

# 合成洗涤剂配方最佳化及其数学模型

周 镇 江

(化工系)

## 一、引 言

如何运用数学方法使洗涤剂配方最佳化,并由此建立适当的数学模型以达到控制和预测影响洗涤剂效果主要参数的目的,这是洗涤剂配方研究中非常重要和一直在探求的问题<sup>[1-5]</sup>。

本文运用试验设计法<sup>[6,7]</sup>和数学回归处理<sup>[8,9]</sup>,研究了该院研制的餐具液体洗涤剂<sup>[10]</sup>(1982年11月鉴定。1983年获轻工部颁发重大科技成果奖)配方的最佳化,并由此得到能运用于控制和预测餐具液体洗涤剂洗涤效果的主要指标——去污力的数学模型。

## 二、研究内容和结果分析

### 1. 配方试验

采用  $L_{16}(4^4 \times 2^3)$  多因素正交试验设计法取得下列试验结果(见表1)<sup>[10]</sup>

表1  $L_{16}(4^4 \times 2^3)$  试验结果\*

| No. | 组 |   |   |   | 分 |   |   | 去 污 力<br>(洗表面<br>皿 数) | 泡沫(毫米) |     |
|-----|---|---|---|---|---|---|---|-----------------------|--------|-----|
|     | A | B | C | D | E | F | G |                       | 当时     | 五分钟 |
| 1   | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 22.5                  | 134    | 131 |
| 2   | 1 | 2 | 2 | 2 | 1 | 2 | 2 | 22.9                  | 151    | 148 |
| 3   | 1 | 3 | 3 | 3 | 2 | 1 | 2 | 30.5                  | 145    | 143 |
| 4   | 1 | 4 | 4 | 4 | 2 | 2 | 1 | 35.5                  | 155    | 151 |
| 5   | 2 | 1 | 2 | 3 | 2 | 2 | 1 | 37.5                  | 151    | 148 |
| 6   | 2 | 2 | 1 | 4 | 2 | 1 | 2 | 36.5                  | 158    | 156 |
| 7   | 2 | 3 | 4 | 1 | 1 | 2 | 2 | 39.5                  | 152    | 149 |
| 8   | 2 | 4 | 3 | 2 | 1 | 1 | 1 | 38.5                  | 153    | 151 |
| 9   | 3 | 1 | 3 | 4 | 1 | 2 | 2 | 38.5                  | 153    | 152 |
| 10  | 3 | 2 | 4 | 3 | 1 | 1 | 1 | 39.5                  | 154    | 153 |
| 11  | 3 | 3 | 1 | 2 | 2 | 2 | 1 | 41.5                  | 164    | 160 |
| 12  | 3 | 4 | 2 | 1 | 2 | 1 | 2 | 43.5                  | 153    | 151 |
| 13  | 4 | 1 | 4 | 2 | 2 | 1 | 2 | 51.5                  | 149    | 148 |
| 14  | 4 | 2 | 3 | 1 | 2 | 2 | 1 | 52.5                  | 165    | 163 |
| 15  | 4 | 3 | 2 | 4 | 1 | 1 | 1 | 50.5                  | 161    | 159 |
| 16  | 4 | 4 | 1 | 3 | 1 | 2 | 2 | 50.5                  | 168    | 167 |

\*① 洗涤液浓度0.06%, 洗涤温度  $46 \pm 2^\circ\text{C}$

② 人造污垢制备和洗涤方法详见参考资料<sup>[10]</sup>

本文1984年11月12日收到。

## 2. 结果分析

## 1) 因子与效应

表 2

| 因子<br>No.   | A<br>$x_{1j}$ | B<br>$x_{2j}$ | C<br>$x_{3j}$ | D<br>$x_{4j}$ | E<br>$x_{5j}$ | F<br>$x_{6j}$ | G<br>$x_{7j}$ | 效<br>$y_j$         | 应<br>$y_j^2$ |
|-------------|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------|--------------------|--------------|
| 1           | 0             | 5.6           | 4             | 1             | 1             | 0             | 0.4           | 22.5               | 506.25       |
| 2           | 0             | 7.0           | 6             | 3             | 1             | 2             | 0.8           | 29.5               | 870.25       |
| 3           | 0             | 8.4           | 10            | 5             | 2             | 0             | 0.8           | 30.5               | 930.25       |
| 4           | 0             | 9.8           | 12            | 7             | 2             | 2             | 0.4           | 35.5               | 1260.25      |
| 5           | 5             | 5.6           | 6             | 5             | 2             | 2             | 0.4           | 37.5               | 1406.25      |
| 6           | 5             | 7.0           | 4             | 7             | 2             | 0             | 0.8           | 36.5               | 1332.25      |
| 7           | 5             | 8.4           | 12            | 1             | 1             | 2             | 0.8           | 39.5               | 1560.25      |
| 8           | 5             | 9.8           | 10            | 3             | 1             | 0             | 0.4           | 38.5               | 1482.25      |
| 9           | 10            | 5.6           | 10            | 7             | 1             | 2             | 0.8           | 38.5               | 1482.25      |
| 10          | 10            | 7.0           | 12            | 5             | 1             | 0             | 0.4           | 39.5               | 1560.25      |
| 11          | 10            | 8.4           | 4             | 3             | 2             | 2             | 0.4           | 41.5               | 1722.25      |
| 12          | 10            | 9.8           | 6             | 1             | 2             | 0             | 0.8           | 43.5               | 1892.25      |
| 13          | 15            | 5.6           | 12            | 3             | 2             | 0             | 0.8           | 51.5               | 2652.25      |
| 14          | 15            | 7.0           | 10            | 1             | 2             | 2             | 0.4           | 52.5               | 2756.25      |
| 15          | 15            | 8.4           | 6             | 7             | 1             | 0             | 0.4           | 50.5               | 2550.25      |
| 16          | 15            | 9.8           | 4             | 5             | 1             | 2             | 0.8           | 50.5               | 2550.25      |
| $\Sigma$    | 120           | 123.2         | 128           | 64            | 24            | 16            | 9.6           | 638                | 25514        |
| $\bar{x}_i$ | 7.5           | 7.7           | 8             | 4             | 1.5           | 1             | 0.6           | $\bar{y} = 39.875$ |              |
| $I_j$       | 118           | 150           | 151           | 158           | 309           | 313           | 318           |                    |              |
| $II_j$      | 152           | 158           | 161           | 161           | 329           | 325           | 320           |                    |              |
| $III_j$     | 163           | 162           | 160           | 158           |               |               |               |                    |              |
| $IV_j$      | 205           | 168           | 166           | 161           |               |               |               |                    |              |
| $S_j$       | 965.25        | 42.75         | 29.25         | 2.25          | 25            | 9             | 0.25          |                    |              |
| $\bar{S}_j$ | 321.75        | 14.25         | 9.75          | 0.75          | 25            | 9             | 0.25          |                    |              |

