



(19)中華民國智慧財產局

(12)發明說明書公告本

(11)證書號數：TW I744518 B

(45)公告日：中華民國 110 (2021) 年 11 月 01 日

(21)申請案號：107113053

(22)申請日：中華民國 107 (2018) 年 04 月 17 日

(51)Int. Cl. : G06N20/00 (2019.01)

G06F30/27 (2020.01)

(30)優先權：2017/05/04 美國

15/586,678

(71)申請人：美商菲爾薇解析公司(美國) VIAVI SOLUTIONS INC. (US)

美國

(72)發明人：熊章民 HSIUNG, CHANGMENG (US)；鄒鵬 ZOU, PENG (US)；孫嵐 SUN, LAN (CN)

(74)代理人：閻啓泰；林景郁

(56)參考文獻：

TW 201243738A

TW 201303618A

US 2007/0282766A1

US 2010/0205124A1

US 2014/0059480A1

US 2014/0080172A1

審查人員：姚乃綺

申請專利範圍項數：20 項 圖式數：8 共 50 頁

(54)名稱

用於通過近紅外光譜學和機器學習技術在製造過程中進行端點檢測之設備和方法，及相關電腦可讀取媒體

(57)摘要

設備可以接收與從非穩定狀態轉換到穩定狀態的製造過程相關聯的訓練光譜數據。該設備可以基於訓練光譜數據生成支援向量機(SVM)分類模型的多次疊代。該設備可以基於 SVM 分類模型的多次疊代確定與製造過程相關聯的多個預測的轉換時間。多個預測的轉換時間中的預測的轉換時間可以識別在製造過程期間 SVM 分類模型的對應疊代預測製造過程從非穩定狀態轉換到穩定狀態的時間。該設備可以基於多個預測的轉換時間生成與確定製造過程是否已經達到穩定狀態相關聯的最終的 SVM 分類模型。

A device may receive training spectral data associated with a manufacturing process that transitions from an unsteady state to a steady state. The device may generate, based on the training spectral data, a plurality of iterations of a support vector machine (SVM) classification model. The device may determine, based on the plurality of iterations of the SVM classification model, a plurality of predicted transition times associated with the manufacturing process. A predicted transition time, of the plurality of predicted transition times, may identify a time, during the manufacturing process, that a corresponding iteration of the SVM classification model predicts that the manufacturing process transitioned from the unsteady state to the steady state. The device may generate, based on the plurality of predicted transition times, a final SVM classification model associated with determining whether the manufacturing process has reached the steady state.

指定代表圖：

400 →

符號簡單說明：
400:支援向量機(SVM)
分類模型的示例過程
的流程圖
410~460:流程圖的區
塊

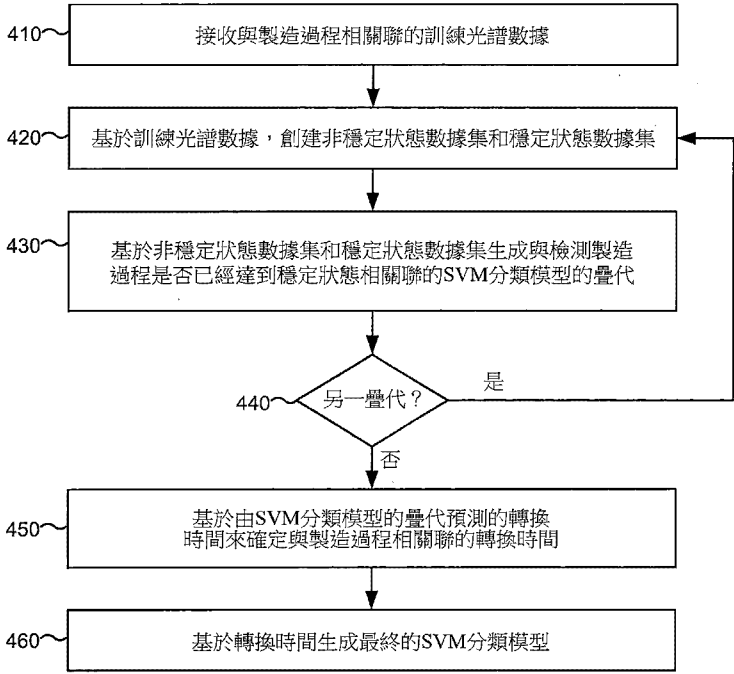


圖4



I744518

【發明摘要】

【中文發明名稱】 用於通過近紅外光譜學和機器學習技術在製造過程中進行端點檢測之設備和方法，及相關電腦可讀取媒體

【英文發明名稱】 DEVICES AND METHODS FOR ENDPOINT
DETECTION IN MANUFACTURING PROCESS BY
NEAR INFRARED SPECTROSCOPY AND MACHINE
LEARNING TECHNIQUES, AND RELATED
COMPUTER-READABLE MEDIUM

【中文】

設備可以接收與從非穩定狀態轉換到穩定狀態的製造過程相關聯的訓練光譜數據。該設備可以基於訓練光譜數據生成支援向量機（SVM）分類模型的多次疊代。該設備可以基於SVM分類模型的多次疊代確定與製造過程相關聯的多個預測的轉換時間。多個預測的轉換時間中的預測的轉換時間可以識別在製造過程期間SVM分類模型的對應疊代預測製造過程從非穩定狀態轉換到穩定狀態的時間。該設備可以基於多個預測的轉換時間生成與確定製造過程是否已經達到穩定狀態相關聯的最終的SVM分類模型。

【英文】

A device may receive training spectral data associated with a manufacturing process that transitions from an unsteady state to a steady state. The device may generate, based on the training spectral data, a plurality of iterations of a support vector machine (SVM) classification model. The device may determine, based on the plurality of iterations of the SVM classification model, a plurality of predicted

transition times associated with the manufacturing process. A predicted transition time, of the plurality of predicted transition times, may identify a time, during the manufacturing process, that a corresponding iteration of the SVM classification model predicts that the manufacturing process transitioned from the unsteady state to the steady state. The device may generate, based on the plurality of predicted transition times, a final SVM classification model associated with determining whether the manufacturing process has reached the steady state.

【指定代表圖】 圖4

【代表圖之符號簡單說明】

400：支援向量機（SVM）分類模型的示例過程的流程圖

410~460：流程圖的區塊

【特徵化學式】

無

【發明說明書】

【中文發明名稱】 用於通過近紅外光譜學和機器學習技術在製造過程中進行端點檢測之設備和方法，及相關電腦可讀取媒體

【英文發明名稱】 DEVICES AND METHODS FOR ENDPOINT
DETECTION IN MANUFACTURING PROCESS BY
NEAR INFRARED SPECTROSCOPY AND MACHINE
LEARNING TECHNIQUES, AND RELATED
COMPUTER-READABLE MEDIUM

【技術領域】

【0001】 本發明係有關於通過近紅外光譜學和機器學習技術的製造過程中的端點檢測。

【先前技術】

【0002】 作為實施製造過程（例如，連續製造過程、批量製造過程）的一部分，可以利用過程分析技術（PAT）系統來產生用於監控和控制製造過程的即時或接近即時的數據（例如，光譜數據）。連續製造過程允許以連續的方式將原材料輸入到系統中並將成品（例如，藥物產品）從系統中卸下（discharge）。換句話說，在連續製造過程中，製造過程的各個步驟被轉換成單個的、整合的製造過程（例如，而不是像批量製造過程那樣的一系列離散步驟）。

【發明內容】

【0003】 根據一些可能的實施方式，設備可以包括一個或多個處理器

以：接收與從非穩定狀態轉換到穩定狀態的製造過程相關聯的訓練光譜數據；基於訓練光譜數據生成支援向量機（SVM）分類模型的多次疊代；基於SVM分類模型的多次疊代確定與製造過程相關聯的多個預測的轉換時間，其中，多個預測的轉換時間中的預測的轉換時間可以標識在製造過程期間，SVM分類模型的相應疊代預測到製造過程從非穩定狀態轉換到穩定狀態的時間；並且基於多個預測的轉換時間，生成與確定製造過程是否已經達到穩定狀態相關聯的最終的SVM分類模型。

