



doi 10.26089/NumMet.v26r426

УДК 519.71

Управление процессом каталитического риформинга бензина на основе кинетической модели с использованием искусственной нейронной сети

К. Ф. Коледина

Уфимский государственный нефтяной технический университет,
кафедра информационных технологий и прикладной математики,
Уфа, Российская Федерация

Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН,
лаборатория математической химии,
Уфа, Российская Федерация

ORCID: 0000-0001-8555-0543, e-mail: koledinakamila@mail.ru

Р. Р. Минигалиев

Уфимский государственный нефтяной технический университет,
кафедра информационных технологий и прикладной математики,
Уфа, Российская Федерация

ORCID: 0009-0008-7223-7361, e-mail: radmirmini@gmail.com

С. Н. Коледин

Финансовый университет при Правительстве Российской Федерации,
кафедра информационных технологий,
Москва, Российская Федерация

ORCID: 0000-0003-3291-9794, e-mail: koledinsrg@gmail.com

Аннотация: В работе представлен подход к ускоренному моделированию одного из основных процессов нефтеперерабатывающей отрасли — каталитического риформинга бензина, для реализации которого использовалась глубокая нейронная сеть. Целью исследования является создание модели, способной заменить ресурсоемкие прямые вычисления для оценки выходных параметров процесса, что обеспечивает возможность оперативного анализа и управления в реальном времени. Традиционные методы требуют значительных затрат времени и вычислительных ресурсов. Для формирования обучающей выборки, используемой нейронной сетью, использовались результаты прямых вычислений, выполненных с помощью MATLAB. Существенное сокращение времени генерации данных было достигнуто путем применения параллельных вычислений. Разработанная модель демонстрирует высокую точность предсказаний при минимальных временных затратах, что делает ее особенно актуальной для применения в автоматизированных системах управления на нефтеперерабатывающих предприятиях. Полученная нейросетевая аппроксимация фактически выполняет роль симулятора, способного мгновенно оценивать ключевые параметры процесса каталитического риформинга бензина: выход риформата, содержание ароматических углеводородов, октановое число смеси.

Ключевые слова: каталитический риформинг бензина, нефтепереработка, машинное обучение, нейронные сети, Python, MATLAB, модель прогнозирования, deep learning.

Для цитирования: Коледина К.Ф., Минигалиев Р.Р., Коледин С.Н. Управление процессом каталитического риформинга бензина на основе кинетической модели с использованием искусственной нейронной сети // Вычислительные методы и программирование. 2025. **26**, № 4. 397–409. doi 10.26089/NumMet.v26r426.

Gasoline catalytic reforming process control based on a kinetic model using an artificial neural network

Kamila F. Koledina

Ufa State Petroleum Technological University,
Department of Information Technology and Applied Mathematics,
Ufa, Russia

Institute of Petrochemistry and Catalysis of Russian Academy of Sciences,
Laboratory of Mathematical Chemistry,
Ufa, Russia

ORCID: 0000-0001-8555-0543, e-mail: koledinakamila@mail.ru

Radmir R. Minigaliev

Ufa State Petroleum Technological University,
Department of Information Technology and Applied Mathematics,
Ufa, Russia

ORCID: 0009-0008-7223-7361, e-mail: radmirmini@gmail.com

Sergey N. Koledin

Financial University under the Government of the Russian Federation,
Department of Information Technology,
Moscow, Russia

ORCID: 0000-0003-3291-9794, e-mail: koledinsrg@gmail.com

Abstract: The paper presents an approach to accelerated modeling of one of the main processes in the oil refining industry — catalytic reforming of gasoline, for which a deep neural network was employed. The aim of the study is to create a model that can replace resource-intensive direct calculations for assessing the output parameters of the process, thereby providing the possibility of operational analysis and control in real time. Traditional methods require significant time and computing resources. The results of direct calculations performed using MATLAB were used to form the training sample. A significant reduction in data generation time was achieved by applying parallel computing. The developed model demonstrates high accuracy of predictions with minimal time costs, which makes it especially relevant for use in automated control systems at oil refineries. The resulting neural network approximation actually acts as a simulator capable of instantly assessing the key parameters of the catalytic reforming of gasoline: reformate yield, aromatic hydrocarbon content, octane number of the mixture.

Keywords: catalytic reforming of gasoline, oil refining, machine learning, neural networks, Python, MATLAB, predictive modeling, deep learning.

For citation: K. F. Koledina, R. R. Minigaliev, S. N. Koledin, “Gasoline catalytic reforming process control based on a kinetic model using an artificial neural network,” Numerical Methods and Programming. **26** (4), 397–409 (2025). doi 10.26089/NumMet.v26r426.

1. Введение. Производственные процессы нефтепереработки требуют глубокого анализа и моделирования для оптимизации условий их проведения и улучшения качества получаемого продукта. Влияние этих условий и состава сырья на характеристики продукта можно исследовать по кинетической модели процесса. Для учета всех параметров кинетическая модель должна быть детализирована до необходимого и достаточного уровня. Для таких многостадийных процессов, как каталитический риформинг, задача моделирования является высокоразмерной. В самом деле, моделирование такого процесса только при одних выбранных условиях занимает достаточно много времени. Однако такая детализированная адекватная кинетическая модель позволяет подготовить большое количество данных — зависимостей характеристик продукта от условий процесса и от состава сырья, формируя тем самым обширный обучающий датасет. С помощью подготовленных датасетов можно разработать модель методами машинного обучения.

Программная реализация предложенной методики позволит в режиме реального времени проводить моделирование сложного процесса нефтепереработки, подбирать оптимальные условия процесса для получения продукта с заданными характеристиками, регулировать конструкционные особенности реакторного блока. Таким образом, актуальным является применение методов машинного обучения для разработки программной среды по анализу управления условиями проведения процессов нефтепереработки, что позволит в конечном итоге уменьшить затраты на сырье и повысить качество продукции.

Важным процессом для современной нефтеперерабатывающей отрасли России становится процесс каталитического реформинга бензина. Реакция протекает в присутствии биметаллического катализатора Pt-Re/Al₂O₃. Продуктом каталитического реформинга бензина является товарный бензин АИ-98, АИ-95, АИ-92 (экологический класс Евро-5 и Евро-6), реализуемый через сети автозаправочных станций. В процессе каталитического реформинга бензина происходит образование ароматических углеводородов, которые повышают октановое число бензина. Это и является основной целью процесса. Кроме того, реформинг используется и для отдельного получения ароматических углеводородов, которые применяются в процессах нефтехимии. Показатель октанового числа бензина определяет его класс и, соответственно, цену.