表 2 中,  $x_{ij}$  表示第  $j$  号试验第  $i$  个因子的取值 ( $i=1,2,\dots,7; j=1,2,\dots,16$ )。  $y_j$  表示第  $j$  号试验的效应。  $I_j$ 、 $II_j$ 、 $III_j$ 、 $IV_j$  分别为因子  $x_{ij}$  取一、二、三、四水平的各次试验的效应之和。  $S_j$  为诸因子各个不同水平引起的偏差平方和。  $\bar{S}_j$  为因子  $x_{ij}$  的平均偏差平方和。

2)  $S_e$  计算  $S_e$  为误差的偏差平方和。据表 2  $\bar{S}_j$  的计算结果,发现  $D$ 、 $F$  和  $G$  对效应  $y_j$  的影响较小(可视作空白列计算),故有

$$S_e = S_D + S_F + S_G = 2.25 + 9 + 0.25 = 11.50$$

并有误差的偏差平方和的自由度

$$f_e = (N_D - 1) + (N_F - 1) + (N_G - 1) = (4 - 1) + (2 - 1) + (2 - 1) = 5$$

式中:  $N_D$ 、 $N_F$ 、 $N_G$  分别为因子  $D$ 、 $F$ 、 $G$  的水平数。

3)  $F$  比和显著性检验 计算  $F$  比 目的是检验因子对效应(所考察的数字指标)的影响是否显著。

按  $F$  比 计算公式

$$F_{比} = \frac{S_i/f_i}{S_e/f_e}$$

式中:  $f_i$  为对应  $S_i$  的自由度

求得

$$F_A = \frac{S_A/f_A}{S_e/f_e} = \frac{965.25/3}{11.5/5} = 139.89$$

$$F_B = \frac{S_B/f_B}{S_e/f_e} = \frac{42.75/3}{11.5/5} = 6.2$$

$$F_C = \frac{S_C/f_C}{S_e/f_e} = \frac{29.25/3}{11.5/5} = 4.24$$

$$F_E = \frac{S_E/f_E}{S_e/f_e} = \frac{25/1}{11.5/5} = 10.87$$

查  $F$  分布表, 得

$$\begin{array}{ll} F_{0.1}(3, 5) = 3.62 & F_{0.1}(1, 5) = 4.06 \\ F_{0.05}(3, 5) = 5.41 & F_{0.05}(1, 5) = 6.61 \\ F_{0.01}(3, 5) = 12.06 & F_{0.01}(1, 5) = 16.26 \end{array}$$

以上显著性检验可归纳如表 3。

表 3 方差分析表

| 方差来源  | $S_i$  | $f$ | $\bar{S}_i$ | $F$    | 显 著 性 |
|-------|--------|-----|-------------|--------|-------|
| A     | 965.25 | 3   | 321.75      | 139.89 | * *   |
| B     | 42.75  | 3   | 14.25       | 6.2    | *     |
| C     | 29.25  | 3   | 9.75        | 4.24   | (*)   |
| E     | 25     | 1   | 25          | 10.87  | *     |
| $S_e$ | 11.5   | 5   | 2.3         |        | *     |

4) 结果分析和最优条件

- ①因子 A 以选取 4 水平为好, 影响高度显著
- ②因子 B 以选取 3 或 4 水平为好, 影响显著
- ③因子 C 以选取 2 或 3 或 4 水平为好, 影响不太大

④因子  $E$  以选取 2 水平为好, 影响显著

⑤因子  $D$  选取 1 或 2 水平都可, 无影响

⑥因子  $G$  选取 1 或 2 水平都可, 无影响

⑦因子  $F$  以选取 2 水平为好, 无影响

本试验结果, 得到最优化条件为

$$A_4B_3C_2D_2E_2F_2G_1 \text{ 或 } A_4B_4C_3D_1E_2F_2G_2$$

经实验多次验证, 上述优化条件是正确的。

### 三、数学模型的建立

#### 1. 有关数据整理

将表 2 中的  $x_{1j}$ 、 $x_{2j}$ 、 $x_{3j}$ 、 $x_{4j}$ 、 $x_{5j}$ 、 $x_{6j}$ 、 $x_{7j}$ 、 $y_j$  改写成  $x_1$ 、 $x_2$ 、 $x_3$ 、 $x_4$ 、 $x_5$ 、 $x_6$ 、 $x_7$  和  $y$ , 并求出下列表 4、表 5 和表 6 中诸值。

