

ISSN 1998-7927(print) ISSN 2664-6498 (online)

DOI: <https://doi.org/10.33216/1998-7927-2026-301-3-87-93>

УДК 681.322

## ВПЛИВ ФУНКЦІЇ АКТИВАЦІЇ НЕЙРОННОЇ МЕРЕЖІ НА АПРОКСИМАЦІЮ ДАНИХ ОСНОВНИХ КАНАЛІВ КЕРУВАННЯ В ПЕРІОД ПУСКУ РЕАКТОРУ СИНТЕЗУ ОЦТОВОЇ КИСЛОТИ

Поркуян О.В., Самойлова Ж.Г.

## THE INFLUENCE OF THE ACTIVATION FUNCTION OF A NEURAL NETWORK ON THE APPROXIMATION OF DATA FROM THE MAIN CONTROL CHANNELS DURING THE START-UP OF AN ACETIC ACID SYNTHESIS REACTOR

Porkuian O.V., Samojlova Zh.G.

Сучасні промислові технології синтезу оцтової кислоти та її похідних переважно базуються на високоефективних каталітичних методах, серед яких провідне місце посідає карбонілювання метанолу (процеси Monsanto та Cativa). Ефективність таких виробництв безпосередньо залежить від роботи хімічних реакторів, що становлять апаратну основу галузі. В умовах високої ринкової конкуренції критично важливим є забезпечення суворої відповідності продукції галузевим специфікаціям, що потребує точного моніторингу та контролю вхідних і вихідних параметрів технологічного процесу.

Найбільш поширений підхід передбачає використання нейромереж як моделей «чорної скриньки». На основі емпіричних даних об'єкта підбирається архітектура мережі та здійснюється її навчання (налаштування вагових коефіцієнтів) для досягнення максимальної адекватності моделі. Надалі отримані моделі інтегруються в системи предиктивного керування (Model Predictive Control, MPC).

Вихід реактора синтезу оцтової кислоти (зокрема в процесі карбонілювання метанолу на родієвому каталізаторі) на робочий режим є складним динамічним процесом. Під час пуску система переходить із інертного стану в активну фазу реакції, що супроводжується різким зростанням тиску та інтенсивним екзотермічним ефектом.

Застосування штучних нейронних мереж на цьому етапі дає змогу мінімізувати перерегулювання — критичну проблему керування, що загрожує спрацьовуванням систем аварійного захисту та скиданням параметрів.

Чисельне моделювання здійснювалося в середовищі MATLAB (версія 2021) із застосуванням ітераційної процедури структурного синтезу нейронної мережі. Емпіричною базою дослідження слугували статистичні дані динаміки реактора синтезу оцтової кислоти у пусковий період.

Похибки моделювання за оксидом вуглецю майже ідентичні результатам за метанолом, що вказує на симетричність впливу обох реагентів на вихідні параметри реактора. Для каналів регулювання тиску, температури та рівня незалежно від вхідного впливу (метанол чи CO) оптимальною є архітектура з лінійною функцією активації *purelin* на вихідному шарі. Це забезпечує високу точність апроксимації з похибкою не більше 1.6%.

Канал концентрації оцтової кислоти виявився найбільш складним для моделювання за обома входами (мінімальна похибка 53.71%). Це вказує на те, що для прогнозування якості продукту в момент пуску стандартної структури мережі недостатньо — необхідно враховувати динамічну затримку (інерційність) або збільшувати глибину мережі.

**Ключові слова:** нейронні мережі, зворотне поширення помилки, реактор

**Вступ.** Завдяки своїм унікальним властивостям оцтова кислота є незамінною у багатьох сферах. У харчовому секторі вона допомагає зберігати продукти та входить до складу популярних соусів. У легкій промисловості з неї отримують синтетичні волокна (ацетилцелюлозу або штучний шовк) та

стійкі барвники для тканин. Окрім того, вона є сировиною у хімічному синтезі ацетону та фармацевтичному виробництві, зокрема при створенні аспірину.

