

# 乙醇偶合制备 C4 烯烃

## 摘 要

本文针对乙醇催化偶合制备 C4 烯烃的问题，基于已有的数据，利用 SPSS 软件，对数据进行分析，并建立多元回归模型。

**针对问题 1**，利用 SPSS 软件对每组催化剂组合进行线性与非线性曲线拟合，分别得到乙醇转化率与温度成正相关，且用三次曲线拟合最佳；C4 烯烃的选择性随着温度的变化分为 3 种，其中有 18 组呈现正相关，1 组存在最适温度，1 组有最低点，三种情况均用三次曲线拟合最佳。对于附件 2 数据中，利用 SPSS 软件，首先将时间与乙醇催化剂之间的关系拟合为一条二次曲线。其次进行相关性分析，得到一些变量之间存在一定的相关性，具体见正文。最后建立多元非线性模型进行参数估计，得到回归方程表达式。

**针对问题 2**，采用控制变量的方法，将情况分为 6 种进行讨论，每种情况仅有 1 种变量进行变化，其余自变量以数据尽量多为目的进行取值固定。最终利用 SPSS 软件进行相关性分析，得到结论：装袋方式对两者的影响不大；总质量、Co 负载量、温度、Co/SiO<sub>2</sub> 和 HAP 的装料比、乙醇浓度、对乙醇转化率的影响很大，且前三者影响作用是正向的，后两者是负向的；装料比和 Co 负载量分别对 C4 烯烃选择性有着一定的正、负向影响，但影响作用不大，相比而言装料比的影响更大，而温度依旧对 C4 烯烃选择性起到很大的正向影响。

**针对问题 3**，利用 SPSS 软件分别分析温度和催化剂与 C4 烯烃收率的关系，得到温度与 C4 烯烃收率存在正相关性。在 350℃ 时，总质量、Co 负载量、Co/SiO<sub>2</sub> 和 HAP 的装料比、乙醇浓度的最优值分别为 400mg、1:1、2wt%、0.3ml/min，装袋方式为 1，因此 400℃ 的 A3 组为最高 C4 烯烃收率组。在 350℃ 的约束下，建立非线性回归模型得到结论：温度为 325℃ 的 A2 组为 C4 烯烃收率最高的组合。

**针对问题 4**，建立 6 个影响因素与 C4 烯烃收率之间的多元非线性回归模型，利用 MATLAB 软件，通过黄金分割法得到准确的最优解为总质量 209.0170mg、Co/SiO<sub>2</sub> 和 HAP 的装料比 0.5023292、Co 负载量 4.81966 wt%，乙醇浓度为 1.674390ml/min，温度为 401.3932℃，最终得到 5 次实验设计方案：

- (1) 200mg 1wt%Co/SiO<sub>2</sub>- 200mg HAP-乙醇浓度 0.9ml/min，温度 450℃；
- (2) 200mg 3wt%Co/SiO<sub>2</sub>- 200mg HAP-乙醇浓度 1.68ml/min，温度 350℃；
- (3) 50mg 1wt%Co/SiO<sub>2</sub>- 50mg HAP-乙醇浓度 0.86ml/min，温度 400℃；
- (4) 57mg 1wt%Co/SiO<sub>2</sub>- 43mg HAP-乙醇浓度 1.68ml/min，温度 400℃；
- (5) 50mg 1wt%Co/SiO<sub>2</sub>+ 90mgHAP-乙醇浓度 1.68ml/min，温度 350℃；

本文主要应用 SPSS 软件，方法直观、准确，整篇文章采取图文并茂的效果。

**关键词：**SPSS 软件 数据分析 相关性分析 多元回归模型

# 1 问题的背景与重述

## 1.1 问题背景

C4 烯烃广泛应用于化工产品及医药的生产，乙醇是生产制备 C4 烯烃的原料。在制备过程中，催化剂组合（即：Co 负载量、Co/SiO<sub>2</sub> 和 HAP 装料比、乙醇浓度的组合）与温度对 C4 烯烃的选择性和 C4 烯烃收率将产生影响（名词解释见附录）。因此通过对催化剂组合设计，探索乙醇催化偶合制备 C4 烯烃的工艺条件具有重要的意义和价值。

## 1.2 问题重述

某化工实验室针对不同催化剂在不同温度下做了一系列实验，结果如附件 1 和附件 2 所示。请通过数学建模完成下列问题：

(1) 对附件 1 中每种催化剂组合，分别研究乙醇转化率、C4 烯烃的选择性与温度的关系，并对附件 2 中 350 度时给定的催化剂组合在一次实验不同时间的测试结果进行分析。

(2) 探讨不同催化剂组合及温度对乙醇转化率以及 C4 烯烃选择性大小的影响。

(3) 如何选择催化剂组合与温度，使得在相同实验条件下 C4 烯烃收率尽可能高。若使温度低于 350 度，又如何选择催化剂组合与温度，使得 C4 烯烃收率尽可能高。

(4) 如果允许再增加 5 次实验，应如何设计，并给出详细理由。

# 2 问题分析

## 2.1 名词解释

温度：反应温度。

选择性：某一个产物在所有产物中的占比。

时间：催化剂在乙醇氛围下的反应时间，单位分钟（min）。

Co 负载量：Co 与 SiO<sub>2</sub> 的重量之比。例如，“Co 负载量为 1wt%”表示 Co 与 SiO<sub>2</sub> 的重量之比为 1:100，记作“1wt%Co/SiO<sub>2</sub>”，依次类推。

HAP：一种催化剂载体，中文名称羟基磷灰石。

Co/SiO<sub>2</sub> 和 HAP 装料比：指 Co/SiO<sub>2</sub> 和 HAP 的质量比。例如附件 1 中编号为

A14 的催化剂组合“33mg 1wt%Co/SiO<sub>2</sub>-67mg HAP-乙醇浓度 1.68ml/min”指 Co/SiO<sub>2</sub> 和 HAP 质量比为 33mg: 67mg 且乙醇按每分钟 1.68 毫升加入，依次类推。

乙醇转化率：单位时间内乙醇的单程转化率，其值为  $100\% \times \frac{\text{乙醇进气量}-\text{乙醇剩余量}}{\text{乙醇进气量}}$ 。

C4 烯烃收率：其值为乙醇转化率×C4 烯烃的选择性。

## 2.2 问题分析

**针对问题 1**，分别对已有的两组数据进行分析，主要使用的软件为 SPSS 软件。在分析附件 1 中数据时，利用直观观测先判断出乙醇转化率与温度之间基本成正相关，但有可能是线性的，也有可能是非线性的，因此考虑到利用数据画出散点图进行曲线拟合，利用 R 方来判断拟合程度的好坏，最终可以得到两者之间的关系。同理，可以分析 C4 烯烃选择性与温度的关系。在分析附件 2 数据中，首先考虑将时间与乙醇催化剂之间的关系进行拟合进行宏观的结果分析。由于结果中存在多于 2 种的变量，因此考虑变量之间存在一定的相关性，因此接下来对各变量进行相关性分析。同时，在数据分析中推测 6 个产物的选择性与乙醇转化率之间建立多元统计模型，分析各产物选择性与乙醇转化率之间的关系，写出回归方程的形式，最终进行参数估计，得到回归方程表达式。利用残差判断模型的可行性与正确性。

**针对问题 2**，为了探究不同催化剂组合及温度对乙醇转化率以及 C4 烯烃选择性大小的影响。由于多因素的影响分析起来比较困难，因此考虑对自变量进行分类，而后分别对分类后的一些条件控制不变，每次仅变化一个，将问题转化为单变量问题，从而简化模型。又通过相关性大小以及正负性判断影响作用的程度以及趋势。

**针对问题 3**，利用问题 1 中的结论分析温度与 C4 烯烃收率的关系。选取温度为 400℃，在此基础上研究催化剂与 C4 烯烃收率的关系。分别分析总质量、装料比、Co 负载量、乙醇浓度与 C4 烯烃收率的关系，绘制拟合曲线，利用问题 2 结论即可得到每个自变量的最优值，找到最优组合。当温度限制为 350℃时，考虑用非线性多元回归模型建立方程，通过方程关系分析最优点，即可找到最优的组合。

**针对问题 4**，依旧考虑建立多元非线性回归模型，得到 6 个自变量影响因素与 C4 烯烃收率的关系。接着，利用 MATLAB 软件，通过黄金分割法逐渐缩小搜索范围，最终得到精确的最优点，采用对照实验的方法，设计出 5 次实验方案，得到更优的催化剂组合和温度研究方案。

## 3 模型假设

- (1) 假设附件给出的数据均真实可靠，不包括任何的不合理因素。
- (2) 假设数据中的奇异数据和缺省值忽略后对总体数据不会有显著的影响。
- (3) 乙醇转化率与 6 类产物选择性之间均相互独立。

## 4 符号说明

符号	符号描述
$\mu$	乙醇转化率
$x$	乙烯选择性
$r$	乙醛选择性
$z$	C4 烯烃选择性

$w$	碳数为 4-12 脂肪醇
$v$	甲基苯甲醛和甲基苯甲醇
$u$	其他
$t$	温度
$m$	总质量
$b$	CoSiO <sub>2</sub> 和 HAP 的装料比
$f$	Co 负载量
$c$	乙醇浓度
$\gamma$	C4 烯烃收率

---

其余符号在文中给出

## 5 模型建立与求解

### 5.1 问题一的建模与求解

根据题目的要求，对附件 1 和附件 2 的数据进行依题分析。

#### 5.1.1 乙醇转化率与温度的模型和关系

针对附件 1 中数据，对每种催化剂组合，本文利用 SPSS 软件研究乙醇转化率与温度的关系。

以催化剂组合为 A1——200mg 1wt%Co/SiO<sub>2</sub>-、200mg HAP、乙醇浓度 1.68ml/min 为例，进行曲线拟合，如图 5-1。（其余催化剂组合输出结果详见附录 1）

