

深圳大学期末考试试卷

开/闭卷 开卷

A/B 卷

1903420001,

数学建模,

课程编号 1905540001

课序号

课程名称

数学模型

学分 3

命题人(签字) 审题人(签字) 年 月 日

| 题号 | 一 | 二 | 三 | 四 | 五 | 六 | 七 | 八 | 九 | 十 | 基本题 总分 | 附加题 |
|-----|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|-----------|-----|
| 得分 | | | | | | | | | | | | |
| 评卷人 | | | | | | | | | | | | |

拉曼光谱仪的光谱分析技术

拉曼光谱(Raman spectra), 是一种散射光谱。拉曼光谱分析法是基于印度科学家 C.V.拉曼(Raman)所发现的拉曼散射效应, 对与入射光频率不同的散射光谱进行分析以得到分子振动、转动方面信息, 并应用于分子结构研究的一种分析方法。

拉曼光谱仪主要适用于科研院所、高等院校物理和化学实验室、生物及医学领域等光学方面, 研究物质成分的判定与确认; 还可以应用于刑侦及珠宝行业进行毒品的检测及宝石的鉴定。该仪器以其结构简单、操作简便、测量快速高效准确, 以低波数测量能力著称; 采用共焦光路设计以获得更高分辨率, 可对样品表面进行 μm 级的微区检测, 也可用此进行显微影像测量。



拉曼光谱技术的优越性: 具有快速、简单、可重复、且更重等优越性, 要的是无损伤的定性定量分析, 它无需样品准备, 样品可直接通过光纤探头或者通过玻璃、石英、和光纤测量。此外

1 由于水的拉曼散射很微弱, 拉曼光谱是研究水溶液中的生物样品和化学化合物的理想工具。

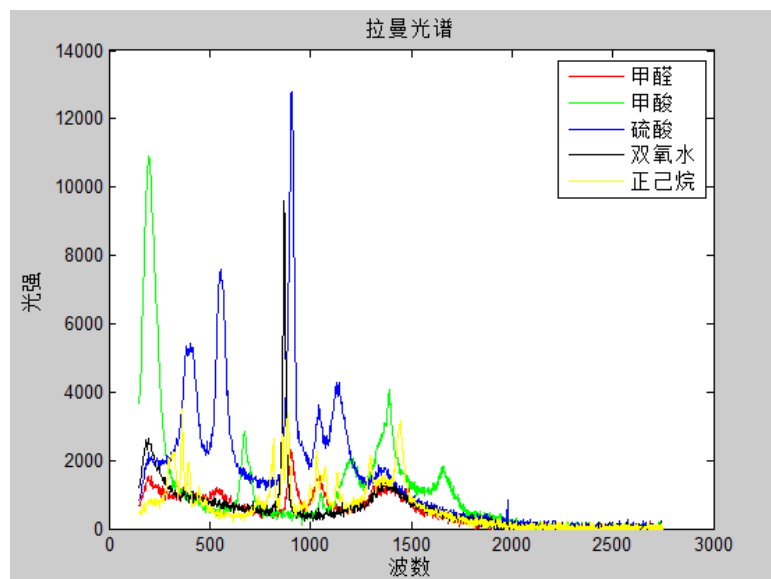
2 拉曼一次可以同时覆盖 50-4000 波数的区间, 可对有机物及无机物进行分析。

3 拉曼光谱谱峰清晰尖锐, 更适合定量研究、数据库搜索、以及运用差异分析进行定性研究。在化学结构分析中, 独立的拉曼区间的强度可以和功能集团的数量相关。

4 因为激光束的直径在它的聚焦部位通常只有 0.2-2 毫米, 常规拉曼光谱只需要少量的样品就可以得到。这是拉曼光谱相对常规红外光谱一个很大的优势。而且, 拉曼显微镜物镜可将激光束进一步聚焦至 20 微米甚至更小, 可分析更小面积的样品。

5 共振拉曼效应可以用来有选择性地增强大生物分子特个发色基团的振动, 这些发色基团的拉曼光强能被选择性地增强 1000 到 10000 倍。

拉曼散射光谱（如下图）可以很典型地来反应一种物品的特性，不同物品的拉曼散射光谱会呈现出不同的特征峰的波数和强度。因此，拉曼散射光谱可以准确地刻画生物样品和化学化合物的特性。



问题：现某公司开发了一批拉曼光谱仪，对吡啶、丙酮、二氯甲烷、环己烷、甲醇、甲醛、甲酸、硫酸、三氯甲烷、双氧水、四氢呋喃、硝酸、乙醇、乙腈、乙醚、乙酸乙酯、正己烷、苯巴比妥、硫酸安非他明、盐酸麻黄碱 20 种试剂标准品和 15 种混合物品（这些混合物品都是由 20 种试剂标准品中的 2-4 种标准品混合而成的，其中 10 种混合物品的成分已知，5 种混合物品的成分未知）进行了测试（拉曼谱图数据详见数据包）。

1. 请构建拉曼光谱分析的模型框架，并通过试验分析验证 10 种已知混合物品的成分和含量，以此来验证所构建的模型的准确性。通过模型计算的时间和准确度等指标来论证该拉曼光谱仪用于海关、机场等场所安全检查的可行性。
2. 通过你们的模型判断 5 种未知混合物品的组成成分和含量。

论文格式：论文报告需采用学校统一格式，详见：学校主页-->教务管理-->考试信息-->表格下载-->以论文、报告等形式考核专用答题纸。参照中国大学生数学建模竞赛论文格式，论文篇幅在 15 页左右。

论文提交：考试采取论文（与演讲）的考核形式，以 3 人为一小组完成论文报告。论文要提交纸质和电子版本两个形式，论文评分以纸质论文为标准，请务必提交纸质论文（未提交纸质论文，将被评定为缺考）。纸质统一于 2019 年 6 月 17 日课堂上交给任课老师，电子版本（包括论文、程序代码和演讲 PPT）于 2019 年 6 月 16 日 23:55 前统一发送到邮箱 mayhhu@szu.edu.cn（邮件标题是：数模论文--学号 1--姓名 1--学号 2--姓名 2--学号 3--姓名 3）。

附录

数据格式说明:

数据文本都是以如下格式存储,其中列向量 **a** 表示该样品拉曼散射光谱的波数,列向量 **b** 该样品拉曼散射光谱的强度(参见拉曼光谱图);列向量 **c**,列向量 **d**,列向量 **e**,列向量 **f** 暂无特殊意义。

addition method:Sample

列向量 **a**,列向量 **b** (约 1500+维列向量)

|

列向量 **c**,列向量 **d** (约 10 维列向量)

|

列向量 **e**,列向量 **f** (约 5 维列向量)