; V — об'єм каталізатора, м³; ρ_{cat} — насипна густина каталізатора, кг/м³; F_{mol} — молярна витрата сировини, моль/с; ν_{ik} — стехіометричний коефіцієнт і-го компонента в к-й реакції; r_k — швидкість к-ї реакції, моль/(кг·с).

Кінетичні рівняння. Швидкості реакцій описуються кінетичними рівняннями типу Ленгмюра–Хіншельвуда, що враховують адсорбцію реагентів на поверхні каталізатора. Для основної реакції дегідрування нафтенів C_6 з утворенням ароматичних вуглеводнів:

$$r_5 = k_5 \cdot a \cdot \frac{p_{N6} - \frac{p_A \cdot p_{H_2}^3}{K_{eq,5}}}{1 + K_A \cdot p_A} \quad (2)$$

де k_5 — константа швидкості реакції; a — відносна активність каталізатора ($0 < a \leq 1$); p_i — парціальні тиски компонентів, МПа; $K_{eq,5}$ — константа рівноваги реакції; K_A — константа адсорбції ароматичних вуглеводнів.

Константа швидкості залежить від температури за рівнянням Арреніуса:

$$k_5 = k_5^0 \cdot \exp\left(-\frac{E_5}{RT}\right) \quad (3)$$

де k_5^0 — передекспоненціальний множник; E_5 — енергія активації, Дж/моль; $R = 8,314$ Дж/(моль·К) — універсальна газова стала; T — температура, К.

Константа рівноваги розраховується за термодинамічними даними:

$$\ln K_{eq,5} = -\frac{\Delta G^0}{RT} = -\frac{\Delta H^0}{RT} + \frac{\Delta S^0}{R} \quad (4)$$

де $\Delta H^0 \approx 210$ кДж/моль — стандартна ентальпія реакції (реакція сильно ендотермічна); $\Delta S^0 \approx 380$ Дж/(моль·К) — стандартна ентропія реакції.

Для реакції ізомеризації парафінів кінетичне рівняння має вигляд:

$$r_3 = k_3 \cdot a \cdot \frac{p_{n-P} - \frac{p_{i-P}}{K_{eq,3}}}{1 + K_P \cdot p_{n-P}} \quad (5)$$

Для реакції гідрокрекінгу парафінів:

$$r_{10} = k_{10} \cdot a \cdot \frac{p_{n-P} \cdot p_{H_2}}{1 + K_P \cdot p_{n-P}} \quad (6)$$

Тепловий баланс. Тепловий баланс реактора враховує ендотермічність більшості реакцій риформінгу:

$$\frac{dT}{dV} = \frac{\rho_{cat}}{F_{mol} \cdot c_p} \cdot \sum_{k=1}^{12} (-\Delta H_k) \cdot r_k \quad (7)$$

де T — температура реакційної суміші, К; c_p — молярна теплоємність суміші, Дж/(моль·К); ΔH_k — тепловий ефект к-ї реакції, Дж/моль. Реакція дегідрування є сильно ендотермічною ($\Delta H_5 \approx +210$ кДж/моль), тому температура в адіабатичному реакторі знижується на 40–80 °С.

Модель дезактивації каталізатора. Активність каталізатора поступово знижується внаслідок відкладення коксу на поверхні та в порах каталізатора. Швидкість дезактивації залежить від температури, парціального тиску ароматичних вуглеводнів та поточної активності [5]:

$$\frac{da}{dt} = -k_d \cdot a^2 \cdot \exp\left(-\frac{E_d}{RT}\right) \cdot p_A^{0,5} \quad (8)$$

де k_d — константа швидкості дезактивації; E_d — енергія активації дезактивації. Квадратична залежність від активності (a^2) відображає автокаталітичний характер коксування — на частково закоксованій поверхні швидкість відкладення коксу зменшується.

В установках ССР дезактивований каталізатор безперервно виводиться з нижнього реактора на регенерацію, де кокс випалюється при температурі 450–550 °С. Завдяки цьому середня активність каталізатора підтримується на рівні 0,85–0,95.

Комплексна модель процесу. Об'єднуючи рівняння (1)–(8) для чотирьох послідовно з'єднаних реакторів, отримуємо комплексну математичну модель у формі системи диференціальних рівнянь:

$$\frac{dx}{dt} = f(x, u, d, \theta), \quad y = h(x) \quad (9)$$

де $x = [C_1, \dots, C_8, T_1, \dots, T_4, a]^T$ — вектор стану розмірності 13; $u = [T_{in,1}, \dots, T_{in,4}, P]^T$ — вектор керуючих впливів; d — вектор збурень (склад сировини); θ — параметри моделі; $y = [RON, Y_{C_5+}]^T$ — вектор виходів.

Розрахунок якісних показників. Октанове число риформату розраховується за адитивною формулою:

$$RON = \sum_{i=1}^6 x_i \cdot RON_i \quad (10)$$

де x_i — масова частка i -го псевдокомпонента в рідкому продукті; RON_i — октанове число i -го псевдокомпонента. Типові значення: $RON_{n,p} \approx 25-30$; $RON_{i,p} \approx 75-85$; $RON_N \approx 65-75$; $RON_A \approx 105-115$.

Вихід рідкого продукту визначається як:

$$Y_{C_5+} = \frac{F_{feed} - F_{LG} - F_{H_2}}{F_{feed}} \cdot 100\% \quad (11)$$

Верифікація моделі. Модель верифіковано за даними промислової установки CCR потужністю 1,5 млн т/рік. Використано 147 точок експериментальних даних при різних режимах роботи. Коефіцієнт детермінації для октанового числа становить $R^2 = 0,967$, середня абсолютна похибка MAE = 0,48 пункту RON. Для виходу рідкого продукту $R^2 = 0,954$, MAE = 0,65 %.

Гібридна модель. Концепція гібридного моделювання. Незважаючи на те, що фізична модель (9) побудована на основі фундаментальних закономірностей процесу, вона має обмежену точність прогнозування через ряд причин:

— спрощення кінетичної схеми: агрегація сотень індивідуальних компонентів сировини та продуктів у 8 псевдокомпонентів неминуче призводить до втрати частини інформації про реальний склад та реакційну здатність суміші;

— невизначеність параметрів моделі: значення констант швидкості, енергій активації, констант адсорбції та інших параметрів визначені з обмеженою точністю на основі лабораторних досліджень, які не завжди відповідають промисловим умовам;

— неврахування вторинних ефектів: модель не враховує такі явища як нерівномірність розподілу потоку по перерізу реактора, радіальні градієнти температури, локальні перегріву, вплив домішок у сировині тощо;

— варіабельність властивостей каталізатора: реальний каталізатор має розподіл частинок за розміром та активністю, який змінюється в процесі експлуатації.

