文章编号: 1001－411X (2002) 01－0085－04

最小综合损失准则与多指标均匀正交试验设计的优化

张国权[1], 吕小欢[1], 杨 君[2]
(1 华南农业大学理学院, 广东 广州 510642; 2 华南农业大学食品系, 广东 广州 510642)

摘要: 对多指标均匀正交试验设计引入回归模型与响应损失概念, 用响应损失变量的主成分建立一个多指标综合损失模型, 并把该模型应用到可食性热水溶性膜特性的研究中, 使该膜获得满意的工艺参数与配方.

关键词: 损失; 综合损失; 可食性膜; 均匀正交设计
中图分类号: O212; C8　　　　文献标识码: A

在多因素多指标的科学试验中, 由于指标之间的不可公度性及矛盾性, 使得对处理方案的评价变得复杂和困难. 例如, 在农业生产对害虫化学防治中, 不仅要求农药对害虫有较好的毒杀作用和对生态环境尽可能少破坏, 同时, 防治成本要低, 还要有好的经济效益. 因此, 对害虫高防治, 对天敌的低杀伤, 低环境残留, 高产量与低成本, 成为化学防治中几个相互矛盾相互制约的追求指标. 通常通过选择某种试验设计方法安排试验后, 将多指标问题转化为综合(单)指标进行优化分析. 然而, 用以往人们采用过的如功效系数法、排队评分法、公式评分法等往往受主观因素干扰和缺乏通用性, 而且常出现求得的理论优化点 X_0 上的一些指标分量的满意程度特别不好, 有时甚至 X_0 是危险点(众多边界点的组合). 笔者在 "热水溶性膜的均匀正交试验" 中使用上述方法, 多次出现上述问题. 通过多次比较与验证, 对多因素多指标试验提出综合损失模型, 求出问题的优化解, 获得满意的工艺参数与配方.

1 模型的结构

1.1 决策向量与响应向量

假定 $x_1, x_2, \cdots, x_k$ 为试验的 k 个可控因素, $y_1, y_2, \cdots, y_m$ 为试验的 m 个响应指标, 称这 k 个可控因素组成的向量 $X=(x_1, x_2, \cdots, x_k)^T$ 为决策向量; 称试验的 m 个指标组成的向量 $Y=(y_1, y_2, \cdots, y_m)^T$ 为响应向量; 各响应变量 y_j 和决策变量 X 之间存在的函数关系向量 $Y=(f_1(x), f_2(x), \cdots, f_m(x))^T$ 称为响应函数向量. 用某一试验设计方法安排 X 作 n 次试验, 则有决策变量阵为: $\boldsymbol{A}=(x_{ij})_{n\times k}$, 其中 x_{ij} 为第 i 个方案中第 j 个决策变量值, 称向量 $X_i=(x_{i1}, x_{i2}, \cdots, x_{ik})^T$; $i=1, 2, \cdots, n$ 为试验的第 i 个处理. 其对应的试验结果 $Y_i=(y_{i1}, y_{i2}, \cdots, y_{im})^T$ 构成响应向量值, n 次试验的响应向量组成的矩阵 $\boldsymbol{B}=(y_{ij})_{n\times m}$ 称为样本响应阵, 其中 y_{ij} 为第 i 个方案中第 j 个响应值.

1.2 响应理想值与响应损失

为了解决指标之间的矛盾性, 需对响应变量作同向处理, 首先按实际需要确定一组响应的 "理想值" y_j^* ($j=1, 2, \cdots, m$). 所谓 "理想值" 是指各项指标在试验结果中的相对优化值, 它可分为望大型(在一定范围内, 响应值越大越好), 望小型(在一定范围内, 响应值越小越好), 或适度型(在一定范围内, 响应值既不能太大也不能太小, 而取适中的位置) 3 类指标. 再给出指标损失概念.

定义 1　设响应变量为 y_j, 其对应的理想值为 y_j^*, 则称

$$z_j=|y_j-y_j^*|,\quad j=1, 2, \cdots, m \tag{1.1}$$

为响应 y_j 的损失分量. 称 $Z=(Z_1, Z_2, \cdots, Z_m)^T$ 为响应损失向量.

