

研究简报

基于结构逼近式神经网络的 间歇反应器优化控制

曹柳林, 李晓光, 王 晶

(北京化工大学信息科学与技术学院自动化研究所, 北京 100029)

关键词: 结构逼近式混合神经网络; 间歇反应器; 最优控制

中图分类号: TQ 316.2

文献标识码: A

文章编号: 0438-1157 (2008) 07-1848-06

Optimal control of batch reactor *via* structure approaching hybrid neural networks

CAO Liulin, LI Xiaoguang, WANG Jing

(Institute of Automation, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, China)

Abstract: A complex exothermic batch reactor model was developed by using structure approaching hybrid neural networks (SAHNN). The optimal reactor temperature profiles were obtained *via* the PSO-SQP algorithm solving maximum product concentration problem based on recurrent neural network (RNN). Considering model-plant mismatches and unmeasured disturbances, a novel extended integral square error index (EISE) was proposed, which introduced mismatches of model-plant into the optimal control profile. The approach used a feedback channel for the control and therefore dramatically enhanced the robustness and anti-disturbance performance. The stability analysis of the one-step-ahead control strategy through SAHNN-based model was described based on Lyapunov theory in detail. The result fully demonstrated the effectiveness of the proposed optimal control profile.

Key words: structure approaching hybrid neural networks; batch reactor; optimal control

引 言

在生产过程中, 间歇反应以其灵活多变的特性在制备多种类型的产品中占有十分重要的地位。近年来, 间歇反应过程优化问题得到了广泛的关注^[1-6], 然而, 由于间歇反应过程自身所具有的强非线性、缺少稳态操作条件、反应过程的不确定性等特点, 很难提出有效的自动控制和优化操作的方案^[7-15]。一般而言, 间歇过程的优化方案可以采用

两个基本步骤: 首先获得过程关键变量(例如反应温度)的优化曲线; 然后使控制系统跟踪期望的给定曲线。基于此, 本文研究一个典型的间歇反应过程。在建立主产物浓度和反应温度的模型基础上, 利用 PSO(粒子群)-SQP(序列二次规划)算法对间歇过程的反应温度进程进行优化; 其次采用结构逼近式混合神经网络建立对象的数学模型; 考虑到反应温度实时可测, 提出了以 EISE 为控制目标的最优控制策略。在 EISE 指标中, 将实时计算的

2008-04-18 收到初稿, 2008-04-30 收到修改稿。

联系人: 李晓光。第一作者: 曹柳林 (1951—), 女, 教授。

基金项目: 国家自然科学基金项目 (60704011)。

Received date: 2008-04-18.

Corresponding author: LI Xiaoguang. E-mail: 2004080102@grad.buct.edu.cn

Foundation item: supported by the National Natural Science Foundation of China (60704011).

模型误差引入控制指标，为基于模型的控制增加反馈通道，增强了控制方法的鲁棒性和抗干扰能力；并利用 Lyapunov 原理对所设计的控制系统进行了稳定性分析，研究结果证明了方法的有效性。

1 基于结构逼近式神经网络的间歇反应过程动态模型

1.1 结构逼近式神经网络

结构逼近式神经网络^[1]是一种从状态空间描述的角度出发，针对化工过程非线性动态系统的特点提出的一种新的混合神经网络的建模方法^[1]。图 1 为本文针对间歇反应过程而采用的结构逼近式混合神经网络的拓扑图，模型细节见文献 [1]。

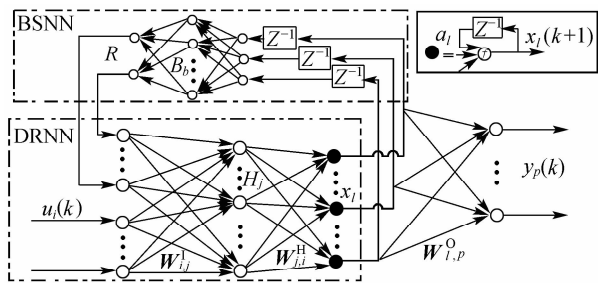


图 1 SAHNN 拓扑图

Fig. 1 Topology for SAHNN

由图 1 可得系统的状态空间描述

$$\begin{cases} \mathbf{X}(k+1) = \mathbf{A}\mathbf{X}(k) + \mathbf{W}^H \mathbf{W}^1 \mathbf{U}(k) \\ \mathbf{Y}(k) = \mathbf{W}^O \mathbf{X}(k) \end{cases} \quad (1)$$

