

基于BP神经网络乙醇偶合制备C4烯烃条件分析

范振宙, 陆星龙*, 魏一纹

太原理工大学, 山西 太原

收稿日期: 2022年7月17日; 录用日期: 2022年8月11日; 发布日期: 2022年8月19日

摘要

本文建立了固定效应变截距模型以及固定效应变系数模型研究乙醇转化率与温度的关系, 并通过F检验选择固定效应变系数模型, 同时对C4烯烃选择性与温度分别进行三次多项式拟合和Fourier拟合, 通过平方和误差SSE选择三次多项式拟合, 借助RadViz模型研究350°C实验不同时间的测试结果, 得到该催化剂组合在20分钟到70分钟不稳定, 并采用单因素控制变量法分别分析催化剂总质量、Co/SiO₂和HAP的质量比、Co负载量、乙醇浓度、温度对乙醇转化率及C4烯烃选择性的影响, 通过主成分分析法选择出了较好的十种结果; 其次使用BP神经网络进行仿真模拟借助遗传算法寻找最大值, 通过多次实验寻找符合条件的最优方案。最后, 借助正交试验设计分析催化剂总质量、Co/SiO₂和HAP质量比、Co负载量、乙醇浓度、温度, 使用方差分析得出五个因素的主次关系, 并根据直观图选出最优的五组实验。

关键词

固定效应面板数据模型, 催化剂稳定性, 遗传算法, BP神经网络, 正交试验设计

Analysis of the Conditions for the Preparation of C4 Olefins Based on BP Neural Network Ethanol Coupling

Zhenzhou Fan, Xinglong Lu*, Yiwen Wei

Taiyuan University of Technology, Taiyuan Shanxi

Received: Jul. 17th, 2022; accepted: Aug. 11th, 2022; published: Aug. 19th, 2022

Abstract

In this paper, a fixed-effect variable intercept model and a fixed-effect variable-coefficient model

*通讯作者。

were established to study the relationship between ethanol conversion rate and temperature, and the fixed-effect variable-coefficient model was selected by the F test. Fourier fitting, selecting cubic polynomial fitting by sum of squares error SSE, and using RadViz model to study the test results of the 350°C experiment at different times, it was found that the catalyst combination was unstable from 20 minutes to 70 minutes, and the single factor controlled variable method was used to analyze them respectively. The effects of total catalyst mass, Co/SiO₂ and HAP mass ratio, Co loading, ethanol concentration, and temperature on ethanol conversion and C4 olefin selectivity were selected by principal component analysis. The BP neural network is used for simulation and the genetic algorithm is used to find the maximum value, and the optimal solution that meets the conditions is found through many experiments. Finally, the total catalyst mass, Co/SiO₂ and HAP mass ratio, Co loading, ethanol concentration, and temperature were analyzed with the help of orthogonal experimental design, and the primary and secondary relationship of the five factors was obtained by variance analysis, and choose the best five groups of experiments according to the intuitive diagram.

Keywords

Fixed Effects Panel Data Model, Catalyst Stability, Genetic Algorithm, BP Neural Network, Orthogonal Experimental Design

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. 背景

现阶段,随着各能源产业不断发展,人们对与煤炭、石油、化工产品的需求量日益增加,而这些能源的大量消耗对未来能源行业的发展将会是极大的阻碍,使用化石能源对环境造成的污染也是不可逆的。因此,提高各能源利用率,使用清洁能源,对化学工业具有重要的现实意义。C4 烯烃在化学工业方面应用广泛,需求量大。而清洁能源乙醇作为生产原料,来源广泛,在制备 C4 烯烃上有极大的发展前景。在制备过程中,催化剂的组合(Co 负载量、Co/SiO₂ 和 HAP 质量比、乙醇浓度)以及温度都可能会影响 C4 烯烃收率。因此通过实验设计,探究各因素对乙醇转化率和 C4 烯烃选择性的影响具有十分重要的意义[1]。

2. 数据处理及说明

通过观察每一组的催化剂组合,我们得出了四组变量(因素):Co 负载量、Co/SiO₂ 和 HAP 质量比、Co/SiO₂ 和 HAP 总质量、乙醇浓度,这四组变量(因素)的变化构成了不同的催化剂组合。Co 负载量即 Co 和 SiO₂ 的质量比,催化剂组合中以例如“1wt%”的形式区分。Co/SiO₂ 和 HAP 总质量即两个质量相加,例如“200 mg 1wt% Co/SiO₂-200 mg HAP”表示总质量为 400 mg。观察各组数据,A11 组为“50 mg 1wt% Co/SiO₂ 和 90 mg 石英砂 - 乙醇浓度 1.68 ml/min,无 HAP”,与其他组不同。通过查阅资料可知,石英砂中的硅含量一般在 90%以上,精细的石英砂可达 99%,所以 A11 组的 Co/SiO₂ 和 HAP 总质量我们将其直接相加,即为 140 mg。由于 A11 组无 HAP,在处理 Co/SiO₂ 和 HAP 质量比时,认为其是一比零即无穷。为了计算机对数据处理方便,后面数据处理中采用 HAP 与 Co/SiO₂ 的质量比;乙醇浓度即为催化剂中所给的;在计算 C4 烯烃收率时处理方式乙醇转化率乘以 C4 烯烃的选择性。

3. 乙醇转化率、C4 烯烃的选择性与温度的关系

由图 1 可知，在解决乙醇转化率和温度的关系时，我们采用固定效应面板数据模型中的两个子模型：固定效应变系数模型和固定效应变截距模型，并通过 F 检验确定最优化模型；面对 C4 烯烃选择性和温度的关系时，我们采用三次多项式拟合和傅里叶拟合，并通过 SSE 比较确定最优化模型[2]。

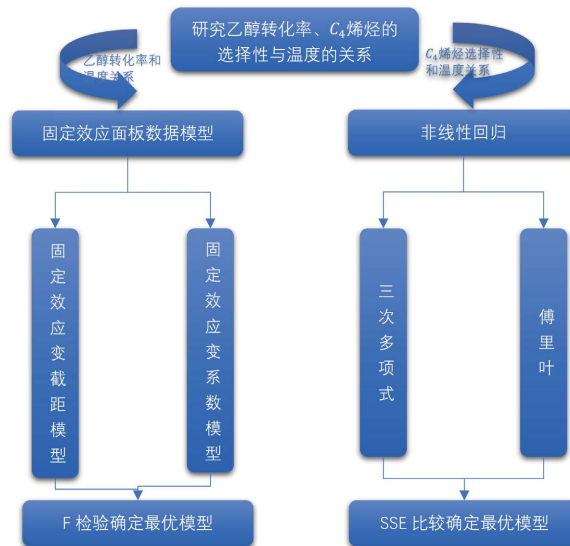


Figure 1. Mind mapping
图 1. 思维导图

3.1. 固定效应面板数据模型建立

面板数据，可解释为平行数据或者时空数据，即在时间序列上取多个截面，在每个截面中同时选取几个个体作为样本，由这些样本观测值构成样本数据。如可以利用面板数据，选择不同时间下不同规模的样本观测值，从而分析数据与多个因素的关系[3]。基于面板数据的相关知识，我们使用了固定面板数据模型中应用最为广泛的变截距模型和变系数模型。

3.1.1. 固定效应变系数模型

$$\varphi(C_2H_6O)_{ij} = \alpha_i + T_{ij}^2 \beta_i + \mu_{ij}$$

其中 $i = 1, 2, \dots, n; j = 1, 2, \dots, J_i; n = 21$ ，表示有 21 组不同的催化剂(装料方式也作为区分不同组催化剂的标准)； J_i 表示第 i 组催化剂下的实验次数。 $\varphi(C_2H_6O)$ 表示乙醇的转化率； T_{ij} 表示第 i 组的第 j 个实验的温度； α_i 表示截距，反应方程中未出现的变量对解释变量的影响； β_i 表示结构参数 μ_{ij} 表示随机干扰项。

式子分别构建了能表现在不同组催化剂作用下不同温度对乙醇转化率的影响的数学模型——固定效应变系数模型，即在不同催化剂作用下截距 α_i 和结构参数 β_i 都会发生变化。式子可简化为如下形式：

$$\varphi(C_2H_6O)_i = e\alpha_i + T_i^2 \beta_i + \mu_i$$

其中 $\varphi(C_2H_6O)_i = \begin{pmatrix} \varphi_{i1} \\ \varphi_{i2} \\ \vdots \\ \varphi_{iJ_i} \end{pmatrix}$ 表示在第 i 组催化剂作用下不同温度下的乙醇转化率； $e = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}_{J_i \times 1}$ ； $T_i = \begin{pmatrix} T_{i1} \\ T_{i2} \\ \vdots \\ T_{iJ_i} \end{pmatrix}_{J_i \times 1}$ 表

示在第 i 组催化剂作用下的不同温度; $\mu_i = \begin{pmatrix} \mu_{i1} \\ \mu_{i2} \\ \vdots \\ \mu_{iJ_i} \end{pmatrix}_{J_i \times 1}$ 表示在第 i 组催化剂作用下的各个温度对应误差项。