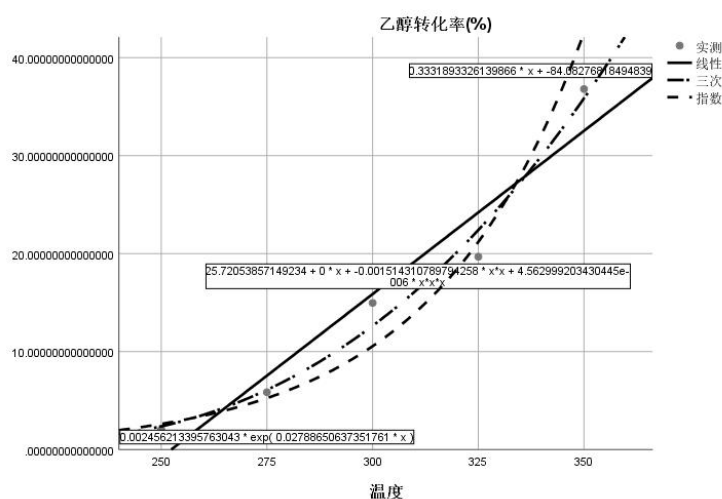


图 5-1 催化剂为 A1 组的拟合曲线

根据 R 方越大曲线拟合的越好，由表 5-1 可以看出三次曲线是拟合的最优的一条，函数表达式为：

$$y = 25.721 + -0.02x^2 + (4.563E-6)x^3$$

由图 5-1 也可以看出三条曲线与散点图之间的分布情况，可以得到三次函数关系曲线为最优拟合曲线。

对每组催化剂进行曲线拟合发现每组对应的规律均是一样的，因此可以得到

**结论：**随着温度的升高，乙醇变化率逐渐变大，且效率逐渐变快，即温度和乙醇变化率成正相关，可以用一条三次曲线很好的描述。

5.1.2 C4 烯烃的选择性与温度的模型和关系

如同 5.1.1 中的方法，依旧利用 SPSS 软件研究 C4 烯烃的选择性与温度的关系。在进行曲线拟合的过程中发现两者关系一共出现 3 种情形，具体如下：

5.1.2.1 模型 1——正相关模型

以催化剂组合为 A4——200mg 0.5wt%Co/SiO<sub>2</sub>、200mg HAP、乙醇浓度 1.68ml/min 为例，进行曲线拟合，如图 5-2。

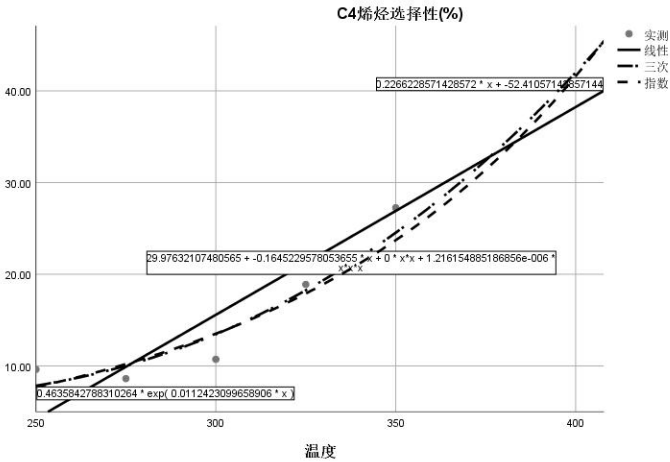


图 5-2 催化剂为 A4 组的拟合曲线

根据 R 方越大曲线拟合的越好，由表 5-2 可以看出三次函数关系曲线是拟合的最优的一条，函数表达式为：

$$y=29.976-0.165x+(1.216E-6)x^3$$

因此由以知数据可以得到结论：C4 烯烃的选择性与温度成正相关关系。

5.1.2.2 模型 2——正+负相关模型

以催化剂组合为 A1——200mg 1wt%Co/SiO<sub>2</sub>-、200mg HAP、乙醇浓度 1.68ml/min 为例，进行曲线拟合，如图 5-3：

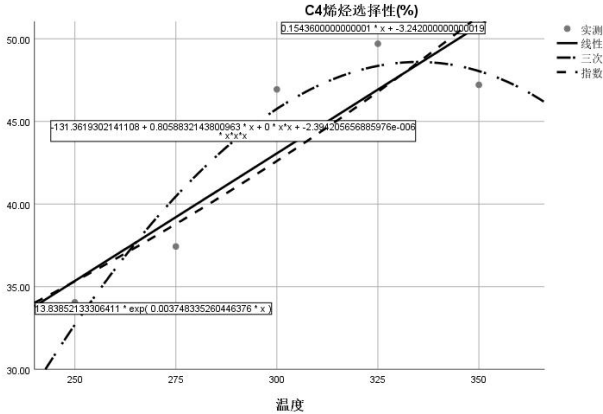


图 5-3 催化剂为 A1 组的拟合曲线

同样根据 R 方越大曲线拟合的越好，由表 5-2 可以看出三次函数关系曲线是



拟合的最优的一条，函数表达式为：

$$y=-131.362+0.806x+(-2.394E-6)x^3$$

由图 5-3 可以看出三条线与散点图之间的分布情况，可以发现三次曲线体现出了回落趋势，因此推断反应可能存在最适温度，利用三次曲线可以进行最优点的描述。

由模型 2 可以得到**结论**：随着温度的升高，C4 烯烃的选择性先变大后变小，即存在一个最优温度使得 C4 烯烃的选择性最大，可以用一条三次曲线很好的描述。

### 5.1.2.3 模型 3——负+正相关模型

以催化剂组合为 A2——200mg 2wt%Co/SiO<sub>2</sub>、200mg HAP、乙醇浓度 1.68ml/min 为例，进行曲线拟合，如图 5-4。

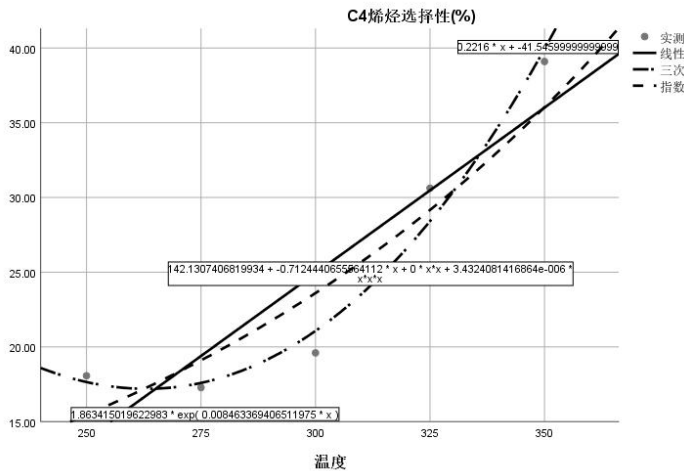


图 5-4 催化剂为 A2 组的拟合曲线

同样根据 R 方越大曲线拟合的越好，由表 5-4 可以看出三次函数关系曲线是拟合的最优的一条，函数表达式为：

$$y=142.131-0.712x+(3.432E-6)x^3$$

由图 5-4 可以看出三条线与散点图之间的分布情况，可以发现三次曲线体现出了回落而后上升的趋势，因此推断反应有 C4 烯烃选择性对应的最低温度点，利用三次曲线可以进行此点的描述。

由模型 3 可以得到**结论**：随着温度的升高，C4 烯烃的选择性先变小后变大，即可能存在一个温度使得 C4 烯烃的选择性最小，可以用一条三次曲线很好的描述。

### 5.1.2.4 结果分析

根据对每组催化剂组的数据分析（其余组别拟合曲线结果图见附录 2），可以得到的结论是 C4 烯烃的选择性与温度的关系可以用一个三次曲线进行描述，然而由于出现了 3 种模型的情况，在已知的 21 组数据种，发现有 19 组可以应用于模型 1，而仅有 A1 组、A2 组出现了不同，分别对应模型 2 和模型 3。此外，需要注意的是 A3 组虽然一直呈现正相关状态，但其斜率不如模型 1 中的三次曲线一样一直在增大，而是一直在减小，因此随着温度继续增大，其走势依旧不能判断。

因此，对于温度和 C4 烯烃的选择性的关系的研究，可以得到的**结论**有：对于 A1 组催化剂，C4 烯烃的选择性随着温度的增大先变大后变小；对于 A2 组

催化剂，C4 烯烃的选择性随着温度的增大先变小后变大；对于 A3 组催化剂，C4 烯烃的选择性随着温度的增大逐渐变大，但增加的速率逐渐变小；对于 A4—A14、B1—B7 组的催化剂，C4 烯烃的选择性随着温度的大小变大，且增加的越来越快。对于 3 个模型不同的结果，还需要更多的实验数据来进行进一步的研究。

### 5.1.3 附件 2 的数据结果分析

由题目中的附件 2 可知，表格数据表示的是温度为 350 度时给定的某种催化剂组合的测试数据。

首先，利用 SPSS 软件可以得到时间与乙醇催化剂之间的关系，并可以拟合成一条二次函数曲线，表达式为：

$$y=45.24884313247438+-0.10507441269091x+ 0.0001772256432622633x^2$$

如图 5-5：

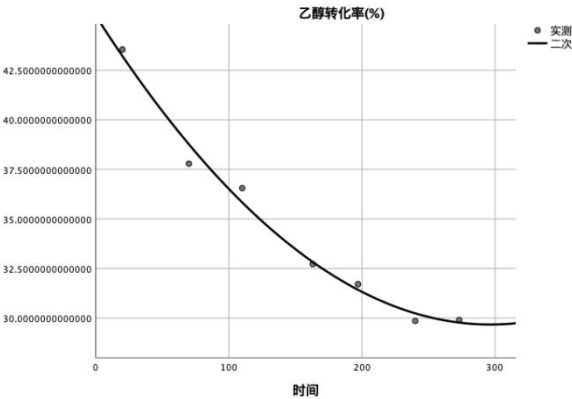


图 5-5 乙醇转化率和时间的关系图

由图 5-5 可知随着时间的增加，乙醇转化率变化的效率越来越慢，催化剂的催化作用随之减弱。

考虑到附件 2 中的 6 个类产物的选择性也在变化，因此可以推测乙醇转化率与这 6 类产物选择性之间都有可能存在着一些联系，可能是线性相关，也可能是非线性相关，也可能是不相关。因此，下面将对数据结果进行相关性分析。

#### 5.1.3.1 相关性分析

为了对结果进行直观分析，利用 SPSS 软件对乙醇转化率以及 6 类产物进行相关性分析，结果如表 5-1：

表 5-1 相关性分析

		乙醇转化率						
		乙醇转化率 (%)		乙烯选择碳数为 4-12 性 脂肪醇		C4 烯烃选 择性		甲基苯甲 醛选择 性和甲基苯甲 醇 性
乙醇转化 率(%)	皮尔逊相关性	1	-0.358	-0.955**	0.899**	-0.147	-0.667	-0.358
	Sig. (双尾)		0.431	0.001	0.006	0.753	0.101	0.431