式中 \mathbf{A} 为状态转移矩阵； \mathbf{W}^H 为 DRNN 网络隐含层到输出层的连接权值矩阵； \mathbf{W}^1 为 DRNN 网络输入层到隐含层的连接权值矩阵； \mathbf{W}^O 为 SAHNN 网络输出层连接权值矩阵。

由此推出 SAHNN 模型的表达式

$$x_l(k+1) = a_l x_l(k) + \sum_j \sum_{i=s+1}^m d_{j,i,l} u_i(k) + \sum_j \sum_{i=1}^s \sum_{b=1}^{l_s} g_{j,i,b,l} B_b[\mathbf{X}(k)] \quad (2)$$

$$y_p(k) = \sum_l \mathbf{W}_{l,p}^O x_l(k) \quad (3)$$

其中， $d_{j,i,l} = \mathbf{W}_{ij}^1 \mathbf{W}_{jl}^H$ ； $g_{j,i,b,l} = \mathbf{W}_{ij}^1 \mathbf{W}_{jl}^H \mathbf{W}_{i,b}^{BS}$ ， $\mathbf{W}_{i,b}^{BS}$ 为 BSNN 网络对应的权值矩阵； $B_b[\mathbf{X}(k)]$ 为 BSNN 网络中 B 样条函数的基函数。

1.2 间歇反应过程描述

典型的间歇反应过程^[7]如图 2 所示。

该过程包括两个并行的高度放热的反应，反应为搅拌充分、液相定容过程。反应由以下 4 种组分

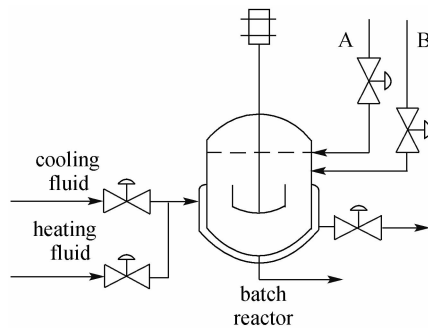
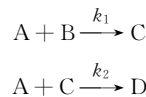


图 2 间歇反应器

Fig. 2 Diagram of batch reactor

构成



其中，A 和 B 分别代表原料，C 和 D 分别代表主产物和副产物， k_1 、 k_2 为反应速率常数。

间歇反应器内进行的反应由如下方程表示：

物料平衡方程

$$\begin{cases} \frac{dM_A}{dt} = -k_1 M_A M_B - k_2 M_A M_C \\ \frac{dM_B}{dt} = -k_1 M_A M_B \\ \frac{dM_C}{dt} = +k_1 M_A M_B - k_2 M_A M_C \\ \frac{dM_D}{dt} = +k_2 M_A M_C \end{cases} \quad (4)$$

能量平衡方程

$$\frac{dT_r}{dt} = \frac{[-\Delta H_1(k_1 M_A M_B) - \Delta H_2(k_2 M_A M_C)] + UA(T_j - T_r)}{M_r c_{p_r}} \quad (5)$$

反应速率函数 $R(t)$ 符合 Arrhenius 方程

$$R_1(t) = f[M_A(t), M_B(t), T_r(t)] \quad (6)$$

$$R_2(t) = f[M_A(t), M_C(t), T_r(t)] \quad (7)$$

$$k_1 = \exp\left(k_1^1 - \frac{k_1^2}{T_r + 273.15}\right) \quad (8)$$

$$k_2 = \exp\left(k_2^1 - \frac{k_2^2}{T_r + 273.15}\right) \quad (9)$$

式中 M_i 代表第 i 种组分浓度； T_r 为反应温度； T_j 表示夹套温度； ΔH_1 、 ΔH_2 分别为主、副反应热焓变化值； U 为反应器传热系数； A 为反应器换热面积； M_r 为反应混合物浓度； c_{p_r} 为反应混合物比热容。 M_A 、 M_B 、 M_C 和 M_D 为 4 种组分的初始值，分别为 12、12、0、0 kmol。 T_j 和 T_r 的初始温度均为 20℃。反应温度和夹套温度的变化范围为 20~120℃。相关过程参数和信息见文献 [7]。