3.1.2. 固定效应变截距模型

$$\varphi(\text{C}_2\text{H}_6\text{O})_i = \epsilon\alpha_i + T_i^2\beta + \mu_i$$

单位其中 $i=1,2,\dots,n; j=1,2,\dots,J_i; \beta$ 是常数, 在不同催化剂组合和不同温度下保持不变, α_i 为截距 (个体影响), 反映每组催化剂条件下除温度以外的因素对乙醇转化率的影响, 如果每一横截面个体间影响可以用 α_i 的差别来表示, 这样 α_i 便是未知参数, 即截距未知, 所以称为固定影响变截距模型。

3.2. 固定效应面板数据模型求解

3.2.1. 固定效应变截距模型

$\varphi(\text{C}_2\text{H}_6\text{O})_{ij} = \alpha_i + T_{ij}^2\beta_i + \mu_{ij}$, 如果随机干扰项在不同截面的个体间协方差不为 0, 即 $E(\mu_i\mu_j') \neq 0$, 则利用广义二乘法能获得更为有效的估计值。记 $\Omega = E(\mu_i\mu_j')$ 。

$$V = \begin{pmatrix} \Omega_{11} & \Omega_{12} & \cdots & \Omega_{1n} \\ \Omega_{21} & \Omega_{22} & \cdots & \Omega_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Omega_{n1} & \Omega_{n2} & \cdots & \Omega_{nn} \end{pmatrix}$$

则对于参数的广义最小二乘法估计为

$$\hat{\beta}_{GLS} = (T_i^2 V^{-1} T_i^2)^{-1} T_i^2 V^{-1} \varphi(\text{C}_2\text{H}_6\text{O})$$

若随机干扰项在不同截面个体之间不相干, 则选用广义最小二乘法和每个横截面上 β_i 的经典单方程估计效果一样。

采用 Eviews 软件, 得到温度与转化率关系方程:

$$\varphi(\text{C}_2\text{H}_6\text{O})_{ij} = \hat{\alpha}_i - 32.10510 + \hat{\beta}_i T_i^2$$

$$\bar{R}^2 = 0.966700 \quad S_1 = 2156.814$$

其中 S_1 利用模型计算得到的残差平方和[4]。

各参数结果

$$\begin{aligned} \hat{\beta}_1 &= 0.000560 & \hat{\beta}_2 &= 0.001100 & \hat{\beta}_3 &= 0.000593 & \hat{\beta}_4 &= 0.000892 & \hat{\beta}_5 &= 0.000641 \\ \hat{\beta}_6 &= 0.000773 & \hat{\beta}_7 &= 0.000576 & \hat{\beta}_8 &= 0.000526 & \hat{\beta}_9 &= 0.000391 & \hat{\beta}_{10} &= 0.000288 \\ \hat{\beta}_{11} &= 0.000325 & \hat{\beta}_{12} &= 0.000445 & \hat{\beta}_{13} &= 0.000397 & \hat{\beta}_{14} &= 0.000522 & \hat{\beta}_{15} &= 0.000435 \\ \hat{\beta}_{16} &= 0.000427 & \hat{\beta}_{17} &= 0.000208 & \hat{\beta}_{18} &= 0.000329 & \hat{\beta}_{19} &= 0.000429 & \hat{\beta}_{20} &= 0.000602 \\ \hat{\beta}_{21} &= 0.000660 \\ \hat{\alpha}_1 &= -3.129243 & \hat{\alpha}_2 &= -31.31625 & \hat{\alpha}_3 &= 7.773863 & \hat{\alpha}_4 &= -19.88365 & \hat{\alpha}_5 &= -2.205682 \\ \hat{\alpha}_6 &= -8.710579 & \hat{\alpha}_7 &= 17.96215 & \hat{\alpha}_8 &= 1.580393 & \hat{\alpha}_9 &= 5.000093 & \hat{\alpha}_{10} &= 10.86305 \\ \hat{\alpha}_{11} &= 7.526829 & \hat{\alpha}_{12} &= 1.942301 & \hat{\alpha}_{13} &= 4.094136 & \hat{\alpha}_{14} &= -2.110009 & \hat{\alpha}_{15} &= 2.593487 \\ \hat{\alpha}_{16} &= 3.433590 & \hat{\alpha}_{17} &= 16.13690 & \hat{\alpha}_{18} &= 7.301953 & \hat{\alpha}_{19} &= 1.785636 & \hat{\alpha}_{20} &= -8.232277 \\ \hat{\alpha}_{21} &= -12.08067 \end{aligned}$$

3.2.2. 固定效应变截距模型求解

在本模型求解中采用最小二乘虚拟变量模型参数估计, 式 $\varphi(\text{C}_2\text{H}_6\text{O})_i = e\alpha_i + T_i^2\beta + \mu_i$ 可写成如下形式:

$$\varphi(\text{C}_2\text{H}_6\text{O})_i = (d_1 \quad d_2 \quad d_3 \quad \cdots \quad T_i^2) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} + \mu$$

其中:

$$\varphi(\text{C}_2\text{H}_6\text{O})_i = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \vdots \\ \varphi_n \end{pmatrix}_{nM \times 1} \quad (d_1 \quad d_2 \quad d_3 \quad \cdots \quad T_i^2) = \begin{pmatrix} e & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & e \end{pmatrix}_{nM \times n}$$

$$T = \begin{pmatrix} T_1 \\ T_2 \\ \vdots \\ T_n \end{pmatrix}_{nM \times 1} \quad \alpha = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix}_{n \times 1} \quad \mu = \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \vdots \\ \mu_n \end{pmatrix}_{nM \times 1}$$

其中 $T=7$, 为不同催化剂组合下的最多实验次数; d_i 代表第 i 个体的虚拟变量。

令 $D = (d_1 \quad d_2 \quad \cdots \quad d_n)$, 则上式等价于:

$$\varphi(\text{C}_2\text{H}_6\text{O})_i = D\alpha + T^2\beta + \mu$$

此模型便为最小二乘虚拟变量模型, 可以视为具有 $n+1$ 个参数的多元回归模型, 参数可以通过最小二乘法估计。参数估计量:

$$\begin{pmatrix} \hat{\alpha} \\ \hat{\beta} \end{pmatrix} = [(DX)^{-1} (DX)]^{-1} (DX)' y$$

借助计算机处理, 得到温度与转化率关系方程:

$$\varphi(\text{C}_2\text{H}_6\text{O})_{ij} = \hat{\alpha}_i - 30.74208 + 0.000515T_i^2$$

$$\bar{R}^2 = 0.868595 \quad S_2 = 6301.809$$

S_2 为利用模型计算得到的残差平方和。

$$\begin{aligned} \hat{\alpha}_1 &= -0.420717 & \hat{\alpha}_2 &= 20.70128 & \hat{\alpha}_3 &= 15.42172 & \hat{\alpha}_4 &= 17.43884 & \hat{\alpha}_5 &= 9.332169 \\ \hat{\alpha}_6 &= 16.25753 & \hat{\alpha}_7 &= 22.76153 & \hat{\alpha}_8 &= 1.309527 & \hat{\alpha}_9 &= -9.106473 & \hat{\alpha}_{10} &= -13.77477 \\ \hat{\alpha}_{11} &= -13.26847 & \hat{\alpha}_{12} &= -6.648473 & \hat{\alpha}_{13} &= -9.416473 & \hat{\alpha}_{14} &= -2.776473 & \hat{\alpha}_{15} &= -7.008473 \\ \hat{\alpha}_{16} &= -6.958473 & \hat{\alpha}_{17} &= -16.77450 & \hat{\alpha}_{18} &= -13.22616 & \hat{\alpha}_{19} &= -8.471164 & \hat{\alpha}_{20} &= -0.694498 \\ \hat{\alpha}_{21} &= 1.365502 \end{aligned}$$

3.3. 模型设定的 F 检验

模型设定检验是检验乙醇的转化率和温度关系是上述两种模型中的哪一种, 最为广泛使用的便是协变分析检验, 即 F 检验, 主要检验以下两个假设[3]。

原假设: 截距和结构参数都发生改变的固定效应变系数模型。

$$\varphi(\text{C}_2\text{H}_6\text{O})_i = \hat{\alpha}_i - 32.10510 + \hat{\beta}_i T_i^2$$

备择假设: 截距发生改变, 结构参数在不同催化剂不同温度下保持不变的固定效应变截距模型。

$$\varphi(\text{C}_2\text{H}_6\text{O})_i = \hat{\alpha}_i - 30.74208 + 0.000515T_i^2$$

显然, 如果接受原假设就采用固定效应变系数模型, 否则采用固定效应变截距模型。分别估计固定效应变系数模型和固定效应变截距模型, 得到:

$$S_1 = 2156.814 \quad S_2 = 6301.809$$

$$F = \frac{(S_2 - S_1) / [(n-1)K]}{S_1 / [nM - n(K+1)]}$$

其中 $n = 21, K = 1$, 而 $M = 7$ 为不同催化剂组合下的以温度为变量的实验次数。计算得:

$$F = \frac{(S_2 - S_1) / [(n-1)K]}{S_1 / [nM - n(K+1)]} = \frac{4144.995/20}{2156.814/105} = 10.0895$$