Для підвищення точності прогнозування запропоновано використати гібридний підхід, що полягає у доповненні фізичної моделі компонентом машинного навчання [6, 7]. Ідея гібридного моделювання базується на декомпозиції моделі на дві складові: фізичну частину, що описує невраховані ефекти та похибки параметрів, та емпіричну частину, що компенсує невраховані ефекти та похибки параметрів.

Архітектури гібридних моделей. У літературі описано три основні архітектури гібридних моделей [6]:

1. Паралельна архітектура — фізична модель та ML-компонент працюють незалежно, їх виходи сумуються або усереднюються. Перевага: простота реалізації. Недолік: ML-компонент може дублювати роботу фізичної моделі.

2. Послідовна архітектура — вихід фізичної моделі подається на вхід ML-компонента, який прогнозує корекцію (похибку). Перевага: ML-компонент навчається компенсувати саме похибки фізичної моделі. Недолік: потребує якісної фізичної моделі.

3. Вбудована архітектура — ML-компонент використовується для оцінювання невідомих параметрів або функцій всередині фізичної моделі. Перевага: максимальна інтеграція з фізикою. Недолік: складність реалізації та навчання.

У даній роботі обрано послідовну архітектуру (рис. 1), оскільки вона забезпечує найкращий баланс між точністю та інтерпретованістю для задачі управління. При такій архітектурі вихід гібридної моделі формується як сума прогнозу фізичної моделі та корекції від нейронної мережі:

$$\hat{y}_{hyb} = \hat{y}_{phys} + \Delta \hat{y}_{ML} = f(x, u, \theta) + g_{NN}(z; w) \quad (12)$$

де \hat{y}_{hyb} — вихід гібридної моделі (прогнозоване значення RON або виходу C_5+); \hat{y}_{phys} — вихід фізичної моделі; $\Delta \hat{y}_{ML}$ — корекція від ML-компонента; $g_{NN}(\cdot)$ — функція нейронної мережі з вагами w ; z — вектор входів нейронної мережі.

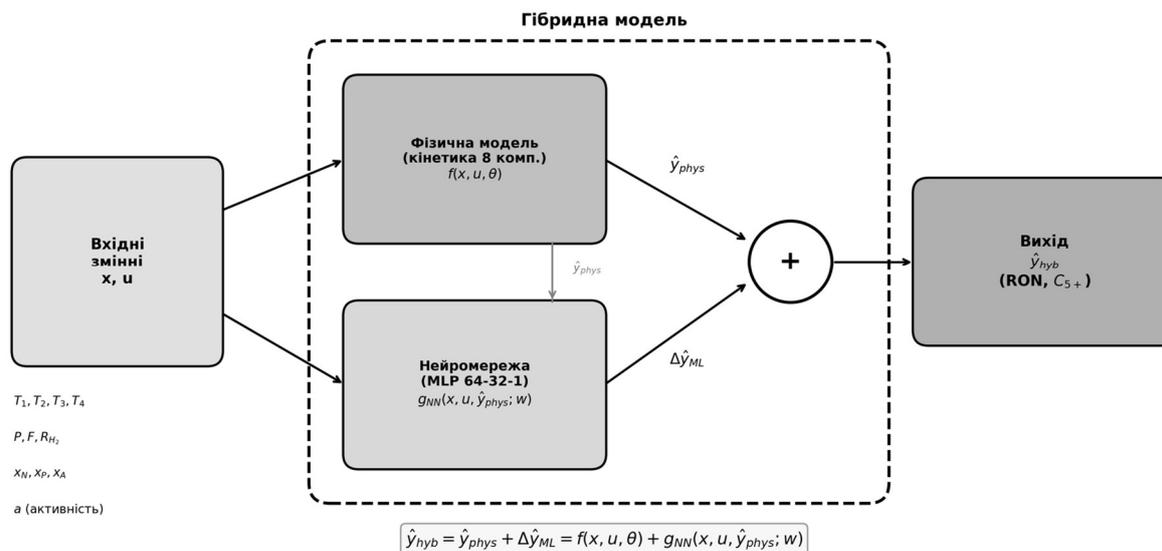


Рис. 1 – Архітектура гібридної моделі з послідовною інтеграцією компонентів

Формування входів нейромережі. Вектор входів нейромережі з формується шляхом об'єднання технологічних змінних та виходу фізичної моделі:

$$z = [T_{in,1}, T_{in,2}, T_{in,3}, T_{in,4}, P, x_N, x_P, x_A, a, \hat{y}_{phys}]^T \quad (13)$$

де $T_{in,j}$ — температури на вході в реактори; P — тиск; x_N, x_P, x_A — вміст нафтенів, парафінів та ароматики в сировині; a — активність каталізатора; \hat{y}_{phys} — вихід фізичної моделі. Загалом вектор z має розмірність 10.

Включення виходу фізичної моделі \hat{y}_{phys} до вектора входів є ключовою особливістю послідовної архітектури. Це дозволяє нейромережі "вивчити" залежність похибки фізичної моделі від робочих умов та величини самого прогнозу, що суттєво підвищує точність корекції.

Архітектура нейронної мережі. Нейромережевий компонент реалізовано у вигляді багатошарового перцептрона (Multilayer Персерптон, MLP) з двома прихованими шарами. Вибір MLP обґрунтовується універсальною апроксимаційною здатністю та простотою реалізації. Функція нейромережі записується як композиція афінних перетворень та нелінійних функцій активації:

$$h_1 = \sigma(W_1 \cdot z + b_1) \quad (14)$$

$$h_2 = \sigma(W_2 \cdot h_1 + b_2) \quad (15)$$

$$g_{NN}(z; w) = W_3 \cdot h_2 + b_3 \quad (16)$$

де h_1, h_2 — вектори активацій прихованих шарів; W_i — матриці ваг; b_i — вектори зміщень (bias); $\sigma(\cdot)$ — функція активації.

Як функцію активації $\sigma(\cdot)$ використано ReLU (Rectified Linear Unit):

$$\sigma(x) = \max(0, x) = \{x, \text{якщо } x > 0; 0, \text{якщо } x \leq 0 \quad (17)$$

Функція ReLU має ряд переваг порівняно з традиційними сигмоїдальними функціями: відсутність проблеми зникаючого градієнта, обчислювальна ефективність, розріджена активація (частина нейронів має нульовий вихід).

