

赛区评阅编号（由赛区组委会填写）：

2021 年高教社杯全国大学生数学建模竞赛

承 诺 书

我们仔细阅读了《全国大学生数学建模竞赛章程》和《全国大学生数学建模竞赛参赛规则》（以下简称“竞赛章程和参赛规则”，可从 <http://www.mcm.edu.cn> 下载）。

我们完全清楚，在竞赛开始后参赛队员不能以任何方式，包括电话、电子邮件、“贴吧”、QQ 群、微信群等，与队外的任何人（包括指导教师）交流、讨论与赛题有关的问题；无论主动参与讨论还是被动接收讨论信息都是严重违反竞赛纪律的行为。

我们完全清楚，在竞赛中必须合法合规地使用文献资料和软件工具，不能有任何侵犯知识产权的行为。否则我们将失去评奖资格，并可能受到严肃处理。

我们以中国大学生名誉和诚信郑重承诺，严格遵守竞赛章程和参赛规则，以保证竞赛的公正、公平性。如有违反竞赛章程和参赛规则的行为，我们将受到严肃处理。

我们授权全国大学生数学建模竞赛组委会，可将我们的论文以任何形式进行公开展示（包括进行网上公示，在书籍、期刊和其他媒体进行正式或非正式发表等）。

我们参赛选择的题号（从 A/B/C/D/E 中选择一项填写）：B

我们的报名参赛队号（12 位数字全国统一编号）：202108007161

参赛学校（完整的学校全称，不含院系名）：哈尔滨工业大学

参赛队员（打印并签名）：1.王灏

2.凌炜然

3.李麟芑

指导教师或指导教师组负责人（打印并签名）：_____

（指导教师签名意味着对参赛队的行为和论文的真实性负责）

日期：2021年9月12日

赛区评阅编号：
(由赛区填写)

全国评阅编号：
(全国组委会填写)

2021 年高教社杯全国大学生数学建模竞赛

编 号 专 用 页

赛区评阅记录（可供赛区评阅时使用）：

| | | | | | | |
|-------------|--|--|--|--|--|--|
| 评 阅 人 | | | | | | |
| 备 注 | | | | | | |

送全国评阅统一编号：
(赛区组委会填写)

乙醇偶合制备 C4 烯烃结果建模分析

摘要

本文是对乙醇偶合催化制备 C4 烯烃过程的研究，通过对不同催化剂组合和不同温度下乙醇转化率、C4 烯烃的选择性的分析，选择合适的生产条件。

针对问题一中的第一小问，即研究每种催化剂组合乙醇转化率、C4 烯烃的选择性与温度的关系，我们采用散点图曲线拟合分析的方法，根据数据在散点图上的分布趋势，寻找最合适的函数关系，并通过拟合分析得到具体函数曲线表达式，从而研究出关系走向。

针对问题一中的第二小问，如何探究出固定条件下原料的转化率和产物的选择性是讨论的重点。我们沿用了问题一的思路，通过把多项内容重复进行画图、分析，得到相应的函数关系，从而分析出相应的结果。

针对问题二，我们对题目的理解为问题一的拓宽：从单变量到多变量对应因变量的变化。因为问题二中自变量不仅数量多，而且比较复杂，我们采用了整体分析和单项分析相结合的方法，从两个不同的角度分别解析各个变量所产生的的影响，已经变量变化所带来的整体影响。经过运用 SPSS 的交互判断进程，可以有效地通过制图分析出其定性与定量的变化规律，从而得出相应结论。

针对问题三，我们的想法是其本质是对于问题二的拓宽应用。两个小问一个无任何限制条件，一个半限制温度条件。运用问题二中的数据分析结果，寻找每个单变量的最佳取值，从而得出整个实验结果的最佳实验条件。而在半限制温度条件下，仅需舍弃不符合条件的温度值，对整个建模过程进行重新构建，即可以得出相应结论。

针对问题四，我们认为其是对于整个实验过程的补充。通过增加实验次数和实验内容，对前文所得出的结论进行进一步的论证完善，同时探索更多对于化学反应制取的影响因素，并详细得出这些影响因子所带来的影响大小，从而对实验过程进行进一步更精准的调控把握。

问题四的五次实验我们分别改变了 Co /SiO₂ 和 HAP 装料比、乙醇按每分钟加入的量的范围、温度区间、催化剂载体种类，探索以上几种自变量之间的单一影响与相互影响，扩充实验数据，提高实验数据的可信度。

关键字：基于 SPSS 的回归分析 多元线性回归关系 控制变量法 边界平均值估计法

一、问题重述

C4 烯烃是化学中一种重要的化学物质，其可以进行的众多有机化学反应能够为生产生活提供大量必需的产品和中间产物，在化工产品和医学药品等方面有着举足轻重的作用。同时，也正因为 C4 烯烃进行有机化学反应时繁琐复杂，原料的转化率、副产物的生成率、反应进行所需要的时间等诸多问题也成为了化工生产和医学制药过程中需要考虑的问题。如何降低整个流程中的材料成本损失和时间人力消耗，并且在前句基础上，尽可能多的得到所需要的 C4 烯烃，是本文所需要解决的大致问题。

在实际生产中，C4 烯烃的制备往往采用的是乙醇催化偶合制备的方法，而乙醇就是在过程中所需要用到的原料。本文就整个过程中关于催化剂的不同组合与不同温度对 C4 烯烃的选择性和 C4 烯烃收率所产生的影响进行讨论。从而最终根据本文所给出的实验结论和数据，能够有效寻找最合适的 C4 烯烃制备条件。本文主要解决如下问题：

1. 分析附件 1 中每种催化剂下温度对乙醇转化率和 C4 烯烃的选择性所产生的影响。
2. 分析附件 2 中给定条件下乙醇转化率和不同产物选择性随时间的变化规律。
3. 分析附件 1 中数据，设计最优条件及温度限制下的最适生产环境。
4. 进行更多的开拓性实验，完善对于实验环境最优解的估计测算。

二、问题分析

针对问题一，我们实际需要研究的应该是两个问题，一个问题是分析附件 1 中不同催化剂组合下乙醇催化率和 C4 烯烃的选择性与温度的关系，另一个问题是给定 350 度的额定温度以及固定催化剂组合，分析各项不同产物的选择性和乙醇催化率和时间关系。

对于第一小问，我们首先想到将本题中各个催化剂组合下不同温度及其相应的数据映射到散点图中，然后对散点图中数据进行回归拟合，得到相应的不同函数下拟合结果及 R 值，然后选择 R 值最为接近 1 的函数进行迭代求出最佳的函数表达式，从而得出相应规律。

对于第二小问，我们首先打算采取与第一小问相同的方式，将给定条件下不同时间的测试数据投入到散点图中，经过对数据的回归分析，选择最合适的函数表达出在各个时间下乙醇转化率和不同产物选择性的变化规律。

针对问题二，我们首先将 6 个自变量假设都满足多元线性回归关系，设 Co/SiO₂ 和 HAP 装料比中 Co/SiO₂ 的质量 (mg) 为 x_1 ，Co/SiO₂ 的质量之比 (wt%) 为 x_2 ，Co/SiO₂ 和 HAP 装料比 HAP (或石英沙)-乙醇使用质量 (mg) 为 x_3 ，乙醇添加速率 (ml/min) 为 x_4 ，有无 HAP (1 为有 2 为无) 为 x_5 ，温度为 x_6 ，乙醇转化率 (%) 为 y_1 ，然后可以写出一般模型方程： $y_1 = ax_1 + bx_2 + cx_3 + dx_4 + ex_5 + fx_6 + g$ ，并利用 SPSS 进行该假设模型分析，具体分析方法为边际平均值的方法。最后本题我们的思路中不仅进行了多因素影响分析，也同样对单因素进行了解析审核，此项内容的具体思路将在第三问中进行呈现。

针对问题三，题干中所询问的是多项自变量影响单个因变量的情况下寻找最优解，我们采用了单因素分析的方法通过控制其他变量注意寻找最合适的实验条件，通过估计相应的边界平均值，得到某一变量对于 C4 烯烃选择性 (%) 单独的影响。同时，对于第二问我们在题干所要求的温度条件下再次进行建模，得出相应结果。

针对问题四，我们对五次实验分别有着不同的实验目标和实验流程，在实验进行的过程中，我们保证其他条件处于最优状态下，并带有相应的实验条件进行如下实验，具体需要完成的内容如下：

对于第一次实验，我们想到的是增加 Co /SiO₂ 和 HAP 装料比到尽可能多，并在此过程中每增加 50mg:50mg 进行一次数据收集，探寻是否 Co /SiO₂ 和 HAP 装料比超过 200mg:200mg 后会不会继续增大还是存在峰值。

对于第二次实验，我们采取的是调大乙醇按每分钟加入的量的范围，探寻乙醇转化率除在 0.5ml 取峰值，C₄ 烯烃的选择性在 0.9 取峰值外是否会在其他值处取峰值，同时固定温度为 400 度，固定其他条件不变。

对于第三次实验，我们拟采用维持其他实验条件不变，改变温度区间由 0 不断调大至 450 的方法，探寻在不同的温度区间，乙醇转化率及 C₄ 烯烃选择性大小与乙醇每分钟加入的量在 0.9 与 0.3 之间变化的关系。

对于第四次实验，我们希望增加在不同温度下，其他条件固定，各种产物生成指标随时间的变化关系。仅仅由 350 度下的数据探明生成产物指标与时间的关系说明性不足。

对于第五次实验则希望可以增加载体的种类，由实验发现拥有载体的实验结果指标是优于无载体的指标的，而载体的种类应除 HAP 多增加几种载体进行讨论不同的载体种类是否会对实验结果产生影响。

以上所有模型算法详细的分析过程、具体描述、应用过程、结果分析及评估见第五节。

三、模型假设

1. 假定在局限单一变量时，其他实验条件合适且完全相同，同时实验结果不受其他因素影响。

2. 假定在多次进行同一实验时，已知的实验数据为稳定时的真实结果且不存在不合常理的数据影响。

3. 假定催化剂组合中各项指标所选取的数值在符合实际要求的范围内可以任取。

4. 多因素共同作用时采用 spss 的多因素方差分析法即多元线性回归分析，为了满足多元线性回归的假设使模型满足下列诊断条件： R^2 大于 0.5 表示模型拟合度较高；各自变量显著性低于 0.05 表示讨论该自变量有意义，即该自变量对因变量有影响，大于 0.05 的自变量应剔除再进行模型构建；VIF 值小于 5，意味着自变量之间不存在多重共线性；残差符合正态分布；RW 值（德宾-沃森值）满足在 0 附近小于 3 的条件，变量之间不存在序列相关，且模型较稳定。

四、符号说明

| 符号 | 符号说明 |
|------------|-----------------------------------|
| b_i | 函数表达式中第 i 个未知数的系数（当 $i=0$ 时为常数） |
| R^2 | 决定系数，反应因变量的全部变异能通过回归关系被自变量解释的比例 |
| x_i, y_i | 根据解题叙述中相应解释设置为相应未知数 |
| x | 函数表达式中自变量，实际意义随题目变化 |
| y | 函数表达式中应变量，实际意义随题目变化 |

表 1 符号说明

五、模型建立及求解

5.1 问题一模型的建立与求解

在第一问中，我们需要建立在相同条件下乙醇转化率和 C4 烯烃的选择性与温度或者时间的关系，并对所建立的结果进行分析得出结论。

5.1.1 催化剂组合编号为 A1 时的分析

| 模型摘要和参数估算值 | | | | | | | | | |
|------------------------------|------|---------|-------|-------|------|-----------|-----------|-------|----------|
| 因变量: A1 乙醇转化率(%),自变量为 A1 温度。 | | | | | | | | | |
| 方程 | 模型摘要 | | | | | 参数估算值 | | | |
| | R 方 | F | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | .980 | 48.377 | 2 | 2 | .020 | 141.753 | -1.194 | .003 | |
| 三次 | .981 | 52.359 | 2 | 2 | .019 | 25.721 | .000 | -.002 | 4.563E-6 |
| 幂 | .973 | 106.893 | 1 | 3 | .002 | 2.252E-20 | 8.355 | | |
| S | .983 | 178.222 | 1 | 3 | .001 | 10.711 | -2471.135 | | |
| 指数 | .957 | 67.522 | 1 | 3 | .004 | .002 | .028 | | |

表 2 模型摘要和参数估算值

通过对附件 1 中催化剂组合为 200mg 1wt%Co/SiO2- 200mg HAP-乙醇浓度 1.68ml/min 时的数据绘制散点图，并进行分析，可以得到如上数据。由表可知，选取三次函数作为最佳拟合模型，并进行拟合得到最终拟合结果如下：

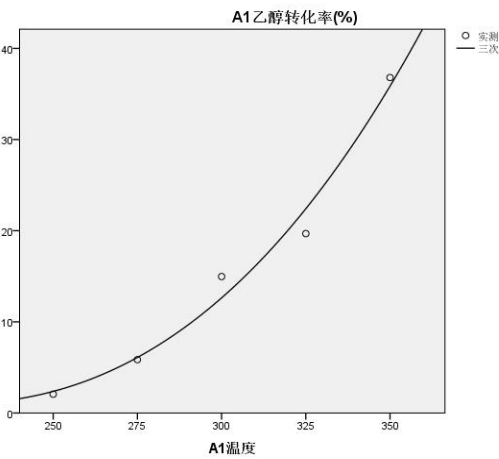


图 1 函数拟合图

| 参数估算值相关性 | | | | |
|----------|--------|--------|--------|--------|
| | b0 | b1 | b2 | b3 |
| b0 | 1.000 | -1.000 | .998 | -.996 |
| b1 | -1.000 | 1.000 | -1.000 | .998 |
| b2 | .998 | -1.000 | 1.000 | -1.000 |
| b3 | -.996 | .998 | -1.000 | 1.000 |

表 3 参数估算相关性

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为：
$$y = 3.773E - 5 * (x^3) - 0.031 * (x^2) + 8.914 * x - 852.939$$

其中该函数表达式的残差平方和为 10.069，参数估算值相关性如上表。

5.1.2 催化剂组合编号为 A1 时 C4 烯烃的选择性的分析

| 模型摘要和参数估算值 | |
|---------------------------------|--|
| 因变量: A1 C4 烯烃选择性(%),自变量为 A1 温度。 | |

| 方程 | 模型摘要 | | | | | 参数估算值 | | | |
|----|------|--------|-------|-------|------|----------|----------|-------|-----------|
| | R 方 | F | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | .916 | 10.899 | 2 | 2 | .084 | -190.783 | 1.422 | -.002 | |
| 三次 | .921 | 11.690 | 2 | 2 | .079 | -131.362 | .806 | .000 | -2.394E-6 |
| 幂 | .823 | 13.992 | 1 | 3 | .033 | .066 | 1.135 | | |
| S | .848 | 16.784 | 1 | 3 | .026 | 4.898 | -338.868 | | |
| 指数 | .794 | 11.531 | 1 | 3 | .043 | 13.839 | .004 | | |

表 4 模型摘要和参数估算值

通过对附件1中催化剂组合为200mg 1wt%Co/SiO2- 200mg HAP-乙醇浓度1.68ml/min时的数据绘制散点图，并进行分析，可以得到如上数据。由表可知，选取三次函数作为最佳拟合模型，并进行拟合得到最终拟合结果如下：

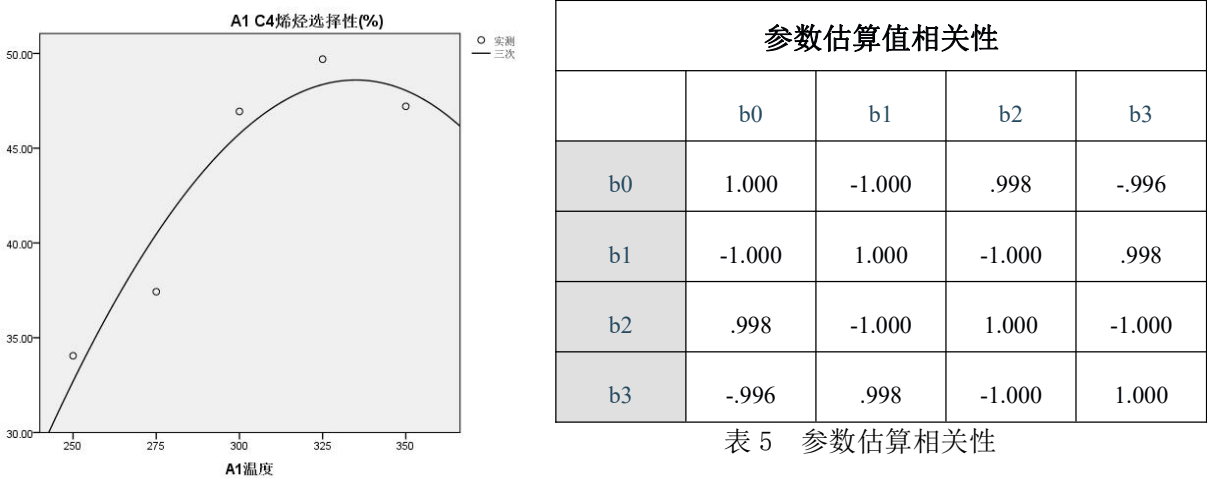


图 2 函数拟合图

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为：

$$y = -6.069E-5 * (x^3) + 0.053 * (x^2) - 14.836 * x + 1409.24$$
其中该函数表达式的残差平方和为 2.954，参数估算值相关性如上表。

5.1.3 催化剂组合编号为 A2 时乙醇转化率的分析

| 模型摘要和参数估算值 | | | | | | | | | |
|------------------------------|------|---------|-------|-------|------|-----------|-----------|-------|-----------|
| 因变量: A2 乙醇转化率(%) 自变量为 A2 温度。 | | | | | | | | | |
| 方程 | 模型摘要 | | | | | 参数估算值 | | | |
| | R 方 | F | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | .991 | 111.107 | 2 | 2 | .009 | -227.393 | 1.106 | -.001 | |
| 三次 | .991 | 113.322 | 2 | 2 | .009 | -209.156 | .903 | .000 | -8.833E-7 |
| 幂 | .919 | 33.884 | 1 | 3 | .010 | 5.965E-19 | 7.938 | | |
| S | .944 | 50.247 | 1 | 3 | .006 | 11.257 | -2366.424 | | |
| 指数 | .890 | 24.175 | 1 | 3 | .016 | .010 | .026 | | |

表 6 模型摘要和参数估算值

通过对附件 1 中催化剂组合为 200mg 2wt%Co/SiO₂- 200mg HAP-乙醇浓度 1.68ml/min 时的数据绘制散点图，并进行分析，可以得到如上数据。由表可知，选取二次函数作为最佳拟合模型，并进行拟合得到最终拟合结果如下：

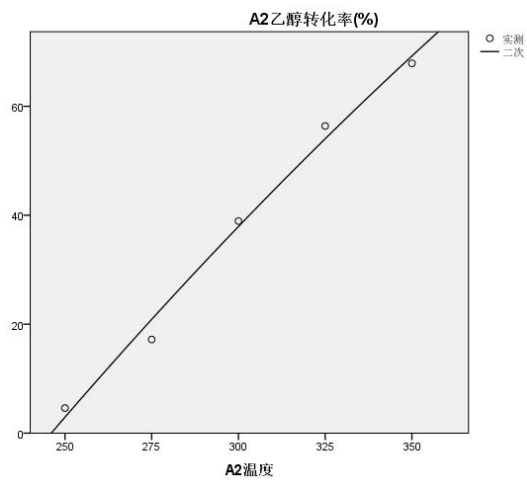


图 3 函数拟合图

| 参数估算值相关性 | | | |
|----------|-------|-------|-------|
| | b0 | b1 | b2 |
| b0 | 1.000 | -.999 | .995 |
| b1 | -.999 | 1.000 | -.999 |
| b2 | .995 | -.999 | 1.000 |

表 7 参数估算相关性

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为：
$$y = -0.001 * (x^2) + 1.106 * x - 227.392$$

其中该函数表达式的残差平方和为 24.750，参数估算值相关性如上表。

5.1.4 催化剂组合编号为 A2 时 C4 烯烃的选择性的分析

| 模型摘要和参数估算值 | | | | | | | | | |
|---------------------------------|------|--------|-------|-------|------|----------|----------|------|----------|
| 因变量: A2 C4 烯烃选择性(%) 自变量为 A2 温度。 | | | | | | | | | |
| 方程 | 模型摘要 | | | | | 参数估算值 | | | |
| | R 方 | F | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | .980 | 49.722 | 2 | 2 | .020 | 234.745 | -1.646 | .003 | |
| 三次 | .978 | 44.835 | 2 | 2 | .022 | 142.131 | -.712 | .000 | 3.432E-6 |
| 幂 | .819 | 13.552 | 1 | 3 | .035 | 1.864E-5 | 2.467 | | |
| S | .782 | 10.758 | 1 | 3 | .046 | 5.559 | -709.059 | | |
| 指数 | .852 | 17.226 | 1 | 3 | .025 | 1.863 | .008 | | |