1.3 损失分量的标准化与主成分

当对 X 安排作 n 次试验, 结果可得样本响应阵 $\boldsymbol{B}=(y_{ij})_{n\times m}$. 其对应的损失矩阵为 $(Z_{ij})_{n\times m}$. 为使响应损失之间有公度性, 对损失矩阵 $(Z_{ij})_{n\times m}$ 作标准化处理. 又由于响应变量间存在的相关联系会造成信息的互相重叠与相互干扰难以客观地反映试验的各种处理效果优劣地位. 因此, 考虑用主成分分析解决这一问题[1]. 对损失矩阵 $(Z_{ij})_{n\times m}$ 作标准化处理后, 计算出其相关阵 $\boldsymbol{R}$ (设其秩为 m) 的 m 个非零特征根 $\lambda_1\geq\lambda_2\geq\cdots\geq\lambda_m>0$ 为, 相应求出其主成分 $(p_1, p_2, \cdots, p_m)$. 其中

$$\begin{cases} p_1=a_{11}z_1+a_{12}z_2+\cdots+a_{1m}z_m \\ p_2=a_{21}z_1+a_{22}z_2+\cdots+a_{2m}z_m \\ \vdots \\ p_m=a_{m1}z_1+a_{m2}z_2+\cdots+a_{mm}z_m \end{cases} \tag{1.2}$$

当前 h 个主成分的累计贡献率 $\sum_{j=1}^{k}\lambda_j/\sum_{j=1}^{m}\lambda_j$ 超过 85% 时, 一般选取前 h 个主成分 $(p_1, p_2, \cdots, p_h)$ 作综合分析分量[2].

收稿日期: 2000－05－10　　修回日期: 2001－01－03　　作者简介: 张国权(1949－), 男, 教授.

?1994-2016 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

1.4 综合损失函数与满意解

定义2 由一组决策变量 $X=(x_1, x_2, \cdots, x_k)$所确定的响应损失向量的主成分的几何平均

$$F(x_1, x_2, \cdots, x_k)=\sqrt[h]{|p_1\times p_2\times\cdots\times p_h|} \tag{1.2}$$

称为综合损失函数, 称以处理 X_i 为对应的函数值 $F_i=F(x_{i1}, x_{i2}, \cdots, x_{ik})$, $i=1, 2, \cdots, n$ 为 X_i 的综合损失系数.

对已安排的 n 次试验, 可分别求得其综合损失系数, 将 $F_i(i=1, 2, \cdots, n)$由大到小依次排序, F_i 小者为优, 其对应的$(x_{i1}, x_{i2}, \cdots, x_{ik})^T$ 必为满意解(非劣解). 一般地, 对综合损失函数满足 $\min F_i(X)$, $i=1, \cdots, n$ 的 $X^{\circ}=(x_1^{\circ}, x_2^{\circ}, \cdots, x_k^{\circ})$为满意解, 或称综合损失最小准则下的优化解, 而$(f_1(X_0), f_2(X_0), \cdots, f_m(X_0))^T$ 为优化响应向量值.

2 热水溶性膜的均匀正交试验与多指标综合优化分析

食品的种类繁多, 性能各异, 因而可食性食品包装膜也要能适应各类食品及各种加工途径的要求. 如普通水溶性膜仅适用于装盛一些干性食品, 常作为食品的内包装. 为了适应食品包装的需要, 使包装膜的用途更广泛, 需要研究具有较好阻水性能, 强度较大, 也有一定的柔韧性, 基本可以满足内外包装的要求, 而且具有冷水不溶, 热水中可完全溶化, 无色无味, 免撕包装的可食性膜. 这既方便食用, 又符合环保要求, 是当今食用膜研究的一大课题. 本文以魔芋胶与卡拉胶为基材, 选择干燥温度, 石蜡、魔芋胶与卡拉胶的比例、乳化剂以及增塑剂为参试因子, 其因素水平按表1设置.