2. Обзор связанных работ. Работа [1] посвящена решению задачи выбора оптимального состава компонентов при компаундировании автомобильных бензинов марок АИ-92 и АИ-95. Реализована нейронная сеть на основе существующих рецептур смешивания бензинов. Такой подход позволил автоматизировать задачу, мало поддающуюся алгоритмизации или традиционному математическому моделированию.

Нейронные сети все активнее применяются для аппроксимации сложных нелинейных зависимостей в инженерных и химико-технологических процессах. Так, в работе [2] предложен метод SANNI для восстановления пропусков во временных рядах с использованием гибридной архитектуры глубоких нейронных сетей. Авторы показали, что применение структурированных представлений данных (snippetов) и специализированных сетевых модулей обеспечивает высокую точность прогнозов при значительно меньших вычислительных затратах по сравнению с традиционными численными методами. Этот результат отражает общую тенденцию: нейросетевые модели способны эффективно заменять ресурсоемкие прямые расчеты в задачах, где требуется оперативное и стабильное получение оценок ключевых параметров.

В работе [3] нейросети применялись для решения обратных геофизических задач с использованием сверточных архитектур и методов совместного обучения (multi-task learning). Подход позволил одновременно решать задачи сегментации и регрессии параметров, что снижало риск переобучения и повышало устойчивость модели к изменению условий. Этот пример демонстрирует, что глубокие нейронные сети могут успешно использоваться в системах, требующих высокой скорости вычислений при сохранении физической достоверности результатов, что близко по смыслу к задачам химико-технологического моделирования.

Таким образом, применение глубоких нейросетей для моделирования процесса каталитического реформинга бензина соответствует современным научным тенденциям. Подобные методы доказали свою эффективность в разных областях — от анализа временных рядов до решения инверсных задач, что подтверждает их универсальность и возможность использования для ускоренного моделирования. Настоящее исследование продолжает этот подход в контексте нефтепереработки, где необходимо создать быструю и точную модель для оценки выходных параметров процесса в реальном времени, что ранее практически не рассматривалось в специализированной литературе.

Целью исследования является разработка модели, способной заменить ресурсоемкие прямые вычисления для оценки выходных параметров процесса каталитического реформинга бензина, тем самым обеспечивая возможность оперативного анализа и управления в реальном времени.

3. Постановка задачи управления процессом каталитического реформинга бензина. Каталитический реформинг является одним из основных источников ароматики в бензине наряду с каталитическим крекингом вакуумного газоилья и низкотемпературной каталитической изомеризацией пентан-гексановой фракции. Современные стандарты производства бензина регламентируют все более высокие требования к бензину. Основным требованием является снижение доли бензола и ароматики в составе. Содержание ароматических углеводородов в товарном бензине не должно превышать 35%, а содержание бензола — не более 1%. Поэтому актуальной задачей для каталитического реформинга бензина является уменьшение количества ароматических углеводородов и бензола при минимальных изменениях октано-

вого числа [4]. На рис. 1 приведена принципиальная схема реакторного блока установки каталитического риформинга бензина. На вход (поток 1) подается смесь гидроочищенного прямого бензина с водородсодержащим газом. На выходе (поток 2) образуется смесь водородсодержащего газа с бензином каталитического риформинга — риформат. Реакторный блок риформинга представлен тремя химическими реакторами вытеснения ($R-1$, $R-2$, $R-3$), заполненными катализатором с промежуточным подогревом сырья в нагревательной печи (блоки $H-1$, $H-2$, $H-3$). Сам процесс является неизотермическим. Размеры реакторов различаются, соответственно различается и загрузка катализатора. Поэтому основными параметрами управления каталитическим риформингом бензина являются температура на входе в каждый из реакторов, загрузка катализатора в каждый реактор, варьирование числа реакторов. Основные целевые критерии процесса — октановое число результирующей смеси, содержание побочных продуктов, таких как ароматические углеводороды и отдельно бензол, выход риформата.

Детализированная кинетическая модель представляет собой математическую формализацию процесса и описывает влияние управляющих параметров, таких как температура на входе в каждый реактор, загрузка катализатора и число реакторов в блоке, на целевые показатели — октановое число смеси, содержание побочных продуктов, выход риформата и изомеризата.

Такая модель состоит из:

- 1) постадийной схемы химических превращений, на основе которой возможен учет изменения концентраций веществ в зависимости от времени контакта реакционной смеси с катализатором, а также учет изменения теплового баланса системы [5];
- 2) значений кинетических параметров отдельных стадий и их температурных зависимостей, что позволяет оценивать изменение состояния системы при вариации температуры [6];
- 3) системы уравнений, описывающих изменение концентраций каждого вещества в зависимости от времени контакта реакционной смеси с катализатором, с заданными начальными данными.

Подобная модель позволяет проводить непрерывный численный расчет функции или кусочного расчет с промежуточным изменением входных данных. В каталитическом риформинге данная особенность обеспечивает возможность учета процесса, в котором сырье проходит через три реакторных блока с промежуточным подогревом смеси. Такая детализированная кинетическая модель была разработана авторами в работах [7, 8, 9], на основе результатов и данных, представленных в работах [10, 11].

С помощью кинетической модели был сгенерирован датасет для последующего моделирования процесса методами машинного обучения.

Перечислим параметры датасета каталитического риформинга бензина:

- 1) независимые факторы:
 - а) число реакторов системы j (рассматривались значения $j = 2, 3, 4$);
 - б) температура T_j на входе в каждый реактор (диапазон 400–500 °C);
 - в) загрузка катализаторов в каждый реактор τ ;
- 2) зависимые переменные отклика:
 - а) октановое число продукта $f_1(T_j, \tau)$ (определяется как сумма произведений концентраций компонент на октановое число каждого компонента, при этом предполагается аддитивность от

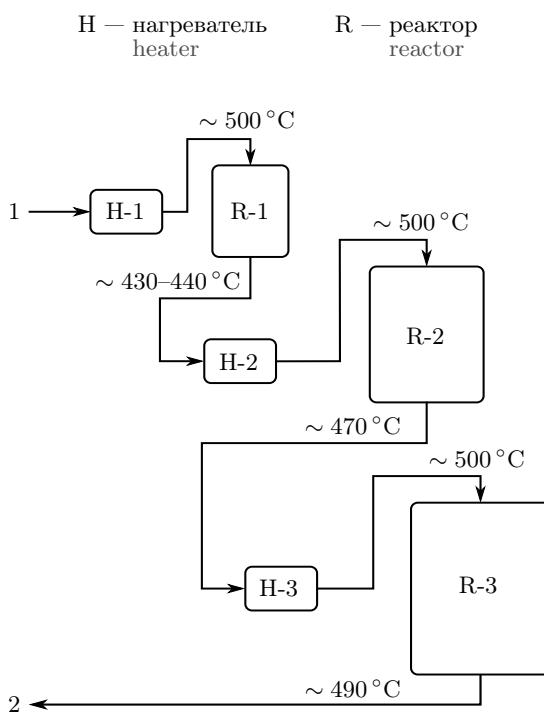


Рис. 1. Принципиальная схема реакторного блока установки каталитического риформинга бензина