表 8 模型摘要和参数估算值

通过对附件 1 中催化剂组合为 200mg 2wt%Co/SiO₂- 200mg HAP-乙醇浓度 1.68ml/min 时的数据绘制散点图，并进行分析，可以得到如上数据。由表可知，选取二次函数作为最佳拟合模型，并进行拟合得到最终拟合结果如下：

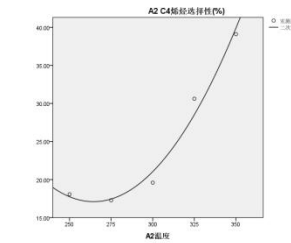


图 4 函数拟合图

| 参数估算值相关性 | | | |
|----------|-------|-------|-------|
| | b0 | b1 | b2 |
| b0 | 1.000 | -.999 | .995 |
| b1 | -.999 | 1.000 | -.999 |
| b2 | .995 | -.999 | 1.000 |

表 9 参数估算相关性

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为：

$$y = 0.003 * (x^2) - 1.646 * x + 234.745$$
 其中该函数表达式的残差平方和为 7.239，参数估算值相关性如上表。

5.1.5 催化剂组合编号为 A3 时乙醇转化率的分析

模型摘要和参数估算值

因变量: A3 乙醇转化率(%) 自变量为 A3 温度。

| 方程 | 模型摘要 | | | | | 参数估算值 | | | |
|----|------|---------|-------|-------|------|----------|-----------|------|-----------|
| | R 方 | F | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | .966 | 57.382 | 2 | 4 | .001 | -134.344 | .648 | .000 | |
| 三次 | .967 | 58.618 | 2 | 4 | .001 | -126.055 | .555 | .000 | -3.596E-7 |
| 幂 | .943 | 81.986 | 1 | 5 | .000 | 1.644E-8 | 3.708 | | |
| S | .974 | 184.152 | 1 | 5 | .000 | 7.424 | -1246.700 | | |
| 指数 | .898 | 44.014 | 1 | 5 | .001 | 1.011 | .011 | | |

表 10 模型摘要和参数估算值

通过对附件 1 中催化剂组合为 200mg 1wt%Co/SiO₂- 200mg HAP-乙醇浓度 0.9ml/min 时的数据绘制散点图，并进行分析，可以得到如上数据。由表可知，选取三次函数作为最佳拟合模型，并进行拟合得到最终拟合结果如下：

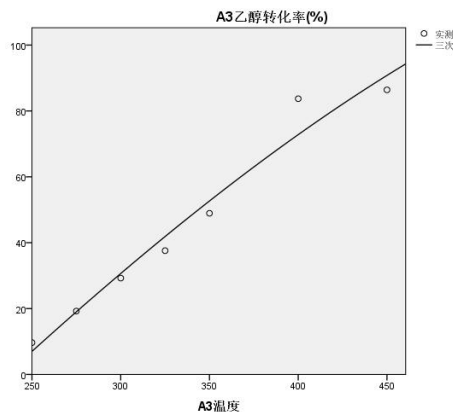


图 5 函数拟合图

参数估算值相关性

| | b0 | b1 | b2 | b3 |
|----|-------|-------|-------|-------|
| b0 | 1.000 | -.999 | .994 | -.988 |
| b1 | -.999 | 1.000 | -.999 | .995 |
| b2 | .994 | -.999 | 1.000 | -.999 |
| b3 | -.988 | .995 | -.999 | 1.000 |

表 11 参数估算相关性

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为：

$$y = -2.037E - 5 * (x^3) + 0.021 * (x^2) - 6.607 * x + 671.505$$
 其中该函数表达式的残差平方和为 68.951，参数估算值相关性如上表。

5.1.6 催化剂组合编号为 A3 时 C4 烯烃选择性的分析

模型摘要和参数估算值

因变量: A3 C4 烯烃选择性(%) 自变量为 A3 温度。

| 方程 | 模型摘要 | | | | | 参数估算值 | | | |
|----|------|--------|-------|-------|------|----------|------|-------|-----------|
| | R 方 | F | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | .955 | 42.519 | 2 | 4 | .002 | -171.076 | .924 | -.001 | |
| 三次 | .959 | 47.070 | 2 | 4 | .002 | -138.791 | .618 | .000 | -9.485E-7 |

| | | | | | | | | | |
|----|------|--------|---|---|------|----------|-----------|--|--|
| 幂 | .887 | 39.179 | 1 | 5 | .002 | 1.198E-9 | 4.072 | | |
| S | .931 | 67.340 | 1 | 5 | .000 | 7.333 | -1380.400 | | |
| 指数 | .829 | 24.293 | 1 | 5 | .004 | .446 | .012 | | |

表 12 模型摘要和参数估算值

通过对附件 1 中催化剂组合为 200mg 1wt%Co/SiO2- 200mg HAP-乙醇浓度 0.9ml/min 时的数据绘制散点图，并进行分析，可以得到如上数据。由表可知，选取三次函数作为最佳拟合模型，并进行拟合得到最终拟合结果如下：

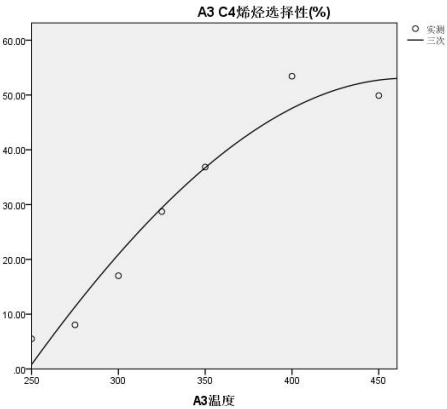


图 6 函数拟合图

参数估算值相关性

| | b0 | b1 | b2 | b3 |
|----|-------|-------|-------|-------|
| b0 | 1.000 | -.999 | .994 | -.988 |
| b1 | -.999 | 1.000 | -.999 | .995 |
| b2 | .994 | -.999 | 1.000 | -.999 |
| b3 | -.988 | .995 | -.999 | 1.000 |

表 13 参数估算相关性

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为：

$$y = -1.862E - 5 * (x^3) + 0.019 * (x^2) - 5.707 * x + 565.646$$
其中该函数表达式的残差平方和为 4. 510，参数估算值相关性如上表。

5.1.7 催化剂组合编号为 A4 时乙醇转化率的分析

模型摘要和参数估算值

因变量: A4 乙醇转化率(%) 自变量为 A4 温度。

| 方程 | 模型摘要 | | | | | 参数估算值 | | | |
|----|------|---------|-------|-------|------|-----------|-----------|------|------|
| | R 方 | F | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | .996 | 365.359 | 2 | 3 | .000 | -106.943 | .345 | .000 | |
| 三次 | .996 | 365.359 | 2 | 3 | .000 | -106.943 | .345 | .000 | .000 |
| 幂 | .916 | 43.516 | 1 | 4 | .003 | 1.799E-15 | 6.478 | | |
| S | .951 | 78.459 | 1 | 4 | .001 | 9.947 | -2064.476 | | |
| 指数 | .871 | 27.079 | 1 | 4 | .006 | .050 | .020 | | |

表 14 模型摘要和参数估算值

通过对附件 1 中催化剂组合为 200mg 0.5wt%Co/SiO2- 200mg HAP-乙醇浓度 1.68ml/min 时的数据绘制散点图，并进行分析，可以得到如上数据。由表可知，选取线性函数作为最佳拟合模型，并进行拟合得到最终拟合结果如下：

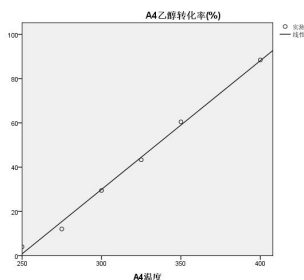


图 7 函数拟合图

参数估算值相关性

| | b0 | b1 |
|----|-------|-------|
| b0 | 1.000 | -.988 |
| b1 | -.988 | 1.000 |

表 15 参数估算相关性

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为：

$$y = 0.582 * x - 144.571$$

其中该函数表达式的残差平方和为 24.647，参数估算值相关性如上表。

5.1.8 催化剂组合编号为 A4 时 C4 烯烃选择性的分析

模型摘要和参数估算值

因变量: A4 C4 烯烃选择性(%) 自变量为 A4 温度。

| 方程 | 模型摘要 | | | | | 参数估算值 | | | |
|----|------|--------|-------|-------|------|----------|-----------|------|----------|
| | R 方 | F | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | .977 | 62.381 | 2 | 3 | .004 | 72.773 | -.562 | .001 | |
| 三次 | .974 | 55.921 | 2 | 3 | .004 | 29.976 | -.165 | .000 | 1.216E-6 |
| 幂 | .903 | 37.295 | 1 | 4 | .004 | 2.256E-8 | 3.550 | | |
| S | .871 | 27.095 | 1 | 4 | .006 | 6.317 | -1090.270 | | |
| 指数 | .923 | 47.898 | 1 | 4 | .002 | .464 | .011 | | |

表 16 模型摘要和参数估算值

通过对附件 1 中催化剂组合为 200mg 0.5wt%Co/SiO₂- 200mg HAP-乙醇浓度 1.68ml/min 时的数据绘制散点图，并进行分析，可以得到如上数据。由表可知，选取二次函数作为最佳拟合模型，并进行拟合得到最终拟合结果如下：

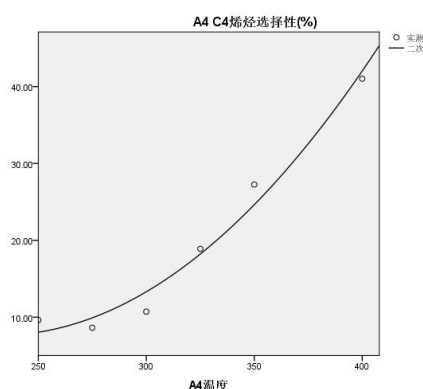


图 8 函数拟合图

参数估算值相关性

| | b0 | b1 | b2 |
|----|-------|-------|-------|
| b0 | 1.000 | -.997 | .989 |
| b1 | -.997 | 1.000 | -.997 |
| b2 | .989 | -.997 | 1.000 |

表 17 参数估算相关性

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为：

$$y = 0.001 * (x^2) - 0.562 * x + 72.773$$

其中该函数表达式的残差平方和为 19.172，参数估算值相关性如上表。

5.1.9 催化剂组合编号为 A5 时乙醇转化率的分析

模型摘要和参数估算值

因变量: A5 乙醇转化率(%) 自变量为 A5 温度。

| 方程 | 模型摘要 | | | | | 参数估算值 | | | |
|----|------|---------|-------|-------|------|----------|-----------|-------|----------|
| | R 方 | F | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | .994 | 249.615 | 2 | 3 | .000 | 231.943 | -1.669 | .003 | |
| 三次 | .994 | 268.814 | 2 | 3 | .000 | 56.500 | .000 | -.002 | 5.349E-6 |
| 幂 | .919 | 45.517 | 1 | 4 | .003 | 1.118E-8 | 3.753 | | |
| S | .883 | 30.195 | 1 | 4 | .005 | 6.974 | -1150.071 | | |
| 指数 | .945 | 68.492 | 1 | 4 | .001 | .595 | .012 | | |

表 18 模型摘要和参数估算值

通过对附件 1 中催化剂组合为 200mg 2wt%Co/SiO₂- 200mg HAP-乙醇浓度 0.3ml/min 时的数据绘制散点图, 并进行分析, 可以得到如上数据。由表可知, 选取二次函数作为最佳拟合模型, 并进行拟合得到最终拟合结果如下:

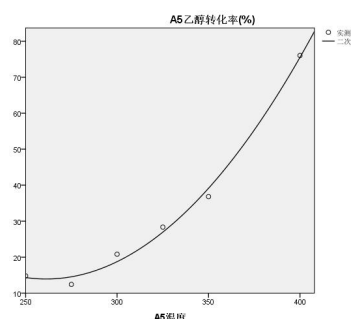


图 9 函数拟合图

参数估算值相关性

| | b0 | b1 | b2 |
|----|-------|-------|-------|
| b0 | 1.000 | -.997 | .989 |
| b1 | -.997 | 1.000 | -.997 |
| b2 | .989 | -.997 | 1.000 |

表 19 参数估算相关性

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为:

$$y = 0.003 * (x^2) - 1.669 * x + 231.943$$

其中该函数表达式的残差平方和为 16.592, 参数估算值相关性如上表。

5.1.10 催化剂组合编号为 A5 时 C4 烯烃选择性的分析

模型摘要和参数估算值

因变量: A5 C4 烯烃选择性(%) 自变量为 A5 温度。

| 方程 | 模型摘要 | | | | | 参数估算值 | | | |
|----|------|---------|-------|-------|------|-----------|-----------|------|----------|
| | R 方 | F | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | .991 | 157.173 | 2 | 3 | .001 | 57.884 | -.500 | .001 | |
| 三次 | .993 | 202.449 | 2 | 3 | .001 | 6.494 | .000 | .000 | 1.666E-6 |
| 幂 | .942 | 65.088 | 1 | 4 | .001 | 3.517E-14 | 5.800 | | |
| S | .963 | 103.385 | 1 | 4 | .001 | 8.276 | -1833.200 | | |
| 指数 | .913 | 42.067 | 1 | 4 | .003 | .036 | .018 | | |

表 20 模型摘要和参数估算值

通过对附件 1 中催化剂组合为 200mg 2wt%Co/SiO₂- 200mg HAP-乙醇浓度 0.3ml/min 时的数据绘制散点图, 并进行分析, 可以得到如上数据。由表可知, 选取二次函数作为最佳拟合模型, 并进行拟合得到最终拟合结果如下:

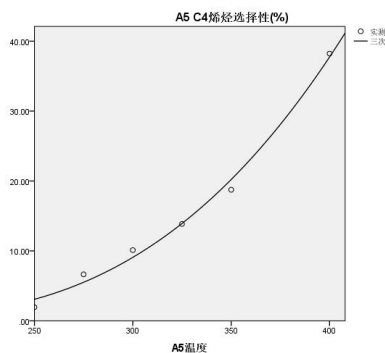


图 10 函数拟合图

参数估算值相关性

| | b0 | b1 | b2 | b3 |
|----|-------|-------|-------|-------|
| b0 | 1.000 | -.999 | .997 | -.994 |
| b1 | -.999 | 1.000 | -.999 | .997 |
| b2 | .997 | -.999 | 1.000 | -.999 |
| b3 | -.994 | .997 | -.999 | 1.000 |

表 21 参数估算相关性

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为：

$$y = 1.382E - 5 * (x^3) - 0.012 * (x^2) + 3.816 * x - 395.617$$

其中该函数表达式的残差平方和为 0.011，参数估算值相关性如上表。

5.1.11 催化剂组合编号为 A6 时乙醇转化率的分析

模型摘要和参数估算值

因变量: A6 乙醇转化率(%) 自变量为 A6 温度。

| 方程 | 模型摘要 | | | | | 参数估算值 | | | |
|----|------|--------|-------|-------|------|-----------|-----------|------|----------|
| | R 方 | F | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | .986 | 70.591 | 2 | 2 | .014 | 51.946 | -.584 | .002 | |
| 三次 | .985 | 64.645 | 2 | 2 | .015 | -7.919 | -.032 | .000 | 1.651E-6 |
| 幂 | .953 | 60.415 | 1 | 3 | .004 | 3.839E-10 | 4.365 | | |
| S | .943 | 49.507 | 1 | 3 | .006 | 7.816 | -1363.224 | | |
| 指数 | .952 | 59.680 | 1 | 3 | .005 | .396 | .014 | | |

表 22 模型摘要和参数估算值

通过对附件 1 中催化剂组合为 200mg 5wt%Co/SiO₂- 200mg HAP-乙醇浓度 1.68ml/min 时的数据绘制散点图，并进行分析，可以得到如上数据。由表可知，选取二次函数作为最佳拟合模型，并进行拟合得到最终拟合结果如下：

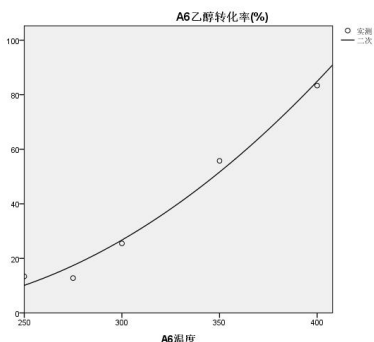


图 11 函数拟合图

参数估算值相关性

| | b0 | b1 | b2 |
|----|-------|-------|-------|
| b0 | 1.000 | -.998 | .992 |
| b1 | -.998 | 1.000 | -.998 |
| b2 | .992 | -.998 | 1.000 |

表 23 参数估算相关性

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为：

$$y = 0.002 * (x^2) - 0.584 * x + 51.946$$

其中该函数表达式的残差平方和为 52.660，参数估算值相关性如上表。

5.1.12 催化剂组合编号为 A6 时 C4 烯烃选择性的分析

模型摘要和参数估算值

因变量: A6 C4 烯烃选择性(%) 自变量为 A6 温度。

| 方程 | 模型摘要 | | | | | 参数估算值 | | | |
|----|------|--------|-------|-------|------|-----------|-----------|-------|----------|
| | R 方 | F | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | .945 | 17.316 | 2 | 2 | .055 | 176.616 | -1.234 | .002 | |
| 三次 | .958 | 22.979 | 2 | 2 | .042 | 50.568 | .000 | -.002 | 4.167E-6 |
| 幂 | .900 | 27.053 | 1 | 3 | .014 | 6.051E-11 | 4.487 | | |
| S | .880 | 21.968 | 1 | 3 | .018 | 6.770 | -1392.868 | | |
| 指数 | .915 | 32.483 | 1 | 3 | .011 | .108 | .014 | | |

表 24 模型摘要和参数估算值

通过对附件 1 中催化剂组合为 200mg 5wt%Co/SiO₂- 200mg HAP-乙醇浓度 1.68ml/min 时的数据绘制散点图，并进行分析，可以得到如上数据。由表可知，选取三次函数作为最佳拟合模型，并进行拟合得到最终拟合结果如下：

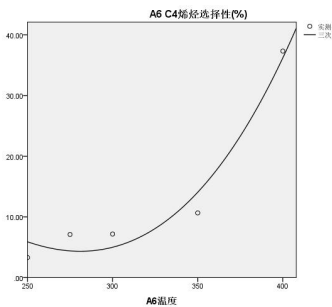


图 12 函数拟合图

参数估算值相关性

| | b0 | b1 | b2 | b3 |
|----|-------|-------|-------|-------|
| b0 | 1.000 | -.999 | .996 | -.992 |
| b1 | -.999 | 1.000 | -.999 | .997 |
| b2 | .996 | -.999 | 1.000 | -.999 |
| b3 | -.992 | .997 | -.999 | 1.000 |

表 25 参数估算相关性

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为：
 $y = 3.224E - 5 * (x^3) - 0.029 * (x^2) + 8.782 * x - 873.500$
其中该函数表达式的残差平方和为 0.053，参数估算值相关性如上表。

5.1.13 催化剂组合编号为 A7 时乙醇转化率的分析

模型摘要和参数估算值

因变量: A7 乙醇转化率(%) 自变量为 A7 温度。

| 方程 | 模型摘要 | | | | | 参数估算值 | | | |
|----|-------|----------|-------|-------|------|----------|----------|------|-----------|
| | R 方 | F | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | 1.000 | 3419.182 | 2 | 2 | .000 | -102.598 | .557 | .000 | |
| 三次 | 1.000 | 3618.162 | 2 | 2 | .000 | -93.551 | .470 | .000 | -2.846E-7 |
| 幂 | .977 | 127.525 | 1 | 3 | .001 | 3.380E-6 | 2.838 | | |
| S | .993 | 399.467 | 1 | 3 | .000 | 6.620 | -898.055 | | |
| 指数 | .954 | 61.585 | 1 | 3 | .004 | 2.534 | .009 | | |

表 26 模型摘要和参数估算值

通过对附件 1 中催化剂组合为 50mg 1wt%Co/SiO₂- 50mg HAP-乙醇浓度 0.3ml/min 时的数据绘制散点图，并进行分析，可以得到如上数据。由表可知，选取二次函数作为最佳拟合模型，并进行拟合得到最终拟合结果如下：

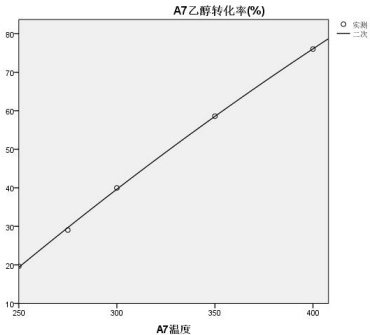


图 13 函数拟合图

| 参数估算值相关性 | | | |
|----------|-------|-------|-------|
| | b0 | b1 | b2 |
| b0 | 1.000 | -.998 | .992 |
| b1 | -.998 | 1.000 | -.998 |
| b2 | .992 | -.998 | 1.000 |