1.3 间歇反应过程 SAHNN 模型

实际的间歇反应过程具有以下特点：①反应机理清楚；②过程参数未知；③非线性因素具有可分离性。因此，可以充分利用这些先验知识并采用 SAHNN 方法建模。鉴于间歇反应的以上特点并结合式 (6)、式 (7) (主要的非线性因素)，将反应速率函数分别代入式 (4)、式 (5) 中，得到间歇过程的状态空间形式

$$\begin{bmatrix} \dot{M}_A \\ \dot{M}_B \\ \dot{M}_C \\ \dot{M}_D \\ \dot{T}_r \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{-UA}{M_r c_{p_r}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} M_A \\ M_B \\ M_C \\ M_D \\ T_r \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -1 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ \frac{-\Delta H_1}{M_r c_{p_r}} & \frac{-\Delta H_2}{M_r c_{p_r}} & \frac{UA}{M_r c_{p_r}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} R_1 \\ R_2 \\ T_j \end{bmatrix} \quad (10)$$

其中，因为把非线性因素引入到系统的输入部分，所以整个系统的状态空间描述呈线性形式。基于该结构的 SAHNN 模型的输入变量分别为反应速率函数 R_1 、 R_2 和夹套温度；其输出变量为 4 种反应物浓度和反应温度。结合式 (1) ~ 式 (3) 即可建立间歇反应过程结构逼近式神经网络动态模型。

2 反应温度优化曲线

间歇反应过程优化的主要目标是在固定的时间间隔中，对反应温度升温曲线^[3-4]进行优化，从而获得主产物最大产率，同时确保反应温度的变化范围在其边界之内。

优化问题的数学描述如式 (11) 所述

$$\begin{cases} \max_{T(k)} J = X_3(k_f) \\ \text{s. t. } \tilde{X}_3 = \text{RNN1}[\tilde{X}_3(k-1), \tilde{X}_3(k-2), \\ T_r(k-1), T_r(k-2), T_r(k-3)] \\ X(k_0) = x(0) \\ 20 \leq T_r(k) \leq 120 \\ k_f = k_i^* \end{cases} \quad (11)$$

式中 $X_3(k_f)$ 代表末端时间的主产物浓度 (M_C)； T_r 为反应器温度； k_f 为终端时间。值得注意的是，上述问题中没有采用机理模型作为优化问题的等式约束^[3-4]，考虑到算法的实用性，采用递归网络 (RNN) 建立反应温度-主产物模型作为其等式约

束，该模型通过交叉检验的优化方法得到模型结构：5-8-1。

RNN 模型如下

$$\begin{aligned} \tilde{X}_3(k) &= \text{RNN}[\tilde{X}_3(k-1), \tilde{X}_3(k-2), \\ &T_r(k-1), T_r(k-2), T_r(k-3)] \end{aligned}$$

本文将 SQP 算法同 PSO 算法相结合，采用 SQP 算法作为 PSO 算法中局部种群迭代过程全局最优解的局部搜索器，从而获得反应温度优化曲线。将整个反应时间按照不同的划分数划分为不同的等分时间区间，划分数 P 分别为 1、5、10 和 20，得到的最终主产物浓度分别为 7.0159、7.0259、7.0315、7.0361 kmol。不同划分数所对应的反应器温度优化曲线如图 3 所示。

