基于统计分析、神经网络的古代玻璃制品成分分析与鉴别

摘 要

玻璃是古代中西方进行早期贸易的宝贵物证,其主要原料是石英砂,主要化学成分是二氧化硅。由于制作工艺和助熔剂选择的差异,不同地域的玻璃的化学成分不同,因此玻璃又分为了铅钡玻璃和钾玻璃。古代玻璃极易受埋藏环境的影响而风化,玻璃的成分比例发生变化,从而影响对其类别的正确判断。本文主要研究了各种类型玻璃的成分指标,建立了**聚类分析、BP 神经网络**等模型,利用**方差分析**,统计学规律进行求解。

针对问题一,对文物的固有属性关系和化学成分含量规律进行分析,基于此预测风化前玻璃的化学成分含量。剔除无颜色的干扰文物,利用 MATLAB 对经过赋值量化和哑变量处理的数值绘制直方图。再剔除成分累加比不符合要求的玻璃,通过控制变量,利用 SPSS 的卡方检验表中的显著性水平和统计图例判断铅钡玻璃更易风化,风化与类型呈现强相关性,与颜色和纹饰关联性不大。运用回归公式和散点图考察平均绝对偏差较大的几类化学成分的相互关联性,进而说明风化和种类对化学成分规律的影响。运用回归公式和散点图考察绝对平均偏差较大的几类化学成分的相互关联性,进而说明风化和种类对化学成分规律的影响。利用风化前和风化后玻璃化学成分含量的平均值并计算差值,据此推断风化前的成分预测。

针对问题二, 依据特征成分指标分析高钾玻璃、铅钡玻璃的分类规律,并对其选择额外的化学成分进行亚类划分,作出分类结果的合理性和敏感性分析。运用问题一的结论,按照类别和风化与否分类玻璃检测点。应用**控制变量**的方法,绘制分别以类型和风化情况为单一自变量的横纵向的**对比折线图**,对比类型和风化情况单一不同情况下的化学特征成分,以此得出各类型玻璃的分类规律。

根据**分类规律**和**绝对平均偏差**,基于风化不会对亚类划分造成很大影响的前提排除数据,以除主要成分外方差较大的化学成分作为次要差异进行亚类划分。结论是以氧化铜的含量对高钾玻璃进行亚类划分,以氧化钙的含量对铅钡玻璃进行亚类划分。运用**K-means 聚类分析**法分析结果,通过字段差异性分析和聚类汇总进行统计,最终说明亚类划分的方式准确合理,敏感度较好。

针对问题三,分析已知玻璃与未知玻璃的数据,鉴定后者的类型,并对结果进行灵敏度分析。经过哑变量处理,建立 **BP 神经网络**分类模型反映玻璃类型和化学成分含量间的非线性映射。通过训练、测试,拟合预测值和目标值的线性化程度,由 **R** 值极接近1,判定检验未知文物的方式准确。运用控制变量法,基于两种类型玻璃各自的特征化学成分含量,**逐步迭代**数据到已完成训练的神经网络模型进行灵敏度检验。由结果随迭代值的曲线图,说明神经网络模型对各种类型玻璃的二氧化硅含量与氧化铅含量的敏感性较好,模型**鲁棒性**较强,利于对未知样本的鉴别。

针对问题四,寻找不同类型玻璃文物样品化学成分之间的关联,比较不同关联关系的差异性。由数值特性考虑基于 Spearman 相关系数对特征化学成分进行相关性分析,综合问题二的分类规律,比对 P 值和相关系数,得到四种类别玻璃的特征化学成分之间的相关性。基于此绘制不同类别玻璃的相关系数热力图,得到高钾玻璃风化后氧化铝、二氧化硅和氧化钾之间相关性的强弱和铅钡玻璃风化后氧化铅和二氧化硅的相关性均发生变化的结论。

本文由数据驱动,建立模型挖掘玻璃化合物的特性,对于玻璃鉴别及其他相关文物识别研究具有良好的推广应用价值。

关键词: 统计分析 控制变量 聚类分析 BP 神经网络 Spearman 相关系数

一、 问题背景与问题重述

1.1 问题背景

随着我国逐渐高质量推进"一带一路"建设,古代丝绸之路及其相关贸易品的重要性尤为彰显。伴随着古代丝绸之路的发展,玻璃制品及其制作方式传入我国。我国古代玻璃吸收其技术后在本土就地取材制作,虽然与外来的玻璃制品外观相似,但化学成分却存在明显差异。玻璃的主要化学成分是二氧化硅,由于其原料熔点较高,在烧制的过程中需要添加助熔剂,导致玻璃出现了不同化学成分,基于此,玻璃又分为铅钡玻璃和钾玻璃。在经过了长时间的埋藏过程后,古代玻璃极易受周围环境影响发生风化,部分变暗,或者风化产物结壳覆盖在其外部,不利于古代玻璃的种类判断。

通过利用化学成分对古代玻璃进行分类,研究其风化程度与特征的关联性,不仅有利于古代文物分类及执行相关保护措施,还可以探究丝绸之路中西方文化的交流、融合、创新过程,其化学成分可用于进一步了解过去不同文明进行的贸易情况,对研究其社会、经济的相互影响有着重要意义。

1.2 问题重述

根据以上背景,以及给出的三个附件表单,需要解决以下问题:

- (1)分析玻璃文物的表面风化与其玻璃类型、纹饰和颜色的关系;结合玻璃种类,分析文物表面风化化学成分含量是否存在一定规律,并根据风化点的检测数据,预测已经风化的玻璃在风化前的化学成分含量。
- (2)根据所附数据,分析高钾玻璃和铅钡玻璃的分类规则;并针对每一类别选择合适的化学成分进行亚类细分,给出具体的划分方法及划分结果,并对分类结果的合理性和敏感性进行分析。
- (3)对附件表单3中未知类别玻璃文物进行化学成分分析,确定其所属类型,并对分类结果的敏感性进行分析。
- (4)根据不同类型的玻璃文物样品,分析其化学成分之间的相关性,并比较不同类别 之间的化学成分相关性的差异。

二、 问题分析

2.1 问题一的分析

问题一需要根据附件中的表单 1 研究玻璃风化与其特征的关系。考虑到没有颜色的玻璃对于关联性存在干扰,将其从样本中剔除。由于定性指标不便研究,首先进行数据预处理,利用赋值量化的方法,将文物的类型、颜色、以及是否风化等定性指标量化,量化结果见表 1。通过哑变量处理,绘制出直观地表示关系的直方图。考虑到纹饰、颜色及类型是玻璃的固有属性,采取控制变量的方式,利用 SPSS 中的卡方检验表分别研究其对玻璃风化的影响。根据卡方检验中的显著性水平,判断玻璃风化与其特征的关联程度。

进一步对玻璃的风化化学成分含量是否存在统计学规律进行分析。根据附件表单 2,剔除无效数据后,对风化和无风化的高钾玻璃和铅钡玻璃的各项化学含量数值分别进行平均值和绝对平均偏差的运算,绘制散点图,分析化学成分含量之间的统计规律。

基于风化后和风化前的各类型玻璃的化学成分含量进行平均值处理,考虑到含量空白处出现的概率过高,通过数值比较,对特殊差值进行取值处理。利用平均值与风化后的玻璃的差值预测出风化前的化学成分含量。

2.2 问题二的分析

问题二要求根据表单中的数据分析出高钾玻璃、铅钡玻璃的分类规律,首先将玻璃 检测点按照具体类型和风化与否分成四类,利用控制变量的方式在 MATLAB 软件上绘 制折线图进行横纵向对比,根据化学成分含量数值的异同,直观地找到分类高钾玻璃、 铅钡玻璃的特征成分,总结高钾玻璃、铅钡玻璃的分类规律。

利用前面得出的分类规律和求出的绝对平均偏差和,找出除主要成分外的方差较大的化学成分作为次要差异进行亚类划分。根据风化前后次要差异含量的差值,排除风化会对化学成分含量造成很大影响的次要差异成分,从而找到进行亚类划分的合适化学成分,制定具体的划分方法并给出结果。运用 K-means 聚类分析法分析上述亚类划分结果,通过字段差异性分析和聚类汇总进行统计,说明模型分类的合理性。

2.3 问题三的分析

问题三首先需要利用表单 1 和表单 2 的化学成分鉴定表单 3 中未知类别的玻璃文物类型。由于样本量少以及考古专业知识匮乏,选择建立 BP 神经网络分类模型反映玻璃文物和化学成分含量间的非线性映射。运用哑变量处理类型,通过对 BP 神经网络进行训练、测试,拟合预测值和目标值的线性化程度,通过 R 值的大小,评价检验未知文物的准确性。

比较铅钡玻璃和高钾玻璃的特征化学成分含量(二氧化硅和氧化铅),判断含量的 区分度显著。运用控制变量法针对不同类型的两种玻璃的化合物含量进行敏感度分析。 设置固定单位步长,逐步迭代数据后输入已经完成训练的神经网络,根据结果随迭代值 的曲线图,说明神经网络模型的鲁棒性和模型对各类型玻璃特征成分含量的敏感性,判断模型应用于未知样本的准确性。

2.4 问题四的分析

问题四需要综合问题二的探究结果,寻找检测高钾玻璃和铅钡玻璃是否发生风化的对应特征化学成分。但由于其数值不符合正态分布,考虑基于 Spearman 相关系数对特征化学成分进行相关性分析。运用问题二的分类规律,以四类玻璃的特征成分含量作为参考,通过比对 p 值和相关系数的值,得到了各类型玻璃的化学成分关联。

综合关联关系的结论,统计化学成分关联的差异性,运用相关系数绘制热力图,根据颜色深浅得到关联关系的具体差异性结论。

三、 模型假设

为了方便且准确地构建数学模型,本文根据实际情况做出以下合理的假设和条件约束。

- 1. 假设测量仪器和手段正常,所有指标数据均正确。
- 2. 假设所有样本均随机取样。
- 3. 假设未检测到的化学成分即为没有,可设为0进行分析。
- 4. 将成分比例累加和介于 85%~105%之间的数据视为有效数据。

四、 符号说明

符号	符号定义
E(x)	平均值

D(x)	平均绝对偏差
n	样本量
x_i	各化学成分的含量
min	最小值
max	最大值
e	误差
F	方差
P	显著性

注: 此处仅给出通用符号, 其他符号在出现处均作详细说。

五、 数据预处理

5.1 数据的剔除

表 1 表单 1 剔除的数据

编号	纹饰	类型	是否风化	颜色
19	A	铅钡	风化	未知
40	C	铅钡	风化	未知
48	A	铅钡	风化	未知
58	C	铅钡	风化	未知

由于 19、40、48 和 58 号玻璃的颜色未知,干扰第一题探究颜色和是否风化的关系的进程,故在第一的第一问做分析时,将以上四组从样本中剔除不作考虑。

表 2 表单 2 剔除的数据

	文物采样 点	二氧化硅	氧化钠	氧化钾	氧化		氧化镁	氧化铝	氧化铁	氧化铜
Ī	15	61.87	3.21	7.44	0		1.02	3.15	1.04	1.29
	17	60.71	2.12	5.71	0	(0.85	0	1.04	1.09
	续表									
	文物采	氧化铅	氧化钡	五氧化	氧化锶	氧化锡	二氧化	累加和	是否风	 类型

文物采 样点	氧化铅	氧化钡	五氧化 二磷	氧化锶	氧化锡	二氧化 硫	累加和	是否风 化	类型
15	0.19	0	0.26	0	0	0	79.47	否	高钾
17	0.19	0	0.18	0	0	0	71.89	否	高钾

由于检测手段等原因可能导致其成分比例的累加和非 100%的情况。由题目知成分比例累加和未介于 85%~105%之间的数据为无效数据,故剔除 15 号和 17 号玻璃。

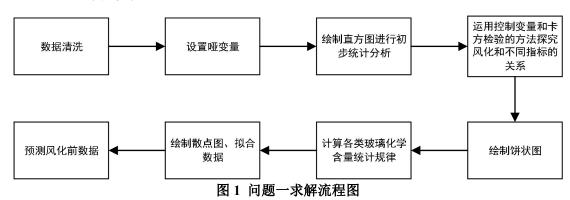
5.2 数据的补足

问题二和问题三在使用附件表单2时,其中数据缺失处表示未检测到该成分,故我们设该处的数值为0,便于后续计算分析。但问题一和问题四由于考虑到数据确实处过多,补0将会导致计算误差很大,故不补0,具体原因见问题一和问题四的求解过程。

六、 模型的建立与求解

6.1 问题一的模型与求解

6.1.1 模型求解流程图



6.1.2 问题一的分析和求解

1.风化与表面纹饰、类型、颜色的关系

在题目附件表单 1 中提供了文物是否风化与纹饰、类型、颜色之间的关系。首先进行数据的预处理,剔除掉干扰数据。我们剔除出了 19、40、48 和 58 号四个玻璃文物,利用赋值量化和哑变量处理方式,对玻璃的纹饰、类型和颜色进行赋值,赋值结果如下表所示。

表 3 哑变量赋值表

变量名	变量含义
纹饰	A=0, B=1, C=2
类型	高钾=0,铅钡=1
颜色	黑色=0, 蓝绿色=1, 绿色=2, 浅蓝=3, 浅绿=4, 深蓝=5, 深绿=6, 紫=7
是否风化	未风化=0,风化=1

因数据众多,为了方便处理,我们选择用 MATLAB 软件绘制直方图,进行初步关系分析。我们以玻璃的颜色、类型和纹饰分别作为三个直方图的自变量,以风化个数作为直方图的因变量,结果如图 1、图 2、图 3 所示。

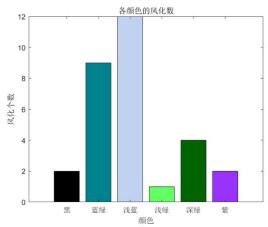


图 1 颜色-风化个数直方图

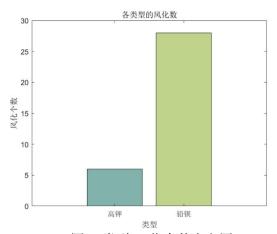


图 2 类型-风化个数直方图

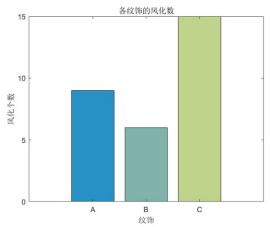


图 3 纹饰-风化个数直方图

从三个直方图中我们可以初步了解到,浅蓝色、蓝绿色的玻璃风化个数较多,黑色、浅绿色、紫色的玻璃风化个数较少;铅钡玻璃风化的数量远远大于高钾玻璃风化的数量;C纹饰的玻璃风化的个数略大于A、B纹饰。

接下来进行进一步分析。根据题目要求,只保留成分比例累加和介于 85%~105%之间的玻璃,故在之前剔除掉四个样本的基础上,我们又剔除了 15 号和 17 号玻璃样本。对于剩下的样本由于纹饰、颜色以及类型是玻璃的固定属性,因素之间没有明显的关系,故我们采取控制变量的方式,利用 SPSS 分别做出纹饰、颜色、玻璃类型与风化的卡方检验表,判断两个变量之间的关联性。以显著性水平 0.05 作为参照指标,若渐近显著性小于 0.05,则可说明两变量间存在显著的相关关系。

卡方检验表如下所示:

表 4 纹饰对于风化影响的卡方检验

	M - White 1 M 1000 1000 1000							
	卡方检验							
	值	自由度	渐进显著性(双侧)					
皮尔逊卡方	5.747 ^a	2	0.056					
似然比	7.993	2	0.018					
线性关联	0.205	1	0.650					
有效个案数	54							

表 5 颜色对于风化影响的卡方检验

卡方检验								
	值	自由度	渐进显著性 (双侧)					
皮尔逊卡方	6.287a	7	0.507					
似然比	8.156	7	0.319					
线性关联	0.873	1	0.350					
有效个案数	54							

表 6 类型对于风化影响的卡方检验

		卡方检验		
值	自由度	渐进显著性(双侧)	精确显著性(双侧)	精确显著性 (单侧)

皮尔逊卡方	5.400a	1	0.020		_
连续性修正b	4.134	1	0.042		
似然比	5.448	1	0.020		
费希尔精确检验				0.040	0.021
线性关联	5.300	1	0.021		
有效个案数	54				