	个案数	7	7	7	7	7	7	7
其他	皮尔逊相关性	-0.358	1	0.321	-0.685	-0.798*	0.578	0.321
	Sig. (双尾)	0.431		0.483	.090	.032	0.101	0.483
	个案数	7	7	7	7	7	7	7
乙烯选择 性	皮尔逊相关性	-0.955**	0.321	1	-0.897**	0.251	0.578	-0.798
	Sig. (双尾)	0.001	0.483		0.006	0.586	0.174	0.032
	个案数	7	7	7	7	7	7	7
碳数为4-12 脂肪醇	皮尔逊相关性	0.899**	-0.685	-0.897**	1	0.151	-0.345	0.309
	Sig. (双尾)	0.006	0.090	0.006		0.746	0.448	0.500
	个案数	7	7	7	7	7	7	7
C4 烯烃选 择性	皮尔逊相关性	-0.147	-0.798*	0.251	0.151	1	0.490	-0.685
	Sig. (双尾)	0.753	0.032	0.586	0.746		0.264	0.09
	个案数	7	7	7	7	7	7	7
甲基苯甲 醛和甲基 苯甲醇	皮尔逊相关性	-0.667	0.579	0.578	-0.733	-0.345	-0.733	0.579
	Sig. (双尾)	0.101	0.174	0.174	0.061	0.448	0.061	0.174
	个案数	7	7	7	7	7	7	7
乙醛选择 性	皮尔逊相关性	-0.963**	0.309	0.972**	-0.886**	0.268	0.579	1
	Sig. (双尾)	0.001	0.500	0.000	0.008	0.561	0.174	
	个案数	7	7	7	7	7	7	7

由表格 5-5 可以直观的得到不同变量之间的皮尔逊相关性，并可以通过 Sig. 值判断检验是否显著，其中以显著性水平 $\alpha=0.05$ 为界限，若 Sig. 值小于等于 0.05，则可以得到两者存在相关性显著。

根据判定方法可以得到如下分析结果：乙醇转化率和乙烯选择性、乙醛选择性具有强负相关性，与碳数为 4-12 脂肪醇具有强正相关性，与其他类和 C4 烯烃选择性相关性不大；其他类和 C4 烯烃选择性具有强负相关性，与碳数为 4-12 脂肪醇具有一定负相关性，而与乙醇转化率、乙烯选择性为弱相关性；乙烯选择性和碳数为 4-12 脂肪醇具有强负相关性，与乙醛选择性具有强正相关性；甲基苯甲醛和甲基苯甲醇没有与其具有强相关性的变量；乙醛选择性与碳数为 4-12 脂肪醇具有强负相关性。

#### 5.1.3.2 模型 4——多元回归模型的建立

由于 6 个变量之间相互独立，因此可以建立多元统计模型进行曲线拟合，从而得到产物与乙醇转化率之间的关系。利用 SPSS 软件与 5.1.3.1 所得的相关性结论可以得到乙醇转化率与乙烯选择性、乙醛选择性、C4 烯烃选择性、碳数为 4-12 脂肪醇呈线性关系，与甲基苯甲醛和甲基苯甲醇、其他类呈二次关系，因此，可以建立多元回归模型为：

$$\mu = \beta_1 \times x + \beta_2 \times r + \beta_3 \times z + \beta_4 \times w + \beta_5 \times v^2 + \beta_6 \times u^2 + \varepsilon \quad (1)$$



其中 $\varepsilon$ 服从  $N(0, \sigma^2)$  的独立随机变量,  $\beta_1$ 、 $\beta_2$ 、 $\beta_3$ 、 $\beta_4$ 、 $\beta_5$ 、 $\beta_6$  分别表示乙烯选择性、乙醛选择性、C4 烯烃选择性、碳数为 4-12 脂肪醇、甲基苯甲醛和甲基苯甲醇、其他类的参数。

利用 SPSS 软件对参数进行估计, 最终得到了参数的估计值如表 5-2:

表 5-2 参数估计值	
参数估计值	
$\beta_1$	1.000
$\beta_2$	-0.727
$\beta_3$	-0.762
$\beta_4$	-0.356
$\beta_5$	-0.910
$\beta_6$	-0.749

同时得到残差为 0.057, 说明模型可行与正确。

### 5.2 问题 2 的建模与求解

分析附件 1 中数据, 分别观察自变量催化剂组合、温度的变化。温度一共有 7 个值, 分别为 250℃、275℃、300℃、325℃、350℃、400℃、450℃。而催化剂组合相对比较复杂, 本文将催化剂组合一共分为 5 种因素进行考虑, 分别为装袋方式、总质量、Co/SiO2 和 HAP 的装料比、Co 负载量、乙醇浓度, 其中 Co/SiO2 和石英砂为特殊情况。对 21 组数据整理情况如表 5-3:

表 5-3 催化剂分类汇总					
催化剂组合编号	装料方式	总质量 (mg)	Co/SiO2 和 HAP 的装 料比	Co 负载量(wt%)	乙醇浓度(ml/min)
A1	1	400	1:1	1	1.68
A2	1	400	1:1	2	1.68
A3	1	400	1:1	1	0.9
A4	1	400	1:1	0.5	1.68
A5	1	400	1:1	2	0.3
A6	1	400	1:1	5	1.68
A7	1	100	1:1	1	0.3
A8	1	100	1:1	1	0.9
A9	1	100	1:1	1	2.1
A10	1	100	1:1	5	2.1
A11	1	140	5:9 (Co/SiO2 和石英砂)	1	1.68
A12	1	100	1:1	1	1.68
A13	1	100	2:1	1	1.68
A14	1	100	1:2	1	1.68
B1	2	100	1:1	1	1.68

B2	2	200	1:1	1	1.68
B3	2	20	1:1	1	1.68
B4	2	50	1:1	1	1.68
B5	2	100	1:1	1	2.1
B6	2	150	1:1	1	1.68
B7	2	200	1:1	1	0.9

下面开始分别控制变量进行分析，可将情况分为 7 种。

### 5.2.1 情况 1——仅装料方式变化

在情况 1 中，规定不变的条件为：总质量为 100mg,Co/SiO<sub>2</sub> 和 HAP 的装料比为 1，Co 负载量 1wt%，乙醇浓度 1.68ml/min，温度选取 250℃。

在此选取 250℃的原因是由问题 1 分析可知，随着温度的升高乙醇转化率的走势不唯一，因此选取第 1 个温度点可以更好的排除温度带来的异常点的影响，从而减小误差。同时，本次以及后面的所有情况中选取的不变条件均遵循数据尽可能多的目标进行不变条件的选取。

经过整理，得到在条件下两种装料方式对应的乙醇转化率和 C4 烯烃选择性，数据汇总如表 5-4:

表 5-4 仅装料方式变化的数据汇总

装料方式	总质量 (mg)	Co/SiO <sub>2</sub> 和 HAP 的装料比	Co 负载量 (wt%)	乙醇浓度 (ml/min)	温度	乙醇转化率(%)	C4 烯烃选 择性(%)	催化剂组 合编号
1	100	1:1	1	1.68	250	1.44170934251802	6.17	A12
2						1.40818182615844	6.32	B1

下面利用 SPSS 软件进行数据分析。为了研究影响，考虑用相关性判定影响程度，因此，利用数据分别对乙醇转化率、C4 烯烃选择性进行相关性分析。由于情况 1 数据很少，所以用斯皮尔曼相关系数进行相关性分析，结果如表 5-5、表 5-6:

表 5-5 情况 1 中变量与乙醇转化率的相关性

相关性				
斯皮尔曼 Rho	装料方式	对比装料方式	乙醇转化率(%)	
		相关系数	1.000	-1.000
		Sig. (双尾)	0	0
		个案数	2	2
	乙醇转化率(%)	相关系数	-1.000**	1.000
		Sig. (双尾)	0	
		个案数	2	2

表 5-6 情况 1 中变量与 C4 烯烃选择性的相关性

相关性			
		对比装料方式	C4 烯烃选择性(%)
对比装料方式	皮尔逊相关性	1	1.000**
	Sig. (双尾)		0.000
	皮尔逊相关值	1.000**	1
	Sig. (双尾)	0.000	

由表 5-5 和表 5-6 可以得到结论：装料方式的不同对乙醇转化率、C4 烯烃选择性影响不大。

### 5.2.2 情况 2——仅总质量变化

在情况 2 中,规定不变的条件为:装料方式 2,Co/SiO<sub>2</sub> 和 HAP 的装料比为 1, Co 负载量 1wt%, 乙醇浓度 1.68ml/min, 温度选取 250℃。经过整理,得到在条件下 3 种总质量对应的乙醇转化率和 C4 烯烃选择性,数据汇总如表 5-7:

表 5-7 仅总质量变化的数据汇总

总质量 (mg)	装料方式	Co/SiO <sub>2</sub> 和 HAP 的装料比	Co 负载量 (wt%)	乙醇浓度 (ml/min)	温度	乙醇转化率(%)	C4 烯烃选择性(%)	催化剂组合编号
20						0.394774301814516	2.85	B3
50	1	1:1	1	1.68	250	0.543983713140717	6.62	B4
150						2.7681694785164	4.5	B6

下面利用 SPSS 软件进行数据分析。为了研究影响,考虑用相关性判定影响程度,因此,利用数据分别对乙醇转化率、C4 烯烃选择性进行相关性分析,结果如表 5-8、表 5-9:

表 5-8 情况 2 中变量与乙醇转化率的相关性

相关性			
		总质量 (mg)	乙醇转化率(%)
总质量 (mg)	皮尔逊相关性	1	0.986
	Sig. (双尾)		0.106
	皮尔逊相关性	0.986	1
	Sig. (双尾)	0.106	

表 5-9 情况 2 中变量与 C4 烯烃选择性的相关性

相关性			
		总质量 (mg)	C4 烯烃选择性 (%)
总质量 (mg)	皮尔逊相关性	1	0.150
	Sig. (双尾)		0.904
	皮尔逊相关性	0.150	1
	Sig. (双尾)	0.904	

由表 5-8 和表 5-9 可以得到结论：总质量与乙醇转化率为强正相关性，与 C4 烯烃选择性不相关。因此总质量对乙醇转化率的影响很大，且影响作用是正向的。

### 5.2.3 情况 3——仅 Co/SiO2 和 HAP 的装料比变化

在情况 3 中，规定不变的条件为：装料方式 1,总质量为 100mg，Co 负载量 1wt%，乙醇浓度 1.68ml/min，温度选取 250℃。经过整理，得到在条件下 3 种总质量对应的乙醇转化率和 C4 烯烃选择性，数据汇总如表 5-10:

表 5-10 仅 Co/SiO2 和 HAP 的装料比变化的数据汇总

Co/SiO2 和 HAP 的装料比	装料方式	总质量 (mg)	Co 负载量 (wt%)	乙醇浓度 (ml/min)	温度	乙醇转化率(%)	C4 烯烃选 择性(%)	催化剂组 合编号
1						1.44170934251802	6.17	A12
2	1	100	1	1.68	250	1.34694843685351	5.19	A13
0.5						2.49268861247491	1.89	A14

同理，利用 SPSS 软件分别对乙醇转化率、C4 烯烃选择性进行相关性分析，结果如表 5-11、表 5-12:

表 5-11 情况 3 中变量与乙醇转化率的相关性

相关性			
		Co/SiO2 和 HAP 的装料比	
Co/SiO2 和 HAP 的装料比	皮尔逊相关性	1	-0.803
	Sig. (双尾)		0.407
乙醇转化率(%)	皮尔逊相关性	-0.803	1
	Sig. (双尾)	0.407	

