

2021 年高教社杯全国大学生数学建模竞赛题目

(请先阅读“全国大学生数学建模竞赛论文格式规范”)

E 题 中药材的鉴别

不同中药材表现的光谱特征差异较大，即使来自不同产地的同一药材，因其无机元素的化学成分、有机物等存在的差异性，在近红外、中红外光谱的照射下也会表现出不同的光谱特征，因此可以利用这些特征来鉴别中药材的种类及产地。

中药材的种类鉴别相对比较容易，不同种类的中药材呈现的光谱的区别比较明显。图 1 为两种不同药材的近红外光谱数据曲线图，容易看出两者的差异比较大。

中药材的道地性以产地为主要指标，产地的鉴别对于药材品质鉴别尤为重要。然而，不同产地的同一种药材在同一波段内的光谱比较接近，使得光谱鉴别的误差较大。另外，有些中药材的近红外区别比较明显，而有些药材的中红外区别比较明显（见图 2 和图 3 所给出的来自某药材 5 个不同产地的近红外和中红外光谱数据曲线图）。当样本量不够充足时，我们可以通过近红外和中红外的光谱数据相互验证来对中药材产地进行综合鉴别。

附件 1 至附件 4 是一些中药材的近红外或中红外光谱数据，其中 No 列为药材的编号，Class 列表示中药材的类别，OP 列表示该种药材的产地，其余各列第一行的数据为光谱的波数(单位 cm^{-1})、第二行以后的数据表示该行编号的药材在对应波段光谱照射下的吸光度（注：该吸光度为仪器矫正后的值，可能存在负值）。试建立数学模型，研究解决以下问题。

问题 1. 根据附件 1 中几种药材的中红外光谱数据，研究不同种类药材的特征和差异性，并鉴别药材的种类。

问题 2. 根据附件 2 中某一种药材的中红外光谱数据，分析不同产地药材的特征和差异性，试鉴别药材的产地，并将下表中所给出编号的药材产地的鉴别结果填入表格中。

| | | | | | | | | | | | | | | | |
|----|---|----|----|----|----|----|----|----|----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| No | 3 | 14 | 38 | 48 | 58 | 71 | 79 | 86 | 89 | 110 | 134 | 152 | 227 | 331 | 618 |
| OP | | | | | | | | | | | | | | | |

问题 3. 根据附件 3 中某一种药材的近红外和中红外数据，试鉴别该种药材的产地，并将下表中所给出编号的药材产地的鉴别结果填入表中。

| | | | | | | | | | | |
|----|---|----|----|----|----|----|----|-----|-----|-----|
| No | 4 | 15 | 22 | 30 | 34 | 45 | 74 | 114 | 170 | 209 |
| OP | | | | | | | | | | |

问题 4. 附件 4 给出了几种药材的近红外光谱数据，试鉴别药材的类别与产地，并将下表中所给出编号的药材类别与产地的鉴别结果填入表各中。

| | | | | | | | |
|-------|----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| No | 94 | 109 | 140 | 278 | 308 | 330 | 347 |
| Class | | | | | | | |
| OP | | | | | | | |

