

基于线性回归的乙醇偶合制备C4烯烃模型研究

岳坤¹, 马俊杰¹, 度明伟¹, 谢素霞²

¹上海理工大学光电信息与计算机工程学院, 上海

²上海理工大学机械工程学院, 上海

收稿日期: 2022年1月17日; 录用日期: 2022年3月7日; 发布日期: 2022年3月15日

摘要

C4烯烃是一种重要的化工原材料, 它广泛应用于药品行业的生产、化工产品的生成等众多领域。为探索乙醇催化偶合制备C4烯烃的工艺条件, 本文提出了基于多元线性回归的乙醇偶合制备C4烯烃模型。该模型创新性地将回归算法引入传统的化学反应实验之中, 将化学反应条件设置为虚拟变量, 通过显著性检验和计算得到变量的回归系数, 分析各变量和反应条件对制备C4烯烃的影响, 从而找出最佳反应条件, 并通过实验和算例验证了模型的有效性和准确性。

关键词

C4烯烃, 最佳反应条件, 多元线性回归模型, 回归算法

Study on the Model of C4 Olefins Prepared by Ethanol Coupling Based on Linear Regression

Kun Yue¹, Junjie Ma¹, Mingwei Tuo¹, Suxia Xie²

¹School of Optical-Electrical and Computer Engineering, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai

²School of Mechanical Engineering, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai

Received: Jan. 17th, 2022; accepted: Mar. 7th, 2022; published: Mar. 15th, 2022

Abstract

C4 olefin is an important chemical raw material, and is widely used in the production of pharmaceutical industry, chemical products and many other fields. In order to explore the technological conditions for the preparation of C4 olefin by ethanol catalytic coupling, a model for the preparation of C4 olefin by ethanol coupling based on multiple linear regression was proposed. The model

innovatively introduces the regression algorithm into the traditional chemical reaction experiment. We set the chemical reaction conditions as virtual variables, obtained the regression coefficients of the variables through significance test and calculation, analyzed the effects of various variables and reaction conditions on the preparation of C4 olefins, so as to find out the best reaction conditions, and verified the effectiveness and accuracy of the model through experiments and examples.

Keywords

C4 Olefin, Optimum Reaction Conditions, Multiple Linear Regression Model, Regression Algorithm

Copyright © 2022 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

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, C4 烯烃的选择性和 C4 烯烃收率将受到催化剂组合(即: Co 负载量、Co/SiO₂ 和 HAP 装料比、乙醇浓度的组合)与温度的影响[1]。因此通过对催化剂组合设计和温度的选择,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。

传统的方法是通过不断设计对照组,进行大量化学实验,并将得到的实验数据进行对比分析,逐步缩小实验测试范围,并不断进行实验,获得一个较好的工艺制备条件。这样的方法虽然最终能够得到一个较为准确有效的结果,但是其代价较大,需要花费大量时间和精力做实验,且对财力消耗也较大。此外,目前在已有的通过建立数学模型的方式来分析化学反应的方法中,还没有这种以催化剂组合和温度为变量建立回归模型来分析产率并找到最佳反应条件的方法,大多是在化学模型的基础上对化学反应进行数值分析。因此,本文提出一种基于多元线性回归的乙醇偶合制备 C4 烯烃模型,在已有的有限的实验数据上,通过数学模型的方法,从不同的温度和催化剂组合的选择对 C4 烯烃的选择性、乙醇转化率以及 C4 烯烃收率的影响的方向上分析,来探究乙醇催化偶合制备 C4 烯烃的工艺条件。

2. 多元线性回归模型的理论研究

2.1. 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

本文将不同催化剂组合以及温度考虑为自变量,乙醇转化率和 C4 烯烃的选择性考虑为因变量,通过实验数据,建立多元线性回归模型[2],求解回归系数,定量探讨自变量对因变量的影响。