【0004】 根據一些可能的實施方式，非暫態電腦可讀取媒體可以存儲一個或多個指令，在由一個或多個處理器運行時，所述一個或多個指令使所述一個或多個處理器：接收與從非穩定狀態轉換到穩定狀態的製造過程的第一執行相關聯的訓練光譜數據；基於訓練光譜數據疊代地生成與確定製造過程的另一執行是否已經從非穩定狀態轉換到穩定狀態相關聯的SVM分類模型；接收與製造過程的第二執行相關聯的附加光譜數據；並且基於SVM分類模型和附加光譜數據，確定製造過程的第二執行是否已經從非穩定狀態轉換到穩定狀態。

【0005】 根據一些可能的實施方式，一種方法可以包括：由設備接收與從非穩定狀態轉換到穩定狀態的製造過程的第一執行相關聯的第一光譜數據；由所述設備並且基於第一光譜數據生成SVM分類模型的多次疊代；由所述設備並且基於SVM分類模型的多次疊代來確定與製造過程的第一執行相關聯的多個預測的轉換時間；由所述設備並且基於多個預測的轉換時間生成與確定製造過程的另一執行是否已經達到穩定狀態相關聯的最終的SVM分類模型；由所述設備接收與製造過程的第二執行相關聯的第二光譜數據；以及由所述設備基於最終的SVM分類模型和第二光譜數據確定製造過程的第二執行是否已經達到穩定狀態。

【圖式簡單說明】

【0006】 圖1A-圖1C是本文描述的示例實施方式的概述的圖；

【0007】 圖2是可以實施本文所描述的系統和/或方法的示例環境的圖；

【0008】 圖3是圖2的一個或多個設備的示例元件的圖；

【0009】 圖4是用於生成用於檢測製造過程何時已經達到穩定狀態的SVM分類模型的示例過程的流程圖；

【0010】 圖5A和圖5B是與基於通過與製造過程相關聯的SVM分類模型的疊代預測的轉換時間確定製造過程的轉換時間相關聯的示例圖形表示；

【0011】 圖6是用於基於光譜數據並且使用SVM分類模型來確定製造過程是否已經達到穩定狀態的示例過程的流程圖；

【0012】 圖7A和圖7B是圖示出與SVM分類模型相關聯的簡化決策邊界的示例圖形表示；以及

【0013】 圖8是基於圖7A和圖7B的決策邊界確定的示例決策值的圖形表示。

【實施方式】

【0014】 示例實施方式的以下詳細描述參考附圖。不同附圖中的相同附圖標記可以標識相同或相似的元件。

【0015】 製造過程（例如，用於製造藥物產品的連續製造過程或批量製造過程）可以涉及一個或多個狀態轉換，諸如從非穩定狀態（例如，材料和/或化合物的特性隨時間變化的狀態）到穩定狀態（例如，材料和/或化合物的特性隨時間基本保持恒定的狀態）的轉換。例如，包括在用於製造藥物產品的製造過程中的混合過程可以涉及化合物的光譜特性從非穩定狀態（例如，在混合過程開始時）到穩定狀態（例如，表示混合過程完成）的轉換。

【0016】 因此，為了提高效率和/或優化製造過程，應該監控製造過程以便（例如，即時或接近即時地）確定製造過程何時已達到穩定狀態。用於檢測製造過程的狀態的可能技術是使用單變數技術的模型，該單變數技術基於與製造過程相關聯的單個變數（諸如總的光譜強度（spectral intensity））來檢測製造過程的狀態。用於檢測製造過程的狀態的另一可能的技術是使用主分量分析（PCA）技術來識別用於檢測製造過程的狀態的變數集合（即，主分量），並且基於監測該變數集合檢測製造過程何時達到穩定狀態。然而，在一些情況下，在製造過程期間測量的數據可以是多變數（multivariate）數據（例如，包括與數百個變數相關聯的數據的NIR光譜）。因此，由於根據單變數技術或PCA技術專注於相對較少的變數，所以這些技術可能導致不準確的狀態檢測和/或可能不夠穩健以確保準確的狀態檢測。

【0017】 本文描述的實施方式提供了能夠生成用於確定製造過程（例如，連續製造過程、批量製造過程等）是否已經到達穩定狀態的支援向量機（SVM）分類模型、以及使用SVM分類模型並且基於與製造過程相關聯的多變數光譜數據來確定製造過程是否已經達到穩定狀態的檢測設備。在一些實施方式中，SVM分類模型可以考慮多個變數（例如，80個變數、120個變數、150個變數等），從而增加SVM分類模型的準確性和/或穩健性（例如，相比較於上述技術）。

【0018】 圖1A-圖1C是本文描述的示例實施方式100的概述的圖。如圖1A所示，並且由附圖標記102所示，檢測設備可以接收與製造過程相關聯的訓練光譜數據。基於可能會生成哪些與檢測製造過程是否已經達到穩定狀態相關聯的支援向量機（SVM）分類模型的疊代，訓練光譜數據（有時稱為第一光譜數據）可以包括與製造過程相關聯的光譜數據。例如，訓練光譜數據可以包括在製造過程的執行期間由光譜儀測量的光譜（例如，諸如NIR光譜的多變數時間

序列數據)。收集訓練光譜數據的期間的製造過程的執行(performance)可以被稱為製造過程的第一執行。

【0019】 如所示的，訓練光譜數據可以包括在製造過程的開始時(時間 t_0)測量的光譜數據、在已知製造過程處於非穩定狀態時(時間 t_{us0})測量的光譜數據、在已知製造過程處於穩定狀態時(時間 t_{ss0})測量的光譜數據、在製造過程結束時(時間 t_e)測量的光譜數據以及不知道製造過程的狀態的時間 t_0 和時間 t_e 之間測量的光譜數據。

【0020】 如附圖標記104至116所示，檢測設備可以基於訓練光譜數據生成SVM分類模型的疊代。例如，如附圖標記104所示，為了生成SVM分類模型的初始疊代(疊代0)，檢測設備可以基於訓練光譜數據創建初始集非穩定狀態數據(例如，包括從時間 t_0 到時間 t_{us0} 測量的光譜數據)和初始集穩定狀態數據(例如，包括從時間 t_{ss0} 到時間 t_e 測量的光譜數據)。

【0021】 如附圖標記106所示，檢測設備可以基於初始集非穩定狀態數據和初始集穩定狀態數據生成SVM分類模型的初始疊代。如所示的，基於提供訓練光譜數據作為SVM分類模型的初始疊代的輸入，檢測設備可以確定與SVM分類模型的初始疊代相關聯的初始預測轉換時間(t_{trans0})(例如，SVM分類模型的初始疊代預測製造過程從非穩定狀態轉換到穩定狀態的時間)。

【0022】 如附圖標記108所示，為了生成SVM分類模型的第一次疊代(疊代1)，檢測設備可以基於訓練光譜數據創建第一集非穩定狀態數據(例如，包括從時間 t_0 到時間 t_{trans0} 測量的光譜數據)和第一集穩定狀態數據(例如，包括從時間 $t_{ss0-dt * 1}$ 到時間 t_e 測量的光譜數據)。值得注意的是，第一集非穩定狀態數據包括直到通過SVM分類模型的初始疊代預測的轉換時間為止測量的光譜數據，而第一集穩定狀態數據包括初始集穩定狀態數據中所包括的光譜數據、以及在時間 t_{ss0} 之前的一個時步(time step)測量的光譜數據。

【0023】 如附圖標記110所示，檢測設備可以基於第一集非穩定狀態數據和第一集穩定狀態數據生成SVM分類模型的第一次疊代。如所示的，基於提供訓練光譜數據作為SVM分類模型的第一次疊代的輸入，檢測設備可以確定與SVM分類模型的第一次疊代相關聯的第一預測的轉換時間（ t_{trans1} ）（例如，SVM分類模型的第一次疊代預測製造過程從非穩定狀態轉換到穩定狀態的時間）。