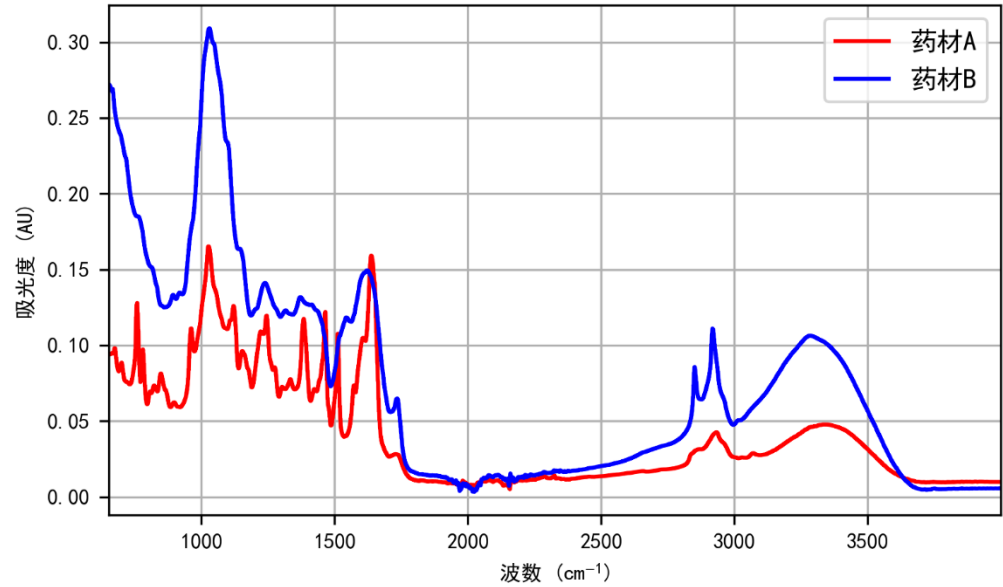


图 1 两种不同中药材的中红外光谱曲线图

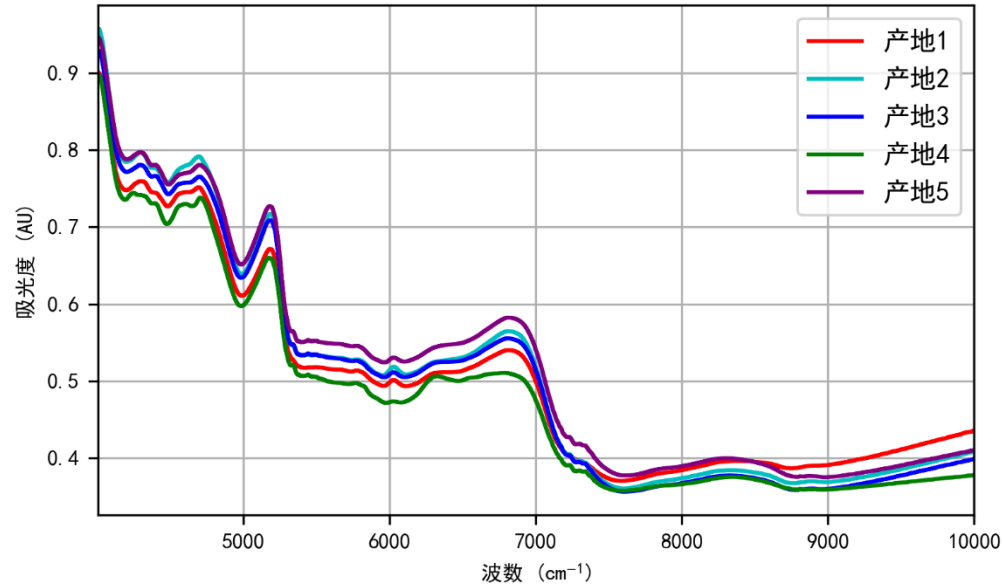


图2 某种中药材不同产地的近红外光谱图

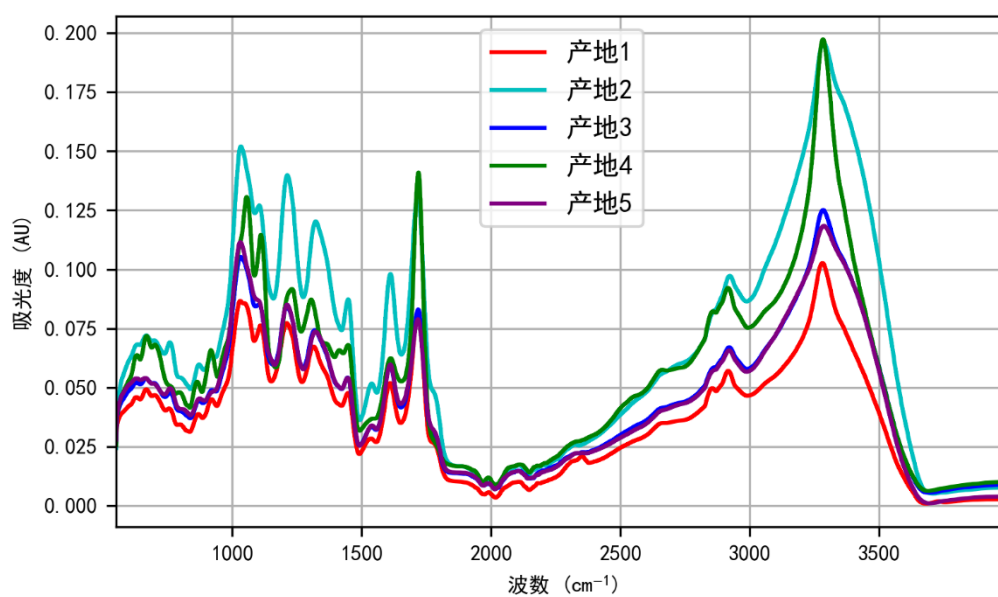


图3 某种中药材不同产地的中红外光谱图

说明 1. 道地药材的信息可参阅百度百科(<https://baike.baidu.com/item/道地药材/1950482?fr=aladdin>)。

说明 2. 红外光谱分析的信息可参阅百度百科(<https://baike.baidu.com/item/红外光谱分析>)。