表 27 参数估算相关性

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为：

$$y = 0.000 * (x^2) + 0.557 * x + 102.598$$
 其中该函数表达式的残差平方和为 0.605，参数估算值相关性如上表。

5.1.14 催化剂组合编号为 A7 时 C4 烯烃选择性的分析

模型摘要和参数估算值

因变量： C4 烯烃 A7 选择性(%) 自变量为 A7 温度。

| 方程 | 模型摘要 | | | | | 参数估算值 | | | |
|----|-------|----------|-------|-------|------|----------|-----------|------|----------|
| | R 方 | F | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | 1.000 | 2861.351 | 2 | 2 | .000 | 74.781 | -.565 | .001 | |
| 三次 | .999 | 1236.542 | 2 | 2 | .001 | 35.781 | -.195 | .000 | 1.181E-6 |
| 幂 | .976 | 122.966 | 1 | 3 | .002 | 1.973E-9 | 3.920 | | |
| S | .954 | 62.467 | 1 | 3 | .004 | 6.421 | -1216.627 | | |
| 指数 | .989 | 262.351 | 1 | 3 | .001 | .239 | .012 | | |

表 28 模型摘要和参数估算值

通过对附件 1 中催化剂组合为 50mg 1wt%Co/SiO₂- 50mg HAP-乙醇浓度 0.3ml/min 时的数据绘制散点图，并进行分析，可以得到如上数据。由表可知，选取二次函数作为最佳拟合模型，并进行拟合得到最终拟合结果如下：

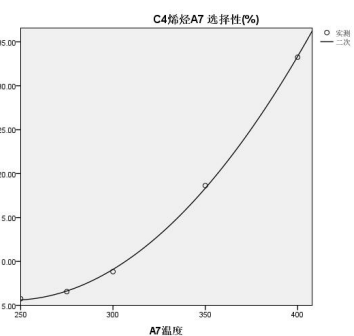


图 14 函数拟合图

| 参数估算值相关性 | | | |
|----------|-------|-------|-------|
| | b0 | b1 | b2 |
| b0 | 1.000 | -.998 | .992 |
| b1 | -.998 | 1.000 | -.998 |
| b2 | .992 | -.998 | 1.000 |

表 29 参数估算相关性

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为：

$$y = 0.001 * (x^2) - 0.565 * x + 74.781$$

其中该函数表达式的残差平方和为 0.189，参数估算值相关性如上表。

5.1.15 催化剂组合编号为 A8 时乙醇转化率的分析

模型摘要和参数估算值

因变量: A8 乙醇转化率(%) 自变量为 A8 温度。

| 方程 | 模型摘要 | | | | | 参数估算值 | | | |
|----|------|----------|-------|-------|------|-----------|-----------|------|----------|
| | R 方 | F | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | .999 | 1039.318 | 2 | 2 | .001 | 96.863 | -.801 | .002 | |
| 三次 | .998 | 662.715 | 2 | 2 | .002 | 37.380 | -.238 | .000 | 1.787E-6 |
| 幂 | .995 | 584.049 | 1 | 3 | .000 | 1.542E-11 | 4.829 | | |
| S | .986 | 214.924 | 1 | 3 | .001 | 7.743 | -1509.441 | | |
| 指数 | .994 | 502.727 | 1 | 3 | .000 | .145 | .015 | | |

表 30 模型摘要和参数估算值

通过对附件 1 中催化剂组合为 50mg 1wt%Co/SiO₂- 50mg HAP-乙醇浓度 0.9ml/min 时的数据绘制散点图，并进行分析，可以得到如上数据。由表可知，选取二次函数作为最佳拟合模型，并进行拟合得到最终拟合结果如下：

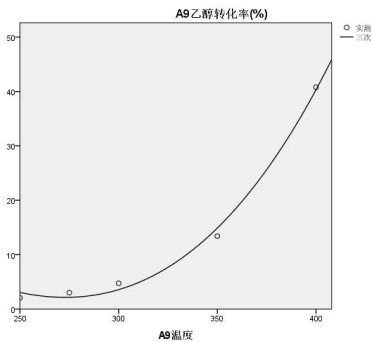


图 15 函数拟合图

参数估算值相关性

| | b0 | b1 | b2 |
|----|-------|-------|-------|
| b0 | 1.000 | -.998 | .992 |
| b1 | -.998 | 1.000 | -.998 |
| b2 | .992 | -.998 | 1.000 |

表 31 参数估算相关性

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为：

$$y = 0.002 * (x^2) + 0.801 * x + 96.863$$

其中该函数表达式的残差平方和为 1.684，参数估算值相关性如上表。

5.1.16 催化剂组合编号为 A8 时 C4 烯烃选择性的分析

模型摘要和参数估算值

因变量: A8 C4 烯烃选择性(%) 自变量为 A8 温度。

| 方程 | 模型摘要 | | | | | 参数估算值 | | | |
|----|-------|----------|-------|-------|------|-----------|-----------|------|----------|
| | R 方 | F | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | 1.000 | 2107.623 | 2 | 2 | .000 | 19.819 | -.245 | .001 | |
| 三次 | .999 | 1535.889 | 2 | 2 | .001 | -5.522 | -.004 | .000 | 7.632E-7 |
| 幂 | .995 | 559.214 | 1 | 3 | .000 | 3.020E-10 | 4.290 | | |
| S | .999 | 2010.217 | 1 | 3 | .000 | 7.101 | -1349.379 | | |
| 指数 | .982 | 163.841 | 1 | 3 | .001 | .224 | .013 | | |

表 32 模型摘要和参数估算值

通过对附件 1 中催化剂组合为 50mg 1wt%Co/SiO₂- 50mg HAP-乙醇浓度 0.9ml/min 时的数据绘制散点图，并进行分析，可以得到如上数据。由表可知，选取二次函数作为最佳拟合模型，并进行拟合得到最终拟合结果如下：

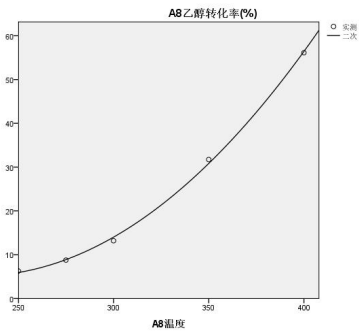


图 16 函数拟合图

参数估算值相关性

| | b0 | b1 | b2 |
|----|-------|-------|-------|
| b0 | 1.000 | -.998 | .992 |
| b1 | -.998 | 1.000 | -.998 |
| b2 | .992 | -.998 | 1.000 |

表 33 参数估算相关性

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为：

$$y = 0.001 * (x^2) - 0.245 * x + 19.819$$

其中该函数表达式的残差平方和为 0.410，参数估算值相关性如上表。

5.1.17 催化剂组合编号为 A9 时乙醇转化率的分析

模型摘要和参数估算值

因变量： A9 乙醇转化率(%) 自变量为 A9 温度。

| 方程 | 模型摘要 | | | | | 参数估算值 | | | |
|----|------|---------|-------|-------|------|-----------|-----------|-------|----------|
| | R 方 | F | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | .990 | 101.695 | 2 | 2 | .010 | 186.287 | -1.343 | .002 | |
| 三次 | .995 | 191.386 | 2 | 2 | .005 | 46.883 | .000 | -.002 | 4.403E-6 |
| 幂 | .984 | 186.565 | 1 | 3 | .001 | 7.358E-16 | 6.410 | | |
| S | .963 | 78.709 | 1 | 3 | .003 | 8.436 | -1990.899 | | |
| 指数 | .996 | 811.147 | 1 | 3 | .000 | .012 | .020 | | |

表 34 模型摘要和参数估算值

通过对附件 1 中催化剂组合为 50mg 1wt%Co/SiO₂- 50mg HAP-乙醇浓度 2.1ml/min 时的数据绘制散点图，并进行分析，可以得到如上数据。由表可知，选取二次函数作为最佳拟合模型，并进行拟合得到最终拟合结果如下：

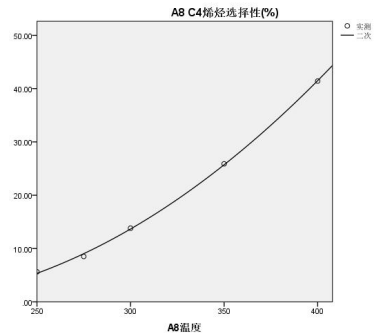


图 17 函数拟合图

参数估算值相关性

| | b0 | b1 | b2 | b3 |
|----|-------|-------|-------|-------|
| b0 | 1.000 | -.999 | .996 | -.992 |
| b1 | -.999 | 1.000 | -.999 | .997 |
| b2 | .996 | -.999 | 1.000 | -.999 |
| b3 | -.992 | .997 | -.999 | 1.000 |

表 35 参数估算相关性

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为：

$$y = -1.097E - 5 * (x^3) + 0.011 * (x^2) + 3.190 * x + 303.923$$

其中该函数表达式的残差平方和为 0.000，参数估算值相关性如上表。

5.1.18 催化剂组合编号为 A9 时 C4 烯烃选择性的分析

模型摘要和参数估算值

因变量: A9 C4 烯烃选择性(%) 自变量为 A9 温度。

| 方程 | 模型摘要 | | | | | 参数估算值 | | | |
|----|------|---------|-------|-------|------|-----------|-----------|----------|------|
| | R 方 | F | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | .995 | 194.580 | 2 | 2 | .005 | -53.430 | .218 | 5.491E-5 | |
| 三次 | .995 | 194.580 | 2 | 2 | .005 | -53.430 | .218 | 5.491E-5 | .000 |
| 幂 | .970 | 97.784 | 1 | 3 | .002 | 1.887E-10 | 4.387 | | |
| S | .988 | 253.789 | 1 | 3 | .001 | 7.321 | -1390.051 | | |
| 指数 | .944 | 50.519 | 1 | 3 | .006 | .229 | .014 | | |

表 36 模型摘要和参数估算值

通过对附件 1 中催化剂组合为 50mg 1wt%Co/SiO₂- 50mg HAP-乙醇浓度 2.1ml/min 时的数据绘制散点图，并进行分析，可以得到如上数据。由表可知，选取二次函数作为最佳拟合模型，并进行拟合得到最终拟合结果如下：

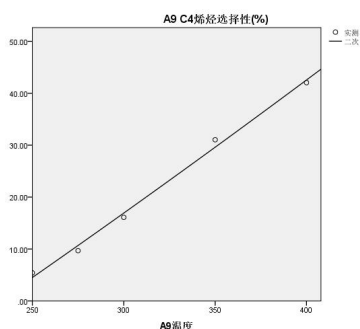


图 18 函数拟合图

参数估算值相关性

| | b0 | b1 | b2 |
|----|-------|-------|-------|
| b0 | 1.000 | -.998 | .992 |
| b1 | -.998 | 1.000 | -.998 |
| b2 | .992 | -.998 | 1.000 |

表 37 参数估算相关性

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为：

$$y = 5.491E - 5 * (x^2) + 0.218 * x - 53.430$$

其中该函数表达式的残差平方和为 4.801，参数估算值相关性如上表。

5.1.19 催化剂组合编号为 A10 时乙醇转化率的分析

模型摘要和参数估算值

因变量: A10 乙醇转化率(%) 自变量为 A10 温度。

| 方程 | 模型摘要 | | | | | 参数估算值 | | | |
|----|------|---------|-------|-------|------|-----------|-----------|-------|----------|
| | R 方 | F | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | .994 | 165.928 | 2 | 2 | .006 | 135.651 | -.987 | .002 | |
| 三次 | .997 | 382.032 | 2 | 2 | .003 | 32.849 | .000 | -.001 | 3.219E-6 |
| 幂 | .995 | 595.830 | 1 | 3 | .000 | 6.638E-24 | 9.473 | | |
| S | .992 | 386.974 | 1 | 3 | .000 | 10.688 | -2970.115 | | |
| 指数 | .989 | 270.481 | 1 | 3 | .000 | .000 | .029 | | |

表 38 模型摘要和参数估算值

通过对附件 1 中催化剂组合为 50mg 5wt%Co/SiO₂- 50mg HAP-乙醇浓度 2.1ml/min 时的数据绘制散点图，并进行分析，可以得到如上数据。由表可知，选取二次函数作为最佳拟合模型，并进行拟合得到最终拟合结果如下：

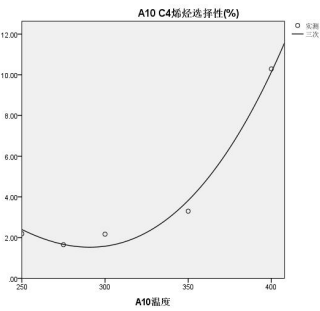


图 19 函数拟合图

参数估算值相关性

| | b0 | b1 | b2 | b3 |
|----|-------|-------|-------|-------|
| b0 | 1.000 | -.999 | .996 | -.992 |
| b1 | -.999 | 1.000 | -.999 | .997 |
| b2 | .996 | -.999 | 1.000 | -.999 |
| b3 | -.992 | .997 | -.999 | 1.000 |

表 39 参数估算相关性

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为：
$$y = 9.187E - 6 * (x^3) - 0.007 * (x^2) + 1.867 * x - 163.600$$

其中该函数表达式的残差平方和为 0.065，参数估算值相关性如上表。

5.1.20 催化剂组合编号为 A10 时 C4 烯烃选择性的分析
模型摘要和参数估算值

因变量: A10 C4 烯烃选择性(%) 自变量为 A10 温度。

| 方程 | 模型摘要 | | | | | 参数估算值 | | | |
|----|------|--------|-------|-------|------|----------|-----------|-------|----------|
| | R 方 | F | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | .978 | 45.444 | 2 | 2 | .022 | 59.711 | -.404 | .001 | |
| 三次 | .987 | 74.070 | 2 | 2 | .013 | 17.797 | .000 | -.001 | 1.323E-6 |
| 幂 | .766 | 9.819 | 1 | 3 | .052 | 1.269E-8 | 3.363 | | |
| S | .709 | 7.312 | 1 | 3 | .074 | 4.434 | -1015.963 | | |
| 指数 | .818 | 13.447 | 1 | 3 | .035 | .100 | .011 | | |

表 40 模型摘要和参数估算值

通过对附件 1 中催化剂组合为 50mg 5wt%Co/SiO₂- 50mg HAP-乙醇浓度 2.1ml/min 时的数据绘制散点图，并进行分析，可以得到如上数据。由表可知，选取二次函数作为最佳拟合模型，并进行拟合得到最终拟合结果如下：

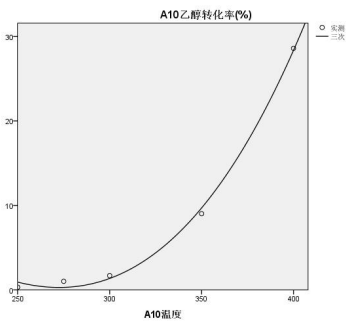


图 20 函数拟合图

参数估算值相关性

| | b0 | b1 | b2 | b3 |
|----|-------|-------|-------|-------|
| b0 | 1.000 | -.999 | .996 | -.992 |
| b1 | -.999 | 1.000 | -.999 | .997 |
| b2 | .996 | -.999 | 1.000 | -.999 |
| b3 | -.992 | .997 | -.999 | 1.000 |

表 41 参数估算相关性

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为：

$$y = 4.752E - 6 * (x^3) - 0.004 * (x^2) + 1.072 * x + 95.056$$
 其中该函数表达式的残差平方和为 0.223，参数估算值相关性如上表。

5.1.21 催化剂组合编号为 A11 时乙醇转化率的分析

模型摘要和参数估算值

因变量: A11 乙醇转化率(%) 自变量为 A11 温度。

| 方程 | 模型摘要 | | | | | 参数估算值 | | | |
|----|------|----------|-------|-------|------|-----------|-----------|-------|----------|
| | R 方 | F | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | .987 | 76.679 | 2 | 2 | .013 | 177.918 | -1.274 | .002 | |
| 三次 | .993 | 141.556 | 2 | 2 | .007 | 45.664 | .000 | -.002 | 4.181E-6 |
| 幂 | .998 | 1674.849 | 1 | 3 | .000 | 3.716E-27 | 10.742 | | |
| S | .993 | 455.917 | 1 | 3 | .000 | 11.771 | -3364.546 | | |
| 指数 | .994 | 489.368 | 1 | 3 | .000 | 5.778E-5 | .033 | | |

表 42 模型摘要和参数估算值

通过对附件 1 中催化剂组合为 50mg 1wt%Co/SiO₂+ 90mg 石英砂-乙醇浓度 1.68ml/min，无 HAPv 时的数据绘制散点图，并进行分析，可以得到如上数据。由表可知，选取二次函数作为最佳拟合模型，并进行拟合得到最终拟合结果如下：

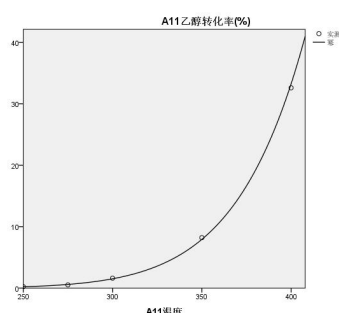


图 21 函数拟合图

参数估算值相关性

| | b0 | b1 |
|----|--------|--------|
| b0 | 1.000 | -1.000 |
| b1 | -1.000 | 1.000 |

表 42 参数估算相关性

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为： $\ln y = -359.349 + 64.127 * \ln x$
 其中该函数表达式的残差平方和为 178.760，参数估算值相关性如上表。

5.1.22 催化剂组合编号为 A11 时 C4 烯烃选择性的分析

模型摘要和参数估算值

因变量: A11 C4 烯烃选择性(%) 自变量为 A11 温度。

| 方程 | 模型摘要 | | | | | 参数估算值 | | | |
|----|-------|----------|-------|-------|------|-----------|-----------|-----------|----------|
| | R 方 | F | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | .999 | 1797.711 | 2 | 2 | .001 | 5.586 | -.067 | .000 | |
| 三次 | 1.000 | 2938.324 | 2 | 2 | .000 | -1.442 | .000 | -2.942E-5 | 2.198E-7 |
| 幂 | .859 | 18.345 | 1 | 3 | .023 | 2.412E-21 | 8.337 | | |
| S | .897 | 26.151 | 1 | 3 | .014 | 9.100 | -2674.211 | | |
| 指数 | .817 | 13.433 | 1 | 3 | .035 | .000 | .025 | | |

表 44 模型摘要和参数估算值

通过对附件 1 中催化剂组合为 50mg 1wt%Co/SiO₂+ 90mg 石英砂-乙醇浓度 1.68ml/min, 无 HAPv 时的数据绘制散点图, 并进行分析, 可以得到如上数据。由表可知, 选取二次函数作为最佳拟合模型, 并进行拟合得到最终拟合结果如下:

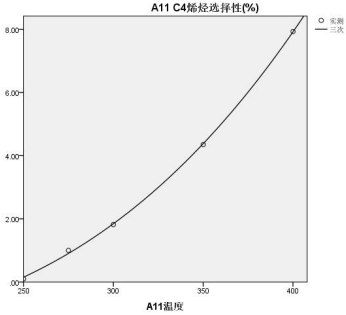


图 22 函数拟合图

参数估算值相关性

| | b0 | b1 | b2 | b3 |
|----|-------|-------|-------|-------|
| b0 | 1.000 | -.999 | .996 | -.992 |
| b1 | -.999 | 1.000 | -.999 | .997 |
| b2 | .996 | -.999 | 1.000 | -.999 |
| b3 | -.992 | .997 | -.999 | 1.000 |

表 45 参数估算相关性

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为:
$$y = 6.035E - 7 * (x^3) + 0.000 * (x^2) + 0.120 * x - 14.072$$

其中该函数表达式的残差平方和为 0.008, 参数估算值相关性如上表。

5.1.23 催化剂组合编号为 A12 时乙醇转化率的分析
模型摘要和参数估算值

因变量: A12 乙醇转化率(%) 自变量为 A12 温度。

| 方程 | R 方 | F | 模型摘要 | | | 参数估算值 | | | |
|----|-------|-----------|-------|-------|------|-----------|-----------|-------|----------|
| | | | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | .999 | 1089.424 | 2 | 2 | .001 | 121.526 | -.954 | .002 | |
| 三次 | 1.000 | 5842.982 | 2 | 2 | .000 | 21.735 | .000 | -.001 | 3.088E-6 |
| 幂 | .994 | 458.841 | 1 | 3 | .000 | 7.726E-18 | 7.227 | | |
| S | 1.000 | 11167.856 | 1 | 3 | .000 | 9.498 | -2275.938 | | |
| 指数 | .979 | 139.115 | 1 | 3 | .001 | .007 | .022 | | |

表 46 模型摘要和参数估算值

通过对附件 1 中催化剂组合为 50mg 1wt%Co/SiO₂- 50mg HAP-乙醇浓度 1.68ml/min 时的数据绘制散点图, 并进行分析, 可以得到如上数据。由表可知, 选取二次函数作为最佳拟合模型, 并进行拟合得到最终拟合结果如下:

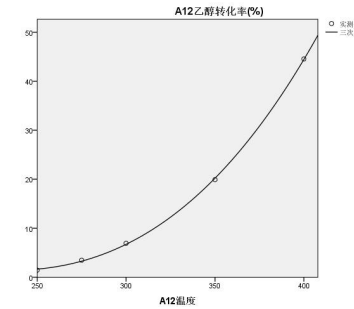


图 23 函数拟合图

参数估算值相关性

| | b0 | b1 | b2 | b3 |
|----|-------|-------|-------|-------|
| b0 | 1.000 | -.999 | .996 | -.992 |
| b1 | -.999 | 1.000 | -.999 | .997 |
| b2 | .996 | -.999 | 1.000 | -.999 |
| b3 | -.992 | .997 | -.999 | 1.000 |