查 F 分布表得:

$$F_{0.05}(20, 105) = 1.68$$

因为 $F > F_{0.05}(20, 105)$, 所以该问题在 5% 的显著水平下接受原假设, 即采用固定效应变系数模型。

3.4. 结果分析

利用 MATLAB 绘制固定效应变系数模型中各催化剂条件下乙醇转化率与温度的关系, 得到二次拟合结果如图 2 所示。

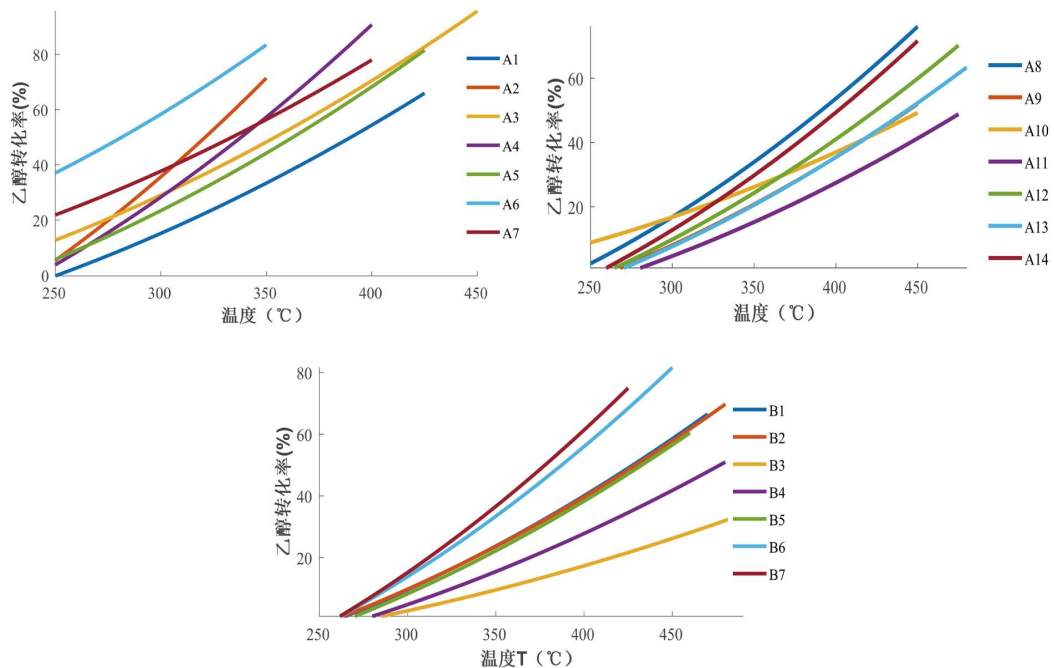


Figure 2. Fixed effect coefficient of variation results
图 2. 固定效应变系数结果

由图 2 可得, 在不同催化剂作用下, 乙醇转化率都随温度的升高而上升, 且由上述模型可得转化率与温度的关系式为:

$$\varphi(C_2H_6O)_i = \hat{\alpha}_i - 32.10510 + \hat{\beta}_i T_i^2$$

3.5. 非线性拟合

3.5.1. 三次多项式拟合

我们经过上面对温度 T 与 C4 烯烃的选择性 ψ 的关系分析, 选择变化趋势与其大致相符的三次多项式来进行分析。三次多项式的通式为:

$$y = ax^3 + bx^2 + cx + d$$

通过借助 MATLAB 进行拟合得到各项系数见表 1, 三次多项式拟合结果如图 3 所示。

Table 1. Cubic polynomial fit

表 1. 三次多项式拟合

催化剂种类	$a(\times 10^{-5})$	b	c	d
A1	-6.069	0.05251	-14.84	1409
A2	-3.013	0.03032	-9.718	1029
A3	-1.862	0.01851	-5.707	565.6
A4	-2.106	0.02175	-7.136	763.7
A5	1.382	-0.01236	3.816	-395.6
A6	3.224	-0.02916	8.782	-873.5
A7	-0.2034	0.003132	-1.197	414
A8	-2.117	0.002807	-0.9026	88.8
A9	-1.097	0.01073	-3.19	303.9
A10	0.4752	-0.003924	1.073	-95.06
A11	0.0635	-0.0004039	0.12	-14.07
A12	-0.3199	0.004014	-1.377	149.5
A13	-1.339	0.01275	-3.818	371.9
A14	-0.3965	0.001355	-0.6171	77.78
B1	-0.7716	0.008434	-2.762	290.4
B2	-0.711	0.007907	-2.612	272.9
B3	0.1711	-0.001191	0.3438	-35.17
B4	-0.6409	0.007251	-2.549	291.3
B5	0.2428	0.003017	-1.034	112
B6	-1.965	0.01948	-6.153	632.3
B7	0.614	0.006439	-1.977	191.6

3.5.2. Fourier 拟合

Fourier 拟合函数为:

$$y = a_0 + a_1 \times \cos(\omega x) + b_1 \times \sin(\omega x)$$

同样, 通过借助 MATLAB 提供的拟合工具箱得到函数的各项系数, 如表 2 所示。

Table 2. Fourier function fitting
表 2. 傅里叶函数拟合

催化剂种类	a_0	a_1	b_1	ω
A1	42.16	6.189	5.481	0.04071
A2	30.58	-4.786	-13.58	0.02781
A3	29.57	7.831	23.34	0.01805
A4	25.1	-15.22	7.574	0.02151
A5	4.47×10^8	-4.47×10^8	-2.23×10^5	2.24×10^{-6}
A6	1.779×10^8	-1.779×10^8	-2.492×10^5	4.95×10^{-6}
A7	48.03	20.86	-36.75	0.008251
A8	49.55	-5.915	-46.18	0.007096
A9	23.84	19.47	5.144	0.01525
A10	4.446×10^8	-4.446×10^8	2.277×10^5	-1.773×10^{-6}
A11	3.664×10^7	-3.664×10^7	-2.133×10^5	3.162×10^{-6}
A12	36.09	20.34	-22.17	0.00978
A13	16.38	-0.5601	11.56	0.01999
A14	85.22	-23.51	-79.9	0.004998
B1	29.49	22.79	4.235	0.01355
B2	4.254×10^7	-4.254×10^7	4.016×10^4	-4.739×10^{-6}
B3	325	-325	2.041×10^4	4.9×10^{-5}
B4	14.87	-7.26	6.258	0.01976
B5	26.29	14.19	-17.19	0.009524
B6	17.29	-11.31	6.735	0.02212
B7	25.1	20.07	-10.74	0.01208

3.5.3. SSE 平方和误差检验

$$SSE = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$$

通过对三次多项式拟合模型与傅里叶拟合模型求得各自的 SSE 均值，如表 3 所示。

Table 3. SSE control
表 3. SSE 对照

平均和误差	三次多项式拟合	Fourier 拟合
SSE 均值	1.123	3.3527

由表可知： SSE (三次多项式拟合) < SSE (傅里叶拟合)，故采用三次多项式拟合接下来使用 MATLAB 拟合三次多项式，如图 3 所示：

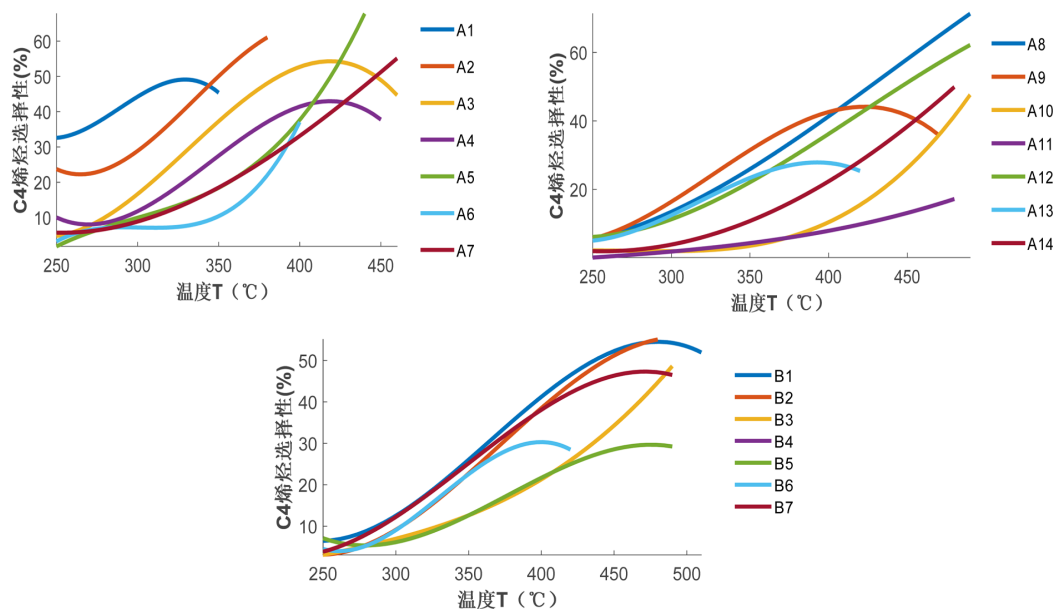


Figure 3. Results of the cubic polynomial fit
图 3. 三次多项式拟合结果

3.6. RadViz 模型催化剂稳定性分析

首先数据进行分析, 计算每个指标下的均值、极差、方差, 得到结果如表 4 所示。

Table 4. The mean, range and variance of each indicator

表 4. 各指标的均值、极差、方差

	乙烯选择性	C4 烯烃选择性	乙醛选择性	碳数为 4-12 脂 肪醇	甲基苯甲醛和 甲基苯甲醇	其他
均值	4.522857143	39.00285714	7.194285714	33.63571429	4.14	11.50428571
极差	0.53	3.6	8.84	8.84	2.22	7.01
方差	0.041757143	1.372890473	11.9393619	11.9393619	0.549166667	5.553228571

