

中国仪器仪表学会近红外光谱分会文件

近学分字[2021] 第 002 号

关于开展 2021 年度“创和亿杯全国近红外光谱数据建模竞赛”的通知

近红外光谱行业专家、学者、研究生及相关单位：

近年来，近红外光谱技术在我国得到了快速发展，其中化学计量学方法的深入研究和应用功不可没。分析模型是近红外光谱分析技术的核心之一，为了共同提升我国本领域人员的建模水平，中国仪器仪表学会近红外光谱分会举办首届“创和亿杯全国近红外光谱数据建模竞赛”，现将有关事宜通知如下：

(1) 本竞赛提供一套近红外光谱数据，来源于实际应用场景，校正集光谱阵 (1200×351) 由 1200 个固体样本的漫反射光谱构成 (文件名 Xtrain.txt)，校正集浓度阵 (1200×1) 由对应 1200 个固体样本的某一成分含量构成 (文件名 Ytrain.txt)，预测集光谱阵 (200×351) 由 200 个固体样本的漫反射光谱构成 (文件名 Xtest.txt)。上述三个文件包含在本通知附件的压缩文件“竞赛数据.rar”。

(2) 任何人均可参赛，每位参赛人员仅限提交一套预测结果。

(3) 根据参赛者提交预测结果的准确性，本竞赛将评选出一等奖 1 名，二等奖 2 名，三等奖 5 名，优秀奖 10 名。颁发电子版获奖证书和奖金，其中一等奖奖金 2000 元，二等奖奖金 1500 元，三等奖奖金 1000 元，优秀奖只颁发获奖证书。

(4) 本竞赛采用以下两个参数评价预测结果的准确性：

$$SEP = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_{i,actual} - y_{i,predicted})^2}{n-1}} \quad MAE = \frac{\sum_{i=1}^n \text{abs}(y_{i,actual} - y_{i,predicted})}{n}$$

(5) 请参赛者于 2021 年 4 月 1 日前将完成的“参赛附表”发送至邮箱：cxlyuli@sina.com，若有疑问请微信联系 13501215398 (微信号)。

(6) 请参赛者认真填写“参赛附表”的个人信息，本竞赛不对外公开参赛人员的任何信息。

(7) 本竞赛将在 2021 年 4 月 5 日前向参赛者公布预测集的浓度真值，2021 年 4 月 15 日前公布获奖名单。

(8) 本竞赛不收取任何费用。

(9) 本套近红外光谱数据版权归属中国仪器仪表学会近红外光谱分会，任何个人或单位不得将其用于商业或其他用途。

中国仪器仪表学会近红外光谱分会

2021 年 2 月 26 日

近红外光谱分会

参赛附表

一、参赛人员基本信息

姓 名		性 别		年 龄	
专 业		学 历		职务/职称	
国 籍		移动电话		E-mail	
工作单位					

二、采用的建模方法（请尽可能详细说明采用的方法）

建模过程的描述（不限字数，可附图表）	
光谱预处理方法及其参数	
浓度值预处理方法	
光谱变量筛选方法	
定量校正方法	
其他需要说明的方法	

三、预测集样本的预测结果

预测集样本序号	预测值
1	

2	
3	
4	
5	
6	
7	
8	
9	
10	
11	
12	
13	
14	
15	
16	
17	
18	
19	
20	
21	
22	
23	
24	
25	
26	
27	
28	
29	
30	
31	
32	
33	
34	
35	
36	
37	
38	
39	
40	
41	
42	
43	
44	
45	
46	

47	
48	
49	
50	
51	
52	
53	
54	
55	
56	
57	
58	
59	
60	
61	
62	
63	
64	
65	
66	
67	
68	
69	
70	
71	
72	
73	
74	
75	
76	
77	
78	
79	
80	
81	
82	
83	
84	
85	
86	
87	
88	
89	
90	
91	

92	
93	
94	
95	
96	
97	
98	
99	
100	
101	
102	
103	
104	
105	
106	
107	
108	
109	
110	
111	
112	
113	
114	
115	
116	
117	
118	
119	
120	
121	
122	
123	
124	
125	
126	
127	
128	
129	
130	
131	
132	
133	
134	
135	
136	

137	
138	
139	
140	
141	
142	
143	
144	
145	
146	
147	
148	
149	
150	
151	
152	
153	
154	
155	
156	
157	
158	
159	
160	
161	
162	
163	
164	
165	
166	
167	
168	
169	
170	
171	
172	
173	
174	
175	
176	
177	
178	
179	
180	
181	

182	
183	
184	
185	
186	
187	
188	
189	
190	
191	
192	
193	
194	
195	
196	
197	
198	
199	
200	