表 47 参数估算相关性

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为：
 $y = 5.421E - 6 * (x^3) - 0.003 * (x^2) + 0.730 * x - 55.051$
其中该函数表达式的残差平方和为 0.000，参数估算值相关性如上表。

5.1.24 催化剂组合编号为 A12 时 C4 烯烃选择性的分析
模型摘要和参数估算值

因变量: A12 C4 烯烃选择性(%) 自变量为 A12 温度。

| 方程 | R 方 | F | 模型摘要 | | | 参数估算值 | | | |
|----|------|----------|-------|-------|------|----------|-----------|------|----------|
| | | | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | .999 | 1346.443 | 2 | 2 | .001 | 45.325 | -.383 | .001 | |
| 三次 | .999 | 853.328 | 2 | 2 | .001 | 14.658 | -.093 | .000 | 9.203E-7 |
| 幂 | .996 | 727.600 | 1 | 3 | .000 | 2.925E-9 | 3.878 | | |
| S | .986 | 214.615 | 1 | 3 | .001 | 6.562 | -1211.704 | | |
| 指数 | .996 | 791.042 | 1 | 3 | .000 | .298 | .012 | | |

表 48 模型摘要和参数估算值

通过对附件 1 中催化剂组合为 50mg 1wt%Co/SiO2- 50mg HAP-乙醇浓度 1.68ml/min 时的数据绘制散点图，并进行分析，可以得到如上数据。由表可知，选取二次函数作为最佳拟合模型，并进行拟合得到最终拟合结果如下：

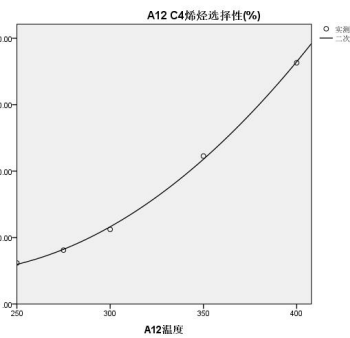


图 24 函数拟合图

参数估算值相关性

| | b0 | b1 | b2 |
|----|-------|-------|-------|
| b0 | 1.000 | -.998 | .992 |
| b1 | -.998 | 1.000 | -.998 |
| b2 | .992 | -.998 | 1.000 |

表 49 参数估算相关性

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为：
 $y = 0.001 * (x^2) - 0.383 * x + 45.325$
其中该函数表达式的残差平方和为 0.467，参数估算值相关性如上表。

5.1.25 催化剂组合编号为 A13 时乙醇转化率的分析
模型摘要和参数估算值

因变量: A13 乙醇转化率(%) 自变量为 A13 温度。

| 方程 | R 方 | F | 模型摘要 | | | 参数估算值 | | | |
|----|------|----------|-------|-------|------|-----------|-----------|-------|----------|
| | | | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | .997 | 285.350 | 2 | 2 | .003 | 164.302 | -1.210 | .002 | |
| 三次 | .999 | 807.516 | 2 | 2 | .001 | 38.103 | .000 | -.002 | 3.935E-6 |
| 幂 | .996 | 689.733 | 1 | 3 | .000 | 2.671E-18 | 7.362 | | |
| S | .984 | 183.485 | 1 | 3 | .001 | 9.285 | -2297.695 | | |
| 指数 | .998 | 1701.905 | 1 | 3 | .000 | .004 | .023 | | |

表 50 模型摘要和参数估算值

通过对附件 1 中催化剂组合为 67mg 1wt%Co/SiO₂- 33mg HAP-乙醇浓度 1.68ml/min 时的数据绘制散点图，并进行分析，可以得到如上数据。由表可知，选取二次函数作为最佳拟合模型，并进行拟合得到最终拟合结果如下：

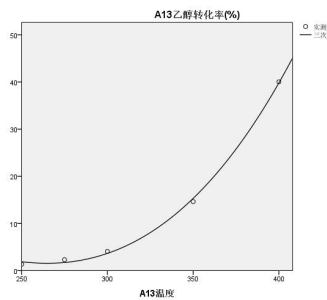


图 25 函数拟合图

参数估算值相关性

| | b0 | b1 | b2 | b3 |
|----|-------|-------|-------|-------|
| b0 | 1.000 | -.999 | .996 | -.992 |
| b1 | -.999 | 1.000 | -.999 | .997 |
| b2 | .996 | -.999 | 1.000 | -.999 |
| b3 | -.992 | .997 | -.999 | 1.000 |

表 51 参数估算相关性

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为：
$$y = 9.635E - 6 * (x^3) - 0.007 * (x^2) + 1.783 * x + 149.516$$

其中该函数表达式的残差平方和为 0.010，参数估算值相关性如上表。

5.1.26 催化剂组合编号为 A13 时 C4 烯烃选择性的分析

模型摘要和参数估算值

因变量: A13 C4 烯烃选择性(%) 自变量为 A13 温度。

| 方程 | 模型摘要 | | | | | 参数估算值 | | | |
|----|------|---------|-------|-------|------|----------|-----------|------|-----------|
| | R 方 | F | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | .982 | 53.518 | 2 | 2 | .018 | -64.333 | .342 | .000 | |
| 三次 | .982 | 55.974 | 2 | 2 | .018 | -56.581 | .261 | .000 | -3.052E-7 |
| 幂 | .961 | 73.456 | 1 | 3 | .003 | 6.072E-9 | 3.740 | | |
| S | .979 | 137.825 | 1 | 3 | .001 | 6.411 | -1185.088 | | |
| 指数 | .934 | 42.439 | 1 | 3 | .007 | .338 | .012 | | |

表 52 模型摘要和参数估算值

通过对附件 1 中催化剂组合为 67mg 1wt%Co/SiO₂- 33mg HAP-乙醇浓度 1.68ml/min 时的数据绘制散点图，并进行分析，可以得到如上数据。由表可知，选取二次函数作为最佳拟合模型，并进行拟合得到最终拟合结果如下：

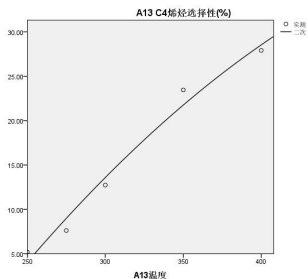


图 26 函数拟合图

参数估算值相关性

| | b0 | b1 | b2 |
|----|-------|-------|-------|
| b0 | 1.000 | -.998 | .992 |
| b1 | -.998 | 1.000 | -.998 |
| b2 | .992 | -.998 | 1.000 |

表 53 参数估算相关性

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为：

$$y = 0.000 * (x^2) + 0.342 * x - 64.333$$

其中该函数表达式的残差平方和为 7.214，参数估算值相关性如上表。

5.1.27 催化剂组合编号为 A14 时乙醇转化率的分析

模型摘要和参数估算值

因变量: A14 乙醇转化率(%) 自变量为 A14 温度。

| 方程 | 模型摘要 | | | | | 参数估算值 | | | |
|----|------|----------|-------|-------|------|-----------|-----------|-------|----------|
| | R 方 | F | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | .997 | 351.384 | 2 | 2 | .003 | 137.991 | -1.083 | .002 | |
| 三次 | .999 | 717.240 | 2 | 2 | .001 | 25.253 | .000 | -.001 | 3.538E-6 |
| 幂 | .994 | 538.570 | 1 | 3 | .000 | 1.146E-15 | 6.416 | | |
| S | .999 | 2909.131 | 1 | 3 | .000 | 9.006 | -2018.871 | | |
| 指数 | .982 | 161.113 | 1 | 3 | .001 | .021 | .020 | | |

表 54 模型摘要和参数估算值

通过对附件 1 中催化剂组合为 33mg 1wt%Co/SiO₂- 67mg HAP-乙醇浓度 1.68ml/min 时的数据绘制散点图，并进行分析，可以得到如上数据。由表可知，选取二次函数作为最佳拟合模型，并进行拟合得到最终拟合结果如下：

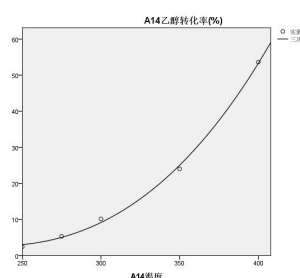


图 27 函数拟合图

参数估算值相关性

| | b0 | b1 | b2 | b3 |
|----|-------|-------|-------|-------|
| b0 | 1.000 | -.999 | .996 | -.992 |
| b1 | -.999 | 1.000 | -.999 | .997 |
| b2 | .996 | -.999 | 1.000 | -.999 |
| b3 | -.992 | .997 | -.999 | 1.000 |

表 55 参数估算相关性

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为：

$$y = 1.084E - 5 * (x^3) - 0.008 * (x^2) + 2.285 * x - 215.137$$

其中该函数表达式的残差平方和为 0.310，参数估算值相关性如上表。

5.1.28 催化剂组合编号为 A14 时 C4 烯烃选择性的分析

模型摘要和参数估算值

因变量: A14 C4 烯烃选择性(%) 自变量为 A14 温度

| 方程 | 模型摘要 | | | | | 参数估算值 | | | |
|----|------|----------|-------|-------|------|-----------|-----------|------|----------|
| | R 方 | F | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | .999 | 1862.218 | 2 | 2 | .001 | 64.863 | -.494 | .001 | |
| 三次 | .999 | 1290.354 | 2 | 2 | .001 | 32.257 | -.184 | .000 | 9.939E-7 |
| 幂 | .983 | 174.830 | 1 | 3 | .001 | 1.159E-13 | 5.482 | | |
| S | .966 | 84.314 | 1 | 3 | .003 | 7.238 | -1705.611 | | |
| 指数 | .991 | 332.590 | 1 | 3 | .000 | .024 | .017 | | |

表 56 模型摘要和参数估算值

通过对附件 1 中催化剂组合为 33mg 1wt%Co/SiO₂- 67mg HAP-乙醇浓度 1.68ml/min 时的数据绘制散点图，并进行分析，可以得到如上数据。由表可知，选取二次函数作为最佳拟合模型，并进行拟合得到最终拟合结果如下：

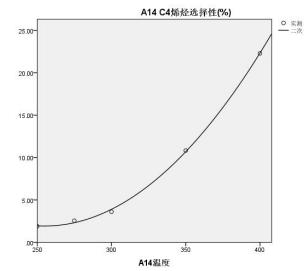


图 28 函数拟合图

参数估算值相关性

| | b0 | b1 | b2 |
|----|-------|-------|-------|
| b0 | 1.000 | -.998 | .992 |
| b1 | -.998 | 1.000 | -.998 |
| b2 | .992 | -.998 | 1.000 |

表 57 参数估算值相关性

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为：

$$y = 0.001 * (x^2) - 0.494 * x + 64.863$$

其中该函数表达式的残差平方和为 0.160，参数估算值相关性如上表。

5.1.29 催化剂组合编号为 B1 时乙醇转化率的分析

模型摘要和参数估算值

因变量: B1 乙醇转化率(%) 自变量为 B1 温度

| 方程 | 模型摘要 | | | | | 参数估算值 | | | |
|----|-------|----------|-------|-------|------|-----------|-----------|-------|----------|
| | R 方 | F | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | .999 | 889.039 | 2 | 2 | .001 | 121.238 | -.948 | .002 | |
| 三次 | 1.000 | 3888.018 | 2 | 2 | .000 | 22.121 | .000 | -.001 | 3.073E-6 |
| 幂 | .994 | 471.414 | 1 | 3 | .000 | 7.871E-18 | 7.219 | | |
| S | 1.000 | 9795.531 | 1 | 3 | .000 | 9.466 | -2273.367 | | |
| 指数 | .979 | 141.923 | 1 | 3 | .001 | .007 | .022 | | |

表 58 模型摘要和参数估算值

通过对附件 1 中催化剂组合为 50mg 1wt%Co/SiO₂- 50mg HAP-乙醇浓度 1.68ml/min 时的数据绘制散点图，并进行分析，可以得到如上数据。由表可知，选取二次函数作为最佳拟合模型，并进行拟合得到最终拟合结果如下：

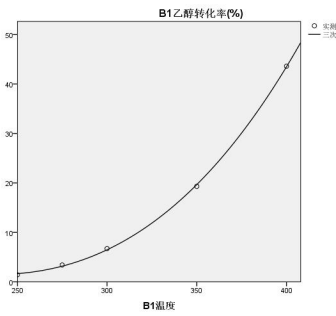


图 29 函数拟合图

参数估算值相关性

| | b0 | b1 | b2 | b3 |
|----|-------|-------|-------|-------|
| b0 | 1.000 | -.999 | .996 | -.992 |
| b1 | -.999 | 1.000 | -.999 | .997 |
| b2 | .996 | -.999 | 1.000 | -.999 |
| b3 | -.992 | .997 | -.999 | 1.000 |

表 59 参数估算值相关性

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为：

$$y = 5.871E - 6 * (x^3) - 0.004 * (x^2) + 0.875 * x - 69.996$$

其中该函数表达式的残差平方和为 0.000，参数估算值相关性如上表。

5.1.30 催化剂组合编号为 B1 时 C4 烯烃选择性的分析

模型摘要和参数估算值

因变量: B1 C4 烯烃选择性(%) 自变量为 B1 温度

| 方程 | 模型摘要 | | | | | 参数估算值 | | | |
|----|------|---------|-------|-------|------|-----------|-----------|------|----------|
| | R 方 | F | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | .997 | 353.204 | 2 | 2 | .003 | 39.068 | -.365 | .001 | |
| 三次 | .996 | 281.094 | 2 | 2 | .004 | 6.998 | -.064 | .000 | 9.401E-7 |
| 幂 | .994 | 469.457 | 1 | 3 | .000 | 6.424E-10 | 4.157 | | |
| S | .987 | 225.337 | 1 | 3 | .001 | 6.934 | -1300.576 | | |
| 指数 | .991 | 324.487 | 1 | 3 | .000 | .248 | .013 | | |

表 60 模型摘要和参数估算值

通过对附件 1 中催化剂组合为 50mg 1wt%Co/SiO₂- 50mg HAP-乙醇浓度 1.68ml/min 时的数据绘制散点图，并进行分析，可以得到如上数据。由表可知，选取二次函数作为最佳拟合模型，并进行拟合得到最终拟合结果如下：

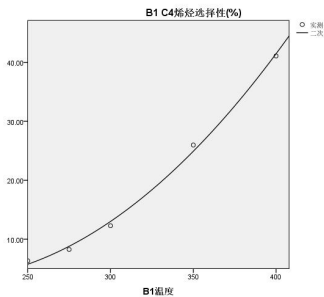


图 30 函数拟合图

参数估算值相关性

| | b0 | b1 | b2 | b3 |
|----|-------|-------|-------|-------|
| b0 | 1.000 | -.999 | .996 | -.992 |
| b1 | -.999 | 1.000 | -.999 | .997 |
| b2 | .996 | -.999 | 1.000 | -.999 |
| b3 | -.992 | .997 | -.999 | 1.000 |

表 61 参数估算相关性

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为：

$$y = 0.001 * (x^2) - 0.365 * x + 39.068$$

其中该函数表达式的残差平方和为 2.421，参数估算值相关性如上表。

5.1.31 催化剂组合编号为 B2 时乙醇转化率的分析

模型摘要和参数估算值

因变量: B2 乙醇转化率(%) 自变量为 B2 温度

| 方程 | 模型摘要 | | | | | 参数估算值 | | | |
|----|------|----------|-------|-------|------|-----------|-----------|-------|----------|
| | R 方 | F | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | .991 | 113.814 | 2 | 2 | .009 | 188.255 | -1.365 | .003 | |
| 三次 | .995 | 213.600 | 2 | 2 | .005 | 46.570 | .000 | -.002 | 4.477E-6 |
| 幂 | .987 | 229.290 | 1 | 3 | .001 | 1.761E-14 | 5.900 | | |
| S | .968 | 92.015 | 1 | 3 | .002 | 8.175 | -1834.661 | | |
| 指数 | .997 | 1077.689 | 1 | 3 | .000 | .026 | .019 | | |

表 62 模型摘要和参数估算值

通过对附件 1 中催化剂组合为 100mg 1wt%Co/SiO₂- 100mg HAP-乙醇浓度 1.68ml/min 时的数据绘制散点图，并进行分析，可以得到如上数据。由表可知，选取二次函数作为最佳拟合模型，并进行拟合得到最终拟合结果如下：

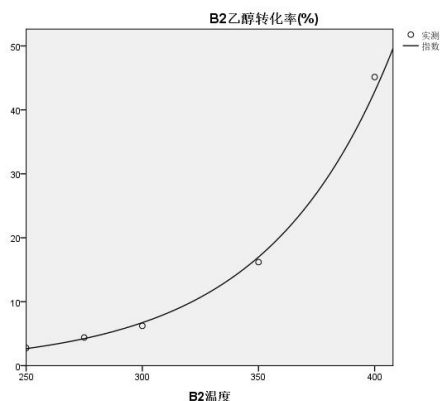


图 31 函数拟合图

参数估算值相关性

| | b0 | b1 |
|----|-------|-------|
| b0 | 1.000 | -.986 |
| b1 | -.986 | 1.000 |

表 63 参数估算相关性

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为：
 $\ln y = \ln 6.771E-9 + 0.112 * x$

其中该函数表达式的残差平方和为 556.443，参数估算值相关性如上表。

5.1.32 催化剂组合编号为 B2 时 C4 烯烃选择性的分析

模型摘要和参数估算值

因变量: B2 C4 烯烃选择性(%) 自变量为 B2 温度

| 方程 | R 方 | F | 模型摘要 | | | 参数估算值 | | | |
|----|------|---------|-------|-------|------|-----------|-----------|------|----------|
| | | | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | .998 | 440.665 | 2 | 2 | .002 | 41.329 | -.403 | .001 | |
| 三次 | .997 | 337.385 | 2 | 2 | .003 | 7.176 | -.081 | .000 | 1.007E-6 |
| 幂 | .992 | 377.152 | 1 | 3 | .000 | 2.609E-13 | 5.461 | | |
| S | .994 | 478.696 | 1 | 3 | .000 | 7.964 | -1715.872 | | |
| 指数 | .981 | 155.684 | 1 | 3 | .001 | .051 | .017 | | |

表 64 模型摘要和参数估算值

通过对附件 1 中催化剂组合为 100mg 1wt%Co/SiO₂-100mg HAP-乙醇浓度 1.68ml/min 时的数据绘制散点图，并进行分析，可以得到如上数据。由表可知，选取二次函数作为最佳拟合模型，并进行拟合得到最终拟合结果如下：

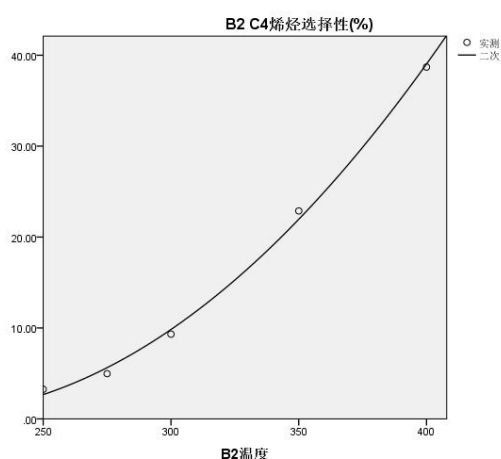


图 32 函数拟合图

参数估算值相关性

| | b0 | b1 | b2 |
|----|-------|-------|-------|
| b0 | 1.000 | -.998 | .992 |
| b1 | -.998 | 1.000 | -.998 |
| b2 | .992 | -.998 | 1.000 |

表 65 参数估算相关性

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为：
 $y = 0.001 * (x^2) - 0.403 * x + 41.329$
 其中该函数表达式的残差平方和为 2.018，参数估算值相关性如上表。

5.1.33 催化剂组合编号为 B3 时乙醇转化率的分析

模型摘要和参数估算值

因变量: B3 乙醇转化率(%) 自变量为 B3 温度

| 方程 | 模型摘要 | | | | | 参数估算值 | | | |
|----|------|---------|-------|-------|------|-----------|-----------|-------|----------|
| | R 方 | F | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | .991 | 174.459 | 2 | 3 | .001 | 106.954 | -.771 | .001 | |
| 三次 | .996 | 342.516 | 2 | 3 | .000 | 26.440 | .000 | -.001 | 2.498E-6 |
| 幂 | .984 | 249.860 | 1 | 4 | .000 | 2.324E-22 | 8.807 | | |
| S | .966 | 114.493 | 1 | 4 | .000 | 9.616 | -2728.424 | | |
| 指数 | .991 | 429.404 | 1 | 4 | .000 | .000 | .028 | | |

表 66 模型摘要和参数估算值

通过对附件 1 中催化剂组合为 10mg 1wt%Co/SiO₂- 10mg HAP-乙醇浓度 1.68ml/min 时的数据绘制散点图，并进行分析，可以得到如上数据。由表可知，选取二次函数作为最佳拟合模型，并进行拟合得到最终拟合结果如下：