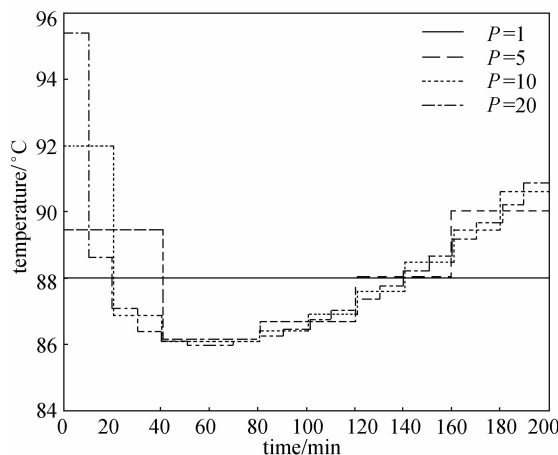


图 3 优化策略

Fig. 3 Optimal temperature profile

由图 3 可以看出，当整个时间区间的划分数为 1 时，在终端反应时间 ($k_f = 200 \text{ min}$)，主产物浓度为 7.0159 kmol，而当时间划分数为 20 时，主产物浓度为 7.0361 kmol。从优化结果可以看出，随着时间划分数的增加，主产物的浓度呈递增趋势，优化作用明显。

3 基于 SAHNN 模型的最优控制算法

本文采用如图 4 所示的闭环自适应控制策略对间歇过程实施最优控制。其中， P 为间歇反应过程对象， $u(k)$ 为控制变量， $y(k)$ 为对象输出， $\tilde{y}(k)$ 为 SAHNN 输出， $d(k)$ 为对象输出和 SAHNN 模型输出之差， $g(k)$ 为反应温度优化曲线。

3.1 基于 EISE 性能指标的控制策略

当存在不可测扰动或时变对象引起模型失配

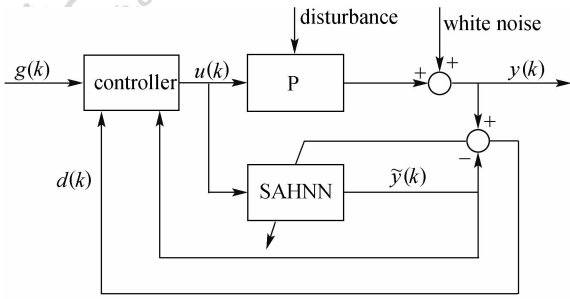


图 4 闭环控制策略

Fig. 4 Closed-loop control profile

时，采用单纯依赖模型的控制算法可能导致不良的控制效果。本文从修改性能指标入手，把系统中设定值跟踪、抑止噪声和实际应用中控制信号受约束等问题综合考虑，提出扩展的误差平方指标 (EISE)

$$\begin{cases} \min_{u(k)} J = \frac{1}{2} E\{[\tilde{y}_m(k+1) - g(k+1)]^2 + \\ \gamma[\tilde{y}_m(k) - y(k)]^2 + \alpha \Delta u^2(k)\} \\ \text{s. t. } \tilde{y}(k+1) = \text{SAHNN}[\tilde{y}_m(k), u(k), Y_m(k)] \\ Y_m(k) = [\tilde{y}_{m1}(k) \quad \tilde{y}_{m2}(k) \quad \tilde{y}_{m3}(k) \quad \tilde{y}_{m4}(k) \quad \tilde{y}_m(k)]^T \\ \Delta u(k) = u(k) - u(k-1) \\ 20 \leq u(k) \leq 120 \\ 20 \leq y_m(k) \leq 120, 20 \leq y(k) \leq 120 \end{cases} \quad (12)$$