Розмірність шарів нейромережі:

- вхідний шар: 10 нейронів (розмірність вектора z);
- перший прихований шар: 64 нейрони, $W_1 \in \mathbb{R}^{64 \times 10}$;
- другий прихований шар: 32 нейрони, $W_2 \in \mathbb{R}^{32 \times 64}$;
- вихідний шар: 1 нейрон (скалярна корекція), $W_3 \in \mathbb{R}^{1 \times 32}$.

Загальна кількість параметрів нейромережі: $64 \cdot 10 + 64 + 32 \cdot 64 + 32 + 1 \cdot 32 + 1 = 2913$. Така кількість є достатньою для апроксимації залежності похибки від робочих умов, при цьому ризик перенавчання залишається прийнятним при наявності декількох сотень навчальних прикладів.

Навчання нейромережі. Навчання виконується методом зворотного поширення похибки шляхом мінімізації функції втрат на історичних даних. Як функцію втрат використано середньоквадратичну похибку з L2-регуляризациєю:

$$L(w) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_{hyb,i})^2 + \lambda \|w\|^2 \quad (18)$$

де N — кількість навчальних прикладів; y_i — вимірне значення виходу (RON з лабораторного аналізу); $\hat{y}_{hyb,i}$ — прогноз гібридної моделі; λ — коефіцієнт регуляризациї; $\|w\|^2$ — квадрат норми вектора ваг.

L2-регуляризація (ridge regression) запобігає перенавчанню шляхом штрафування великих значень ваг. Значення $\lambda = 0,001$ обрано на основі крос-валідації.

Оптимізація функції втрат виконується методом Adam (Adaptive Moment Estimation), який поєднує переваги методів SGD з моментом та RMSprop:

$$w_{t+1} = w_t - \alpha \cdot \frac{\hat{m}_t}{\sqrt{\hat{v}_t + \epsilon}} \quad (19)$$

де $\alpha = 0,001$ — швидкість навчання (learning rate); \hat{m}_t — оцінка першого моменту градієнта; \hat{v}_t — оцінка другого моменту; $\epsilon = 10^{-8}$ — константа для чисельної стабільності.

Підготовка даних. Для навчання використано історичні дані промислової установки за 6 місяців роботи. Після видалення аномальних точок та перехідних режимів отримано 892 спостереження. Дані розділено на навчальну (70 %), валідаційну (15 %) та тестову (15 %) вибірки.

Перед навчанням виконано нормалізацію входів до діапазону $[0, 1]$:

$$z_{norm} = \frac{z - z_{min}}{z_{max} - z_{min}} \quad (20)$$

Нормалізація забезпечує однаковий масштаб для всіх входів, що покращує збіжність алгоритму навчання.

Результати навчання. Навчання виконувалось протягом 500 епох з розміром батчу 32. Збіжність контролювалась за значенням функції втрат на валідаційній вибірці. Застосовано ранню зупинку (early stopping) з терпінням 50 епох для запобігання перенавчанню.

Порівняння точності фізичної та гібридної моделей на тестовій вибірці (147 точок) наведено в таблиці 1.

Таблиця 1 – Порівняння точності моделей на тестовій вибірці

Показник	Фізична модель	Гібридна модель	Покращення
MAE RON, пункт	0,48	0,36	25%
RMSE RON, пункт	0,58	0,44	24%
R ²	0,967	0,982	+0,015
Макс. похибка, пункт	1,42	0,98	31%

Як видно з таблиці 1, гібридна модель забезпечує суттєве підвищення точності прогнозування за всіма показниками. Середня абсолютна похибка знижується з 0,48 до 0,36 пункту RON (покращення на 25 %), максимальна похибка — з 1,42 до 0,98 пункту (покращення на 31%). Коефіцієнт детермінації зростає з 0,967 до 0,982.

Переваги гібридної моделі. Порівняно з чисто емпіричними моделями (наприклад, нейромережею, що прогнозує RON безпосередньо за входами), гібридна модель має такі переваги:

— краща екстраполяційна здатність: при виході за межі навчальних даних фізична складова забезпечує фізично обґрунтований прогноз;

— менша потреба в даних: нейромережа навчається прогнозувати лише невелику корекцію, а не повну залежність;

— інтерпретованість: можна аналізувати внесок фізичної та ML-складових окремо;

— робастність: при відмові ML-компонента система може продовжувати працювати на основі фізичної моделі.

Синтез системи нелінійного предиктивного управління. Принципи предиктивного управління. Предиктивне управління на основі моделей (Model Predictive Control, MPC) є сучасним підходом до управління складними технологічними процесами, що базується на розв'язанні задачі оптимізації в реальному часі [2]. На відміну від класичних регуляторів (ПД), що реагують на поточне відхилення, MPC використовує модель процесу для прогнозування майбутньої поведінки та визначення оптимальної послідовності керуючих впливів.

Основні принципи MPC:

1. Використання явної моделі процесу для прогнозування виходів на певному горизонті в майбутнє (горизонт прогнозування N_p).

2. Формулювання задачі оптимального управління з функцією цілі, що штрафує відхилення виходів від завдання та надмірні зміни керуючих впливів.

3. Розв'язання задачі оптимізації на кожному кроці управління для визначення оптимальної послідовності керуючих впливів на горизонті керування N_c .

4. Реалізація лише першого елемента оптимальної послідовності, після чого горизонт зсувається на один крок і процедура повторюється (принцип рухомого горизонту).

При використанні нелінійної моделі процесу (як у даній роботі) підхід називається нелінійним предиктивним управлінням (Nonlinear MPC, NMPC). NMPC дозволяє безпосередньо враховувати нелінійність об'єкта, що особливо важливо для процесу риформінгу з його яскраво вираженими нелінійними залежностями.

Постановка задачі оптимізації. На кожному кроці управління k розв'язується задача нелінійного програмування (NLP) на рухомому горизонті. Задача полягає у визначенні послідовності керуючих впливів $\{u(k), u(k+1), \dots, u(k+N_c-1)\}$, що мінімізує функцію цілі при виконанні обмежень.