【0024】 在一些實施方式中，檢測設備可以以這種方式生成SVM分類模型的 n （ $n > 1$ ）次疊代並確定預測的轉換時間，直到與用於生成SVM分類模型的第 n 次疊代的穩態數據集相關聯的最早時間是距已知製造過程處於非穩定狀態的時間的時間閾值量（例如，一個時步）為止（例如，直到該穩定狀態集包括從 $t_{ss0-dt} * n = t_{us0} + dt$ 到時間 t_e 測量的光譜數據為止）。

【0025】 例如，如圖1A中由附圖標記112所示，為了生成SVM分類模型的第 n 次疊代（疊代 n ），檢測設備可以基於訓練光譜數據創建第 n 集非穩定狀態數據（例如，包括從時間 t_0 到時間 $t_{trans(n-1)}$ 測量的光譜數據）和第 n 集穩定狀態數據（例如，包括從時間 $t_{ss0-dt} * n = t_{us0} + dt$ 到時間 t_e 測量的光譜數據）。值得注意的是，第 n 集非穩定狀態數據包括直到通過SVM分類模型的第（ $n-1$ ）次（即，先前的）疊代預測的轉換時間的時間為止測量的光譜數據，而第 n 集穩定狀態數據包括第（ $n-1$ ）集穩定狀態數據中所包括的光譜數據、以及在時間 $t_{ss0-dt} * (n-1)$ 之前的一個時步測量的光譜數據。

【0026】 如附圖標記114所示，檢測設備可以基於第 n 集非穩定狀態數據和第 n 集穩定狀態數據生成SVM分類模型的第 n 次疊代。如所示的，基於提供訓練光譜數據作為SVM分類模型的第 n 次疊代的輸入，檢測設備可以確定與SVM分類模型的第 n 次疊代相關聯的第 n 個預測的轉換時間（ $t_{trans(n)}$ ）（例如，SVM分類模型的第 n 次疊代預測製造過程從非穩定狀態轉換到穩定狀態的時間）。

【0027】 如附圖標記116所示，檢測設備可以基於通過SVM分類模型的 n 次疊代所預測的 n 個轉換時間來確定與製造過程相關聯的主要（例如，最多預測的）轉換時間。如附圖標記118所示，檢測設備可以基於與製造過程相關聯的轉換時間生成最終的SVM分類模型。例如，檢測設備可以創建包括在所確定的優勢轉換時間之前測量的光譜數據的最終集非穩定狀態數據，以及包括在所確定的優勢轉換時間處或在其之後測量的訓練光譜數據的最終集穩定狀態數據。如所示的，相應地，檢測設備可以基於最終集非穩態數據和最終集穩定狀態數據來生成最終的SVM分類模型。

【0028】 如圖1B所示，並且通過附圖標記120，檢測設備可以（在稍後的時間）識別SVM分類模型（例如，基於存儲如所描述的生成的最終的SVM分類模型）以用於檢測製造過程的執行是否達到了穩定狀態。例如，檢測設備可以基於接收到製造過程正在開始或已經開始的指示來識別SVM分類模型。

【0029】 如附圖標記122所示，檢測設備可以在製造過程的第二執行期間接收與製造過程相關聯的光譜數據（有時稱為第二光譜數據或附加光譜數據）。例如，如所示的，光譜儀可以在製造過程的執行期間的給定時間（例如，時間 t_A ）處測量光譜數據，並且可以將光譜數據提供給檢測設備。在收集光譜數據用於SVM分類模型的輸入期間的製造過程的執行可以被稱為製造過程的第二執行。

【0030】 如進一步所示的，檢測設備可以基於光譜數據和SVM分類模型確定製造過程在時間 t_A 處是否處於穩定狀態。例如，如附圖標記124所示，檢測設備可以提供在時間 t_A 處測量的光譜數據作為SVM分類模型的輸入。如附圖標記126所示，檢測設備可以基於SVM分類模型的輸出來確定製造過程在時間 t_A 處未處於穩定狀態。在一些實施方式中，檢測設備可以基於與SVM分類模型相關聯的決策邊界來確定製造過程是否處於穩定狀態，如下所述。

【0031】 如圖1C所示，並且通過附圖標記128，檢測設備可以在製造過程的執行期間的稍後時間（時間 t_B ）接收與製造過程相關聯的光譜數據。例如，如所示的，光譜儀可以在時間 t_B 處測量光譜數據，並且可以將光譜數據提供給檢測設備。

【0032】 如進一步所示的，檢測設備可以基於光譜數據和SVM分類模型來確定製造過程在時間 t_B 處是否處於穩定狀態。例如，如附圖標記130所示，檢測設備可以提供在時間 t_B 處測量的光譜數據作為SVM分類模型的輸入。如附圖標記132所示，檢測設備可以基於SVM分類模型的輸出來確定製造過程在時間 t_B 處於穩定狀態。

【0033】 如附圖標記134所示，在一些實施方式中，檢測設備可以（可選地）基於確定製造過程已經達到穩定狀態來確定與穩定狀態相關聯的定量度量。定量度量可以包括指示與穩定狀態相關聯的定量屬性的度量，例如，化合物在穩定狀態下的組成部分的濃度、穩定狀態下的粒子大小等。例如，檢測設備可以存儲或存取回歸模型（例如，偏最小二乘（PLS）回歸模型、支援向量回歸（SVR）模型），該回歸模型接收基於其檢測到穩定狀態的光譜數據作為輸入，並且提供與該穩定狀態相關聯的定量度量作為輸出。

【0034】 如附圖標記136所示，基於確定製造過程已經達到穩定狀態，檢測設備可以（例如，向與監測製造過程相關聯的使用者設備）提供製造過程已經達到穩定狀態的指示。如進一步所示的，檢測設備還可以提供與定量度量相關聯的資訊。

【0035】 以這種方式，檢測設備可以生成用於確定製造過程是否已經達到穩定狀態的SVM分類模型，以及使用該SVM分類模型並基於與製造過程相關聯的多變數光譜數據來確定製造過程是否已達到穩定狀態。

【0036】 如上所述，圖1A-圖1C僅作為示例被提供。其他的示例也是可

能的並且可以不同於關於圖1A-圖1C所描述的示例。

【0037】 圖2是可以實現本文所描述的系統和/或方法的示例環境200的圖。如圖2所示，環境200可以包括一個或多個光譜儀210-1至210-X ($X \geq 1$) (此處統一地稱為光譜儀210，並且單獨地稱為光譜儀210)、檢測設備220、使用者設備230和網路240。環境200的設備可以經由有線連接、無線連接或有線和無線連接的組合來互連。

【0038】 光譜儀210包括能夠對樣品(例如，與製造過程相關聯的樣品)執行光譜測量的設備。例如，光譜儀210可以包括執行光譜學(例如，振動光譜學，諸如近紅外(NIR)光譜學、中紅外光譜學(mid-IR)、拉曼光譜學等)的桌面型(即，非掌上型)光譜儀設備。在一些實施方式中，光譜儀210可以能夠提供由光譜儀210獲得的光譜數據，用於由另一設備(諸如檢測設備220)進行分析。

【0039】 檢測設備220包括能夠基於與製造過程相關聯的分類模型和與製造過程相關聯的光譜數據來檢測製造過程是否已經達到穩定狀態的一個或多個設備。例如，檢測設備220可以包括伺服器、一組伺服器、電腦、雲計算設備等。在一些實施方式中，檢測設備220可以能夠基於與製造過程相關聯的訓練光譜數據來生成分類模型。在一些實施方式中，檢測設備220可以從環境200中的另一設備(諸如光譜儀210和/或使用設備230)接收資訊和/或將資訊發送給該另一設備。

【0040】 使用者設備230包括能夠接收、處理和/或提供與製造過程是否已經達到穩定狀態相關聯的資訊的一個或多個設備。例如，使用者設備230可以包括通信和計算設備，諸如桌面型電腦、行動電話(例如，智慧型手機、無線電話等)、筆記型電腦、平板電腦、掌上型電腦、可穿戴通信設備(例如，智慧腕表、一副智慧眼鏡等)或類似類型的設備。

