

附件 1:

作品提交要求

为保障算法竞赛的公平、公正与顺利开展，同时确保参赛作品能得到全面、精准的评估，特制定如下关于赛题作品提交的详尽要求。请各参赛团队仔细研读，严格按照要求提交相关材料。

一、技术方案文件

（一）格式规范

1. 文件名必须严格遵循“参赛团队编号-技术方案-赛题名称”的格式，统一保存为 PDF 格式。此举旨在确保文件命名的一致性，方便竞赛组织方进行系统管理与分类。

2. 文件大小不得超过 10M。过大的文件可能导致上传失败或影响后续评审流程的效率，因此请参赛团队提前对文件进行必要的压缩与优化。

（二）内容架构

内容应参照《赛题作品技术方案编写大纲》进行组织与撰写。大纲为技术方案提供了清晰的结构框架，涵盖问题分析、算法设计、模型构建、实验验证等关键板块，确保技术方案内容完整、逻辑连贯，全面展现参赛团队对赛题的理解与解决方案的设计思路。

（三）提交途径与时间限制

1. 参赛团队需在报名系统中完成技术方案文件的提交操作。报名系统为官方指定的唯一提交渠道，具有安全性与规范性，可有效保障文件提交的准确性与可追溯性。

2. 提交截止日期后，系统将自动锁定，参赛团队无法对已提交的技术方案进行任何修改。请务必在截止日期前仔细检查文件内容，确认无误后再行提交，避免因时间延误或疏忽导致遗憾。

（四）其他说明

技术方案文件应聚焦于核心技术内容，不得包含相关的论文、专利、软著、测试报告等补充材料。此类材料应在后续规定的补充佐证材料环节中另行提交，以保持技术方案的简洁性与专业性，便于评审专家快速把握关键技术要点。

二、源代码及模型文件

（一）格式要求

1. 源代码及模型数据需统一放置于一个文件夹内，根文件夹命名务必为“参赛团队编号—代码模型—赛题名称”。

2. 根据文件夹内部的具体内容和格式要求，会因不同赛题的特性与需求而有所差异。参赛团队务必认真查阅相关赛题的详细说明，严格按照要求整理与放置源代码及模型文件，确保文件结构清晰、易于读取。

（二）提交方式

1.将包含源代码及模型数据的整个文件夹压缩为“参赛团队编号-源代码-赛题名称.zip”格式。

2.在报名系统中完成压缩文件的提交。提交过程中，请留意系统提示，确保文件成功上传，进度条显示 100%且无任何报错信息。

三、演示视频

（一）内容构成

演示视频应全面展示算法作品的核心内容，具体涵盖算法作品信息（如作品名称、所属领域、解决的实际问题等）、算法运行展示（详细呈现算法从输入数据到输出结果的完整运行过程，可配合动画、注释等手段增强可视化效果）、结果解读（对算法运行产生的结果进行深入分析，解释其含义与价值）、创新点演示（突出展示作品相较于传统方法的创新之处，如独特的算法设计、新颖的应用场景拓展等）。

（二）格式与规格

1.视频格式限定为 MP4，这是一种广泛兼容且具有良好画质与音质表现的格式，能确保在各类播放设备与平台上正常播放。

2.时长需严格控制在 5-8 分钟之间。时间过短可能无法充分展示作品的关键内容，过长则可能导致评审专家注意力分散，难以抓住重点。

3.视频应保证画面清晰、声音清楚，可根据需要添加必要的字幕和注释，以辅助观众理解复杂的算法流程与专业术语。字幕的字体、颜色、大小应与画面整体风格协调一致，且位置醒目、不遮挡关键信息。

（三）提交流程

参赛团队需将演示视频上传至在线网盘（如百度网盘或其他主流网盘平台），确保视频可在线流畅播放，无卡顿、加载缓慢等现象。上传完成后，将视频的播放链接地址在报名系统中提交。提交链接前，请务必自行点击链接进行测试，确保链接有效且能正常跳转至视频播放页面。

四、答辩 PPT

（一）内容要求

1.PPT 内容应包括算法作品信息（介绍作品的背景、目标与主要功能）、项目背景（阐述项目产生的缘由，如市场需求、社会痛点等）、算法概述（简要介绍所采用算法的基本原理、核心步骤与优势特点）等内容。具体可参考《作品答辩 PPT 大纲》，进一步丰富与完善 PPT 内容，使其逻辑严谨、重点突出。

2.PPT 应注重图文并茂，合理运用图表、图片、示意图等元素，直观展示复杂的数据、算法流程与项目成果，避免大段文字堆砌，以提升视觉效果与信息传达效率。文字表述应简洁精炼，提炼关键信息，使观众能迅速抓住要点。

（二）格式规范

1.PPT 页数应控制在 10-15 页之间。合理的页数设置既能保证内容完整，又能确保展示节奏紧凑，不冗长拖沓。

2.文件名统一设定为“参赛团队编号—答辩 PPT—赛题名称”，并保存为 PDF 格式。PDF 格式可有效防止 PPT 在不同设备上打开时出现格式错乱的问题，保证展示效果的一致性。