Сучасні промислові технології синтезу оцтової кислоти та її похідних переважно базуються на високоефективних каталітичних методах, серед яких провідне місце посідає карбонілювання метанолу (процеси Monsanto та Cativa) [1–8]. Ефективність таких виробництв безпосередньо залежить від роботи хімічних реакторів, що становлять апаратну основу галузі. В умовах високої ринкової конкуренції критично важливим є забезпечення суворої відповідності продукції галузевим специфікаціям, що потребує точного моніторингу та контролю вхідних і вихідних параметрів технологічного процесу [9].

Проектування, оптимізація та керування складними хіміко-технологічними системами є багатокритеріальними завданнями, де традиційні аналітичні методи часто виявляються малоефективними. Згідно з результатами численних досліджень [10, 11], для моделювання таких нелінійних процесів доцільно застосовувати штучні нейронні мережі (ШНМ). На відміну від лінійних методів керування, які в умовах нелінійності призводять до зниження продуктивності, ШНМ демонструють високу ефективність в оптимізації роботи каталізаторів, розпізнаванні сигналів та управлінні великотоннажними промисловими установками.

Найбільш поширений підхід передбачає використання нейромереж як моделей «чорної скриньки». На основі емпіричних даних об'єкта підбирається архітектура мережі та здійснюється її навчання (налаштування вагових коефіцієнтів) для досягнення максимальної адекватності моделі. Надалі отримані моделі інтегруються в системи предиктивного керування (Model Predictive Control, MPC). Ефективність такої стратегії підтверджена як теоретичними розробками [12–15], так і практичним впровадженням на промислових підприємствах [16–18].

Вихід реактора синтезу оцтової кислоти (зокрема в процесі карбонілювання метанолу на родієвому каталізаторі) на робочий режим є складним динамічним процесом. Під час пуску система переходить із інертного стану в активну фазу реакції, що супроводжується різким зростанням тиску та інтенсивним екзотермічним ефектом.

Застосування штучних нейронних мереж на цьому етапі дає змогу мінімізувати

перерегулювання — критичну проблему керування, що загрожує спрацьовуванням систем аварійного захисту та скиданням параметрів. Попередні дослідження [19] підтвердили можливість моделювання алгоритмів керування пуском реактора за допомогою середовища MATLAB (Neural Network Toolbox), що забезпечує стабільну ідентифікацію нелінійних характеристик процесу навіть у нестабільних перехідних станах.

**Метою даної роботи** є розробка та дослідження нейромережевої моделі з алгоритмом зворотного поширення помилки для керування реактором синтезу оцтової кислоти в пусковий період. У межах дослідження проведено порівняльний аналіз впливу різних функцій активації (ФА) (hardlim, tansig, logsig, purelin) прихованого та вихідного шарів на точність апроксимації технологічних параметрів. Отримані результати обґрунтовують доцільність інтеграції розробленої мережі в автоматизовані системи керування реактором для стабілізації перехідних процесів.

**Викладання основного матеріалу.** Чисельне моделювання здійснювалося в середовищі MATLAB (версія 2021) із застосуванням ітераційної процедури структурного синтезу нейронної мережі. Емпіричною базою дослідження слугували статистичні дані динаміки реактора синтезу оцтової кислоти у пусковий період. Об'єкт моделювання розглядався як система з декількома входами та виходами згідно зі структурно-логічною схемою, обґрунтованою у роботі [20].

У роботі досліджено тришарову архітектуру нейронної мережі зі зворотним поширенням помилки. Вхідний шар адаптовано під розмірність вектора вхідних параметрів, а перший прихований шар містив 49 нейронів (рис. 1). Кількість елементів вихідного шару відповідала числу каналів керування реактором, що забезпечувало формування прогнозованих значень для задач регресійного аналізу.

Ключовим етапом дослідження став аналіз впливу функцій активації на точність апроксимації нелінійних залежностей пускового режиму. Експериментально порівнювалися комбінації функцій hardlim, tansig, logsig та purelin для прихованого та вихідного шарів. Такий підхід дозволив визначити оптимальну конфігурацію мережі для ефективного відпрацювання основних каналів керування в умовах перехідних процесів

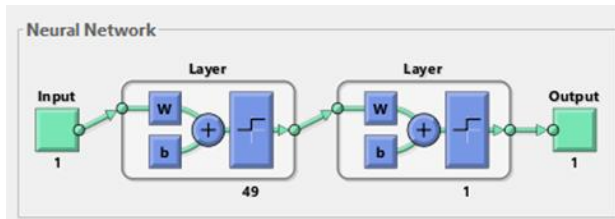


Рис. 1. Архітектура нейронної мережі

Вибірка даних містила 49 елементів. Мережа навчалася протягом 50 циклів.