表 4

| No.      | $x_1y$ | $x_2y$ | $x_3y$ | $x_4y$ | $x_5y$ | $x_6y$ | $x_7y$ | $y^2$   |
|----------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|---------|
| 1        | 0      | 126    | 90     | 22.5   | 22.5   | 0      | 9      | 506.25  |
| 2        | 0      | 206.5  | 177    | 88.5   | 29.5   | 59     | 23.6   | 870.25  |
| 3        | 0      | 256.2  | 305    | 152.5  | 61     | 0      | 24.4   | 930.25  |
| 4        | 0      | 347.9  | 426    | 248.5  | 71     | 71     | 14.2   | 1260.25 |
| 5        | 187.5  | 210    | 225    | 187.5  | 75     | 75     | 15     | 1406.25 |
| 6        | 182.5  | 255.5  | 146    | 255.5  | 73     | 0      | 29.2   | 1332.25 |
| 7        | 197.5  | 331.8  | 474    | 39.5   | 39.5   | 79     | 31.6   | 1560.25 |
| 8        | 192.5  | 377.3  | 385    | 115.5  | 38.5   | 0      | 15.4   | 1482.25 |
| 9        | 385    | 215.6  | 385    | 269.5  | 38.5   | 77     | 30.8   | 1482.25 |
| 10       | 395    | 276.5  | 474    | 197.5  | 39.5   | 0      | 15.8   | 1560.25 |
| 11       | 415    | 348.6  | 166    | 124.5  | 83     | 83     | 16.6   | 1722.25 |
| 12       | 435    | 426.3  | 261    | 43.5   | 87     | 0      | 34.8   | 1892.25 |
| 13       | 772.5  | 288.4  | 618    | 154.5  | 103    | 0      | 41.2   | 2652.25 |
| 14       | 787.5  | 367.5  | 525    | 52.5   | 105    | 105    | 21     | 2756.25 |
| 15       | 757.5  | 424.2  | 303    | 353.5  | 50.5   | 0      | 20.2   | 2550.25 |
| 16       | 757.5  | 494.9  | 202    | 252.5  | 50.5   | 101    | 40.4   | 2550.25 |
| $\Sigma$ | 5465   | 4953.2 | 5162   | 2558   | 967    | 650    | 383.2  | 26514   |

表 5

| No.      | $x_1^2$ | $x_2^2$ | $x_3^2$ | $x_4^2$ | $x_5^2$ | $x_6^2$ | $x_7^2$ | $x_1x_2$ | $x_1x_3$ | $x_1x_4$ | $x_1x_5$ | $x_1x_6$ | $x_1x_7$ |
|----------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|
| 1        | 0       | 31.36   | 16      | 1       | 1       | 0       | 0.16    | 0        | 0        | 0        | 0        | 0        | 0        |
| 2        | 0       | 49      | 36      | 9       | 1       | 4       | 0.64    | 0        | 0        | 0        | 0        | 0        | 0        |
| 3        | 0       | 70.56   | 100     | 25      | 4       | 0       | 0.64    | 0        | 0        | 0        | 0        | 0        | 0        |
| 4        | 0       | 96.04   | 144     | 49      | 4       | 4       | 0.16    | 0        | 0        | 0        | 0        | 0        | 0        |
| 5        | 25      | 31.36   | 36      | 25      | 4       | 4       | 0.16    | 28       | 30       | 25       | 10       | 10       | 2        |
| 6        | 25      | 49      | 16      | 49      | 4       | 0       | 0.64    | 35       | 20       | 35       | 10       | 0        | 4        |
| 7        | 25      | 70.56   | 144     | 1       | 1       | 4       | 0.64    | 42       | 60       | 5        | 5        | 10       | 4        |
| 8        | 25      | 96.04   | 100     | 9       | 1       | 0       | 0.16    | 49       | 50       | 15       | 5        | 0        | 2        |
| 9        | 100     | 31.36   | 100     | 49      | 1       | 4       | 0.64    | 56       | 100      | 70       | 10       | 20       | 8        |
| 10       | 100     | 49      | 144     | 25      | 1       | 0       | 0.16    | 70       | 120      | 50       | 10       | 0        | 4        |
| 11       | 100     | 70.56   | 16      | 9       | 4       | 4       | 0.16    | 84       | 40       | 30       | 20       | 20       | 4        |
| 12       | 100     | 96.04   | 36      | 1       | 4       | 0       | 0.64    | 98       | 60       | 10       | 20       | 0        | 8        |
| 13       | 225     | 31.36   | 144     | 9       | 4       | 0       | 9.64    | 84       | 180      | 45       | 30       | 0        | 12       |
| 14       | 225     | 49      | 100     | 1       | 4       | 4       | 0.16    | 105      | 150      | 15       | 30       | 30       | 6        |
| 15       | 225     | 70.56   | 36      | 49      | 1       | 0       | 0.16    | 126      | 90       | 105      | 15       | 0        | 6        |
| 16       | 225     | 96.04   | 16      | 25      | 1       | 4       | 0.64    | 147      | 60       | 75       | 15       | 30       | 12       |
| $\Sigma$ | 1400    | 987.84  | 1184    | 336     | 40      | 32      | 6.4     | 924      | 960      | 480      | 180      | 120      | 72       |

表 6

| No.      | $x_2x_3$ | $x_2x_4$ | $x_2x_5$ | $x_2x_6$ | $x_2x_7$ | $x_3x_4$ | $x_3x_5$ | $x_3x_6$ | $x_3x_7$ | $x_4x_5$ | $x_4x_6$ | $x_4x_7$ | $x_5x_6$ | $x_5x_7$ | $x_6x_7$ |
|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|
| 1        | 22.4     | 5.6      | 5.6      | 0        | 2.24     | 4        | 4        | 0        | 1.6      | 1        | 0        | 0.4      | 0        | 0.4      | 0        |
| 2        | 42       | 21       | 7        | 14       | 5.6      | 18       | 6        | 12       | 4.8      | 3        | 6        | 2.4      | 2        | 0.8      | 1.6      |
| 3        | 84       | 42       | 16.8     | 0        | 6.72     | 50       | 20       | 0        | 8        | 10       | 0        | 4        | 0        | 1.6      | 0        |
| 4        | 117.6    | 68.6     | 19.6     | 19.6     | 3.92     | 84       | 24       | 24       | 4.8      | 14       | 14       | 2.8      | 4        | 0.8      | 0.8      |
| 5        | 33.6     | 28       | 11.2     | 11.2     | 2.24     | 30       | 12       | 12       | 2.4      | 10       | 10       | 2        | 4        | 0.8      | 0.8      |
| 6        | 28       | 49       | 14       | 0        | 5.6      | 28       | 8        | 0        | 3.2      | 14       | 0        | 5.6      | 0        | 1.6      | 0        |
| 7        | 100.8    | 8.4      | 8.4      | 16.8     | 6.72     | 12       | 12       | 24       | 9.6      | 1        | 2        | 0.8      | 2        | 0.8      | 1.6      |
| 8        | 98       | 29.4     | 9.8      | 0        | 3.92     | 30       | 10       | 0        | 4.6      | 3        | 0        | 1.2      | 0        | 0.4      | 0        |
| 9        | 56       | 39.2     | 5.6      | 11.2     | 4.48     | 70       | 10       | 20       | 8        | 7        | 14       | 5.6      | 2        | 0.8      | 1.6      |
| 10       | 84       | 35       | 7        | 0        | 2.8      | 60       | 12       | 0        | 4.8      | 5        | 0        | 2        | 0        | 0.4      | 0        |
| 11       | 33.6     | 25.2     | 16.8     | 16.8     | 3.36     | 12       | 8        | 8        | 1.6      | 6        | 6        | 1.2      | 4        | 0.8      | 0.8      |
| 12       | 58.5     | 9.8      | 19.6     | 0        | 7.84     | 6        | 12       | 0        | 4.8      | 2        | 0        | 0.8      | 0        | 1.6      | 0        |
| 13       | 67.2     | 16.8     | 11.2     | 0        | 4.48     | 36       | 24       | 0        | 9.6      | 6        | 0        | 2.4      | 0        | 1.6      | 0        |
| 14       | 70       | 7        | 14       | 14       | 2.8      | 10       | 20       | 20       | 4        | 2        | 2        | 0.4      | 4        | 0.8      | 0.8      |
| 15       | 50.4     | 58.8     | 8.4      | 0        | 3.36     | 42       | 6        | 0        | 2.4      | 7        | 0        | 2.8      | 0        | 0.4      | 0        |
| 16       | 39.2     | 49       | 9.8      | 19.6     | 7.84     | 20       | 4        | 8        | 3.2      | 5        | 10       | 4        | 2        | 0.8      | 1.6      |
| $\Sigma$ | 985.6    | 492.8    | 184.8    | 123.2    | 73.92    | 512      | 192      | 128      | 76.8     | 96       | 64       | 38.4     | 24       | 144      | 9.6      |