表 5-12 情况 3 中变量与 C4 烯烃选择性的相关性

相关性			
		Co/SiO2 和 HAP 的装料比	C4 烯烃选择性 (%)
Co/SiO2 和 HAP 的装料比	皮尔逊相关性	1	0.595
	Sig. (双尾)		0.595
C4 烯烃选择性(%)	皮尔逊相关性	0.595	1
	Sig. (双尾)	0.595	

由表 5-11 和表 5-12 可以得到结论：Co/SiO2 和 HAP 的装料比与乙醇转化率为强负相关性，与 C4 烯烃选择性成弱正相关性。因此 Co/SiO2 和 HAP 的装料比对乙醇转化率的影响很大，且影响作用是负向的，而 Co/SiO2 和 HAP 的装料比对 C4 烯烃选择性有一定影响，但影响作用不大。

### 5.2.4 情况 4——仅 Co 负载量变化

在情况 4 中，规定不变的条件为：装料方式 1,总质量为 400mg，Co/SiO2 和 HAP 的装料比为 1，乙醇浓度 1.68ml/min，温度选取 250℃。经过整理，得到在条件下 3 种总质量对应的乙醇转化率和 C4 烯烃选择性，数据汇总如表 5-13:

表 5-13 仅 Co/SiO<sub>2</sub> 和 HAP 的装料比变化的数据汇总

Co 负载量 (wt%)	装料方式	总质量 (mg)	Co/SiO <sub>2</sub> 和 HAP 的装料比	乙醇浓度 (ml/min)	温度	乙醇转化率(%)	C4 烯烃选 择性(%)	催化剂组 合编号
0.5						4.0193913236899	9.62	A4
1	1	400	1	1.68	250	2.06716944958221	34.05	A1
2						4.60299723489029	18.07	A2
5						13.3893967283351	3.3	A6

利用 SPSS 软件分别对乙醇转化率、C4 烯烃选择性进行相关性分析，结果如表 5-14、表 5-15：

表 5-14 情况 4 中变量与乙醇转化率的相关性

相关性			
		Co 负载量 (wt%)	乙醇转化率(%)
Co 负载量 (wt%)	皮尔逊相关性	1	0.955*
	Sig. (双尾)		0.045
乙醇转化率(%)	皮尔逊相关性	0.955*	1
	Sig. (双尾)	0.045	

表 5-15 情况 4 中变量与 C4 烯烃选择性的相关性

相关性			
		Co 负载量 (wt%)	C4 烯烃选择性(%)
Co 负载量 (wt%)	皮尔逊相关性	1	-0.0580
	Sig. (双尾)		0.420
C4 烯烃选择性(%)	皮尔逊相关性	-0.0580	1
	Sig. (双尾)	0.420	

由表 5-14 和表 5-15 可以得到结论：Co 负载量与乙醇转化率为强正相关性，与 C4 烯烃选择性成弱负相关性。因此 Co 负载量对乙醇转化率的影响很大，且影响作用是正向的，而对 C4 烯烃选择性有一定影响，但影响作用不大。

### 5.2.5 情况 5——仅乙醇浓度变化

在情况 5 中，规定不变的条件为：装料方式 1,总质量为 100mg，Co 负载量 1wt%，Co/SiO<sub>2</sub> 和 HAP 的装料比为 1，温度选取 250℃。经过整理，得到在条件下 3 种总质量对应的乙醇转化率和 C4 烯烃选择性，数据汇总如表 5-16:

表 5-16 仅 Co/SiO<sub>2</sub> 和 HAP 的装料比变化的数据汇总

乙醇浓度 (ml/min)	装料方式	总质量 (mg)	Co/SiO <sub>2</sub> 和 HAP 的装料比	Co 负载量 (wt%)	温度	乙醇转化率(%)	C4 烯烃选 择性(%)	催化剂组 合编号
0.3						19.6562914186116	5.75	A7
0.9	1	100	1	1	250	6.26573693340327	5.63	A8
1.68						1.44170934251802	6.17	A12
2.1						2.05316160924955	5.4	A9

利用 SPSS 软件分别对乙醇转化率、C4 烯烃选择性进行相关性分析，结果如表 5-17、表 5-18：

表 5-17 情况 5 中变量与乙醇转化率的相关性

相关性			
		乙醇浓度	乙醇转化率(%)
乙醇浓度	皮尔逊相关性	1	-0.899
	Sig. (双尾)		.101
乙醇转化率(%)	皮尔逊相关性	-0.899	1
	Sig. (双尾)	0.101	

表 5-18 情况 5 中变量与 C4 烯烃选择性的相关性

相关性			
		乙醇浓度	C4 烯烃选择性(%)
乙醇浓度	皮尔逊相关性	1	-0.097
	Sig. (双尾)		0.903
C4 烯烃选择性(%)	皮尔逊相关性	-0.097	1
	Sig. (双尾)	0.903	

由表 5-17 和表 5-18 可以得到结论：乙醇浓度与乙醇转化率为强负相关性，与 C4 烯烃选择性不相关。因此乙醇浓度对乙醇转化率的影响很大，且影响作用是相反的，而对 C4 烯烃选择性几乎没有影响。

### 5.2.6 情况 6——仅温度比变化

在情况 6 中，规定不变的条件为：装料方式 1,总质量为 100mg, Co/SiO<sub>2</sub> 和 HAP 的装料比为 1, Co 负载量 1wt%，乙醇浓度 1.68ml/min，温度选取 250℃。

经过整理，得到在条件下 3 种总质量对应的乙醇转化率和 C4 烯烃选择性，数据汇总如表 5-19：

表 5-19 仅 Co/SiO<sub>2</sub> 和 HAP 的装料比变化的数据汇总

温度	装料方式	总质量 (mg)	Co/SiO <sub>2</sub> 和 HAP 的装料比	Co 负载量 (wt%)	乙醇浓度 (ml/min)	乙醇转化率(%)	C4 烯烃选择性(%)	催化剂组合编号
250						9.6693729570379	5.5	A3
275						19.2369353731673	8.04	A3
300	1	100	1	1	250	29.2502335391358	17.01	A3
325						37.5791851341654	28.72	A3
350						48.9370446484212	36.85	A3
400						83.7133815760754	55.43	A3
450						86.4097027402944	49.9	A3

利用 SPSS 软件分别对乙醇转化率、C4 烯烃选择性进行相关性分析，结果如表 5-20、表 5-21：



表 5-20 情况 6 中变量与乙醇转化率的相关性

相关性			
		温度	乙醇转化率(%)
温度	皮尔逊相关性	1	0.982**
	Sig. (双尾)		0.000
乙醇转化率(%)	皮尔逊相关性	0.982**	1
	Sig. (双尾)	0.000	

表 5-21 情况 6 中变量与 C4 烯烃选择性的相关性

相关性			
		温度	C4 烯烃选择性(%)
温度	皮尔逊相关性	1	0.949**
	Sig. (双尾)		0.001
C4 烯烃选择性(%)	皮尔逊相关性	0.949**	1
	Sig. (双尾)	0.001	

由表 5-20 和表 5-21 可以得到结论：温度与乙醇转化率为强正相关性，与 C4 烯烃选择性也成强正相关性。因此温度对乙醇转化率、C4 烯烃选择性的影响均很大，且影响作用是正向的。

### 5.2.7 结果分析

通过 6 种情况可以得到一下结论：装袋方式对两者的影响不大；总质量、Co 负载量、温度、Co/SiO<sub>2</sub> 和 HAP 的装料比、乙醇浓度、对乙醇转化率的影响很大，且前三者影响作用是正向的，后两者是负向的；装料比和 Co 负载量分别对 C4 烯烃选择性有着一定的正、负向影响，但影响作用不大，相比而言装料比的影响更大，而温度依旧对 C4 烯烃选择性起到很大的正向影响，总质量几乎不影响 C4 烯烃选择性。

## 5.3 问题 3 的研究与求解

### 5.3.1 温度对 C4 烯烃收率的影响

首先研究温度对 C4 烯烃收率的影响。根据问题 1 可知温度与乙醇转化、C4 烯烃的选择性的关系在 275℃~400℃ 之间呈正相关关系，因此推测温度与 C4 烯烃收率也成正相关。利用 SPSS 软件对每个温度对应的 C4 烯烃收率绘制散点图，并进行线性回归直线拟合，可以得到温度越高 C4 烯烃收率的确越大，如图 5-6:

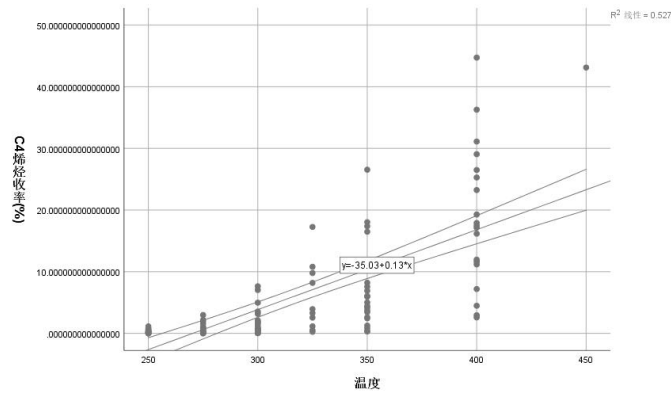


图 5-6 温度—C4 烯烃收率关系图

### 5.3.2 催化剂对 C4 烯烃收率的影响

其次，研究催化剂对 C4 烯烃收率的影响。选取温度为 400℃，分别对催化剂在问题 2 中存在影响关系的 4 个变量进行研究，分析结果如图 5-7、图 5-8、图 5-9、图 5-10：