【0041】 網路240包括一個或多個有線和/或無線網路。例如，網路240可以包括行動網路（例如，長期演進（LTE）網路、3G網路、碼分多址（CDMA）網路等）、公共陸地移動網（PLMN）、區域網路（LAN）、廣域網路（WAN）、都會區網路（MAN）、電話網絡（例如，公共交換電話網絡（PSTN））、私人網路、特殊網路（ad hoc network）、內部網路、互聯網、基於光纖的網路、雲計算網路等、和/或這些或其他類型的網路的組合。

【0042】 作為示例提供圖2中所示的設備和網路的數量和佈置。實際上，可能存在與圖2中所示的那些相比有附加的設備和/或網路、更少的設備和/或網路、不同的設備和/或網路、或者不同佈置的設備和/或網路。此外，圖2中示出的兩個或更多個設備可以在單一個設備內實現，或者，圖2中示出的單一個設備可以實現為多個、分散式的設備。另外或可選地，環境200的一組設備（例如，一個或多個設備）可以執行被描述為由環境200的另一組設備執行的一個或多個功能。

【0043】 圖3是設備300的示例元件的圖。設備300可以對應於光譜儀210、檢測設備220和/或使用設備230。在一些實施方式中，光譜儀210、檢測設備220和/或使用設備230可以包括一個或多個設備300和/或設備300的一個或多個元件。如圖3所示，設備300可以包括匯流排310、處理器320、記憶體330、存儲元件340、輸入元件350、輸出元件360和通信介面370。

【0044】 匯流排310包括允許在設備300的元件之間進行通信的元件。處理器320以硬體、軟體或硬體和軟體的組合來實現。處理器320包括中央處理單元（CPU）、圖形處理單元（GPU）、加速處理單元（APU）、微處理器、微控制器、數位訊號處理器、現場可程式化閘陣列（FPGA）、特殊應用積體電路（ASIC）或另一類型的處理元件。在一些實施方式中，處理器320包括能夠被程式化為執行功能的一個或多個處理器。記憶體330包括存儲由處理器320使

用的資訊和/或指令的隨機存取記憶體（RAM）、唯讀記憶體（ROM）和/或另一類型的動態或靜態存儲裝置（例如，快閃記憶體、磁記憶體和/或光記憶體）。

【0045】 存儲元件340存儲與設備300的操作和使用有關的資訊和/或軟體。例如，存儲元件340可以包括硬碟（例如，磁片、光碟、磁光碟和/或固態盤）、光碟片（CD）、數位多功能光碟（DVD）、軟碟片、卡匣、磁帶和/或另一類型的非暫態電腦可讀取媒體以及相應的驅動器。

【0046】 輸入元件350包括允許設備300諸如經由使用者輸入（例如，觸控式螢幕顯示器、鍵盤、鍵區（keypad）、滑鼠、按鈕、開關和/或麥克風）接收資訊的元件。另外或可選地，輸入元件350可以包括用於感測資訊的感測器（例如，全球定位系統（GPS）元件、加速度計、陀螺儀和/或致動器）。輸出元件360包括提供來自設備300的輸出資訊的元件（例如，顯示器、揚聲器和/或一個或多個發光二極體（LED））。

【0047】 通信介面370包括使得設備300能夠諸如經由有線連接、無線連接或有線連接和無線連接的組合來與其他設備通信的、類似收發器的元件（例如，收發器和/或單獨的接收器和發送器）。通信介面370可以允許設備300從另一個設備接收資訊和/或向另一設備提供資訊。例如，通信介面370可以包括乙太網介面、光學介面、同軸介面、紅外線介面、射頻（RF）介面、通用序列匯流排（USB）介面、Wi-Fi介面、行動網路介面等。

【0048】 設備300可以執行本文所描述的一個或多個過程。設備300可以回應於處理器320運行由非暫態電腦可讀取媒體（諸如記憶體330和/或存儲元件340）存儲的軟體指令來執行這些過程。電腦可讀取媒體在本文被定義為非暫態記憶體設備。記憶體設備包括單個物理存儲裝置內的記憶體空間或分佈在多個物理存儲裝置上的記憶體空間。

【0049】 軟體指令可以經由通信介面370從另一電腦可讀取媒體或者從另一設備被讀取到記憶體330和/或存儲元件340中。當被運行時，存儲在記憶體330和/或存儲元件340中的軟體指令可以使處理器320執行本文所描述的一個或多個過程。另外地，或可選地，可以使用固線式電路來代替軟體指令或與軟體指令結合來執行本文所描述的一個或多個過程。因此，本文所描述的實施方式不限於硬體電路和軟體的任何特定組合。

【0050】 作為示例提供圖3中所示的元件的數量和佈置。在實踐中，設備300可以包括與圖3中所示的那些相比附加的元件、更少的元件、不同的元件或者不同佈置的元件。另外地，或者可選地，設備300的一組元件（例如，一個或多個元件）可以執行被描述為由設備300的另一組元件執行的一個或多個功能。

【0051】 圖4是用於生成用於檢測製造過程何時達到穩定狀態的分類模型的示例過程400的流程圖。在一些實施方式中，圖4中的一個或多個過程區塊可以由檢測設備220執行。在一些實施方式中，圖4中的一個或多個過程區塊可以由與檢測設備220分離或包括檢測設備220的另一設備或設備組（諸如光譜儀210和/或使用設備230）執行。

【0052】 如圖4所示，過程400可以包括接收與製造過程相關聯的訓練光譜數據（區塊410）。例如，檢測設備220可以接收與製造過程相關聯的訓練光譜數據。

【0053】 基於可以生成SVM分類模型的哪些疊代，訓練光譜數據可以包括與製造過程相關聯的光譜數據。例如，訓練光譜數據可以包括在製造過程的執行期間由光譜儀210測量的光譜（例如，諸如NIR光譜的多變數時間序列數據）。在一些實施方式中，製造過程可以是連續製造過程或批量製造過程。在一些實施方式中，檢測設備220可以基於訓練光譜數據生成SVM分類模型的疊

代，如下所述。

【0054】 在一些實施方式中，訓練光譜數據可以包括在製造過程的較早執行期間在不同時間（例如，週期性地在一系列時步處）測量的歷史光譜。例如，訓練光譜數據可以包括在製造過程的較早執行的開始時間（本文稱為時間 t_0 ）處測量的光譜和在製造過程的較早執行的結束時間（本文稱為時間 t_e ）處測量的光譜。

【0055】 作為另一示例，訓練光譜數據可以包括在已知製造過程的較早執行已經處於非穩定狀態的時間（本文稱為時間 t_{us0} ）處測量的光譜。在一些實施方式中，時間 t_{us0} 可以與時間 t_0 相同（例如，由於製造過程在製造過程開始時處於非穩定狀態）。或者，時間 t_{us0} 可以是在時間 t_0 之後的時間，諸如時間 t_0 之後的一個時步的時間、時間 t_0 之後的5個時步的時間、時間 t_0 之後的40個時步的時間等。在一些實施方式中，時間 t_{us0} 可以是在時間 t_0 之後的時間，假定在該時間處製造過程的較早執行已經處於非穩定狀態。

【0056】 作為額外的示例，訓練光譜數據可以包括在已知製造過程的較早執行已經處於穩定狀態（此處稱為時間 t_{ss0} ）的時間處測量的光譜。在一些實施方式中，時間 t_{ss0} 可以是與時間 t_e 相同的時間（例如，由於製造過程在製造過程結束時處於穩定狀態）。或者，時間 t_{ss0} 可以是時間 t_e 之前的時間，諸如，時間 t_e 之前的一個時步的時間、時間 t_e 之前的5個時步的時間、時間 t_e 之前的40個時步的時間等。在一些實施方式中，時間 t_{ss0} 可以是時間 t_e 之前的時間，假定在該時間處製造過程的較早執行已經處於穩定狀態。