## 2. 需求的多元线性回归方程

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_4x_4 + b_5x_5 + b_6x_6 + b_7x_7$$

1)  $b_i$  应满足的方程组 ( $i = 1, 2, \dots, 7$ )

$$L_{11}b_1 + L_{12}b_2 + L_{13}b_3 + L_{14}b_4 + L_{15}b_5 + L_{16}b_6 + L_{17}b_7 = L_{01}$$

$$L_{21}b_1 + L_{22}b_2 + L_{23}b_3 + L_{24}b_4 + L_{25}b_5 + L_{26}b_6 + L_{27}b_7 = L_{02}$$

.....

$$L_{71}b_1 + L_{72}b_2 + L_{73}b_3 + L_{74}b_4 + L_{75}b_5 + L_{76}b_6 + L_{77}b_7 = L_{07}$$

2) 求系数  $b_i$  ( $i = 1, 2, \dots, 7$ )

①公式

$$L_{00} = \sum_{i=1}^n y_i^2 - \frac{1}{n} \left[ \sum_{i=1}^n y_i \right]^2$$

式中:  $j = 1, 2, 3, \dots, 16$

将前面有关数值代入, 得

$$L_{00} = 26514 - \frac{1}{16} \times 638^2 = \frac{1}{16} \times 17180$$

②公式

$$L_{0q} = \sum_{i=1}^n x_{qi}y_i - \frac{1}{n} \left( \sum_{i=1}^n x_{qi} \right) \left( \sum_{i=1}^n y_i \right)$$

式中:

$$q = 1, 2, \dots, 7; j = 1, 2, \dots, 16$$

以求  $L_{01}$  为例, 将前面有关数值代入, 得

$$L_{01} = 5465 - \frac{1}{16} (120)(638) = \frac{1}{16} \times 10880$$

余类推。可得

$$L_{02} = \frac{1}{16} \times 649.6, \quad L_{03} = \frac{1}{16} \times 928$$

$$L_{04} = \frac{1}{16} \times 96, \quad L_{05} = \frac{1}{16} \times 160$$

$$L_{06} = \frac{1}{16} \times 192, \quad L_{07} = \frac{1}{16} \times 6.4$$

③公式

$$L_{pq} = \sum_{i=1}^n x_{pi}x_{qi} - \frac{1}{n} \left( \sum_{i=1}^n x_{pi} \right) \left( \sum_{i=1}^n x_{qi} \right)$$

式中:  $p, q = 1, 2, \dots, 7$

$j = 1, 2, \dots, 16$

以求  $L_{11}$  为例, 将前面有关数值代入, 得

$$L_{11} = 1400 - \frac{1}{16} (120)(120) = \frac{1}{16} \times 8000$$

余类推。可得

$$L_{22} = \frac{1}{16} \times 627.2, \quad L_{33} = \frac{1}{16} \times 2560$$

$$L_{44} = \frac{1}{16} \times 1280, \quad L_{55} = \frac{1}{16} \times 64$$

$$L_{66} = \frac{1}{16} \times 256, \quad L_{77} = \frac{1}{16} \times 10.24$$

同理, 可得  $L_{pq} = L_{qp} = 0$

式中: 当

$$p = 1 \text{ 时}, q = 2, 3, \dots, 7;$$

$$p = 2 \text{ 时}, q = 3, 4, \dots, 7;$$

$$p = 3 \text{ 时}, q = 4, 5, \dots, 7;$$

$$p = 4 \text{ 时}, q = 5, 6, 7;$$

$$p = 5 \text{ 时}, q = 6, 7.$$

将各系数代入方程组, 得到下列方程组

$$L_{11}b_1 = L_{01}, \quad L_{55}b_5 = L_{05}$$

$$L_{22}b_2 = L_{02}, \quad L_{66}b_6 = L_{06}$$

$$L_{33}b_3 = L_{03}, \quad L_{77}b_7 = L_{07}$$

$$L_{44}b_4 = L_{04},$$

从而得到  $b_i (i = 1, 2, \dots, 7)$

$$b_1 = \frac{L_{01}}{L_{11}} = 1.36, \quad b_2 = \frac{L_{02}}{L_{22}} = 1.036$$

$$b_3 = \frac{L_{03}}{L_{33}} = 0.362, \quad b_4 = \frac{L_{04}}{L_{44}} = 0.075$$

$$b_5 = \frac{L_{05}}{L_{55}} = 2.5, \quad b_6 = \frac{L_{06}}{L_{66}} = 0.75$$

$$b_7 = \frac{L_{07}}{L_{77}} = 0.625$$

3) 求常数  $b_0$ .