表1 参试各因子的水平表1)

Tab.1 Levels of factors in experiments

水平 level	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
1	50	0	4∶6	0	0
2	40	2.0	5∶5	1.0	2.0
3	30	4.0	6∶4	2.0	4.0
4	20	6.0	7∶3	3.0	6.0

1) X_1 为温度(℃), X_2 为 ρ(石蜡)/(g·L^{-1}), X_3 为魔芋胶与卡拉胶的比例, X_4 为 ρ(蔗糖酯)/(g·L^{-1}), X_5 为 ρ(聚乙二醇)/(mL·L^{-1})

要考察这些因素不同水平组合试验的4个指标: Y_W(水蒸气透过系数)、Y_T(抗张强度)、Y_E(伸长率)和 Y_BS(耐破度)的影响, 并采用最小综合损失优化设计法, 对影响膜各种性能的因素进行多指标综合分析, 从中找出其优化因素组合的满意解与满意响应值. 其步骤如下:

2.1 安排试验, 采集数据

用均匀正交表设计试验 $UL_{16}(4^5)$[3] 安排试验, (表2), 获取决策变量矩阵与响应矩阵的数据, 并分别求出各响应指标与影响因素之间的关系.

表2 参试因子试验结构矩阵、结果及各响应与参试因子间的二次回归模型

Tab.2 Structural matrix of the experimental factors, experimental results, and the quadratic regression model for the responses and factors

试验号 no.	参试因子 factor x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	Y_W	Y_T	Y_E	Y_B	F
1	1	1	2	1	2	0.172 6	44.915	5.380	7.647 0	1.42
2	1	2	1	4	4	0.160 4	32.437	17.070	5.632 6	1.09
3	1	3	3	2	1	0.099 7	45.630	7.701	6.172 8	0.55
4	1	4	4	3	3	0.113 2	31.288	13.910	4.263 2	1.08
5	2	1	4	2	4	0.175 3	32.758	16.290	4.488 8	1.50
6	2	2	3	3	2	0.113 0	42.332	8.890	6.453 4	0.21
7	2	3	1	1	3	0.147 6	33.522	11.340	5.929 9	0.80
8	2	4	2	4	1	0.077 2	46.501	6.380	5.410 0	1.54
9	3	1	1	3	1	0.107 1	50.330	4.750	6.700 5	1.48
10	3	2	2	2	3	0.152 8	36.266	13.040	6.289 7	0.44
11	3	3	4	4	2	0.106 5	38.176	8.310	4.502 7	1.28
12	3	4	3	1	4	0.156 7	23.909	12.120	5.217 4	0.99
13	4	1	3	4	3	0.147 3	37.418	9.440	4.340 9	0.31
14	4	2	4	1	1	0.113 5	46.697	3.900	6.076 4	0.77
15	4	3	2	3	4	0.132 3	31.899	10.670	4.563 7	1.33
16	4	4	1	2	2	0.130 1	36.243	4.853	4.638 0	0.89

?1994-2016 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

$Y_{\mathrm{W}}= 0.124\,37x_1 - 0.038\,90x_2 + 0.011\,88x_3 + 0.010\,55x_4 + 0.042\,36x_5 + 0.006\,32x_2^2 - 0.004\,82x_5^2 + 0.003\,49x_1x_2 + 0.004\,04x_1x_3 - 0.001\,41x_2x_4 - 0.002\,51x_2x_5 + 0.001\,90x_4x_5$;

$Y_{\mathrm{T}}= 53.112\,37 - 2.156\,28_2 + 6.773\,30x_3 - 10.092\,33x_5 + 0.484\,11x_1^2 - 0.419\,96x_2^2 - 0.713\,50x_3^2 + 0.980\,70x_5^2 + 0.368\,86x_1x_4 + 0.753\,98x_2x_4 - 0.565\,91x_3x_4 - 0.448\,19x_3x_5 + 0.381\,56x_4x_5$;

$Y_{\mathrm{E}}= - 2.507\,12 + 4.754\,45x_1 - 2.122\,70x_3 + 4.512\,65x_4 + 2.242\,10x_5 + 0.680\,78x_1^2 - 0.553\,78x_4^2 - 0.577\,22x_1x_2 - 0.537\,05x_1x_4 + 0.445\,66x_2x_3 + 0.337\,05x_3x_5$