Результати моделювання нейронної мережі (НМ) за каналами керування реактором синтезу оцтової кислоти у пусковий період наведено в табл. 1 та 3. Для оцінки адекватності моделей розраховано відносну похибку апроксимації.

Таблиця 1

Відносні похибки досліджуваної нейронної мережі для каналів з витратою метанолу

Канал	ФА прихованого шару	ФА вихідного шару	Відносна похибка
1	2	3	4
Витрата метанолу-тиск у реакторі	hardlim	hardlim	0.9906
		tansig	0.9644
		logsig	0.9644
		purelin	0.0076
	tansig	hardlim	0.9993
		tansig	0.9644
		logsig	0.9651
		purelin	0.0034
	logsig	hardlim	0.9651
		tansig	0.9658
		logsig	0.9644
		purelin	0.0016
	purelin	hardlim	1
		tansig	1.0356
		logsig	1
		purelin	0.0014
Витрата метанолу-температура реакційної суміші в реакторі	hardlim	hardlim	0.9990
		tansig	0.9947
		logsig	0.9947
		purelin	0.0068
	tansig	hardlim	0.9987
		tansig	0.9949
		logsig	0.9949
		purelin	0.0020
	logsig	hardlim	0.9999
		tansig	0.9947
		logsig	0.9947
		purelin	0.0017
	purelin	hardlim	0.9947
		tansig	0.9947
		logsig	1
		purelin	0.0016

Продовження табл. 1

1	2	3	4
Витрата метанолу-рівень реакційної суміші в реакторі	hardlim	hardlim	0.9995
		tansig	0.9868
		logsig	0.9868
		purelin	0.0189
	tansig	hardlim	0.9976
		tansig	0.9868
		logsig	0.9868
		purelin	0.0178
	logsig	hardlim	0.9976
		tansig	0.9868
		logsig	0.9868
		purelin	0.0164
	purelin	hardlim	1
		tansig	1.0132
		logsig	1
		purelin	0.0149
Витрата метанолу-концентрація оцтової кислоти на виході реактора	hardlim	hardlim	0.9106
		tansig	0.7837
		logsig	0.5538
		purelin	5459
	tansig	hardlim	0.8511
		tansig	0.6179
		logsig	0.5538
		purelin	4124
	logsig	hardlim	0.6860
		tansig	0.5372
		logsig	0.5372
		purelin	4449
	purelin	hardlim	0.5371
		tansig	2.5371
		logsig	1
		purelin	4183

Аналіз даних табл. 1 свідчить, що для каналів «витрата метанолу — тиск», «витрата метанолу — температура» та «витрата метанолу — рівень» мінімальну похибку (0,0014, 0,0016 та 0,0149 відповідно) забезпечує лінійна функція активації purelin у прихованому та вихідному шарах. Це свідчить про близький до лінійного характер взаємозв'язків між цими параметрами у момент пуску реактора. Для каналу «витрата метанолу — концентрація продукту» оптимальною конфігурацією є поєднання функцій purelin (прихований шар) та hardlim (вихідний шар) із похибкою 0,5371.

При цьому, найвища точність досягнута для каналів «витрата метанолу — тиск» (похибка 0.0014) та «витрата метанолу — температура» (0.0016). Середня точність спостерігається для каналу «витрата метанолу — рівень» (0.0149). Низька точність зафіксована для каналу «витрата метанолу — концентрація кислоти», де мінімальна похибка становить 0.5371 (при

комбінації purelin у прихованому та hardlim у вихідному шарі). Це вказує на складну нелінійність або інерційність процесу зміни концентрації, що потребує складніших моделей.

Використання функцій hardlim, tansig та logsig у вихідному шарі для перших трьох каналів призводить до критичного зростання похибки (до 0.96–1.0), що робить такі конфігурації непридатними для практичного застосування. Для каналу концентрації оцтової кислоти використання функції purelin у вихідному шарі призводить до аномально високих значень похибки (понад 4000), що свідчить про математичну розбіжність моделі при такій структурі.