分别以乙醇转化率及 C4 烯烃选择性为因变量,不同催化剂组合及温度为自变量建立多元线性回归模型一和模型二如式(1)、式(2)所示。

$$Y_1 = \alpha_0 + \alpha_1 X + \sum_{i=1}^n \theta_i A_i \quad (1)$$

$$Y_2 = \beta_0 + \beta_1 X + \sum_{i=1}^n \delta_i A_i \quad (2)$$

其中:

Y_1 、 Y_2 分别为乙醇转化率及 C4 烯烃选择性;

α_i 、 β_i 、 δ_i 、 θ_i 分别为对应变量的回归系数；

$A_{i(1\sim n)}$ 为 n 种催化剂组合。

对变量催化剂组合的处理：

为将催化剂组合引入模型，本文设置虚拟变量[3]。为了避免完全多重共线性的影响，引入虚拟变量的个数一般是分类数减1。即：

$$N_i = N_c - 1 \quad (3)$$

其中：

N_i 为虚拟变量个数；

N_c 为分类数。

对于 n 种催化剂组合，设置 $n-1$ 个虚拟变量，另一个催化剂组合作为对照组。

其中虚拟变量 $A_1, A_2, A_3, \dots, A_{n-1}, A_n$ 的定义是：

$$A_i = \begin{cases} 1 & \text{采用第}i\text{种催化剂组合方式} \\ 0 & \text{其它} \end{cases} \quad (i=1, 2, \dots, n) \quad (4)$$

模型一和模型二中的变量说明如表1所示。

Table 1. Description of model 1 and model 2 variables

表 1. 模型一和模型二变量说明表

变量类型	变量名称	说明
定量	乙醇转化率(%)	单位时间内乙醇的单程转化率
	C4 烯烃选择性(%)	C4 烯烃在所有产物中的占比
	温度(摄氏度)	反应温度
定性	催化剂组合	实验数据中的催化剂组合和一个对照组

2.2. 探究不同催化剂组合及温度对 C4 烯烃收率大小的影响

为获取 C4 烯烃的最大收率的反应条件，本文根据实验数据求得 C4 烯烃的收率在不同条件下的大小，并建立多元线性回归模型，求得回归系数，对照置信因子，进而分析不同反应条件对 C4 烯烃收率大小的影响，找到最佳反应条件。

以 C4 烯烃的收率作为因变量，不同催化剂组合及温度为自变量建立多元线性回归模型三如式(5)，式(6)所示

$$Y_3 = \gamma_0 + \gamma_1 X + \sum_{i=1}^n \sigma_i A_i \quad (5)$$

$$Y_3 = Y_2 \times Y_1 \quad (6)$$

其中：

Y_3 分别为 C4 烯烃的收率；

γ_i 、 σ_i 分别为对应变量的回归系数；

$A_{i(1\sim n)}$ 为 n 种催化剂组合。

为将 21 种催化剂组合引入模型，本文设置虚拟变量。为了避免完全多重共线性的影响，引入虚拟变量的个数一般是分类数减1。即：

$$N_i = N_c - 1 \quad (7)$$

其中:

N_i 为虚拟变量个数;

N_c 为分类数。

为将催化剂组合引入模型, 本文设置虚拟变量。为了避免完全多重共线性的影响, 引入虚拟变量的个数一般是分类数减 1。即:

其中虚拟变量 $A_1, A_2, A_3, \dots, A_{n-1}, A_n$ 的定义是:

$$A_i = \begin{cases} 1 & \text{采用第 } i \text{ 种催化剂组合方式} \\ 0 & \text{其它} \end{cases} \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (8)$$

对模型三中的变量进行说明, 如表 2 所示。

Table 2. Description of model 3 variables

表 2. 模型三变量说明表

变量类型	变量名称	说明
定量	温度(摄氏度)	乙醇转化率(%) × C4 烯烃选择性(%)
	C4 烯烃收率(%)	反应温度
定性	催化剂组合	实验数据中的催化剂组合和一个对照组