公式

$$b_0 = \bar{y}_i - \sum_{p=1}^k \bar{b}_p \bar{x}_p$$

式中:

$$p = 1, 2, \dots, 7$$

已知

$$\bar{y} = 39.875$$

$$\bar{x}_1 = 7.5, \quad \bar{x}_2 = 7.7, \quad \bar{x}_3 = 8, \quad \bar{x}_4 = 4$$

$$\bar{x}_5 = 1.5, \quad \bar{x}_6 = 1, \quad \bar{x}_7 = 0.6$$

代入上式, 得

$$b_0 = \bar{y} - b_1 \bar{x}_1 - b_2 \bar{x}_2 - b_3 \bar{x}_3 - b_4 \bar{x}_4 - b_5 \bar{x}_5 - b_6 \bar{x}_6 - b_7 \bar{x}_7 = 13.627$$

## 4) 方程回归

将  $b_0, b_1, \dots, b_7$  诸值代回回归方程, 得到

$$y = 13.627 + 1.36x_1 + 1.036x_2 + 0.362x_3 + 0.075x_4 + 2.5x_5 + 0.75x_6 + 0.625x_7$$

此即洗涤效果的主要参数——去污力与配方中各组分之间的线性关系。式中,  $y$  为去污力值, 单位为洗表面皿数;  $x_i (i=1, 2, \dots, 7)$  为配方中组分, 单位为重量%。

## 3. 回归误差和 F 检验

## 1) 有关数据整理

表 7

| No.                                                 | $\frac{x_{1j} - \bar{x}_1}{x_{1j}}$                                                                | $\frac{x_{2j} - \bar{x}_2}{x_{2j}}$ | $\frac{x_{3j} - \bar{x}_3}{x_{3j}}$ | $\frac{x_{4j} - \bar{x}_4}{x_{4j}}$ | $\frac{x_{5j} - \bar{x}_5}{x_{5j}}$ | $\frac{x_{6j} - \bar{x}_6}{x_{6j}}$ | $\frac{x_{7j} - \bar{x}_7}{x_{7j}}$ | $\hat{y}_j$ |
|-----------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------|-------------------------------------|-------------------------------------|-------------------------------------|-------------------------------------|-------------------------------------|-------------|
| 1                                                   | -7.5                                                                                               | -2.1                                | -4                                  | -3                                  | -0.5                                | -1                                  | -0.2                                | 23.853      |
| 2                                                   | -7.5                                                                                               | -0.7                                | -2                                  | -1                                  | -0.5                                | 1                                   | 0.2                                 | 27.776      |
| 3                                                   | -7.5                                                                                               | 0.7                                 | 2                                   | 1                                   | 0.5                                 | -1                                  | 0.2                                 | 31.824      |
| 4                                                   | -7.5                                                                                               | 2.1                                 | 4                                   | 3                                   | 0.5                                 | 1                                   | -0.2                                | 35.4        |
| 5                                                   | -2.5                                                                                               | -2.1                                | -2                                  | 1                                   | 0.5                                 | 1                                   | -0.2                                | 35.526      |
| 6                                                   | -2.5                                                                                               | -0.7                                | -4                                  | 3                                   | 0.5                                 | -1                                  | 0.2                                 | 35.125      |
| 7                                                   | -2.5                                                                                               | 0.7                                 | 4                                   | -3                                  | -0.5                                | 1                                   | 0.2                                 | 38.048      |
| 8                                                   | -2.5                                                                                               | 2.1                                 | 2                                   | -1                                  | -0.5                                | -1                                  | -0.2                                | 37.175      |
| 9                                                   | 2.5                                                                                                | -2.1                                | 2                                   | 3                                   | -0.5                                | 1                                   | 0.2                                 | 41.674      |
| 10                                                  | 2.5                                                                                                | -0.7                                | 4                                   | 1                                   | -0.5                                | -1                                  | -0.2                                | 41.948      |
| 11                                                  | 2.5                                                                                                | 0.7                                 | -4                                  | -1                                  | 0.5                                 | 1                                   | -0.2                                | 44.352      |
| 12                                                  | 2.5                                                                                                | 2.1                                 | -2                                  | -3                                  | 0.5                                 | -1                                  | 0.2                                 | 45.127      |
| 13                                                  | 7.5                                                                                                | -2.1                                | 4                                   | -1                                  | 0.5                                 | -1                                  | 0.2                                 | 49.898      |
| 14                                                  | 7.5                                                                                                | -0.7                                | 2                                   | -3                                  | 0.5                                 | 1                                   | -0.2                                | 51.724      |
| 15                                                  | 7.5                                                                                                | 0.7                                 | -2                                  | 3                                   | -0.5                                | -1                                  | -0.2                                | 48.176      |
| 16                                                  | 7.5                                                                                                | 2.1                                 | -4                                  | 1                                   | -0.5                                | 1                                   | 0.2                                 | 50.503      |
| $S_{ii} = \sum_{j=1}^{16} (x_{ij} - \bar{x}_i)^2$   | 500                                                                                                | 39.2                                | 160                                 | 80                                  | 4                                   | 16                                  | 0.64                                |             |
| $S_{iy} = \sum_{j=1}^{16} (x_{ij} - \bar{x}_i) y_j$ | 680                                                                                                | 40.6                                | 58                                  | 6                                   | 10                                  | 12                                  | 0.4                                 |             |
| $\hat{b}_i$                                         | $\hat{b}_1 = 1.36$                                                                                 | $\hat{b}_2 = 1.036$                 | $\hat{b}_3 = 0.362$                 | $\hat{b}_4 = 0.075$                 | $\hat{b}_5 = 2.5$                   | $\hat{b}_6 = 0.75$                  | $\hat{b}_7 = 0.625$                 |             |
| $\hat{b}_0'$                                        | $\hat{b}_0' = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n y_j = \frac{1}{16} \times 638 = 39.875 (j=1, 2, \dots, 16)$ |                                     |                                     |                                     |                                     |                                     |                                     |             |