Загальна рекомендація: Для створення системи керування реактором у пусковий період доцільно використовувати нейромережову структуру з функціями purelin-purelin, за винятком каналу концентрації, який потребує специфічного підходу (purelin-hardlim) або додаткового дослідження. Оптимальні параметри нейронної мережі за розглянутими каналами наведено в таблиці 2.

Таблиця 2

**Оптимальні параметри нейронної мережі за каналами керування з витратою метанолу**

Канал керування (витрата метанолу — параметр)	ФА прихованого шару	ФА вихідного шару	Мінімальна відносна похибка
Тиск у реакторі	purelin	purelin	0.0014
Температура суміші	purelin	purelin	0.0016
Рівень реакційної суміші	purelin	purelin	0.0149
Концентрація оцтової кислоти	purelin	hardlim	0.5371

Проаналізуємо результати для каналів з витратою оксиду вуглецю (Таблиця 3).

Згідно з табл. 3, для каналів керування за витратою оксиду вуглецю (параметри: тиск, температура, рівень) найкращі результати також отримано при використанні функції purelin, де похибки становили 0,0013, 0,0016 та 0,0075 відповідно. Винятком є канал «витрата оксиду вуглецю — концентрація», де найменшу похибку (0,5371) забезпечило використання функції logsig.

Таблиця 3

**Відносні похибки досліджуваної нейронної мережі для каналів з витратою оксиду вуглецю**

Канал	ФА прихованого шару	ФА вихідного шару	Відносна похибка
1	2	3	4
Витрата оксиду вуглецю - тиск у реакторі	hardlim	hardlim	0.9956
		tansig	0.9644
		logsig	0.9644
		purelin	0.0041
	tansig	hardlim	0.9942
		tansig	0.9644
		logsig	0.9651
		purelin	0.0014
	logsig	hardlim	0.9717
		tansig	0.9644
		logsig	0.9644
		purelin	0.0013
purelin	hardlim	0.9644	
	tansig	1.0356	
	logsig	0.9644	
	purelin	0.0013	
Витрата оксиду вуглецю - температура реакційної суміші в реакторі	hardlim	hardlim	0.9993
		tansig	0.9947
		logsig	0.9947
		purelin	0.0026
	tansig	hardlim	0.9993
		tansig	0.9947
		logsig	0.9947
		purelin	0.0019
	logsig	hardlim	0.9991
		tansig	0.9947
		logsig	0.9947
		purelin	0.0016
purelin	hardlim	0.9947	
	tansig	1.0053	
	logsig	0.9947	
	purelin	0.0016	
Витрата оксиду вуглецю - рівень реакційної суміші в реакторі	hardlim	hardlim	0.9949
		tansig	0.9868
		logsig	0.9868
		purelin	0.0193
	tansig	hardlim	0.9984
		tansig	0.9868
		logsig	0.9868
		purelin	0.0167
	logsig	hardlim	0.9984
		tansig	0.9868
		logsig	0.9868
		purelin	0.0223
purelin	hardlim	1	
	tansig	0.9868	
	logsig	1	
	purelin	0.0158	

Продовження табл. 3

1	2	3	4
Витрата оксиду вуглецю - концентрація оцтової кислоти на виході реактора	hardlim	hardlim	1
		tansig	0.9886
		logsig	0.5538
		purelin	3132
	tansig	hardlim	0.5724
		tansig	0.5372
		logsig	0.5373
		purelin	2931
	logsig	hardlim	0.9479
		tansig	0.5373
		logsig	0.5371
		purelin	35960
purelin	hardlim	1	
	tansig	2.5371	
	logsig	1	
	purelin	4229	

Для каналів тиску та температури функції logsig та purelin у прихованому шарі дають ідентично високу точність (0.0013–0.0016), що вказує на стійкість моделі до вибору активації прихованих нейронів за умови лінійного виходу.