3. 算例验证

3.1. 实验数据

本次研究所用实验数据包括两个: 化学反应性能数据表和特定温度下某种催化剂组合的测试数据表。其中化学反应性能数据表中包括在 21 种催化剂组合和温度梯度 250、275、300、325、350、400、450 摄氏度的反应条件下, 反应物乙醇的转化率, 生成物中乙烯、C4 烯烃、乙醛、碳数为 4-12 脂肪醇, 甲基苯甲醛和甲基苯甲醇以及其它生成物的选择性的数据。特定温度下某种催化剂组合的测试数据表中则包括在反应时间 20、70、110、163、197、240、273 分钟下反应物乙醇的转化率和生成物中乙烯、C4 烯烃、乙醛、碳数为 4-12 脂肪醇, 甲基苯甲醛和甲基苯甲醇以及其它生成物的选择性的数据。

3.2. 不同催化剂组合及温度对乙醇转化率大小影响的结果与分析

3.2.1. 模型一的显著性检验

通过 Stata 软件对模型一进行显著性检验, 如表 3 示。

Table 3. Ethanol conversion variance analysis table

表 3. 乙醇转化率方差分析表

Source	SS	df	MS	Number of obs	=	114
				F(21, 92)	=	31.68
Model	51,746.2302	21	2464.1062	Prob > F	=	0
Residual	7155.671	92	77.7790326	R-squared	=	0.8785
				Adj R-squared	=	0.8508
Total	58,901.9012	113	521.255763	Root MSE	=	8.8192

原假设 $H_0: \alpha_0 = \alpha_1 = \theta_1 = \dots = \theta_{20} = 0$ 。

由表 3 可知, 检验值 F 为 31.68, P 等于 0, 则该多元线性回归模型是显著的, 通过显著性检验, 拒绝原假设 $H_0: \alpha_0 = \alpha_1 = \theta_1 = \dots = \theta_{20} = 0$, 即该模型是有意义的。

3.2.2. 模型一的拟合优度和调整后的拟合优度

引入的自变量越多, 拟合优度会变大。但本文倾向于使用调整后的拟合优度, 如果新引入的自变量对 SSE 的减少程度特别少, 那么调整后的拟合优度反而会减小[4]。

$$R^2 = 1 - \frac{SSE}{SST} \quad (9)$$

$$SSE = \sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y})^2 \quad (10)$$

$$R_{adjusted}^2 = 1 - \frac{\frac{SSE}{n-k-1}}{\frac{SST}{n-1}} \quad (11)$$

其中:

SSE 是拟合数据和原始数据对应点的误差的平方和;

SST 是原始数据和均值之差的平方和;

n 是实验数据数;

k 为调整值;

R^2 为拟合优度;

$R_{adjusted}^2$ 为调整后的拟合优度。

由式(9)、(10)、(11)得:

$n=114$, $k=2$, $SSE=7155.671$, $SST=51746.2302$, $R^2=0.8785$, $R_{adjusted}^2=0.8508$ 。

可知拟合优度接近 1, 说明误差平方和接近 0, 本文模型的拟合效果越好, 由于本文并不用于预测, 拟合优度并不需要接近 1。

3.2.3. 基于普通最小二乘法求解多元线性回归模型一

$$\hat{k}, \hat{b} = \min_{k,b} \left(\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \right) = \min_{k,b} \left(\sum_{i=1}^n (y_i - kx_i - b)^2 \right) \quad (12)$$

其中 k 、 b 为回归系数。

通过 Stata 进行标准线性回归[5]得到表 4 所示。

Table 4. Regression coefficients of Model 1

表 4. 模型一回归系数表

变量	回归系数	变量	回归系数
温度	0.334***	A_{12} (催化剂组合 A12)	0.313
A_1 (催化剂组合 A1)	5.938	A_{13} (催化剂组合 A13)	-2.461
A_2 (催化剂组合 A2)	27.061***	A_{14} (催化剂组合 A14)	4.183
A_3 (催化剂组合 A3)	23.115***	A_{15} (催化剂组合 B1)	-0.051