Функція цілі включає два доданки — штраф за відхилення виходів від завдання та штраф за зміни керуючих впливів:

$$\min J = \sum_{i=1}^{N_p} \|\hat{y}(k+i|k) - r(k+i)\|_Q^2 + \sum_{i=0}^{N_c-1} \|\Delta u(k+i)\|_R^2 \quad (21)$$

де $\hat{y}(k+i|k)$ — прогноз виходу на момент $k+i$, обчислений в момент k на основі гібридної моделі; $r(k+i)$ — завдання (уставка) для виходів; $\Delta u(k+i) = u(k+i) - u(k+i-1)$ — зміна керуючого впливу; N_p — горизонт прогнозування; N_c — горизонт керування; Q, R — вагові матриці.

Квадратична норма з ваговою матрицею визначається як:

$$\|x\|_Q^2 = x^T Q x = \sum_{j=1}^n q_j x_j^2 \quad (22)$$

де $Q = \text{diag}(q_1, q_2, \dots, q_n)$ — діагональна вагова матриця.

Вибір параметрів налаштування. Для процесу риформінгу обрано такі значення параметрів NMPC:

Крок дискретизації $\Delta t = 5$ хв обрано як компроміс між точністю опису динаміки та обчислювальними витратами. Цей крок значно менший за постійну часу процесу (25–45 хв), що забезпечує адекватне відстеження динаміки.

Горизонт прогнозування $N_p = 24$ кроки (2 години) охоплює приблизно 3 постійні часу процесу, що достатньо для врахування повної динаміки об'єкта.

Горизонт керування $N_c = 12$ кроків (1 година). Після горизонту керування передбачається, що керуючі впливи залишаються сталими: $u(k+i) = u(k+N_c-1)$ для $i \geq N_c$. Це зменшує розмірність задачі оптимізації.

Вагова матриця виходів $Q = \text{diag}(100, 10)$ відображає пріоритети управління. Підвищена вага для RON ($q_1 = 100$) порівняно з виходом C_{5+} ($q_2 = 10$) обумовлена тим, що октанове число є критичним показником якості продукції.

Вагова матриця керування $R = \text{diag}(1, 1, 1, 1, 0.5)$ штрафує різкі зміни керуючих впливів. Однакові ваги для температур ($r_1 = r_2 = r_3 = r_4 = 1$) та дещо знижена вага для тиску ($r_5 = 0.5$) враховують різну динаміку контурів.

Обмеження. Задача оптимізації (21) розв'язується при виконанні обмежень, що відображають технологічні та безпекові вимоги. Розглядаються три типи обмежень.

Обмеження на керуючі впливи визначають допустимий діапазон зміни керуючих змінних:

$$u_{\min} \leq u(k+i) \leq u_{\max}, \quad i = 0, 1, \dots, N_c - 1 \quad (23)$$

Конкретні значення для установки CCR:

— температури на вході в реактори: $480 \text{ }^\circ\text{C} \leq T_{in,j} \leq 530 \text{ }^\circ\text{C}$ ($j = 1, 2, 3, 4$);

— тиск у системі: $0,35 \text{ МПа} \leq P \leq 0,50 \text{ МПа}$.

Нижня межа температури обумовлена необхідністю підтримання достатньої швидкості реакцій, верхня — ризиком прискореної дезактивації каталізатора та термічного крекінгу. Діапазон тиску визначається конструкцією обладнання та оптимальними умовами для рівноваги реакцій.

Обмеження на швидкість зміни керуючих впливів запобігають різким змінам, що можуть викликати термічні напруження в обладнанні:

$$-\Delta u_{max} \leq \Delta u(k+i) \leq \Delta u_{max}, \quad i = 0, 1, \dots, N_c - 1 \quad (24)$$

де $\Delta u(k+i) = u(k+i) - u(k+i-1)$. Конкретні значення:

— максимальна зміна температури: $\Delta T_{max} = 5 \text{ }^\circ\text{C}$ за крок ($1 \text{ }^\circ\text{C}/\text{хв}$);

— максимальна зміна тиску: $\Delta P_{max} = 0,02 \text{ МПа}$ за крок.

Обмеження на виходи забезпечують виконання специфікацій на продукцію:

$$y_{min} \leq \hat{y}(k+i|k) \leq y_{max}, \quad i = 1, 2, \dots, N_p \quad (25)$$

Конкретні значення:

— мінімальне октанове число: $RON \geq 95$ (специфікація на продукцію);

— максимальний вміст бензолу: $x_{Bz} \leq 1\%$ (екологічні вимоги).

Обмеження на виходи є "м'якими" (soft constraints) — їх порушення штрафуються в функції цілі, але не призводить до неможливості розв'язання задачі. Це реалізується введенням змінних послаблення (slack variables):

$$y_{min} - \varepsilon_i \leq \hat{y}(k+i|k) \leq y_{max} + \varepsilon_i, \quad \varepsilon_i \geq 0 \quad (26)$$

де ε_i — змінна послаблення, яка додається до функції цілі з великою вагою ρ :

$$J_{ext} = J + \rho \sum_{i=1}^{N_p} \varepsilon_i^2 \quad (27)$$

де $\rho = 10^4$ — велика вага, що забезпечує виконання обмежень, коли це можливо.

Алгоритм розв'язання задачі NLP. Задача оптимізації (21) з обмеженнями (23)–(26) є задачею нелінійного програмування (NLP). Для її розв'язання використано метод послідовного квадратичного програмування (Sequential Quadratic Programming, SQP) [2].

Ідея методу SQP полягає в ітеративному розв'язанні квадратичних підзадач (QP), що апроксимують вихідну нелінійну задачу. На кожній ітерації l розв'язується підзадача:

$$\min \nabla J^T \Delta u + \frac{1}{2} \Delta u^T H \Delta u \quad (28)$$

при обмеженнях:

$$\nabla g^T \Delta u + g \leq 0 \quad (29)$$

де $\Delta u = u^{l+1} - u^l$ — крок оптимізації; ∇J — градієнт функції цілі; H — апроксимація Гессіана (матриці других похідних); g — вектор функцій обмежень; ∇g — Якобіан обмежень.

Апроксимація Гессіана H оновлюється за формулою BFGS (Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno):

$$H_{l+1} = H_l + \frac{q_l q_l^T}{q_l^T s_l} - \frac{H_l s_l s_l^T H_l}{s_l^T H_l s_l} \quad (30)$$

де $s_l = u^{l+1} - u^l$; $q_l = \nabla J^{l+1} - \nabla J^l$.

Програмна реалізація. Систему NMPC реалізовано мовою програмування Python з використанням спеціалізованих бібліотек.

