



### 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

$$Y = XG + ZB + E \quad (1)$$

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

$$y_k = Xg_k + Zb_k + e_k \quad (2)$$

其中  $\bullet_k$  表示第  $k$  列数据。

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

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

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

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

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

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

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

$$\log p(y_k | g_k, b_k, \Sigma_v^{-1}) = -\frac{N}{2} \ln(2\pi) + \frac{N}{2} \ln(\sigma^2) - \frac{1}{2}(y_k - Xg_k - Zb_k)^T \Sigma_v (y_k - Xg_k - Zb_k) \quad (6)$$

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

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

$$b_k = (Z^T Z)^{-1} Z^T (y_k - Xg_k) \quad (8)$$

$$\sigma^2 = \frac{(y_k - Xg_k - Zb_k)^T (y_k - Xg_k - Zb_k)}{N} \quad (9)$$

我们不断更新(7)-(9)来使得(6)达到最大。最后输出  $g_k$ ,  $b_k$ ,  $\sigma^2$  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/SiO<sub>2</sub> 浓度=1

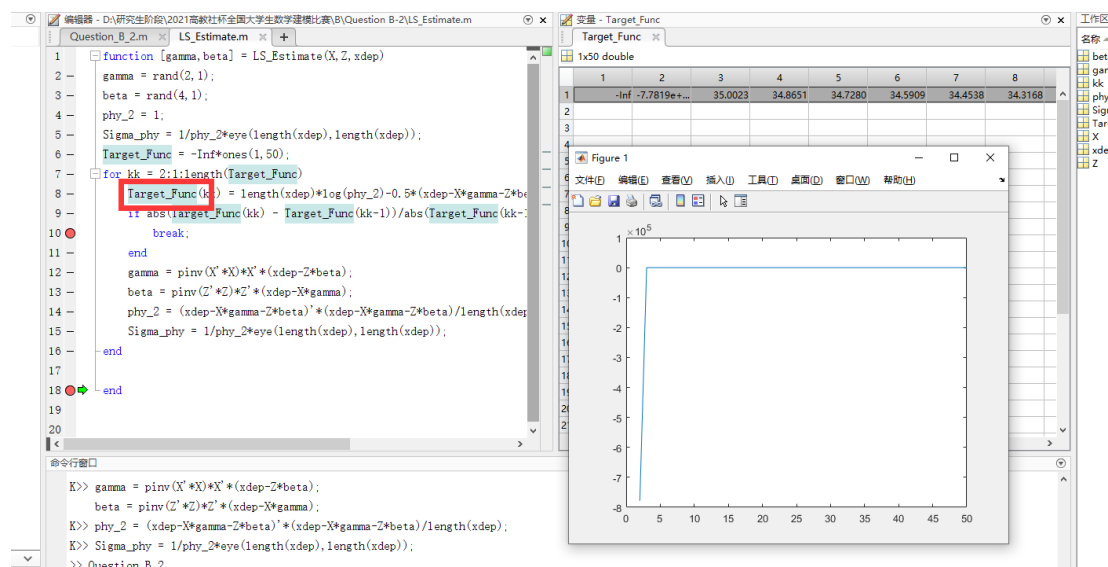
Co/SiO<sub>2</sub> 溶液量=200

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。



y2 = [34.05  
37.43  
46.94  
49.7  
47.21

```
Y=[y1,y2];%%观测值
```

x1 = [250  
275  
300  
325  
350

```
x2 = x1;
```

%% 催化剂相应指标 Co/SiO<sub>2</sub> 浓度, Co/SiO<sub>2</sub> 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; %%HAP 溶液量

%% 构造 Z 矩阵 这部分不要动

```
for channel_ii = 1:1:size(x1,1)
```

end

```
nvar = size(Y,2);
```

```
for ii=1:nvar
```

```
[G(:,ii),B(:,ii)] = LS_Estimate(X,Z, xvec);
```

%% 只需要提取 G 就是需要的数据内容

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

```

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

```