Continued

A ₄ (催化剂组合 A4)	24.139 ^{***}	A ₁₆ (催化剂组 B2-对照)	0
A ₅ (催化剂组合 A5)	16.035 ^{***}	A ₁₇ (催化剂组合 B3)	-10.073 [*]
A ₆ (催化剂组合 A6)	23.208 ^{***}	A ₁₈ (催化剂组合 B4)	-6.522
A ₇ (催化剂组合 A7)	29.721 ^{***}	A ₁₉ (催化剂组合 B5)	-1.766
A ₈ (催化剂组合 A8)	8.266	A ₂₀ (催化剂组合 B6)	6.007
A ₉ (催化剂组合 A9)	-2.147	A ₂₁ (催化剂组 B7)	8.068
A ₁₀ (催化剂组合 A10)	-6.816	_cons	-90.192 ^{***}
A ₁₁ (催化剂组合 A11)	-6.312	N	114

*** p < 0.01, ** p < 0.05, * p < 0.1。

P 值小于 0.1, 代表在 90%置信水平下, 回归系数显著的异于 0 的变量有 A₂~A₇, A₁₇, 解得模型一为:

$$Y_1 = -90.192 + 0.334X + 27.061A_2 + 23.115A_3 + 24.139A_4 + 16.035A_5 + 23.208A_6 + 29.721A_7 - 10.073A_{17} \quad (13)$$

由于温度回归系数为 0.334, 同时样本取点温度范围绝大部分在 250~400 度, 所以, 在 250 度到 400 度的温度范围类, 温度与乙醇转化率成正相关, 且在其它条件不变的情况下, 温度每升高一度, 乙醇转化率平均增加 0.334 个百分点。

以催化剂组合 B2 为对照组, 由于催化剂组合 A2 的回归系数为 27.061, 在其它条件不变的情况下, 催化剂组合 A2 比 B2 的乙醇转化率平均高 27.061 个百分点, 其它催化剂组合对乙醇转化率大小的影响也取决其回归系数, 以此类推。

由显著性检验可知, 催化剂组合 A2~A7, B3 对乙醇转化率平均有较显著的影响。

3.3. 不同催化剂组合及温度对 C4 烯烃的选择性大小影响的结果与分析

3.3.1. 模型二的显著性检验

通过 Stata 软件对模型二进行显著性检验[6], 如表 5 所示。

Table 5. Selective variance analysis of C4 olefins

表 5. C4 烯烃选择性方差分析表

Source	SS	df	MS	Number of obs	=	114
				F(21, 92)	=	39.32
Model	18,616.6328	21	886.506325	Prob > F	=	0
Residual	2074.37781	92	22.5475849	R-squared	=	0.8997
Total	20,691.0106	113	183.106289	Adj R-squared	=	0.8769
				Root MSE	=	4.7484

原假设 H₀: $\beta_0 = \beta_1 = \delta_1 = \dots = \delta_{20} = 0$ 。

由表可知, 检验值 F 为 31.68, P 等于 0, 则该多元线性回归模型是显著的, 通过显著性检验, 拒绝原假设 H₀: $\beta_0 = \beta_1 = \delta_1 = \dots = \delta_{20} = 0$, 即该模型是有意义的。

3.3.2. 模型二的拟合优度和调整后的拟合优度

由式(9)、(10)、(11)得:

$$n = 114, k = 2, SSE = 2074.37781, SST = 18616.6328, R^2 = 0.8997, R^2_{adjusted} = 0.8769。$$