通过卡方检验,对数据进行进一步说明。颜色和纹饰分别关于风化的显著性均大于 0.05,说明文物的颜色与纹饰和玻璃是否风化的关联性不大;而玻璃的种类与是否风化 的显著性小于 0.05,可说明玻璃是否风化与玻璃的类型呈现强相关性。由直方图所示,铅钡玻璃的风化个数远远大于高钾玻璃的风化个数。我们绘制了饼状图直观说明,分别展示了在高钾玻璃中风化的比例和铅钡玻璃中风化的比例。

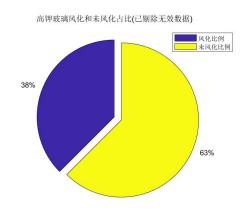


图 4 高钾玻璃风化-未风化饼状图

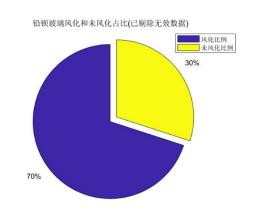


图 5 铅钡玻璃风化-未风化饼状图

如图所示,铅钡玻璃的风化占比显著高于高钾玻璃的风化占比,初步说明铅钡玻璃比高钾玻璃更易风化。

2.化学成分含量的统计规律

结合玻璃的类型,寻找文物样品表面风化化学成分含量的统计规律。首先将玻璃分类为高钾玻璃和铅钡玻璃两大类,进一步将玻璃的检测点分类为铅钡风化检测点、铅钡

未风化检测点、高钾风化检测点、高钾未风化检测点四小类。我们需利用 excel 表格提取相关数据,并利用 Average 函数分别计算每一类中各项化学成分含量的平均值,再利用 AVEDEV 函数算出相对应的平均绝对偏差,使用公式如下。具体数据见附件 1。以X表示各化学成分含量,E(X)表示平均值,D(X)表示平均绝对偏差,列出数学表达式。

$$E(X) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i$$
 (1)

$$D(X) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (x_i - E(X))^2$$
 (2)

我们还需根据绝对平均偏差的值分析每一种化学成分的含量的平均值的普适性与稳定性,因为较大的偏差所对应的平均值的代表性较弱,因此需利用 excel 将绝对平均偏差较大的化学成分的含量绘制成散点图,从而找到并剔除差异过大的数值,再对其余数值重新求平均值,以求得到更加具有代表性的数据,平均值结果如表 7,表 8,散点图及重整的数据见附件 1。

表 7 高钾玻璃各化合物平均值及差值

高钾玻璃	二氧化硅	氧化纳	氧化钾	氧化钙	氧化镁	氧化铝	氧化铁
风化	93.96	0	0.82	0.87	0.59	1.93	0.27
无风化	64.81	3.12	9.97	5.76	1.35	5.86	2.05
差值	29.16	-3.12	-9.16	-4.89	-0.76	-3.93	-1.79

表7续表

高钾玻璃	氧化铜	氧化铅	氧化钡	五氧化二 磷	氧化锶	氧化锡	二氧化硫
风化	1.56	0	0	0.34	0	0	0
无风化	3.48	0.87	2.12	1.14	0.25	2.36	0.41
差值	-1.92	-0.87	-2.12	-0.80	-0.25	-2.36	-0.41

表 8 铅钡玻璃各化合物平均值及差值

铅钡玻璃	二氧化硅	氧化纳	氧化钾	氧化钙	氧化镁	氧化铝	氧化铁
风化	25.11	1.41	0.41	2.77	1.16	2.98	0.95
无风化	59.19	4.00	0.34	1.54	0.98	4.59	1.54
差值	-34.08	-2.59	0.07	1.23	0.17	-1.61	-0.59

表8续表

铅钡玻璃	氧化铜	氧化铅	氧化钡	五氧化二 磷	氧化锶	氧化锡	二氧化硫
风化	2.36	41.78	9.05	5.56	0.48	0.89	8.88
无风化	1.60	19.83	7.47	1.49	0.36	0.36	3.66
差值	0.75	21.95	1.58	4.07	0.11	0.53	5.22

根据散点图,我们发现只有在铅钡玻璃中存在很多组绝对平均偏差较大的几组化学成分。

对于绝对平均偏差较大的几组化学成分,我们以二氧化硅的含量为自变量,氧化铅和氧化钡的含量为因变量,利用 excel 做二氧化硅与这两种成分含量的关系的散点图,并利用回归公式分析其相关关系,具体分析情况如下:

根据图 6, 在铅钡风化这一类中:

氧化铅的含量与二氧化硅的含量的关系符合五次多项式:

$$y = 10^{-5}x^5 - 0.0019x^4 + 0.1041x^3 - 2.6338x^2 + 28.738x - 49.011$$
 (3)

其相关系数 R^2 =0.4863, 吻合程度一般, 相关性适中。

氧化钡的含量与二氧化硅的含量的关系符合六次多项式:

$$y = 6 \cdot 10^{-7} x^6 - 0.0001 x^5 + 0.0079 x^4 - 0.2795 x^3 + 5.0683 x^2 - 43.283 x + 142.43$$
 (4)

其相关系数 R^2 =0.5206, 吻合程度一般, 相关性适中。

通过对两个相关系数的对比分析,二氧化硅含量对这两种化学成分的含量有一定影响,且对氧化钡的影响大于对氧化铅的影响。

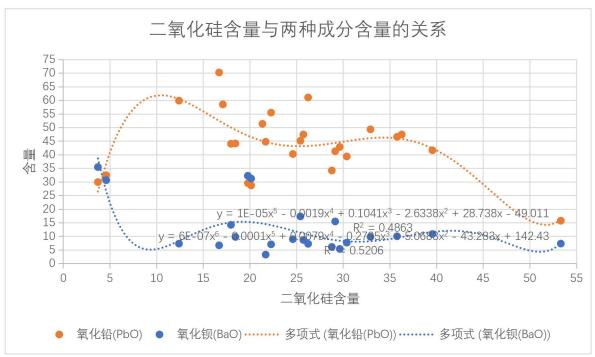


图 6 风化铅钡玻璃氧化铅、氧化钡含量与二氧化硅的关系

根据图 7, 在铅钡无风化这一类中:

氧化铅的含量与二氧化硅的含量的关系符合五次多项式:

$$y = -6 \cdot 10^{-7} x^6 + 0.0002 x^5 - 0.0242 x^4 + 1.5913 x^3 - 57.726 x^2 + 1093 x - 8406$$
 (5)

其相关系数 $R^2 = 0.4742$, 吻合程度一般, 相关性适中。

氧化钡的含量与二氧化硅的含量的关系符合六次多项式:

$$v = 10^{-7}x^6 - 5 \cdot 10^{-5}x^5 + 0.006x^4 - 0.4235x^3 + 16.646x^2 - 348.68x + 3058.5 \tag{6}$$

其相关系数 R^2 =0.6104, 吻合程度一般, 相关性较好。

通过对两个相关系数的对比分析,二氧化硅含量对这两种化学成分的含量有一定影响,且对氧化钡的影响大于对氧化铅的影响。

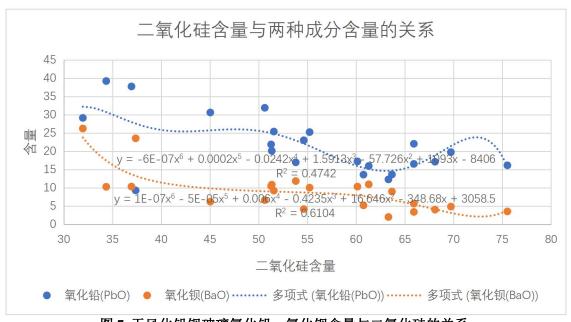


图 7 无风化铅钡玻璃氧化铅、氧化钡含量与二氧化硅的关系

根据上述两组数据结果分析,无论是否风化,在铅钡玻璃中,二氧化硅的含量与氧化钡和氧化铅的含量的关联度相似,且都与氧化钡的关联度更大,即风化对二氧化硅的含量与氧化钡和氧化铅的含量的关系的影响度较小,玻璃自身种类对这三种化学成分的关联度影响较大。

3.风化前化学成分含量的预测

因为所求平均值的代表性较强,所以我们用各化学成分风化的含量减去无风化的含量,差值见表 7、表 8,用每个风化的文物的各化学成分的含量减去差值,即为我们所预测的风化前的各化学成分的含量。

设x为风化的各化学成分的含量,y为无风化的各化学成分的含量,e为差值,z为预测风化点风化前的各化学成分的含量,i代表化学成分的种类, $i=1,2,\cdots,14$,k代表玻璃种类,k=1,2(1为高钾,2为铅钡),l代表文物序号, $l=1,2,\cdots,n$,n为文物总量。

$$e_k^i = \chi_k^i - y_k^i \tag{7}$$

$$z_k^{i,l} = x_k^{i,l} - y_k^{i,l} \tag{8}$$

由于在最初的数据预处理时,考虑到空白处过多,数值点出现的概率很小,数据缺失处若补 0 将会造成整体平均值偏低。故我们不对数据缺失处补 0,风化后如果存在数值,那么它总是在平均值附近浮动。

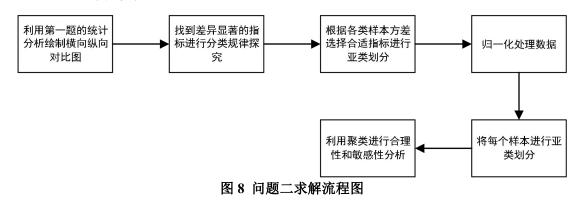
故单纯通过这种差值预测的风化前化学含量成分存在一定误差,差值法很有可能计算出小于 0 的数值、或者数值等于差值的绝对值的值。如果出现这种情况,就同样按照空白出现概率高的情况,把风化前的化学成分含量均设为 0。

高钾风化玻璃大多不含氧化钠、氧化钡、氧化锡和二氧化硫,铅钡玻璃大多不含氧化钠、氧化锡和二氧化硫,故预测风化前的各类型玻璃时化学成分含量时将以上这几类化学成分含量均设为 0。

详细预测结果见附录 1, 附录 2。

6.2 问题二的模型与求解

6.2.1 模型求解流程图



6.2.2 问题二的分析和求解

1.高钾玻璃、铅钡玻璃的分类规律

问题二首先要求依据附件数据分析高钾玻璃、铅钡玻璃的分类规律,沿用问题一的思路,将玻璃检测点按照类别和是否风化进行分类,包括风化的高钾玻璃检测点、风化的高钾玻璃检测点、风化的铅钡玻璃检测点,未风化的铅钡玻璃检测点。对于玻璃的分类规律,我们按照分步的方式进行。第一步,先根据特征化合物指标鉴别玻璃的具体类别,在已知玻璃类别后,再根据特征值鉴定玻璃是否发生风化。通过运用 MATLAB 绘制折线图。

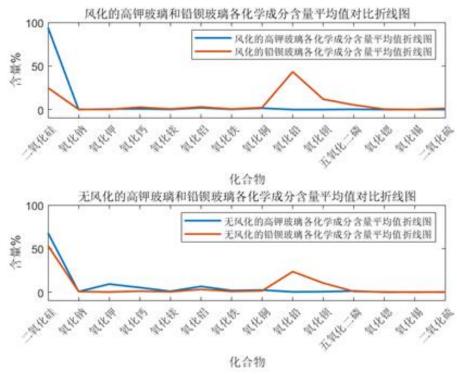


图 9 不同类型玻璃化合物含量分布横向对比图

由于高钾玻璃和铅钡玻璃的类型是一种固定属性,由问题一可知,玻璃的类型会影响到玻璃是否发生风化,本题需要先讨论高钾玻璃、铅钡玻璃的类型规律,而类型可以看成"发生风化"的前提条件,故我们运用控制变量的方式,忽略玻璃是否风化这一类

型造成的"结果",讨论玻璃的类型对固定一种化合物的影响。即对图9进行纵向分析。由对比图可初步得知,不论是在风化还是未风化的条件之下,铅钡玻璃的氧化铅含量均远远大于高钾玻璃的氧化铅含量,高钾玻璃的二氧化硅含量均大于铅钡玻璃。

进一步地,我们对高钾玻璃和铅钡玻璃分类的依据进行具体数值的统计。运用计算平均值的公式,我们可以得知对于高钾玻璃而言,氧化铅的含量不论是否发生风化都几乎为0。

探究出铅钡玻璃或是高钾玻璃的类型分类依据及规律后,在已知玻璃的类型的条件下,对玻璃类型实施控制变量法,进一步分析这两类玻璃检测点风化与未分化的差异。我们以化学成分为横坐标,化学成分的含量为纵坐标,运用 MATLAB 软件绘制折线图,折线图存在明显差异值的点,对此进行进一步说明。

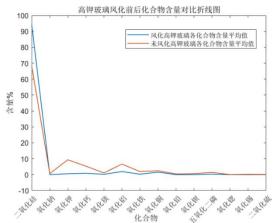


图 10 高钾玻璃化合物含量分布纵向对比图

图 11 高钾玻璃化合物含量分布纵向对比图

对于高钾玻璃而言,通过对比风化与未风化的玻璃检测点的化学成分含量可知:风 化检测点的二氧化硅含量明显高于未风化的检测点;未风化检测点的氧化钾、氧化铝含 量明显高于已风化的玻璃检测点。故根据二氧化硅、氧化钾和氧化铝的含量,可以说明 高钾玻璃的检测点是否风化。

对于铅钡玻璃而言,通过运用同样的比对方式可知:风化检测点的氧化铅含量明显高于未风化的检测点;未风化检测点的二氧化硅含量明显高于已风化的玻璃检测点。故根据氧化铅、二氧化硅的含量,可以说明铅钡玻璃的检测点是否风化。

2.亚类划分方法和结果

在问题一中,已经分析了各类型玻璃绝对平均偏差较大的几组化学成分之间的关联度。无论玻璃发生风化与否,都不应该干扰接下来进行的亚类划分。我们利用绝对平均偏差,寻找除了问题一探求的主要成分外的方差较大的化学成分作为次要差异对玻璃进行亚类划分。

a) 高钾玻璃的亚类划分

除了主要成分以外,高钾玻璃的氧化铝、氧化铜含量在风化前后方差均较大,由此, 我们初步估计氧化铝、氧化铜可以作为亚类划分的依据。

a.1 变量判定

为了探究氧化铝和氧化铜二者作为亚类划分的依据的可靠性,根据风化前后含量变化进一步对变量进行排除。若风化前后的含量变化大,则说明亚类划分的结果受到风化的影响,那么这种化学成分含量不适合作为亚类划分的依据。

- 1)氧化铝:通过对风化前后氧化铝的含量进行分析,发现风化对氧化铝的含量影响极大,即风化前氧化铝的含量的最大值与风化后氧化铝的最小值相近,因是否风化不会影响玻璃种类,故氧化铝不能做为亚类划分的分类标准。
- 2)氧化铜:通过对风化前后氧化铜的含量进行分析,发现风化对氧化铜的含量影响较小,即风化前氧化铜的含量的最大值与风化后氧化铜的最大值相近,风化前氧化铜的含量的最小值与风化后氧化铜的最小值相近,即是否风化不会影响玻璃种类,故氧化铜能做为亚类划分的分类标准。
 - 3)结论:可以氧化铜的含量进行亚类划分,分为高钾高铜与高钾低铜。

a.2 划分方法

设高钾玻璃中氧化铜的含量为集合 A_1 , x_1^i 为第 i 个样本点的氧化铜含量, Max_1 =5.09为最大氧化铜含量, $Min_1=0.47$ 为最小氧化铜含量:

 $\forall \mathbf{x}_1^{\mathbf{i}} \in A_1, \exists Max_1, Min_1 \in A_1, s.\ t. \frac{\mathbf{x}_1^{\mathbf{i}} - Min_1}{Max_1 - Min_1} \in [0,1], \ \ \ddot{\Xi} \frac{\mathbf{x}_1^{\mathbf{i}} - Min_1}{Max_1 - Min_1} > 0.5$,则为高钾高铜,若 $\frac{\mathbf{x}_1^{\mathbf{i}} - Min_1}{Max_1 - Min_1} < 0.5$,则为高钾低铜。