（三）提交方式

确保生成的 PDF 格式答辩 PPT 可在线流畅播放，将其播放链接地址在报名系统中提交。同样，提交前需对链接进行测试，保证链接的有效性与稳定性，避免在答辩环节出现无法打开 PPT 的尴尬局面。

五、补充佐证材料

（一）内容范畴

参赛团队可根据自身实际情况，提交能够进一步凸显项目优势、创新点或团队实力的材料。例如：

1.相关的学术研究成果，如发表的学术论文、研究报告等，用以证明团队在该领域的深入研究与专业积累。

2.前期的预实验数据，展示团队在项目探索阶段的实践过程与初步成果，为最终方案提供数据支撑与实践依据。

3.算法在其他类似数据集上的测试结果，通过横向对比，彰显算法的通用性与有效性。

4.专利、软著、获奖荣誉等佐证材料，直观体现团队的创新能力与过往取得的成绩。

（二）格式要求

根据材料类型，选择与之适配的格式提交。例如，论文以 PDF 格式提交，以保证文档格式稳定、内容完整呈现；数据以 Excel 或 CSV 格式提交，便于数据的读取、分析与处理。同时，应对每份材料的内容进行简要说明，概括材料的核心要点与对项目的支撑作用，方便评审专家快速了解材料价值。

（三）提交途径

参赛团队需将补充材料上传至在线网盘（百度网盘或其他），确保材料可在线浏览。上传完成后，将材料的链接地址在报名系统中提交。提交链接时，建议按照材料类别进行分类标注，如“学术论文链接”“预实验数据链接”等，以便评审专家清晰识别与查阅。

附件 2:

技术方案大纲

一、算法概述

（算法作品目标、算法主要特点、创新性、应用成效和应用价值等。语言简洁明了，重点突出。概述字数控制在 300-500 字。）

算法的目标是通过人工智能方法实现对晶胞参数的精准预测，同时基于布拉格定律编写算法为每一个衍射峰合理分配晶面指数。算法的特点是基于寻峰算法找到的离散衍射峰作为输入训练基于 Transformer 架构的神经网络模型实现晶胞参数预测，并构建了衍射峰分配算法。算法的创新点在于基于 Transformer 架构的神经网络架构很好的捕捉到了衍射峰位置之间的关联，模型在验证集上取得了较小的 RMSE 值，同时衍射峰分配算法也取得了较高的准确率。该算法探索了 XRD 图谱指标化的新方法，改善了传统指标化方法的一些缺陷，例如对低对称性晶体、含有杂质峰的衍射图等适用性不足等问题，有望提高 XRD 实验数据的处理效率，从而推动对新材料的研发。

二、实现方案

（详细说明解题思路、数据处理、算法设计与开发、模型训练与优化、测试与验证等内容。）

算法的整体思路是从 XRD 图谱中提取衍射峰，并将衍射峰作为特征进行晶胞参数预测，得到晶胞参数后基于布拉格格式分配晶面指数。

数据预处理：首先基于 Scipy 库中的寻峰方法搜寻其中的衍射峰，通过波长关系过滤掉 $K\alpha_2$ 衍射峰。

模型训练与优化：模型架构基于 Transformer, 输入为离散的衍射峰特征，输出为晶胞参数预测值，损失函数为晶胞参数的 RMSE。对 Transformer 的 multi-heads 数及层数进行了优化。

算法设计与开发：算法先利用寻峰算法获得 XRD 图谱的衍射峰信息，，随后利用波长关系过滤掉 $K\alpha_2$ 衍射峰，随后将衍射峰作为特征交给模型预测晶胞参数，最后通过布拉格公式及就近分配原则分配晶面指数。

测试与验证：对验证数据集进行了验证，其中 RMSE 值为*，晶面指数分配准确率为*。

三、算法创新点

（说明算法的主要特点和创新性，如采用的独特模型架构、创新的数据处理方法、算法优化等。）

算法的创新点在于基于 Transformer 架构的神经网络架构很好的捕捉到了衍射峰位置之间的关联，模型在验证集上取得了较小的 RMSE 值，同时衍射峰分配算法也

取得了较高的准确率。

四、问题与思考

开发过程中遇到的困难、问题以及对应解决方案，进一步优化思考等内容。

五、过程进度

使用表格形式说明从开始到结束的各个阶段，包括数据准备阶段、算法设计与开发阶段、模型训练与优化阶段、测试与验证阶段、文档撰写与提交阶段等，明确每个阶段的开始时间、结束时间以及主要完成的内容。

六、团队分工

列出团队成员的姓名、角色（如算法工程师、数据分析师、文档撰写员等）以及具体负责的工作内容，如算法设计、模型训练、数据处理、文档编写等。

七、解题参考

解题过程中用到的解题资源、参考资料等。