【0057】 作為另一示例，訓練光譜數據可以包括在時間 t_0 和時間 t_e 之間的時間處測量的光譜，在該時間期間製造過程的較早執行的狀態未知。

【0058】 在一些實施方式中，檢測設備220可以從一個或多個其他設備（諸如，在製造過程的較早執行期間獲得訓練光譜數據的一個或多個光譜儀

210或者存儲由一個或多個光譜儀210在製造過程的較早執行期間測量的訓練光譜數據的伺服器設備）接收訓練光譜數據。

【0059】 在一些實施方式中，訓練光譜數據可以與製造過程的多個較早執行相關聯，其中起始條件（例如，總重量、粒子大小、分佈、濕度水準等）在製造過程的多個執行中變化。在這種情況下，可以對與製造過程的多個執行相關聯的訓練光譜數據的多個集合進行平均和/或另外組合，以形成訓練光譜數據。在一些實施方式中，通過變化起始條件來測量訓練光譜數據導致基於訓練光譜數據生成的SVM分類模型的準確度和/或穩健性增加（例如，相比於基於具有單集起始條件的製造過程生成的SVM分類模型）。

【0060】 在一些實施方式中，檢測設備220可以對訓練光譜數據執行降維。降維可以包括減少可基於其生成SVM分類模型的多變數訓練光譜數據的許多變數。在一些實施方式中，可以使用主成分分析（PCA）技術來執行降維，由此，主成分（即，多變數的子集）被識別以用於生成SVM分類模型。另外，或可選地，可以使用變數選擇技術來執行降維，由此，選擇多變數中的變數，該變數與例如與製造過程相關聯的化合物區分（discriminative）。這種變數選擇技術的示例包括選擇性比率（SR）技術、投影中的變數重要性（VIP）技術等。在一些實施方式中，執行降維可以通過例如在多變數之間移除干擾和/或減少雜訊而致使SVM分類模型的可解釋性提升和/或SVM分類模型的生成改進（例如，相比於在訓練光譜數據的整個集合上生成的SVM分類模型）。

【0061】 如圖4進一步所示，過程400可以包括基於訓練光譜數據創建非穩定狀態數據集和穩定狀態數據集（區塊420）。例如，檢測設備220可以基於訓練光譜數據創建非穩定狀態數據集和穩定狀態數據集。

【0062】 為了生成SVM分類模型的疊代，非穩定狀態數據集可以包括訓練光譜數據中包括的、對應於製造過程被假定為處於非穩定狀態的時間的光譜

數據。例如，與生成SVM分類模型的初始疊代相關聯的初始集非穩定狀態數據可以包括在從時間 t_0 到時間 t_{us0} 的時間處測量的光譜數據。繼續該示例，與生成SVM模型的下一次疊代相關聯的另一集非穩定狀態數據可以包括在從時間 t_0 到時間 t_{trans0} 的時間處測量的光譜數據，其中，時間 t_{trans0} 是如SVM分類模型的初始疊代所預測的轉換時間（例如，從非穩定狀態到穩定狀態的轉換的時間）。通常，與生成SVM模型的第 n 次疊代相關聯的第 n 集非穩定狀態數據可以包括在從時間 t_0 到時間 $t_{trans(n-1)}$ 的時間處測量的光譜數據，其中，時間 $t_{trans(n-1)}$ 是由SVM分類模型的第 $(n-1)$ 次（即，先前的）疊代確定的轉換時間。以下描述關於生成SVM分類模型的疊代的附加細節。

【0063】 在一些實施方式中，可以通過例如將訓練光譜數據中所包括的附加光譜數據添加到與生成SVM模型的先前疊代相關聯的非穩定狀態數據集中，來更新、修改和/或重新創建非穩定狀態數據集以生成SVM模型的每次疊代。例如，用於生成SVM分類模型的第 n 次疊代的第 n 集非穩定狀態數據可以包括用於生成SVM分類模型的第 $(n-1)$ 次疊代的第 $(n-1)$ 集非穩定狀態數據中包括的光譜數據、以及在從第 $(n-1)$ 集非穩定狀態數據中的最後時間到使用SVM分類模型的第 $(n-1)$ 次疊代預測的轉換時間的時間處測量的光譜數據。作為特定的示例，用於生成SVM分類模型的第4次疊代的穩定狀態數據集可以包括從時間 t_0 到時間 t_{trans3} （例如，從開始時間到使用模型的第3次疊代確定的轉換時間）測量的光譜數據，而用於生成SVM分類模型的第5次（即，下一次）疊代的穩定狀態數據集可以包括從時間 t_0 到時間 t_{trans4} （例如，從開始時間到使用SVM分類模型的第4次疊代確定的轉換時間）測量的光譜數據。

【0064】 為了生成SVM分類模型的疊代，穩定狀態數據集可以包括訓練光譜數據中所包括的、對應於製造過程的較早執行被假定為處於穩定狀態的時間的光譜數據。例如，與生成SVM分類模型的初始疊代相關聯的初始集穩定狀

態數據可以包括在從時間 t_{ss0} 到時間 t_e 的時間處測量的光譜數據。繼續該示例，與生成SVM模型的下一次疊代相關聯的另一集穩定狀態數據可以包括在從時間 $t_{ss0-dt * 1}$ 到時間 t_e 的時間處測量的光譜數據，其中，時間 $t_{ss0-dt * 1}$ 是時間 t_{ss0} 之前的一個時步的時間。換句話說，在生成SVM分類模型的每次疊代時，檢測設備220可以將與時間 t_{ss0} 之前的時步相關聯的光譜數據疊代地添加到每一集穩定狀態數據中。通常，與生成SVM模型的第 n 次疊代相關聯的第 n 集穩定狀態數據可以包括在從時間 $t_{ss0-dt * n}$ 到時間 t_e 的時間處測量的光譜數據，其中，時間 $t_{ss0-dt * n}$ 是時間 t_{ss0} 之前的 n 個時步的時間。

【0065】 在一些實施方式中，可以通過例如將附加光譜數據添加到與生成SVM模型的先前疊代相關聯的穩定狀態數據集中，來更新、修改和/或重新創建穩定狀態數據集以生成SVM模型的每次疊代。例如，用於生成SVM分類模型的給定疊代的穩定狀態數據集可以包括用於生成SVM分類模型的先前疊代的穩定狀態數據集中所包括的光譜數據、以及在與用於生成SVM分類模型的先前疊代的光譜數據集相關聯的最早時步之前緊接的時步處測量的光譜數據。作為特定的示例，用於生成SVM分類模型的第4次疊代的穩定狀態數據集可以包括從時間 $t_{ss0-dt * 4}$ 到時間 t_e 測量的光譜數據，而用於生成SVM分類模型的第5次（即，下一次）疊代的穩定狀態數據集可以包括從時間 $t_{ss0-dt * 5}$ 到時間 t_e 測量的光譜數據（即， $t_{ss0-dt * 4}$ 之前的一個時步的光譜數據）。

【0066】 如圖4中進一步示出的，過程400可以包括基於非穩定狀態數據集和穩定狀態數據集生成與檢測製造過程是否已經達到穩定狀態相關聯的SVM分類模型的疊代（區塊430）。例如，檢測設備220可以基於非穩定狀態數據集和穩定狀態數據集生成與檢測製造過程何時已經達到穩定狀態相關聯的SVM分類模型的疊代。

【0067】 在一些實施方式中，檢測設備220可以基於將SVM技術應用於

非穩定狀態數據集和穩定狀態數據集來生成SVM分類模型的疊代。例如，檢測設備220可以通過將非穩定狀態數據集和穩定狀態數據集映射為空間中的點，使得非穩定狀態數據集與穩定狀態數據集通過例如超平面相分離，來生成SVM分類模型。

【0068】 在一些實施方式中，檢測設備220可以基於訓練光譜數據和SVM分類模型的疊代來確定與SVM分類模型的疊代相關聯（即，通過其預測）的預測的轉換時間。例如，檢測設備220可以基於穩定狀態數據集和非穩定狀態數據集生成SVM分類模型的疊代。這裡，檢測設備220可以將訓練光譜數據（例如，與從時間 t_0 到時間 t_e 的每個時步相關聯）映射到相同空間中，基於相同空間生成SVM分類模型的疊代。在該示例中，基於訓練光譜數據項目被映射的位置（例如，相對於超平面集），SVM分類模型可以識別與製造過程相關聯、通過SVM分類模型的初始疊代預測的轉換時間（ $t_{trans(n)}$ ）。在一些實施方式中，檢測設備220可以確定用於SVM分類模型的每次疊代的預測的轉換時間。在一些實施方式中，檢測設備220可以存儲標識與SVM分類模型的疊代相關聯的預測的轉換時間的資訊，以便允許檢測設備220確定與製造過程相關聯的轉換時間，如下所述。