Fig. 1. Schematic diagram of the reactor block of the gasoline catalytic reforming facility

октанового числа компонентов смеси; в задаче оптимизации октановое число смеси максимизируется)

$$f_1(T_j, \tau) = \sum_{i=1}^I y_i(T_j) \cdot ON_i \rightarrow \max, \quad (1)$$

где y_i — концентрация i -го компонента, мольные доли; ON_i — октановое число i -го компонента по исследовательскому методу;

б) выход целевого продукта риформата в реакторах $f_2(T_j, \tau)$ (представляет собой суммарный продукт процесса за вычетом газов крекинга и водорода)

$$f_2(T_j, \tau) = 1 - \sum_{i=1}^{I_{\text{Creck}}} y_i(T_j) - \Delta y_{\text{H}_2}(T_j) \rightarrow \max, \quad (2)$$

где I_{Creck} — число газов крекинга, Δy_{H_2} — изменение доли водорода в продукте;

в) выход отдельно бензола $f_3(T_j, \tau)$ и суммарный выход ароматических углеводородов $f_4(T_j, \tau)$

$$f_3(T_j, \tau) = y_6(T_j) \rightarrow \min, \quad (3)$$

$$f_4(T_j, \tau) = \sum_{i=6}^{11} y_i(T_j) \rightarrow \min. \quad (4)$$

4. Формирование датасета параметров управления процессом катализитического риформинга бензина. Любой алгоритм машинного обучения требует наличия соответствующего датасета для своей настройки. В нашем случае для формирования датасета использовалась кинетическая модель катализитического риформинга бензина в виде MATLAB-скрипта — решения прямой кинетической задачи. Скрипт представляет собой последовательное решение системы дифференциальных уравнений, описывающих изменения концентраций веществ со временем, а также изменения температуры в трех реакторах с промежуточным увеличением температуры, имитирующими подогрев смеси. Соответствующие кинетические параметры были рассчитаны в работах [5–7]. На вход скрипта подаются значение температуры, при которой сырье поступает в колонны, температуры промежуточных подогревов, а также параметры загрузки катализатора для соответствующих колонн. На выходе формируются значения критериев оптимальности: октановое число продукта (1), выход риформата (2), бензола (3) и ароматики (4). Такой скрипт позволяет сгенерировать датасет любой размерности в диапазоне допустимых значений варьируемых параметров.

Для генерации входных данных был использован Python-скрипт, создающий набор уникальных входных данных, формирующихся по определенным правилам: для всех трех температур диапазон — от 400 до 500 °C; диапазон изменения загрузки катализатора в первую колонну — от 2000 до 4000, во вторую колонну — как сумма значений из первого реактора и значений из интервала от 4000 до 8000, в третью колонну — как сумма значений из второго реактора и значений из интервала от 8000 до 25000.

Далее исходный MATLAB-скрипт был переделан на считывание значений из нового набора данных. Ввиду того, что кинетическая модель катализитического риформинга представляет собой систему из 40 дифференциальных нелинейных уравнений, численное решение при одних условиях занимает более одной минуты. При генерации обучающего датасета такие расчеты требуют значительных временных затрат. Для ускорения вычислений был реализован параллельный запуск прямых задач расчета с распределением по доступным ядрам процессора с помощью инструмента `parfor`, встроенного в MATLAB. В расчетах применялся процессор Ryzen 5 2600X с 6 ядрами, при этом MATLAB задействовал 6 рабочих процессов.

По результатам измерений время полной генерации датасета без распараллеливания составило $T_{\text{seq}} = 166$ мин, а с распараллеливанием — $T_{\text{par}} = 29$ мин. Отсюда находим итоговое ускорение $S = \frac{T_{\text{seq}}}{T_{\text{par}}} = \frac{166}{29} \approx 5.72$ и эффективность на ядро (всего 6 ядер) $\eta = \frac{S}{p} = \frac{5.72}{6} \approx 0.95$ ($\approx 95\%$).

Достигнутое ускорение близко к теоретическому пределу для 6 параллельных потоков, что указывает на малую долю непараллелизуемой части и невысокие накладные расходы.

Обучающая выборка сформирована объемом в 3850 уникальных комбинаций ключевых параметров. Объем выбран по практическому правилу для табличных данных: число наблюдений должно существенно

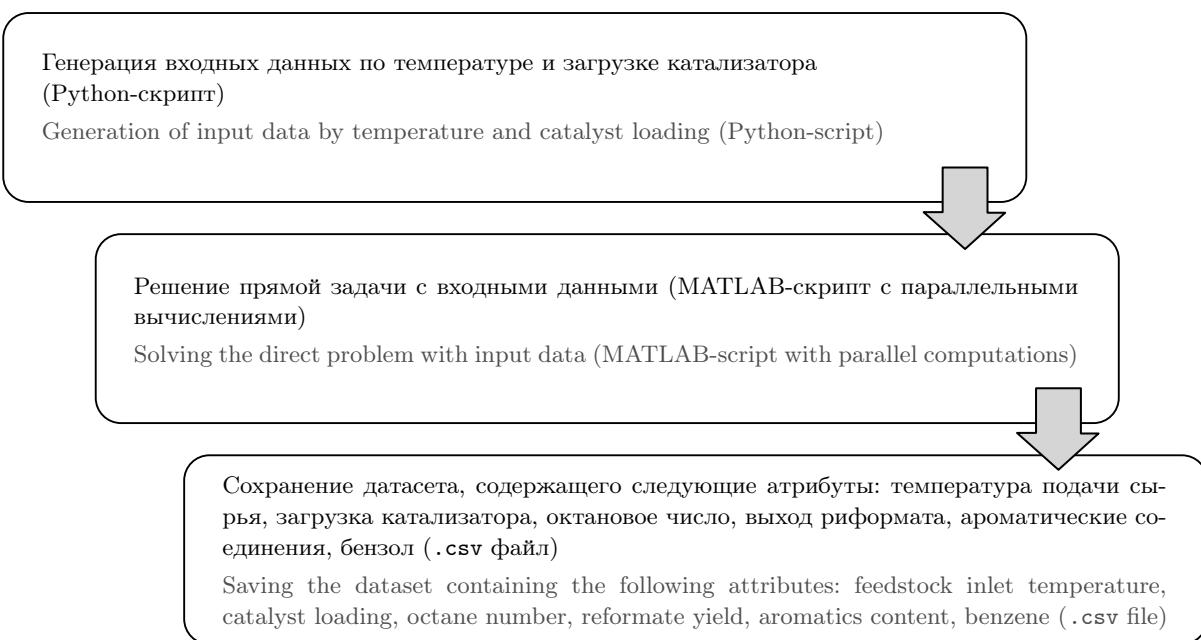


Рис. 2. Схема процесса генерации датасета параметров управления процессом катализитического риформинга бензина