由表 4 可知, 反应后的各个成分的极差、方差均较小, 各个数值均在平均值附近, 若使用多元非线性回归分析, 拟合模型效果较差。

考虑到该问题的维度大, 通过查阅资料[5], 我们决定使用 RadViz 模型。由于 RadViz 模型具有计算复杂的低, 表达数据关系简单、直观, 可显示维度大等特点, 对于该问题中维度的简化分析具有较好的拟合。

RadViz 模型基于弹簧张力的最小化算法, 通过径向投影机制将多维数据映射到低维空间, 将多维数据的多个属性具体化作为维度锚点, 并把各维度锚点均匀分布于圆上, 通过各维度锚点与数据点对应维度的之间距离的比值将具有相似维度取值的数据映射到圆内相近的位置, 从而将多维数据映射到二维空间中[5]。

3.6.1. RadViz 模型建立

通过模型介绍可知, RadViz 模型的思想是通过多维数据的多个维度将多维数据转化为二维空间上的点, 从而进行数据分析。因此, 我们将分为 6 个维度(只观测产物)或 7 个维度(产物与乙醇剩余的关系), 绘制 RadViz 图。

3.6.2. RadViz 模型求解与结果分析

通过 Python 编程，得到图 4：

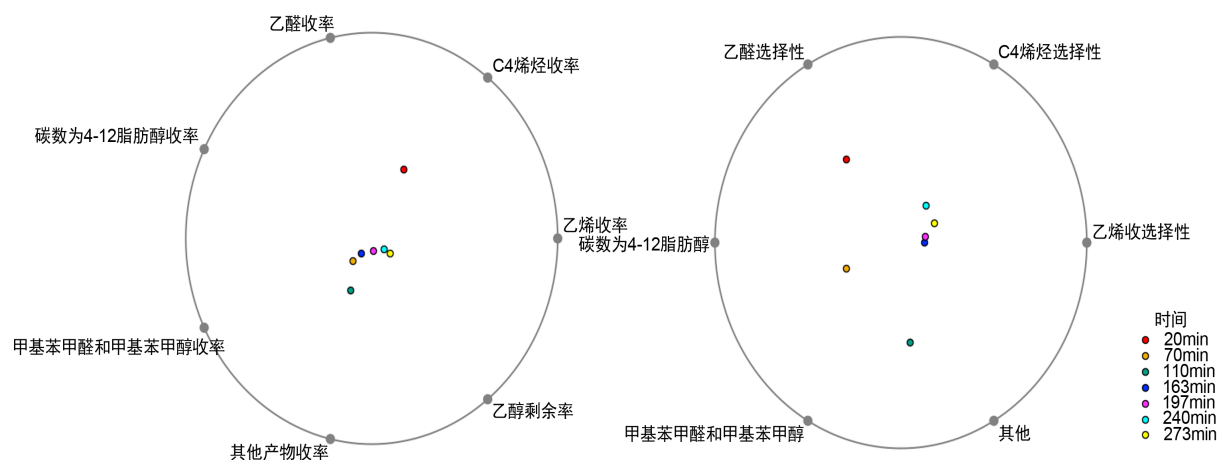


Figure 4. RadViz diagram

图 4. RadViz 图

由左图可知，在某一种催化剂组合、350℃的条件下，在前 163 分钟产物各成分的变化较大，在 163 分钟后产物各成分的变化较小，趋于稳定；C4 烯烃选择性占比较为稳定。

由右图可知，在某一种催化剂组合、350℃的条件下，20 分钟到 70 分钟 C4 烯烃的产量下降较快，70 分钟后 C4 烯烃的产量逐渐趋于稳定，未反应的乙醇量逐渐增加，由此可知，该反应在 20 分钟时的 C4 烯烃的产量最高，催化剂较不稳定。因此，在进行这一化学反应时，若需要获得 C4 烯烃，则需要严格控制时间在 20 分钟左右。

4.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

根据已知数据，有 14 个 A 组，7 个 B 组，共 21 组，其中 A、B 两组的装料方式不同。为了便于我们后续的分析，本文文先就不同装料的方式对于我们所关注的乙醇转化率、C4 烯烃选择性这两个量进行分析。

4.1. 不同装料方式对实验目标的影响

在分析题目中所给的实验数据之前，我们首先查阅了乙醇偶合制备 C4 烯烃的相关参考文献。文章提到装料方式对催化剂的性能并没有影响[1]。为了验证题目中所给数据是否符合这个实验结果，我们挑选了 A12 (50 mg 1wt% Co/SiO₂-50 mg HAP-乙醇浓度 1.68 ml/min)和 B1 (50 mg 1wt% Co/SiO₂-50 mg HAP-乙醇浓度 1.68 ml/min)、A9 (50 mg 1wt% Co/SiO₂-50 mg HAP-乙醇浓度 2.1 ml/min)和 B5 (50 mg 1wt% Co/SiO₂-50 mg HAP-乙醇浓度 2.1 ml/min)作对比，研究在其他条件都相同时不同装料方式对乙醇转化率以及 C4 烯烃选择性大小的影响，结果如图 5、图 6 所示。

由图 5 可以得出，在仅装料方式不同的 A12 和 B1 两组催化剂作用下，乙醇转化率和 C4 烯烃选择性在同一温度下大致相同，符合查阅资料所得的实验结果[1]。而图 6 显示出随着温度升高 A9 和 B5 两组实验数据差距逐渐增大，可能是实验误差或者其他外在因素对实验结果的影响，在这不予讨论。

