

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”，现将有关事项通知如下：

(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 | |