Таблиця 4

**Оптимальні конфігурації за критерієм мінімальної похибки за каналами з витратою оксиду вуглецю**

Канал керування (витрата CO — параметр)	ФА прихованого шару	ФА вихідного шару	Мінімальна відносна похибка
Тиск у реакторі	logsig / purelin	purelin	0.0013
Температура суміші	logsig / purelin	purelin	0.0016
Рівень реакційної суміші	purelin	purelin	0.0158
Концентрація оцтової кислоти	logsig	logsig	0.5371

На відміну від метанолу (де кращим був hardlim), для оксиду вуглецю в каналі концентрації найкращий результат (0.5371) отримано при використанні логістичної сигмоїди (logsig) в обох шарах. Це свідчить про суттєву нелінійність взаємозв'язку «витрата CO — вихід продукту». Використання функції purelin на виході для прогнозування концентрації призводить до катастрофічних похибок (до 35960), що робить таку конфігурацію абсолютно неприпустимою для цього каналу. Оптимальні конфігурації за критерієм мінімальної похибки за каналами з витратою оксиду вуглецю зведено в таблицю 4.

**Висновки.** Встановлено, що лінійна нейронна мережа зі зворотним поширенням помилки ефективно апроксимує технологічні дані для шести основних каналів керування. Оптимальні результати зведено в таблицю 5.

Похибки моделювання за оксидом вуглецю майже ідентичні результатам за метанолом, що вказує на симетричність впливу обох реагентів на вихідні параметри реактора. Для каналів регулювання тиску, температури та рівня незалежно від вхідного впливу (метанол чи CO) оптимальною є архітектура з лінійною функцією активації purelin на вихідному шарі. Це забезпечує високу точність апроксимації з похибкою не більше 1.6%.

Канал концентрації оцтової кислоти виявився найбільш складним для моделювання за обома входами (мінімальна похибка 53.71%). Це вказує на те, що для прогнозування якості продукту в момент пуску стандартної структури мережі недостатньо — необхідно враховувати динамічну затримку (інерційність) або збільшувати глибину мережі. Цікавим є той факт, що для каналу метанолу найкраще спрацював hardlim (порогова функція), а для оксиду вуглецю — logsig (сигмоїда). Це свідчить про різну природу впливу реагентів на динаміку накопичення продукту.

Таблиця 5

**Оптимальні параметри нейронної мережі для керування реактором**

Вхідний канал (керуюча дія)	Вихідний параметр (регульована величина)	ФА прихованого шару	ФА вихідного шару	Мінімальна відносна похибка
Витрата метанолу	Тиск у реакторі	purelin	purelin	0.0014
	Температура суміші	purelin	purelin	0.0016
	Рівень суміші	purelin	purelin	0.0149
	Концентрація кислоти	purelin	hardlim	0.5371
Витрата оксиду вуглецю	Тиск у реакторі	logsig / purelin	purelin	0.0013
	Температура суміші	logsig / purelin	purelin	0.0016
	Рівень суміші	purelin	purelin	0.0158
	Концентрація кислоти	logsig	logsig	0.5371

Отримані моделі для тиску, температури та рівня можуть бути впроваджені в систему керування реактором вже зараз, тоді як канал концентрації потребує додаткової доробки (наприклад, використання рекурентних нейронних мереж типу LSTM).