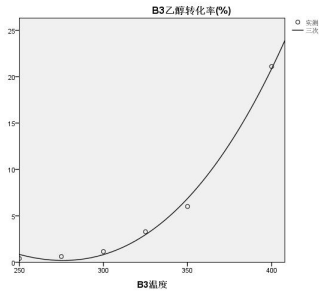


图 33 函数拟合图

参数估算值相关性

| | b0 | b1 | b2 | b3 |
|----|-------|-------|-------|-------|
| b0 | 1.000 | -.999 | .997 | -.994 |
| b1 | -.999 | 1.000 | -.999 | .997 |
| b2 | .997 | -.999 | 1.000 | -.999 |
| b3 | -.994 | .997 | -.999 | 1.000 |

表 67 参数估算相关性

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为：
 $y = 7.823E - 6 * (x^3) - 0.006 * (x^2) + 1.671 * x - 149.660$
其中该函数表达式的残差平方和为 0.231，参数估算值相关性如上表。

5.1.34 催化剂组合编号为 B3 时 C4 烯烃选择性分析

模型摘要和参数估算值

因变量: B3 C4 烯烃选择性(%) 自变量为 B3 温度

| 方程 | 模型摘要 | | | | | 参数估算值 | | | |
|----|------|---------|-------|-------|------|-----------|-----------|------|----------|
| | R 方 | F | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | .976 | 61.782 | 2 | 3 | .004 | 20.970 | -.190 | .000 | |
| 三次 | .977 | 62.625 | 2 | 3 | .004 | 1.066 | .000 | .000 | 6.157E-7 |
| 幂 | .965 | 109.004 | 1 | 4 | .000 | 5.035E-10 | 4.088 | | |
| S | .967 | 117.810 | 1 | 4 | .000 | 6.219 | -1279.868 | | |
| 指数 | .952 | 80.144 | 1 | 4 | .001 | .142 | .013 | | |

表 68 模型摘要和参数估算值

通过对附件 1 中催化剂组合为 10mg 1wt%Co/SiO₂- 10mg HAP-乙醇浓度 1.68ml/min 时的数据绘制散点图，并进行分析，可以得到如上数据。由表可知，选取二次函数作为最佳拟合模型，并进行拟合得到最终拟合结果如下：

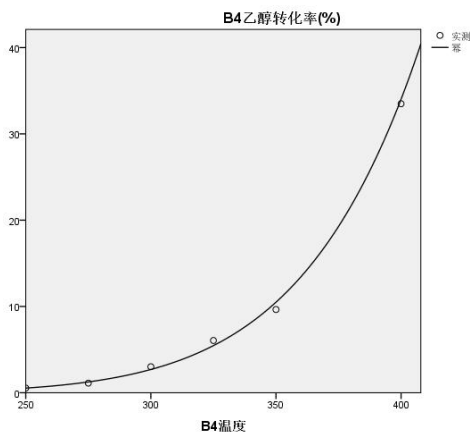


图 34 函数拟合图

参数估算值相关性

| | b0 | b1 | b2 | b3 |
|----|-------|-------|-------|-------|
| b0 | 1.000 | -.999 | .997 | -.994 |
| b1 | -.999 | 1.000 | -.999 | .997 |
| b2 | .997 | -.999 | 1.000 | -.999 |
| b3 | -.994 | .997 | -.999 | 1.000 |

表 69 参数估算值相关性

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为：

$$y = 1.711E - 6 * (x^3) - 0.001 * (x^2) + 0.344 * x - 35.166$$

其中该函数表达式的残差平方和为 5.177，参数估算值相关性如上表。

5.1.35 催化剂组合编号为 B4 时乙醇转化率的分析

模型摘要和参数估算值

因变量: B4 乙醇转化率(%) 自变量为 B4 温度

| 方程 | 模型摘要 | | | | | 参数估算值 | | | |
|----|------|---------|-------|-------|------|-----------|-----------|-------|----------|
| | R 方 | F | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | .987 | 114.135 | 2 | 3 | .001 | 155.275 | -1.129 | .002 | |
| 三次 | .992 | 183.735 | 2 | 3 | .001 | 37.621 | .000 | -.001 | 3.676E-6 |
| 幂 | .996 | 999.268 | 1 | 4 | .000 | 4.027E-22 | 8.811 | | |
| S | .993 | 589.424 | 1 | 4 | .000 | 10.260 | -2751.065 | | |
| 指数 | .988 | 326.097 | 1 | 4 | .000 | .001 | .027 | | |

表 70 模型摘要和参数估算值

通过对附件 1 中催化剂组合为 25mg 1wt%Co/SiO₂- 25mg HAP-乙醇浓度 1.68ml/min 时的数据绘制散点图，并进行分析，可以得到如上数据。由表可知，选取二次函数作为最佳拟合模型，并进行拟合得到最终拟合结果如下：

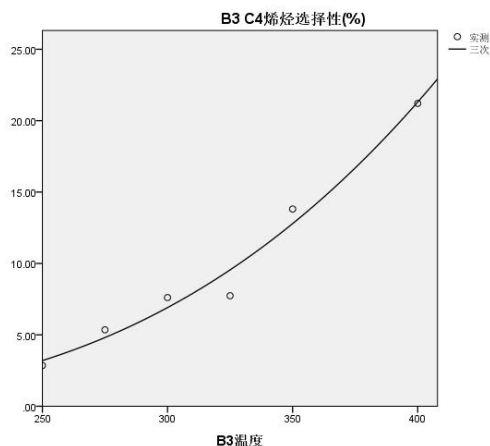


图 35 函数拟合图

参数估算值相关性

| | b0 | b1 |
|----|--------|--------|
| b0 | 1.000 | -1.000 |
| b1 | -1.000 | 1.000 |

表 71 参数估算值相关性

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为：

$$\ln y = -358.089 + 63.883 * \ln x$$

其中该函数表达式的残差平方和为 194.295，参数估算值相关性如上表。

5.1.36 催化剂组合编号为 B4 时 C4 烯烃选择性的分析

模型摘要和参数估算值

| 因变量: B4 C4 烯烃选择性(%) 自变量为 B4 温度 | | | | | | | | | |
|--------------------------------|------|--------|-------|-------|------|----------|----------|------|----------|
| 方程 | 模型摘要 | | | | | 参数估算值 | | | |
| | R 方 | F | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | .974 | 55.500 | 2 | 3 | .004 | 81.074 | -.549 | .001 | |
| 三次 | .971 | 49.665 | 2 | 3 | .005 | 46.726 | -.225 | .000 | 1.018E-6 |
| 幂 | .729 | 10.746 | 1 | 4 | .031 | 1.713E-6 | 2.692 | | |
| S | .672 | 8.178 | 1 | 4 | .046 | 4.806 | -808.099 | | |
| 指数 | .779 | 14.072 | 1 | 4 | .020 | .567 | .009 | | |

表 72 模型摘要和参数估算值

通过对附件 1 中催化剂组合为 25mg 1wt%Co/SiO₂- 25mg HAP-乙醇浓度 1.68ml/min 时的数据绘制散点图，并进行分析，可以得到如上数据。由表可知，选取三次函数作为最佳拟合模型，并进行拟合得到最终拟合结果如下：

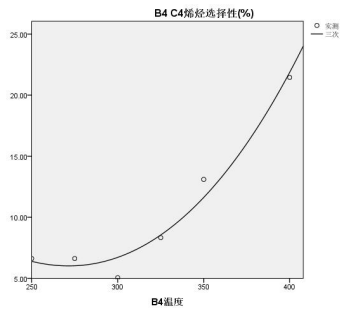


图 36 函数拟合图

| 参数估算值相关性 | | | | |
|----------|-------|-------|-------|-------|
| | b0 | b1 | b2 | b3 |
| b0 | 1.000 | -.999 | .997 | -.994 |
| b1 | -.999 | 1.000 | -.999 | .997 |
| b2 | .997 | -.999 | 1.000 | -.999 |
| b3 | -.994 | .997 | -.999 | 1.000 |

表 73 参数估算相关性

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为：
 $y = -6.409E - 6 * (x^3) + 0.007 * (x^2) - 2.549 * x + 291.319$
其中该函数表达式的残差平方和为 3.356，参数估算值相关性如上表。

5.1.37 催化剂组合编号为 B5 时乙醇转化率的分析

模型摘要和参数估算值

| 因变量: B5 乙醇转化率(%) 自变量为 B5 温度 | | | | | | | | | |
|-----------------------------|------|----------|-------|-------|------|-----------|-----------|-------|----------|
| 方程 | 模型摘要 | | | | | 参数估算值 | | | |
| | R 方 | F | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | .991 | 173.734 | 2 | 3 | .001 | 185.741 | -1.355 | .003 | |
| 三次 | .995 | 319.396 | 2 | 3 | .000 | 44.463 | .000 | -.002 | 4.405E-6 |
| 幂 | .993 | 576.804 | 1 | 4 | .000 | 9.321E-16 | 6.392 | | |
| S | .977 | 168.592 | 1 | 4 | .000 | 8.528 | -1982.031 | | |
| 指数 | .999 | 3932.252 | 1 | 4 | .000 | .014 | .020 | | |

表 74 模型摘要和参数估算值

通过对附件 1 中催化剂组合为 50mg 1wt%Co/SiO₂- 50mg HAP-乙醇浓度 2.1ml/min 时的数据绘制散点图，并进行分析，可以得到如上数据。由表可知，选取二次函数作为最佳拟合模型，并进行拟合得到最终拟合结果如下：

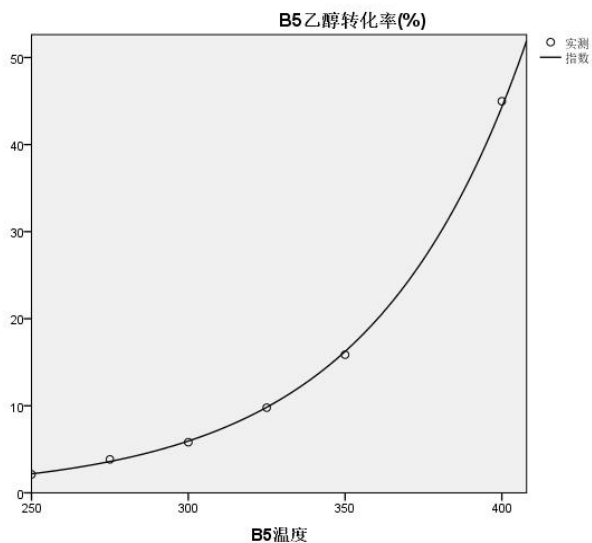


图 37 函数拟合图

参数估算值相关性

| | b0 | b1 |
|----|-------|-------|
| b0 | 1.000 | -.988 |
| b1 | -.988 | 1.000 |

表 75 参数估算值相关性

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为:

$$\ln y = \ln 1.315E-8 + 0.105 * x$$

其中该函数表达式的残差平方和为 632.432，参数估算值相关性如上表。

5.1.38 催化剂组合编号为 B5 时 C4 烯烃选择性的分析

模型摘要和参数估算值

因变量: B5 C4 烯烃选择性(%) 自变量为 B5 温度

| 方程 | 模型摘要 | | | | | 参数估算值 | | | |
|----|------|---------|-------|-------|------|-----------|-----------|------|----------|
| | R 方 | F | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | .998 | 842.038 | 2 | 3 | .000 | 32.402 | -.276 | .001 | |
| 三次 | .998 | 670.249 | 2 | 3 | .000 | 10.272 | -.067 | .000 | 6.624E-7 |
| 幂 | .988 | 337.290 | 1 | 4 | .000 | 9.409E-10 | 4.011 | | |
| S | .977 | 173.459 | 1 | 4 | .000 | 6.299 | -1247.333 | | |
| 指数 | .987 | 313.504 | 1 | 4 | .000 | .180 | .013 | | |

表 76 模型摘要和参数估算值

通过对附件 1 中催化剂组合为 50mg 1wt%Co/SiO₂- 50mg HAP-乙醇浓度 2.1ml/min 时的数据绘制散点图，并进行分析，可以得到如上数据。由表可知，选取二次函数作为最佳拟合模型，并进行拟合得到最终拟合结果如下：

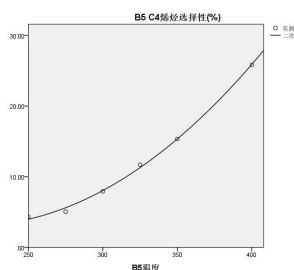


图 38 函数拟合图

参数估算值相关性

| | b0 | b1 | b2 |
|----|-------|-------|-------|
| b0 | 1.000 | -.997 | .989 |
| b1 | -.997 | 1.000 | -.997 |
| b2 | .989 | -.997 | 1.000 |

表 77 参数估算值相关性

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为:

$$y = 0.001 * (x^2) - 0.276 * x + 32.402$$

其中该函数表达式的残差平方和为 0.580，参数估算值相关性如上表。

5.1.39 催化剂组合编号为 B6 时乙醇转化率的分析

模型摘要和参数估算值

因变量: B6 乙醇转化率(%) 自变量为 B6 温度

| 方程 | 模型摘要 | | | | | 参数估算值 | | | |
|----|------|---------|-------|-------|------|-----------|-----------|-------|----------|
| | R 方 | F | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | .990 | 152.328 | 2 | 3 | .001 | 190.083 | -1.445 | .003 | |
| 三次 | .993 | 225.071 | 2 | 3 | .001 | 39.867 | .000 | -.002 | 4.724E-6 |
| 幂 | .979 | 185.234 | 1 | 4 | .000 | 3.132E-15 | 6.270 | | |
| S | .984 | 239.713 | 1 | 4 | .000 | 8.985 | -1965.111 | | |
| 指数 | .965 | 109.527 | 1 | 4 | .000 | .029 | .019 | | |

表 78 模型摘要和参数估算值

通过对附件 1 中催化剂组合为 75mg 1wt%Co/SiO₂- 75mg HAP-乙醇浓度 1.68ml/min 时的数据绘制散点图，并进行分析，可以得到如上数据。由表可知，选取二次函数作为最佳拟合模型，并进行拟合得到最终拟合结果如下：

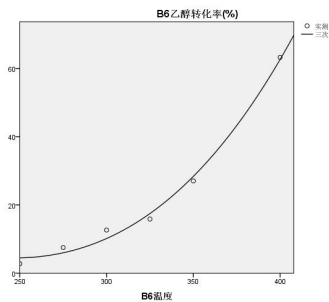


图 39 函数拟合图

参数估算值相关性

| | b0 | b1 | b2 | b3 |
|----|-------|-------|-------|-------|
| b0 | 1.000 | -.999 | .997 | -.994 |
| b1 | -.999 | 1.000 | -.999 | .997 |
| b2 | .997 | -.999 | 1.000 | -.999 |
| b3 | -.994 | .997 | -.999 | 1.000 |

表 79 参数估算相关性

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为：

$$y = 2.246E - 5 * (x^3) - 0.019 * (x^2) + 5.566 * x - 546.746$$

其中该函数表达式的残差平方和为 3.302，参数估算值相关性如上表。

5.1.40 催化剂组合编号为 B6 时 C4 烯烃选择性的分析

模型摘要和参数估算值

因变量: B6 C4 烯烃选择性(%) 自变量为 B6 温度

| 方程 | 模型摘要 | | | | | 参数估算值 | | | |
|----|------|--------|-------|-------|------|-----------|-----------|------|------|
| | R 方 | F | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | .971 | 50.099 | 2 | 3 | .005 | -12.129 | -.022 | .000 | |
| 三次 | .971 | 50.099 | 2 | 3 | .005 | -12.129 | -.022 | .000 | .000 |
| 幂 | .949 | 74.343 | 1 | 4 | .001 | 3.253E-11 | 4.625 | | |
| S | .949 | 75.056 | 1 | 4 | .001 | 7.101 | -1446.320 | | |
| 指数 | .936 | 58.305 | 1 | 4 | .002 | .119 | .014 | | |

表 80 模型摘要和参数估算值

通过对附件 1 中催化剂组合为 75mg 1wt%Co/SiO₂- 75mg HAP-乙醇浓度 1.68ml/min 时的数据绘制散点图，并进行分析，可以得到如上数据。由表可知，选取二次函数作为最佳拟合模型，并进行拟合得到最终拟合结果如下：

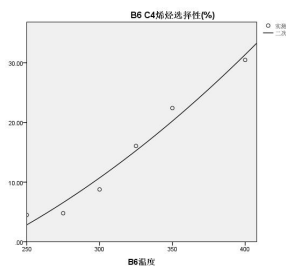


图 40 函数拟合图

参数估算值相关性

| | b0 | b1 | b2 |
|----|-------|-------|-------|
| b0 | 1.000 | -.997 | .989 |
| b1 | -.997 | 1.000 | -.997 |
| b2 | .989 | -.997 | 1.000 |

表 81 参数估算值相关性

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为：

$$y = 0.000 * (x^3) - 0.022 * (x^2) + 5.566 * x - 12.129$$

其中该函数表达式的残差平方和为 15.915，参数估算值相关性如上表。

5.1.41 催化剂组合编号为 B7 时乙醇转化率的分析

模型摘要和参数估算值

因变量: B7 乙醇转化率(%) 自变量为 B7 温度

| 方程 | 模型摘要 | | | | | 参数估算值 | | | |
|----|------|----------|-------|-------|------|-----------|-----------|-------|----------|
| | R 方 | F | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | .997 | 439.470 | 2 | 3 | .000 | 228.711 | -1.711 | .003 | |
| 三次 | .998 | 945.876 | 2 | 3 | .000 | 49.725 | .000 | -.002 | 5.531E-6 |
| 幂 | .996 | 963.553 | 1 | 4 | .000 | 5.391E-14 | 5.797 | | |
| S | .984 | 241.789 | 1 | 4 | .000 | 8.581 | -1801.328 | | |
| 指数 | .997 | 1543.744 | 1 | 4 | .000 | .050 | .018 | | |

表 82 模型摘要和参数估算值

通过对附件 1 中催化剂组合为 75mg 1wt%Co/SiO₂- 75mg HAP-乙醇浓度 1.68ml/min 时的数据绘制散点图，并进行分析，可以得到如上数据。由表可知，选取二次函数作为最佳拟合模型，并进行拟合得到最终拟合结果如下：

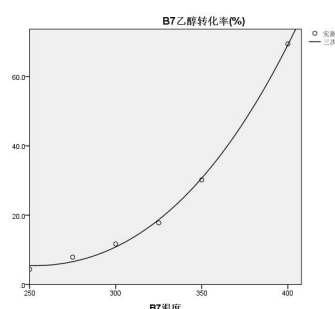


图 41 函数拟合图

参数估算值相关性

| | b0 | b1 | b2 | b3 |
|----|-------|-------|-------|-------|
| b0 | 1.000 | -.999 | .997 | -.994 |
| b1 | -.999 | 1.000 | -.999 | .997 |
| b2 | .997 | -.999 | 1.000 | -.999 |
| b3 | -.994 | .997 | -.999 | 1.000 |

表 83 参数估算值相关性

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为：

$$y = 1.472E - 5 * (x^3) - 0.011 * (x^2) + 2.885 * x - 254.303$$

其中该函数表达式的残差平方和为 1.206，参数估算值相关性如上表。

5.1.42 催化剂组合编号为 B7 时 C4 烯烃选择性的分析

模型摘要和参数估算值

因变量: B7 C4 烯烃选择性(%) 自变量为 B7 温度

| 方程 | 模型摘要 | | | | | 参数估算值 | | | |
|----|------|---------|-------|-------|------|-----------|-----------|------|------|
| | R 方 | F | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | .997 | 523.678 | 2 | 3 | .000 | -9.858 | -.060 | .000 | |
| 三次 | .997 | 523.678 | 2 | 3 | .000 | -9.858 | -.060 | .000 | .000 |
| 幂 | .975 | 154.703 | 1 | 4 | .000 | 8.785E-12 | 4.884 | | |
| S | .990 | 402.233 | 1 | 4 | .000 | 7.582 | -1539.007 | | |
| 指数 | .949 | 73.738 | 1 | 4 | .001 | .114 | .015 | | |

表 84 模型摘要和参数估算值

通过对附件 1 中催化剂组合为 75mg 1wt%Co/SiO₂- 75mg HAP-乙醇浓度 1.68ml/min 时的数据绘制散点图，并进行分析，可以得到如上数据。由表可知，选取二次函数作为最佳拟合模型，并进行拟合得到最终拟合结果如下：

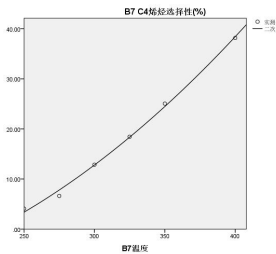


图 42 函数拟合图

参数估算值相关性

| | b0 | b1 | b2 |
|----|-------|-------|-------|
| b0 | 1.000 | -.997 | .989 |
| b1 | -.997 | 1.000 | -.997 |
| b2 | .989 | -.997 | 1.000 |