由于样本 18 不含氧化铜, 即差异性过大, 故不作为制定划分标准的参考数据。

a.3 划分结果

见附录3和附件2高钾表。

b) 铅钡玻璃的亚类划分

除了主要成分以外,铅钡玻璃的氧化铝、氧化铜、五氧化二磷、氧化钙含量在风化 前后方差均较大,由此,我们初步估计氧化铝、氧化铜、五氧化二磷、氧化钙含量可以 作为亚类划分的依据。

b.1 变量判定

方式通高钾玻璃划分, 顾在此不再赘述。

- 1)氧化铝:通过对风化前后氧化铝的含量进行分析,发现风化对氧化铝的含量影响极大,即风化前氧化铝的含量的最大值与风化后氧化铝的最小值相近,因是否风化不会影响玻璃种类,故氧化铝不能做为亚类划分的分类标准。
- 2)氧化铜:通过对风化前后氧化铜的含量进行分析,发现风化对氧化铜的含量影响极大,即风化前氧化铜的含量的最大值与风化后氧化铜的最小值相近,因是否风化不会影响玻璃种类,故氧化铜不能做为亚类划分的分类标准。
- 3) 五氧化二磷:通过对风化前后五氧化二磷的含量进行分析,发现风化对五氧化二磷的含量影响极大,即风化前五氧化二磷的含量的最大值与风化后五氧化二磷的最小值相近,因是否风化不会影响玻璃种类,故五氧化二磷不能做为亚类划分的分类标准。
- 4)氧化钙:通过对风化前后氧化钙的含量进行分析,发现风化对氧化钙的含量影响较小,即风化前氧化钙的含量的最大值与风化后氧化钙的最大值相近,风化前氧化钙的含量的最小值与风化后氧化钙的最小值相近,即是否风化不会影响玻璃种类,故氧化钙能做为亚类划分的分类标准。
 - 5)结论:可以氧化钙的含量进行亚类划分,分为铅钡高钙与铅钡低钙。

b.2 划分方法

设铅钡玻璃中氧化钙的含量为集合 A_2 , x_2 为第 i 个样本点的氧化钙含量, $Max_2=5.24$

为最大氧化钙含量, Min₂=0.37 为最小氧化钙含量:

 $\forall x_2^i \in A_2, \exists Max_2, Min_2 \in A_2, s.t. \frac{x_2^i - Min_2}{Max_2 - Min_2} \in [0,1]$,若 $\frac{x_2^i - Min_2}{Max_2 - Min_2} > 0.5$,则为铅钡高钙,若 $\frac{x_2^i - Min_2}{Max_2 - Min_2} < 0.5$,则为铅钡低钙。

由于样本 20,42,46,54 不含氧化钙,样本 43 部位 2 的氧化钙含量过高,即差异性过大,故不作为制定划分标准的参考数据。

b.3 划分结果

见附录4和附录2铅钡表。

3.合理性和敏感性分析

我们利用 K-means 聚类分析进行分类结果的合理性和敏感性分析。

3.1 对高钾中氧化铜做聚类分析

1) 字段差异性分析

表9 字段差异分析表

	聚类类别(平均	匀值±标准差)	_	P
	类别 1(n=12)	类别 2(n=6)	Г	Р
氧化铜(CuO)	1.277±0.782	3.913±0.815	44.285	0.000***
,,	. // B1 // H	,, n ++1	1 1	

注: ***、**、*分别代表 1%、5%、10%的显著性水平

方差分析的结果显示:

对于变量氧化铜(CuO),显著性 P 值为 0.000***,水平上呈现显著性,敏感性高,拒绝原假设,说明变量氧化铜(CuO)在聚类分析划分的类别之间存在显著性差异。

2) 聚类汇总

表 10 聚类分析表

· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·		
聚类类别	频数	百分比%
聚类类别_1	12	66.667%
聚类类别_2	6	33.333%
合计	18	100.0%

与我们所用的方法所做的分类结果相同,即模型分类合理。

3.2 对铅钡中氧化钙做聚类分析

1) 字段差异性分析

表 11 字段差异分析表

	聚类类别(平	均值±标准差)	Г	P
	类别 1(n=31)	类别 2(n=18)	F	Р
氧化钙(CaO)	0.981±0.68	3.892±1.026	142.838	0.000***
<u> </u>	· 시 메 / 아 = · · · ·	50/ 400/44日本	kl. 1. 17	

注: ***、**、*分别代表 1%、5%、10%的显著性水平

方差分析的结果显示:

对于变量氧化钙(CaO),显著性 P 值为 0.000***,水平上呈现显著性,敏感性高,拒绝原假设,说明变量氧化钙(CaO)在聚类分析划分的类别之间存在显著性差异。

2) 聚类汇总

表 12 聚类分析表

	*1.5 474 81 44	
聚类类别	频数	百分比%
聚类类别_1	31	63.265%
聚类类别_2	18	36.735%
合计	49	100.0%

与我们所用的方法所做的分类结果相同, 即模型分类合理。

6.3 问题三的模型与求解

6.3.1 模型求解流程图

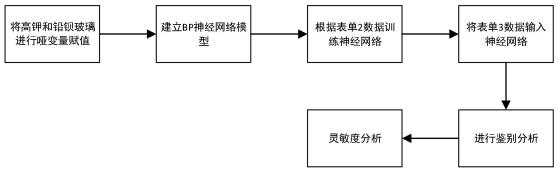


图 12 问题三求解流程图

6.3.2 问题三的分析和求解

由于定性分析未知类别玻璃的所属类型需要较强的专业背景知识,而单纯利用统计学的方式,无法准确地在有效样本数量非常有限的情况下根据化学成分就揭示其类型。因此,我们选择建立 BP 神经网络分类模型。BP 神经网络具备很强的自学习、自组织能力,是模式识别的强有力的工具,它可以在未完全了解玻璃类型与化学成分和风化判定所对应的机理的情况下,完成对表单三中已知风化情况的玻璃文物和化学成分含量之间的非线性映射。因此,我们使用 BP 神经网络建立模型解决本题。

1.BP 神经网络鉴定文物类别模型

1.1 BP 神经网络建立文物鉴别模型

BP 神经网络是一种多层前馈神经网络,该网络的主要特点是将信号向前传递,误差反向传播。在前向传播中,输入信号通过隐层作用于输出节点,输出信号通过非线性变换产生。如果实际输出与预期输出不一致,就会转化为误差的反向传播过程。误差反传是将输出误差通过隐层逐层传递到输入层,并将误差分配给每一层的所有单元,并以每一层得到的误差信号作为调整各单元权重的依据。通过调整输入节点和隐层节点之间的连接强度、隐层节点和输出节点之间的连接强度和阈值,使误差沿梯度方向减小。在反复学习和训练后,确定与最小误差对应的网络参数(权值和阈值),并停止训练。此时,训练好的神经网络可以处理相似样本的输入信息,并以最小的输出误差处理非线性变换后的信息。

本文建立的神经网络结构如图 13 所示,设 x_i ($i = 1,2,3\cdots,n$)是神经网络的输入,即待测样本的 14 个化合物指标含量, y_i ($i = 1,2,3\cdots,n$)是神经网络的隐含层,z为实际的输出值,训练阶段,将高钾玻璃和铅钡玻璃分别赋值为 0 和 1,通过表单 2 的有效数据进行训练,结束训练后将待测样本化合物含量输入到神经网络进行类别的划分。

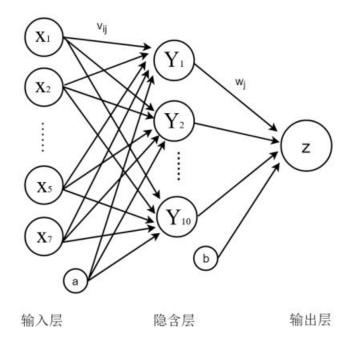


图 13 神经网络示意图

隐含层的输出量设为 F_j ,输出层的输出量设为 O_k ,系统的激励函数设为G,学习速率设为 β ,则其三个层之间有如下数学关系:

$$F_{j} = G\left(\sum_{i=1}^{m} \omega_{ij} x_{i} + a_{j}\right)$$

$$O_{k} = \sum_{j=1}^{l} F_{j} \omega_{jk} + b_{k}$$

$$(1)$$

系统期望的输出量设为 T_k ,则系统的误差E可由实际输出值和期望目标值的方差表示,具体关系表达式如下:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n} (T_k - O_k)^2$$

$$e_k = T_k - O_k$$
(2)

利用梯度下降原理, 则系统权值和偏置的更新公式如下:

$$\begin{cases}
\omega_{ij} = \omega_{ij} + \beta F_j (1 - F_j) x_i \sum_{k=1}^n \omega_{jk} e_k \\
\omega_{jk} = \omega_{jk} + \beta F_j e_k \\
\alpha_j = \alpha_j + \beta F_j (1 - F_j) x_i \sum_{k=1}^n \omega_{jk} e_k \\
b_k = b_k + \beta e_k
\end{cases} \tag{3}$$

由于表单 3 中文物已给出是否风化的结果,所以我们只需使用 BP 神经网络模型针对已知的待鉴别文物的化学成分含量情况进行分析。先将十四个化学成分含量作为输入数据,结合文物的类型从而建立了十四个输入变量、一个输出变量的神经网络,因曾选

择目前并没有可靠的成熟理论,可根据数据的复杂程度尝试不同的隐含层节点数目。

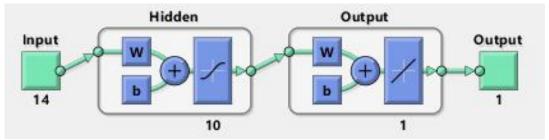


图 14 神经网络结构图

在此需要特作说明,虽然问题一中已经说明了不同类型玻璃文物的风化前和风化后 的化学成分含量存在差异性,但根据问题二求解过程中的图 9,不论是在风化还是未风 化的条件之下,铅钡玻璃的氧化铅含量均远远大于高钾玻璃的氧化铅含量,高钾玻璃的 二氧化硅含量均大于铅钡玻璃,说明风化与否对可以用来区分铅钡玻璃和高钾玻璃的特 征化学成分含量的影响不大,为了方便后续数据分析以及灵敏度分析,我们选择在训练 中对已知风化和未风化玻璃的检测点在一开始不做特别区分。

具体步骤如下:

Step1: 训练时将高钾设为 S_K , 铅钡设为 S_{Ph} , 有如下关系:

$$S_K = 0, S_{Pb} = 1 \tag{4}$$

Step2: 将表单 1 和表单 2 中的文物进行数据整理,以所有有效样本的十四种化学成 分含量数据作为训练集数据,建立 BP 神经网络分类模型。

Step3:将建立的 BP 神经网络分类模型应用到训练、测试数据,得到模型的分类评 估结果。

Step4: 通过预测结果进行误差分析。

Step5:运用控制变量法进行敏感度分析。

1.2 神经网络模型求解

本文选取了14种影响较大的指标数据作为神经网络的输入值。将玻璃文物类型作 为神经网络的期望输出值。利用 MATLAB 的神经网络工具箱建立一个三层 BP 神经网 络模型,其中70%的样本数据用于神经网络训练,15%的样本用于测试BP神经网络的 样本集,另外15%的样本用于BP神经网络的样本集测试,可以检验网络的泛化能力。 最后, 当网络迭代 4 次时, 均方误差最小, 可以认为 BP 神经网络达到了最好的预测水 平,均方误差和拟合优度如图 15,图 15 所示,由图示结果可知网络训练效果较好。

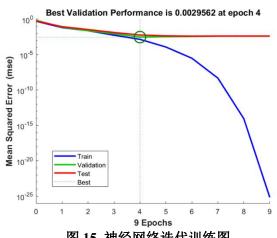


图 15 神经网络迭代训练图

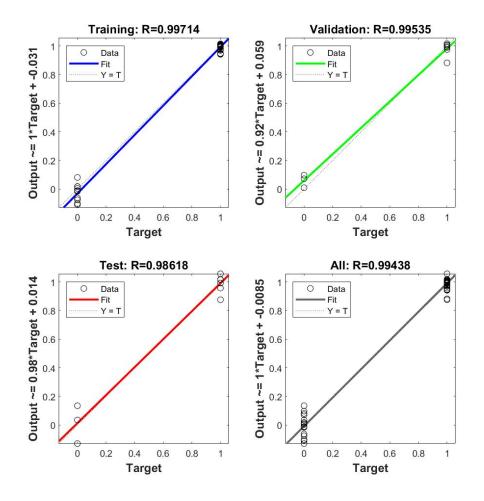


图 16 神经网络训练效果图

利用训练好的神经网络模型对表单3中8个未知样本的类型进行鉴别,若输出参数接近于0,则将其判定为高钾类型,否则判定为铅钡类型,预测结果如下表所示。

表 13 预测结果与误差

农13 灰 粉 4 木 4					
待测文物编号	表面风化	预测结果 x_i	玻璃类型 y_i	误差e _i	
A1	无风化	0.0658	0, 高钾	0.0658	
A2	风化	0.8558	1, 铅钡	0.1442	
A3	无风化	1.0003	1, 铅钡	0.0003	
A4	无风化	0.9290	1, 铅钡	0.0710	
A5	风化	0.9221	1, 铅钡	0.0779	
A6	风化	-0.0644	0, 高钾	0.0644	
A7	风化	-0.0360	0, 高钾	0.0360	
A8	无风化	0.8264	1, 铅钡	0.1736	

$$e_i = x_i - y_i \tag{5}$$

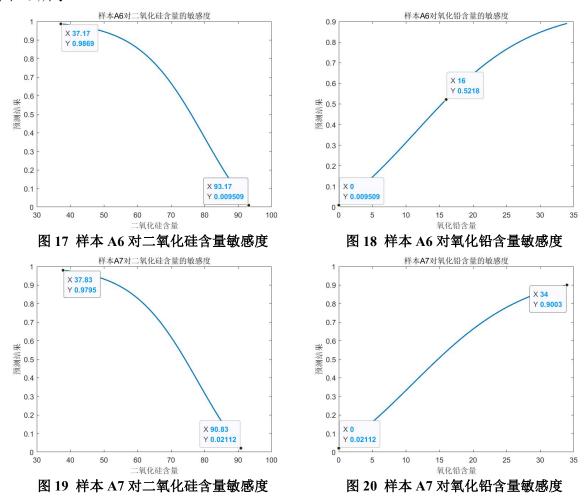
$$\overline{e} = \frac{1}{8} \sum_{i=1}^{8} (x_i - y_i) = 0.0792$$
 (6)

1.3 敏感度分析

通过问题二折线图可知,无论风化与否,高钾玻璃和铅钡玻璃的二氧化硅和氧化铅对比含量均有相同趋势,即高钾玻璃的二氧化硅含量均多于铅钡玻璃,铅钡玻璃的氧化铅含量均远大于高钾玻璃,且区分度显著,因此,我们运用控制变量法针对不同类型玻璃的两种化合物含量进行敏感度分析,分析步骤如下:

step1: 对风化高钾玻璃的敏感度分析

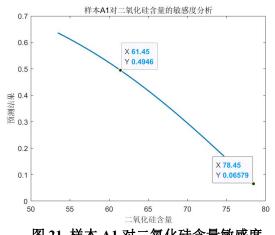
设风化高钾玻璃二氧化硅含量分别为 $\omega_{i-K-Sio2}(i=1,2,3\cdots,n)$,氧化铅含量分别为 $\omega_{i-K-Pbo}(i=1,2,3\cdots,n)$,风化铅钡玻璃二氧化硅含量最小值为 $\omega_{min-Pb-Sio2}$,氧化铅含量最大值为 $\omega_{max-Pb-Pbo}$,保持其他化合物含量不变,将 $\omega_{i-K-Sio2}(i=1,2,3\cdots,n)$ 和 $\omega_{i-K-Pbo}(i=1,2,3\cdots,n)$ 分别以步长 1 为单位逐步迭代到 $\omega_{min-Pb-Sio2}$ 和 $\omega_{max-Pb-Pbo}$,分别将得到的数据输入到训练好的神经网络,得出训练结果随迭代值的曲线图,如图 17,图 18 所示