### Література

- METHODS FOR PRODUCING ACETIC ACID, United States Patent, Patent No.: US 7,683,212 B2, Date of Patent: Mar. 23, 2010
- PROCESS FOR MONITORING A CONTINUOUS ACETIC ACID AND/OR METHYLACETATE PRODUCTION, United States Patent, Patent No.: US 6,642,413 B2, Date of Patent: Nov. 4, 2003
- LOW WATER METHANOL CARBOXYLATION PROCESS FOR HIGH ACETIC ACID PRODUCTION AND FOR WATER BALANCE CONTROL, United States Patent, Patent No.: US 7,005,541 B2, Date of Patent: Feb. 28, 2006
- Jane H. Jones. The Cativa™ Process for the Manufacture : Plant of Acetic Acid Location Year Debottlenecking or increased throughput achieved, Iridium Catalyst Improves Productivity in an Established Industrial Process/ Jane H. Jones // Platinum Metals Rev., 2000,44, (3), pp. 94-105, DOI: [10.1595/003214000X44394105](https://doi.org/10.1595/003214000X44394105)
- Golhosseini Bidgoli, Reza. Kinetic Study, Modeling and Simulation of Homogeneous Rhodium-Catalyzed Methanol Carbonylation to Acetic Acid / Golhosseini Bidgoli, Reza; Naderifar, Abas//Iran. J. Chem. Chem. Eng., Vol. 31, No. 1, 2012, pp.57-73, DOI: [10.30492/ijcce.2012.6076](https://doi.org/10.30492/ijcce.2012.6076)
- [Naderifar](https://doi.org/10.30492/ijcce.2012.6076) A. Kinetic Study, Modeling and Simulation of Homogeneous Rhodium-Catalyzed Methanol Carbonylation to Acetic Acid/[Abbas Naderifar](https://doi.org/10.30492/ijcce.2012.6076)2012, Iranian Journal of Chemistry & Chemical Engineering-international English Edition, Vol. 31, No. 1, 2012, p. 57-73, <https://doi.org/10.30492/ijcce.2012.6076>
- Mandake M.B. Kinetic Study of Catalyzed and Uncatalyzed Esterification Reaction of Acetic acid with Methanol / M.B. Mandakea, S.V. Anekarb, S.M.Walkec //American International Journal of Research in Formal, Applied & Natural Sciences, 3(1), June-August, 2013, pp. 114-121, CorpusID:33223967
- [Haynes](https://doi.org/10.1007/3418_021) A. Acetic Acid Synthesis by Catalytic Carbonylation of Methanol/[Anthony Haynes](https://doi.org/10.1007/3418_021), May 2006, [ChemInform](https://doi.org/10.1007/3418_021) 18(45):179-205, DOI:[10.1007/3418\\_021](https://doi.org/10.1007/3418_021)
- Reddi, K. (2016). Adaptive ANN model based nonlinear control of a semi-batch polymerization reactor challenge problem. / Reddi, Kamesh & Rani, K. Yamuna, Conference: 2016 Indian Control Conference (ICC), Hyderabad, Volume: 222 – 229, DOI: [10.1109/INDIANCC.2016.7441132](https://doi.org/10.1109/INDIANCC.2016.7441132)
- Emuoyibofarhe J.. An optimum solution for a process control problem (continuous stirred tank reactor) using a hybrid neural network. / Emuoyibofarhe, Justice & Reju, Sunday, Journal of Theoretical and Applied Information Technology © 2005 - 2008 JATIT. P.906-915, CorpusID:11391265
- McCulloch WS. A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity/ [Warren McCulloch](https://doi.org/10.7551/mitpress/12274.003.0011), [Walter Pitts](https://doi.org/10.7551/mitpress/12274.003.0011), Bulletin of Mathematical Biophysics, 1943, 5: 115-133, DOI: [10.7551/mitpress/12274.003.0011](https://doi.org/10.7551/mitpress/12274.003.0011)
- Hinton, G. Reducing the Dimensionality of Data with Neural Networks./ G.Hinton & R.Salakhutdinov & Yoesoep Rachmad, Science (New York, N.Y.), 2006, 313. 504-7. 10.1126/science.1127647. DOI:[10.1126/science.1127647](https://doi.org/10.1126/science.1127647)
- Hinton G.E. A fast learning algorithm for deep belief nets / G.E.Hinton, S.Osindero, Y.W. Teh NEURAL COMPUTATION, 2006,18(7): p.1527-1554, DOI:[10.1162/neco.2006.18.7.1527](https://doi.org/10.1162/neco.2006.18.7.1527)
- Osindero S. Topographic product models applied to natural scene statistics, / S. Osindero, M. Welling, and G.E. Hinton., NEURAL COMPUTATION, 2006, 18 (2): 381-414, DOI:[10.1162/089976606775093936](https://doi.org/10.1162/089976606775093936)
- Hodgkin A. L. A Quantitative Description of Ion Currents and Its Applications to Conduction and Excitation in Nerve Membranes / A. L. Hodgkin, A .F. Huxley, Journal of Physiology, 1952, 117:500-544. [https://doi.org/10.1016/S0092-8240\(05\)80004-7](https://doi.org/10.1016/S0092-8240(05)80004-7)
- Rosenblatt F. The perceptron: Probabilistic model for information storage and organization in the brain / F.Rosenblatt, Psychological Review, 1958, 65(6): 386-408, DOI: [10.1037/h0042519](https://doi.org/10.1037/h0042519)
- Widrow B. Adaptive Switching Circuits [C] / B. Widrow, M. E. Hoff, 1960 I RE WESCON convention record: part 4.Computers : Man-machine Systems, Los Angeles: 96~104, DOI: 10.21236/ad0241531
- Sun L. (2021). Artificial Neural Network and Its Application Research Progress in Chemical Process/ Li Sun & Fei Liang & Wutai Cui. Asian Journal of Research in Computer Science, 2021, 177-185. 10.9734/ajrcos/2021/v12i430302. DOI:[10.9734/ajrcos/2021/v12i430302](https://doi.org/10.9734/ajrcos/2021/v12i430302)
- Porkujan O. Neural network simulation in running of acetic acid syntesis unit while start-up / Olga Porkujan, Zhanna Samojlova.- ТЕКА, Польща, Academy of Sciences (PAN), with registered offices in Warsaw, 2013, p.188-192
- Samoilova Zh.G. Development of a mathematical model of technological processes in a reactor for the synthesis of otic acid / Zh.G. Samoilova // Eastern-European Journal of Enterprise Technologies, 5/2 ( 113 ), 2021, pp. 94-104, DOI: 10.15587/1729-4061.2021.242816