Fig. 2. Scheme of the dataset generation for control parameters of the catalytic reforming process of gasoline

превосходить число входных признаков. В данной задаче на вход подаются 6 признаков, поэтому ориентир порядка 4×10^3 записей является разумным. Предварительная проверка показала, что обучение на 4000 и на 3850 наблюдениях дает различия метрик в пределах статистической погрешности. Это подтверждает достаточность выбранного объема данных и отсутствие признаков переобучения модели.

Общая схема процесса генерации датасета параметров управления процессом катализитического риформинга бензина представлена на рис. 2.

5. Алгоритмы машинного обучения для управления процессом катализитического риформинга бензина. Для решения рассматриваемой задачи был выбран подход, основанный на глубокой нейронной сети [12]. Такой выбор обусловлен способностью нейросети к аппроксимации сложных нелинейных зависимостей между признаками и целевыми значениями [13].

Первым шагом была подготовка данных, созданных ранее для обучения искусственной нейронной сети. Загруженные данные сначала разделяются на признаки и целевые переменные, а затем каждая группа делится таким образом, чтобы 20% группы оставались в качестве тестовой выборки, а оставшиеся 80% — в качестве обучающей. Затем каждый из наборов стандартизируется отдельно для предотвращения возможной утечки данных. Каждая группа данных приводится к нулевому среднему значению и к единичной дисперсии. Цель стандартизации — избегание смещения, а также улучшение сходимости данных [14].

Следующим шагом является поиск оптимальной архитектуры нейронной сети и ее гиперпараметров. Для этого используется библиотека Keras Tune и алгоритм Random Search [15]. Идея заключается в том, чтобы с помощью этих инструментов автоматически обучить, протестировать и сравнить нейросети, отличающиеся количеством слоев, количеством нейронов в слоях, функциями активации и скоростью обучения. Каждая модель обучается трижды для получения более надежной оценки. В качестве метрики для оценки производительности модели используется среднеквадратичная ошибка (MSE) [16, 17].

В ходе выполнения этого алгоритма получена оптимальная архитектура нейронной сети и соответствующий набор гиперпараметров, комбинация которых приводит модель к наименьшей ошибке на валидационной выборке [18]. Учитывая природу нейронных сетей, обоснование выбора их параметров является затруднительным. Можно лишь заключить, что найденные значения актуальны для обсуждаемого

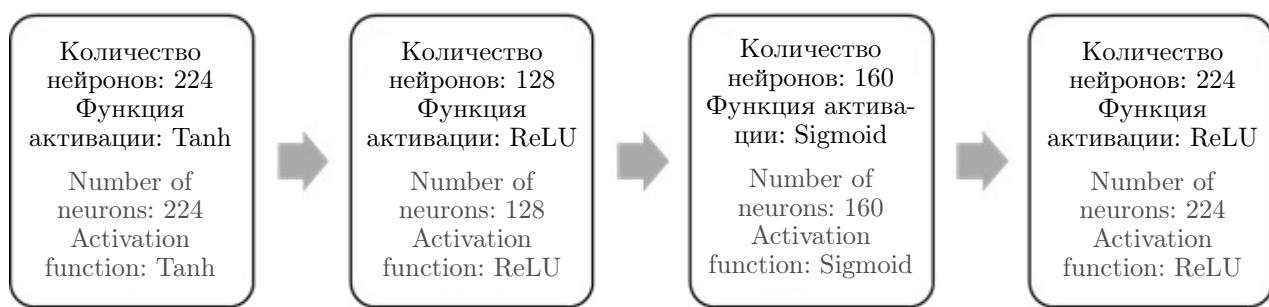


Рис. 3. Оптимальная архитектура скрытых слоев нейронной сети управления процессом катализитического риформинга бензина

Fig. 3. Optimal architecture of the hidden layers of the neural network for control of the catalytic reforming process of gasoline

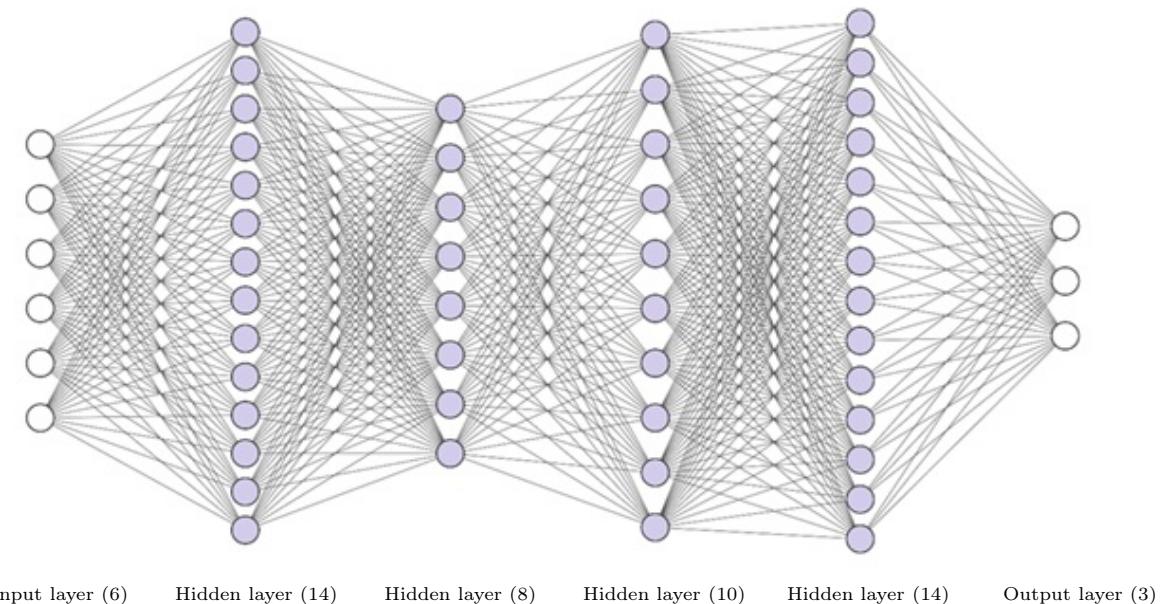


Рис. 4. Архитектура искусственной нейронной сети управления процессом катализитического риформинга бензина. Слои, которые помечены цветом на схеме, уменьшены в 16 раз для наглядности

Fig. 4. Architecture of artificial neural network for controlling the process of catalytic reforming of gasoline. Layers highlighted in color on the diagram are scaled down by a factor of 16 to visual clarity

набора данных именно с такими входными и целевыми значениями. Итоговая архитектура скрытых слоев модели показана на рис. 3.