【0069】 如圖4進一步所示，過程400可以包括確定是否生成SVM分類模型的另一次疊代（區塊440）。例如，檢測設備220可以確定是否生成SVM分類模型的另一次疊代。

【0070】 在一些實施方式中，檢測設備220可以基於與穩定狀態數據集相關聯的時間來確定是否生成SVM分類模型的另一次疊代。例如，檢測設備220可以被配置為繼續生成SVM分類模型的疊代，直到與穩定狀態數據集相關聯的時間的最早時間滿足與已知製造過程處於非穩定狀態的時間（時間 t_{us0} ）相關聯的閾值時間為止。作為特定的示例，檢測設備220可以被配置為繼續生成SVM

分類模型的疊代（並確定預測的轉換時間），直到與穩定狀態數據集相關聯的最早時間與時間 t_{us0} 相差閾值量為止（例如，直到 $t_{ss0-dt} * n$ 距 t_{us0} 一個時步（ $t_{ss0-dt} * n = t_{us0} + dt$ ）為止）。

【0071】 另外，或替代地，檢測設備220可以基於疊代閾值來確定是否生成SVM分類模型的另一次疊代。例如，檢測設備220可以被配置為在閾值時間量內繼續生成SVM分類模型的疊代，直到已經生成了閾值次數的疊代等。這裡，檢測裝置220可以基於是否滿足閾值（例如，閾值時間量是否已經過去、是否已經生成了閾值次數的疊代等）來確定是否生成SVM分類模型的另一次疊代。

【0072】 如圖4進一步所示，如果要生成SVM分類模型的另一次疊代（區塊440-是），則過程400可以包括基於訓練光譜數據創建另一集穩定狀態數據和另一集非穩定狀態數據（區塊420）。例如，檢測設備220可以確定要生成SVM分類模型的另一次疊代（例如，當 $t_{ss0-dt} * n > t_{us0} + dt$ 時、當疊代閾值未被滿足時等），並且，檢測設備220可以基於訓練光譜數據來創建另一集穩定狀態數據和另一集非穩定狀態數據。

【0073】 在一些實施方式中，檢測設備220可以以上述關於區塊420所描述的方式創建另一集非穩定狀態數據和另一集穩定狀態數據。在一些實施方式中，在創建另一集穩定狀態數據和另一集非穩定狀態數據時，檢測設備220可以生成SVM分類模型的另一次疊代並且確定通過SVM分類模型的另一次疊代預測的轉換時間，如上面關於區塊430所描述的。

【0074】 作為上述疊代過程的示例，檢測設備220可以創建初始集非穩定狀態數據（例如，包括在從時間 t_0 到時間 t_{us0} 的時間處測量的訓練光譜數據）和初始集穩定狀態數據（例如，包括在從時間 t_{ss0} 到時間 t_e 的時間處測量的訓練光譜數據）。在該示例中，檢測設備220可以將SVM技術應用於初始集穩定狀態

數據和初始集非穩定狀態數據，以便生成SVM分類模型的初始疊代。接下來，檢測設備220可以將訓練光譜數據作為輸入提供給SVM分類模型的初始疊代，並且確定與SVM分類模型的初始疊代相關聯的初始預測的轉換時間（ $t_{\text{trans}0}$ ）作為輸出。

【0075】 繼續該示例，檢測設備220可以確定 $t_{\text{ss}0} > t_{\text{us}0} + dt$ ，並且因此，檢測設備220可以生成SVM分類模型的另一次疊代。然後，檢測設備220可以基於訓練光譜數據和初始預測的轉換時間創建第一集穩定狀態數據（例如，包括從時間 $t_{\text{ss}0-dt} * 1$ 到時間 t_e 測量的訓練光譜數據）和第一集非穩定狀態數據（例如，包括在從時間 t_0 到時間 $t_{\text{trans}0}$ 的時間處測量的訓練光譜數據）。然後，檢測設備220可以將SVM技術應用於第一集穩定狀態數據和第一集非穩定狀態數據，以生成SVM分類模型的第一次疊代。接下來，檢測設備220可以將訓練光譜數據作為輸入提供給SVM分類模型的第一次疊代，並且確定與SVM分類模型的第一次疊代相關聯的第一預測的轉換時間（ $t_{\text{trans}1}$ ）作為輸出。檢測設備220可以以這種方式繼續生成SVM分類模型的疊代（並且確定預測的轉換時間），直到檢測設備220確定將不生成附加的疊代。

【0076】 如圖4進一步所示，如果將不生成SVM分類模型的另一次疊代（區塊440-否），則過程400可以包括基於通過SVM分類模型的疊代預測的轉換時間來確定與製造過程相關聯的轉換時間（區塊450）。例如，檢測設備220可以確定將不生成SVM分類模型的另一次疊代，並且檢測設備220可以基於通過SVM分類模型的疊代預測的轉換時間來確定與製造過程相關聯的轉換時間。

【0077】 在一些實施方式中，檢測設備220可以基於與SVM分類模型的疊代相關聯的預測的轉換時間來確定與製造過程相關聯的轉換時間。例如，檢測設備220可以以上述方式分別確定通過SVM分類模型的 n 次疊代預測的 n 個轉換時間。這裡，檢測設備220可以將與製造過程相關聯的轉換時間確定為通過

SVM分類模型的n次疊代預測的轉換時間的優勢轉換時間（例如，具有最常出現的預測的轉換時間）。

【0078】 圖5A和圖5B是與基於通過與製造過程相關聯的SVM分類模型的疊代預測的轉換時間來確定製造過程的轉換時間相關聯的示例圖形表示500和550。為了圖5A和圖5B，假定檢測設備220已經確定了與SVM分類模型的n次疊代相對應的n個轉換時間。

【0079】 在圖5A中，每個點表示通過SVM分類模型的疊代預測的轉換時間，其相對於與SVM分類模型的疊代相關聯的時間 $t_{ss0-dt} * n$ 繪製（即，時間 $t_{ss0-dt} * n$ 與關聯於生成SVM分類模型的疊代的穩定狀態集相關聯）。如圖5A所示，n個轉換時間的集中的優勢轉換時間位於時間130處（例如，時間130通過比任何其他轉換時間被預測了更多的疊代）。在該示例中，檢測設備220可以將與製造過程相關聯的轉換時間確定為時間130。

【0080】 圖5B中示出了另一圖形表示。在圖5B中，繪製了每個轉換時間的出現的總次數。再次，如圖5B所示，n個轉換時間的集中的優勢轉換時間位於時間130。因此，檢測設備220可以將與製造過程相關聯的轉換時間確定為時間130。

【0081】 如上所述，圖5A和圖5B僅作為示例提供。其他的示例也是可能的並且可以不同於關於圖5A和圖5B所描述的示例。

【0082】 返回到圖4，過程400可以包括基於與製造過程相關聯的轉換時間生成最終的SVM分類模型（區塊460）。例如，檢測設備220可以基於與製造過程相關聯的轉換時間生成最終的SVM分類模型。

【0083】 最終的SVM分類模型可以包括基於與製造過程相關聯的轉換時間生成的SVM分類模型，該轉換時間是基於SVM分類模型的疊代而確定的。

【0084】 在一些實施方式中，檢測設備220可以基於與製造過程相關聯的

轉換時間生成最終的分類模型。例如，如上所述，檢測設備220可以確定與製造過程相關聯的轉換時間。這裡，檢測設備220可以創建包括與轉換時間之前的時間相關聯的訓練光譜數據的最終集非穩定狀態數據，以及包括與轉換時間處或其之後的時間相關聯的訓練光譜數據的最終集穩定狀態數據。在該示例中，檢測設備220可以將SVM技術應用於最終集非穩定狀態數據和最終集穩定狀態數據，並且可以以與上述類似的方式生成最終的SVM分類模型。