表 85 参数估算相关性

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为：

$$y = 0.000 * (x^2) - 0.060 * x - 9.858$$

其中该函数表达式的残差平方和为 2.300，参数估算值相关性如上表。

5.1.43 问题一第二小问模型分析与建立

模型摘要和参数估算值

因变量: 乙醇转化率(%) 自变量为 时间 (min)

| 方程 | 模型摘要 | | | | | 参数估算值 | | | |
|----|------|---------|-------|-------|------|--------|-------|------|-----------|
| | R 方 | F | 自由度 1 | 自由度 2 | 显著性 | 常量 | b1 | b2 | b3 |
| 二次 | .988 | 162.007 | 2 | 4 | .000 | 45.249 | -.105 | .000 | |
| 三次 | .988 | 83.796 | 3 | 3 | .002 | 45.538 | -.117 | .000 | -2.216E-7 |
| 幂 | .956 | 109.473 | 1 | 5 | .000 | 69.982 | -.149 | | |
| S | .762 | 15.993 | 1 | 5 | .010 | 3.438 | 7.322 | | |
| 指数 | .954 | 103.387 | 1 | 5 | .000 | 43.065 | -.001 | | |

表 86 模型摘要和参数估算值

通过对附件 2 中某催化剂组合、350 摄氏度条件下的数据绘制散点图，并进行分析，可以得到如上数据。由表可知，选取二次函数作为最佳拟合模型，并进行拟合得到最终拟合结果如下：

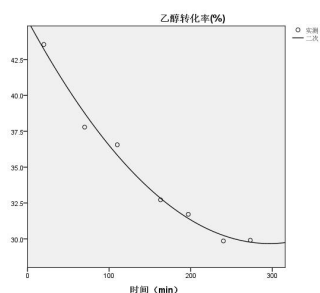


图 44 函数拟合图

参数估算值相关性

| | b0 | b1 | b2 | b3 |
|----|-------|-------|-------|-------|
| b0 | 1.000 | -.883 | .778 | -.704 |
| b1 | -.883 | 1.000 | -.973 | .929 |
| b2 | .778 | -.973 | 1.000 | -.988 |
| b3 | -.704 | .929 | -.988 | 1.000 |

表 87 参数估算值相关性

乙醇表达式与温度之间的函数表达式为：

$$y = -7.952E-8 * (x^3) + 2.906E-5 * (x^2) + 0.000 * x + 4.216$$

其中该函数表达式的残差平方和为 0.008，参数估算值相关性如上表。

5.2 问题二模型的建立与求解

在第二问中，我们需要建立乙醇转化率和 C4 烯烃的选择性与温度或者不同催化剂组合的关系，并对所建立的结果进行分析得出结论。

5.2.1 多变量共同影响分析

首先将 6 个自变量假设都满足多元线性回归关系，设 Co /SiO2 和 HAP 装料比中 Co/SiO2 的质量 (mg) 为 X1，Co/SiO2 的质量之比 (wt%) 为 x2，Co /SiO2 和 HAP 装料比 HAP（或石英沙）-乙醇使用质量 (mg) 为 x3，乙醇添加速率 (ml/min) 为 x4，有无 HAP（1 为有 2 为无）为 x5，温度为 x6。则首先对乙醇转化率 (%) 设为 y1 进行分析。可以写出一般模型方程： $y_1 = ax_1 + bx_2 + cx_3 + dx_4 + ex_5 + fx_6 + g$ 。现在利用 SPSS 进行该假设模型分析：

1. 首先从模型摘要表得 R^2 ，可看出 R^2 满足 0.785，较符合假设。

| 模型摘要 ^b | | | | | |
|---|-------------------|------|---------|--------------------|-------|
| 模型 | R | R 方 | 调整后 R 方 | 标准估算的误差 | 德宾-沃森 |
| 1 | .892 ^a | .796 | .785 | 10.593473290000000 | .884 |
| a. 预测变量: (常量), 温度, Co /SiO2 和 HAP 装料比中 Co/SiO2 的质量 (mg), 有无 HAP (1 为有 2 为无), Co/SiO2 的质量之比 (wt%), 乙醇添加速率 (ml/min), Co /SiO2 和 HAP 装料比 HAP（或石英沙）-乙醇使用质量 (mg) | | | | | |
| b. 因变量: 乙醇转化率 (%) | | | | | |

表 88 模型摘要

2. 再判断该系数表得显著性判断：

| 系数 ^a | | | | | | | | |
|-----------------|------|---------|-------|-------|--------|------|-------|-----|
| 模型 | | 未标准化系数 | | 标准化系数 | t | 显著性 | 共线性统计 | |
| | | B | 标准误差 | Beta | | | 容差 | VIF |
| 1 | (常量) | -92.816 | 9.543 | | -9.726 | .000 | | |

| | | | | | | | |
|--|--------|-------|-------|--------|------|------|--------|
| Co /SiO ₂ 和 HAP 装料比中 Co/SiO ₂ 的质量 (mg) | -.043 | .099 | -.132 | -.435 | .665 | .021 | 48.371 |
| Co/SiO ₂ 的质量之比 (wt%) | .177 | .903 | .009 | .196 | .845 | .904 | 1.107 |
| Co /SiO ₂ 和 HAP 装料比 HAP (或石英沙)-乙醇使用质量 (mg) | .152 | .099 | .464 | 1.543 | .126 | .021 | 47.385 |
| 乙醇添加速率 (ml/min) | -9.008 | 2.111 | -.199 | -4.268 | .000 | .875 | 1.143 |
| 有无 HAP (1 为有 2 为无) | 13.335 | 6.270 | .120 | 2.127 | .036 | .597 | 1.675 |
| 温度 | .331 | .019 | .757 | 17.303 | .000 | .995 | 1.005 |
| a. 因变量: 乙醇转化率(%) | | | | | | | |

表 89 系数表

发现显著性中, Co /SiO₂ 和 HAP 装料比中 Co/SiO₂ 的质量 (x₁), Co/SiO₂ 的质量之比 (x₂), Co/SiO₂ 和 HAP 装料比 HAP (或石英沙)-乙醇使用质量 (x₃) 的显著性分别为 0.665, 0.845, 0.126 均大于显著性水平 0.05. 证明该三因素对乙醇转化率(%)的影响无意义, 几乎无影响。下面剔除该三个因素, 再进行一次分析。

| 模型摘要 ^b | | | | | |
|--|-------------------|------|---------|--------------------|-------|
| 模型 | R | R 方 | 调整后 R 方 | 标准估算的误差 | 德宾-沃森 |
| 1 | .831 ^a | .690 | .682 | 12.877597180000000 | .670 |
| a. 预测变量: (常量), 温度, 有无 HAP (1 为有 2 为无), 乙醇添加速率 (ml/min) | | | | | |
| b. 因变量: 乙醇转化率(%) | | | | | |

表 90 模型摘要

可知 r² 的值为 0.690, RW 值 (德宾-沃森值) = 0.670

| 系数 ^a | | | | | | | | |
|------------------|--------------------|---------|--------|-------|--------|------|-------|-------|
| 模型 | | 未标准化系数 | | 标准化系数 | t | 显著性 | 共线性统计 | |
| | | B | 标准误差 | Beta | | | 容差 | VIF |
| 1 | (常量) | -73.852 | 10.267 | | -7.193 | .000 | | |
| | 乙醇添加速率 (ml/min) | -12.927 | 2.409 | -.286 | -5.367 | .000 | .993 | 1.007 |
| | 有无 HAP (1 为有 2 为无) | 12.306 | 5.896 | .111 | 2.087 | .039 | .998 | 1.002 |
| | 温度 | .328 | .023 | .750 | 14.108 | .000 | .995 | 1.005 |
| a. 因变量: 乙醇转化率(%) | | | | | | | | |

表 91 系数表

发现乙醇添加速率 (x₄), 有无 HAP 载体 (x₅), 温度 (x₆) 的显著性均小于 0.05 存在线性关系。同时由系数可写出, $y_1 = -12.927x_4 + 12.306x_5 + 0.328x_6 - 73.852$ 。

再由 VIF 值小于 5, 意味着自变量之间不存在多重共线性, 满足第一个诊断。

再判断是否残差符合正态分布:

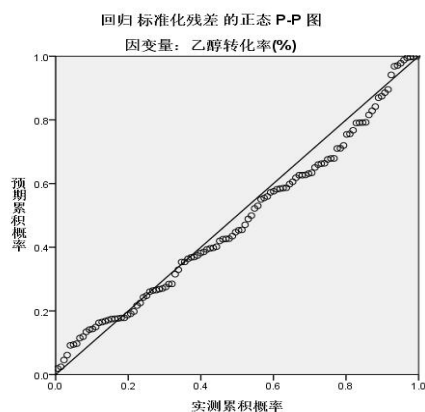


图 45 回归标准化残差的正态分布图

发现基本分布于直线附近，发现残差符合正态分布。

再由最后的 RW 值（德宾-沃森值）0.670 满足小于 3 的条件，变量之间不存在序列相关。同时散点图基本没有越过 ± 3 之间，证明模型误差较小：

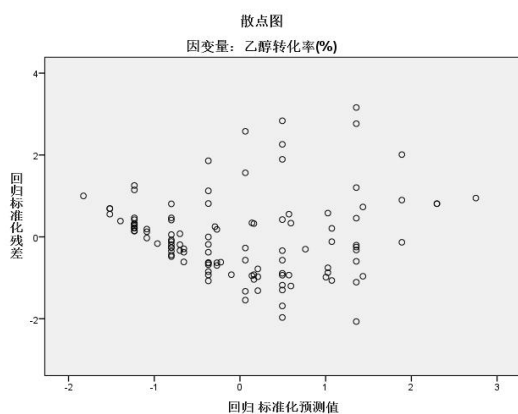


图 46 散点图

最后得出 $y_1 = -12.927x_4 + 12.306x_5 + 0.328x_6 - 73.852$ 。

5.2.2 单变量影响分析

5.2.2.1 乙醇转化率与 Co/SiO₂ 和 HAP 装料比中 Co/SiO₂ 的质量的关系

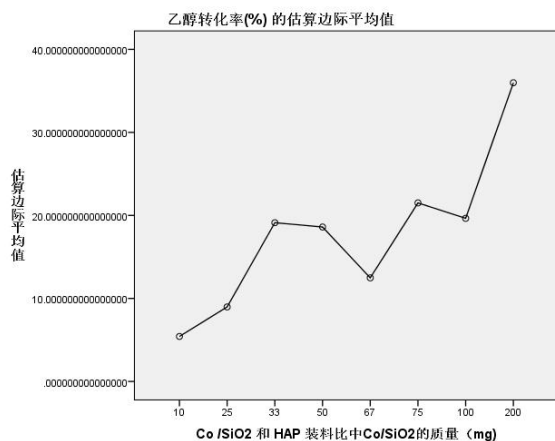


图 47 乙醇转化率与 Co/SiO₂ 和 HAP 装料比中 Co/SiO₂ 的质量的关系图

转化率整体呈阶梯式上升趋势,说明Co和SiO₂的总质量需要到达10mg、33mg、75mg、200mg 几个阶段阈值后会对乙醇的转化率产生逐步增大的促进作用。

5.2.2.2 乙醇转化率与 Co/SiO₂ 的质量之比的关系

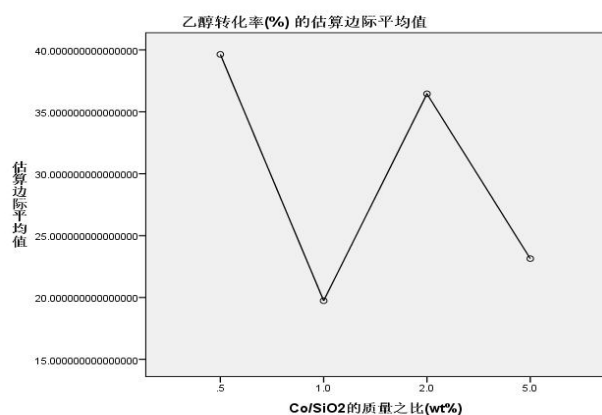


图 48 乙醇转化率与 Co/SiO₂ 的质量之比的关系图

数据说明,当Co与SiO₂质量比为0.5或2时,乙醇转化率较高。

5.2.2.3 乙醇转化率与 Co/SiO₂ 和 HAP 装料比中 HAP-乙醇的质量的关系

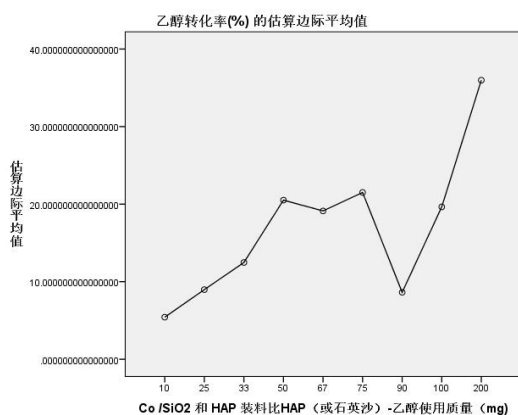


图 49 乙醇转化率与 Co/SiO₂ 和 HAP 装料比中 HAP-乙醇的质量的关系图

整体上随着乙醇使用质量的上升,乙醇转化率随之提升。

5.2.2.4 乙醇转化率与乙醇添加速率的关系

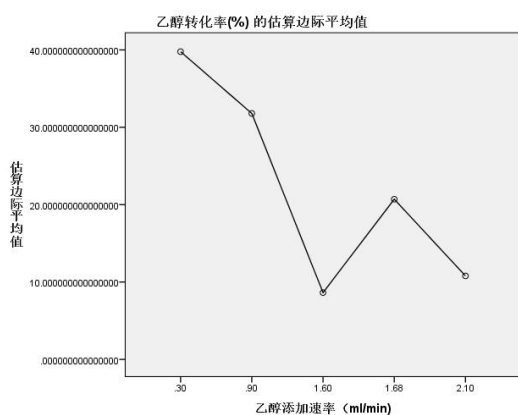


图 50 乙醇转化率与乙醇添加速率的关系图

整体上，随着乙醇添加速率的增大，乙醇转化率下降。

5.2.2.5 乙醇转化率与 Co/SiO₂ 和 HAP 装料比中有无 HAP 的关系

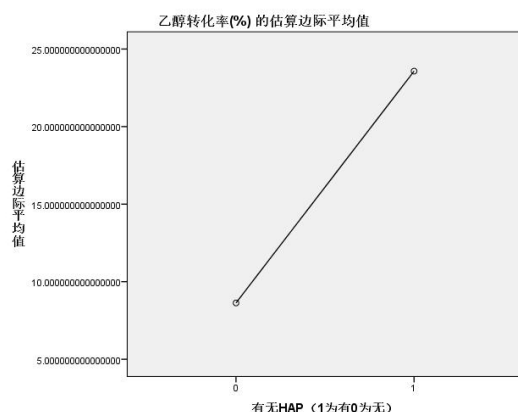


图 51 乙醇转化率与 Co/SiO₂ 和 HAP 装料比中有无 HAP 的关系图

HAP 载体增大了催化剂与原料的有效反应面积，在速率上表现出良好的优化性质

5.2.2.6 乙醇转化率与 Co/SiO₂ 和 HAP 装料比中温度的关系

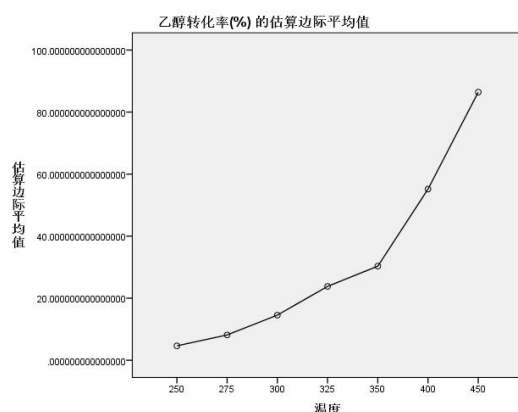


图 52 乙醇转化率与 Co/SiO₂ 和 HAP 装料比中温度的关系图

温度在 250-350 区间内对反应转化率呈正相关关系，说明随着温度的增高，速率缓慢上升；在 350-450 温度区间内，反应转化率（反应速率）随温度上升大量升高，可能是催化剂在该温度区间内活性良好且活性持续上升，相较于 250-350 温度区间中速率的上升更快。

5.3 第三问的模型建立及求解

5.3.1 无限制条件下 C4 烯烃收率最高的实验条件选择。

我们通过对第二问中单因素影响和多因素影响分析可以看出，当各因素共同对 C4 烯烃选择性(%)作用时，x₃ 与 x₄ 作用较不明显，而当单独讨论时同样存在影响，由图知道：当 x₁ 取 200mg，x₂ 取 2.0，x₃ 取 200，x₄ 取 0.9，x₅ 取 1，x₆ 取 450 时在该题情形下取最优。

5.3.2 350 度以下温度条件下 C4 烯烃收率最高的实验条件选择。

依据第二问的建模分析，我们排出 350 度以上的温度再次建模得到实验结果如下：

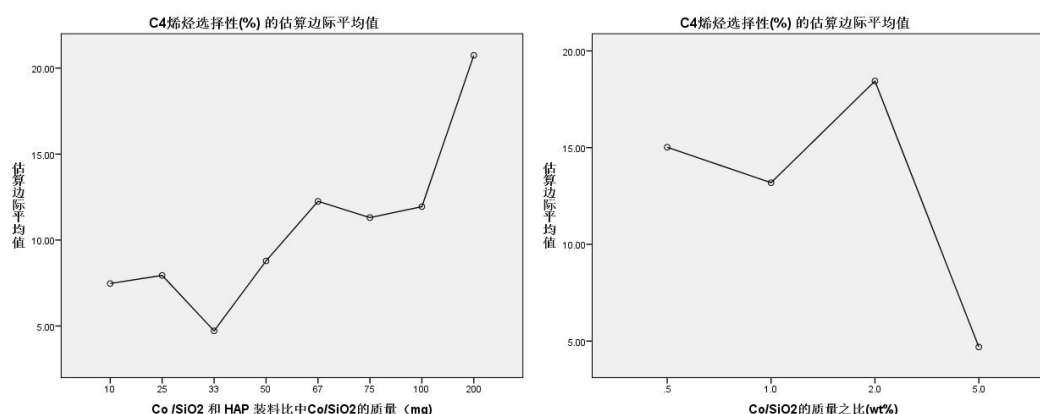


图 53 新 C4 烯烃收率与 Co/SiO2 和 HAP 装料比中 Co/SiO2 的质量的关系图 (左)

图 54 新 C4 烯烃收率与 Co/SiO2 质量之比的关系图 (右)

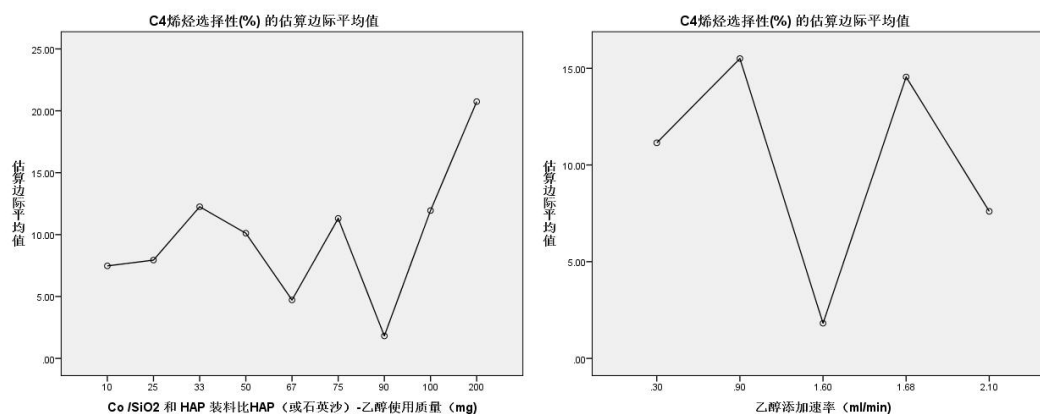


图 55 新 C4 烯烃收率与 Co/SiO2 和 HAP 装料比中 HAP-乙醇的质量的关系图 (左)

图 56 新 C4 烯烃收率与乙醇添加速率的关系图 (右)

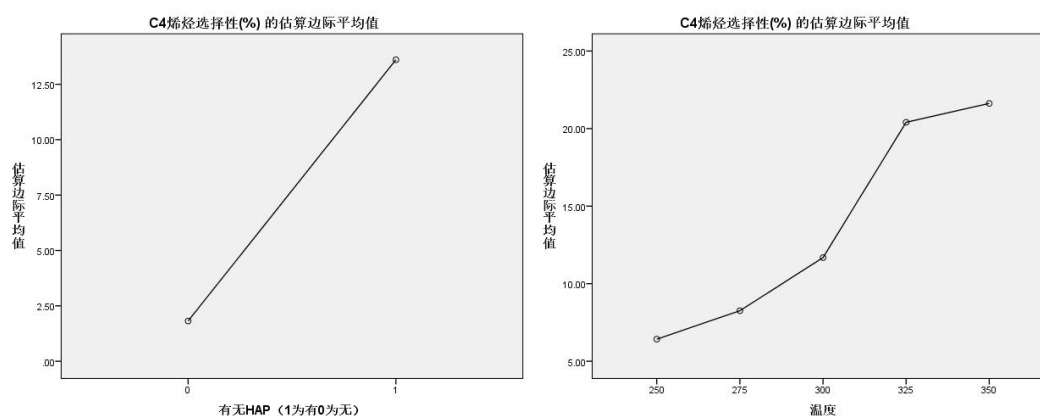


图 57 新 C4 烯烃收率与有无 HAP 的关系图 (左)