Также следует уточнить, что число нейронов во входном слое идентично количеству переменных, передаваемых на вход нейросети. Такая же ситуация обстоит и с выходным слоем (нейронов столько же, сколько и целевых значений). Далее эта оптимальная модель была успешно обучена на полном наборе данных. Также она была проверена на тестовой выборке и показала удовлетворительные значения метрик MSE и R^2 . Итоговая архитектура модели показана на рис. 4.

6. Пример работы программы. Обученная модель представляет собой программу в виде одного Python-скрипта и сопутствующих файлов (модель, скейлеры данных и текстовые файлы для ввода и вывода), которые должны находиться в одной директории со скриптом. Данные записываются в файл `input.txt`, после чего запуск скрипта приводит к получению результатов как в окне программы, так и в файле `output.txt`.

Рассмотрим в качестве примера входных данных для обученной модели следующие значения:

- первый набор данных — [419; 478; 445; 2098; 9893; 32584];
- второй набор — [485; 407; 435; 3700; 10146; 22193];
- третий набор — [470; 461; 477; 2188; 7620; 28514].

В каждом наборе первые три числа представляют значения температуры загрузки сырья (°C) в первую, вторую и третью колонны соответственно. Оставшиеся три значения — тайминги загрузки катализатора в колонны с поступающим сырьем, относительно начала процесса.

Расчет относительной погрешности производится по формуле

$$\delta = \left| \frac{Y_{\text{пред}} - Y_{\text{факт}}}{Y_{\text{факт}}} \right| \cdot 100\%, \quad (5)$$

где $Y_{\text{пред}}$ — значения, предсказанные искусственной нейронной сетью, а $Y_{\text{факт}}$ — значения, вычисленные напрямую.

Полученные данные представлены в табл. 1–3.

Таблица 1. Пример предсказания параметров выхода процесса катализитического риформинга бензина для первого набора данных

Table 1. Example of the predicted output parameters for catalytic gasoline reforming process for the first data set

	Вычисленное значение Calculated value	Предсказанное значение Predicted value	Относительная погрешность, % Relative error, %
Октановое число Octane number	84.09	84.78	0.82
Выход бензола Benzene yield	0.0027	0.0028	3.84
Сумма ароматических соединений Total aromatic compounds	0.257	0.268	4.18

Таблица 2. Пример предсказания параметров выхода процесса катализитического риформинга бензина для второго набора данных

Table 2. Example of the predicted output parameters for catalytic gasoline reforming process for the second data set

	Вычисленное значение Calculated value	Предсказанное значение Predicted value	Относительная погрешность, % Relative error, %
Октановое число Octane number	78.26	78.48	0.29
Выход бензола Benzene yield	0.00252	0.00248	1.62
Сумма ароматических соединений Total aromatic compounds	0.231	0.252	9.07

Таблица 3. Пример предсказания параметров выхода процесса катализитического риформинга бензина для третьего набора данных

Table 3. Example of the predicted output parameters for catalytic gasoline reforming process for the third data set

	Вычисленное значение Calculated value	Предсказанное значение Predicted value	Относительная погрешность, % Relative error, %
Октановое число Octane number	91.07	90.91	0.17
Выход бензола Benzene yield	0.00340	0.00341	0.29
Сумма ароматических соединений Total aromatic compounds	0.301	0.293	2.56



7. Результаты и обсуждение. Аналогично предыдущему разделу следует провести такую же оценку точности, но уже для более объемного набора данных. Для этого были случайно синтезированы 385 уникальных комбинаций входных значений, а также вычислены соответствующие им целевые значения, найденные по кинетической модели. Полученные комбинации были использованы в качестве входных данных для искусственной нейронной сети. В результате работы сети был сформирован набор предсказанных значений, который в дальнейшем сравнивался с результатами, вычисленными аналитически. Оценка точности прогноза осуществлялась посредством расчета относительной погрешности по формуле (5).

По каждому “таргету” была вычислена относительная ошибка в процентах. На рис. 5–7 приведены диаграммы, на которых числа по оси абсцисс показывают номер вычислительного эксперимента, а по оси ординат — относительную погрешность предсказанных данных к фактическим. Оранжевая прямая демонстрирует среднее значение относительной погрешности.

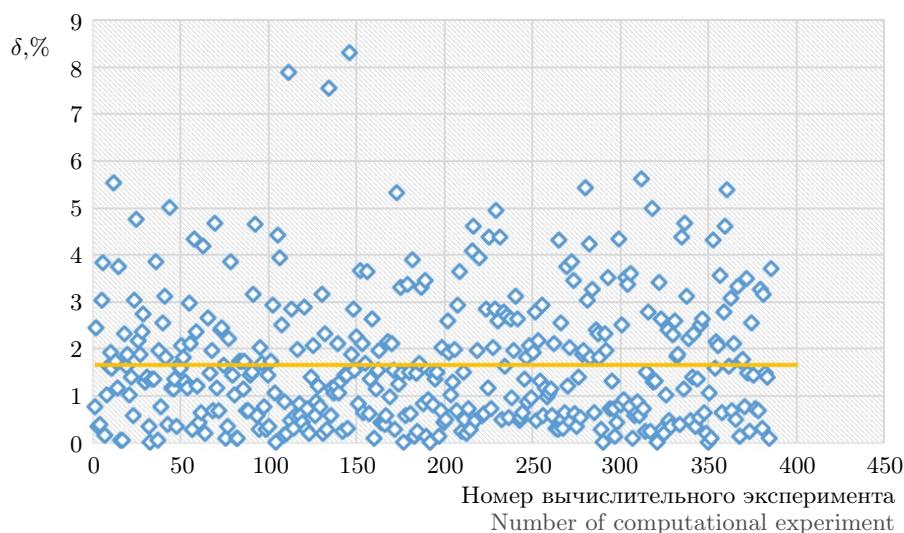


Рис. 5. Относительная погрешность расчетных значений октанового числа риформата каталитического риформинга бензина по искусственной нейронной сети (среднее значение 1.71%)

Fig. 5. Relative error of the calculated values of octane number of reformat of gasoline using artificial neural network (average value is 1.71%)