【0085】 在一些實施方式中，如上所述，SVM分類模型可以包括決策邊界（例如，超平面），其可以充當用於確定製造過程的稍後執行是否已經達到穩定狀態的基礎。下面參照圖6描述關於決策邊界的附加細節。

【0086】 在一些實施方式中，檢測設備220可以存儲最終的SVM分類模型，使得檢測設備220可以使用最終的SVM分類模型以確定製造過程的稍後執行是處於非穩定狀態還是處於穩定狀態，如下所述。以這種方式，檢測設備220可以生成SVM分類模型，該SVM分類模型可以接收與製造過程相關聯的光譜數據作為輸入並且提供製造過程處於非穩定狀態還是處於穩定狀態的指示作為輸出。

【0087】 在一些實施方式中，製造過程可以包括多個狀態轉換，並且檢測設備220可以針對每個穩定狀態重複過程400以確定與製造過程相關聯的多個SVM分類模型。例如，製造過程可以從第一非穩定狀態轉換到第一穩定狀態、從第一穩定狀態轉換到第二非穩定狀態、並且從第二非穩定狀態轉換到第二穩定狀態。在該示例中，檢測設備220可以執行過程400（例如，基於與製造過程相關聯測量的訓練光譜數據）以生成與到第二穩定狀態的轉換時間相關聯的SVM分類模型。接下來，檢測設備220可以執行過程400（例如，基於不包括與第二穩定狀態相關聯的訓練光譜數據的訓練光譜數據的子集），以生成與到第一穩定狀態的轉換時間相關聯的SVM分類模型。

【0088】 儘管圖4示出了過程400的示例區塊，但是，在一些實施方式中，過程400可以包括與圖4中所描繪的那些相比附加的區塊、較少的區塊、不同的區塊或不同佈置的區塊。另外地，或可選地，過程400中的兩個或更多區塊可以並存執行。

【0089】 圖6是用於基於光譜數據並使用SVM分類模型來確定製造過程是否已經達到穩定狀態的示例過程600的流程圖。在一些實施方式中，圖6中的一個或多個過程區塊可以由檢測設備220執行。在一些實施方式中，圖6中的一個或多個過程區塊可以由與檢測設備220分離的另一設備或包括檢測設備220的設備組（諸如光譜儀210和/或使用設備230）執行。

【0090】 如圖6所示，過程600可以包括識別用於檢測製造過程是否已經達到穩定狀態的SVM分類模型（區塊610）。例如，檢測設備220可以識別用於檢測製造過程是否已經達到穩定狀態的SVM分類模型。

【0091】 在一些實施方式中，檢測設備220可以基於檢測設備220存儲或可存取的資訊來識別SVM分類模型。例如，檢測設備220可以基於存儲由檢測設備220生成的最終的SVM分類模型來識別SVM分類模型，如以上關於過程400所描述的。

【0092】 在一些實施方式中，檢測設備220可以在檢測設備220接收到（例如，從光譜儀210、使用設備230、基於使用者輸入等）檢測設備220要監測製造過程以確定製造過程何時達到穩定狀態的指示時識別SVM分類模型。例如，檢測設備220可以從光譜儀210和/或使用設備230接收特定的製造過程將要開始或已經開始的指示，並且可以（例如，自動地）基於接收到的例如當檢測設備220被配置為自動監測製造過程以檢測製造過程何時達到穩定狀態時的指示來識別SVM分類模型。

【0093】 如圖6進一步所示，過程600可以包括接收與製造過程相關聯的

光譜數據（區塊620）。例如，檢測設備220可以接收與製造過程相關聯的光譜數據。

【0094】 在一些實施方式中，光譜數據可以包括在製造過程的執行期間由一個或多個光譜儀210測量的光譜。在一些實施方式中，檢測設備220可以在製造過程期間即時地或接近即時地接收光譜數據。例如，檢測設備220可以相對於光譜儀210獲得光譜數據即時或接近即時地接收在製造過程的執行期間由光譜儀210測量的光譜數據。在一些實施方式中，檢測設備220可以基於光譜數據和SVM分類模型確定製造過程是否已經達到穩定狀態，如下所述。

【0095】 如圖6進一步所示，過程600可以包括基於光譜數據和SVM分類模型確定製造過程是否已經達到穩定狀態（區塊630）。例如，檢測設備220可以基於光譜數據和SVM分類模型確定製造過程是否已經達到穩定狀態。

【0096】 在一些實施方式中，檢測設備220可以基於與SVM分類模型相關聯的決策邊界來確定製造過程是否已達到穩態。例如，基於使用訓練光譜數據來識別製造過程的轉換時間（如上所述），檢測設備220可以生成包括由光譜空間中的超平面表示的決策邊界的SVM分類模型。這裡，決策邊界內的光譜空間中的點表示製造過程處於穩定狀態的光譜條件，而決策邊界外的點表示製造過程處於非穩定狀態的光譜條件。在一些實施方式中，可以在確定與製造過程相關聯的轉換時間之後基於將SVM分類模型技術應用於訓練光譜數據來生成決策邊界，如上所述。

【0097】 圖7A和圖7B是示出與SVM分類模型相關聯的簡化決策邊界的示例圖形表示700。為了說明的目的，圖7A和圖7B所示的決策邊界被示出為僅與第一主要分量（PC1）和第二主要分量（PC2）相關聯。在實踐中，決策邊界可以與不同數量的分量（例如，80個變數、120個變數等）相關聯。

【0098】 在圖7A和圖7B中，灰色的點和線表示在製造過程處於非穩定狀

態的時間（即，從 t_0 到與SVM分類模型相關聯的轉換時間）處測量的訓練光譜數據，而黑色的點和線表示在製造過程處於穩定狀態的時間（即，從與SVM分類模型相關聯的轉換時間到時間 t_e ）處測量的訓練光譜數據。淺灰色的圓圈表示製造過程處於非穩定狀態時的最後一點，以及製造過程處於穩定狀態時的第一點。圖7A是與製造過程相關聯的所有訓練光譜數據（例如，從時間 t_0 到時間 t_e ）的圖形表示，而圖7B是由圖7A中的虛線矩形指示的空間內的點的特寫視圖。在圖7B中，決策邊界由與穩定狀態相關聯的點（以及與非穩定狀態相關聯的點的子集）周圍的粗線表示。如上所述，圖7A和圖7B僅作為簡化的說明性示例被提供。其他的示例也是可能的並且可以不同於關於圖7A和圖7B所描述的示例。

【0099】 在一些實施方式中，檢測設備220可以基於決策邊界（例如，如圖7B中所示的決策邊界）確定製造過程是否已達到穩定狀態。例如，檢測設備220可以接收與製造過程相關聯的光譜數據，並且可以將光譜數據映射為與決策邊界相關聯的空間中的點。這裡，如果與光譜數據相關聯的點位於決策邊界之上或之內，則檢測設備220可以確定製造過程已經達到穩定狀態。或者，如果與光譜數據相關聯的點位於決策邊界之外，則檢測設備220可以確定製造過程尚未達到穩定狀態（即，處於非穩定狀態）。

【0100】 在一些實施方式中，檢測設備220可以生成與確定製造過程是否已經達到穩定狀態相關聯的置信度量（本文稱為決策值）。例如，檢測設備220可以基於決策邊界和表示光譜數據的點來確定從決策邊界到表示光譜數據的點的距離（例如，到決策邊界上的最近點的距離）。這裡，決策邊界內的點可以被分配正（或負）決策值，而決策邊界外的點可以被分配負（或正）決策值。在該示例中，具有較高絕對值的決策值（例如，4.0、2.5、-2.5、-4.0等）表示確定製造過程的狀態的置信度高於具有較低絕對值的決策值（例如，0.5、