表7中,  $S_{ii}$  为因子  $x_i$  的偏差平方和。  $S_{iy}$  为因子  $x_i$  和效应  $y$  交叉乘积的偏差总和。  $\hat{y}_i$  为相应各  $x_i (i=1, 2, \dots, 7)$  因子的回归值。  $\hat{b}_i$  为斜率最小平方估计量。  $\hat{b}_0'$  为截距最小平方估计量。

## 2) $SS_E$ 计算和 $F$ 检验

### ① $SS_R$ 计算

$$\begin{aligned} SS_R (\text{回归偏差平方和}) &= \sum_{i=1}^n \hat{b}_i S_{iy} \\ &= 1.36 \times 680 + 1.036 \times 40.6 + 0.362 \times 58 \\ &\quad + 0.075 \times 6 + 2.5 \times 10 + 0.75 \times 12 + 0.625 \times 0.4 \\ &= 1022.56 \end{aligned}$$

$f_R$  (对应  $SS_R$  的自由度) = 7

### ② $S_{yy}$ 计算

$$\begin{aligned} S_{yy} (y \text{ 的偏差平方和}) &= \sum_{i=1}^n y_i^2 - \frac{\left( \sum_{i=1}^n y_i \right)^2}{n} \\ &= 26514 - \frac{638^2}{16} = 1073.75 \end{aligned}$$

$f_y$  (对应  $S_{yy}$  的自由度) = 15

### ③ $SS_E$ 计算

$$\begin{aligned} SS_E (\text{回归误差的偏差平方和}) &= S_{yy} - SS_R \\ &= 1073.75 - 1022.56 = 51.19 \end{aligned}$$

$f_E$  (对应  $SS_E$  的自由度) = 8

### ④ $F_0$ 计算

$$F_0 = \frac{MS_R}{MS_E} = \frac{SS_R/f_R}{SS_E/f_E} = \frac{1022.56/7}{51.19/8} = 22.83$$

查表  $F_{0.01}(7, 8) = 6.19 < F_0$

### ⑤ $F_{O(3)}$ 计算

$$F_{O(3)} = \frac{SS_{R(3)}/f_3}{SS_E/f_E} = \frac{\hat{b}_3 \cdot S_{iy(3)}/f_3}{SS_E/f_E} = \frac{0.362 \times 58/1}{51.19/8} = 3.28$$

查表

$$F_{0.01}(1, 8) = 11.26 > F_{O(3)}$$

$$F_{0.05}(1, 8) = 5.32 > F_{O(3)}$$

$$F_{0.1}(1, 8) = 3.46 > F_{O(3)}$$

$$F_{0.25}(1, 8) = 1.54 < F_{O(3)}$$

### ⑥ $F_{O(4,6,7)}$ 计算

$$F_{O(4,6,7)} = \frac{[SS_{R(4)} + SS_{R(6)} + SS_{R(7)}]/(f_4 + f_6 + f_7)}{SS_E/f} \\ = \frac{(0.075 \times 6 + 0.75 \times 12 + 0.625 \times 0.4)/(1+1+1)}{51.19/8} = 0.506$$

查表  $F_{0.1}(3, 8) = 2.92 > F_{O(4,6,7)}$

$F_{0.25}(3,8) = 1.67 > F_{O(4,6,7)}$

将上面计算结果列入方差分析表(见表8)。

表8 多元线性回归方程显著性的方差分析表

| 方 差 来 源                                      | 自由度 | 均 方                    | F                      | 显著性 |
|----------------------------------------------|-----|------------------------|------------------------|-----|
| 回归偏差平方和, $SS_R = 1022.56$                    | 7   | $MS_R = 146.08$        | $F_O = 22.83$          | * * |
| 因子 $x_3$ , $SS_{R(3)} = 21.0$                | 1   | $MS_{R(3)} = 21.0$     | $F_{O(3)} = 3.28$      |     |
| 因子 $x_4 + x_6 + x_7$ , $SS_{R(4,6,7)} = 9.7$ | 3   | $MS_{R(4,6,7)} = 3.23$ | $F_{O(4,6,7)} = 0.506$ |     |
| 回归误差平方和, $SS_E = 51.19$                      | 8   | $MS_E = 6.40$          |                        |     |
| 总偏差平方和, $S_{yy} = 1073.75$                   | 15  |                        |                        |     |

检验结果, 因子  $x_4$ 、 $x_6$ 、 $x_7$  的对应系数  $\hat{b}_4$ 、 $\hat{b}_6$ 、 $\hat{b}_7$  对结果无影响。从而得到  $y$  与  $x$  之间的线性关系为

$$y = 13.627 + 1.36x_1 + 1.036x_2 + 0.362x_3 + 2.5x_5$$

#### 4、预测和控制用的回归方程

剩余离差计算式

$$S_y = \sqrt{\frac{Q}{N-K-1}} = \sqrt{\frac{Q}{f_E}}$$

$$Q = L_{00} - U, \quad U = \sum_{p=1}^k b_p L_{0p}$$

$$\therefore U = \sum_{p=1}^7 b_p L_{0p}$$

$$= b_1 L_{01} + b_2 L_{02} + b_3 L_{03} + b_4 L_{04} + b_5 L_{05} + b_6 L_{06} + b_7 L_{07}$$

由于因子  $x_4$ 、 $x_6$ 、 $x_7$  的对应系数对结果无影响, 故有

$$U = b_1 L_{01} + b_2 L_{02} + b_3 L_{03} + b_5 L_{05}$$

$$= 1.36 \times \frac{1}{16} \times 10880 + 1.036 \times \frac{1}{16} \times 649.6$$

$$+ 0.326 \times \frac{1}{16} \times 928 + 2.5 \times \frac{1}{16} \times 160 = 1010.77$$