CasADi [10] — бібліотека з відкритим кодом для символічних обчислень та автоматичного диференціювання. Основні можливості:

— символічний опис моделі процесу та функції цілі;

— автоматичне обчислення градієнтів та Якобіанів методом автоматичного диференціювання (AD);

— ефективна робота з розрідженими матрицями;

— інтерфейс до солверів NLP (IPOPT, SNOPT та ін.).

IPOPT (Interior Point OPTimizer) — солвер для великомасштабних задач NLP, що використовує метод внутрішньої точки (interior point method) з фільтром лінійного пошуку. Особливості:

— ефективна обробка розріджених структур, типових для задач оптимального управління;

— надійна збіжність для широкого класу задач;

— підтримка «теплого старту» (warm start) — ініціалізації з розв'язку попереднього кроку.

Механізм адаптації моделі. Для компенсації дрейфу моделі внаслідок дезактивації каталізатора та інших повільних змін реалізовано дворівневий механізм адаптації.

Корекція зміщення (bias update) виконується на кожному кроці управління. Обчислюється різниця між вимірним виходом та прогнозом моделі:

$$b(k) = y_{meas}(k) - \hat{y}(k|k-1) \quad (31)$$

Ця різниця (bias) додається до всіх прогнозів на горизонті:

$$\hat{y}_{corr}(k+i|k) = \hat{y}(k+i|k) + b(k), \quad i = 1, 2, \dots, N_p \quad (32)$$

Припущення про сталість зміщення на горизонті є прийнятним для повільно змінних процесів.

Періодичне оновлення ML-компонента виконується кожні 8 годин роботи (96 кроків). При цьому:

- накопичуються нові дані за період роботи;
- виконується дооновлення ваг нейромережі методом SGD з малим learning rate (0,0001);
- використовується лише декілька епох (5–10) для запобігання «забування» попередніх даних.

Такий підхід дозволяє нейромережі адаптуватися до поступових змін характеристик процесу без повного перенавчання.

Обчислювальні характеристики. Розмірність задачі оптимізації:

- кількість змінних рішення: $5 \cdot N_c = 5 \cdot 12 = 60$ (5 керуючих впливів на 12 кроків);
- кількість обмежень-нерівностей: $5 \cdot 2 \cdot N_c + 5 \cdot 2 \cdot N_c + 2 \cdot N_p \approx 288$;
- кількість ітерацій IPOPT: типово 15–30.

Середній час розв'язання задачі NLP становить 0,8 с на процесорі Intel Core i7-10700 (2,9 ГГц). Це значно менше за крок дискретизації (5 хв = 300 с), що забезпечує можливість роботи в реальному часі з великим запасом.

Результати моделювання. Порівняно PID, лінійний MPC та NMPC для установки 1,5 млн т/рік.

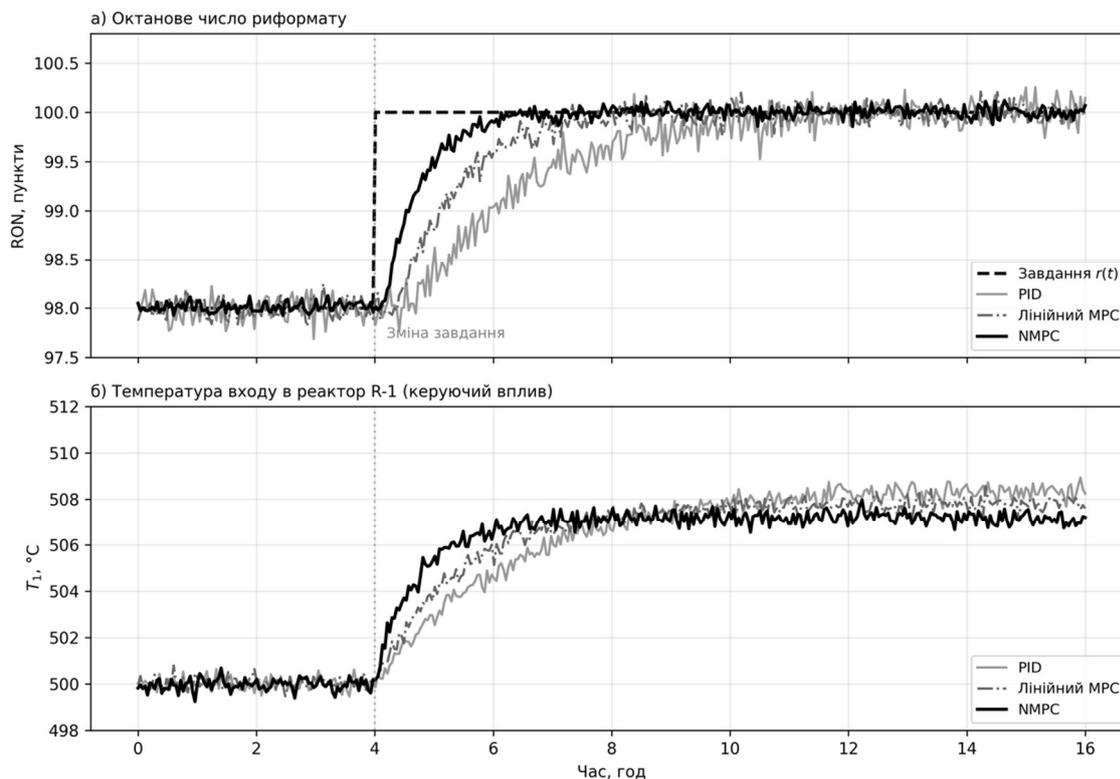


Рис. 2 – Перехідні процеси при зміні завдання RON

На рис. 2 наведено перехідні процеси при ступінчастій зміні завдання октанового числа з 98 до 100 пунктів у момент часу $t = 4$ год. Порівнюються три стратегії управління: традиційне PID-управління (каскадна структура з контуром температури та контуром якості), лінійний MPC та розроблений NMPC з гібридною моделлю.

Як видно з рис. 2а, система NMPC забезпечує найшвидше відпрацювання зміни завдання. Час виходу на 5 % зону від нового значення становить 65 ± 8 хв для NMPC проти 95 ± 12 хв для лінійного MPC та 185 ± 25 хв для PID-управління. Таким чином, NMPC скорочує час перехідного процесу у 2,8 рази порівняно з PID. Перерегулювання також суттєво знижується: з 12 % (PID) та 6 % (лінійний MPC) до 3 % (NMPC).