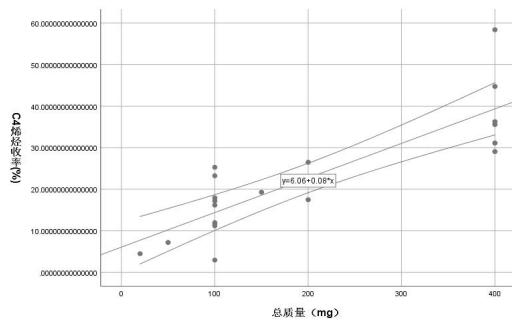


图 5-7 总质量-C4 烯烃收率关系图

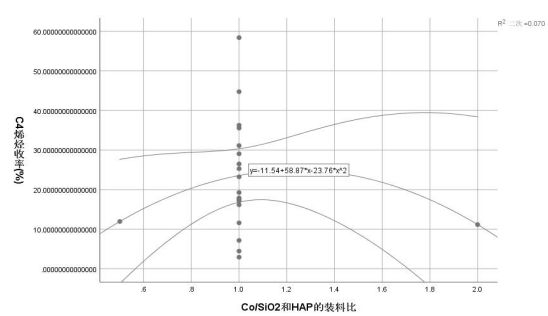


图 5-8 装料比-C4 烯烃收率关系图

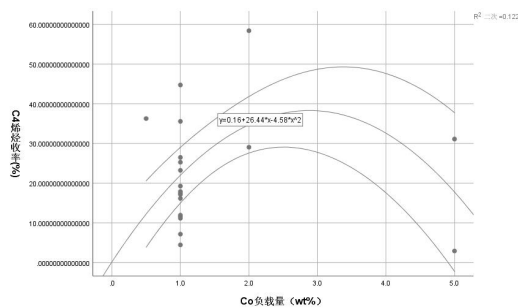


图 5-9 Co 负载量关系图

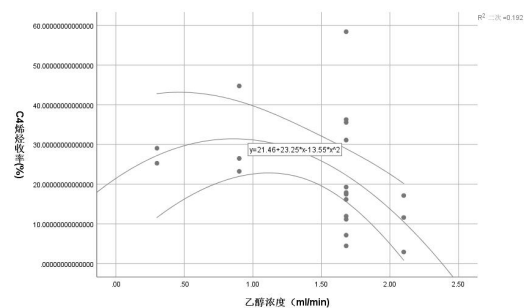


图 5-10 乙醇浓度关系图

由 4 张图分析可知总质量与 C4 烯烃收率成正相关，最优值为 400mg；Co/SiO<sub>2</sub> 和 HAP 装料比存在最优值为 1.2388；Co 负载量存在最优值为 2.8865wt%；乙醇浓度最优值为 0.8579ml/min。同时，对比 A11 中的石英砂组，A11 没有算的最优数据好，因此考虑最靠近最优值的其他组。

因此根据问题 2 结果可以得到结论：温度为 400℃ 的 A3 组为 C4 烯烃收率最高的组合。

### 5.3.3 温度限制下的最优组合

当温度小于 350℃ 时，由于温度很强的正相关性，选择温度为 300℃，观察

其他影响因素对 C4 收率的影响。

### 5.3.3.1 模型 5——多元非线性回归模型

利用问题 2 结论，利用 SPSS 软件建立多元非线性回归模型，模型 4 的建立方法的基础上考虑相关性，最终得到回归方程表达式为：

$$\gamma = 0.011m - 1.482b^2 + 3.807b - 0.406f^2 + 1.976f - 0.396c^2 + 1.037c - 4.489 \quad (2)$$

根据方程可以分别计算出总质量、Co/SiO<sub>2</sub> 和 HAP 的装料比、Co 负载量、乙醇浓度的极大值点，得到最优值，计算结果如下：

总质量为 400mg、Co/SiO<sub>2</sub> 和 HAP 的装料比最优值为 1.28、Co 负载量最优值为 2.43wt%、乙醇浓度最优值为 1.31ml/min、温度的最优值为 325℃。

因此根据问题 2 结果可以得到**结论**：在温度约束为 350℃ 以下时，温度为 325℃ 的 A2 组为 C4 烯烃收率最高的组合。

### 5.3.4 结果分析

根据问题 2 结果中影响大小的关系以及 SPSS 软件得出的结果分析，可以得到**结论**：温度为 400℃ 的 A3 组为 C4 烯烃收率最高的组合。在温度约束为 350℃ 以下时，温度为 325℃ 的 A2 组为 C4 烯烃收率最高的组合。

## 5.4 问题 4 的求解与分析

考虑在问题 3 的基础上设计实验，得到更好催化剂组合和温度使得 C4 烯烃收率更高。

### 5.4.1 模型 6——多元非线性回归模型

依旧考虑用多元非线性回归模型，与模型 5 同理，最终得到回归方程表达式为：

$$\gamma = 0.01t^2 - 0.573t + 0.022m - 2.754b^2 + 6.921b + 0.05f^2 - 0.996f - 1.355c^2 + 2.120c - 69.462 \quad (3)$$

(3)式可以反映出 6 个自变量影响因素与 C4 烯烃收率的关系，因此考虑在问题 3 得到的最优组 A3 的基础上，利用黄金分割法进行迭代逐渐缩小搜索范围，最终得到精确的最优点，设计出更好的实验方案。

利用 MATLAB 软件将问题 3 所求的自变量最优点代入模型 6，进行黄金分割法的一维搜索，最终得到理论最优极值点如表 5-22:

表 5-22 理论最优极值点

总质量	Co/SiO <sub>2</sub> 和 HAP 的装料比	Co 负载量	乙醇浓度	温度	装料方式
209.0170	0.5023292	4.81966	1.674390	401.3932	1

结合问题 3 中结论，设计出 5 次实验。

### 5.4.2 实验方案

由模型 6 设计出 5 次实验方案中催化剂组合和温度分别为：

- (1) 200mg 1wt%Co/SiO<sub>2</sub>- 200mg HAP-乙醇浓度 0.9ml/min，温度 450℃；
- (2) 200mg 3wt%Co/SiO<sub>2</sub>- 200mg HAP-乙醇浓度 1.68ml/min，温度 350℃；

- (3) 50mg 1wt%Co/SiO<sub>2</sub>- 50mg HAP-乙醇浓度 0.86ml/min, 温度 400℃;
- (4) 57mg 1wt%Co/SiO<sub>2</sub>- 43mg HAP-乙醇浓度 1.68ml/min, 温度 400℃;
- (5) 50mg 1wt%Co/SiO<sub>2</sub>+ 90mgHAP-乙醇浓度 1.68ml/min, 温度 350℃;

选择实验的组合是通过对照实验的方式进行选择。其中,第(1)组与最优组合 A3 进行对照,验证 400~450℃之间是否有最适温度;第(2)组与 A1、A2、A6 组进行对照,结合问题 2 得出的 Co 负载量最优值对比出更优的 Co 负载量;第(3)组与 A7、A8 组进行对照,结合问题 2 得出的乙醇浓度最优值对比出更优的乙醇浓度;第(4)组与 A13 组进行对照,对比出更优的 Co/SiO<sub>2</sub> 和 HAP 的装料比;第(5)组与 A11 组进行对照,对比石英砂与 HAP 的催化效果。

在 5 次实验后,对比优劣,可以得到更好的催化组合与温度,从而对得到更高的 C4 烯烃收率有了更优化的研究方案。

## 6 模型的评价与推广

### 6.1 模型的优点

- 1、本文求解过程严谨,建立的模型具有普适性。
- 2、利用 SPSS 软件对数据进行分析,操作简便,方法直观。
- 3、研究的问题与现实紧密结合,具有重要意义。

### 6.2 模型的缺点

- 1、数据数量偏少,研究内容具有局限性。

### 6.3 模型的改进

本文基于的数据量较少,研究范围有局限性,可以在已有数据的基础上多进行实验,得到更多数据,以方便研究更多更准确的催化剂组合以提高 C4 烯烃收率。

### 6.4 模型的推广

本文主要运用到 SPSS 软件,进行统计学中的数据分析。数据分析在诸多领域都有着广泛的应用。利用 SPSS 软件进行相关性分析、建立多元回归模型对研究乙醇偶合制备 C4 烯烃有着很大的意义。此方法对医学领域、航天航空领域也有着很强的推广意义。

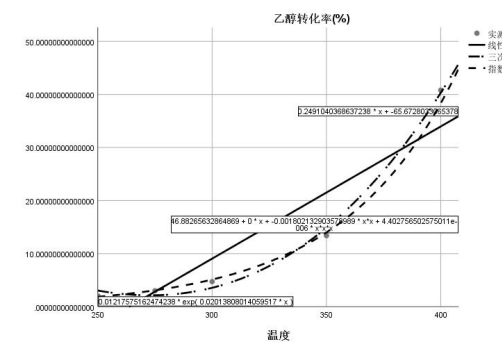
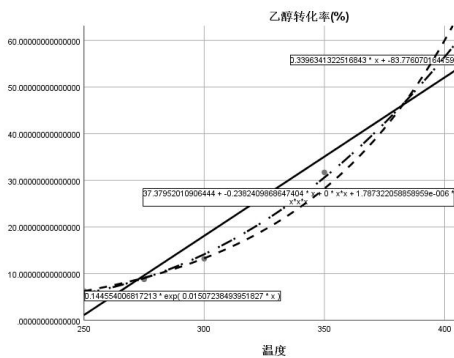
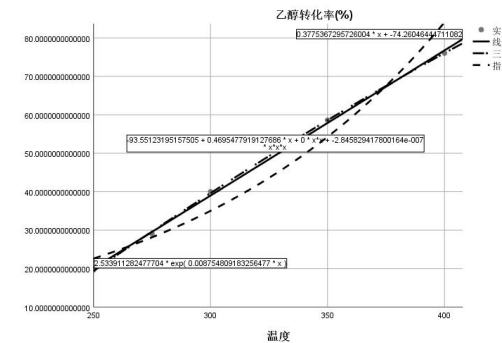
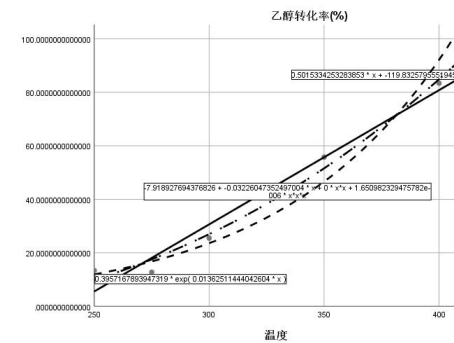
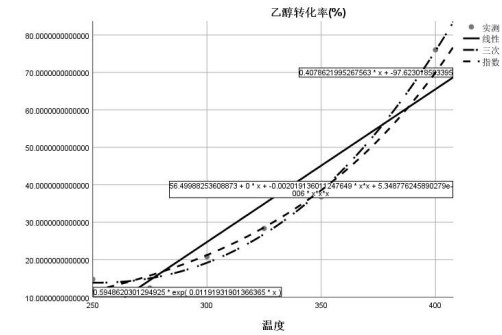
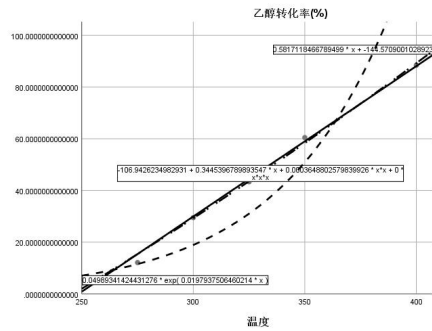
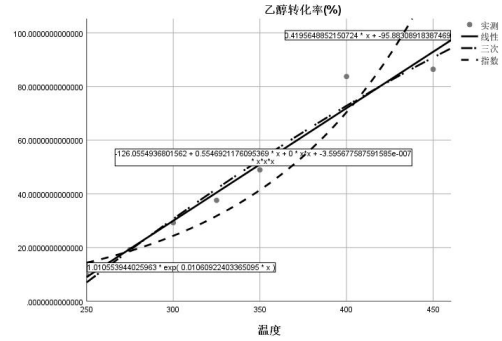
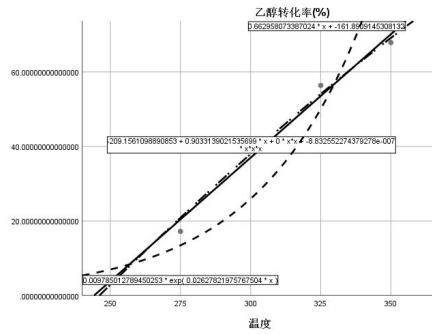
## 7 参考文献

- [1] 姜启源、谢金星、叶俊.《数学建模》[M]. 第五版.北京:高等教育出版社, 2018: 318-325.
- [2] 张润楚.《多元统计分析》[M].北京:科学出版社, 2006.
- [3] 王松桂、陈敏、陈立萍.《线性统计模型》[M].北京:高等教育出版社, 1999.