代入, 得

$$Q = L_{00} - U = \frac{1}{16} \times 17180 - 1010.77 = 62.98$$

故得

$$S_y = \sqrt{\frac{Q}{f_E}} = \sqrt{\frac{62.98}{8}} = 2.81$$

因此, 上述回归方程用于预测和控制时应为:

$$y = 13.627 + 1.36x_1 + 1.636x_2 + 0.362x_3 + 2.5x_5 \pm 2.81$$

#### 四、模型检验

上述得到的回归方程, 必须通过实验检验, 以考察方程的正确程度。试验是在表2的基础上进行的。共进行了11次试验, 结果见表9<sup>[10]</sup>。

表9

| 因素<br>No. | 配 方 组 分 |       |       |       |       |       |       | 去污力 $y$<br>(洗表面皿数) |
|-----------|---------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|--------------------|
|           | $x_1$   | $x_2$ | $x_3$ | $x_4$ | $x_5$ | $x_6$ | $x_7$ |                    |
| 1         | 5       | 5.6   | 6     | 1     | 2     | 2     | 0.8   | 36.5               |
| 2         | 5       | 7.0   | 4     | 3     | 2     | 2     | 0.8   | 36.5               |
| 3         | 10      | 8.4   | 4     | 3     | 2     | 2     | 0.8   | 46.5               |
| 4         | 10      | 9.8   | 6     | 1     | 2     | 2     | 0.8   | 47.5               |
| 5         | 15      | 9.8   | 4     | 5     | 1     | 2     | 0.8   | 49.5               |
| 6         | 15      | 8.4   | 4     | 3     | 1     | 2     | 0.8   | 48.5               |
| 7         | 15      | 7.0   | 4     | 3     | 2     | 2     | 0.8   | 51.5               |
| 8         | 15      | 5.6   | 4     | 3     | 2     | 2     | 0.8   | 48.5               |
| 9         | 15      | 8.4   | 4     | 5     | 2     | 2     | 0.8   | 54.5               |
| 10        | 15      | 7.0   | 4     | 5     | 2     | 2     | 0.8   | 52.5               |
| 11        | 15      | 5.6   | 4     | 5     | 2     | 2     | 0.8   | 52.5               |

根据所得回归方程, 将表中  $x_1, x_2, \dots, x_7$  诸值代入, 即可计算  $y$  值。以1号试验为例。 $y$  值的计算如下。已知回归方程(含全部因子)为:

$$y = 13.627 + 1.36x_1 + 1.036x_2 + 0.362x_3 + 0.075x_4 + 2.5x_5 + 0.75x_6 + 0.625x_7$$

将  $x_1 = 5, x_2 = 5.6, x_3 = 6, x_4 = 1, x_5 = 2, x_6 = 2, x_7 = 0.8$

诸值代入上式, 则

$$y = 13.627 + 1.36 \times 5 + 1.036 \times 5.6 + 0.362 \times 6 + 0.075 \times 1 + 2.5 \times 2 + 0.75 \times 2 + 0.625 \times 0.8 = 35.47$$

若将上面  $x_i$  诸值代入最优化回归方程,

则  $y = 13.627 + 1.37 \times 5 + 1.036 \times 5.6 + 0.36 \times 6 + 2.5 \times 2 = 33.4$

其余试验类此计算, 其结果列入表10。

表中,  $y$  全为按含所有因子的回归方程计算的结果。 $y$  优为按最优化的回归方程计算的结果。由表中数据可知, 根据“平均差值 =  $y$  实 -  $y$  全”, 数值为 +1.2[块表面皿], 表明按回归方程的计算值与实验值相差很小, 证明此回归方程是正确的。又从“平均差值 =  $y$  全 -  $y$  优”, 数值为 +2.25[块表面皿], 同用于预测和控制的回归方程比较, 其误差数值为  $\pm 2.81$  [块表面皿], 平均差值在误差范围内, 这也说明该方程有足够的精确度。

#### 五、结 论

1) 运用试验设计法和数学回归得到餐具液体洗涤剂配方组成最优化的数学模型(对去污力的效应)为:

表 10

| No.     | 按回归方程计算结果 |         | 差 值<br>( $y_{全} - y_{优}$ ) | 实 验 结 果<br>$y_{实}$ | 差 值<br>( $y_{实} - y_{全}$ ) |
|---------|-----------|---------|----------------------------|--------------------|----------------------------|
|         | $y_{全}$   | $y_{优}$ |                            |                    |                            |
| 1       | 35.47     | 33.4    | +2.07                      | 36.5               | +1.03                      |
| 2       | 36.35     | 34.12   | +2.23                      | 36.5               | +0.15                      |
| 3       | 44.60     | 42.38   | +2.22                      | 46.5               | +1.90                      |
| 4       | 46.63     | 44.55   | +2.08                      | 47.5               | +0.87                      |
| 5       | 50.50     | 48.13   | +2.37                      | 49.5               | -1.00                      |
| 6       | 48.90     | 46.68   | +2.22                      | 48.5               | -0.40                      |
| 7       | 49.95     | 47.73   | +2.22                      | 51.5               | +1.55                      |
| 8       | 48.50     | 46.28   | +2.22                      | 48.5               | ±0.00                      |
| 9       | 51.55     | 49.18   | +2.37                      | 54.5               | +2.95                      |
| 10      | 50.10     | 47.73   | +2.37                      | 52.5               | +2.40                      |
| 11      | 48.65     | 46.28   | +2.37                      | 52.5               | +3.80                      |
| 平 均 差 值 |           |         | +2.25                      | 平均差值               | +1.20                      |

$$y = 13.627 + 1.36x_1 + 1.036x_2 + 0.362x_3 + 2.5x_5$$

上述回归方程,用于预测和控制,则应为:

$$y = 13.627 + 1.36x_1 + 1.036x_2 + 0.362x_3 + 2.5x_5 \pm 2.81$$

2) 方差分析证明,因子  $D$ 、 $F$ 、 $G$  对效应(去污力)无甚影响。诚然,  $D$  为配方中的泡沫增效剂,  $F$  为增溶剂,  $G$  为增稠剂,它们对去污力不是主要因素。

3) 由回归方程得到,影响去污力的主要因子为  $A$ 、 $B$ 、 $C$ 、 $E$ ,理论与实践表明,它们确是配方的主剂,共同对洗涤效果产生积极的协同效应。