图 58 新 C4 烯烃收率与温度的关系图 (右)

该结果显示 x_1 取 200, x_2 取 2, x_3 取 200, x_4 取 0.9 但 1.68 的效果也很强。且 x_5 取 1, x_6 取 325 到 350 之间作用同样强烈。

5.4 第四问的模型建立及求解

5.4.1 第四问实验一的模型建立及求解

对于第一组实验，增加 Co /SiO2 和 HAP 装料比到尽可能多，比如从 200mg:200mg 增加到 1000mg:1000mg 每增加 50mg:50mg 进行一次数据收集,探寻是否 Co /SiO2 和 HAP 装料比超过 200mg:200mg 后会不会继续增大还是存在峰值。本实验对比结果如下图所示：

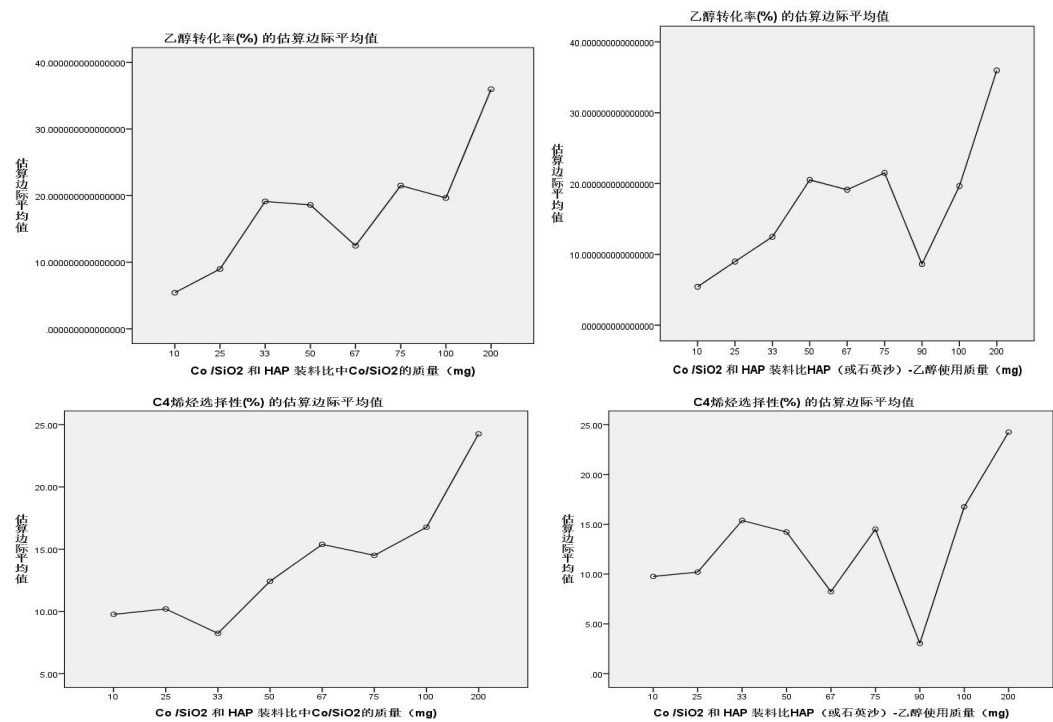


图 59 第四问实验一结果图

5.4.2 第四问实验二的模型建立及求解

对于第二组实验，调大乙醇按每分钟加入的量的范围，比如从 0.1ml 至 5ml，探寻乙醇转化率除在 0.5ml 取峰值，C4 烯烃的选择性在 0.9 取峰值外是否会在其他值处取峰值，同时固定温度为 400 度，固定其他条件不变。本实验对比图

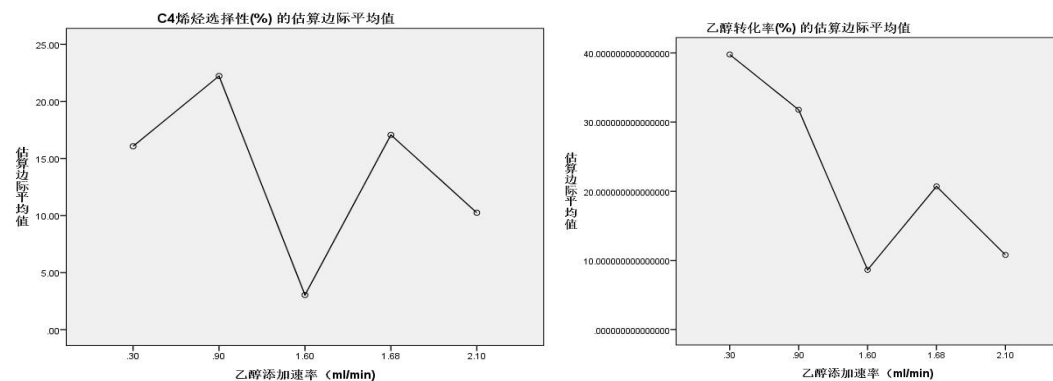


图 60 第四问实验二结果图

5.4.3 第四问实验三的模型建立及求解

第三组实验，维持其他实验条件不变，改变温度区间由 0 不断调大至 450，探寻在不同的温度区间，乙醇转化率与及 C4 烯烃选择性大小在乙醇按每分钟加入的量所取的值 0.9 与 0.3 是否会发生改变，依据为上述实验的：250-450 区间与 250-350 区间 C4 烯烃选择性大小在 1.68 处的值增大。

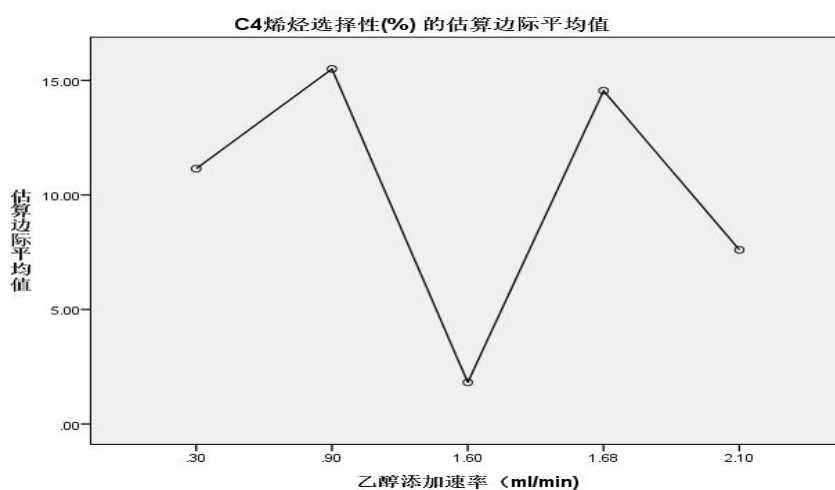


图 61 第四问实验三结果图

5.4.4 第四问实验四的模型建立及求解

第四组实验希望增加在不同温度下，其他条件固定，各种产物生成指标随时间的变化关系。仅仅由 350 度下的数据探明生成产物指标与时间的关系说明性不足。

5.4.5 第四问实验五的模型建立及求解

第五组实验则希望可以增加载体的种类，由实验发现拥有载体的实验结果指标是优于无载体的指标的，而载体的种类应除 HAP 多增加几种载体进行讨论不同的载体种类是否会对实验结果产生影响。

六、模型不足与改进

6.1 不足之处

1. 数据内容太少，建立关系表达式存在一定的偶然性。
2. R^2 太小。

6.2 改进意见

1. 补足数据库，提升论证可信度。
2. 选择更加合适的数据，对数据的正误可以进行有效判断。

七、参考文献

- [1]徐燕.SPSS 软件在数学建模竞赛中的应用实践[J].教育教学论坛,2020(23):331-333.
- [2]胡小宁.基于 SPSS 软件的数学建模案例化教学实践[J].电脑知识与技术,2020,16(07):113-114.
- [3]姚一鸣.基于 SPSS 软件对众包模式存在的问题进行分析——以 2017 数学建模大赛 B 题为例[J].今日财富,2019(05):153-154.
- [4]范馨香.数学建模中的数据处理[J].数字技术与应用,2018,36(03):232-233.
- [5]郭浩浩,王美艳,薛鲁萍,薛圣达.基于 SPSS 的数学建模竞赛数据分析[J].教育教学论坛,2017(45):71-72.
- [6]周静.SPSS 在数学建模中的应用实例[J].天津职业院校联合学报,2012,14(11):93-96.
- [7]吕绍沛.乙醇偶合制备丁醇及 C₄ 烯烃[D].大连理工大学,2018.

附录 SPSS 支撑代码

1. 第一问

GET DATA

```
/TYPE=XLS  
/FILE='C:\Users\Ducker\Desktop\附件 1 提取版.xls'  
/SHEET=name 'Sheet1'  
/CELLRANGE=FULL  
/READNAMES=ON  
/DATATYPEMIN PERCENTAGE=95.0.
```

EXECUTE.

DATASET NAME 数据集 2 WINDOW=FRONT.

DATASET CLOSE 数据集 1.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

```
/VARIABLES=A1 乙醇转化率 WITH A1 温度  
/CONSTANT  
/MODEL=LINEAR LOGARITHMIC INVERSE QUADRATIC CUBIC COMPOUND POWER S GROWTH  
EXPONENTIAL LGSTIC  
/PLOT FIT.
```

NEW FILE.

DATASET NAME 数据集 1 WINDOW=FRONT.

* 非线性回归.

MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0 b3=0.

COMPUTE PRED_=b0+b1*A1 温度+b2*A1 温度*A1 温度+b3*A1 温度*A1 温度*A1 温度.

NLR A1 乙醇转化率

```
/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss45776\SPSSFNLR.TMP'  
/PRED PRED_  
/CRITERIA SS CONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.
```

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

```
/VARIABLES=A1C4 烯烃选择性 WITH A1 温度  
/CONSTANT  
/MODEL=LINEAR LOGARITHMIC INVERSE QUADRATIC CUBIC COMPOUND POWER S GROWTH  
EXPONENTIAL LGSTIC  
/PLOT FIT.
```

* 非线性回归.

MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0 b3=0.

COMPUTE PRED_=b0+b1*A1 温度+b2*A1 温度*A1 温度+b3*A1 温度*A1 温度*A1 温度.

NLR A1C4 烯烃选择性

```
/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss45776\SPSSFNLR.TMP'  
/PRED PRED_  
/CRITERIA SS CONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.
```

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=A2 乙醇转化率 WITH A2 温度

/CONSTANT

/MODEL=LINEAR LOGARITHMIC INVERSE QUADRATIC CUBIC COMPOUND POWER S GROWTH
EXPONENTIAL LGSTIC

/PLOT FIT.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=A2 乙醇转化率 WITH A2 温度

/CONSTANT

/MODEL=QUADRATIC CUBIC

/PLOT FIT.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=A2 乙醇转化率 WITH A2 温度

/CONSTANT

/MODEL=QUADRATIC

/PLOT FIT.

* 非线性回归.

MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0 b3=0.

COMPUTE PRED_=b0+b1*A1 温度+b2*A1 温度*A1 温度.

NLR A1C4 烯炔选择性

/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss45776\SPSSFNLR.TMP'

/PRED PRED_

/CRITERIA SSCONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.

* 非线性回归.

MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0.

COMPUTE PRED_=b0+b1*A1 温度+b2*A1 温度*A1 温度.

NLR A1C4 烯炔选择性

/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss45776\SPSSFNLR.TMP'

/PRED PRED_

/SAVE PRED RESID DERIVATIVES

/CRITERIA SSCONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=A1 乙醇转化率 A1C4 烯烃选择性 WITH A1 温度

/CONSTANT

/MODEL=CUBIC

/PLOT FIT.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=A2C4 烯烃选择性 WITH A2 温度

/CONSTANT

/MODEL=LINEAR LOGARITHMIC INVERSE QUADRATIC CUBIC COMPOUND POWER S GROWTH
EXPONENTIAL LGSTIC

/PLOT FIT.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=A2C4 烯烃选择性 WITH A2 温度

/CONSTANT

/MODEL=QUADRATIC

/PLOT FIT.

* 非线性回归.

MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0.

COMPUTE PRED_=b0+b1*A2 温度+b2*A2 温度*A2 温度.

NLR A2 乙醇转化率

/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss45776\SPSSFNLR.TMP'

/PRED PRED_

/SAVE PRED RESID DERIVATIVES

/CRITERIA SS CONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.

* 非线性回归.

MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0.

COMPUTE PRED_=b0+b1*A2 温度+b2*A2 温度*A2 温度.

NLR A2C4 烯烃选择性

/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss45776\SPSSFNLR.TMP'

/PRED PRED_

/SAVE PRED RESID DERIVATIVES

/CRITERIA SSCONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=A3 乙醇转化率 WITH A3 温度

/CONSTANT

/MODEL=LINEAR LOGARITHMIC INVERSE QUADRATIC CUBIC COMPOUND POWER S GROWTH
EXPONENTIAL LGSTIC

/PLOT FIT.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=A3 乙醇转化率 WITH A3 温度

/CONSTANT

/MODEL=S

/PLOT FIT.

* 非线性回归.

MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0.

COMPUTE PRED_=b0+b1*EXP(b2*A3 温度).

NLR A3 乙醇转化率

/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss45776\SPSSFNLR.TMP'

/PRED PRED_

/SAVE PRED RESID DERIVATIVES

/CRITERIA SSCONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=A3 乙醇转化率 WITH A3 温度

/CONSTANT

/MODEL=CUBIC

/PLOT FIT.

* 非线性回归.

MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0 b3=0.

COMPUTE PRED_=b0+b1*A3 温度+b2*A3 温度*A3 温度+b3*A3 温度*A3 温度*A3 温度.

NLR A3 乙醇转化率

/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss45776\SPSSFNLR.TMP'


```
/PRED PRED_  
/SAVE PRED RESID DERIVATIVES  
/CRITERIA SSCONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.
```

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=A3C4 烯炔选择性 WITH A3 温度

/CONSTANT

/MODEL=LINEAR LOGARITHMIC INVERSE QUADRATIC CUBIC COMPOUND POWER S GROWTH
EXPONENTIAL LGSTIC

/PLOT FIT.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=A3C4 烯炔选择性 WITH A3 温度

/CONSTANT

/MODEL=CUBIC

/PLOT FIT.

* 非线性回归.

MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0 b3=0.

COMPUTE PRED_=b0+b1*A3 温度+b2*A3 温度*A3 温度+b3*A3 温度*A3 温度*A3 温度.

NLR A3C4 烯炔选择性

/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss45776\SPSSFNLR.TMP'

/PRED PRED_

/SAVE PRED RESID DERIVATIVES

/CRITERIA SSCONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=A4 乙醇转化率 WITH A4 温度

/CONSTANT

/MODEL=LINEAR LOGARITHMIC INVERSE QUADRATIC CUBIC COMPOUND POWER S GROWTH
EXPONENTIAL LGSTIC

/PLOT FIT.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=A4 乙醇转化率 WITH A4 温度

/CONSTANT

/MODEL=QUADRATIC

/PLOT FIT.

* 非线性回归.

MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0.

COMPUTE PRED_=b0+b1*A4 温度+b2*A4 温度*A4 温度.

NLR A4 乙醇转化率

/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss45776\SPSSFNLR.TMP'

/PRED PRED_

/SAVE PRED RESID DERIVATIVES

/CRITERIA SSCONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=A4 乙醇转化率 WITH A4 温度

/CONSTANT

/MODEL=LINEAR

/PLOT FIT.

* 非线性回归.

MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0.

COMPUTE PRED_=b0+b1*A4 温度.

NLR A4 乙醇转化率

/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss45776\SPSSFNLR.TMP'

/PRED PRED_

/SAVE PRED RESID DERIVATIVES

/CRITERIA SSCONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=A4C4 烯炔选择性 WITH A4 温度

/CONSTANT

/MODEL=LINEAR LOGARITHMIC INVERSE QUADRATIC CUBIC COMPOUND POWER S GROWTH
EXPONENTIAL LGSTIC

/PLOT FIT.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=A4C4 烯烃选择性 WITH A4 温度

/CONSTANT

/MODEL=QUADRATIC

/PLOT FIT.

* 非线性回归.

MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0.

COMPUTE PRED_=b0+b1*A4 温度+b2*A4 温度*A4 温度.

NLR A4 乙醇转化率

/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss45776\SPSSFNLR.TMP'

/PRED PRED_

/SAVE PRED RESID DERIVATIVES

/CRITERIA SSCONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.

* 非线性回归.

MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0.

COMPUTE PRED_=b0+b1*A4 温度.

NLR A4 乙醇转化率

/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss45776\SPSSFNLR.TMP'

/PRED PRED_

/SAVE PRED RESID DERIVATIVES

/CRITERIA SSCONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.

* 非线性回归.

MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0.

COMPUTE PRED_=b0+b1*A4 温度+b2*A4 温度*A4 温度.

NLR A4C4 烯烃选择性

/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss45776\SPSSFNLR.TMP'

/PRED PRED_

/SAVE PRED RESID DERIVATIVES

/CRITERIA SSCONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=A5 乙醇转化率 WITH A5 温度

/CONSTANT

/MODEL=LINEAR LOGARITHMIC INVERSE QUADRATIC CUBIC COMPOUND POWER S GROWTH
EXPONENTIAL LGSTIC

/PLOT FIT.

* 非线性回归.

MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0.

COMPUTE PRED_=b0+b1*A5 温度+b2*A5 温度*A5 温度.

NLR A5 乙醇转化率

/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss45776\SPSSFNLR.TMP'

/PRED PRED_

/SAVE PRED RESID DERIVATIVES

/CRITERIA SSCONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=A5 乙醇转化率 WITH A5 温度

/CONSTANT

/MODEL=QUADRATIC

/PLOT FIT.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=A5C4 烯烃选择性 WITH A5 温度

/CONSTANT

/MODEL=CUBIC

/PLOT FIT.

* 非线性回归.

MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0 b3=0.

COMPUTE PRED_=b0+b1*A5 温度+b2*A5 温度*A5 温度+b3*A5 温度*A5 温度*A5 温度.

NLR A5 乙醇转化率

/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss45776\SPSSFNLR.TMP'

/PRED PRED_

/SAVE PRED RESID DERIVATIVES

/CRITERIA SSCONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=A6 乙醇转化率 WITH A6 温度

/CONSTANT

```

/MODEL=LINEAR LOGARITHMIC INVERSE QUADRATIC CUBIC COMPOUND POWER S GROWTH
EXPONENTIAL LGSTIC
/PLOT FIT.

```

* 曲线估算.

```
TSET NEWVAR=NONE.
```

```
CURVEFIT
```

```
/VARIABLES=A6 乙醇转化率 WITH A6 温度
```

```
/CONSTANT
```

```
/MODEL=QUADRATIC
```

```
/PLOT FIT.
```

* 非线性回归.

```
MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0 b3=0.
```

```
COMPUTE PRED_=b0+b1*A5 温度+b2*A5 温度*A5 温度+b3*A5 温度*A5 温度*A5 温度.
```

```
NLR A5C4 烯炔选择性
```

```
/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss45776\SPSSFNLR.TMP'
```

```
/PRED PRED_
```

```
/SAVE PRED RESID DERIVATIVES
```

```
/CRITERIA SS CONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.
```

* 非线性回归.

```
MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0.
```

```
COMPUTE PRED_=b0+b1*A6 温度+b2*A6 温度*A6 温度.
```

```
NLR A6 乙醇转化率
```

```
/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss45776\SPSSFNLR.TMP'
```

```
/PRED PRED_
```

```
/SAVE PRED RESID DERIVATIVES
```

```
/CRITERIA SS CONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.
```

* 曲线估算.

```
TSET NEWVAR=NONE.
```

```
CURVEFIT
```

```
/VARIABLES=A6C4 烯炔选择性 WITH A6 温度
```

```
/CONSTANT
```

```

/MODEL=LINEAR LOGARITHMIC INVERSE QUADRATIC CUBIC COMPOUND POWER S GROWTH
EXPONENTIAL LGSTIC
/PLOT FIT.

```

* 曲线估算.

```
TSET NEWVAR=NONE.
```

CURVEFIT

/VARIABLES=A6C4 烯炔选择性 WITH A6 温度

/CONSTANT

/MODEL=CUBIC

/PLOT FIT.

* 非线性回归.

MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0 b3=0.

COMPUTE PRED_=b0+b1*A6 温度+b2*A6 温度*A6 温度+b3*A6 温度*A6 温度*A6 温度.

