

2021 年高教社杯全国大学生数学建模竞赛题目

(请先阅读“全国大学生数学建模竞赛论文格式规范”)

B 题 乙醇偶合制备 C4 烯烃

C4 烯烃广泛应用于化工产品 & 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/SiO₂ 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。

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。

附录：名词解释与附件说明

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 SiO₂ 的重量之比。例如，“Co 负载量为 1wt%”表示 Co 与 SiO₂ 的重量之比为 1:100，记作“1wt%Co/SiO₂”，依次类推。

HAP：一种催化剂载体，中文名称羟基磷灰石。

Co/SiO₂ 和 HAP 装料比: 指 Co/SiO₂ 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/SiO₂-67mg HAP-乙醇浓度 1.68ml/min”指 Co/SiO₂ 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 $100\% \times (\text{乙醇进气量} - \text{乙醇剩余量}) / \text{乙醇进气量}$ 。

C4 烯烃收率: 其值为乙醇转化率 \times C4 烯烃的选择性。

附件 1: 性能数据表。表中乙烯、C4 烯烃、乙醛、碳数为 4-12 脂肪醇等均为反应的生成物; 编号 A1~A14 的催化剂实验中使用装料方式 I, B1~B7 的催化剂实验中使用装料方式 II。

附件 2: 350 度时给定的某种催化剂组合的测试数据。