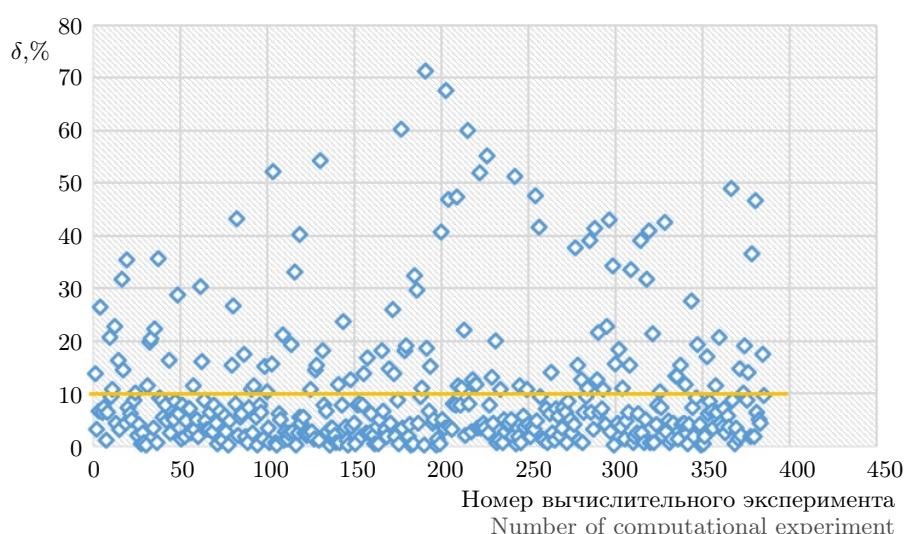


Рис. 6. Относительная погрешность расчетных значений содержания бензола в риформате каталитического риформинга бензина по искусственной нейронной сети (среднее значение 10.24%)

Fig. 6. Relative error of the calculated values of benzene content in reformat of catalytic reforming of gasoline using artificial neural network (average value is 10.24%)

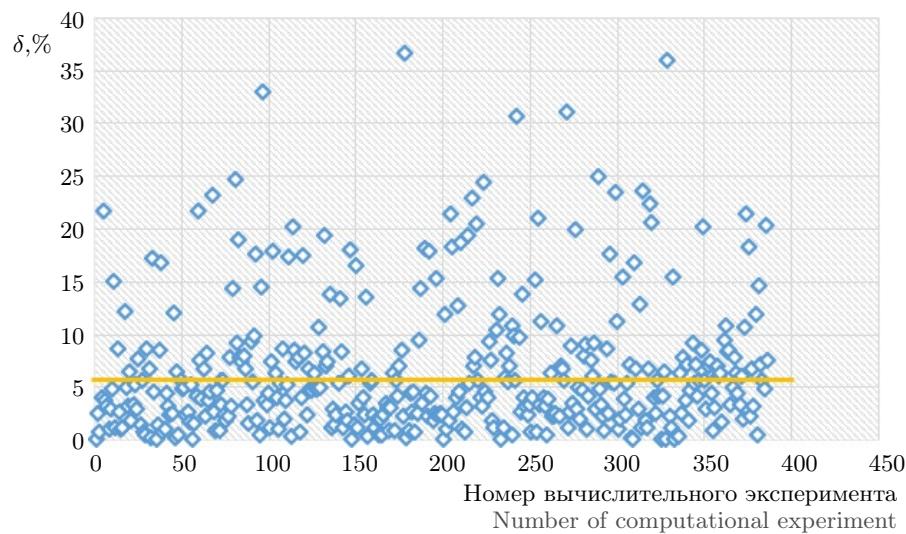


Рис. 7. Относительная погрешность расчетных значений содержания ароматических углеводородов в риформате катализитического риформинга бензина по искусственной нейронной сети (среднее значение 6.63%)

Fig. 7. Relative error of the calculated values of aromatic hydrocarbon content in reformat of catalytic reforming of gasoline using artificial neural network (average value is 6.63%)

Кроме того, большой объем вычислительных экспериментов позволяет выявить закономерности влияния параметров управления на критерии оптимизации. Например, обнаружено, что температура в третьем реакторе имеет сильную положительную корреляцию с октановым числом риформата. Это связано с тем, что в третьем реакторе в основном идут реакции крекинга, и в нем происходит существенный прирост бензола, который обладает наибольшим значением октанового числа [10].

Все полученные значения погрешностей остаются в допустимых пределах, что позволяет нам считать эту модель успешно обученной. Однако можно заметить, что с предсказанием содержания бензола модель справляется хуже всего, демонстрируя наибольшую погрешность среди всех целевых параметров. Вероятно, это связано с тем, что значения всегда меньше единицы и имеют порядок десятых, сотых или тысячных долей. В дальнейшем точность предсказания по содержанию бензола будет улучшена за счет искусственного изменения размерности данных или применения альтернативных подходов к обучению модели в рамках будущих исследований. Таким образом, подход с использованием глубокой нейронной сети позволяет построить модель, способную эффективно предсказывать целевые значения критерии оптимизации каталитического риформинга бензина. Предсказанные значения имеют некоторую погрешность, но это нивелируется почти мгновенным получением результата по сравнению с минутами, требуемыми для прямых вычислений. Это позволяет решать задачу управления сложным процессом каталитического риформинга бензина в режиме реального времени.

8. Заключение. Практическая значимость данной работы состоит в разработке предлагаемого метода оперативного вычисления оптимальных значений параметров каталитического риформинга бензина в зависимости от заданных целевых критериев:

- 1) максимизации выхода риформата при минимальном содержании ароматики;
- 2) максимизации выхода ароматики;
- 3) получения продукта с максимально возможным октановым числом.

Применение глубокой нейронной сети позволяет создать модель, которая в режиме реального времени предсказывает значения выхода риформата, содержание ароматических углеводородов и, в частности, бензола, октановое число смеси для каталитического риформинга бензина при заданных условиях — температуре и загрузке катализатора. Главная цель исследования заключалась в том, чтобы ускорить расчеты, сохраняя при этом достаточную точность моделирования. Эта цель была достигнута путем замены трудоемких прямых вычислений на быстрые предсказания, генерируемые обученной нейросетью.

Начальный набор данных для обучения был собран с помощью вычислений в MATLAB по математической модели кинетики каталитического риформинга. Время, необходимое для генерации обучающего

массива данных, было значительно уменьшено благодаря использованию параллельных вычислений в расчетной программе. Это позволило получить нужный объем информации с оптимальным соотношением затрат и точности.

