授权给: 猫猫每天都好饿



问题二的解决:

问题二要求探讨不同催化剂组合及温度对乙醇转化率及 C4 烯烃选择性大小的影响,因此,该问可以在第一问的基础上进行升级改进。相比较第一问而言,该问需要奖不同催化剂的一些数据特征考虑在内,由附件一得知,不同催化剂具有 Co/SiO2 浓度,Co/SiO2 溶液量(多少多少毫升),HAP 浓度,HAP 溶液量四个点。同时,我们需要了解到的是,在这些变量中,只有温度是动态的。因此,我们在问题一模型的基础上,需要对回归方程做出改进。既有 Y = XG + ZB + E

其中,Y 为观测值矩阵, $Y \in R^{Tem \times 2}$; X 为温度矩阵, $X \in R^{Tem \times 2}$;G 为传递矩阵, $G \in R^{2 \times 2}$;Z 为不同催化剂的参数矩阵, $Z \in R^{Tem \times 4}$;B 为催化剂相关参数的传递矩阵, $B \in R^{4 \times 2}$;E 为观测噪声, $E \in R^{Tem \times 2}$ 。

那么,基于式(1),我们可以将式(1)进一步表示为

$$y_k = Xg_k + Zb_k + e_k \tag{2}$$

其中 ● k 表示第 k 列数据。

我们假设噪声服从均值为 0 方差为 $\Sigma_{n}^{-1} = \sigma^{2}I$,那么便有

$$e_k \sim N\left(0, \Sigma_v^{-1}\right) \tag{3}$$

那么由高斯分布的性质得,我们可以得到关于 y_k 的分布形式,即有

$$y_k \sim N\left(Xg_k + Zb_k, \Sigma_v^{-1}\right) \tag{4}$$

那么,关于观测值 y_k 的边际似然概率密度函数可以表示为

$$p(y_k \mid g_k, b_k, \Sigma_v^{-1}) = (2\pi)^{-\frac{N}{2}} |\Sigma_v|^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}(y_k - Xg_k - Zb_k)^T \Sigma_v(y_k - Xg_k - Zb_k)}$$
(5)

那么,为了方便的求解,关于观测值 y_i 的对数边际似然概率密度函数可以表示为

$$\log p(y_{k} | g_{k}, b_{k}, \Sigma_{v}^{-1}) = -\frac{N}{2} \ln(2\pi) + \frac{N}{2} \ln(\sigma^{2}) - \frac{1}{2} (y_{k} - Xg_{k} - Zb_{k})^{T} \Sigma_{v} (y_{k} - Xg_{k} - Zb_{k})$$
(6)

下面,我们可以对式(6)针对要求的参数求偏导,其中包括 g_k , b_k , σ^2 , 那么便有

$$g_k = \left(X^T X\right)^{-1} X^T \left(y_k - Zb_k\right) \tag{7}$$

$$b_k = \left(Z^T Z\right)^{-1} Z^T \left(y_k - X g_k\right) \tag{8}$$

$$\sigma^{2} = \frac{\left(y_{k} - Xg_{k} - Zb_{k}\right)^{T}\left(y_{k} - Xg_{k} - Zb_{k}\right)}{N} \tag{9}$$

我们不断更新(7)-(9)来使得(6)达到最大。最后输出 g_k , b_k , σ^2 的值。

第一题中问题要求我们探究**乙醇转化率**和 **C4 烯烃选择性**与**温度**的关系,已知附件一中共有 **21** 种不同的催化剂,那么便可以得到 21 个 A 矩阵,即构成了 21 个不同的回归方程**(这里需要手动替换 Y 和 X 中的数据)**,这是第一问中要得到的结果。第二问中,引入了更多指标变量,因此,构建了 21 个新的回归方程。

$$Y = XG + ZB + E$$

(举例)在这里, 我们可以表示为如下所示:

例如附件一中的 A1 催化剂,我们知道了温度序列为[250,275,300,325,350]; 那么相应的可以构造矩阵 X(代码中有示例);

不仅如此, 催化剂也给出了几种指标, 这里有

Co/SiO2 浓度=1

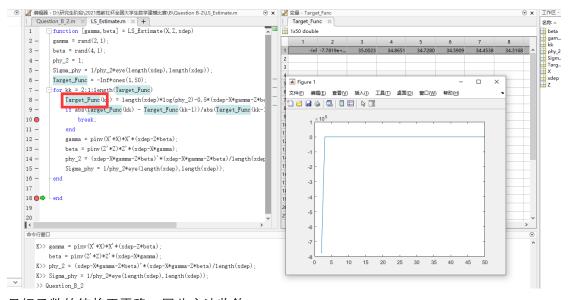
Co/SiO2 溶液量=200

HAP 浓度=200

HAP 溶液量=1.68

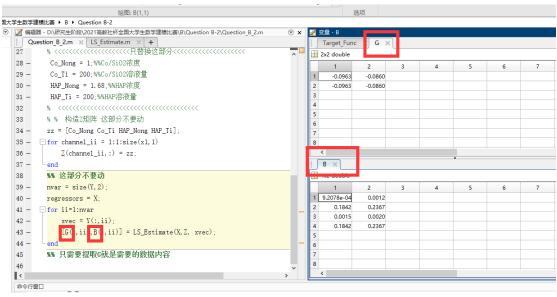
并根据上文构建 Z(代码中有示例);