其中， $\gamma > 0$ 和 $\alpha > 0$ 分别为加权因子； $\tilde{y}_m(k+1)$ 为基于 SAHNN 模型的 $k+1$ 时刻反应温度预测输出 $\tilde{T}_r(k+1)$ ； $g(k+1)$ 为 $k+1$ 时刻优化反应温度的给定值； $y(k)$ 为 k 时刻过程的实际反应温度输出值 $T_r(k)$ ； $\Delta u(k) = u(k) - u(k-1)$ 为控制器输出 (T_j) 变化率； $\tilde{y}_{m1}(k)$ 、 $\tilde{y}_{m2}(k)$ 、 $\tilde{y}_{m3}(k)$ 和 $\tilde{y}_{m4}(k)$ 分别代表 M_A 、 M_B 、 M_C 和 M_D 在 k 时刻的预测输出值。指标的第一项为设定值跟踪项，第二项是模型误差项，加入它的主要目的是抑止干扰，因为不可测扰动会引起实测温度的变化，却不会影响神经网络模型的输出，因此两者的实时误差将及时反映出不可测扰动对温度输出的影响，第三项是输入约束项。通过对加权因子的选择，在满足输入约束的条件下，最小化性能指标能够实现随动与定值控制的协调优化。

当 SAHNN 模型训练完成，由式 (2) 得到反应温度模型的一步预测表达式为

$$\hat{y}_m(k+1) = \alpha \hat{y}_m(k) + \sum_j \sum_{i=1}^m d_{j,i} u_i(k) +$$

$$\sum_j \sum_{i=1}^s \sum_{b=1}^{b_s} g_{j,i,b} B_b [\tilde{Y}_m(k)] \quad (13)$$

结合式 (13)，利用梯度方法可以得到基于 SAHNN 的一步超前预测控制 (one-step-ahead)。令 $e_1(k+1) = \hat{y}_m(k+1) - g(k+1)$ ， $e_2(k) = \hat{y}_m(k) - y(k)$ ，则最优控制序列可用式 (14) 表达

$$u(k) = u(k-1) -$$

$$\frac{\lambda}{1 + \alpha \lambda} \left[e_1(k+1) \frac{\partial e_1(k+1)}{\partial u(k)} + \gamma e_2(k) \frac{\partial e_2(k)}{\partial u(k)} \right] \quad (14)$$

其中， $\lambda > 0$ 为优化步长，为简化起见，令

$$\beta = \frac{\lambda}{1 + \alpha \lambda} \quad (15)$$

将式 (13) 带入式 (12) 的目标函数中，并令

$$G = -g(k+1) + \alpha \tilde{y}_m(k) + \sum_{j=1}^{h=8} \sum_{i=1}^{s=2} \sum_{b=1}^{b_s=9} g_{j,i,b} B_b [\tilde{Y}_m(k)]$$

由最优化方法知 $\frac{\partial J}{\partial u(k)} = 0$ ，并用差分近似代替微分且令 $\frac{\partial y(k)}{\partial u(k)} \approx \frac{y(k) - y(k-1)}{u(k) - u(k-1)} = \Delta$ ，即可得到具体的优化控制序列的解析表达形式

$$u(k) = \frac{\alpha u(k-1) + \gamma \Delta [\hat{y}_m(k) - y(k)] - G \sum_{j=1}^8 d_j}{\alpha + \left(\sum_{j=1}^8 d_j\right)^2} \quad (16)$$

3.2 控制算法收敛性和稳定性分析

首先对上节提出的算法做收敛性分析。

根据式 (13)，对 k 求微分

$$\begin{aligned} \frac{\partial J}{\partial k} &= e_1(k+1) \frac{\partial e_1(k+1)}{\partial u(k)} \frac{\partial u(k)}{\partial k} + \\ &\gamma e_2(k) \frac{\partial e_2(k)}{\partial u(k)} \frac{\partial u(k)}{\partial k} + \alpha \Delta u(k) \frac{\partial u(k)}{\partial k} \end{aligned}$$

用差分代替微分得到

$$\begin{aligned} \frac{\Delta J}{\Delta k} &= e_1(k+1) \frac{\partial e_1(k+1)}{\partial u(k)} \frac{\Delta u(k)}{\Delta k} + \\ &\gamma e_2(k) \frac{\partial e_2(k)}{\partial u(k)} \frac{\Delta u(k)}{\Delta k} + \alpha \Delta u(k) \frac{\Delta u(k)}{\Delta k} \end{aligned}$$