NLR A6C4 烯炔选择性

/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss45776\SPSSFNLR.TMP'

/PRED PRED_

/SAVE PRED RESID DERIVATIVES

/CRITERIA SSCONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=A7 乙醇转化率 WITH A7 温度

/CONSTANT

/MODEL=LINEAR LOGARITHMIC INVERSE QUADRATIC CUBIC COMPOUND POWER S GROWTH
EXPONENTIAL LGSTIC

/PLOT FIT.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=C4 烯炔 A7 选择性 WITH A7 温度

/CONSTANT

/MODEL=LINEAR LOGARITHMIC INVERSE QUADRATIC CUBIC COMPOUND POWER S GROWTH
EXPONENTIAL LGSTIC

/PLOT FIT.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=C4 烯炔 A7 选择性 WITH A7 温度

/CONSTANT

/MODEL=QUADRATIC

/PLOT FIT.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=A7 乙醇转化率 WITH A7 温度

/CONSTANT

/MODEL=QUADRATIC

/PLOT FIT.

* 非线性回归.

MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0 b3=0.

COMPUTE PRED_=b0+b1*A7 温度+b2*A7 温度*A7 温度.

NLR A7 乙醇转化率

/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss45776\SPSSFNLR.TMP'

/PRED PRED_

/SAVE PRED RESID DERIVATIVES

/CRITERIA SSCONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.

* 非线性回归.

MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0.

COMPUTE PRED_=b0+b1*A7 温度+b2*A7 温度*A7 温度.

NLR A7 乙醇转化率

/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss45776\SPSSFNLR.TMP'

/PRED PRED_

/SAVE PRED RESID DERIVATIVES

/CRITERIA SSCONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.

* 非线性回归.

MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0.

COMPUTE PRED_=b0+b1*A7 温度+b2*A7 温度*A7 温度.

NLR C4 烯烃 A7 选择性

/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss45776\SPSSFNLR.TMP'

/PRED PRED_

/SAVE PRED RESID DERIVATIVES

/CRITERIA SSCONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=A8 乙醇转化率 WITH A8 温度

/CONSTANT

/MODEL=LINEAR LOGARITHMIC INVERSE QUADRATIC CUBIC COMPOUND POWER S GROWTH
EXPONENTIAL LGSTIC

/PLOT FIT.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=A8C4 烯炔选择性 WITH A8 温度

/CONSTANT

/MODEL=LINEAR LOGARITHMIC INVERSE QUADRATIC CUBIC COMPOUND POWER S GROWTH
EXPONENTIAL LGSTIC

/PLOT FIT.

* 非线性回归.

MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0.

COMPUTE PRED_=b0+b1*A8 温度+b2*A8 温度*A8 温度.

NLR A8C4 烯炔选择性

/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss45776\SPSSFNLR.TMP'

/PRED PRED_

/SAVE PRED RESID DERIVATIVES

/CRITERIA SS CONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=A9 乙醇转化率 WITH A9 温度

/CONSTANT

/MODEL=LINEAR LOGARITHMIC INVERSE QUADRATIC CUBIC COMPOUND POWER S GROWTH
EXPONENTIAL LGSTIC

/PLOT FIT.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=A9C4 烯炔选择性 WITH A9 温度

/CONSTANT

/MODEL=LINEAR LOGARITHMIC INVERSE QUADRATIC CUBIC COMPOUND POWER S GROWTH
EXPONENTIAL LGSTIC

/PLOT FIT.

* 非线性回归.

MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0.

COMPUTE PRED_=b0+b1*A9 温度+b2*A9 温度*A9 温度.

NLR A9C4 烯炔选择性


```

/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss45776\SPSSFNLR.TMP'
/PRED PRED_
/SAVE PRED RESID DERIVATIVES
/CRITERIA SSCONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.

```

* 非线性回归.

```
MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0 b3=0.
```

```
COMPUTE PRED_=b0+b1*A9 温度+b2*A9 温度*A9 温度+b3*A9 温度*A9 温度*A9 温度.
```

```
NLR A9C4 烯烃选择性
```

```

/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss45776\SPSSFNLR.TMP'
/PRED PRED_
/SAVE PRED RESID DERIVATIVES
/CRITERIA SSCONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.

```

* 曲线估算.

```
TSET NEWVAR=NONE.
```

```
CURVEFIT
```

```
/VARIABLES=A10 乙醇转化率 WITH A10 温度
```

```
/CONSTANT
```

```

/MODEL=LINEAR LOGARITHMIC INVERSE QUADRATIC CUBIC COMPOUND POWER S GROWTH
EXPONENTIAL LGSTIC

```

```
/PLOT FIT.
```

* 非线性回归.

```
MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0 b3=0.
```

```
COMPUTE PRED_=b0+b1*A10 温度+b2*A10 温度*A10 温度+b3*A10 温度*A10 温度*A10 温度.
```

```
NLR A10 乙醇转化率
```

```

/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss45776\SPSSFNLR.TMP'
/PRED PRED_
/SAVE PRED RESID DERIVATIVES
/CRITERIA SSCONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.

```

* 非线性回归.

```
MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0 b3=0.
```

```
COMPUTE PRED_=b0+b1*A10 温度+b2*A10 温度*A10 温度+b3*A10 温度*A10 温度*A10 温度.
```

```
NLR A10C4 烯烃选择性
```

```

/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss45776\SPSSFNLR.TMP'
/PRED PRED_
/SAVE PRED RESID DERIVATIVES
/CRITERIA SSCONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.

```

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=A11 乙醇转化率 WITH A11 温度

/CONSTANT

/MODEL=LINEAR LOGARITHMIC INVERSE QUADRATIC CUBIC COMPOUND POWER S GROWTH
EXPONENTIAL LGSTIC

/PLOT FIT.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=A11C4 烯烃选择性 WITH A11 温度

/CONSTANT

/MODEL=LINEAR LOGARITHMIC INVERSE QUADRATIC CUBIC COMPOUND POWER S GROWTH
EXPONENTIAL LGSTIC

/PLOT FIT.

* 非线性回归.

MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0 b3=0.

COMPUTE PRED_=b0+b1*A11 温度+b2*A11 温度*A11 温度+b3*A11 温度*A11 温度*A11 温度.

NLR A11C4 烯烃选择性

/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss45776\SPSSFNLR.TMP'

/PRED PRED_

/SAVE PRED RESID DERIVATIVES

/CRITERIA SS CONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=A12 乙醇转化率 WITH A12 温度

/CONSTANT

/MODEL=LINEAR LOGARITHMIC INVERSE QUADRATIC CUBIC COMPOUND POWER S GROWTH
EXPONENTIAL LGSTIC

/PLOT FIT.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=A12 乙醇转化率 WITH A12 温度

/CONSTANT

/MODEL=CUBIC

/PLOT FIT.

* 非线性回归.

MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0 b3=0.

COMPUTE PRED_=b0+b1*A12 温度+b2*A12 温度*A12 温度+b3*A12 温度*A12 温度*A12 温度.

NLR A12 乙醇转化率

/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss45776\SPSSFNLR.TMP'

/PRED PRED_

/SAVE PRED RESID DERIVATIVES

/CRITERIA SSCONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=A13 乙醇转化率 WITH A13 温度

/CONSTANT

/MODEL=LINEAR LOGARITHMIC INVERSE QUADRATIC CUBIC COMPOUND POWER S GROWTH
EXPONENTIAL LGSTIC

/PLOT FIT.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=A13C4 烯炔选择性 WITH A13 温度

/CONSTANT

/MODEL=QUADRATIC

/PLOT FIT.

* 非线性回归.

MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0.

COMPUTE PRED_=b0+b1*A13 温度+b2*A13 温度*A13 温度.

NLR A13C4 烯炔选择性

/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss45776\SPSSFNLR.TMP'

/PRED PRED_

/SAVE PRED RESID DERIVATIVES

/CRITERIA SSCONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.

* 非线性回归.

MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0 b3=0.

COMPUTE PRED_=b0+b1*A13 温度+b2*A13 温度*A13 温度+b3*A13 温度*A13 温度*A13 温度.

NLR A13 乙醇转化率

/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss45776\SPSSFNLR.TMP'

```
/PRED PRED_  
/SAVE PRED RESID DERIVATIVES  
/CRITERIA SSCONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.
```

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=A14C4 烯烃选择性 WITH A14 温度

/CONSTANT

/MODEL=LINEAR LOGARITHMIC INVERSE QUADRATIC CUBIC COMPOUND POWER S GROWTH
EXPONENTIAL LGSTIC

/PLOT FIT.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=A14C4 烯烃选择性 WITH A14 温度

/CONSTANT

/MODEL=QUADRATIC

/PLOT FIT.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=A14 乙醇转化率 WITH A14 温度

/CONSTANT

/MODEL=CUBIC

/PLOT FIT.

* 非线性回归.

MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0 b3=0.

COMPUTE PRED_=b0+b1*A14 温度+b2*A14 温度*A14 温度+b3*A14 温度*A14 温度*A14 温度.

NLR A14 乙醇转化率

/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss45776\SPSSFNLR.TMP'

/PRED PRED_

/SAVE PRED RESID DERIVATIVES

/CRITERIA SSCONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

```

/VARIABLES=B1C4 烯烃选择性 WITH B1 温度
/CONSTANT
/MODEL=LINEAR LOGARITHMIC INVERSE QUADRATIC CUBIC COMPOUND POWER S GROWTH
EXPONENTIAL LGSTIC
/PLOT FIT.

```

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

```

/VARIABLES=B1 乙醇转化率 WITH B1 温度
/CONSTANT
/MODEL=CUBIC
/PLOT FIT.

```

* 非线性回归.

MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0.

COMPUTE PRED_=b0+b1*B1 温度+b2*B1 温度*B1 温度.

NLR B1C4 烯烃选择性

```

/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss45776\SPSSFNLR.TMP'
/PRED PRED_
/SAVE PRED RESID DERIVATIVES
/CRITERIA SSCONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.

```

* 非线性回归.

MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0 b3=0.

COMPUTE PRED_=b0+b1*B1 温度+b2*B1 温度*B1 温度+b3*B1 温度*B1 温度*B1 温度.

NLR B1 乙醇转化率

```

/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss45776\SPSSFNLR.TMP'
/PRED PRED_
/SAVE PRED RESID DERIVATIVES
/CRITERIA SSCONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.

```

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

```

/VARIABLES=B2 乙醇转化率 WITH B2 温度
/CONSTANT
/MODEL=LINEAR LOGARITHMIC INVERSE QUADRATIC CUBIC COMPOUND POWER S GROWTH
EXPONENTIAL LGSTIC
/PLOT FIT.

```

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=B2C4 烯烃选择性 WITH B2 温度

/CONSTANT

/MODEL=LINEAR LOGARITHMIC INVERSE QUADRATIC CUBIC COMPOUND POWER S GROWTH
EXPONENTIAL LGSTIC

/PLOT FIT.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=B3 乙醇转化率 WITH B3 温度

/CONSTANT

/MODEL=LINEAR LOGARITHMIC INVERSE QUADRATIC CUBIC COMPOUND POWER S GROWTH
EXPONENTIAL LGSTIC

/PLOT FIT.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=B3C4 烯烃选择性 WITH B3 温度

/CONSTANT

/MODEL=LINEAR LOGARITHMIC INVERSE QUADRATIC CUBIC COMPOUND POWER S GROWTH
EXPONENTIAL LGSTIC

/PLOT FIT.

* 非线性回归.

MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0 b3=0.

COMPUTE PRED_=b0+b1*B3 温度+b2*B3 温度*B3 温度+b3*B3 温度*B3 温度*B3 温度.

NLR B2C4 烯烃选择性

/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss45776\SPSSFNLR.TMP'

/PRED PRED_

/SAVE PRED RESID DERIVATIVES

/CRITERIA SS CONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.

* 非线性回归.

MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0 b3=0.

COMPUTE PRED_=b0+b1*B3 温度+b2*B3 温度*B3 温度+b3*B3 温度*B3 温度*B3 温度.

NLR B3 乙醇转化率

/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss45776\SPSSFNLR.TMP'

/PRED PRED_

/SAVE PRED RESID DERIVATIVES

/CRITERIA SSCONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.

* 非线性回归.

MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0 b3=0.

COMPUTE PRED_=b0+b1*B3 温度+b2*B3 温度*B3 温度+b3*B3 温度*B3 温度*B3 温度.

NLR B3 乙醇转化率

/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss45776\SPSSFNLR.TMP'

/PRED PRED_

/SAVE PRED RESID DERIVATIVES

/CRITERIA SSCONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=B4C4 烯烃选择性 WITH B4 温度

/CONSTANT

/MODEL=CUBIC

/PLOT FIT.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=B4 乙醇转化率 WITH B4 温度

/CONSTANT

/MODEL=POWER

/PLOT FIT.

* 非线性回归.

MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0 b3=0.

COMPUTE PRED_=b0+b1*B4 温度+b2*B4 温度*B4 温度+b3*B4 温度*B4 温度*B4 温度.

NLR B4C4 烯烃选择性

/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss45776\SPSSFNLR.TMP'

/PRED PRED_

/SAVE PRED RESID DERIVATIVES

/CRITERIA SSCONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.

* 非线性回归.

MODEL PROGRAM b0=0 b1=0.

COMPUTE PRED_=b0+b1*LN(B4 温度).

NLR B4 乙醇转化率

/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss45776\SPSSFNLR.TMP'

```

/PRED PRED_
/SAVE PRED RESID DERIVATIVES
/CRITERIA SSCONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.

```

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=B5C4 烯烃选择性 WITH B5 温度

/CONSTANT

/MODEL=LINEAR LOGARITHMIC INVERSE QUADRATIC CUBIC COMPOUND POWER S GROWTH
EXPONENTIAL LGSTIC

/PLOT FIT.

* 非线性回归.

MODEL PROGRAM b0=0 b1=0.

COMPUTE PRED_=LN(b0)+b1*B2 温度.

NLR B2 乙醇转化率

/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss45776\SPSSFNLR.TMP'

/PRED PRED_

/SAVE PRED RESID DERIVATIVES

/CRITERIA SSCONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.

* 非线性回归.

MODEL PROGRAM b0=0 b1=0.

COMPUTE PRED_=LN(b0)+b1*B2 温度.

CNLR B2 乙醇转化率

/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss45776\SPSSFNLR.TMP'

/PRED PRED_

/BOUNDS b0 >= 0

/SAVE PRED RESID DERIVATIVES

/CRITERIA STEPLIMIT 2 ISTEP 1E+20.

* 非线性回归.

MODEL PROGRAM b0=0 b1=0.

COMPUTE PRED_=LN(b0)+LN(b1)*B2 温度.

CNLR B2 乙醇转化率

/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss45776\SPSSFNLR.TMP'

/PRED PRED_

/BOUNDS b0 >= 0

/SAVE PRED RESID DERIVATIVES

/CRITERIA STEPLIMIT 2 ISTEP 1E+20.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=乙醇转化率 WITH 时间 (min)

/CONSTANT

/MODEL=LINEAR LOGARITHMIC INVERSE QUADRATIC CUBIC COMPOUND POWER S GROWTH
EXPONENTIAL LGSTIC

/PLOT FIT.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=乙醇转化率 WITH 时间 (min)

/CONSTANT

/MODEL=QUADRATIC

/PLOT FIT.

DATASET CLOSE 数据集 1.

* 非线性回归.

MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0.

COMPUTE PRED_=b0+b1*时间+b2*时间*时间.

NLR 乙醇转化率

/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss17152\SPSSFNLR.TMP'

/PRED PRED_

/CRITERIA SSCONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=乙烯选择性 WITH 时间

/CONSTANT

/MODEL=LINEAR LOGARITHMIC INVERSE QUADRATIC CUBIC COMPOUND POWER S GROWTH
EXPONENTIAL LGSTIC

/PLOT FIT.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=乙烯选择性 WITH 时间

/CONSTANT

/MODEL=CUBIC

/PLOT FIT.

* 非线性回归.

MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0 b3=0.

COMPUTE PRED_=b0+b1*时间+b2*时间*时间+b3*时间*时间*时间.

NLR 乙烯选择性

/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss17152\SPSSFNLR.TMP'

/PRED PRED_

/CRITERIA SSCONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=C4 烯炔选择性 WITH 时间

/CONSTANT

/MODEL=LINEAR LOGARITHMIC INVERSE QUADRATIC CUBIC COMPOUND POWER S GROWTH
EXPONENTIAL LGSTIC

/PLOT FIT.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=C4 烯炔选择性 WITH 时间

/CONSTANT

/MODEL=CUBIC

/PLOT FIT.

* 非线性回归.

MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0 b3=0.

COMPUTE PRED_=b0+b1*时间+b2*时间*时间+b3*时间*时间*时间.

NLR C4 烯炔选择性

/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss17152\SPSSFNLR.TMP'

/PRED PRED_

/CRITERIA SSCONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.

CURVEFIT

/VARIABLES=乙醛选择性 WITH 时间

/CONSTANT

/MODEL=LINEAR LOGARITHMIC INVERSE QUADRATIC CUBIC COMPOUND POWER S GROWTH

EXPONENTIAL LGSTIC
/PLOT FIT.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.
CURVEFIT

/VARIABLES=乙醛选择性 WITH 时间
/CONSTANT
/MODEL=CUBIC
/PLOT FIT.

* 非线性回归.

MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0 b3=0.
COMPUTE PRED_=b0+b1*时间+b2*时间*时间+b3*时间*时间*时间.
NLR 乙醛选择性
/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss17152\SPSSFNLR.TMP'
/PRED PRED_
/CRITERIA SSCONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.
CURVEFIT

/VARIABLES=碳数为 412 脂肪醇 WITH 时间
/CONSTANT
/MODEL=LINEAR LOGARITHMIC INVERSE QUADRATIC CUBIC COMPOUND POWER S GROWTH
EXPONENTIAL LGSTIC
/PLOT FIT.

* 曲线估算.

TSET NEWVAR=NONE.
CURVEFIT

/VARIABLES=碳数为 412 脂肪醇 WITH 时间
/CONSTANT
/MODEL=CUBIC
/PLOT FIT.

* 非线性回归.

MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0 b3=0.
COMPUTE PRED_=b0+b1*时间+b2*时间*时间+b3*时间*时间*时间.
NLR 碳数为 412 脂肪醇
/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss17152\SPSSFNLR.TMP'

```
/PRED PRED_  
/CRITERIA SSCONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.
```

* 曲线估算.

```
TSET NEWVAR=NONE.
```

```
CURVEFIT
```

```
/VARIABLES=甲基苯甲醛和甲基苯甲醇 WITH 时间
```

```
/CONSTANT
```

```
/MODEL=LINEAR LOGARITHMIC INVERSE QUADRATIC CUBIC COMPOUND POWER S GROWTH  
EXPONENTIAL LGSTIC
```

```
/PLOT FIT.
```

* 曲线估算.

```
TSET NEWVAR=NONE.
```

```
CURVEFIT
```

```
/VARIABLES=甲基苯甲醛和甲基苯甲醇 WITH 时间
```

```
/CONSTANT
```

```
/MODEL=CUBIC
```

```
/PLOT FIT.
```

* 非线性回归.

```
MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0 b3=0.
```

```
COMPUTE PRED_=b0+b1*时间+b2*时间*时间+b3*时间*时间*时间.
```

```
NLR 甲基苯甲醛和甲基苯甲醇
```

```
/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss17152\SPSSFNLR.TMP'
```

```
/PRED PRED_
```

```
/CRITERIA SSCONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.
```

* 曲线估算.

```
TSET NEWVAR=NONE.
```

```
CURVEFIT
```

```
/VARIABLES=其他 WITH 时间
```

```
/CONSTANT
```

```
/MODEL=CUBIC
```

```
/PLOT FIT.
```

* 非线性回归.

```
MODEL PROGRAM b0=0 b1=0 b2=0 b3=0.
```

```
COMPUTE PRED_=b0+b1*时间+b2*时间*时间+b3*时间*时间*时间.
```

```
NLR 其他
```

```
/OUTFILE='C:\Users\Ducker\AppData\Local\Temp\spss17152\SPSSFNLR.TMP'
```

```
/PRED PRED_  
/CRITERIA SS CONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8.
```

2. 第二问

```
REGRESSION  
/MISSING LISTWISE  
/STATISTICS COEFF OUTS R ANOVA COLLIN TOL  
/CRITERIA=PIN(.15) POUT(.20)  
/NOORIGIN  
/DEPENDENT 乙醇转化率  
/METHOD=ENTER CoSiO2 和 HAP 装料比中 CoSiO2 的质量 (mg CoSiO2 的质量之比 wt CoSiO2 和 HAP 装  
料比 HAP (或石英沙) 乙醇使用质量 (m  
乙醇添加速率 (ml/min 有无 HAP (1 为有 2 为无) 温度  
/SCATTERPLOT=(*ZRESID,*ZPRED)  
/RESIDUALS DURBIN NORMPROB(ZRESID).
```

```
REGRESSION  
/MISSING LISTWISE  
/STATISTICS COEFF OUTS R ANOVA COLLIN TOL  
/CRITERIA=PIN(.15) POUT(.20)  
/NOORIGIN  
/DEPENDENT 乙醇转化率  
/METHOD=ENTER 乙醇添加速率 (ml/min 有无 HAP (1 为有 2 为无) 温度  
/SCATTERPLOT=(*ZRESID,*ZPRED)  
/RESIDUALS DURBIN NORMPROB(ZRESID).
```