На рис. 2б показано динаміку температури на вході в перший реактор, яка є основним керуючим впливом для регулювання октанового числа. NMPC реалізує більш агресивну початкову зміну температури завдяки використанню нелінійної моделі та прогнозуванню на довшому горизонті, але при цьому уникає надмірного перерегулювання за рахунок оптимізації траєкторії керування.

На рис. 3 продемонстровано реакцію систем управління на ступінчасте збурення складу сировини — зниження вмісту нафтенів з 34 % до 26 % у момент часу $t = 4$ год. Така зміна є типовою при переході на іншу партію сировини і призводить до зниження октанового числа продукту через зменшення кількості попередників ароматичних вуглеводнів.

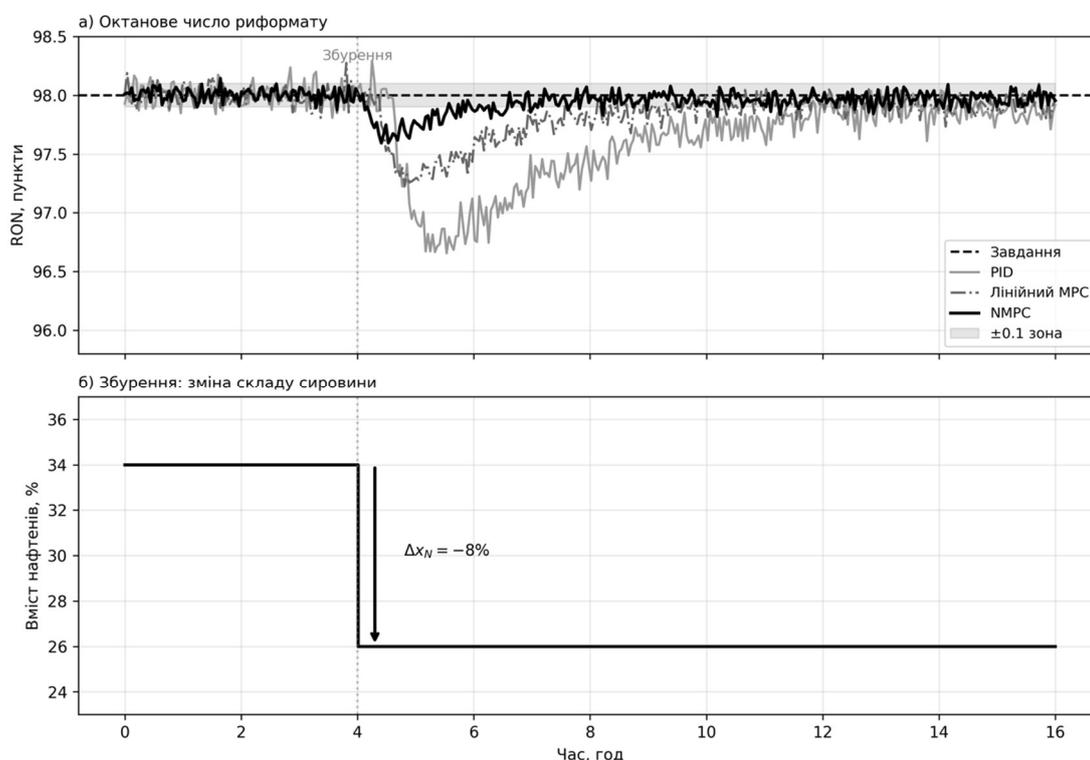


Рис. 3 – Компенсація збурення по складу сировини

Рис. 3а показує динаміку октанового числа при різних стратегіях управління. Максимальне відхилення RON від завдання (98 пунктів) становить: 1,85 пункту для PID; 1,22 пункту для лінійного MPC; 0,68 пункту для NMPC. Таким чином, NMPC знижує максимальне відхилення на 63 % порівняно з PID-управлінням. Час повернення до зони $\pm 0,1$ пункту також суттєво скорочується: з 4,5 год (PID) до 1,8 год (NMPC).

Покращена компенсація збурень у системі NMPC досягається завдяки двом факторам: використанню feedforward-компенсації на основі вимірювання густини сировини (непрямий показник вмісту нафтенів) та точнішому прогнозуванню впливу зміни складу на октанове число за допомогою гібридної моделі.

На рис. 4 продемонстровано ефективність механізму адаптації моделі при поступовому зниженні активності каталізатора. Моделювання виконано на горизонті 48 годин, протягом яких активність знижується з $a = 1,0$ до $a = 0,7$, що еквівалентно приблизно 45 добам реальної роботи установки.