$Y_{\mathrm{B}}= 16.182\,40 - 0.944\,95x_2 - 0.712\,12x_3 - 3.347\,54x_4 - 0.368\,11x_1^2 - 0.374\,96x_5^2 + 0.152\,18x_1x_3 + 0.456\,21x_1x_4 + 0.094\,00x_2x_4 + 0.294\,30x_2x_5 + 0.679\,65x_3x_4 + 0.375\,68x_3x_5$

2.2　计算各响应 y_j 对理想值的损失

对响应变量为 y_j, 其对应的理想值 y_j^* 可结合以往的经验和技术指标取试验样本中性能较理想的值, 从可食性膜的应用角度考虑, *WVP*(水蒸气)应越低越好, *TS*(抗张强度)及 *BS*(耐破度)应越高越好, *E*(伸长率)适中则较为理想. 因此, 根据试验结果选择以 0.077 2, 50.330, 11.340 和 7.674 分别作为 Y_{W}, Y_{T}, Y_{E}, Y_{B} 的理想值, 求出各响应变量损失分别为: $Z_1=|y_{\mathrm{W}}-0.077\,2|$, $Z_2=|y_{\mathrm{T}}-50.330|$, $Z_3=|y_{\mathrm{E}}-11.340|$, $Z_4=|y_{\mathrm{B}}-7.674|$.

2.3　求各响应变量损失的主成分, 建立各处理的综合损失函数

应用 SAS 软件包进行分析得出主成分相互关系特征值(表 3)和各主成分与 Z 的关系.

表 3　主成分相互关系特征值

Tab. 3　The characteristic values of correlation among main components

主成分 main components	特征值 characteristic value	差数 difference	贡献率 contribution ratio	累积贡献率 cumulative contribution ratio
$P1$	2.464 16	1.419 96	0.6160 40	0.616 04
$P2$	1.044 20	0.704 03	0.2610 49	0.877 09
$P3$	0.340 17	0.188 69	0.0850 42	0.962 13
$P4$	0.151 47	.	0.0378 69	1.000 00

从表 3 看出, 前 2 个主成分的累加贡献率为 0.877 09 > 0.85, 所以只选取 $P1$ 和 $P2$ 两个分量, 即可满足要求. 求得:

$P1=0.420\,955Z_1+0.601\,284Z_2+0.559\,459Z_3+0.385\,046\,1Z_4$;

$P2=0.656\,748Z_1+0.101\,503Z_2-0.122\,289Z_3+0.737\,173Z_4$.

而, $Z_1=Y_{\mathrm{W}}(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5)-0.077\,2$;

$Z_2=50.329-Y_{\mathrm{T}}(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5)$;

$Z_3=Y_{\mathrm{E}}(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5)-11.34$;

$Z_4=7.647-Y_{\mathrm{B}}(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5)$.

故综合损失函数为: $F=\sqrt{|P1\times P2|}$.　(2.1)

计算各处理的综合损失值 F_i, $i=1, 2, \cdots, 16$. 将 F_i 填写在试验安排表最右列(表 2).

2.4　方案择优, 求出满意解

2.4.1　试验直观优化分析　按正交试验设计常规直观分析的计算方法得表 4.

表 4　试验结果直观分析1)

Tab.4　Intuitive analysis of the experimental results

试验结果 result	X_1	X_2	X_3	X_4	X_5
I_j	1.04	1.18	0.92	1.10	0.90
II_j	1.01	0.63	1.04	0.85	0.96
III_j	1.05	0.99	0.52	1.02	0.66
IV_j	0.83	1.12	1.16	1.05	1.23
R_j	0.22	0.55	0.64	0.25	0.57

1) I_j 为水平 1 的 F 均值, II_j 为水平 2 的 F 均值, III_j 为水平 3 的 F 均值, IV_j 为水平 4 的 F 均值, R_j 为极差

由表 2、表 4 知, 试验中第 6 号试验最好, 第 13 号试验次之; 各因素对综合指标影响次序为: $x_3 > x_5 > x_2 > x_4 > x_1$. 由于 X_1 有 2 个低谷, 故更满意的因素优化组合方案可在{x_3(3) x_5(3) x_2(2) x_1(4)}或{x_3(3) x_5(3) x_2(2) x_4(2) x_1(2)}附近探索产生.