则有

$$\Delta J = \left[e_1(k+1) \frac{\partial e_1(k+1)}{\partial u(k)} + \gamma e_2(k) \frac{\partial e_2(k)}{\partial u(k)} \right] \Delta u(k) + \alpha [\Delta u(k)]^2 \quad (17)$$

将式 (12) 代入式 (17)，得到

$$\Delta J = \left(-\frac{1}{\beta} + \alpha\right) [\Delta u(t)]^2 \quad (18)$$

为确保算法收敛，式 (18) 的右侧应半负定。注意到 $[\Delta u(t)]^2 \geq 0$ 。且如前述 $\alpha > 0$ ， $\beta > 0$ 。当 $-\frac{1}{\beta} + \alpha \leq 0$ 时算法收敛，即 $\alpha \beta \leq 1$ 。

其次, 采用 Lyapunov 方法对基于 SAHNN 模型的一步超前预测控制做稳定性分析。

定义 Lyapunov 方程

$$V = e_1^2(k+1) + \Delta e_1^2(k+1) + \gamma e_2^2(k) + \gamma \Delta e_2^2(k)$$

其中, γ 的定义同式 (12)。显然, 该控制系统的平衡点为 $[e_1(k+1), \Delta e_1(k+1), e_2(k), \Delta e_2(k)] = (0, 0, 0, 0)$, 即控制系统准确跟踪给定优化曲线, 同时消除系统的未知干扰和模型失配造成的误差。为了达到上述目的, $\Delta V \leq 0$ 。

$$\begin{aligned} \frac{\delta V}{\delta k} = & 2e_1(k+1) \frac{\delta e_1(k+1)}{\delta u(k)} \frac{\delta u(k)}{\delta k} + \\ & 2\Delta e_1(k+1) \frac{\delta \Delta e_1(k+1)}{\delta u(k)} \frac{\delta u(k)}{\delta k} + \\ & 2\gamma e_2(k) \frac{\delta e_2(k)}{\delta u(k)} \frac{\delta u(k)}{\delta k} + 2\gamma \Delta e_2(k) \frac{\delta \Delta e_2(k)}{\delta u(k)} \frac{\delta u(k)}{\delta k} \end{aligned}$$

用差分代替微分

$$\begin{aligned} \Delta V = & 2e_1(k+1) \frac{\delta e_1(k+1)}{\delta u(k)} \Delta u(k) + \\ & 2\Delta e_1(k+1) \frac{\delta \Delta e_1(k+1)}{\delta u(k)} \Delta u(k) + \\ & 2\gamma e_2(k) \frac{\delta e_2(k)}{\delta u(k)} \Delta u(k) + 2\gamma \Delta e_2(k) \frac{\delta \Delta e_2(k)}{\delta u(k)} \Delta u(k) \end{aligned}$$

因为

$$\Delta e_1(k+1) = \frac{\delta e_1(k+1)}{\delta u(k)} \Delta u(k) \quad (19)$$

$$\Delta e_2(k) = \frac{\delta e_2(k)}{\delta u(k)} \Delta u(k) \quad (20)$$

则由式 (14)、式 (15) 及式 (19) 和式 (20) 可推出

$$\begin{aligned} \Delta V = & \left[e_1(k+1) \frac{\delta e_1(k+1)}{\delta u(k)} + \gamma e_2(k) \frac{\delta e_2(k)}{\delta u(k)} \right]^2 \times \\ & \beta \left\{ -1 + \beta \left[\frac{\delta e_1(k+1)}{\delta u(k)} \right]^2 + \gamma \beta \left[\frac{\delta e_2(k)}{\delta u(k)} \right]^2 \right\} \end{aligned}$$

为了满足 $\Delta V \leq 0$, 则有

$$\begin{aligned} \beta \leq & \frac{1}{\left[\frac{\delta e_1(k+1)}{\delta u(k)} \right]^2 + \gamma \left[\frac{\delta e_2(k)}{\delta u(k)} \right]^2} \leq \\ & \frac{1}{\left[\frac{\delta e_1(k+1)}{\delta u(k)} \right]^2} = \frac{1}{\left[\sum_{j=1}^8 d_j \right]^2} \end{aligned}$$