Во время оптимизации архитектуры нейросети были определены такие параметры, как входной слой, состоящий из 6 нейронов, а также выходной слой, состоящий из 3 нейронов с линейной активацией. Внутренние слои представлены четырьмя уровнями, содержащими 224, 128, 160 и 224 нейрона соответственно. Функции активации этих слоев — \tanh , ReLU, sigmoid и ReLU. Выбранная конфигурация с learning rate равным 0.01 показала лучшие результаты по среднеквадратичной ошибке.

Наличие незначительных погрешностей в полученных результатах не умаляет практической ценности разработанной модели. Ее главное преимущество — быстродействие, что очень важно для задач управления в реальном времени. В отличие от традиционных методов, где время расчетов может длиться более минуты, нейросеть позволяет значительно ускорить процесс. Данный подход может быть полезен на нефтезаводах, работающих с каталитическим риформингом. Фактически, разработанная модель служит для быстрой симуляции процесса, открывая возможности для интеграции в системы поддержки принятия решений. В будущем планируется разработать удобный программный интерфейс для взаимодействия с моделью, что позволит расширить ее применение в промышленных условиях.

Работа выполнена в рамках темы государственного задания Института нефтехимии и катализа УФИЦ РАН “Компьютерное моделирование химических и химико-технологических процессов: разработка и тестирование новых алгоритмов и программ” (FMRS-2025-0031).

Список литературы

1. Зиннатуллин В.Ф., Коледин С.Н. Метод минимизации остатков в процессе компаундирования бензинов, основанный на интеграции линейного программирования и нейронной сети // Электротехнические и информационные комплексы и системы. 2024. **20**, № 1. 132–140. doi [10.17122/1999-5458-2024-20-1-132-140](https://doi.org/10.17122/1999-5458-2024-20-1-132-140).
2. Цымблер М.Л., Юртин А.А. Восстановление пропущенных значений временного ряда на основе совместного применения аналитических алгоритмов и нейронных сетей // Вычислительные методы и программирование. 2023. **24**, № 3. 243–259. doi [10.26089/NumMet.v24r318](https://doi.org/10.26089/NumMet.v24r318).
3. Голубев В.И., Анисимов М.И. Опыт применения сверточных нейронных сетей к обратным задачам сейсмической разведки // Вычислительные методы и программирование. 2024. Специальный выпуск. 46–61. doi [10.26089/NumMet.2024s04](https://doi.org/10.26089/NumMet.2024s04).
4. Шуляка С.Е. Современные аспекты применения промышленной фракции риформинга бензина // Технологии нефти и газа. 2014. № 3(92). 25–28.
5. Спивак С.И., Коледин К.Ф., Коледин С.Н., Губайдуллин И.М. Информационно-вычислительная аналитическая система теоретической оптимизации каталитических процессов // Прикладная информатика. 2017. **12**, № 1(67). 39–49.
6. Sakharov M., Koledina K., Gubaydullin I. Optimal control of hydrocarbons' hydrogenation with catalysts // Mathematics. 2024. **12**, N 22. Article Number 3570. doi [10.3390/math12223570](https://doi.org/10.3390/math12223570).
7. Zainullin R.Z., Koledina K.F., Akhmetov A.F., Gubaidullin I.M. Kinetics of the catalytic reforming of gasoline // Kinetics and Catalysis. 2017. **58**, N 3. 279–289. [Кинетика и катализ 2017. **58**, № 3. 292–303.]
8. Zaynullin R.Z., Koledina K.F., Gubaydullin I.M., Akhmetov A.F., Koledin S.N. Kinetic model of catalytic gasoline reforming with consideration for changes in the reaction volume and thermodynamic parameters // Kinetics and Catalysis **61**, N 4. 613–622 (2020) [Кинетика и катализ 2020. **61**, № 4. 550–559.]
9. Koledina K.F., Gubaydullin I.M., Koledin S.N., Zagidullin Sh.G. Multicriteria optimization of gasoline catalytic reforming temperature regime based on a kinetic model with grouped hydrocarbons // Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis 2022. **135**, N 1. 135–153. doi [10.1007/s11144-021-02070-0](https://doi.org/10.1007/s11144-021-02070-0).
10. Iranshahi D., Amiri S., Karimi M., et al. Modeling and simulation of a novel membrane reactor in a continuous catalytic regenerative naphtha reformer accompanied with a detailed description of kinetics // Energy & Fuels. 2013. **27**, N 7, 4084–4070.
11. Diveev A.I., Konstantinov S.V., Sofronova E.A. A comparison of evolutionary algorithms and gradient-based methods for the optimal control problem // Proc. of the 2018 5th Int. Conf. on Control, Decision and Information Technologies (CoDIT), Thessaloniki, Greece, April 10–13, 2018. 259–264. doi [10.1109/CoDIT.2018.8394805](https://doi.org/10.1109/CoDIT.2018.8394805).
12. Hawkins S., He H., Williams G., Baxter R. Outlier detection using replicator neural networks // In: Data Warehousing and Knowledge Discovery. Lecture Notes in Computer Science. Vol. 2454. Berlin, Springer, 2002. 170–180. doi [10.1007/3-540-46145-0_17](https://doi.org/10.1007/3-540-46145-0_17).
13. Ясницкий Л.Н., Плотникова Е.Г. Нейросетевой алгоритм выявления и удаления выбросов в зашумленных наборах данных // Прикладная информатика. 2024. **19**, № 5(113). 88–100.

14. Дли М.И., Пучков А.Ю., Максимкин М.В. Программная модель интеллектуальной системы управления сложными процессами переработки мелкорудного сырья // Прикладная информатика. 2024. **19**, № 6(114). 96–112.
15. Goodfellow I., Bengio Y., Courville A. Deep learning. Cambridge, MA: MIT Press, 2016.
16. Aggarwal C.C. Neural networks and deep learning: a textbook. Champaign: Springer, 2018.
17. Howard J., Gugger S. Deep learning for coders with fastai and PyTorch. Sebastopol, CA: O'Reilly Media, 2020.
18. Diveev A.I., Konstantinov S.V., Safonova E.A. A comparison of evolutionary algorithms and gradient-based methods for the optimal control problem // Proc. of the 2018 Int. Conf. on Control, Decision and Information Technologies (CoDIT), Thessaloniki, Greece, April 10–13, 2018. 259–264.

Получена
31 июля 2025 г.

Принята
28 августа 2025 г.

Опубликована
6 октября 2025 г.

Информация об авторах

Камила Феликсовна Коледина — д.ф.-м.н., профессор; 1) Уфимский государственный нефтяной технический университет, кафедра информационных технологий и прикладной математики, ул. Космонавтов, 1, 450044, Уфа, Российская Федерация; 2) Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, лаборатория математической химии, пр-кт Октября, 141, 450075, Уфа, Российская Федерация.