因此, 跑完 A1 催化剂之后, 我们发现,



目标函数的值趋于平稳,因此方法收敛。

同时,还得知了G和B的数值。



那么,针对催化剂 1, 我们的回归方程可以转化为

$$Y_{A1} = X \cdot \begin{bmatrix} -0.0963 & -0.0860 \\ -0.0963 & -0.0860 \end{bmatrix} + Z \cdot \begin{bmatrix} 0.00092 & 0.0012 \\ 0.1842 & 0.2367 \\ 0.0015 & 0.0020 \\ 0.1842 & 0.2367 \end{bmatrix} + E$$
温度的影响
$$Y_{A1} = X \cdot \begin{bmatrix} -0.0963 & -0.0860 \\ -0.0963 & -0.0860 \end{bmatrix} - Z \begin{bmatrix} 0.00092 & 0.0012 \\ \#化剂指标的影响 \\ 0.1842 & 0.2367 \\ 0.0015 & 0.0020 \\ 0.1842 & 0.2367 \end{bmatrix} - E$$

通过该方程,来说明**乙醇转化率**和 **C4 烯烃选择性**与**温度、催化剂**的关系。在这里,公式(1)构成了一个通用的回归方程矩阵。其中不同的是传递矩阵 G 和 B 的变化来说明不同催化剂下温度和其他指标的关系。

(结果展示,有 21 个催化剂,那么可以得到 21 个矩阵 A 构建的 21 个回归方程,我们可以将这 21 个方程列出来。建议论文中只列出一个,剩下 20 个放进附录)

如有其他问题或需要,联系 QQ 304628270 (原来的 QQ 不提供第二问的相关服务)

若代码有乱码

看下面

Question_B_2

y1 = [2.07]

5.85

14.97

19.68

36.80

```
y2 = [34.05]
37.43
46.94
49.7
47.21
];%%C4 烯烃选择性(%) 需要手动替换的数据 2
Y=[y1,y2];‰观测值
‰ 温度
x1 = [250]
275
300
325
350
1;%%温度 需要手动替换的数据 3
x2 = x1;
X = [x1,x2];
₩ 催化剂相应指标 Co/SiO2 浓度,Co/SiO2 溶液量(多少多少毫升),HAP 浓度,HAP 溶
液量
Co_Nong = 1; % Co/SiO2 浓度
Co_Ti = 200; % Co/SiO2 溶液量
HAP_Nong = 1.68; % HAP 浓度
HAP Ti = 200; MHAP 溶液量
% <<<<<<<<<<<<
%% 构造 Z 矩阵 这部分不要动
zz = [Co_Nong Co_Ti HAP_Nong HAP_Ti];
for channel_ii = 1:1:size(x1,1)
   Z(channel_i;) = zz;
end
‰ 这部分不要动
nvar = size(Y,2);
regressors = X;
for ii=1:nvar
   xvec = Y(:,ii);
   [G(:,ii),B(:,ii)] = LS\_Estimate(X,Z,xvec);
end
5% 只需要提取 G 就是需要的数据内容
```

LS Estimate

function [gamma,beta] = LS_Estimate(X,Z,xdep)

];‰乙醇转化率(%) 需要手动替换的数据 1

```
gamma = rand(2,1);
beta = rand(4,1);
phy_2 = 1;
Sigma_phy = 1/phy_2*eye(length(xdep),length(xdep));
Target_Func = -Inf*ones(1,50);
for kk = 2:1:length(Target_Func)
    Target_Func(kk)
                                          length(xdep)*log(phy_2)-0.5*(xdep-X*gamma-
Z*beta)'*Sigma_phy*(xdep-X*gamma-Z*beta);
    if abs(Target_Func(kk) - Target_Func(kk-1))/abs(Target_Func(kk-1)) < 1e-4
        break;
    end
    gamma = pinv(X'*X)*X'*(xdep-Z*beta);
    beta = pinv(Z'*Z)*Z'*(xdep-X*gamma);
    phy_2 = (xdep-X*gamma-Z*beta)'*(xdep-X*gamma-Z*beta)/length(xdep);
    Sigma_phy = 1/phy_2*eye(length(xdep),length(xdep));
end
end
```