从图中可以看出,风化高钾玻璃二氧化硅和氧化铅的含量对神经网络关于玻璃的分类敏感程度均较低,图示结果表明,控制其他化合物成分含量不变,二氧化硅含量减小到 70%以下才有可能被神经网络预测为铅钡玻璃,而根据表单 2 的统计数据可得风化高钾玻璃二氧化硅含量均值为 93.9%,所以二氧化硅含量值的波动对神经网络的鉴别影响很小,而氧化铅增加到 15%才有可能被神经网络预测为铅钡玻璃,而表单 2、3 中所有风化高钾玻璃的氧化铅含量均为 0,所以氧化铅含量值的波动对神经网络的鉴别影响很小,因此总体敏感性较低。

step2:对未风化高钾玻璃的敏感度分析

设未风化高钾玻璃二氧化硅含量分别为 $\omega_{l-K-Sio2}(l=1,2,3\cdots,n)$,氧化铅含量分别为 $\omega_{l-K-Pbo}(l=1,2,3\cdots,n)$,未风化铅钡玻璃二氧化硅含量最小值为 $\omega_{min-Pb-Sio2-wei}$,氧化铅含量最大值为 $\omega_{max-Pb-Pbo-wei}$ 将 $\omega_{l-K-Sio2}(l=1,2,3\cdots,n)$ 和 $\omega_{l-K-Pbo}(i=1,2,3\cdots,n)$ 分别以步长为 1 为单位逐步迭代到 $\omega_{min-Pb-Sio2-wei}$ 和 $\omega_{max-Pb-Pbo-wei}$,分别将得到的数据输入训练好的神经网络,得出训练结果随迭代值的曲线图,如图 21,图 22 所示



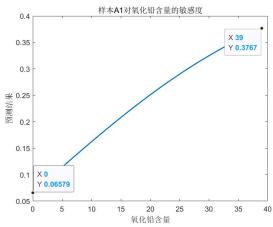


图 21 样本 A1 对二氧化硅含量敏感度

图 22 样本 A1 对氧化铅含量敏感度

从图中可以看出,未风化高钾玻璃二氧化硅和氧化铅的含量对神经网络关于玻璃的分类敏感程度均较低,图示结果表明,控制其他化合物成分含量不变,二氧化硅含量减小到 61%以下才有可能被神经网络预测为铅钡玻璃,而根据表单 2 的统计数据可得未风化高钾玻璃二氧化硅含量均值为 67.98%,所以二氧化硅含量值的波动对神经网络的鉴别影响较小,而氧化铅增加到 39%才有可能被神经网络预测为铅钡玻璃,而表单 2 中未风化高钾玻璃氧化铅含量均值为 0.41%,所以氧化铅含量值的波动对神经网络的鉴别影响很小,因此总体敏感性较低。

step3:对风化铅钡玻璃的敏感度分析

设风化铅钡玻璃二氧化硅含量分别为 $\omega_{i-Pb-Sio2}(l=1,2,3\cdots,n)$,氧化铅含量分别为 $\omega_{i-Pb-Pbo}(l=1,2,3\cdots,n)$,风化高钾玻璃二氧化硅含量最大值为 $\omega_{max-K-Sio2}$,氧化铅含量最小值为 $\omega_{min-K-Pbo}$ 将 $\omega_{i-Pb-Sio2}(l=1,2,3\cdots,n)$ 和 $\omega_{i-Pb-Pbo}(l=1,2,3\cdots,n)$ 分别以步长为1为单位逐步迭代到 $\omega_{max-K-Sio2}$ 和 $\omega_{min-K-Pbo}$,分别将得到的数据输入训练好的神经网络,得出训练结果随迭代值的曲线图,如图 23,图 24 所示

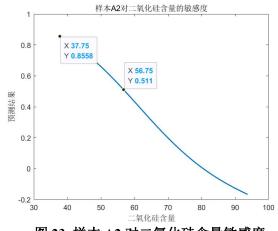


图 23 样本 A2 对二氧化硅含量敏感度

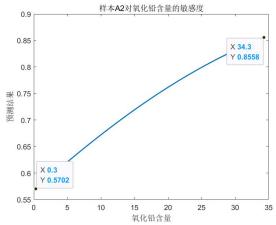
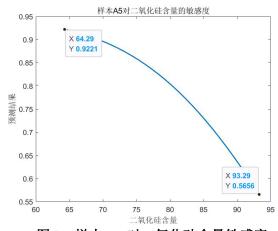


图 24 样本 A2 对氧化铅含量敏感度



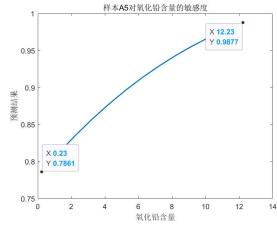


图 25 样本 A5 对二氧化硅含量敏感度

图 26 样本 A5 对氧化铅含量敏感度

从图中可以看出,风化铅钡玻璃二氧化硅和氧化铅的含量对神经网络关于玻璃的分类敏感程度均较低,图示结果表明,控制其他化合物成分含量不变,二氧化硅含量增加到 56%以上才有可能被神经网络预测为高钾玻璃,而根据表单 2 的统计数据可得风化铅钡玻璃二氧化硅含量均值为 24.9%,所以二氧化硅含量值的波动对神经网络的鉴别影响较小,而氧化铅减小到 0%附近也无法错误分类,所以氧化铅含量值的波动对神经网络的鉴别影响很小,因此总体敏感性较低。

step4:对未风化铅钡玻璃的敏感度分析

设未风化铅钡玻璃二氧化硅含量分别为 $\omega_{l-Pb-Sio2}(l=1,2,3\cdots,n)$,氧化铅含量分别为 $\omega_{l-Pb-Pbo}(l=1,2,3\cdots,n)$,未风化高钾玻璃二氧化硅含量最大值为 $\omega_{max-K-Sio2-wei}$,氧化铅含量最小值为 $\omega_{min-K-Pbo-wei}$ 将 $\omega_{l-Pb-Sio2}(l=1,2,3\cdots,n)$ 和 $\omega_{l-Pb-Pbo}(l=1,2,3\cdots,n)$ 分别以步长为 1 为单位逐步迭代到 $\omega_{max-K-Sio2-wei}$ 和 $\omega_{min-K-Pbo-wei}$,分别将得到的数据输入训练好的神经网络,得出训练结果随迭代值的曲线图,如图 27 到 32 所示。

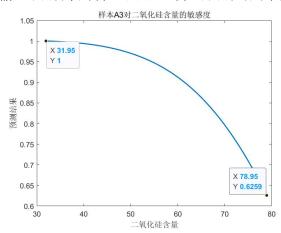


图 27 样本 A3 对二氧化硅含量敏感度

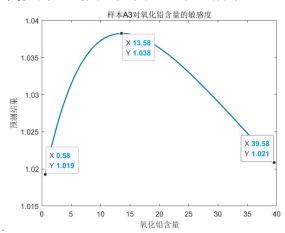


图 28 样本 A3 对氧化铅含量敏感度

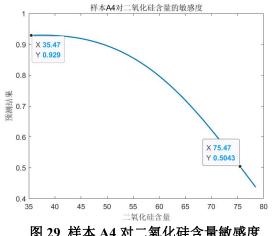


图 29 样本 A4 对二氧化硅含量敏感度

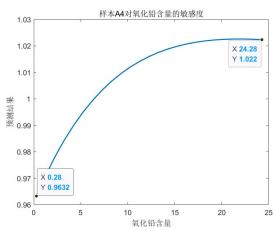


图 30 样本 A4 对氧化铅含量敏感度

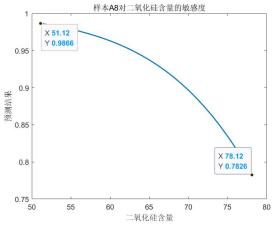


图 31 样本 A8 对二氧化硅含量敏感度

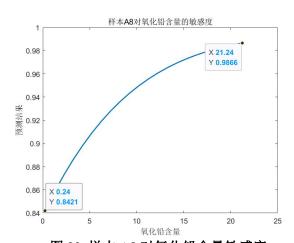


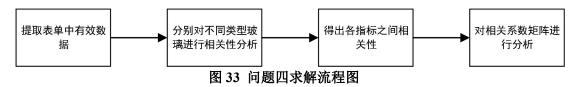
图 32 样本 A8 对氧化铅含量敏感度

从图中可以看出, 无风化铅钡玻璃二氧化硅和氧化铅的含量对神经网络关于玻璃的 分类敏感程度均较低, 图示结果表明, 控制其他化合物成分含量不变, 二氧化硅含量增 加到 70%以上也没有被鉴别出错,而根据表单 2 的统计数据可得风化铅钡玻璃二氧化硅 含量均值为53.4%, 所以二氧化硅含量值的波动对神经网络的鉴别影响较小, 而氧化铅 减小到0%附近也无法错误分类,所以氧化铅含量值的波动对神经网络的鉴别影响很小, 因此总体敏感性较低。

综上所述,神经网络模型对各种类型玻璃的二氧化硅含量与氧化铅含量的敏感性均 较低,模型鲁棒性较强,利于对未知样本的鉴别。

6.4 问题四的模型与求解

6.4.1 模型求解流程图



6.4.2 问题四的分析和求解

1. Spearman 模型建立思路

由问题二中我们已经根据化学成分含量分析出了高钾玻璃、铅钡玻璃的分类规律,我们分别找到了检测高钾玻璃和铅钡玻璃是否发生风化的对应的特征化学成分。

对于高钾玻璃,根据二氧化硅、氧化钾和氧化铝的含量,可以说明高钾玻璃的检测点是否风化,故我们以这三个化学成分作为主成分进行关联分析。

对于铅钡玻璃,根据氧化铅、二氧化硅的含量,可以说明铅钡玻璃的检测点是否风 化,故我们以这两个化学成分作为主成分进行关联分析。

但是由于以上几个特征化学成分的含量数值不符合正态分布,所以我们运用 Spearman 相关系数对化学成分之间的关联进行相关性分析。

Spearman 相关系数被定义为等级变量之间的皮尔逊相关系数,对于样本容量为n的样本,n个原始数据被转换成等级数据,相关系数p为

$$\rho = \frac{\sum_{i} (x_{i} - \bar{x})(y_{i} - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i} (x_{i} - \bar{x})^{2} \sum_{i} (y_{i} - \bar{y})^{2}}}$$
(1)

注: p 值小于 0.05 或 0.01, 严格为 0.01, 不严格为 0.05。

2. 各类型玻璃的化学成分关联

2.1 高钾玻璃的化学成分关联

对于高钾玻璃,我们选择的特征变量是二氧化硅、氧化钾和氧化铝的含量。

表 14 高钾风化玻璃相关系数表 二氧化硅(SiO2) 氧化钾(K2O) 氧化铝(Al2O3) 二氧化 -0.943(0.005*** 1.000(0.000***) 0.290(0.577) 硅 (SiO2) 氧化钾 1.000(0.000* 0.290(0.577)-0.290(0.577)(K2O) 氧化铝 -0.943(0.005***) -0.290(0.577) 1.000(0.000***)(Al2O3)

注: ***、**、*分别代表 1%、5%、10%的显著性水平

运用 Spearman 相关系数,得到了高钾风化玻璃的相关系数表,过程和结果如下: 根据系数表中的 p 值大小,发现氧化铝和二氧化硅的 p 值为 0.01,说明二者存在显著性关系,严格相关;氧化钾与氧化铝、二氧化硅的 p 值均为 0.577,大于 0.05,关系均不显著,相关性不强。

根据相关性系数的正负和数值,氧化铝和二氧化硅的相关性较弱且为负相关,氧化钾和二氧化硅的相关性一般且为负相关,氧化钾和氧化铝的相关性极弱且为负相关。

表 15 高钾无风化玻璃相关系数表

	二氧化硅 (SiO2)	氧化钾(K2O)	氧化铝(Al2O3)	
二氧化 硅 (SiO2)	1.000(0.000***)	-0.555(0.077*)	-0.473(0.142)	
氧化钾 (K2O)	-0.555(0.077*)	1.000(0.000***)	-0.091(0.790)	

氧化铝	-0.473(0.142)	0.001(0.700)	1 000(0 000***)
(Al2O3)	-0.4/3(0.142)	-0.091(0.790)	1.000(0.000***)

注: ***、**、*分别代表 1%、5%、10%的显著性水平

分析过程和结果如下:

根据系数表中的 p 值大小,发现氧化铝和二氧化硅的 p 值为 0.142,大于 0.1,说明二者关系的显著性较差;氧化钾和氧化铝的 p 值为 0.790,大于 0.1,说明关系显著性较差;氧化钾和二氧化硅的 p 值为 0.077,介于 0.05 和 0.1 之间,显著性一般;

根据相关性系数的正负和数值,氧化铝和二氧化硅的相关性较弱且为负相关,氧化钾和二氧化硅的相关性一般且为负相关,氧化钾和氧化铝的相关性极弱且为负相关。

2.2 铅钡玻璃的化学成分关联

对于铅钡玻璃,我们选择的特征变量是氧化铅、二氧化硅的含量。

 表 16 铅钡风化玻璃相关系数表

 二氧化硅 (SiO2)
 氧化铅(PbO)

 二氧化硅 (SiO2)
 1.000(0.000***)
 -0.169(0.410)

 氧化铅(PbO)
 -0.169(0.410)
 1.000(0.000***)

分析过程和结果如下:

根据系数表中的 p 值大小,发现氧化铅和二氧化硅的 p 值为 0.410,大于 0.01,说明二者关系不显著;

根据相关性系数的正负和数值,氧化铅和二氧化硅的相关性较弱且为负相关。

表 16	铅钡无风化相关系数表

 		<u>* : </u>
	二氧化硅(SiO2)	氧化铅(PbO)
二氧化硅 (SiO2)	1.000(0.000***)	-0.602(0.002***)
 氧化铅(PbO)	-0.602(0.002***)	1.000(0.000***)

注: ***、**、*分别代表 1%、5%、10%的显著性水平

分析过程和结果如下:

根据系数表中的 p 值大小,发现氧化铅和二氧化硅的 p 值为 0.002,小于 0.01,说明二者关系关系较严格显著;

根据相关性系数的正负和数值,氧化铅和二氧化硅的相关性较强且为负相关。

2.3 不同类别之间的化学成分关联关系的差异性。

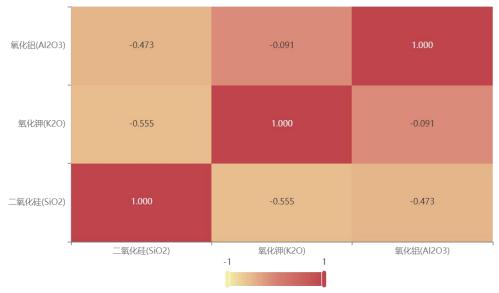


图 34 高钾玻璃风化前相关系数热力图

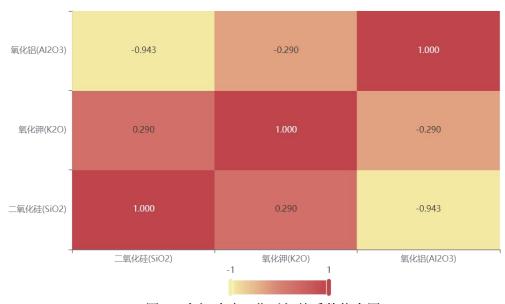


图 35 高钾玻璃风化后相关系数热力图

根据以上热力图,作出结论如下:

对于高钾玻璃,风化后,氧化铝和二氧化硅的相关性增强,氧化钾和二氧化硅的相 关性减弱,氧化钾和氧化铝的相关性减弱

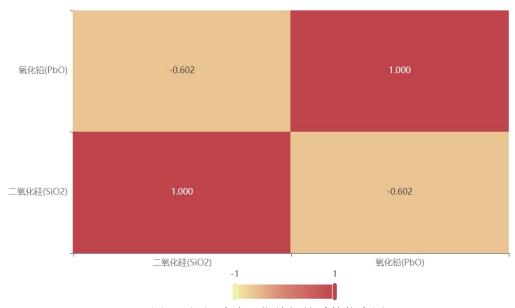


图 36 铅钡玻璃风化前相关系数热力图

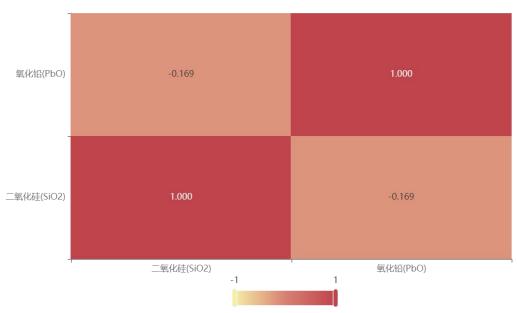


图 37 铅钡玻璃风化后相关系数热力图

根据以上热力图,作出结论如下:

对于铅钡玻璃,风化后,氧化铅和二氧化硅的相关性减弱。

- 注:上表展示了模型检验的参数结果表,包括了相关系数、显著性 P 值。
- 1. 先对 XY 之间是否存在统计上的显著性关系进行检验,判断 P 值是否呈现显著性(*p<0.05,**p<0.01);
- 2. 若呈现显著性,则说明两变量之间存在相关性,反之,则两变量之间不存在相关性;
- 3. 分析相关系数的正负向以及相关性程度。
- 4 热力图主要通过颜色深浅去表示相关系数的值的大小。

七、模型检验

7.1 问题一预测模型检验

使用 SPSSPRO 软件,利用高钾的所有数据和铅钡的所有数据建立两个 bp 神经网络预测是否风化的模型,再分别代入问题 1 所得预测的各成分含量做是否风化的预测,对问题一预测的结果做检验,结果如下:

7.1.1 高钾

表 18 bp 预测结果

衣 18 bp 顶侧结果				
	预测结果概率 无风化	预测结果概率_风化		
无风化	0.9999998303 079579	1.6969204203382017e- 7		
无风化	0.9999995736 977958	4.263022042099792e-7		
无风化	0.9999990760 501699	9.239498300500046e-7		
无风化	0.9999997415 925547	2.5840744531879365e- 7		
无风化	0.9999999341 347875	6.586521254985415e-8		
无风化	0.9999998619 051876	1.3809481238684058e- 7		

分析检验:

因为所有预测结果均为无风化,且无风化概率很高,说明问题一所用预测模型准确率较高。

7.1.2 铅钡

表 19 hn 预测结果

		衣 19 Up 顶侧绢末	
预测结	/1,	预测结果概率_无风	预测结果概率_风化
<u>果_Y</u>	化		
无风化		0. 999999888	1.12E-07
无风化		0. 99999983	1.68E-08
无风化		0.999918957	8.10E-05
无风化		0. 99999993	6.86E-09
无风化		0. 999983383	1.66E-05
无风化		0.99999997	3.00E-08
无风化		0. 999993059	6.94E-06
无风化		0. 999999186	8.14E-07
无风化		0. 999999766	2.34E-07
无风化		0.99998532	1.47E-05
无风化		0.99297829	0.00702171
风化		0. 2803733	0.7196267
无风化		0.999980001	2.00E-05
无风化		0. 975262287	0.024737713
无风化		0. 998209343	0.001790657
无风化		1	1.89E-15
无风化		0. 999999684	3.16E-07
无风化		0. 999952323	4.77E-05

无风化	0.999997893	2.11E-06
无风化	0.99638084	0.00361916
无风化	0.99980181	0.00019819
无风化	0.999813697	0.000186303
风化	0.006902187	0. 993097813
无风化	0.999999716	2.84E-07
无风化	0.999997656	2.34E-06
无风化	0.999997525	2. 48E-06

2.2 分析检验

26个预测结果中,有两个预测结果不准确,通过对表单2的对比分析,因为这两处为严重风化,数值差异较大,故不准确。预测准确性越为92.315,准确性较好。

1. 总结分析

问题 1 所用预测模型的对一般风化程度的预测准确性较好,对极端情况的预测准确性较差。

八、 模型评价

● 优点

- 1. 问题一的预测模型使用的平均值经过方差检验后代表性较强。
- 2. 问题二的分类模型经过 k-means 聚类分析后得出合理性和敏感性较强。
- 3. 问题三的神经网络模型的拟合度较好,结果准确性高。
- 4. 问题三的神经网络模型的敏感度高。

● 缺点

- 1. 问题一的预测模型适用范围较窄,对于极端情况不能较好预测。
- 2. 问题三训练样本个数过少,可能造成的误差偏大。

九、 参考文献

- [1]姜启源,谢金星,叶俊.数学模型[M].北京:高等教育出版社,2003.
- [2]卓金武,李必文,魏永生,秦健.matlab 在数学建模中的应用[M].北京:北京航空航天大学出版社,2014.
- [3]张凤荣,王秀丽,梁小宏,孔祥斌,张青璞,杨黎芳.对全国第二次土壤普查中土类、亚类划分及其调查制图的辨析[J].土壤,2014,46(04):761-765.
- [4]张彩荷,李纯斌,吴静.基于草原综合顺序分类法的中国山地草地亚类分类研究[J]. 草业学报,2022,31(03):16-25.
- [5]邓晋福,刘翠,狄永军,冯艳芳,肖庆辉,刘勇,丁孝忠,孟贵祥,黄凡,赵国春,吴宗絮.英云闪长岩-奥长花岗岩-花岗闪长岩(TTG)岩石构造组合及其亚类划分[J].地学前缘,2018,25(06):42-50.
- [6] 董 云 朝 . 应 用 SPSS 软 件 分 析 名 义 变 量 之 间 的 相 关 性 [J]. 福 建 电 脑,2019,35(12):16-19.DOI:10.16707/j.cnki.fjpc.2019.12.005.
 - [7]张晋昕,李河.回归分析中定性变量的赋值[J].循证医学,2005(03):169-171.

1. 铅钡风化前预测

文物采样点	类型	表面风化	二氧化硅(SiO2)	氧化钠(Na2O)	氧化钾(K2O)	氧化钙(CaO)	氧化镁(MgO)	氧化铝(Al2O3)	氧化铁(Fe2O3)	氧化铜(CuO)	氧化铅(PbO)	氧化钡(BaO)	五氧化二磷 (P2O5)	氧化锶(SrO)	氧化锡(SnO2)	二氧化硫 (SO2)
02	铅钡	无风化	69.99	0.00	1.00	1.08	1.04	7.35	2.45	0.00	26.26	0.00	0.00	0.08	0.00	0.00
08	铅钡	无风化	53.85	0.00	0.00	0.22	0.00	2.96	0.59	9.55	7.51	29.36	0.00	0.26	0.00	0.00
08严重风化	铅钡	无风化	38.32	0.00	0.00	1.93	0.00	2.73	0.59	2.28	11.28	28.75	3.33	0.42	0.00	9.81
11	铅钡	无风化	67.30	0.00	0.16	2.25	0.57	4.31	0.59	4.07	4.22	12.74	5.15	0.26	0.00	0.00
19	铅钡	无风化	63.35	0.00	0.00	1.67	0.45	5.19	1.92	2.65	21.65	3.48	4.60	0.08	0.00	0.00
26	铅钡	无风化	53.50	0.00	0.00	0.18	0.00	2.32	0.59	9.71	8.36	30.38	0.00	0.34	0.00	0.00
26严重风化	铅钡	无风化	37.43	0.00	0.35	1.75	0.00	2.80	0.59	2.74	8.75	33.58	1.81	0.51	0.00	10.73
34	铅钡	无风化	69.49	0.00	0.20	-0.48	0.00	3.24	1.06	0.65	25.38	8.13	0.00	0.11	0.00	0.00
36	铅钡	无风化	73.28	4.81	0.09	-0.89	0.00	3.22	0.91	0.00	20.44	8.96	0.00	0.11	0.00	0.00
38	铅钡	无风化	66.64	3.97	0.00	-0.58	0.00	4.19	0.88	0.00	28.14	7.92	0.00	0.30	0.00	0.00
39	铅钡	无风化	59.96	0.00	0.00	-0.15	0.00	2.12	0.59	0.02	39.86	5.35	0.00	0.50	0.00	0.00
40	铅钡	无风化	50.42	0.00	0.00	0.61	0.00	2.07	0.78	0.00	49.04	4.82	0.00	0.57	0.00	0.00
41	铅钡	无风化	52.17	0.00	0.39	3.70	2.59	4.95	2.38	0.00	22.95	7.89	3.23	0.36	0.00	0.00
43部位1	铅钡	无风化	46.12	0.00	0.00	3.98	0.00	3.87	1.35	4.49	38.68	5.42	0.00	0.53	0.00	0.00
43部位2	铅钡	无风化	55.41	0.00	0.00	5.14	0.81	5.03	1.98	0.65	23.58	1.39	8.60	0.36	0.00	0.00
48	铅钡	无风化	87.04	3.39	0.27	1.56	1.40	15.27	1.62	0.00	0.00	5.44	0.00	0.14	0.78	0.00
49	铅钡	无风化	62.50	0.00	0.00	3.32	1.33	7.00	3.33	0.00	13.01	4.23	6.87	0.35	0.00	0.00
50	铅钡	无风化	51.69	0.00	0.00	1.93	0.33	3.49	0.92	0.27	22.83	12.33	2.11	0.55	0.00	0.00
51部位1	铅钡	无风化	58.32	0.00	0.00	2.32	1.05	6.87	1.78	0.51	19.07	7.07	3.87	0.28	0.00	0.00
51部位2	铅钡	无风化	55.06	0.00	0.00	3.87	1.31	4.13	1.01	0.00	30.17	0.00	4.52	0.00	0.00	0.00
52	铅钡	无风化	59.45	3.81	0.00	1.01	0.41	2.78	0.82	0.00	26.25	6.77	1.48	0.33	0.00	0.00
54	铅钡	无风化	55.99	0.00	0.27	1.93	1.14	5.77	0.59	0.00	34.29	5.17	0.01	0.77	0.00	0.00
54严重风化	铅钡	无风化	50.82	0.00	0.00	-1.26	0.97	5.27	0.59	0.48	37.29	0.00	9.90	1.01	0.00	0.00
56	铅钡	无风化	62.86	0.00	0.00	-0.05	0.00	3.47	0.59	0.00	20.08	13.58	0.00	0.00	0.00	0.00
57	铅钡	无风化	59.13	0.00	0.00	0.05	0.00	3.80	0.59	0.30	23.93	15.43	0.00	0.00	0.00	0.00
58	铅钡	无风化	64.10	0.00	0.29	2.23	0.65	5.14	1.45	2.27	18.18	5.79	4.76	0.13	0.00	0.00

2. 高钾风化前预测

文物采样点	类型	表面风化	二氧化硅 (SiO2)	氧化钠 (Na2O)	氧化钾(K2O)	氧化钙(CaO)	氧化镁(MgO)	氧化铝 (Al2O3)	氧化铁 (Fe2O3)	氧化铜(CuO)	氧化铅(PbO)	氧化钡(BaO)	五氧化二磷 (P2O5)	氧化锶(SrO)	氧化锡 (SnO2)	二氧化硫 (SO2)
07	高钾	不风化	62.29	0.00	9.36	6.60	0.71	6.67	2.22	4.35	0.71	0.00	1.80	0.08	0.00	0.00
09	高钾	不风化	64.68	0.00	9.95	6.15	0.71	6.01	2.37	2.66	0.71	0.00	1.54	0.08	0.00	0.00
10	高钾	不风化	66.43	0.00	10.28	5.74	0.71	5.50	2.31	1.95	0.71	0.00	1.19	0.08	0.00	0.00
12	高钾	不风化	63.95	0.00	10.37	6.25	0.71	6.15	2.34	2.76	0.71	0.00	1.34	0.08	0.00	0.00
22	高钾	不风化	62.01	0.00	10.10	7.19	1.35	8.19	2.40	1.66	0.71	0.00	1.40	0.08	0.00	0.00
27	高钾	不风化	62.38	0.00	9.36	6.47	1.25	7.20	2.25	2.65	0.71	0.00	1.55	0.08	0.00	0.00

3. 高钾亚分类

	种类划分
01	高钾高铜
03 部位 1	高钾低铜
03 部位 2	高钾高铜
04	高钾低铜
05	高钾高铜
06 部位 1	高钾低铜
06 部位 2	高钾低铜
07	高钾高铜
09	高钾低铜
10	高钾低铜
12	高钾低铜
13	高钾高铜
14	高钾低铜
16	高钾低铜
18	高钾低铜
21	高钾高铜
22	高钾低铜
27	高钾低铜

4. 铅钡亚分类

文物采样点	种类划分
02	铅钡低钙
08	铅钡低钙
08 严重风化点	铅钡高钙
11	铅钡高钙

19	铅钡高钙
20	铅钡低钙
23 未风化点	铅钡低钙
24	铅钡低钙
25 未风化点	铅钡低钙
26	铅钡低钙
26 严重风化点	铅钡高钙
28 未风化点	铅钡低钙
29 未风化点	铅钡高钙
30 部位 1	铅钡高钙
30 部位 2	铅钡高钙
31	铅钡低钙
32	铅钡低钙
33	铅钡低钙
34	铅钡低钙
35	铅钡低钙
36	铅钡低钙
37	铅钡低钙
38	铅钡低钙
39	铅钡低钙
40	铅钡低钙
41	铅钡高钙
42 未风化点 1	铅钡低钙
42 未风化点 2	铅钡低钙
43 部位 1	铅钡高钙
43 部位 2	铅钡高钙
44 未风化点	铅钡低钙
45	铅钡低钙
46	铅钡低钙
47	铅钡低钙
48	铅钡高钙
49	铅钡高钙
49 未风化点	铅钡低钙
50	铅钡高钙
50 未风化点	铅钡高钙
51 部位 1	铅钡高钙
51 部位 2	铅钡高钙
52	铅钡低钙
53 未风化点	铅钡低钙
54	铅钡高钙
54 严重风化点	铅钡低钙
55	铅钡低钙
56	铅钡低钙
57	铅钡低钙
58	铅钡高钙
	14 5/15/14

5. 各种玻璃类型化合物含量皮尔逊相关系数矩阵

		风化高钾泵	皮璃各化学	成分皮尔	下逊相关系	数矩阵		
	二氧化 硅	氧化钾	氧化钙	氧化 镁	氧化铝	氧化 铁	氧化 铜	五氧化 二磷
二氧化 硅	1.000	0.406	-1.000**	-0.676	-0.943**	-0.029	0.029	-0.543
氧化钾	0.406	1.000	-0.406	-0.223	-0.406	0.522	-0.232	-0.928**
氧化钙	-1.000**	-0.406	1.000	0.676	0.943**	0.029	-0.029	0.543
氧化镁	-0.676	-0.223	0.676	1.000	0.845*	0.338	-0.676	0.135
氧化铝	-0.943**	-0.406	0.943**	0.845*	1.000	0.086	-0.200	0.486
氧化铁	-0.029	0.522	0.029	0.338	0.086	1.000	-0.543	-0.486
氧化铜	0.029	-0.232	-0.029	-0.676	-0.200	-0.543	1.000	0.486
五氧化 二磷	-0.543	-0.928**	0.543	0.135	0.486	-0.486	0.486	1.000

	-1-	可从产畑	かかななん	쓰유사	<i>├</i>	人工业和口际		
	木	风化尚钾	坎埚石化	子风分皮	小型相力	长系数矩阵		
	二氧化 硅	氧化钾	氧化钙	氧化 镁	氧化 铝	氧化铁	氧化 铜	五氧 化二 磷
二氧化 硅	1.000	-0.622*	-0.662*	-0.074	-0.448	-0.718**	-0.403	-0.091
氧化钾	-0.622*	1.000	0.827**	-0.389	-0.126	0.004	0.210	-0.420
氧化钙	-0.662*	0.827**	1.000	-0.432	0.095	0.177	0.221	-0.459
氧化镁	-0.074	-0.389	-0.432	1.000	0.553	0.447	0.025	0.546
氧化铝	-0.448	-0.126	0.095	0.553	1.000	0.588*	-0.046	0.154
氧化铁	-0.718**	0.004	0.177	0.447	0.588*	1.000	0.618*	0.557
氧化铜	-0.403	0.210	0.221	0.025	-0.046	0.618*	1.000	0.200
五氧化 二磷	-0.091	-0.420	-0.459	0.546	0.154	0.557	0.200	1.000

	未风化	铅钡玻璃	各化学成	分皮尔语	外相关系数	数矩阵	
	二氧化 硅	氧化 钾	氧化 钙	氧化 镁	氧化 铝	氧化铁	氧化铜
二氧化 硅	1.000	-0.136	-0.262	0.166	-0.239	-0.087	-0.264
氧化钾	-0.136	1.000	-0.153	0.273	0.560*	-0.043	0.068
氧化钙	-0.262	-0.153	1.000	0.187	0.006	0.323	-0.419
氧化镁	0.166	0.273	0.187	1.000	0.439	0.016	-0.339
氧化铝	-0.239	0.560*	0.006	0.439	1.000	0.287	-0.030
氧化铁	-0.087	-0.043	0.323	0.016	0.287	1.000	-0.613*
氧化铜	-0.264	0.068	-0.419	-0.339	-0.030	-0.613*	1.000
五氧化 二磷	0.033	-0.241	-0.121	-0.417	0.006	0.416	0.208
氧化纳	-0.071	-0.011	0.201	-0.033	-0.037	-0.473	0.201