2.4.2　试验理论优化分析　利用 SAS 的 NLP 过程, 解出使 F 为最小的满意解(可行解)为:

$X_1=2.279\,68$, $X_2=2.880\,64$, $X_3=2.651\,57$, $X_4=2.025\,00$, $X_5=2.687\,64$.

2.4.3　试验综合调优分析　安排对直观优化分析与理论优化分析的因素水平组合作调优模拟得表 5.

表 5　调优模拟试验观察分析1)

Tab. 5　Observation and analysis of optimizing simulation experiment

序号 No.	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	F'
1	4	2	3	2	3	0.147 42
2	3.5	2.5	2.7	2.5	2.5	0.452 80
3	2	2	3	2	3	0.668 39
4	2.5	2.5	2.7	2.5	2.5	0.095 96
5	2.279 7	2.880 6	2.651 7	2.025 0	2.687 6	0.079 00

1) 1 为推断处理方案 1, 2 为方案 1 的范围扩展, 3 为推断处理方案 2, 4 为方案 2 的范围扩展, 5 为理论满意方案; F' 为 F 调优值

由表 5 知, 试验中第 5 号试验最好, 第 4 号试验

?1994-2016 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

次之,故安排它们进行验证试验,结果表明还是第5号试验为优.以上所得的为试验编码值,将其换算为实际值,得出在设定条件下使热溶性膜综合性能较优的因素水平:干燥温度为37 ℃,ρ(石蜡)为3.761 g/L,魔芋胶与卡拉胶的比例为1.298,ρ(乳化剂)为1.094 g/L.φ(PEG－400)为3.375 mL/L.

由此进行理论计算,根据表2的二次回归模型可得上述条件下制成膜的水蒸气透过系数、抗张强度、伸长率和耐破度.同时根据上述配方制膜进行验证试验,验证试验的结果与理论值较接近,说明所得出的模型是可靠并满足优化设计的要求(表6).

表6 验证试验结果与理论响应值的比较[1)]

Tab.6 Comparison of theoretical response values with experimental results

项目 item	理论计算值 theoretical value	试验结果 experimental result	残差 residue	相对误差 relative error/%
WVP	0.117	0.121	0.004	3.3
TS	37.442	36.922	－0.52	1.4
E	11.594	10.87	－0.724	6.6
BS	6.105	6.40	0.295	4.8

1) *WVP* 为水蒸气透过系数,*TS* 为抗张强度,*E* 为伸长率,*BS* 为耐破度

3 结论

本文结合在研制热水溶性食品膜研究中的多因素多指标试验优化分析,提出以综合损失最小的择优准则确定试验因子“最佳”优化组合.较好地解决了多指标之间不可公度性和相互矛盾性以及相关关系对多指标综合评判的影响.在优化分析中,利用计算机把正交试验设计常规直观分析法与回归分析模型结合作调优模拟,得到理想的结果.研究表明,模型是可靠的;试验设计与调优分析方法是可行的.本模型与方法对一般的多目标决策的连续多因素多指标综合优化问题的研究有一定的参考价值.

参考文献:

[1] JOHNSON R A. Applied Multivariate Statistical Analysis[M]. Upper Saddle River: Prentice－Hall Inc, 1998. 458－50.

[2] 方开泰.实用多元统计分析[M].上海:华东师范大学出版社, 1989. 120－145.

[3] 方开泰,马长兴,立久坤.正交设计的最新发展和应用[J].数理统计与管理, 1999, 3: 43－51.

The Minimum Synthetic Loss Rule and Optimization Analysis in Multi－Index Uniformly Orthogonal Designs

ZHANG Guo-quan[1], LÜ Xiao-huan[1], YANG Jun[2]

(1 College of Sciences, South China Agric. Univ., Guangzhou 510642, China; 2 College of Food Science, South China Agric. Univ., Guangzhou 510642, China)

Abstract: The concept of index loss and regression model were introduced into multi－index experimental uniformly orthogonal designs. A synthetic multi－index loss model based on main components of responding loss variables was built. The model was applied to study the properties of hot water soluble edible film and obtain satisfactory technical coefficients and formulas.

Key words: loss; synthetic loss; edible film; uniformly orthogonal designs

【责任编辑 周志红】

?1994-2016 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net