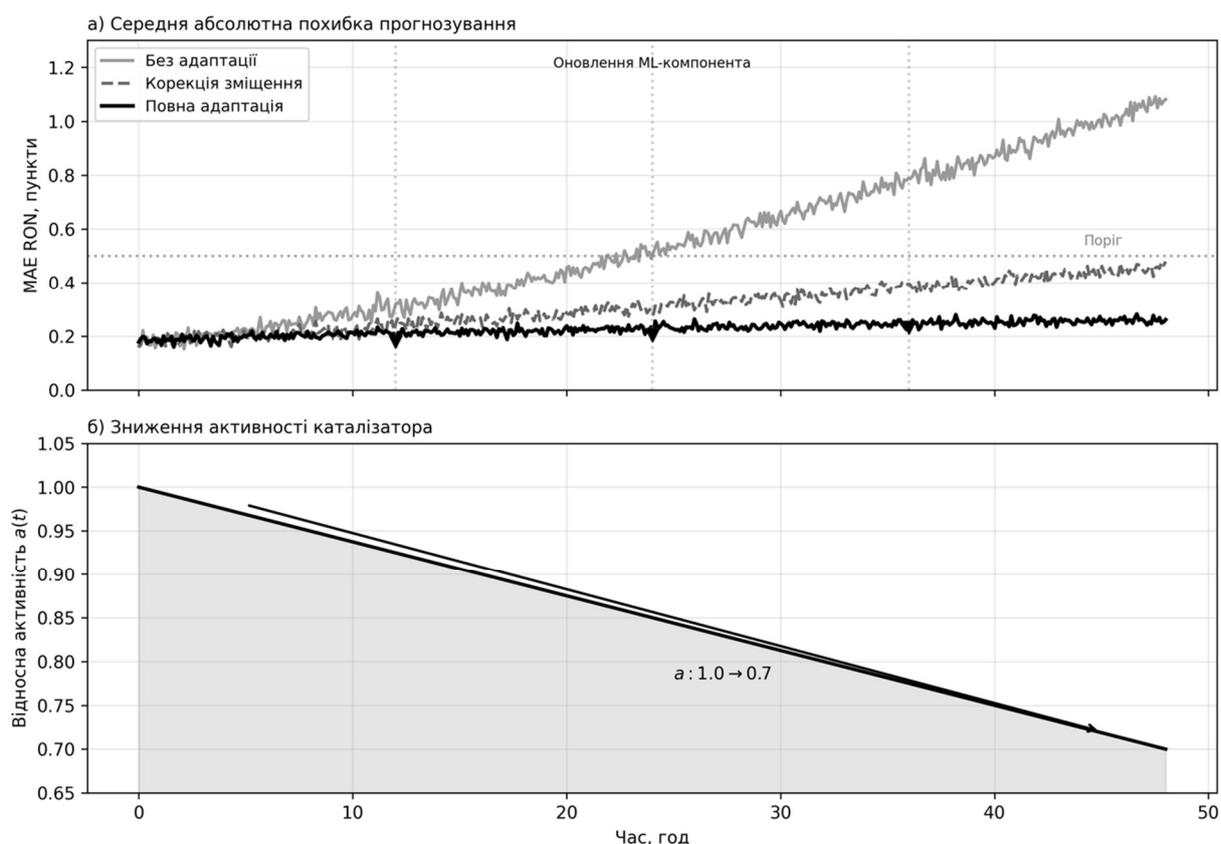


Рис. 4 – Адаптація при дезактивації каталізатора

На рис. 4а показано еволюцію середньої абсолютної похибки (MAE) прогнозування октанового числа для трьох варіантів: без адаптації, з корекцією зміщення (bias update) та з повною адаптацією (bias + оновлення ML-компонента). Без адаптації похибка прогнозування зростає з початкових 0,18 до 0,95 пункту через невідповідність моделі реальному стану каталізатора. Корекція зміщення (формула 31–32) суттєво покращує ситуацію, обмежуючи зростання MAE до 0,45 пункту. Повна адаптація з періодичним оновленням ваг нейромережі (кожні 8 годин, позначено трикутниками) забезпечує найкращий результат — MAE зростає лише до 0,24 пункту.

Рис. 4б ілюструє профіль зниження активності каталізатора, що використовувався при моделюванні. Зниження активності на 30 % є типовим для періоду між регенераціями в промислових умовах.

Таблиця 2 – Порівняння систем управління

Показник	PID	Лін. MPC	NMPC
MAE RON	0,42	0,28	0,18
Час перех., хв	185	95	65
Макс. відх.	1,85	1,22	0,68
Покращення	—	37%	57%

У таблиці 2 наведено зведені результати порівняння ефективності трьох досліджених систем управління. Показник MAE RON характеризує середню абсолютну похибку підтримання октанового числа в стаціонарному режимі при наявності типових збурень (варіації складу сировини, коливання витрати). Час перехідного процесу визначено як час досягнення 5% зони від нового значення завдання. Перерегулювання — максимальне відхилення вище завдання у відсотках від величини ступінчастої зміни. Максимальне відхилення при збуренні — найбільше відхилення RON від завдання при ступінчастій зміні вмісту нафтенів на 8 %.

Як видно з таблиці, розроблена система NMPC з гібридною моделлю забезпечує покращення всіх показників порівняно з традиційним PID-управлінням: зниження MAE на 57 % (з 0,42 до 0,18 пункту), скорочення часу перехідного процесу у 2,8 рази (з 185 до 65 хв), зниження перерегулювання в 4 рази (з 12 % до 3 %), зменшення максимального відхилення при збуреннях на 63 % (з 1,85 до 0,68 пункту). Порівняно з лінійним MPC покращення також є суттєвим — 36 % за показником MAE та 44% за максимальним відхиленням при збуреннях.

Отримані результати підтверджують ефективність запропонованого підходу та доцільність використання гібридних моделей у системах предиктивного управління складними нелінійними процесами.

Висновки

1. Розроблено комплексну математичну модель процесу CCR-риформінгу з 8 псевдокомпонентами, 12 реакціями та моделлю дезактивації.

2. Запропоновано гібридну модель (фізика + MLP 64-32-1), що підвищує точність RON на 25 %.

3. Синтезовано NMPC на Python (CasADi, IPOPT) з механізмом адаптації.

4. NMPC забезпечує: зниження MAE на 57 %; скорочення часу в 2,8 рази; зниження відхилень на 63 %.

Перспективи подальших досліджень пов'язані з інтеграцією з суміжними процесами та застосуванням reinforcement learning.

Список використаної літератури

1. Qin, s. Joe & Badgwell, Thomas. (2003). A Survey of Industrial Model Predictive Control Technology. Control engineering practice. 11. 733-764. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0967-0661\(02\)00186-7](https://doi.org/10.1016/S0967-0661(02)00186-7)
2. Rawlings, J. & Mayne, D.Q. & Diehl, Moritz. (2017). Model Predictive Control: Theory, Computation, and Design.
3. Li, Jin & Tan, Yuejin & Liao, Liangcai. (2005). Modeling and optimization of a semi-regenerative catalytic naphtha reformer. 867 - 872. DOI: <https://doi.org/10.1109/CCA.2005.1507238>
4. Rahimpour, M. R. & Jafari, Mitra & Iranshahi, Davood. (2013). Progress in catalytic naphtha reforming process: A review. Applied Energy. 109. 79–93. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2013.03.080>
5. Argyle, Morris & Bartholomew, Calvin. (2015). Heterogeneous Catalyst Deactivation and Regeneration: A Review. Catalysts. 5. 145-269. DOI: <https://doi.org/10.3390/catal5010145>
6. von Stosch, Moritz & Oliveira, Rui & Peres, Joana & Feyo de Azevedo, Sebastião. (2014). Hybrid semi-parametric modeling in process systems engineering: Past, present and future. Computers & Chemical Engineering. 60. 86-101. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2013.08.008>
7. Примиська, С., Абрамова, А., & Складанний, Д. (2025). Інтеграція штучного інтелекту в системи автоматизації промислових процесів. КОМП'ЮТЕРНО-ІНТЕГРОВАНІ ТЕХНОЛОГІЇ: ОСВІТА, НАУКА, ВИРОБНИЦТВО, (58), 12-20. <https://doi.org/10.36910/6775-2524-0560-2025-58-02>
8. Ковалюк, Д. О., Ковалюк, О. О., & Малішевський, В. С. (2024). Реалізація систем контролю якості продукції на основі машинного зору та web-технологій. Вісник НТУУ «КПІ імені Ігоря Сікорського». Серія: Хімічна інженерія, екологія та ресурсозбереження, (1), 28–34. <https://doi.org/10.20535/2617-9741.1.2024.300980>
9. Schweidtmann, Artur & Esche, Erik & Fischer, Asja & Kloft, Marius & Repke, Jens-Uwe & Sager, Sebastian & Mitsos, Alexander. (2021). Machine Learning in Chemical Engineering: A Perspective. Chemie Ingenieur Technik. 93. DOI: <https://doi.org/10.1002/cite.202100083>
10. Andersson, Joel & Gillis, Joris & Horn, Greg & Rawlings, James & Diehl, Moritz. (2018). CasADi: a software framework for nonlinear optimization and optimal control. Mathematical Programming Computation. DOI: <https://doi.org/11.10.1007/s12532-018-0139-4>