可知拟合优度接近 1, 说明误差平方和接近 0, 本文的拟合效果越好, 由于本文并不用于预测, 拟合优度并不需要接近 1。

3.3.3. 基于普通最小二乘法求解多元线性回归模型二

通过 Stata 进行标准线性回归得到表 6 所示。

Table 6. Regression coefficients of Model 2

表 6. 模型二回归系数表

变量	回归系数	变量	回归系数
温度	0.188***	A ₁₂ (催化剂组合 A12)	0.986
A ₁ (催化剂组合 A1)	30.055***	A ₁₃ (催化剂组合 A13)	-0.442
A ₂ (催化剂组合 A2)	11.923***	A ₁₄ (催化剂组合 A14)	-7.590**
A ₃ (催化剂组合 A3)	8.779***	A ₁₅ (催化剂组合 B1)	2.954
A ₄ (催化剂组合 A4)	3.215	A ₁₆ (催化剂组 B2-对照)	0
A ₅ (催化剂组合 A5)	-1.21	A ₁₇ (催化剂组合 B3)	-6.377**
A ₆ (催化剂组合 A6)	-2.714	A ₁₈ (催化剂组合 B4)	-5.944**
A ₇ (催化剂组合 A7)	-1.218	A ₁₉ (催化剂组合 B5)	-4.449
A ₈ (催化剂组合 A8)	3.23	A ₂₀ (催化剂组合 B6)	-1.637
A ₉ (催化剂组合 A9)	5.026*	A ₂₁ (催化剂组 B7)	1.4
A ₁₀ (催化剂组合 A10)	-11.906***	_cons	-43.296***
A ₁₁ (催化剂组合 A11)	-12.786***	N	114

*** p < 0.01, ** p < 0.05, * p < 0.1。

P 值小于 0.5, 代表在 95%置信水平下, 回归系数显著的异于 0 的变量有 A₁~A₃, A₁₀~A₁₁, 解得模型二为:

$$Y_2 = -43.296 + 0.188X + 30.055A_1 + 11.923A_2 + 8.779A_3 - 11.906A_{10} - 12.786A_{11} \quad (14)$$

由于温度回归系数为 0.188, 同时样本取点温度范围绝大部分在 250~400 度, 所以, 在 250 度到 400 度的温度范围类, 温度与 C4 烯烃选择性成正相关, 且在其它条件不变的情况下, 温度每升高一度, C4 烯烃选择性平均增加 0.188 个百分点。

以催化剂组合 B2 为对照组, 由于催化剂组合 A2 的回归系数为 11.923, 在其它条件不变的情况下, 催化剂组合 A2 比 B2 的 C4 烯烃选择性平均高 11.923 个百分点, 其它催化剂组合对 C4 烯烃选择性大小的影响也取决于其回归系数, 以此类推。

由显著性检验可知, 催化剂组合 A1~A3, A10~A11 对 C4 烯烃选择性平均有较显著的影响。

3.4. 不同催化剂组合及温度对 C4 烯烃收率大小影响的结果与分析

3.4.1. 模型三显著性检验

通过 Stata 软件对模型三进行显著性检验, 如表 7 所示。

Table 7. Variance analysis of C4 olefins yield
表 7. C4 烯烃收率方差分析表

Source	SS	df	MS	Number of obs	=	114
				F(21, 92)	=	11.02
Model	70586407.7	21	3361257.51	Prob > F	=	0
Residual	28068753.5	92	305095.146	R-squared	=	0.7155
Total	98655161.2	113	873054.524	Adj R-squared	=	0.6505
				Root MSE	=	552.35

原假设 $H_0: \gamma_0 = \gamma_1 = \sigma_1 = \dots = \sigma_{20} = 0$ 。

由表可知, 检验值 F 为 11.02, P 等于 0, 则该多元线性回归模型是显著的, 通过显著性检验, 拒绝原假设 $H_0: \gamma_0 = \gamma_1 = \sigma_1 = \dots = \sigma_{20} = 0$, 即该模型是有意义的。

