

# 基于回归分析与神经网络的乙醇偶合制备烯烃优化模型

赵雨

安徽理工大学

**[摘要]** 在乙醇偶合制备C4烯烃的反应中, 催化剂组合以及温度有着重要的影响。本文基于2021年全国大学生数学建模赛题所给出的实验数据, 主要研究温度与催化剂对该反应的影响。首先, 选用回归分析, 分别建立出乙醇转化率与温度的指数回归方程, C4烯烃选择性与温度的二元多项回归方程; 接着, 利用控制变量法, 得出不同催化剂对乙醇转化率和C4烯烃选择性的影响; 之后, 基于神经网络, 得到各个变量的重要性, 从而选择出最佳的催化剂组合选择A3催化剂, 温度控制在450℃左右; 最后分别利用SPSS中的逐步回归进行模型的检验。

**[关键词]** C4烯烃; 回归分析; 神经网络; SPSS

**[DOI]** 10.12252/j.issn.2096-627X.2021.11.1147

## 引言:

C4 烯烃在化工以及医药领域意义重大, 而乙醇可以在催化剂的作用下制备 C4 烯烃。在乙醇偶合制备C4烯烃的过程中, 不同的催化剂以及温度的条件下, C4烯烃的选择性和C4烯烃的收率不尽相同<sup>[1]</sup>

本文基于2021年全国大学生数学建模B题所给出的不同催化剂组合和温度的条件下的21组实验数据, 主要解决以下问题:

1. 针对赛题附件1的每种催化剂组合, 分别研究乙醇转化率以及C4烯烃的选择性与温度之间的关系;
2. 分析不同催化剂组合对乙醇转化率和C4烯烃的影响;
3. 探究在相同实验条件下, C4烯烃收率尽可能高的最佳催化剂组合以及温度。

## 一、温度对反应的影响

作出以温度为自变量, 乙醇转化率、C4 烯烃的选择性为因变量的散点图, 可以通过散点图直观看出, 温度与乙醇转化率和C4烯烃的选择性有较强的正向相关性, 因此利用回归分析, 建立拟合方程, 在每种催化剂组合下, 分别探究乙醇转化率、C4 烯烃的选择性与温度的关系。由于实验数据较多, 21组实验数据拟合步骤大致相同, 散点图将不在本文详述, 且仅给出部分催化剂条件下的拟合方程。下面将分别建立乙醇转化率、C4 烯烃的选择性与温度的拟合方程:

(一) 建立乙醇转化率与温度的关系的微分方程

根据散点图变化趋势以及变量数量, 建立一元微分方程:

$$\frac{dy}{dx} - by = 0$$

$$\frac{dy}{dx} = by$$

$$\frac{dy}{y} = bdx$$

由此可得函数

$$y = a * e^{bx}$$

部分催化剂条件下温度与乙醇转化率的拟合方程如表1:

因为随着温度的提升, 催化剂的效果在不断的加强, 乙醇在催化剂的作用快速的反应, 成指数幂增加。从拟合的效果来看, 21组催化剂条件下的温度与乙醇转化率的拟合方程的确定系数均处于0.8830-0.9990之间, 拟合效果很好。

(二) 建立C4烯烃选择性和温度的函数模型:

$$y = p_1x^2 + p_2 + p_3$$

部分催化剂下温度与C4烯烃的拟合方程如表2:

当乙醇的转化率成指数幂增加时, C4烯烃的选择性并未成指数形式增加, 而是成二次方程的增加, 有着明显的峰

表1每种催化剂组合下乙醇转化率与温度的关系

催化剂组合	温度与乙醇转化率的拟合方程	确定系数
A1	$y=0.01391e^{0.02251x}$	0.9732
A2	$y=0.2377e^{0.01636x}$	0.8830
A3	$y=3.093e^{0.01636x}$	0.8672
A4	$y=0.7273e^{0.01213x}$	0.9987
A5	$y=3.093e^{0.007461x}$	0.9895
B5	$y=0.01256e^{0.02046x}$	0.9948
B7	$y=0.06174e^{0.01757x}$	0.9988