**Porkuian O.V., Samojlova Zh.G. The influence of the activation function of a neural network on the approximation of data from the main control channels during the start-up of an acetic acid synthesis reactor**

Modern industrial technologies for the synthesis of acetic acid and its derivatives are mainly based on highly efficient catalytic methods, among which methanol carbonylation (Monsanto and Cativa processes) occupies a leading position. The efficiency of such production facilities directly depends on the operation of chemical reactors, which form the hardware basis of the industry. In a highly competitive market, it is critical to ensure strict compliance of products with industry specifications, which requires accurate monitoring and control of the input and output parameters of the technological process.

The most common approach involves using neural networks as black box models. Based on empirical data from the object, the network architecture is selected and trained (weight coefficients are adjusted) to achieve maximum model adequacy. The models obtained will subsequently be integrated into predictive control systems (Model Predictive Control, MPC).

The start-up of an acetic acid synthesis reactor (in particular, in the process of methanol carbonylation on a rhodium catalyst) to operating mode is a complex dynamic process. During start-up, the system transitions from an inert state to an active reaction phase, accompanied by a sharp increase in pressure and an intense exothermic effect.

The use of artificial neural networks at this stage makes it possible to minimise overregulation — a critical control problem that threatens to trigger emergency protection systems and reset parameters.

Numerical modeling was performed in MATLAB (version 2021) using an iterative procedure for structural synthesis of a neural network. The empirical basis for the study was provided by statistical data on the dynamics of the acetic acid synthesis reactor during the start-up period.

Modeling errors for carbon monoxide are almost identical to the results for methanol, indicating the

symmetry of the effect of both reagents on the reactor output parameters. For pressure, temperature, and level control channels, regardless of the input influence (methanol or CO), the optimal architecture is one with a linear purelin activation function on the output layer. This ensures high approximation accuracy with an error of no more than 1.6%.

The acetic acid concentration channel proved to be the most difficult to model for both inputs (minimum error 53.71%). This indicates that it is not enough to predict product quality at the moment of launching a standard network structure—it is necessary to take into account dynamic delay (inertia) or increase the depth of the network.

**Keywords:** neural networks, backpropagation, reactor

**Поркуян Ольга Вікторівна** — доктор технічних наук, професор, радник ректора Східноукраїнського національного університету імені Володимира Даля ( м.Київ)  
ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-4046-0998>  
[porkuyan@snu.edu.ua](mailto:porkuyan@snu.edu.ua)

**Самойлова Жанна Георгіївна** — кандидат технічних наук, доцент кафедри Комп'ютерно-інтегрованих систем управління Східноукраїнського національного університету імені Володимира Даля ( м.Київ)  
ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-4509-4501>  
[samojlova@snu.edu.ua](mailto:samojlova@snu.edu.ua)

Дата першого надходження статті 20.02.2026.

Дата прийняття статті до друку після рецензування 25.03.2026.

Дата публікації 11.05.2026.



Стаття з відкритим доступом,  
відповідно до умов ліцензії  
[Creative Commons \(CC BY 4.0\)](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/)