3.3 控制结果分析

本文采用时间划分数为 10 的反应温度优化曲线作为控制系统的给定曲线, 采用 EISE 控制指标对系统实施控制。

取 $\gamma = 0.1$, 根据已验证的 SAHNN 模型, 得到使控制系统稳定的 β 的上限值为 $\beta = \frac{\lambda}{1 + \alpha\lambda} \leq 3.37$ 。在稳定上限以下, 选择 $\lambda = 0.5$, $\beta = 0.4545$ 。

图 5 显示在反应时间为 80 min 时, 加入 10°C 的设定值扰动, 直至反应结束。控制作用使反应温度无振荡、快速、无超调地跟踪了给定曲线, 而且可以表明对于大的设定值变化也能产生很好的跟踪结果。

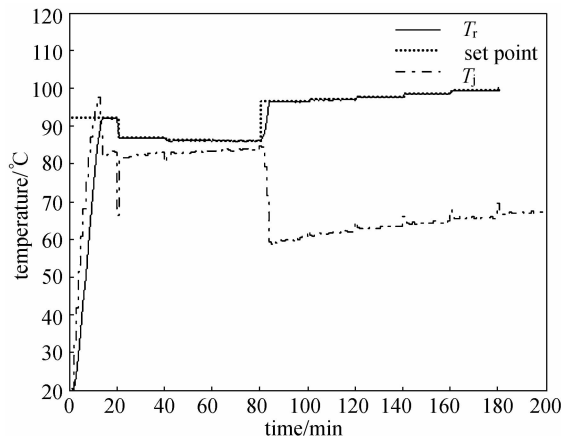


图 5 基于 EISE 的 T_r 响应

Fig. 5 T_r response based on EISE

图 6 显示系统在 70~90 min 内受到 10°C 温度的阶跃变化时控制系统的输出响应, 系统在短时间内快速响应, 克服了阶跃干扰, 准确跟踪了给定曲线, 达到理想的控制结果。

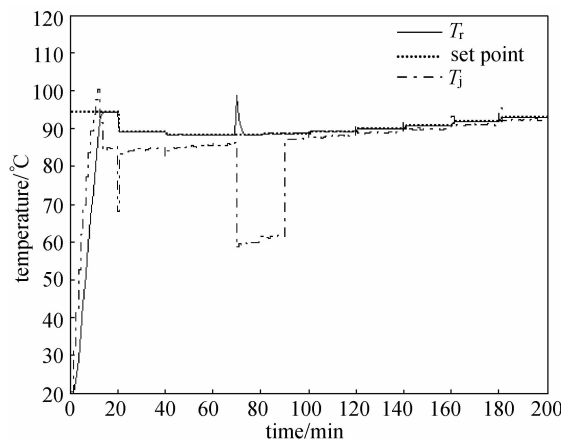
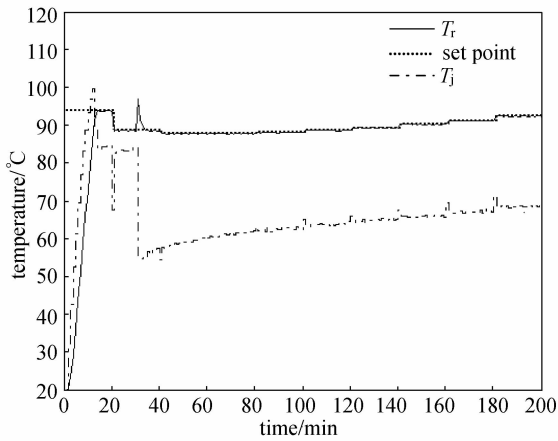


图 6 阶跃扰动下的 T_r 响应

Fig. 6 T_r response with step disturbance rejection

图 7 显示当系统受参数变化时系统的输出响应。由式 (8) 可知, 当反应时间为 30 min 时, 过程参数 k_1^1 变化 2.5%, 直至过程结束。由图 7 可以看出, 所设计的控制系统具有很强的鲁棒性和抗干扰能力。