表2 每种催化剂组合下C4 烯烃的选择性与温度的关系

催化剂组合	温度与C4烯烃选择性的拟合方程	确定系数
A1	$y=-0.002296x^2+1.533x+207.3$	0.9160
A2	$y=0.002851x^2-1.489x+211.70$	0.9621
A3	$y=-0.001566x^2+1.383x-253.5$	0.9465
A4	$y=0.000937x^2-0.3825x+44.49$	0.9839
A5	$y=0.000256x^2-0.1222x+14.33$	0.9924
B5	$y=0.0006225x^2+0.2583x+29.57$	0.9991
B7	$y=0.0003461x^2+0.01095x-21.51$	0.9987

值，当温度超过峰值所在的温度时，成下降趋势。因为在乙醇制备C4烯烃不是直接转化，是乙醇与催化剂反应转化为乙醛，乙醛转化为烯醛，烯醛转化为C4烯烃。当反应随着温度的升高到某个特定温度时，反应物中可能达到了某种转化C4烯烃的极限，可能是乙烯，乙醛，甲基苯甲醛，甲基苯甲醇以及其它副产品的影响<sup>[2]</sup>。所以C4烯烃的选择性拟合出的图满足一元二次方程，会有一个峰值。从拟合效果来看，21组催化剂条件下的温度与C4烯烃的选择性的拟合方程的确定系数均处于0.8214-0.9999之间，拟合效果很好。

### 二、催化剂对化学反应的影响

运用控制变量法，分别对所提供的21组催化剂中各成分对乙醇转化率和C4烯烃选择性的影响进行进一步的探究与分析，得出结论，即Co负载量增加，乙醇转化率和C4烯烃选择性先增后减；乙醇浓度增加，乙醇转化率下降，C4烯烃选择

性增加；HPA对乙醇偶合制备C4烯烃具有重要意义；Co/SiO<sub>2</sub>-HAP含量增加，乙醇转化率先增加至最高值后降低，C4烯烃选择性呈单峰趋势；Co/SiO<sub>2</sub>-HAP的装料比增大时，C4烯烃选择性变大，乙醇转化率降低。

### 三、选取最佳催化剂组合以及温度

#### (一) 数据预处理

首先对21组实验数据进行预处理，因为催化剂中有许多的变量，将其中的变量与温度进行分类整理，并以此为依据探究变量温度，HAP, Co负载量，乙醇浓度，Co/SiO<sub>2</sub>以及编号为11中特有的石英砂与因变量C4烯烃收率的关系。