因此，本论文在接下来的数据中将不再区分两种装料方式，认为这一变量对于乙醇转化率 φ 以及 C4 烯烃的选择性 ψ 没有影响。

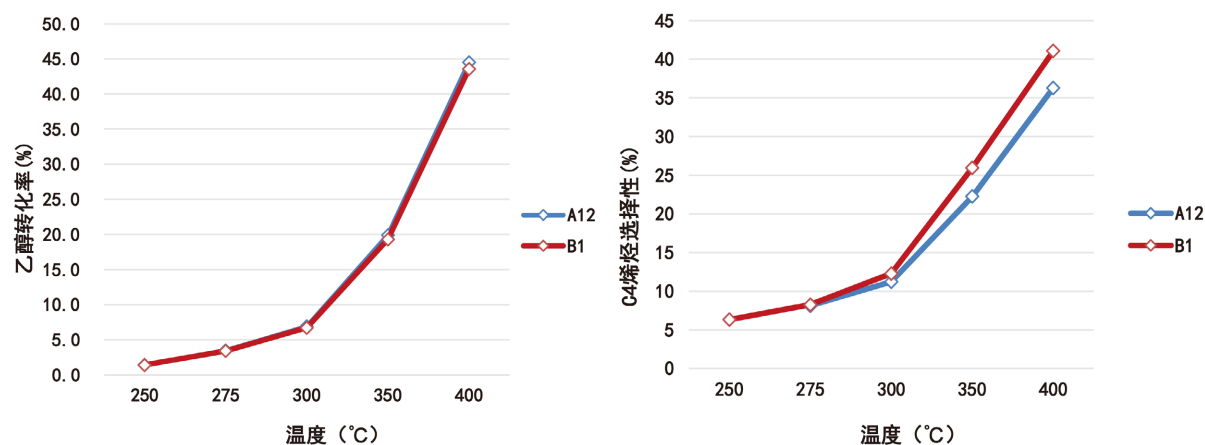


Figure 5. A12 and B1 comparison chart

图 5. A12 和 B1 对比图

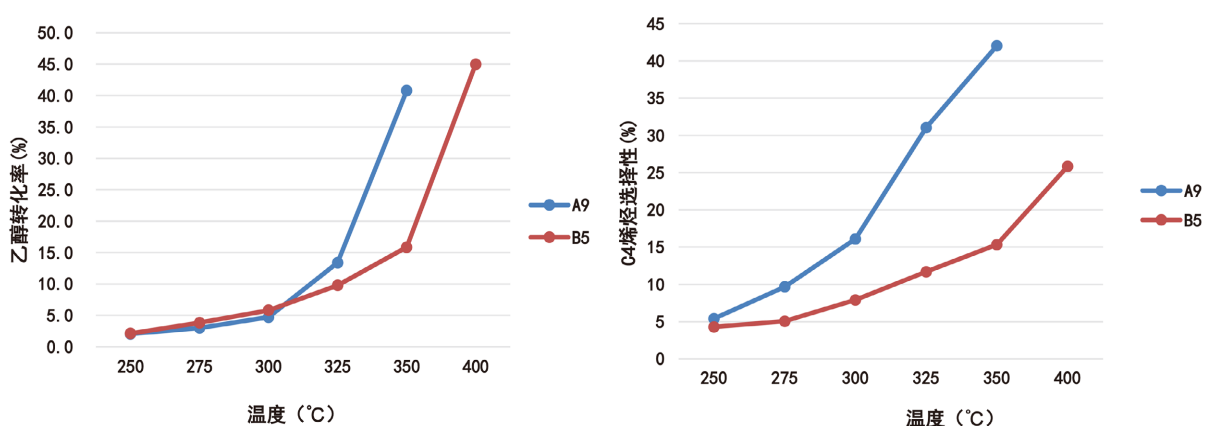


Figure 6. A9 and B5 comparison chart

图 6. A9 和 B5 对比图

4.2. 催化剂组合各量定性分析

4.2.1. Co 负载量对实验目标的影响

为研究 Co 负载量对乙醇转化率以及 C4 烯烃选择性大小的影响, 我们选取了 A1 (200 mg 1wt% Co/SiO₂-200 mg HAP-乙醇浓度 1.68 ml/min)、A4 (200 mg 0.5wt% Co/SiO₂-200 mg HAP-乙醇浓度 1.68 ml/min)、A2 (200 mg 2wt% Co/SiO₂-200 mg HAP-乙醇浓度 1.68 ml/min)在 350°C 下的数据做对比, A9 (50 mg 1wt% Co/SiO₂-50 mg HAP-乙醇浓度 2.1 ml/min)和 A10 (50 mg 5wt% Co/SiO₂-50 mg HAP-乙醇浓度 2.1 ml/min)在 400°C 下的数据做对比, 控制除 Co 在 Co/SiO₂ 中的质量占比外其他各变量都相同[6], 结果如图 7 所示。

由上述结果可知, 对于第一组数据, 当 Co 负载量为 0.5wt% 时, 乙醇转化率为 60.5%, C4 烯烃的选择性为 27.25%; 当钴负载量增加到 1wt%, 乙醇的转化率降为 36.80%, 此时 C4 烯烃的选择性升至 47.21%; 当再次增加钴的负载量至 2wt%, 乙醇的转化率上升为 67.88%, 此时 C4 烯烃的选择性为 39.1%。对于第二组数据, 当钴的负载量为 1wt%, 乙醇的转化率为 40.8%, C4 烯烃的选择性为 10.29%; 而当增加钴的负载量至 5wt%, 乙醇的转化率为 28.6%, C4 烯烃的选择性降至 10.29%, 综合分析第一组和第二组实验可以发现, 当钴负载量为 1wt% 时, C4 烯烃收率最大可达。

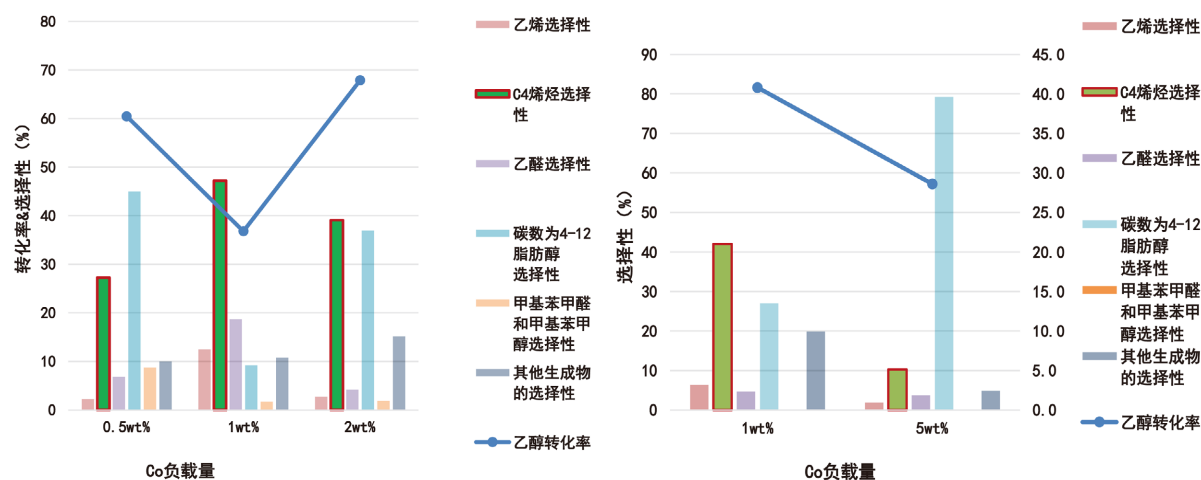


Figure 7. Co load
图 7. Co 负载量

4.2.2. Co/SiO₂ 和 HAP 质量比对实验目标的影响

为了探究 Co/SiO₂ 和 HAP 质量比对乙醇转化率以及 C4 烯烃选择性大小的影响, 我们选取了 A11 (50 mg 1wt% Co/SiO₂ + 90 mg 石英砂 - 乙醇浓度 1.68 ml/min, 无 HAP), A12 (50 mg 1wt% Co/SiO₂-50 mg HAP-乙醇浓度 1.68 ml/min), A13 (67 mg 1wt% Co/SiO₂-33 mg HAP-乙醇浓度 1.68 ml/min), A14 (33 mg 1wt% Co/SiO₂-67 mg HAP-乙醇浓度 1.68 ml/min) 在 400°C 下的数据做对比, 控制除 Co/SiO₂ 和 HAP 质量比外其他各变量都相同, 结果如图 8 所示。

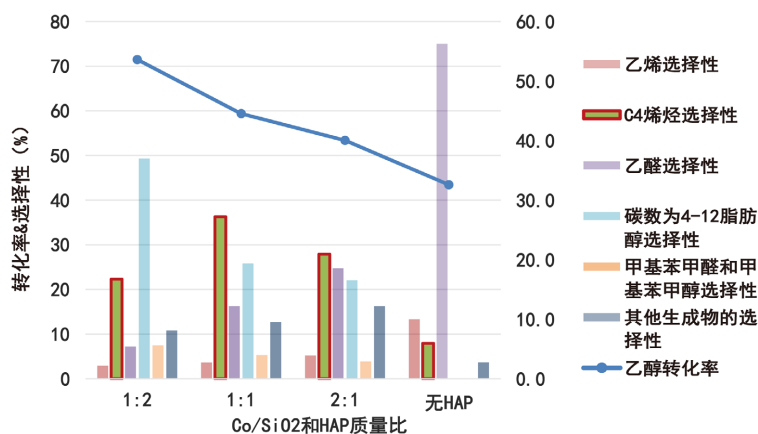


Figure 8. Co/SiO₂ and HAP mass ratio
图 8. Co/SiO₂ 和 HAP 质量比

由上述结果可知, 随着 Co/SiO₂ 和 HAP 质量比的增加, 乙醇的转化率逐渐减小。对于 C4 烯烃选择性, 我们不难发现其随着 Co/SiO₂ 和 HAP 质量比增加先增后减, 在 Co/SiO₂ 和 HAP 质量比为 1:1 时, C4 烯烃选择性最大, 为 36.3%。

4.2.3. 乙醇浓度对实验目标的影响

为了探究 Co/SiO₂ 和 HAP 质量比对乙醇转化率以及 C4 烯烃选择性大小的影响, 我们选取了 A7 (50 mg 1wt% Co/SiO₂-50 mg HAP-乙醇浓度 0.3 ml/min)、A8 (50 mg 1wt% Co/SiO₂-50 mg HAP-乙醇浓度 0.9 ml/min)、A9 (50 mg 1wt% Co/SiO₂-50 mg HAP-乙醇浓度 2.1 ml/min)、A12 (50 mg 1wt% Co/SiO₂-50 mg HAP-乙醇浓度