4) 通过实验验证,11次试验的去污力的平均差值(实验值—计算值)为1.2(块表面皿)。表明所得到的回归方程精确度是较高的。

本文在写作过程中,得到我院费荣昌、童有勇、曹传书、胡惠良老师的帮助,谨此致谢。

#### 参 考 文 献

- [1] Иончев Х. А. ..., Химия и технол., Топл и мас., 1976, No.7, 22—25
- [2] Седых Л. Г., Ж. прикл. хим., 1978, No.1, 199—200
- [3] Колесникова Р. В. ..., Нефтеп. и нефтех., 1977, No.4, 38—39
- [4] Tenside detergents, 1977, No.4, 217—221; 或日用化学工业译丛 1979年3期
- [5] James M. Huggins, Soap & Chem. Spec., 1967, No.9, 108—119
- [6] 中国科学院数学研究所,《正交试验设计》,1973
- [7] 上海人民出版社,《正交试验设计法》,1975
- [8] 《正交设计法》,北京大学数学力学系概率统计组编,石油工业出版社,1975
- [9] Douglas C. Montgomery, Design and analysis of experiments, Wiley, 1976
- [10] 无锡轻工业学院,周镇江等,专用洗涤剂:餐具液体洗涤剂之研究(F型系列产品),1982.9

85029

THE ELEMENTARY BALANCE in the PRODUCTION of ERYTHROMYCIN «Journal of the Wuxi Institute of Light Industry», Vol.4, No.4, 1985

KEYWORDS Erythromycin, The elementary balance.

In this paper, the mass flow in the process of erythromycin production can be elemented using the elementary balance method, and the mathematical model of quantitative analysis of mass flow is established. The method for quantitative study of mass flow is the fermentation factories has been tested. The system for quantitative measurement of the relationships between elements, mass flow, organic substances and COD was introduced. Both of the drainage coefficient of various lost substance and the ratio of carbon and nitrogen utilization, which will provide the sound basis for the technological reform and improvement of the economic and environmental availabilities, have been established.

Author: An Qinghan, Yu Hang, Lu Tunjia et al.

85027

RESEARCH of PROTECTING COLOUR and PROCESSING TECHNOLOGY in PLUP PEAR JUICE —CHARACTERISTICS of POLYPHENOLASE in ZIMU PEAR were STUDIED. «Journal of the Wuxi Institute of Light Industry», Vol.4, No.4, 1985

KEYWORDS Zimu Pear, Polyphenoloxidase, Acetone power.

This report describes the polyphenoloxidase made of acetone powder from Zimu pears and extracted by buffer in return. Employing the wazbwy respirometer or spectrophometer, the pH, the temrerature, the enzyre concentration and the substrat concentration were investigated with polyphenoloxidase actively for the optimum pH, the optimum temperature, the Yman and the Km respectively, The thermodynamic stability of the enzyme systems was studied. Fmally, the properties of inhibitor of SO<sub>2</sub>, Vit C to the polyphenolas were introduced in the paper.

Author: Yang Fangqi, Fei Jian, Yang Jian et al

85030

OPTIMIZATION of SYNTHETIC DETERGENT FORMULATIONS and THEIR MATHEMATICAL MODEL «Journal of the Wuxi Institute of Light Industry», Vol.4, No.4, 1985

KEYWORDS Optimization, Liquid detergent composition, Experimental design, Regression analysis, Mathematical model, Variance analysis.

The optimum conditions of liquid detergent composition are obtained by employing experimental design and variance analysis in this paper. A mathematical model for the forecasting and controlling of the mutual correlation between major washing efficiency (detergency performance) and their individual constituents has been established through mathematical regression analysis treatment.

Author: Zhou Zhenjiang

85028

STUDIES of KEEPING RICE FRESH «Journal of the Wuxi Institute of Light Industry», Vol.4, No.4, 1985

KEYWORDS Rice storage, Freshness, Activestaling, Hydrogen sulfide content.

This paper discussed the soundness of substituting the fatty acid content with H<sub>2</sub>S content of rice as an indicator for rice freshness. According to similar experiments, that the pearly clean rice has a batter rice freshness storage property than St. I rice on the market have been proved.

Author: Zhu Bixian, Lu Jizhang

85027

# 带肉梨汁护色及加工工艺的研究(I)——子母梨中多酚氧化酶特性的

研究《无锡轻工业学院学报》1985年, 第四卷, 第四期

**关键词** 子母梨, 多酚氧化酶, 丙酮粉。

**摘要** 本文用丙酮粉法从子母梨组织中提取多酚氧化酶, 经萃取后, 分别用量压法或分光光度法测定了 pH、温度、酶浓度、底物浓度对多酚氧化酶酶活力的关系, 分别求出最适 pH 值、最适温度、 $V_{max}$  和  $K_m$ ; 测定了该酶体系的热稳定性情况; 初步研究了  $SO_2$  和 Vit C 对多酚氧化酶的抑制作用。

作者: 杨方琪, 贾健, 杨健等

85029

# 红霉素生产中的元素衡算《无锡轻工业学院学报》1985年, 第四卷,

第四期

**关键词** 红霉素 元素衡算

**摘要** 本文通过红霉素生产中“元素衡算”, 将物质流元素化, 建立了物质流定量分析的数学模型, 解决了物质流在发酵工业环境中定量化的方法, 找出了元素、物质流、有机物、COD 等相互之间的定量化系列体系; 导出了各种流失物质的排放系数和碳、氮源利用率, 为工艺改革, 提高红霉素生产的经济效益和环境效益提供了依据。

作者: 安强华 俞杭 卢君佳等

85028

# 大米保鲜的研究《无锡轻工业学院学报》1985年, 第四卷, 第四期

**关键词** 大米贮藏, 新鲜度, 强制陈化, 硫化氢含量。

**摘要** 本研究以实验论证了用大米硫化氢含量代替脂肪酸含量作为大米新鲜度指标的合理性。通过对比试验证实珠光精洁米比市售标一梗具有较好的保鲜性能。

作者: 朱斌昕 吕季璋

85030

# 合成洗涤剂配方最佳化及其数学模型《无锡轻工业学院学报》

1985年, 第四卷, 第四期

**关键词** 最佳化, 液体洗涤剂组成, 试验设计, 回归分析, 数学模

型, 方差分析

**摘要** 本文运用试验设计法和方差分析得到液体洗涤剂配方最佳化的条件, 并由此通过数学回归分析处理, 建立能应用于预测和液体制液体洗涤剂主要洗涤效果(去污力)与其各组分之间相互关系的数学模型。

作者: 周镇江