#### (二) 模型的建立

由 SPSS 将处理过后的数据进行神经网络分析得到下面的图1与表3

#### (三) 结果分析

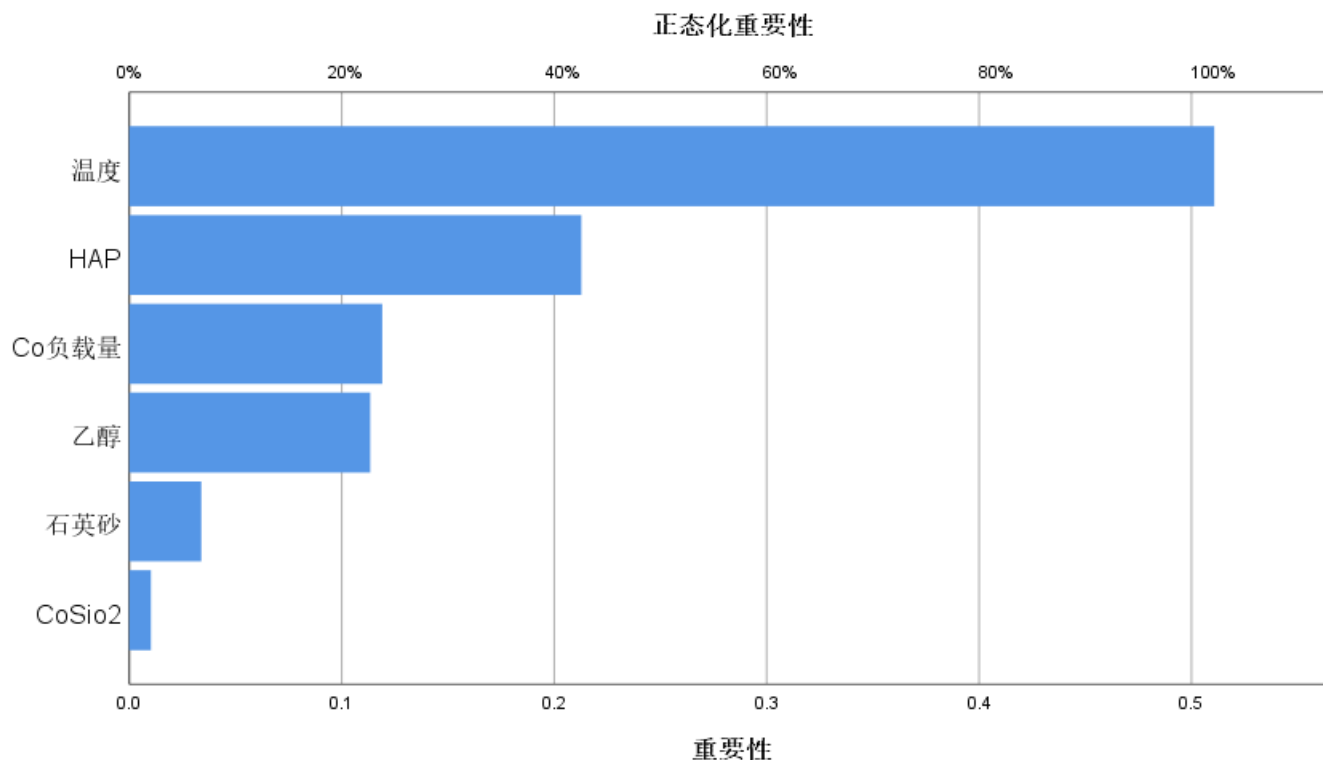


图1. 催化剂各成分以及温度的重要性分布

表 3. 催化剂成分以及温度的重要性结果表  
自变量重要性

	重要性	正态化重要性
温度	0.511	100.0%
Co负载量	0.119	23.3%
乙醇	0.113	22.2%
Co/SiO <sub>2</sub>	0.010	2.0%
HAP	0.213	41.7%
石英砂	0.034	6.6%

表4. 利用SPSS计算出的结果表

系数 <sup>a</sup>								
模型 B		未标准化系数		标准化系数	t	显著性 容差	共线性统计	
		标准错误	Beta				VIF	
1	(常量)	-35.033	3.714		-9.432	.000		
	温度	.130	.012	.726	11.161	.000	1.000	1.000
2	(常量)	-39.528	3.243		-12.190	.000		
	温度	.130	.010	.726	13.090	.000	1.000	1.000
	HAP	.047	.007	.363	6.545	.000	1.000	1.000

a. 因变量: C4烯烃收率

如表3与图1所示,可以观察到温度的大小与 HAP 的含量对 C4 烯烃收率有着很大的影响。如果选择催化剂组合与温度,使得在相同实验条件下 C4 烯烃收率尽可能大,则可以通过各个自变量所占的重要性进行分析。其中温度和 HAP 占的比例有 73%左右,优先对 HAP 含量高的的催化剂组合在高的温度下进行对比得到最优的组合。

经过对不同的催化剂组合与温度对比发现当选用 A3 编号的催化剂最好,催化剂组合为 200mg 1wt% Co/SiO<sub>2</sub> 200mgHAP 乙醇浓度 1.68ml/min 在温度为

与 450℃时 C4 烯烃收率最高。所以选择 A3 催化剂,温度控制在 450℃左右就能使得 C4 烯烃收率尽可能高。

#### (四) 模型检验:

当用SPSS对数据进行神经网络分析时,因为初始化的权值和阈值都是随机的,可能会导致每次神经网络的结果都是不同的。所以要对结果进行检验,确定C4烯烃收率尽可能高时催化剂组合和温度。下面用SPSS对数据进行逐步回归分析所确定各个变量的权重。

由表4可知,其逐步回归结果给出了两个模型,第二个模

型为,m为温度,n为HAP。可以看出温度与HAP占比很大,即神经网络的结果是正确的。

#### 四、结语:

C4烯烃是重要的基础化工原料,在化工生产和医药产品领域具有重要意义<sup>[2]</sup>。本文基于回归分析以及神经网络探究与分析了乙醇偶合制备C4烯烃反应种催化剂以及温度的影响,为优化乙醇偶合制备C4烯烃的工艺条件提供参考,希望可以起到积极的作用。

#### 参考文献:

- [1] 葛跃娜.C4烯烃选择性叠合工艺的研究[D]. 上海:华东理工大学,2019.
- [2] 汪思祺.生物质乙醇制备异丁烯工艺路线的探究[D]. 北京:北京化工大学,2020.

作者简介:赵雨(2001.11-),女,汉族,安徽濉溪人,本科在读,研究方向:会计学。