1.68 ml/min)在 400℃下的数据做对比,控制除乙醇浓度外其他各变量都相同,结果如图 9 所示。

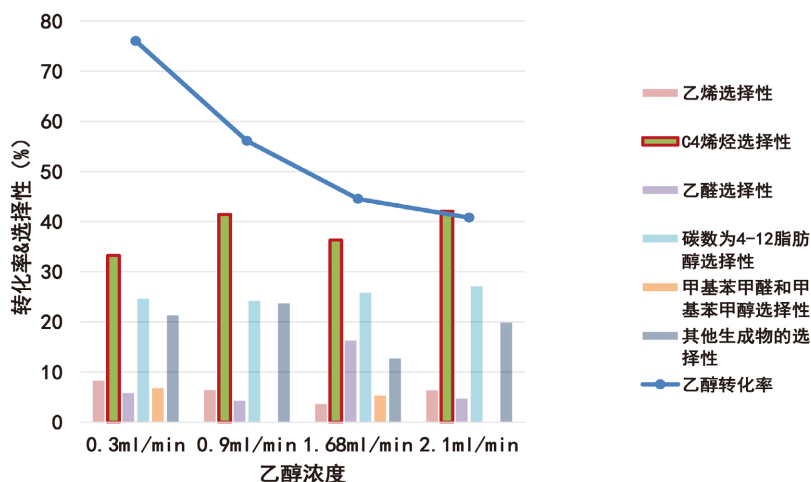


Figure 9. Ethanol concentration

图 9. 乙醇浓度

由上述结果可知,随着乙醇浓度的升高,乙醇转化率逐渐下降,而 C4 烯烃的选择性基本不发生变化,初步说明乙醇浓度对 C4 烯烃的选择性影响小。

4.2.4. Co/SiO₂ 和 HAP 总质量对实验目标的影响

为了探究 Co/SiO₂ 和 HAP 总质量对乙醇转化率以及 C4 烯烃选择性大小的影响,我们选取了 A1 (200 mg 1wt% Co/SiO₂-200 mg HAP-乙醇浓度 1.68 ml/min)、B1 (50 mg 1wt% Co/SiO₂-50 mg HAP-乙醇浓度 1.68 ml/min)、B2 (100 mg 1wt% Co/SiO₂-100 mg HAP-乙醇浓度 1.68 ml/min)、B3 (10 mg 1wt% Co/SiO₂-10 mg HAP-乙醇浓度 1.68 ml/min)、B4 (25 mg 1wt% Co/SiO₂-25 mg HAP-乙醇浓度 1.68 ml/min)、B6 (75 mg 1wt% Co/SiO₂-75 mg HAP-乙醇浓度 1.68 ml/min)做对比,控制除 Co/SiO₂ 和 HAP 总质量比外其他各变量都相同。温度为 350℃,结果如图 10 所示。

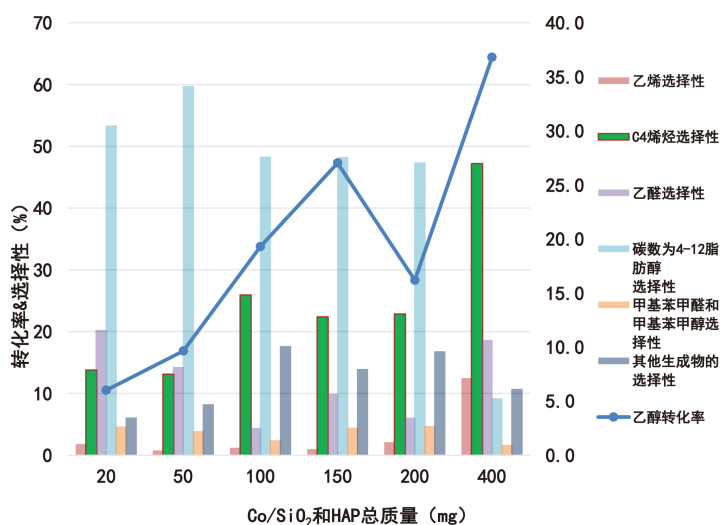


Figure 10. Total mass of catalyst

图 10. 催化剂总质量

由上述结果初步可知, 乙醇转化率和 Co/SiO₂ 和 HAP 总质量(mg)关系为先增再减再增, 在 Co/SiO₂ 和 HAP 总质量为 400 mg 时乙醇转化率和 C4 烯烃选择性都急剧上升, 但由于缺少之后数据, 无法排除偶然因素的影响, 只可得出初步结论。

4.3. 主成分分析

上述我们研究了单个变量对乙醇转化率及 C4 烯烃的影响, 接下来根据指标: 乙醇转化率/催化剂总质量、乙醇转化率/HAP 与 SiO₂ 之比、乙醇转化率/Co 负载量、乙醇转化率/乙醇浓度、乙醇转化率/温度, 我们采用主成分分析法分析催化剂组合和温度对乙醇转化率的综合影响, 给出十种较好的结果, 如表 5 所示。

Table 5. Combined effect of catalyst combination and temperature on ethanol conversion

表 5. 催化剂组合和温度对乙醇转化率的综合影响

排名	催化剂组合	温度
1	50 mg 1wt% Co/SiO ₂ +90 mg 石英砂-乙醇浓度 1.68 ml/min, 无 HAP (A11)	400℃
2	200 mg 2wt% Co/SiO ₂ -200 mg HAP-乙醇浓度 0.3 ml/min (A5)	400℃
3	50 mg 1wt% Co/SiO ₂ -50 mg HAP-乙醇浓度 0.3 ml/min (A7)	400℃
4	50 mg 1wt% Co/SiO ₂ -50 mg HAP-乙醇浓度 0.3 ml/min (A7)	350℃
5	200 mg 0.5wt% Co/SiO ₂ -200 mg HAP-乙醇浓度 1.68 ml/min (A4)	400℃
6	200 mg 1wt% Co/SiO ₂ -200 mg HAP-乙醇浓度 0.9 ml/min (A3)	400℃
7	200 mg 1wt% Co/SiO ₂ -200 mg HAP-乙醇浓度 0.9 ml/min (A3)	450℃
8	50 mg 1wt% Co/SiO ₂ -50 mg HAP-乙醇浓度 0.3 ml/min (A7)	300℃
9	200 mg 2wt% Co/SiO ₂ -200 mg HAP-乙醇浓度 0.3 ml/min (A5)	350℃
10	100 mg 1wt% Co/SiO ₂ -100 mg HAP-乙醇浓度 0.9 ml/min (B7)	400℃

根据指标: C4 烯烃选择性/催化剂总质量、C4 烯烃选择性/HAP 与 SiO₂ 之比、C4 烯烃选择性/Co 负载量、C4 烯烃选择性/乙醇浓度、C4 烯烃选择性/温度, 我们采用主成分分析法分析催化剂组合和温度对 C4 烯烃的综合影响, 给出十种较好的结果, 如表 6 所示。

Table 6. Comprehensive effect of catalyst combination and temperature on C4 olefins

表 6. 催化剂组合和温度对 C4 烯烃的综合影响

排名	催化剂组合	温度
1	10 mg 1wt% Co/SiO ₂ -10 mg HAP-乙醇浓度 1.68 ml/min (B3)	400℃
2	50 mg 1wt% Co/SiO ₂ + 90 mg 石英砂 - 乙醇浓度 1.68 ml/min, 无 HAP (A11)	400℃
3	50 mg 1wt% Co/SiO ₂ -50 mg HAP-乙醇浓度 0.3 ml/min (A7)	400℃
4	200 mg 2wt% Co/SiO ₂ -200 mg HAP-乙醇浓度 0.3 ml/min (A5)	400℃
5	50 mg 1wt% Co/SiO ₂ -50 mg HAP-乙醇浓度 0.9 ml/min (A8)	400℃
6	10 mg 1wt% Co/SiO ₂ -10 mg HAP-乙醇浓度 1.68 ml/min (B3)	350℃
7	50 mg 1wt% Co/SiO ₂ -50 mg HAP-乙醇浓度 1.68 ml/min (B1)	400℃
8	50 mg 1wt% Co/SiO ₂ -50 mg HAP-乙醇浓度 2.1 ml/min (A9)	400℃

Continued

9	200 mg 1wt% Co/SiO ₂ -200 mg HAP-乙醇浓度 0.9 ml/min (A3)	400℃
10	50 mg 1wt% Co/SiO ₂ + 90 mg 石英砂 - 乙醇浓度 1.68 ml/min, 无 HAP (A11)	350℃

由表 5、表 6 可知, 表 5 中排名是 1、2、3、6 与表 6 中排名是 2、4、3、9 相对应, 催化剂组合和温度对乙醇转化率和 C4 烯烃的综合影响较好。

4.4. 基于上述定性分析的 BP 神经网络

综合上述分析结果, 由于乙醇浓度对于转化率没有影响, 其对于反应的影响基本上是通过影响乙醇转化率来达到。对此本论文, 计划在训练关于 C4 烯烃选择性的 BP 神经网络是以催化剂总质量, Co/SiO₂ 和 HAP 质量比的倒数, Co 的负载量, 温度这 4 个量为输入层神经元, 即剔除乙醇浓度数据后代入神经网络进行训练。而对于乙醇转化率 φ 则不用剔除变量, 直接代入, 即该神经网络有 5 个脸为输入层神经元。在此, 我们的这两个 BP 神经网络的隐藏层均是有 10 个神经元[6] [7]。

此次神经网络的构建, 我们借助 Matlab 神经网络拟合工具箱。用我们所构造的训练集对神经网络展开训练[8]。

训练所得神经网络拟合效果, 如图 11 所示:

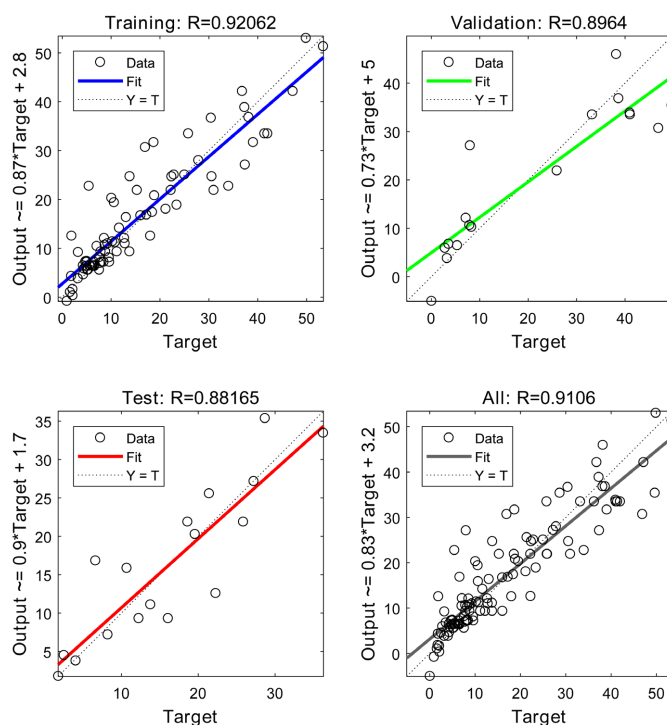


Figure 11. C4 olefins selectivity ψ -BP neural network training R value

图 11. C4 烯烃选择性 ψ -BP 神经网络训练 R 值

从结果来看, 无论是训练集, 还是验证集、测试集其 R 分别达到 0.92062, 0.8964, 0.88165, 因此我们所得到的该神经网络效果比较好。

同样得方法, 我们不难得到乙醇转化率 φ 所对应得神经网络。

下面我们就该 BP 神经网络对上面的问题进行模拟仿真。得到图 12~16。

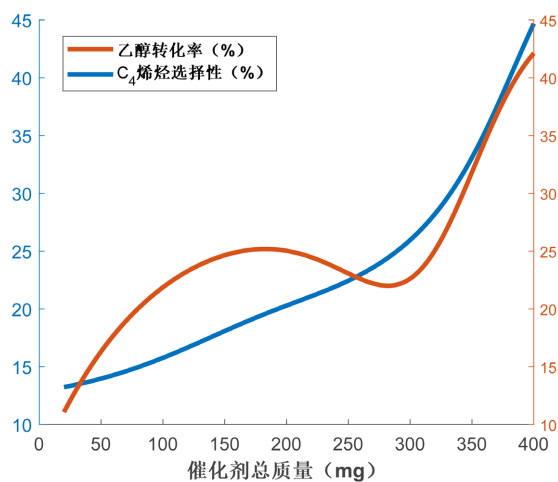


Figure 12. Catalyst total mass simulation curve

图 12. 催化剂总质量模拟曲线

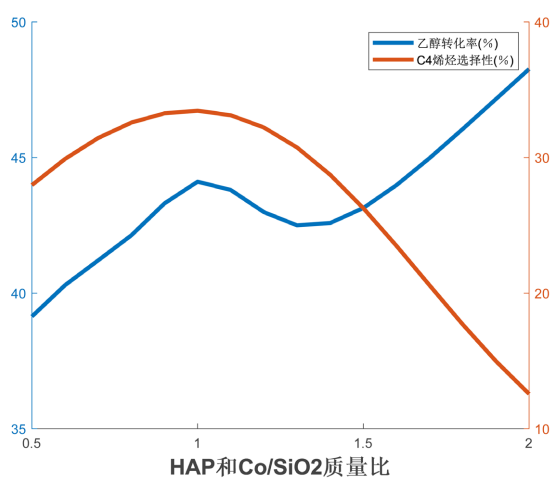


Figure 13. Catalyst ratio simulation curve

图 13. 催化剂比值模拟曲线

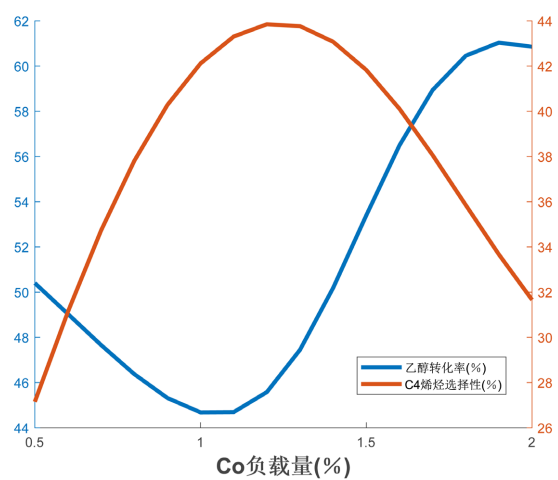


Figure 14. Co load simulation curve

图 14. Co 负载量模拟曲线

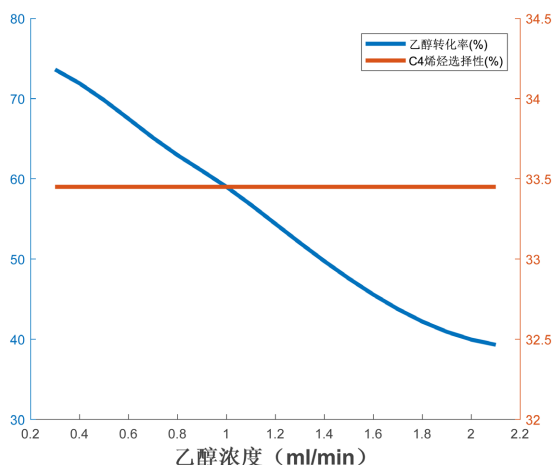


Figure 15. Ethanol concentration simulation curve

图 15. 乙醇浓度模拟曲线

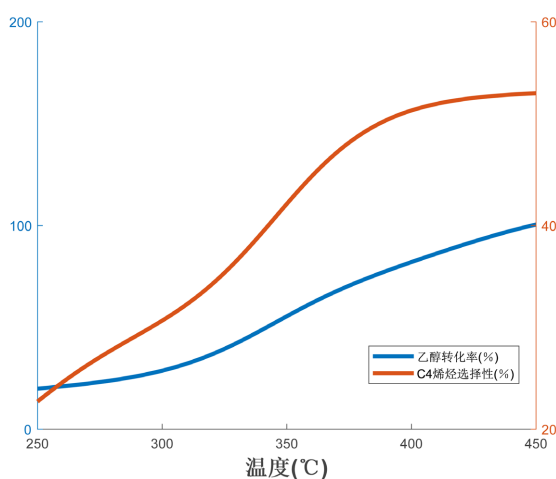


Figure 16. Temperature simulation curve

图 16. 温度模拟曲线

从上述各个截面的数据来看, 我们的所得这两个 BP 神经网络在一定范围内能有效揭示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。

5. 基于 BP 神经网络以遗传算法求最值

在上一问中, 我们已经就乙醇转化率 α 及 C4 烯烃的选择性构建训练了 BP 神经网络。在这一问题中, 我们利用上述同样的模型建立与求解方法构建神经网络。在此我们建立的神经网络模型的输出层神经元为 C4 烯烃的收率。而对于输入层我们输入催化剂总质量、Co/SiO₂ 和 HAP 质量比、Co 的负载量、乙醇浓度、温度这五个量的实验值来作为神经网络的输入, 即为 5 个输入层的神经元。对于隐藏层经过反复实验我们采用隐藏层为 15 个神经元的 BP 网络来进行训练[8]。

经检验, 最后所得神经网络对于原数据的效果比较好。

为了找到最优得方案使得 C4 烯烃收率最大, 对于神经网络求最值, 本文将采用遗传算法对所训练得到神经网络进行搜索[9]。

由于遗传算法为智能算法, 且我们所得神经网络结构复杂, 在可行域内可能广泛存在极值, 遗传算

法有较大可能会陷入局部最优解。要计算找到准确最大值难度较大，只能寻找近似最大值。对此本论文将对遗传算法计算 10 次，从而得到最优解。

但是要寻最优解并不能仅仅只追求 C2 烯烃发率值最大，这是因为神经网络在训练数据范围能其拟合效果比较好，若越远离训练数据得最大范围，则神经网络得结果可能与实际不符。因此，我们在选取值是尽量在训练数据范围内进行选取。

在此不妨我们对 5 个量选取范围，使得所得的极值对应催化剂组合方案是合理的。

最后我们得到表 7。

Table 7. C4 olefin yield scheme
表 7. C4 烃收率方案

序号	催化剂总质量	Co/SiO ₂ 和 HAP 质量比	Co 负载量	乙醇浓度	温度	C4 烯烃收率
1	287.7538	1.7618	2.4884	1.4997	441.4874	56.5738
2	190.7377	1.0425	0.5432	0.3772	444.138	59.8697
3	496.341	0.9848	2.7941	1.2184	390.2165	63.6223
4	383.800	1.8173	0.7471	0.3278	409.1359	56.8925
5	319.5488	1.8583	2.2798	1.1084	401.2097	59.0683
6	453.7789	1.8648	0.6840	0.8618	402.8491	60.0032
7	486.4035	2.2301	1.4724	0.5729	444.138	65.0296
8	431.2926	0.6745	3.8820	2.3125	417.6440	62.5291
9	486.8569	1.5579	1.2167	0.3472	417.9328	58.6038