氧化铅	-0.613*	-0.107	0.481	0.000	-0.264	0.084	-0.278
氧化钡	-0.740**	0.175	-0.091	-0.266	0.429	-0.149	0.451
氧化锶	-0.600*	0.070	0.297	0.241	0.203	-0.086	0.102
氧化锡	-0.507	0.072	0.621*	0.221	0.280	0.560*	-0.625*
二氧化 硫	0.077	0.159	0.155	-0.284	-0.077	-0.252	0.309

	未风化铅钡玻璃各化学成分皮尔逊相关系数矩阵												
	五氧化 二磷	氧化纳	氧化铅	氧化钡	氧化锶	氧化锡	二氧化 硫						
二氧化 硅	0.033	-0.071	-0.613*	-0.740**	-0.600*	-0.507	0.077						
氧化钾	-0.241	-0.011	-0.107	0.175	0.070	0.072	0.159						
氧化钙	-0.121	0.201	0.481	-0.091	0.297	0.621*	0.155						
氧化镁	-0.417	-0.033	0.000	-0.266	0.241	0.221	-0.284						
氧化铝	0.006	-0.037	-0.264	0.429	0.203	0.280	-0.077						
氧化铁	0.416	-0.473	0.084	-0.149	-0.086	0.560*	-0.252						
氧化铜	0.208	0.201	-0.278	0.451	0.102	-0.625*	0.309						
五氧化 二磷	1.000	-0.400	-0.256	-0.041	-0.235	-0.105	0.309						
氧化纳	-0.400	1.000	0.100	0.011	0.046	-0.230	-0.157						
氧化铅	-0.256	0.100	1.000	0.093	0.531	0.620*	-0.154						
氧化钡	-0.041	0.011	0.093	1.000	0.447	0.236	0.154						
氧化锶	-0.235	0.046	0.531	0.447	1.000	0.359	0.079						
氧化锡	-0.105	-0.230	0.620*	0.236	0.359	1.000	-0.123						
二氧化 	0.309	-0.157	-0.154	0.154	0.079	-0.123	1.000						

	风化	と铅钡玻	璃各化学	成分皮尔逊	相关系数	矩阵	
	二氧化 硅	氧化 钾	氧化钙	氧化镁	氧化铝	氧化铁	氧化铜
二氧化 硅	1.000	0.329	-0.285	0.086	0.389*	0.314	-0.327
氧化钾	0.329	1.000	0.097	0.291	0.326	0.220	-0.196
氧化钙	-0.285	0.097	1.000	0.636**	0.366	0.491*	0.135
氧化镁	0.086	0.291	0.636**	1.000	0.814**	0.626**	-0.316
氧化铝	0.389*	0.326	0.366	0.814**	1.000	0.603**	-0.215
氧化铁	0.314	0.220	0.491*	0.626**	0.603**	1.000	-0.345
氧化铜	-0.327	-0.196	0.135	-0.316	-0.215	-0.345	1.000
五氧化 二磷	-0.198	-0.039	0.505**	0.486*	0.389*	0.211	0.192
氧化纳	0.469*	0.052	-0.376	-0.095	-0.024	0.063	-0.461*
氧化铅	-0.169	-0.203	-0.150	0.031	-0.088	0.021	-0.338
氧化钡	-0.143	0.031	-0.241	-0.631**	-0.537**	-0.535**	0.410*

氧化锶	-0.667**	-0.110	0.144	0.064	-0.166	-0.210	0.072
氧化锡	0.240	0.090	0.129	0.383	0.425*	0.276	-0.194
二氧化 硫	-0.496**	-0.021	-0.055	-0.441*	-0.478*	-0.466*	0.543**

	风化铅钡玻璃各化学成分皮尔逊相关系数矩阵													
	五氧化 二磷	氧化纳	氧化铅	氧化钡	氧化锶	氧化 锡	二氧化 硫 硫							
二氧化 硅	-0.198	0.469*	-0.169	-0.143	-0.667**	0.240	-0.496**							
氧化钾	-0.039	0.052	-0.203	0.031	-0.110	0.090	-0.021							
氧化钙	0.505**	-0.376	-0.150	-0.241	0.144	0.129	-0.055							
氧化镁	0.486*	-0.095	0.031	-0.631**	0.064	0.383	-0.441*							
氧化铝	0.389*	-0.024	-0.088	-0.537**	-0.166	0.425*	-0.478*							
氧化铁	0.211	0.063	0.021	-0.535**	-0.210	0.276	-0.466*							
氧化铜	0.192	-0.461*	-0.338	0.410*	0.072	-0.194	0.543**							
五氧化 二磷	1.000	-0.378	-0.233	-0.325	0.177	-0.048	0.026							
氧化纳	-0.378	1.000	-0.039	0.070	-0.168	0.243	-0.180							
氧化铅	-0.233	-0.039	1.000	-0.585**	0.288	-0.333	-0.506**							
氧化钡	-0.325	0.070	-0.585**	1.000	-0.090	-0.041	0.624**							
氧化锶	0.177	-0.168	0.288	-0.090	1.000	-0.118	0.177							
氧化锡	-0.048	0.243	-0.333	-0.041	-0.118	1.000	-0.122							
二氧化 硫	0.026	-0.180	-0.506**	0.624**	0.177	-0.122	1.000							

6. 神经网络预测模型 matlab 代码

function [Y,Xf,Af] = myNeuralNetworkFunction(X,~,~)

x1 step1.gain =

[0.0214938205265986; 0.2525252525252525253; 0.137741046831956; 0.229885057471264; 0.732600732600733; 0.143988480921526; 0.33112582781457; 0.189214758751183; 0.0284859706594502; 0.0564174894217207; 0.141542816702052; 1.78571428571429; 0.847457627118644; 0.125391849529781];

x1 step 1.ymin = -1;

b1 =

 $\begin{bmatrix} 1.7192623310735060116; -1.1076791597144568513; -1.0936860804440866612; 0.62355613 \\ 991150282693; -0.41061629460519866175; 0.016460322170464607161; -0.777009197223965 \\ 88618; 0.85685345335637075337; -2.0382465000140288502; 1.7205815895044600516]; \\ IW1_1 = \begin{bmatrix} -0.36527398520395132353 & -0.70193811160132324467 & 0.30463879417518741066 \\ 0.19158807005626002362 & 0.23755554951163920796 & 0.27689014582806115161 \\ \end{bmatrix}$

- -0.11681677938540324657 0.21665879719297026496 -0.12465631256847362063
- $-0.18500253494964413736\ 0.65992119725047926337; 0.33276721899657307757$
- -0.039949390920284669204 0.16960719335298152233 -0.67341625567038987388
- 0.38831321711003563557 0.86170485988896206031 0.66984473169605562859

```
-0.014162227851783011634 -0.41098491533685010957 -0.11738318673890926758
-0.15139550337413487657\ 0.64099268686874788514\ 1.3538026198404433664
-0.53396139309165113751; 1.221271368384658329 -0.63415575540903312834
-0.93982177938894584379 -0.35289887258375540746 -0.085094887503033261877
0.44126019591543153009 0.1847543540833366249 -0.26130311030394443028
-0.66689346591053111357 -0.33158184823265585139 -0.1024738817102965327
0.3168230043995990397 2.0672855472329887405
-0.13371856703821302648; -0.56460974203656599801 -0.2451486374250272382
-0.7169327832428088465 -1.0459436914429280918 -0.34802014007490633674
0.27215354174032196921 - 0.28194725248313912136 - 0.034287250180595502114
0.56734188498238979914 1.1289580381813204557 -0.7780337392601529567
0.037476806801233726596 0.63308944638748620992
-0.2121081198335367235; 0.3276592341581897605 0.41906778800275540364
0.0079729105836107393157\ 0.16710494972310852013\ 0.095381643869153390214
-0.39420917652846276802 -0.28199126661628798329 1.3981485489845082437
0.38907088789185606537 0.53746348168816193702 0.79292603246109849557
-0.62332767018102352985 0.09800522026841537726
0.98144402991653723056; 1.6926764350803238379 \ 0.19574134698339129557
0.045287585947400413322\ 1.4239228944752624351\ -0.55972326957086881993
0.073641067372840610106\ 0.22694045041278379515\ -0.68284045119089420428
0.2017143762882381286 - 0.96897561265372145201 - 0.17108066067793586962
-0.035741465778489661664 -0.091234513976522102485
0.98929923712025014115; -0.35940774425199134567 0.65797147392642485464
0.48944644698076816836 0.087850684867193010175 -0.29617869984896227908
0.60658259290767913008 0.28630602396642501617 -0.39354703733261525711
0.37403640755688682962 0.27513808477870382863 -0.023092674974298274537
-0.21640419083730444427\ 0.51602776070396971786
-0.28126311231494210974; 0.85568194847754119881 -0.76730457334342316855
0.01383188203892312014\ 0.3776186225872297797\ 0.49787873329910009579
0.052549058966099571055\ 0.082564451355562382129\ 0.14606134658919134317
-1.0057701879008711376\ 0.036599355046599953145\ 0.6134395241944055055
0.43218944939441822362 -0.22226573441594502101
0.86902863759161497192; 1.7834883977967923574 - 0.11293806385234643475
0.86555637615653502337 0.41088109423526075759 -1.4157099612528214472
0.2444612202819222424 - 0.0073734790351982354428 \ 0.037608434476645663525
-2.3822819490246609497 -0.55365797056113608132 0.68759778825004358449
-0.15499642453346532123 -0.32462980096543642139
0.95903705443343023607;-0.35018039243922455261 -0.593298570526080149
-0.75049445675496639918 0.88504449786653760501 0.3083425022312707986
0.35374595517985030213 0.014845288969805491008 -0.6252966022293877657
1.562570012460073654 -0.30183929250845820125 0.80261588086138235809
0.037360106173961966924\ 0.79453538293659342617\ -0.19421625646485324301;
b2 = -1.014671607637486872;
LW2 1 = [0.53830322352989889989 1.2725202170560248049 -1.4517074186611347297
0.89480687247837598086 -0.63523606568733603783 1.3261898052506162493
0.24468828575105186496 0.37745665816052892394 -1.4018854275662009368
-0.53513351161420752433];
y1 \text{ step } 1.ymin = -1;
v1 \text{ step } 1.gain = 0.666666666666667;
y1 	ext{ step1.xoffset} = 1;
```

```
isCellX = iscell(X);
if ~isCellX
     X = \{X\};
end
TS = size(X,2);
if \simisempty(X)
     Q = size(X\{1\},1);
else
     Q = 0;
end
Y = cell(1,TS);
for ts=1:TS
     X\{1,ts\} = X\{1,ts\}';
     Xp1 = mapminmax apply(X\{1,ts\},x1 step1);
     a1 = tansig apply(repmat(b1,1,Q) + IW1 1*Xp1);
     a2 = repmat(b2,1,Q) + LW2 1*a1;
     Y\{1,ts\} = mapminmax reverse(a2,y1 step1);
     Y\{1,ts\} = Y\{1,ts\}';
end
Xf = cell(1,0);
Af = cell(2,0);
if ~isCellX
     Y = cell2mat(Y);
end
end
function y = mapminmax apply(x, settings)
y = bsxfun(@minus,x,settings.xoffset);
y = bsxfun(@times,y,settings.gain);
y = bsxfun(@plus,y,settings.ymin);
end
function a = tansig apply(n, \sim)
a = 2 ./ (1 + \exp(-2*n)) - 1;
end
function x = mapminmax reverse(y,settings)
x = bsxfun(@minus,y,settings.ymin);
x = bsxfun(@rdivide,x,settings.gain);
x = bsxfun(@plus,x,settings.xoffset);
end
7. 灵敏度检验matlab代码
clc:
clear;
load('matlab.mat');
                                           3.6 29.92
                                                                         0.62
X=[3.720]
             0.4 3.01
                              1.18
                                      0
                                                       35.45
                                                                6.04
                                                                                 0
                                                                                      15.95
4.61
                 3.19
                              1.110
                                      3.14
                                               32.45
                                                        30.62
                                                                7.56
                                                                         0.53
                                                                                 0
                                                                                      15.03
        0
             0
                         0
12.41
                 5.24
                                  2.25
                                           0.76
                                                   5.35
                                                                    7.29
                                                                                 0.64
        0
             0
                         0.89
                                                            59.85
                                                                             0
                                                                                          0
    0.00
16.71
             0
                 1.87
                         0
                              0.45
                                      0.19
                                               0
                                                   70.21
                                                            6.69
                                                                    1.77
                                                                             0.68
                                                                                     0
        0
    0.00
             0
17.11
        0
                 0 1.113.65
                                  0
                                      1.34
                                               58.46
                                                       0
                                                            14.13
                                                                    1.12
                                                                             0
                                                                                 0.00
```

17.98 0.0		0	3.1	9	0.47	7	1.8	7	0.3	3	1.13	3	44	14.	2	6.3	4	0.6	6 0
18.46	0				6	2.73	3	3.33	3	1.79	9	0.19	9	44.	12	9.7	6	7.4	6
0.4			0.0		0	0.7	Λ	10	57	20	52	22	25	2.1	2	0.4	5	0	1.06
	0	0	1.4		0	0.7													1.96 0
20.14		0	1.4	8	U	1.34	+	U	10.4	41	28.0	08	31.	23	3.3	9	0.3	/	U
2.5		0	<i>5</i> 1:	2	1 44	-	2.5	1	0.4	2	0.7	_	<i>-</i> 1	2.4	0	0.7	_	0	0
21.35	-	0	5.1	3	1.45)	2.5	1	0.4	2	0.7.	3	51.	34	U	8.7	3	0	U
0.0		0	<i>C</i> 1	0.0	_	2 41	1	1 2	0	1 -	1	44	7.5	2.2	_	10	0.2	0.4	7 0
21.7		U	6.4	0.93	3	3.4	L	1.3	9	1.5	1	44.	/3	3.2	b	12.	83	0.4	7 0
0.0		0.2	2	2 1/	0	1.00		4 1	_	0	0.07	,		1.0	7.0	1	4.0	4	0.00
22.28	0		2	3.15	9	1.28	3	4.13)	0	0.8.	3	55.	46	7.0	4	4.2	4	0.88
	0.0		2.5	0	1 1/	,	<i>-</i> 2	_	1 1	0	1.2/	_	40	2.4	0.0	4	0.1	0.2	0
	0			8	1.19)	5.23)	1.15	9	1.3	/	40.	24	8.9	4	8.1	0.3	9
0.4		0.0			0	2.16		•		_	4.5			2	0	0	0	0.0	0
25.42	0				0													0.0	
		2	0	2.2	1	0.55)	1.10	6	0.2.	3	0.7	47.	42	8.6	4	5.7	l	0.44
0	0.0					_		_				_		_			_		_
26.25	0	0	1.1											6				0.0	
28.79	0	0	4.5			7			2.74					6.1				0	
29.15	0	0	1.2			1.85								45			0	0	0.00
29.64		0	2.9	3	0.59)	3.5	7	1.3	3	3.5	1	42.	82	5.3	5	8.8	3	0.19
0	0.0																		
30.39	0	0.3	4	3.49	9	0.79)	3.52	2	0.8	6	3.1.	3	39.	35	7.6	6	8.9	9
0.2	.4	0	0.0																
31.94	0	0	0.4°	7	0	1.59)	0	8.4	6	29.	14	26.	23	0.1	4	0.9	1	0
0.0																			
32.93	1.3	8	0	0.68	8	0	2.5	7	0.29	9	0.73	3	49.	31	9.7	9	0.4	8	0.41
0	0.0																		
33.59	0	0.2	1	3.5	1	0.71	1	2.69	9	0	4.93	3	25.	39	14.	61	9.3	8	0.37
0	0.0	0																	
34.34	0	1.4	1	4.49	9	0.98	3	4.3	5	2.12	2	0	39.	22	10.	29	0	0.3	5
0.4	0.0	0																	
35.78	0	0.2	5	0.73	8	0	1.62	2	0.4'	7	1.5	1	46.	55	10	0.3	4	0.2	2 0
0.0	0																		
36.28	0	1.0	5	2.3	4	1.18	3	5.73	3	1.8	6	0.2	6	47.	43	0	3.5	7	0.19
0	0.0	0																	
36.93	0	0	4.2	4	0.51	1	3.86	6	2.7	4	0	37.	74	10.	35	1.4	1	0.4	8
0.4	4	0.0	0																
37.36	0	0.7	1	0	0	5.45	5	1.5	1	4.7	8	9.3	23.	55	5.7	5	0	0	0.00
39.57	2.2	2	0.1	4	0.37	7	0	1.6	0.32	2	0.68	8	41.	61	10.	83	0.0	7	0.22
0	0.0	0																	
45.02	0	0	3.1	2	0.54	1	4.16	6	0	0.7	30.0	61	6.2	2	6.3	4	0.2	3	0
0.0	0																		
49.01	2.7	1	0	1.1.	3	0	1.45	5	0	0.8	6	32.9	92	7.9	5	0.3	5	0	0
0.0	00																		
50.61	2.3	1	0	0.63	3	0	1.9	1.53	5	1.12	2	31.9	9	6.6	5	0.19	9	0.2	0
0.0																			
51.26		4	0.1	5	0.79)	1.09	9	3.5	3	0	2.6	7	21.	88	10.	47	0.0	8
	5		0.0																
			-																