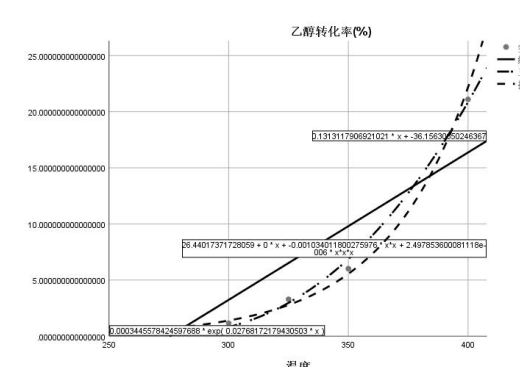
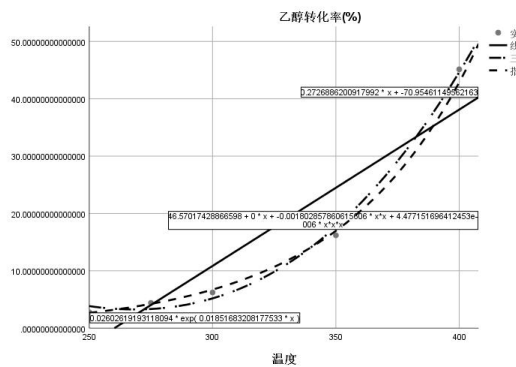
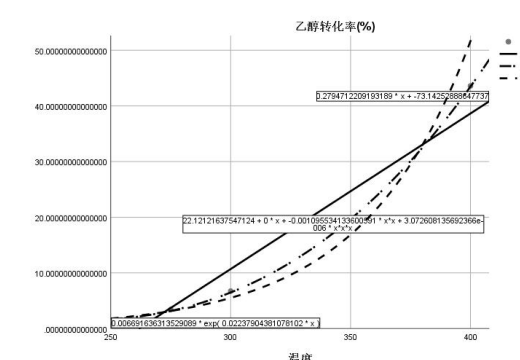
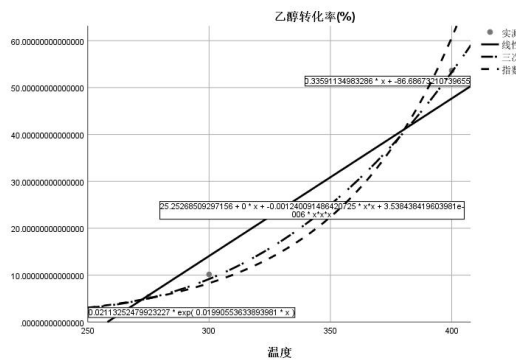
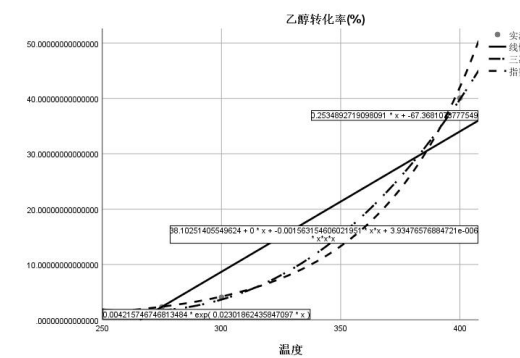
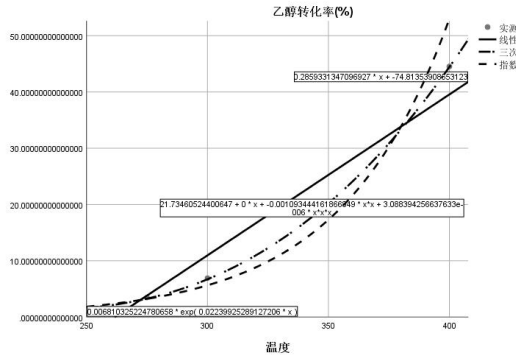
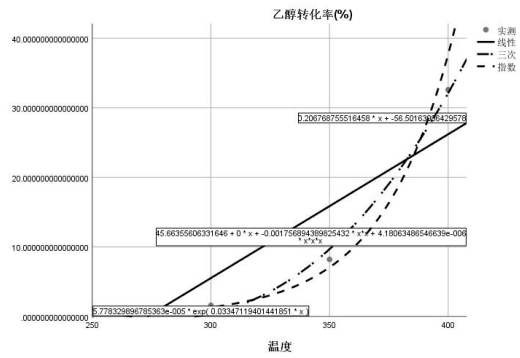
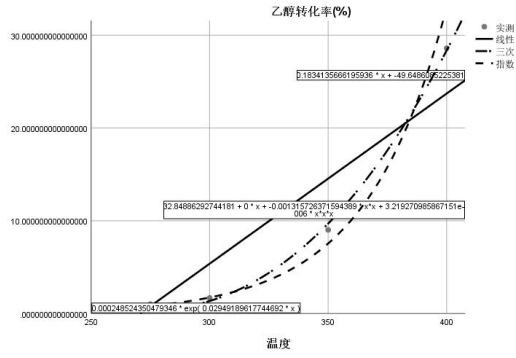
## 8 附录

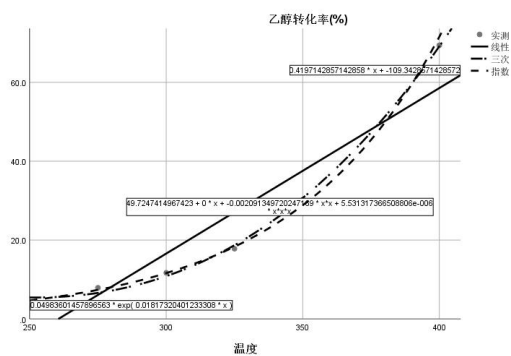
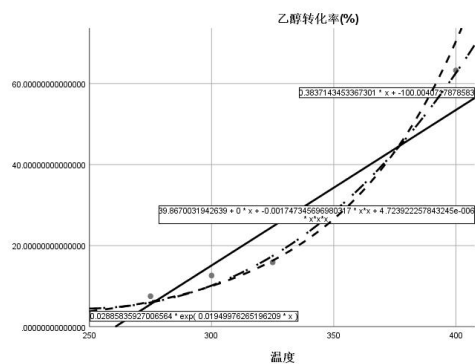
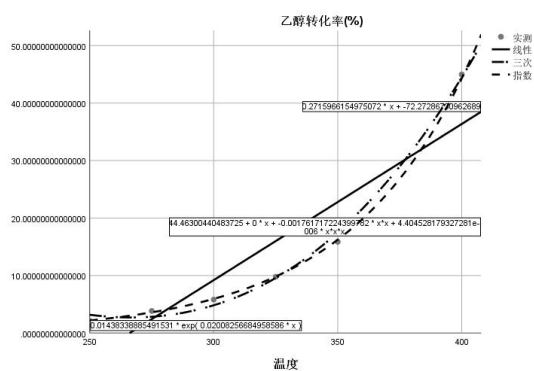
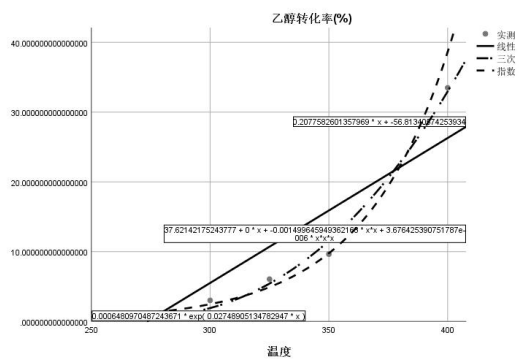
附录 1 问题 1:乙醇转化率与温度的拟合曲线, 组别分别从 A2——A14、B1——B7:

(顺序从左至右, 从上至下, 例如第一排左边为 A2 组, 第一排右边为 A3 组, 第二排左边为 A4 组, 以此类推)