3.4.2. 基于普通最小二乘法求解多元线性回归模型三

通过 Stata 进行标准线性回归得到表 8 所示。

Table 8. Regression coefficients of Model 3
表 8. 模型三回归系数表

变量	回归系数	变量	回归系数
温度	12.812 ^{***}	A ₁₂ (催化剂组合 A12)	414.269
A ₁ (催化剂组合 A1)	492.505	A ₁₃ (催化剂组合 A13)	246.333
A ₂ (催化剂组合 A2)	-375.191	A ₁₄ (催化剂组合 A14)	8.226
A ₃ (催化剂组合 A3)	-381.67	A ₁₅ (催化剂组合 B1)	41.208
A ₄ (催化剂组合 A4)	-6.294	A ₁₆ (催化剂组 B2-对照)	0
A ₅ (催化剂组合 A5)	-133.695	A ₁₇ (催化剂组合 B3)	-367.697
A ₆ (催化剂组合 A6)	-139.027	A ₁₈ (催化剂组合 B4)	-308.998
A ₇ (催化剂组合 A7)	855.726 ^{**}	A ₁₉ (催化剂组合 B5)	-196.858
A ₈ (催化剂组合 A8)	1060.929 ^{***}	A ₂₀ (催化剂组合 B6)	28.662
A ₉ (催化剂组合 A9)	629.600 [*]	A ₂₁ (催化剂组 B7)	196.554
A ₁₀ (催化剂组合 A10)	256.042	_cons	-3594.645 ^{***}
A ₁₁ (催化剂组合 A11)	363.409	N	114

^{***} $p < 0.01$, ^{**} $p < 0.05$, ^{*} $p < 0.1$ 。

根据表 8 结果显示, 以催化剂组合 A16 (催化剂组合 B2) 作为对照组, 与温度相关性最大的催化剂组合为 A8 (催化剂组合 A3), 且 $p < 0.01$, 可信度最高。温度相关性为正 12.812, 且 $p < 0.01$ 具有很高的可信度。在一定的温度范围区间内 (250°C~400°C), 随温度增加 C4 烯烃的收率 [7] 呈显著增长。且 A8 (催化剂组合 A3) 相关性最大, 可信度最高。由此可得, 催化剂组合 A3 在 400°C 的环境下 C4 烯烃的收率最高。

在低于 350°C 时, 由表 8 可知, 置信度最高的两组催化剂分别为催化剂组合 A3 ($p < 0.01$) 和催化剂组

合 A2 ($p < 0.05$), 且上述两组同样为与温度相关性最大的两种组合。在低于 350°C 的条件下有理由相信 A3 与 A2 的插值拟合曲线[8], 如图 1 所示催化剂组合 A2 随温度增加, 且效果最为显著。

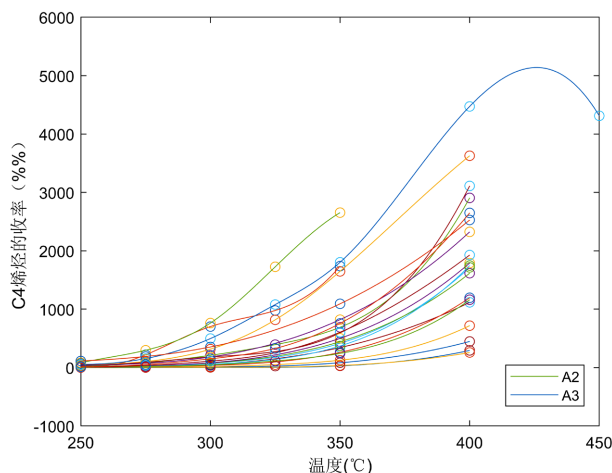


Figure 1. Interpolation fitting of C4 olefin yield of 21 catalyst combinations at different temperatures
图 1. 21 种催化剂组合在不同温度下 C4 烯烃收率的插值拟合

在温度控制在低于 350°C 的条件下, 重新采用如上述多元线性回归, 如表 9 所示, 以 A2 (催化剂组合 A10)作为对照组, 与温度相关性最大的组别为催化剂组合 A2 且置信度高, 与温度呈正相关。由此推断, 在低于 350°C 时, 在一定温度范围内($250^{\circ}\text{C} \sim 350^{\circ}\text{C}$)随温度增大催化剂组合 A2 的 C4 烯烃收率越高。

综上所述, 低于 350°C 条件下, 催化剂组合 A2 最优且温度越高越好。

Table 9. Regression coefficients below 350 degrees of model 3
表 9. 模型三 350 度以下的回归系数表