51.33 5.68 0.35 0 1.16 5.66 0 2.72 20.12 10.88 0 0 0 0.0051.54 4.66 0.29 0.87 0.61 3.06 0 0.65 25.4 9.23 0.1 0.85 0.00 53.33 0.8 0.32 2.82 1.54 13.65 1.03 0 15.71 7.31 1.1 0.25 1.31 0.00 53.79 7.92 0 0.5 0.71 1.42 0 2.99 16.98 11.86 0 0.330.00 54.61 0 0.3 2.08 1.2 6.5 1.27 0.45 23.02 4.19 4.32 0.3 0 0.00 0 0.25 0 1.67 4.79 0 0.77 25.25 10.06 0.2 0.43 55.21 0.0059.01 2.86 12.53 8.7 0 6.16 2.88 4.73 0 0 1.27 0 0 0.00 59.81 0 7.68 5.41 1.73 10.05 6.04 2.18 0.35 0.97 4.5 0.12 0.0060.12 0 0.23 0.89 0 2.72 0 3.01 17.24 10.34 1.46 0.31 3.66 60.74 3.06 0.2 2.14 0 12.69 0.77 0.43 13.61 5.22 0 0.26 0 0.0061.28 2.66 0.110.84 0.74 5 0 0.53 15.99 10.96 0 0.230 0.0061.58 0 10.95 7.35 1.77 7.5 2.62 3.27 0 0 0.94 0.06 0.4761.71 0 12.37 5.87 1.115.5 2.16 5.09 1.41 0.7 0.1 0 0.00 2.86 62.47 3.38 12.28 8.23 0.66 9.23 0.5 0.47 1.62 0 0.16 0 0 0.0063.3 0.92 0.3 2.98 1.49 14.34 0.81 0.7412.31 2.03 0.410.25 0 0.00 63.66 3.04 0.110.78 0 0.54 13.66 8.99 0 0.27 1.14 6.06 0.006.18 65.18 2.1 14.52 8.27 1.07 0.110 0 0.04 0.52 0.420 0.0065.88 0 9.67 7.12 1.56 6.44 2.06 2.18 $0 \quad 0$ 0.79 0.36 65.91 0 3.114.59 0.44 16.55 3.42 1.62 0.3 0 0 1.6 0.89 0.00 0 0.38 0 1.44 0.17 0.16 22.05 5.68 0.420.0067.65 0 0 1.98 11.15 2.39 2.51 0.2 1.38 7.37 4.18 0.110 0.001 4.7 0.41 68.08 0 0.26 1.34 0.33 17.14 4.04 1.04 0.12 0.23 0.00 69.33 0 9.99 6.32 0.87 3.93 1.74 3.87 0 0 1.17 0 0 0.39 69.71 0 0.1119.76 4.88 0.17 0 0 0.21 0.46 0 2.36 1 0.00 75.51 0 0.15 0.64 1 2.35 0 0.47 16.16 3.55 0.13 0 0 0.000 4.71 1.22 6.19 76.68 0 2.37 3.28 1 1.97 1.1 0 0 0 0 0 0 1.36 0.07 0 1.53 79.46 3.05 2.36 0 9.42 0.00 87.05 5.19 2.01 0 4.06 0 0.78 0.25 0 0.66 0.00 0.74 1.66 0.64 3.5 0.35 0.55 0 0 0.21 92.35 0 0 0 0.00 92.63 0 1.07 0 1.98 0.17 3.24 0 0 0.61 0 0 0 0.00

```
0 0 0.94 0.54
                             2.51
                                    0.2 1.54 0
                                                      0.36 0
92.72
                                                                     0.00
                                                  0
                                                                0
94.29
          1.01
                             1.46
                                    0.29
                                           1.65
                                                                     0.00
       0
                  0.72
                       0
                                                   0
                                                      0 0.15
                                                                 0
95.02
       0
          0.59
                  0.62
                         0
                             1.32
                                    0.32
                                           1.55
                                                   0
                                                      0
                                                          0.35
                                                                 0
                                                                     0.00
          0.92
                                    0.26
96.77
                                           0.84
                                                   0
                                                      0
                                                          0 0
                                                                     0.00
       0
                  0.21
                         0
                             0.81
                                                                 0
]
Y=[1
1
1
1
1
1
1
1
1
1
1
1
1
1
1
1
1
1
1
1
1
1
1
1
1
1
1
1
1
1
1
1
1
1
1
1
1
1
1
0
0
1
1
1
0
```

```
0
0
1
1
0
0
1
1
0
1
0
1
1
0
0
0
0
0
0
0
0
0
];
pridict_y=zeros(8,1);
pridict_x=[78.45 0 0
                         6.08
                                  1.86
                                          7.23
                                                   2.15
                                                           2.110
                                                                   0
                                                                        1.06
                                                                                0.03
                                                                                         0
    0.51
37.75
                             2.33
                                          0
                                              34.3
                                                                            0
                7.63
                         0
                                      0
                                                       0
                                                           14.27
                                                                   0
                                                                        0
       0
            0
31.95
                     7.19
                             0.81
                                      2.93
                                              7.06
                                                       0.21
                                                               39.58
                                                                        4.69
                                                                                2.68
        0
            1.36
    0.52
            0
                 0
35.47
            0.79
                     2.89
                              1.05
                                      7.07
                                              6.45
                                                       0.96
                                                               24.28
                                                                        8.31
                                                                                8.45
        0
    0.28
            0
                0
64.29
       1.2 0.37
                     1.64
                             2.34
                                      12.75
                                              0.81
                                                       0.94
                                                                12.23
                                                                        2.16
                                                                                0.19
    0.21
            0.49
                     0
93.17
                             0.21
                                      1.52
                                              0.27
                                                       1.73
                                                               0
                                                                    0
                                                                        0.21
                                                                                0
                                                                                     0
        0
            1.35
                     0.64
                                                                                         0
90.83
        0
            0.98
                     1.12
                              0
                                  5.06
                                          0.24
                                                   1.17
                                                           0
                                                               0
                                                                    0.13
                                                                            0
                                                                                0
                                                                                     0.11
                                          2.12
                                                                    21.24
51.12
                         0.89
                                  0.00
                                                   0.00
                                                           9.01
                                                                            11.34
        0.00
                 0.23
                                                                                     1.46
    0.31
            0.00
                     2.26
];
for i=1:8
     pridict_y(i,1)=sim(net,pridict_x(i,:)');
end
hhh=[0 1 1 1 1 0 0 1];
wucha=abs(pridict y'-hhh);
wucha=sum(wucha)/8;
mingandufenxi a1=[78.45]
                             0
                                 0
                                      6.08
                                               1.86
                                                       7.23
                                                               2.15
                                                                        2.110
                                                                                     1.06
    0.03
            0
                0.51
];
for i=1:1:25
     mingandufenxi a1=[mingandufenxi a1;mingandufenxi a1(1,:)];
```

```
end
for i=2:1:26
    mingandufenxi a1(i,:)=mingandufenxi a1(i,:)-[i-1,zeros(1,13)];
end
for i=1:26
    pridict a1(i,1)=sim(net,mingandufenxi a1(i,:)');
end
figure(1);
plot(mingandufenxi a1(:,1),pridict a1,'Linewidth',1.5);
xlabel('二氧化硅含量');
ylabel('预测结果');
title('样本 A1 对二氧化硅含量的敏感度');
mingandu of sio2 a1=(78.45-61.45)/78.45;
mingandufenxi a1=[78.45]
                           0
                              0
                                   6.08
                                            1.86
                                                   7.23
                                                           2.15
                                                                   2.110
                                                                               1.06
    0.03
            0
               0.51
];
for i=1:1:39
    mingandufenxi a1=[mingandufenxi a1;mingandufenxi_a1(1,:)];
end
for i=2:1:40
    mingandufenxi a1(i,:)=mingandufenxi a1(i,:)+[zeros(1,8),i-1,zeros(1,5)];
end
for i=1:40
    pridict a1(i,1)=sim(net,mingandufenxi a1(i,:)');
end
figure(2):
plot(mingandufenxi a1(:,9),pridict a1,'Linewidth',1.5);
xlabel('氧化铅含量');
ylabel('预测结果');
title('样本 A1 对氧化铅含量的敏感度');
mingandufenxi a2=[37.75
                                           0 2.33
                                                       0 0 34.3
                           0
                              0
                                   7.63
                                                                       0 14.27
    0
       0
];
for i=1:1:34
    mingandufenxi a2=[mingandufenxi a2;mingandufenxi a2(1,:)];
for i=2:1:35
    mingandufenxi a2(i,:)=mingandufenxi a2(i,:)-[zeros(1,8),i-1,zeros(1,5)];
end
```

```
pridict a2=[];
for i=1:35
    pridict a2(i,1)=sim(net,mingandufenxi a2(i,:)');
end
figure(3);
plot(mingandufenxi a2(:,9),pridict a2,'Linewidth',1.5);
xlabel('氧化铅含量');
ylabel('预测结果');
title('样本 A2 对氧化铅含量的敏感度');
mingandufenxi a8=[31.95
                                        7.19
                                                                 7.06
                                                                         0.21
                            0
                                1.36
                                                 0.81
                                                         2.93
                                                                                 39.58
    4.69
                            0
            2.68
                    0.52
                                0
];
for i=1:1:78-31
    mingandufenxi a8=[mingandufenxi a8;mingandufenxi a8(1,:)];
end
for i=2:1:79-31
    mingandufenxi a8(i,:)=mingandufenxi a8(i,:)+[i-1,zeros(1,13)];
end
pridict a4=[];
for i=1:48
    pridict a4(i,1)=sim(net,mingandufenxi a8(i,:)');
end
figure(4);
plot(mingandufenxi a8(:,1),pridict a4,'Linewidth',1.5);
xlabel('二氧化硅含量');
ylabel('预测结果');
title('样本 A3 对二氧化硅含量的敏感度');
mingandufenxi a8=[31.95
                            0
                                1.36
                                        7.19
                                                 0.81
                                                         2.93
                                                                 7.06
                                                                         0.21
                                                                                 39.58
                                0
    4.69
            2.68
                    0.52
                            0
];
for i=1:1:39
    mingandufenxi a8=[mingandufenxi a8;mingandufenxi a8(1,:)];
end
for i=2:1:40
    mingandufenxi a8(i,:)=mingandufenxi a8(i,:)-[zeros(1,8),i-1,zeros(1,5)];
end
pridict a4=[];
for i=1:40
    pridict a4(i,1)=sim(net,mingandufenxi a8(i,:)');
end
```

```
figure(4);
plot(mingandufenxi_a8(:,1),pridict_a4,'Linewidth',1.5);
xlabel('氧化铝含量');
ylabel('预测结果');
title('样本 A3 对氧化铝含量的敏感度');
mingandufenxi a8=[35.47
                            0
                                0.79
                                        2.89
                                                 1.05
                                                         7.07
                                                                 6.45
                                                                         0.96
                                                                                 24.28
    8.31
            8.45
                    0.28
                            0
                                0
];
for i=1:1:24
    mingandufenxi a8=[mingandufenxi a8;mingandufenxi a8(1,:)];
end
for i=2:1:25
    mingandufenxi a8(i,:)=mingandufenxi a8(i,:)-[i-1,zeros(1,13)];
end
pridict a4=[];
for i=1:25
    pridict a4(i,1)=sim(net,mingandufenxi a8(i,:)');
end
figure(4);
plot(mingandufenxi a8(:,1),pridict a4,'Linewidth',1.5);
xlabel('氧化铅含量');
ylabel('预测结果');
title('样本 A4 对氧化铅含量的敏感度');
mingandufenxi a8=[64.29
                            1.2 0.37
                                         1.64
                                                2.34
                                                         12.75
                                                                0.81
                                                                         0.94
                                                                                 12.23
    2.16
            0.19
                    0.21
                            0.49
                                    0
];
for i=1:1:12
    mingandufenxi a8=[mingandufenxi a8;mingandufenxi a8(1,:)];
end
for i=2:1:13
    mingandufenxi a8(i,:)=mingandufenxi a8(i,:)-[zeros(1,8),i-1,zeros(1,5)];
end
pridict a4=[];
for i=1:13
    pridict a4(i,1)=sim(net,mingandufenxi a8(i,:)');
end
figure(4):
plot(mingandufenxi a8(:,1),pridict a4,'Linewidth',1.5);
xlabel('氧化铅含量');
ylabel('预测结果');
```