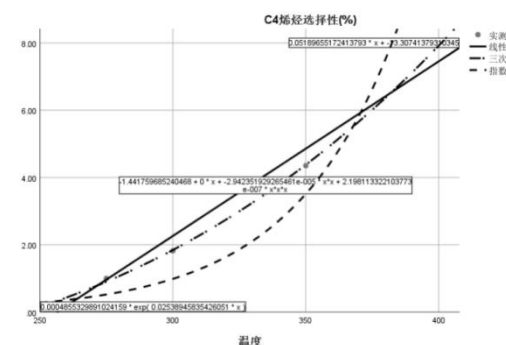
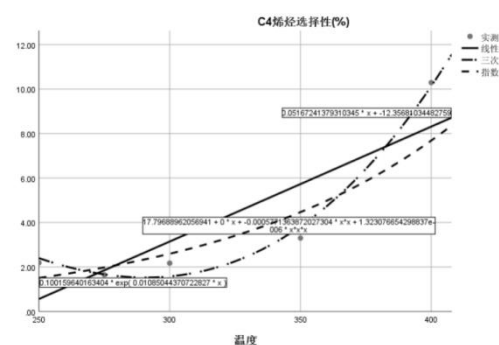
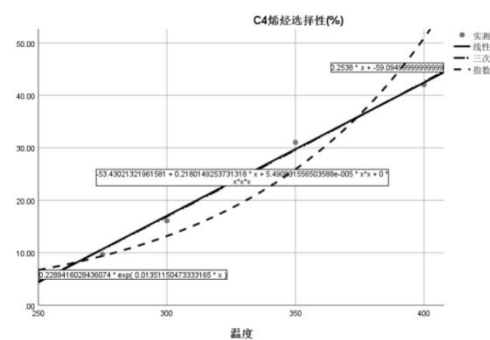
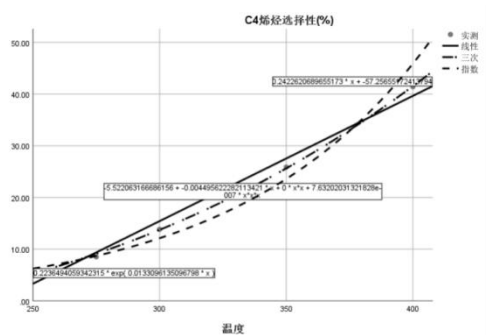
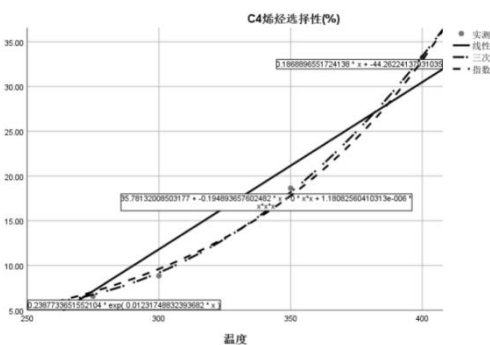
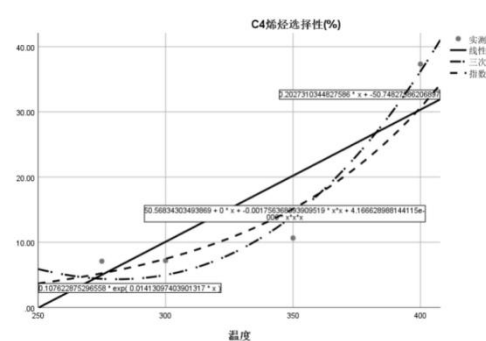
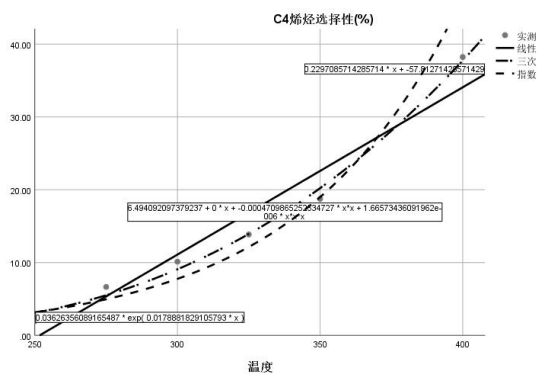
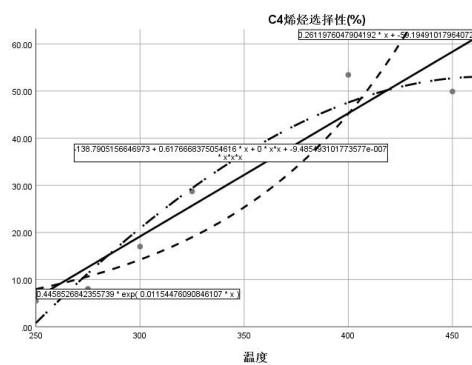


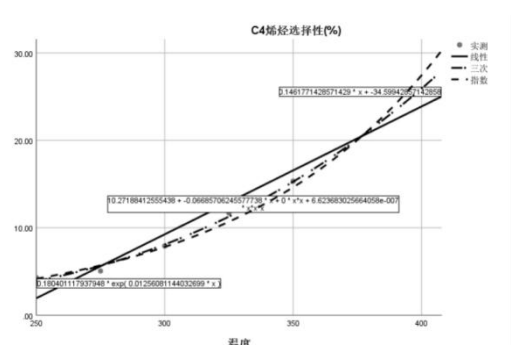
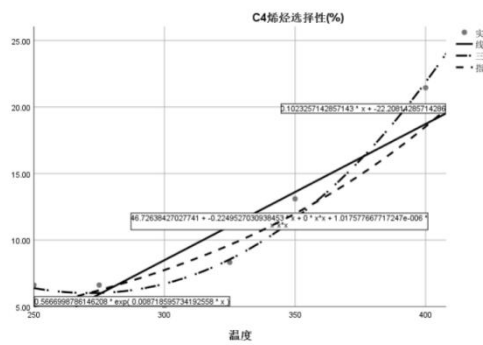
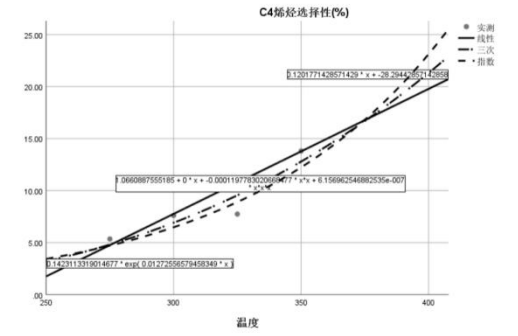
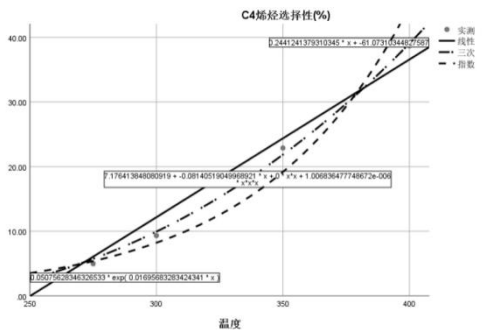
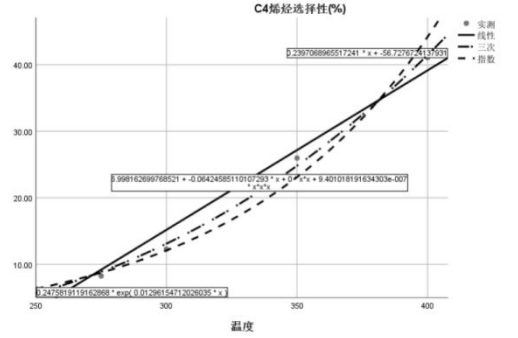
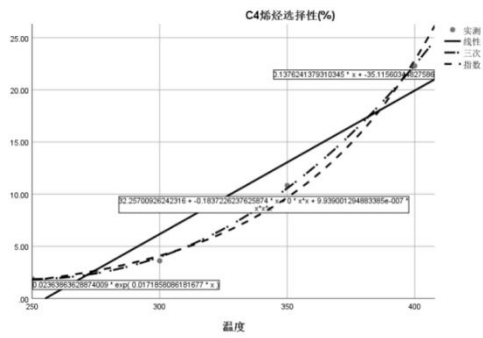
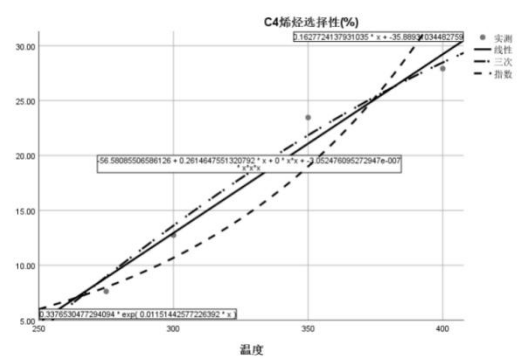
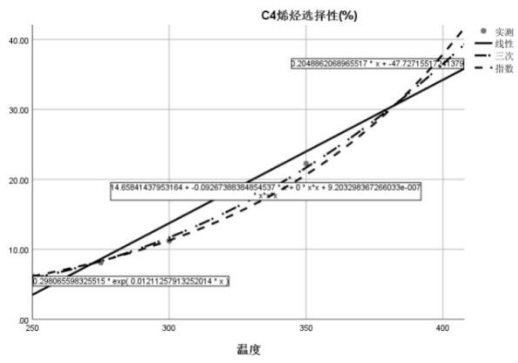


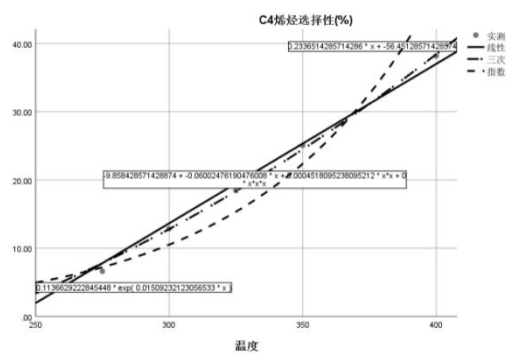
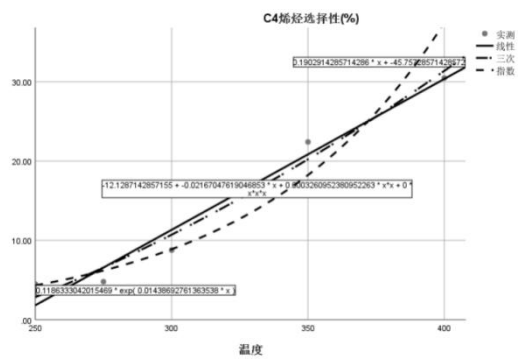


## 附录 2 问题 1:乙醇转化率与温度的拟合曲线, 组别分别从 A3、A5——A14、B1——B7:

(顺序从左至右, 从上至下, 例如第一排左边为 A3 组, 第一排右边为 A5 组, 第二排左边为 A5 组, 以此类推)







### 附录3 问题4:MATLAB\_R2018a 软件进行黄金分割法求最优点

```
%% 定义函数和初始化
%温度
m=400; %总质量
b=1;    %装料比
c=2;    %Co 负载量
j=0.3;  %乙醇浓度

f =
@(t)0.01*t^2-0.573*t+0.022*m-2.754*b^2+6.921*b+0.050*c^2-0.996*c-1.355*j^2+
2.120*j+69.462; % 所求函数
a = 400;b = 450; % 初始搜索区间
Theta_error = 0.01; % 收敛精度
r = (sqrt(5)-1)/2; % 给 r 赋值 0.618

%%算法部分
a1 = b - r*(b-a);
a2 = a + r*(b-a);
y1 = feval(f,a1);
y2 = feval(f,a2);
stepNum = 0; % 迭代次数初始化
%循环部分
while abs((b-a)/b) >= Theta_error || abs((y2-y1)/y2) >= Theta_error
    stepNum = stepNum + 1;
    if y1 >= y2
        a = a1;
        a1 = a2;
        y1 = y2;
        a2 = a+r*(b-a);
        y2 = feval(f,a2);
    else
        b = a2;
        a2 = a1;
        y2 = y1;
        a1 = b - r*(b-a);
        y1 = feval(f,a1);
    end
end

%% 输出
x_opt = (a+b)/2
y_opt = feval(f,x_opt)
fprintf('程序经过%d 次迭代得到温度的极小值点为%d ',stepNum,x_opt)
```



```

%% 定义函数和初始化
%乙醇浓度
m=400;%总质量
b=1;      %装料比
c=2;      %Co 负载量
t=400;    %温度
f =
@(j)0.01*(t^2)-0.573*t+0.022*m-2.754*(b^2)+6.921*b+0.050*(c^2)-0.996*c-1.355*
(j^2)+2.120*j+69.462;      % 所求函数
a = 0.3;b = 1.68;      % 初始搜索区间
Theta_error = 0.01;    % 收敛精度
r = (sqrt(5)-1)/2;      % 给 r 赋值 0.618

%%算法部分
a1 = b - r*(b-a);
a2 = a + r*(b-a);
y1 = feval(f,a1);
y2 = feval(f,a2);
stepNum = 0;           % 迭代次数初始化
%循环部分
while abs((b-a)/b) >= Theta_error || abs((y2-y1)/y2) >= Theta_error
    stepNum = stepNum + 1;
    if y1 >= y2
        a = a1;
        a1 = a2;
        y1 = y2;
        a2 = a+r*(b-a);
        y2 = feval(f,a2);
    else
        b = a2;
        a2 = a1;
        y2 = y1;
        a1 = b - r*(b-a);
        y1 = feval(f,a1);
    end
end

%% 输出
x_opt = (a+b)/2
y_opt = feval(f,x_opt)
fprintf('程序经过%d 次迭代得到乙醇浓度极小值点为%d ',stepNum,x_opt)