变量	回归系数	变量	回归系数
温度	7.210***	A ₁₂ (催化剂组合 A12)	428.406**
A ₁ (催化剂组合 A1)	687.511***	A ₁₃ (催化剂组合 A13)	269.378
A ₂ (催化剂组合 A2)	0	A ₁₄ (催化剂组合 A14)	124.052
A ₃ (催化剂组合 A3)	0.843	A ₁₅ (催化剂组合 B1)	146.333
A ₄ (催化剂组合 A4)	130.525	A ₁₆ (催化剂组 B2-对照)	105.864
A ₅ (催化剂组合 A5)	96	A ₁₇ (催化剂组合 B3)	-29.69
A ₆ (催化剂组合 A6)	69.859	A ₁₈ (催化剂组合 B4)	-13.415
A ₇ (催化剂组合 A7)	1050.732***	A ₁₉ (催化剂组合 B5)	32.446
A ₈ (催化剂组合 A8)	663.591***	A ₂₀ (催化剂组合 B6)	149.904
A ₉ (催化剂组合 A9)	531.017**	A ₂₁ (催化剂组 B7)	207.118
A ₁₀ (催化剂组合 A10)	227.055	_cons	-2108.855***
A ₁₁ (催化剂组合 A11)	218.967	N	94

*** $p < 0.01$, ** $p < 0.05$, * $p < 0.1$ 。

4. 结论

本文对已有实验数据建立数学模型探究乙醇催化偶合制备 C₄ 烯烃的工艺条件。通过建立多元线性回归模型, 引入虚拟变量, 探究不同催化剂组合及温度对乙醇转化率、C₄ 烯烃选择性以及 C₄ 烯烃收率大小的影响, 得出催化剂组合和温度的最优区间。本文在已知的实验数据中, 通过模型求解, 得到了催化剂组合为 A2, 即 200 mg 1 wt% Co/SiO₂, 200 mg HAP, 乙醇浓度 0.9 ml/min, 温度为 425 °C 时 C₄ 烯烃的收率最高, 与实验验证结果一致。

本文所提出的模型能极大程度减少实验次数和简化实验数据处理的复杂程度, 为今后寻找最佳实验条件提供一个较为准确和简洁的思路。

基金项目

本论文由上海市级大学生创新创业训练计划项目资助(编号: SH2021131)。

参考文献

- [1] 李韶伟, 王宇杰, 熊浪, 黄圣淇. 乙醇偶合制备 C₄ 烯烃的优化模型[J]. 台州学院学报, 2021, 43(6): 26-32+77. <https://doi.org/10.13853/j.cnki.issn.1672-3708.2021.06.004>
- [2] 金浩, 高素英. 最佳多元线性回归模型的选择[J]. 河北工业大学学报, 2002, 31(5): 10-14.
- [3] 章晓英. 虚拟变量在线性回归模型中的应用[J]. 重庆工业管理学院学报, 1998(2): 84-88.
- [4] 刘京娟. 多元线性回归模型检验方法[J]. 湖南税务高等专科学校学报, 2005, 18(5): 49-50+60.
- [5] 连玉君, 杨柳. Stata 中因子变量的使用方法[J]. 郑州航空工业管理学院学报, 2018, 36(2): 90-103. <https://doi.org/10.19327/j.cnki.zuaxb.1007-9734.2018.02.008>
- [6] 鲍贵, 席雁. 统计显著性检验: 问题与思考[J]. 南京工程学院学报(社会科学版), 2010, 10(4): 27-32. <https://doi.org/10.13960/j.issn.1671-3753.2010.04.006>
- [7] 吕绍沛. 乙醇偶合制备丁醇及 C₄ 烯烃[D]: [硕士学位论文]. 大连: 大连理工大学, 2018.
- [8] 于亚龙, 穆远彪. 插值算法的研究[J]. 现代计算机(专业版), 2014(5): 32-35.