由以上控制结果可以得出, 由于 EISE 指标将模型误差引入控制策略, 为基于模型的控制增加了反馈通道, 因而增强了控制方法的鲁棒性和抗干扰性能。

图7 参数扰动下的 T_r 响应Fig. 7 T_r response with parameter disturbance rejection

4 结 论

本文首先利用结构逼近式混合神经网络建立了一类典型的放热间歇反应过程的数学模型; 其次, 利用 PSO-SQP 算法求解主产物产率最大化问题, 进而得到间歇过程反应温度优化曲线; 基于以上两步, 从修改性能指标入手, 提出了扩展的误差平方积分指标 EISE, 并推导出相应的控制策略。

由于该方法充分利用可测的间歇反应器温度信息, 对模型及控制策略进行实时修正, 从而有效地解决了设定值跟踪、抑止噪声和控制信号受约束等问题。利用 Lyapunov 原理对所提出的一步超前预测控制进行了稳定性分析, 证明了算法的正确性。

研究结果充分证明了基于 SAHNN 模型、以 EISE 作为性能指标的最优控制策略的有效性。

References

- [1] Cao Liulin (曹柳林), Li Xiaoguang (李晓光), Wang Jing (王晶). Modeling of batch reactor based on structure approaching hybrid neural networks approach. *Journal of Chemical Industry and Engineering (China)* (化工学报), 2008, **59** (4): 958-963
- [2] Aziz N, Mujtaba L M. Optimal operation policies in batch reactors. *Chem. Eng. J.*, 2002, **85**: 313-325
- [3] Aziz N, Hussain M A, Mujtaba L M. Performance of different types of controllers in tracking optimal temperature profiles in batch reactor. *Comput. Chem. Eng.*, 2000, **24**: 1069-1075
- [4] Hua Xiangming, Rohani S, Jutan A. Cascade closed-loop optimization and control of batch reactors. *Chemical Engineering Science*, 2004, **59**: 5695-5708
- [5] Buskens C, Maurer H. SQP-methods for solving optimal control problems with control and state constraints: adjoint variables, sensitivity analysis and real-time control. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 2000, **120**: 85-108
- [6] Krothapally M, Palanki S. A neural network strategy for batch process optimization. *Comput. Chem. Eng.*, 1997, **21** (suppl.): 463-468
- [7] Cott B, Macchietto S. Temperature control of exothermic batch reactor using generic model control. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 1989, **28**: 1177-1184
- [8] Ng C W, Hussain M A. Hybrid neural network—prior knowledge model in temperature control of a semi-batch polymerization processes. *Chemical Engineering and Processing*, 2004, **43**: 559-570
- [9] Tsoukas A, Tirrell M, Stephanopoulos G. Multi-objective dynamic optimization of semi-batch copolymerization reactors. *Chem. Eng. Sci.*, 1982, **37**: 1785-1795
- [10] Dube M A, Penlidis A, Mutha R K, Cluett W R. Mathematical modeling of emulsion copolymerization of acrylonitrile/butadiene. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 1996, **35**: 4434-4448
- [11] Terwiesch P, Argarwal M, Rippin D W T. Batch unit optimization with imperfect modeling: a survey. *J. Process Control*, 1994, **4**: 238-258
- [12] Zhang J, Morris A J, Martin E B, Kiparissides C. Prediction of polymer quality in batch polymerization reactors using robust neural networks. *Chem. Eng. J.*, 1998, **69**: 135-143
- [13] Cybenko G. Approximation by super positions of a sigmoidal function. *Math. Control Signals Syst.*, 1989, **2**: 303-314
- [14] Sjöberg J, Zhang Q, Ljung L, Benveniste A, Delyon B, Glorennec P, Hjalmarsson H, Juditsky A. Nonlinear black-box modeling in system identification: a unified overview. *Automatica*, 1995, **31**: 1691-1724
- [15] Hunt K J, Sbarbaro D, Zbikowski R, Gawthrop P J. Neural networks for control systems: a survey. *Automatica*, 1992, **28**: 1083-1112