```

```

%% 定义函数和初始化
%Co 负载量
m=400;%总质量
b=1;      %装料比
t=400;    %温度
j=0.3;    %乙醇浓度

f =
@(c)0.01*t^2-0.573*t+0.022*m-2.754*b^2+6.921*b+0.050*c^2-0.996*c-1.355*j^2+
2.120*j+69.462;      % 所求函数
a = 1;b = 5;          % 初始搜索区间
Theta_error = 0.1;    % 收敛精度
r = (sqrt(5)-1)/2;     % 给 r 赋值 0.618

%%算法部分
a1 = b - r*(b-a);
a2 = a + r*(b-a);
y1 = feval(f,a1);
y2 = feval(f,a2);
stepNum = 0;          % 迭代次数初始化
%循环部分
while abs((b-a)/b) >= Theta_error || abs((y2-y1)/y2) >= Theta_error
    stepNum = stepNum + 1;
    if y1 >= y2
        a = a1;
        a1 = a2;
        y1 = y2;
        a2 = a+r*(b-a);
        y2 = feval(f,a2);
    else
        b = a2;
        a2 = a1;
        y2 = y1;
        a1 = b - r*(b-a);
        y1 = feval(f,a1);
    end
end

%% 输出
x_opt = (a+b)/2
y_opt = feval(f,x_opt)
fprintf('程序经过%d 次迭代得到 Co 负载量极小值点为%d ',stepNum,x_opt)

```

```

%% 定义函数和初始化
%装料比
m=400; %总质量
j=0.3; %乙醇浓度
c=2; %Co 负载量
t=400; %温度
f
=
@(b)0.01*t^2-0.573*t+0.022*m-2.754*b^2+6.921*b+0.050*c^2-0.996*c-1.355*j^2+
2.120*j+69.462; % 所求函数
a = 0.5;b = 2.0; % 初始搜索区间
Theta_error = 0.01; % 收敛精度
r = (sqrt(5)-1)/2; % 给 r 赋值 0.618

%%算法部分
a1 = b - r*(b-a);
a2 = a + r*(b-a);
y1 = feval(f,a1);
y2 = feval(f,a2);
stepNum = 0; % 迭代次数初始化
%循环部分
while abs((b-a)/b) >= Theta_error || abs((y2-y1)/y2) >= Theta_error
    stepNum = stepNum + 1;
    if y1 >= y2
        a = a1;
        a1 = a2;
        y1 = y2;
        a2 = a+r*(b-a);
        y2 = feval(f,a2);
    else
        b = a2;
        a2 = a1;
        y2 = y1;
        a1 = b - r*(b-a);
        y1 = feval(f,a1);
    end
end

%% 输出
x_opt = (a+b)/2
y_opt = feval(f,x_opt)

```

```
fprintf('程序经过%d 次迭代得到装料比的极小值点为%d ',stepNum,x_opt)
```

```
%% 定义函数和初始化
```

```
%总质量
```

```
b=1; %装料比
```

```
j=0.3; %乙醇浓度
```

```
c=2; %Co 负载量
```

```
t=400; %温度
```

```
f =
```

```
@(m)0.01*t^2-0.573*t+0.022*m-2.754*b^2+6.921*b+0.050*c^2-0.996*c-1.355*j^2  
+2.120*j+69.462; % 所求函数
```

```
a = 200;b = 400; % 初始搜索区间
```

```
Theta_error = 0.1; % 收敛精度
```

```
r = (sqrt(5)-1)/2; % 给 r 赋值 0.618
```

```
%%算法部分
```

```
a1 = b - r*(b-a);
```

```
a2 = a + r*(b-a);
```

```
y1 = feval(f,a1);
```

```
y2 = feval(f,a2);
```

```
stepNum = 0; % 迭代次数初始化
```

```
%循环部分
```

```
while abs((b-a)/b) >= Theta_error || abs((y2-y1)/y2) >= Theta_error
```

```
    stepNum = stepNum + 1;
```

```
    if y1 >= y2
```

```
        a = a1;
```

```
        a1 = a2;
```

```
        y1 = y2;
```

```
        a2 = a+r*(b-a);
```

```
        y2 = feval(f,a2);
```

```
    else
```

```
        b = a2;
```

```
        a2 = a1;
```

```
        y2 = y1;
```

```
        a1 = b - r*(b-a);
```

```
        y1 = feval(f,a1);
```

```
    end
```

```
end
```

```
%% 输出
```

```
x_opt = (a+b)/2
```

```
y_opt = feval(f,x_opt)
fprintf('程序经过%d 次迭代得到总质量极小值点为%d ',stepNum,x_opt)
```

附录 4 支撑材料文件列表

我的支撑材料.rar (评估版本)

文件(F) 命令(C) 工具(S) 收藏夹(O) 选项(N) 帮助(H)

添加

解压到

测试

查看

删除

查找

向导

信息

扫描病毒

注释

保护

我的支撑材料.rar - RAR 压缩文件, 解包大小为 8,038,927 字节

名称	大小	压缩后大小	类型	修改时间	CRC32
支撑材料	8,038,927	1,431,514	文件夹	2021/9/12 16:...	

总计 1 文件夹, 8,038,927 字节

我的支撑材料.rar (评估版本)

文件(F) 命令(C) 工具(S) 收藏夹(O) 选项(N) 帮助(H)

添加

解压到

测试

查看

删除

查找

向导

信息

扫描病毒

注释

保护

我的支撑材料.rar\支撑材料 - RAR 压缩文件, 解包大小为 8,038,927 字节

名称	大小	压缩后大小	类型	修改时间	CRC32
问题1	5,883,386	1,112,280	文件夹	2021/9/12 15:...	
问题2	664,812	35,536	文件夹	2021/9/12 15:...	
问题3	1,479,955	282,736	文件夹	2021/9/12 14:...	
问题4	10,774	962	文件夹	2021/9/12 15:...	

总计 4 文件夹, 8,038,927 字节

我的支撑材料.rar (评估版本)

文件(F) 命令(C) 工具(S) 收藏夹(O) 选项(N) 帮助(H)

添加

解压到

测试

查看

删除

查找

向导

信息

扫描病毒

注释

保护

我的支撑材料.rar\支撑材料\问题1 - RAR 压缩文件, 解包大小为 8,038,927 字节

名称	大小	压缩后大小	类型	修改时间	CRC32
.DS_Store	6,148	357	DS_STORE 文件	2021/9/12 15:...	DBC9D2...
C4烯烃选择率.d...	2,859,038	487,564	DOC 文档	2021/9/10 20:...	80F583A2
附件2 spss.xlsx	9,644	8,499	XLSX 工作表	2021/9/12 7:46	2BB4AC0...
问题1 单变量曲...	94,555	82,887	SPSS Statistics Ou...	2021/9/10 17:...	89333563
问题1 附件之结果...	45,801	40,684	SPSS Statistics Ou...	2021/9/11 11:...	98460848
问题1 时间乙醇...	12,612	11,583	SPSS Statistics Ou...	2021/9/10 20:...	A38FB5FB
乙醇转化率.doc	2,855,588	480,706	DOC 文档	2021/9/10 20:...	74581A04

总计 7 文件, 5,883,386 字节

我的支撑材料.rar (评估版本)

文件(F) 命令(C) 工具(S) 收藏夹(O) 选项(N) 帮助(H)

添加

解压到

测试

查看

删除

查找

向导

信息

扫描病毒

注释

保护

我的支撑材料.rar\支撑材料\问题2 - RAR 压缩文件, 解包大小为 8,038,927 字节

名称	大小	压缩后大小	类型	修改时间	CRC32
.DS_Store	6,148	326	DS_STORE 文件	2021/9/12 9:41	9A38AB57
Co负载量.doc	94,289	2,624	DOC 文档	2021/9/11 15:...	B89FA5B3
第二同催化剂量...	9,644	8,494	XLSX 工作表	2021/9/11 12:...	F96EBC89
第二同控制变量...	11,679	10,509	XLSX 工作表	2021/9/11 12:...	C2AE0FF5
配料比.doc	93,918	2,544	DOC 文档	2021/9/11 15:...	6CE7BEEC
温度.doc	94,384	2,568	DOC 文档	2021/9/11 15:...	082C522C
乙醇浓度.doc	93,501	2,753	DOC 文档	2021/9/11 15:...	3FF4A112
原料方式.doc	168,481	3,459	DOC 文档	2021/9/11 16:...	CBE223B5
总质量.doc	92,768	2,259	DOC 文档	2021/9/11 15:...	01BD4E3C

总计 9 文件, 664,812 字节

我的支撑材料.rar (评估版本)

文件(F) 命令(C) 工具(S) 收藏夹(O) 选项(N) 帮助(H)

添加

解压到

测试

查看

删除

查找

向导

信息

扫描病毒

注释

保护

我的支撑材料.rar\支撑材料\问题3 - RAR 压缩文件, 解包大小为 8,038,927 字节

名称	大小	压缩后大小	类型	修改时间	CRC32
催化剂对C4烯烃...	205,371	94,698	DOC 文档	2021/9/11 21:...	97E8E09C
规划.xlsx	19,264	17,983	XLSX 工作表	2021/9/12 8:41	EE7BBB81
温度对C4烯烃收...	1,255,320	170,055	DOC 文档	2021/9/11 20:...	AEC05D15

总计 3 文件, 1,479,955 字节

我的支撑材料.rar (评估版本)

文件(F) 命令(C) 工具(S) 收藏夹(O) 选项(N) 帮助(H)

添加

解压到

测试

查看

删除

查找

向导

信息

扫描病毒

注释

保护

我的支撑材料.rar\支撑材料\问题4 - RAR 压缩文件, 解包大小为 8,038,927 字节

名称	大小	压缩后大小	类型	修改时间	CRC32
.DS_Store	6,148	220	DS_STORE 文件	2021/9/12 15:...	097CAC31
question4.m	4,626	742	M 文件	2021/9/12 14:...	6B48CA...

总计 2 文件, 10,774 字节