Радмир Ришатович Минигалиев — студент; Уфимский государственный нефтяной технический университет, кафедра информационных технологий и прикладной математики, ул. Космонавтов, 1, 450044, Уфа, Российская Федерация.

Сергей Николаевич Коледин — к.ф.-м.н., доцент; Финансовый университет при Правительстве Российской Федерации, кафедра информационных технологий, Ленинградский пр-кт, 49/2, 125167, Москва, Российская Федерация.

References

1. V. F. Zinnatullin and S. N. Koledin, “Method of Minimizing Residues in the Process of Gasoline Compounding Based on the Integration of Linear Programming and Neural Network,” Electrical and Information Complexes and Systems **20** (1), 132–140 (2024). doi [10.17122/1999-5458-2024-20-1-132-140](https://doi.org/10.17122/1999-5458-2024-20-1-132-140).
2. M. L. Zymbler, A. A. Yurtin, “Imputation of missing values of a time series based on joint application of analytical algorithms and neural networks,” Numerical Methods and Programming (Vychisl. Metody Programm.) **24** (3), 243–259 (2023). doi [10.26089/NumMet.v24r318](https://doi.org/10.26089/NumMet.v24r318).
3. V. I. Golubev, M. I. Anisimov, “Experience of applying convolutional neural networks to inverse problems of seismic exploration,” Numerical Methods and Programming (Vychisl. Metody Programm.) Special Issue, 46–61 (2024). doi [10.26089/NumMet.2024s04](https://doi.org/10.26089/NumMet.2024s04).
4. S. E. Shuljaka, “Current Aspects of Industrial Reformate Fraction Utilization,” Technologies of Oil and Gas, N 3(92), 25–28 (2014).
5. S. I. Spivak, K. F. Koledina, S. N. Koledin, and I. M. Gubaydullin, “The Information–Analytical System of Theoretical Computing Optimization of Catalytic Processes,” Applied Informatics **12** (1), 39–49 (2017).
6. M. Sakharov, K. Koledina, and I. Gubaydullin, “Optimal Control of Hydrocarbons’ Hydrogenation with Catalysts,” Mathematics **12** (22), Article Number 3570 (2024). doi [10.3390/math12223570](https://doi.org/10.3390/math12223570).
7. R. Z. Zainullin, K. F. Koledina, A. F. Akhmetov, and I. M. Gubaidullin, “Kinetics of the Catalytic Reforming of Gasoline,” Kinet. Catal. **58** (3), 279–289 (2017) [Kinetika i Kataliz **58** (3), 292–303 (2017)].
8. R. Z. Zaynullin, K. F. Koledina, I. M. Gubaydullin, et al., “Kinetic Model of Catalytic Gasoline Reforming with Consideration for Changes in Reaction Volume and Thermodynamic Parameters,” Kinet. Catal. **61** (4), 613–622 (2020) [Kinetika i Kataliz **61** (4), 550–559 (2020)].
9. K. F. Koledina, I. M. Gubaydullin, S. N. Koledin, and Sh. G. Zagidullin, “Multicriteria Optimization of Gasoline Catalytic Reforming Temperature Regime Based on a Kinetic Model with Grouped Hydrocarbons,” React. Kinet. Mech. Catal. **135** (1), 135–153 (2022). doi [10.1007/s11144-021-02070-0](https://doi.org/10.1007/s11144-021-02070-0).
10. D. Iranshahi, S. Amiri, M. Karimi, et al., “Modeling and Simulation of a Novel Membrane Reactor in a Continuous Catalytic Regenerative Naphtha Reformer Accompanied with a Detailed Description of Kinetics,” Energy & Fuels **27** (7), 4048–4070 (2013).



11. A. I. Diveev, S. V. Konstantinov, and E. A. Sofronova, “A Comparison of Evolutionary Algorithms and Gradient-Based Methods for the Optimal Control Problem,” Proc. of the 2018 5th Int. Conf. on Control, Decision and Information Technologies (CoDIT), Thessaloniki, Greece, April 10–13, 2018, pp. 259–264. doi [10.1109/CoDIT.2018.8394805](https://doi.org/10.1109/CoDIT.2018.8394805).
12. S. Hawkins, H. He, G. Williams, and R. Baxter, “Outlier Detection Using Replicator Neural Networks,” in *Data Warehousing and Knowledge Discovery*, Lecture Notes in Computer Science, Vol. 2454. Springer, Berlin, 2002, pp. 170–180. doi [10.1007/3-540-46145-0_17](https://doi.org/10.1007/3-540-46145-0_17).
13. L. N. Yasnitsky and E. G. Plotnikova, “A Neural Network Algorithm for Identifying and Removing Outliers in Noisy Data Sets,” *Applied Informatics* **19** (5), 88–100 (2024).
14. M. Dli, A. Puchkov, and M. Maksimkin, “Software Model of an Intelligent Control System for Complex Processes of Small-Scale Ore Processing,” *Applied Informatics* **19** (6), 96–112 (2024).
15. I. Goodfellow, Y. Bengio, and A. Courville, *Deep Learning*. MIT Press, Cambridge, MA, 2016.
16. C. C. Aggarwal, *Neural Networks and Deep Learning: A Textbook*. Springer, Champaign, 2018.
17. J. Howard and S. Gugger, *Deep Learning for Coders with Fastai and PyTorch*. O'Reilly Media, Sebastopol, CA, 2020.
18. A. I. Diveev, S. V. Konstantinov, and E. A. Safonova, “A Comparison of Evolutionary Algorithms and Gradient-Based Methods for the Optimal Control Problem,” Proc. of the 2018 Int. Conf. on Control, Decision and Information Technologies (CoDIT), Thessaloniki, Greece, April 10–13, 2018. 259–264.

Received

July 31, 2025

Accepted

August 28, 2025

Published

October 6, 2025

Information about the authors

Kamila F. Koledina — Ph.D., professor; 1) Ufa State Petroleum Technological University, Department of Information Technology and Applied Mathematics, Kosmonavtov ulitsa, 1, 450044, Ufa, Russia; 2) Institute of Petrochemistry and Catalysis of Russian Academy of Sciences, Laboratory of Mathematical Chemistry, October prospekt, 141, 450075, Ufa, Russia.

Radmir R. Minigaliev — Student; Ufa State Petroleum Technological University, Department of Information Technology and Applied Mathematics, Kosmonavtov ulitsa, 1, 450044, Ufa, Russia.

Sergey N. Koledin — Ph.D., Associate Professor; Financial University under the Government of the Russian Federation, Department of Information Technology, Leningradskiy prospekt, 49/2, 125167, Moscow, Russia.