在 350 摄氏度的下的最优方案，只要在遗传算法中限制温度 T 的上界为 350 度，我们可以利用上述相同算法进行最优方案的寻找(结果如表 8 所示)。

Table 8. Protocol for C4 olefin yield at 350°C
表 8. 350°C 下的 C4 烯烃收率方案

序号	催化剂总质量	Co/SiO ₂ 和 HAP 质量比	Co 负载量	乙醇浓度	温度	C4 烯烃收率
1	489.5216	1.3515	1.3005	0.7956	349.2939	42.3516
2	491.8027	1.3332	1.9983	1.2227	342.9438	46.4863
3	421.5024	0.9976	2.6268	1.2619	335.7384	29.7583
4	448.2449	0.6889	2.6717	1.7701	343.2236	30.6654
5	499.8146	1.3023	1.2963	2.3097	314.4283	27.7680

6. 实验设计

影响 C4 烯烃收率的因素为催化剂总质量、Co/SiO₂ 和 HAP 质量比、Co 负载量、乙醇浓度、温度，根据表 6 可知催化剂总质量水平个数有 9 个、Co/SiO₂ 和 HAP 质量水平个数有 8 个、Co 负载量水平个数有 9 个、乙醇浓度水平个数有 9 个、温度水平个数有 9 个。利用 SPSS 对各因素及其对应的水平进行正交试验，得出 81 组方案，并利用 MATLAB 的 BP 神经网络对这几组方案进行训练，得出试验结果，

并采用 SPSS 方差分析对此试验进行结果分析(不考虑交互作用, 只考察各因素的主效应), 所得结果, 如表 9 所示。

Table 9. Inter subject effect test
表 9. 主体间效应检验

因变量: C4 烯烃收率					
	III 类平方和	自由度	均方	F	显著性
修正模型	5244.750	39	134.481	2.502	0.002
截距	5829.708	1	5829.708	108.447	0.000
A	1132.189	8	141.524	2.633	0.020
B	1106.761	7	158.109	2.941	0.014
C	2157.580	8	269.698	5.017	0.000
D	480.775	8	60.097	1.118	0.372
E	367.445	8	45.931	0.854	0.562
误差	2204.017	41	53.757		
总计	13124.715	81			
修正后总计	7448.767	80			

A: 催化剂总质量, B: Co/SiO₂ 和 HAP 质量比, C: Co 负载量, D: 乙醇浓度, E: 温度。

可得出, 5 个因素的主次关系为: Co 负载量 > Co/SiO₂ 和 HAP 质量比 > 催化剂总质量 > 乙醇浓度 > 温度。

通过图 12~16, 结合 5 个因素的主次关系: Co 负载量 > Co/SiO₂ 和 HAP 质量比 > 催化剂总质量 > 乙醇浓度 > 温度, 从这五个因素中选择最好的水平得到第一组数据, 再根据主次关系, 从而给出再增加如下五组实验: 第一组: 催化剂总质量 190.74 mg、Co/SiO₂ 和 HAP 质量比 0.98%、Co 负载量 0.75wt%、乙醇浓度 1.11 ml/min、温度 441.49℃。第二组: 催化剂总质量 190.74 mg、Co/SiO₂ 和 HAP 质量比 0.98%、Co 负载量 0.75wt%、乙醇浓度 1.11 ml/min、温度 417.93℃。第三组: 催化剂总质量 190.74 mg、Co/SiO₂ 和 HAP 质量比 0.98%、Co 负载量 0.75wt%、乙醇浓度 0.57 ml/min、温度 417.93℃。第四组: 催化剂总质量 453.78 mg、Co/SiO₂ 和 HAP 质量比 0.98%、Co 负载量 0.75wt%、乙醇浓度 0.97 ml/min、温度 417.93℃。第五组: 催化剂总质量 453.78 mg、Co/SiO₂ 和 HAP 质量比 0.67%、Co 负载量 0.75wt%、乙醇浓度 0.97 ml/min、温度 417.93℃。

7. 结论

对于乙醇偶合制备 C4 烯烃的反应中的一种新型催化剂(Co/SiO₂-HAP 催化剂), 本文在文献[1]的实验数据基础上对反应条件、Co 负载量等进行深入分析, 得出以下结论:

- 1) 在固定效应变截距模型和固定效应变系数模型中, 根据 F 检验结果固定效应变系数模型对乙醇转化率与温度的关系描述更加准确。
- 2) 在三次多项式拟合和 Fourier 拟合中, 根据平方和误差 SSE 显示三次多项式拟合对 C4 烯烃选择性与温度的关系描述更加准确。
- 3) 在 350℃某催化剂组合的实验中, 若需获得 C4 烯烃, 则需要将时间控制在 20 分钟左右。

4) 装料方式对实验结果较小, 不会对实验结果造成较大的影响。

5) 随着温度的升高, 乙醇转化率和 C4 烯烃选择性逐渐增大。

6) 随着乙醇浓度的增加, 乙醇转化率逐渐下降。

7) 在已知的实验结果中, 催化剂组合(A3)和温度(400℃), 对乙醇转化率和 C4 烯烃选择性综合影响较好, 即当 Co/SiO₂ 与 HAP 混料比为 1:1、反应温度为 400℃、Co 负载量为 1wt%时, 催化剂性能最优。

8. 结束语

在制备乙醇和 C4 烯烃过程中, 本文首先采用固定效应面板数据模型中的两个子模型: 固定效应变系数模型和固定效应变截距模型解决乙醇转换率和温度的关系, 并利用三次多项式拟合解决 C4 烯烃选择性与温度的关系, 通过 RadViz 数据处理方法研究了 350℃ 下一次实验不同时间的测试结果, 分析得该催化剂组合在 20 分钟到 70 分钟并不稳定, 20 分钟左右 C4 烯烃产率较高; 其次, 采用单因素控制变量法和 BP 神经网络仿真模拟, 同时采用主成分分析法综合分析了催化剂组合和温度整体对乙醇转换率和 C4 烯烃选择性大小的影响; 再次, 采用遗传算法对训练所得的 BP 神经网络模型进行寻优, 以求解 C4 烯烃收率尽可能高的催化剂组合和温度和在温度低于 350℃ 时 C4 烯烃收率尽可能高的催化剂组合和温度, 由于极大值并不唯一, 因此, 通过多次实验寻找符合条件的最优方案; 最后, 采用了正交试验设计, 分析催化剂总质量、Co/SiO₂ 和 HAP 质量比、Co 负载量、乙醇浓度、温度五个因素得出较为优化的实验组合, 再利用方差分析得出五个因素间的主次关系, 选出 5 组可增加实验。

参考文献

- [1] 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.
- [2] 张媛, 金一冉, 李霄. 基于机器学习和多元非线性拟合的乙醇偶合制备 C4 烯烃研究[J]. 科学技术创新, 2022(16): 177-180.
- [3] 赵静. 一类面板数据模型的估计和检验[D]: [博士学位论文]. 北京: 北京工业大学, 2017.
- [4] 赵卫亚, 孙津, 赵亚茹. 面板数据模型的类型识别检验的 EViews 实现[J]. 统计与决策, 2013(7): 71-74. <https://doi.org/10.13546/j.cnki.tjyjc.2013.07.011>
- [5] 周芳芳, 李俊材, 黄伟, 王俊韡, 赵颖. 基于维度扩展的 Radviz 可视化聚类分析方法[J]. 软件学报, 2016, 27(5): 1127-1139. <https://doi.org/10.13328/j.cnki.jos.004951>
- [6] 赵超凡. 基于数据挖掘的甲烷化催化剂建模研究[D]: [硕士学位论文]. 太原: 太原理工大学, 2018.
- [7] 林正根, 姚杰, 庄柯, 金定强, 吴碧君. 基于 PCA-LMBP 神经网络模型的 SCR 脱硝催化剂工艺特性预测[J]. 热力发电, 2019, 48(11): 108-114. <https://doi.org/10.19666/j.rfd.201904091>
- [8] 周梦, 吕志刚, 邸若海, 李叶. 基于小样本数据的 BP 神经网络建模[J]. 科学技术与工程, 2022, 22(7): 2754-2760.
- [9] 林正根, 姚杰, 庄柯, 金定强. 基于 GA-BP 神经网络模型的 SCR 脱硝催化剂脱硝效率模拟[C]//中国环境科学学会 2019 年科学技术年会——环境工程技术创新与应用分论坛论文集(三). 西安: 《工业建筑》杂志社有限公司, 2019: 472-477+167. <https://doi.org/10.26914/c.cnkihy.2019.071230>