title('样本 A5 对氧化铅含量的敏感度');

```
0.00
mingandufenxi a8=[51.12
                                     0.23
                                             0.89
                                                     0.00
                                                             2.12
                                                                      0.00
                                                                              9.01
    21.24
            11.34
                    1.46
                             0.31
                                     0.00
                                             2.26
];
for i=1:1:21
    mingandufenxi a8=[mingandufenxi a8;mingandufenxi a8(1,:)];
end
for i=2:1:22
    mingandufenxi a8(i,:)=mingandufenxi a8(i,:)-[zeros(1,8),i-1,zeros(1,5)];
end
pridict a8=[];
for i=1:22
    pridict a8(i,1)=sim(net,mingandufenxi a8(i,:)');
end
figure(4);
plot(mingandufenxi a8(:,9),pridict a8,'Linewidth',1.5);
xlabel('氧化铅含量');
ylabel('预测结果');
title('样本 A8 对氧化铅含量的敏感度');
8. 图表绘制 matlab 代码
%有无风化化学含量统计规律
clc;
clear;
                                                                              0.61
fenghua gaojia=[92.63
                        0
                            0
                                 1.07
                                             1.98
                                                     0.17
                                                             3.24
                                                                      0
                                                                         0
                                                                                      0
        0.00
    0
95.02
            0.59
                    0.62
                            0
                                 1.32
                                         0.32
                                                 1.55
                                                             0
                                                                 0.35
                                                                          0
                                                                              0
                                                                                  0.00
        0
                                                         0
96.77
            0.92
                    0.21
                             0
                                 0.81
                                         0.26
                                                 0.84
                                                         0
                                                             0
                                                                  0
                                                                    0
                                                                          0
                                                                              0.00
        0
94.29
            1.01
                    0.72
                             0
                                 1.46
                                         0.29
                                                 1.65
                                                         0
                                                             0
                                                                 0.15
                                                                          0
                                                                              0
                                                                                  0.00
        0
92.35
            0.74
                    1.66
                             0.64
                                     3.5 0.35
                                                 0.55
                                                         0
                                                             0
                                                                  0.21
                                                                          0
                                                                                  0.00
        0
                                                                              0
92.72
                0.94
                        0.54
                                 2.51
                                         0.2 1.54
                                                         0
                                                             0.36
                                                                          0
                                                                              0.00
        0
            0
                                                     0
                                                                      0
1;
average of gaojia fenghua=sum(fenghua gaojia)/6;
                                 9.99
                                         6.32
                                                         3.93
                                                                          3.87
wufenghua gaojia=[69.33
                                                 0.87
                                                                  1.74
                                                                                  0
                                                                                      0
    1.17
                0
            0
                    0.39
87.05
            5.19
                    2.01
                                4.06
                                         0
                                             0.78
                                                     0.25
                                                             0
                                                                 0.66
                                                                          0
                                                                              0
                                                                                  0.00
        0
                            0
                                             5.09
61.71
        0
            12.37
                    5.87
                             1.115.5 2.16
                                                     1.41
                                                             2.86
                                                                      0.7 \ 0.1 \ 0
                                                                                  0.00
65.88
            9.67
                                                     2.18
                                                                      0.79
        0
                    7.12
                             1.56
                                     6.44
                                             2.06
                                                             0
                                                                  0
                                                                                  0
    0.36
61.58
            10.95
                    7.35
                             1.77
                                     7.5 2.62
                                                 3.27
                                                         0
                                                             0
                                                                 0.94
                                                                          0.06
                                                                                  0
        0
    0.47
67.65
      0
            7.37
                    0 1.98
                                 11.15
                                         2.39
                                                 2.51
                                                         0.2 1.38
                                                                      4.18
                                                                              0.110
    0.00
59.81
            7.68
                    5.41
                             1.73
                                     10.05
                                            6.04
                                                     2.18
                                                             0.35
                                                                      0.97
                                                                              4.5 0.12
        0
```

```
0
      0.00
59.01
       2.86
              12.53
                     8.7 0
                            6.16
                                   2.88
                                          4.73 0
                                                     0 1.27
                                                                0 0
                                                                       0.00
62.47 3.38
              12.28
                     8.23
                            0.66
                                   9.23
                                          0.5 0.47
                                                     1.62
                                                                0.16
                                                                       0 0
   0.00
                             6.18
                                              1.07
                                                     0.110 0
65.18
      2.1 14.52
                8.27 0.52
                                       0.42
                                                                0.04
                                                                       0
   0.00
                     1.53
                            3.05
                                   0 0
                                          0 0
                                                1.36
79.46
      0 9.42
                 0
                                                       0.07
                                                                2.36
                                                                       0.00
                     1.22
                                   2.37
                                          3.28 1 1.97 1.1 0 0
76.68 0 0 4.71
                            6.19
                                                                       0.00
];
average of gaojia wufenghua=sum(wufenghua gaojia)/12;
fenghua qianbei=[36.28 0 1.05
                                2.34
                                       1.18
                                              5.73
                                                     1.86
                                                            0.26
                                                                   47.43 0
   3.57
          0.19 0
                    0.00
20.14 0
          0 1.48
                                0 10.41 28.68
                                                31.23 3.59
                                                                       0
                     0
                        1.34
                                                             0.37
   2.58
4.61
       0
          0 3.19
                     0
                       1.110
                                3.14
                                       32.45 30.62 7.56
                                                            0.53
                                                                       15.03
                                2.69
33.59
          0.21 3.51
                        0.71
                                       0
                                          4.93
                                                  25.39
                                                        14.61
                                                                9.38
                                                                       0.37
       0
       0.00
   0
29.64
       0
          0
              2.93
                     0.59
                            3.57
                                 1.33
                                          3.51
                                                 42.82
                                                        5.35
                                                                8.83
                                                                       0.19
   0
       0.00
                        0.7 0 10.57 29.53 32.25
19.79
       0
          0 1.44
                     0
                                                    3.13
                                                            0.45
                                                                       1.96
                                   3.6 29.92 35.45 6.04
3.72
          0.4 3.01
                     0
                       1.18
                                0
                                                            0.62
                                                                   0
                                                                       15.95
35.78
         0.25
               0.78
                                   0.47
                                          1.51
                                                  46.55
                                                        10 0.34
                        0 1.62
                                                                   0.22 0
  0.00
39.57
       2.22
              0.14
                     0.37
                            0 1.6 0.32
                                          0.68
                                                  41.61
                                                         10.83
                                                                0.07
                                                                       0.22
       0.00
  0
32.93
       1.38
              0 0.68
                       0
                            2.57
                                          0.73
                                                         9.79
                                   0.29
                                                  49.31
                                                                0.48
                                                                       0.41
      0.00
   0
26.25
       0 0
              1.110 0.5 0 0.88
                                   61.03
                                          7.22
                                                  1.16
                                                         0.61
                                                                0.00
              1.87
                        0.45
                                0.19
                                          70.21
                                                  6.69
                                                                0.68
16.71
       0
          0
                     0
                                       0
                                                         1.77
   0.00
18.46 0
          0.44
                 4.96
                        2.73
                                3.33
                                       1.79
                                              0.19
                                                     44.12
                                                           9.76
                                                                   7.46
   0.47
              0.00
          0
              5.24
                     0.89
                            2.25
                                 0.76
                                          5.35
                                                       7.29
12.41 0
                                                  59.85
                                                                   0.64
   0.00
21.7
          0
             6.4 0.95
                                       1.51
     0
                        3.41
                                1.39
                                              44.75 3.26
                                                          12.83
                                                                           0
                                                                   0.47
   0.00
53.33 0.8 0.32
                 2.82
                      1.54
                                13.65 1.03
                                              0
                                                15.71 7.31 1.1 0.25
          0.00
   1.31
28.79 0
          0 4.58
                     1.47
                            5.38
                                   2.74
                                          0.7 34.18 6.1 11.10.46
                                                                   0.00
17.98 0
              3.19
                     0.47
                            1.87
                                   0.33
                                          1.13
                                                  44 14.2
                                                            6.34
                                                                   0.66
   0.00
              3.58
                     1.19
                            5.25
                                          1.37
                                                  40.24
                                                         8.94
                                                                8.1 0.39
24.61
     0
          0
                                   1.19
   0.47
          0.00
21.35 0 0
              5.13
                     1.45
                            2.51
                                   0.42
                                          0.75
                                                  51.34
                                                         0
                                                           8.75
   0.00
25.74
      1.22
              0 2.27
                        0.55
                                       0.23
                                              0.7 47.42
                                                                5.71
                                1.16
                                                         8.64
                                                                       0.44
       0.00
   0
22.28
       0 0.32
                 3.19
                         1.28
                                4.15
                                       0 0.83
                                                  55.46
                                                         7.04
                                                                4.24
                                                                       0.88
   0
       0.00
```

```
0.00
17.11
       0
           0
               0 1.113.65
                             0
                                   1.34
                                           58.46 0
                                                      14.13
                                                              1.12
                                                                      0
29.15
                                                      15.45
                                                              2.54
                                                                             0.00
       0
           0
               1.21
                       0
                           1.85
                                   0
                                      0.79
                                              41.25
                                                                      0
                                                                          0
25.42
       0
           0
               1.31
                       0
                           2.18
                                   0
                                       1.16
                                              45.1
                                                      17.3
                                                              0
                                                                  0
                                                                      0
                                                                          0.00
                                                                          8.99
30.39
       0
           0.34
                   3.49
                           0.79
                                   3.52
                                          0.86
                                                  3.13
                                                          39.35
                                                                  7.66
               0.00
   0.24
           0
];
average of qianbei fenghua=sum(fenghua qianbei)/26;
                           0 0.71
                                       0
                                          0
                                              5.45
                                                      1.51
                                                              4.78
                                                                      9.3 23.55
wufenghua qianbei=[37.36
               0
    5.75
           0
                  0.00
               0.47
                       0
                                   0
                                      8.46
31.94 0
           0
                           1.59
                                              29.14
                                                      26.23
                                                              0.14
                                                                      0.91
                                                                             0
    0.00
34.34
      0
           1.41
                   4.49
                           0.98
                                   4.35
                                          2.12
                                                  0
                                                      39.22
                                                              10.29
                                                                      0
                                                                         0.35
    0.4 0.00
36.93
           0
               4.24
                       0.51
                               3.86
                                      2.74
                                              0
                                                  37.74
                                                          10.35
                                                                 1.41
       0
                                                                          0.48
    0.44
           0.00
               1.6 0.89
                           3.114.59
                                      0.44
                                                                      0.3 0
                                                                              0.00
65.91
      0
                                               16.55
                                                      3.42
                                                              1.62
           0
                                                      4.88
                                                                             0.00
69.71
       0
           0.21
                   0.46
                           0
                               2.36
                                       1
                                          0.1119.76
                                                              0.17
                                                                      0
                                                                         0
75.51
       0
           0.15
                   0.64
                           1
                               2.35
                                      0
                                          0.47
                                                  16.16
                                                          3.55
                                                                  0.13
                                                                          0
                                                                             0
    0.00
65.91 0
           0 0.38
                     0
                                  0.17
                                          0.16
                                                  22.05
                                                          5.68
                           1.44
                                                                  0.42
                                                                          0
                                                                             0
   0.00
                               2.72
           0.23
                   0.89
                                      0
                                           3.01
                                                  17.24
                                                          10.34
                                                                  1.46
                                                                         0.31
                                                                                 0
60.12
       0
                           0
    3.66
61.28
       2.66
               0.110.84
                           0.74
                                  5
                                      0
                                          0.53
                                                  15.99
                                                          10.96
                                                                  0 0.23
                                                                             0
    0.00
55.21
       0 0.25
                   0
                       1.67
                               4.79
                                      0
                                          0.77
                                                  25.25
                                                          10.06
                                                                  0.2 0.43
                                                                             0
   0.00
51.54
       4.66
               0.29
                       0.87
                               0.61
                                      3.06
                                            0
                                                  0.65
                                                          25.4
                                                                  9.23
                                                                          0.1 0.85
    0
       0.00
49.01
       2.71
                  1.13
                           0
                               1.45
                                      0
                                          0.86
                                                  32.92
                                                          7.95
                                                                  0.35
                                                                          0
                                                                             0
               0
   0.00
];
average of wufenghua qianbei=sum(wufenghua qianbei)/13;
figure(1);
x=0:1:13:
plot(x,average of gaojia fenghua,'LineWidth',1.5)
plot(x,average of gaojia wufenghua,'LineWidth',1.5);
axis([0,14,-10,100]);
set(gca,'XTickLabel',{'二氧化硅' '氧化钠''氧化钾''氧化钙''氧化镁''氧化铝''氧化铁'' 氧 化
铜' '氧化铅''氧化钡''五氧化二磷'
                                  '氧化锶''氧化锡''二氧化硫'
});
figure(2);
x=0:1:13;
plot(x,average of qianbei fenghua,'LineWidth',1)
hold on;
plot(x,average of wufenghua qianbei,'LineWidth',1);
```

```
axis([0,18,-10,100]);
set(gca,'XTickLabel',{'二氧化硅' '氧化钠''氧化钾''氧化钙''氧化镁''氧化铝''氧化铁'' 氧化
铜''氧化铅''氧化钡''五氧化二磷'
                               '氧化锶''氧化锡''二氧化硫'
});
figure(3);
x=[6,10];
explode=[0,1];
pie(x,explode);
figure(4);
y=[28,12];
explode=[0,1];
pie(y,explode);
figure(5);
x=0:1:13;
plot(x,average of gaojia fenghua,'LineWidth',1.5)
hold on;
plot(x,average of qianbei fenghua,'LineWidth',1.5);
axis([0,18,-10,100]);
set(gca,'XTickLabel',{'二氧化硅' '氧化钠''氧化钾''氧化钙''氧化镁''氧化铝''氧化铁'' 氧 化
铜''氧化铅''氧化钡''五氧化二磷''''氧化锶''氧化锡''二氧化硫'
});
figure(5);
x=0:1:13;
plot(x,average of gaojia fenghua,'LineWidth',1.5)
hold on;
plot(x,average of qianbei fenghua,'LineWidth',1.5);
axis([0,13,-10,100]);
set(gca,'XTick',[0:1:13]);
set(gca,'XTickLabelRotation',45);
set(gca,'XTickLabel',{'二氧化硅' '氧化钠''氧化钾''氧化钙''氧化镁''氧化铝''氧化铁'' 氧化
铜' '氧化铅''氧化钡''五氧化二磷'
                               '氧化锶''氧化锡''二氧化硫'
});
xlabel('化合物');
ylabel('含量%');
title('风化的高钾玻璃和铅钡玻璃各化学成分含量平均值对比折线图');
legend('风化的高钾玻璃各化学成分含量平均值折线图','风化的铅钡玻璃各化学成分含量
平均值折线图);
figure(5);
x=0:1:13;
plot(x,average of gaojia wufenghua,'LineWidth',1.5)
hold on:
plot(x,average of wufenghua qianbei,'LineWidth',1.5);
axis([0,13,-10,100]);
set(gca,'XTick',[0:1:13]);
```

```
set(gca,'XTickLabelRotation',45);
set(gca,'XTickLabel',{'二氧化硅' '氧化钠''氧化钾''氧化钙''氧化镁''氧化铝''氧化铁'' 氧 化
铜''氧化铅''氧化钡''五氧化二磷''''氧化锶''氧化锡''二氧化硫'
});
xlabel('化合物');
ylabel('含量%');
title('无风化的高钾玻璃和铅钡玻璃各化学成分含量平均值对比折线图');
legend('无风化的高钾玻璃各化学成分含量平均值折线图','无风化的铅钡玻璃各化学成分
含量平均值折线图');
subplot(2,1,1);
x=0:1:13;
plot(x,average of gaojia fenghua,'LineWidth',1.5)
hold on:
plot(x,average of qianbei fenghua,'LineWidth',1.5);
hold on:
axis([0,13,-10,100]);
set(gca,'XTick',[0:1:13]);
set(gca,'XTickLabelRotation',45);
set(gca,'XTickLabel',{'二氧化硅' '氧化钠''氧化钾''氧化钙''氧化镁''氧化铝''氧化铁'' 氧化
铜''氧化铅''氧化钡''五氧化二磷''''氧化锶''氧化锡''二氧化硫'
});
xlabel('化合物');
ylabel('含量%');
title('风化的高钾玻璃和铅钡玻璃各化学成分含量平均值对比折线图');
legend('风化的高钾玻璃各化学成分含量平均值折线图','风化的铅钡玻璃各化学成分含量
平均值折线图');
subplot(2,1,2);
x=0:1:13;
plot(x,average_of_gaojia wufenghua,'LineWidth',1.5)
plot(x,average of wufenghua qianbei,'LineWidth',1.5);
axis([0,13,-10,100]);
set(gca,'XTick',[0:1:13]);
set(gca,'XTickLabelRotation',45);
set(gca,'XTickLabel',{'二氧化硅' '氧化钠''氧化钾''氧化钙''氧化镁''氧化铝''氧化铁'' 氧化
铜''氧化铅''氧化钡''五氧化二磷'''''氧化锶''氧化锡''二氧化硫'
});
xlabel('化合物');
ylabel('含量%');
title('无风化的高钾玻璃和铅钡玻璃各化学成分含量平均值对比折线图');
legend('无风化的高钾玻璃各化学成分含量平均值折线图','无风化的铅钡玻璃各化学成分
含量平均值折线图');
```

9. 柱状图绘制 matlab 代码

wenshi=[9,6,15];

```
% wenshi=wenshi/30;
figure(4);
a=bar(wenshi,'FaceColor','flat');
xlabel("纹饰");
ylabel("风化个数");
title("各纹饰的风化数");
set(gca, 'XTicklabel', {'A','B','C'});
a.CData(1,:) = [40/255,146/255,199/255]; % 普通 RGB 值除以 255,得到的数字就是在
MATLAB 中颜色的值
a.CData(2,:) = [129/255,179/255,171/255];
a.CData(3,:) = [191/255,212/255,138/255];
leixing=[6,28];
% leixing=leixing/34;
figure(2);
b=bar(leixing,'FaceColor','flat');
xlabel("类型");
ylabel("风化个数");
title("各类型的风化数");
set(gca, 'XTicklabel', {'高钾','铅钡'});
b.CData(1,:) = [129/255,179/255,171/255];
b.CData(2,:) = [191/255,212/255,138/255];
yanse=[2,9,12,1,4,2];
%yanse=yanse/30;
figure(3);
c=bar(yanse,'FaceColor','flat');
xlabel("颜色");
ylabel("风化个数");
title("各颜色的风化数");
set(gca, 'XTicklabel', {'黑','蓝绿','浅蓝','浅绿','深绿','紫'});
c.CData(2,:) = [0/255,131/255,143/255];
c.CData(3,:) = [193/255,210/255,240/255];
c.CData(4,:) = [100/255,255/255,100/255];
c.CData(5,:) = [0/255, 100/255, 0/255];
c.CData(6,:) = [153/255,51/255,250/255];
c.CData(1,:) = [0/255,0/255,0/255];
```