Vitalii Tsapar, Serhii Tkachuk, Vadym Bondar

NONLINEAR PREDICTIVE CONTROL OF THE CATALYTIC REFORMING PROCESS BASED ON A HYBRID MODEL

The paper investigates the problem of improving the efficiency of process control for catalytic reforming with continuous catalyst regeneration (CCR). The relevance of this research is determined by the fact that traditional control systems based on PID controllers cannot ensure optimal operation of the unit due to the significant inertia of the process, transport delays, nonlinear characteristics, and parameter variability caused by catalyst deactivation. The aim of the study is to develop a nonlinear model predictive control (NMPC) system based on a hybrid model that combines a physical kinetic model of the process with a neural network component for correcting prediction errors.

A comprehensive mathematical model of the CCR reforming process has been developed. It includes a kinetic model with eight pseudocomponents and twelve reactions, a catalyst deactivation model, and a model for calculating the octane number using an additive formula. A hybrid model architecture with sequential integration of components is proposed, where multilayer perceptron (MLP) neural network with two hidden layers (64 and 32 neurons) compensates for systematic errors of the physical model. The hybrid model provides a 25% improvement in the accuracy of octane number prediction compared with the baseline physical model.

An NMPC control system has been synthesized using a quadratic objective function that minimizes the deviation of controlled variables from their setpoints while penalizing rapid changes in control inputs. The optimization problem includes constraints on temperature ranges, pressure, and the rate of change of control actions. The software implementation was carried out in Python using the CasADi library for symbolic computations and automatic differentiation, and the IPOPT solver for nonlinear programming based on the interior-point method. A model adaptation mechanism has also been implemented to compensate for drift caused by catalyst deactivation.

Simulation results for a reforming unit with a capacity of 1.5 million tons per year confirm the advantages of the developed NMPC system: the average absolute error of the octane number is reduced by 57% compared with PID control and by 36% compared with linear MPC; the settling time of transient processes is reduced by a factor of 2.8; and the maximum deviation under feed composition disturbances is reduced by 63%. The practical significance of the work lies in the possibility of applying the proposed algorithms to improve the efficiency of control systems for industrial CCR reforming units.

Keywords: catalytic reforming, predictive control, nonlinear optimization, hybrid model, neural network, machine learning, soft sensor, CasADi

References

1. Qin, S. Joe & Badgwell, Thomas (2003). "A Survey of Industrial Model Predictive Control Technology". *Control engineering practice*, vol. 11, no. 7, pp. 733-764. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0967-0661\(02\)00186-7](https://doi.org/10.1016/S0967-0661(02)00186-7)
2. Rawlings, J., Mayne, D.Q. & Diehl, Moritz (2017). *Model Predictive Control: Theory, Computation, and Design*, Nob Hill Publishing, LLC, Madison, Wisconsin, USA.
3. Li, Jin, Tan, Yuejin & Liao, Liangcai. (2005). "Modeling and optimization of a semi-regenerative catalytic naphtha reformer". *Proceedings of 2005 IEEE Conference on Control Applications, 2005. CCA 2005.*, Toronto, Ont., 2005, pp. 867 – 872. DOI: <https://doi.org/10.1109/CCA.2005.1507238>
4. Rahimpour, M. R., Jafari, Mitra & Iranshahi, Davood (2013). Progress in catalytic naphtha reforming process: A review. *Applied Energy*. Vol. 109, pp. 79 – 93. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2013.03.080>
5. Argyle, Morris & Bartholomew, Calvin (2015). Heterogeneous Catalyst Deactivation and Regeneration: A Review. *Catalysts*, vol. 5, no. 1, pp. 145 – 269. DOI: <https://doi.org/10.3390/catal5010145>
6. Stosch, M. V., Oliveira, R., Peres, J., & Azevedo, S. F. (2014). Hybrid semi-parametric modeling in process systems engineering: Past, present and future. *Computers & Chemical Engineering*, vol. 60, pp. 86 – 101. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2013.08.008>
7. Prymska, S., Abramova, A., & Skladannyj, D. (2025). Intehratsiia shtuchnoho intelektu v systemy avtomatyzatsii promyslovykh protsesiv. [Integration of Artificial Intelligence into Industrial Process Automation Systems]. *COMPUTER-INTEGRATED TECHNOLOGIES: EDUCATION, SCIENCE, PRODUCTION*, no. 58, pp. 12 – 20. <https://doi.org/10.36910/6775-2524-0560-2025-58-02>
8. Kovaliuk, D., Kovaliuk, O., & Malishevskiy, V. (2024). Realizatsiia system kontroliu yakosti produktsii na osnovi mashynnoho zoru ta web-tekhnologii. [Implementation of quality control systems based on machine vision and web technologies]. *Bulletin of NTUU «Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute», Series «Chemical Engineering, Ecology and Resource Saving»*, no. 1, pp. 28 – 34. <https://doi.org/10.20535/2617-9741.1.2024.300980>
9. Schweidtmann, A. M., Esche, E., Fischer, A., Kloft, M., Repke, J.-U., Sager, S. & Mitsos, A. (2021), Machine Learning in Chemical Engineering: A Perspective. *Chemie Ingenieur Technik*, vol. 93, no. 12, pp. 2029 – 2039. DOI: <https://doi.org/10.1002/cite.202100083>
10. Andersson, J. A., Gillis, J., Horn, G., Rawlings, J. B., & Diehl, M. (2018). CasADi: a software framework for nonlinear optimization and optimal control. *Mathematical Programming Computation*, vol. 11, pp. 1 – 36. DOI: <https://doi.org/10.1007/s12532-018-0139-4>