0.2、-0.2、-0.5等)的置信度。

【0101】 如上所述，圖7A和圖7B僅作為說明性示例提供。其他的示例也是可能的並且可以不同於關於圖7A和圖7B所描述的示例。

【0102】 圖8是基於圖7A和圖7B的決策邊界確定的示例決策值的圖形表示800。在圖8中，負決策值對應於在製造過程期間測量的具有落在決策邊界之外的點的光譜數據，而正決策值對應於在製造過程期間測量的具有落在決策邊界之內的點的光譜數據。如由圖8中的垂直線所示，檢測設備220在大致時步65處確定第一正決策值。

【0103】 在一些實施方式中，檢測設備220可以基於決策值閾值來確定製造過程是否已達到穩定狀態。例如，當與決策邊界內的點相關聯的決策值滿足閾值時，檢測設備220可以確定製造過程已經達到穩定狀態。使用圖8作為特定的示例，如果檢測設備220被配置為當檢測設備220確定大於或等於2.0的正決策值時確定製造過程已經達到穩定狀態，則檢測設備220可以在大致時步75處做出這樣的確定。

【0104】 作為另一實例，當表示與連續時步的數量相關聯的光譜數據的連續決策值的數量滿足閾值時，檢測設備220可以確定製造過程已經達到穩定狀態。使用圖8作為特定的示例，如果檢測設備220被配置為當檢測設備220確定5個連續的正決策值時確定製造過程已經達到穩定狀態，則檢測設備220可以在大致時步69處做出這樣的確定。

【0105】 作為另一示例，當連續決策值的閾值數量滿足閾值時，檢測設備220可以確定製造過程已經達到穩定狀態。使用圖8作為特定的示例，如果檢測設備220被配置為當檢測設備220確定大於或等於1.0的3個連續正決策值時確定製造過程已經達到穩定狀態，則檢測設備220可以在大致時步68處做出這樣的確定。

【0106】 作為另一示例，當多個決策值（例如，一系列連續正決策值）的平均值或加權平均值滿足閾值時，檢測設備220可以確定製造過程已經達到穩定狀態。在一些實施方式中，使用決策值閾值可以防止製造過程已經達到穩定狀態的錯誤確定（例如，由於製造過程本質上可以是隨機的）。

【0107】 如上所述，圖8僅作為說明性的示例提供。其他的示例也是可能的並且可以不同於關於圖8所描述的示例。

【0108】 返回至圖6，如果製造過程尚未達到穩定狀態（區塊630-否），則過程600可以包括接收與製造過程相關聯的附加光譜數據（區塊620）。例如，檢測設備220可以確定製造過程還沒有達到穩定狀態（例如，製造過程仍處於非穩定狀態），並且可以等待接收附加光譜數據（例如，製造過程期間，在下一個時步處收集的）。

【0109】 在一些實施方式中，可以以上述方式基於附加光譜數據確定製造過程是否已經達到穩定狀態。在一些實施方式中，檢測設備220可以繼續接收光譜數據並且確定製造過程是否已經達到穩定狀態，直到檢測設備220確定製造過程已經達到穩定狀態為止。

【0110】 如圖6進一步所示，如果製造過程已經達到穩定狀態（區塊630-是），則過程600可以包括確定與穩定狀態相關聯的定量度量（quantitative metric）（區塊640）。例如，檢測設備220可以確定製造過程已經達到穩定狀態，並且可以確定與穩定狀態相關聯的定量度量。

【0111】 定量度量可以包括指示與穩定狀態相關聯的定量屬性（諸如化合物在穩定狀態下的組分的濃度、穩定狀態下的粒子大小等）的度量。在一些實施方式中，由檢測設備220基於光譜數據檢測到的穩定狀態可以對應於具有特定物理屬性（例如粒子大小）的組分化合物的特定組成。因此，可以基於與穩定狀態相關聯的光譜數據來預測定量度量。

【0112】 例如，在一些實施方式中，檢測設備220可以存儲或存取回歸模型（例如，PLS回歸模型、SVR模型），該回歸模型接收基於其檢測穩定狀態的光譜數據作為輸入，並且提供與穩定狀態相關聯的定量度量作為輸出。在該示例中，回歸模型的輸出可以是例如化合物的每個組分的濃度、化合物的特定大小等。

【0113】 在一些實施方式中，檢測設備220可以存儲或存取回歸模型。另外地或可選地，檢測設備220可以基於訓練光譜數據和訓練定量數據（例如，標識與訓練光譜數據對應的定量度量的資訊）來生成回歸模型（在較早的時間）。在一些實施方式中，定量度量的確定是可選的。

【0114】 如圖6進一步所示，過程600可以包括提供製造過程已經達到穩定狀態的指示、以及與定量度量相關聯的資訊（區塊650）。例如，檢測設備220可以提供製造過程已經達到穩定狀態的指示、以及與定量度量相關聯的資訊。

【0115】 在一些實施方式中，檢測設備220可以將製造過程已經達到穩定狀態的指示和/或與定量度量相關聯的資訊提供給另一設備，例如，使用者設備230（例如，使得使用者可以被通知製造過程已經達到穩定狀態和/或查看與定量度量相關聯的資訊）。

【0116】 另外地，或可選地，檢測設備220可以提供製造過程已經達到穩定狀態的指示，以使動作自動地執行。例如，檢測設備220可以將該指示提供給與執行製造過程相關聯的設備，以使製造過程停止製造過程（例如，停止與穩定狀態相關聯的混合過程）、啟動製造過程的下一個步驟、使得製造過程重新開始（例如，重新開始對新的原料的混合過程）等。

【0117】 儘管圖6示出過程600的示例區塊，但是在一些實施方式中，過程600可以包含與圖6中所描繪的那些相比較附加的區塊、較少的區塊、不同的

區塊或不同佈置的區塊。另外地或可選地，過程600中的兩個或更多的區塊可以並存執行。

【0118】 本文所描述的實施方式提供了能夠執行以下操作的檢測設備：生成用於確定製造過程（例如，連續製造過程、批量製造過程等）是否已經達到穩定狀態的SVM分類模型，以及使用SVM分類模型並基於與製造過程相關聯的多變數光譜數據確定製造過程是否已經達到穩定狀態。在一些實施方式中，SVM分類模型可以考慮多個變數（例如，80個變數、120個變數、150個變數等），從而增加SVM分類模型的準確性和/或穩健性（例如，相比於單變數技術或PCA技術）。

【0119】 前述公開內容提供了說明和描述，但並非旨在窮舉或將實施方式限於所公開的精確形式。按照上述公開內容，修改和變化是可能的，或者可以從實施方式的實踐中獲得修改和變化。

【0120】 如本文所使用的，術語元件旨在被廣義地解釋為硬體、固件和/或硬體和軟體的組合。

【0121】 本文中結合閾值描述了一些實施方式。如本文所使用的，滿足閾值可以是指大於閾值、多於閾值、高於閾值、大於或等於閾值、小於閾值、少於閾值、低於閾值、小於或等於閾值、等於閾值等的值。

【0122】 顯而易見的是，本文所描述的系統和/或方法可以以不同形式的硬體、固件或者硬體和軟體的組合來實現。用於實施這些系統和/或方法的實際專用控制硬體或軟體代碼不限於實施方式。因此，此處描述了系統和/或方法的操作和行為而沒有參考具體的軟體代碼-應當理解，軟體和硬體可以被設計為基於本文的描述來實現系統和/或方法。

【0123】 儘管特徵的特定組合在請求項中被列舉和/或在說明書中被公開，但這些組合不意圖限制可能的實施方式的公開。實際上，這些特徵中的許

多特徵可以以未在請求項中具體列舉和/或在說明書中公開的方式組合。儘管下面列出的每個從屬請求項可以直接依賴於僅一項請求項，但是可能的實施方式的公開包括每個從屬請求項與請求項集中的每個其他請求項的組合。

【0124】 除非明確地如此描述，否則這裡的任何元件、動作或指令都不應被解釋為關鍵或必要的。而且，如這裡所使用的，冠詞“一”和“一個”旨在包括一個或多個專案，並且可以與“一個或多個”互換使用。此外，如這裡所使用的，術語“集”旨在包括一個或多個項（例如，相關項、不相關項、相關項和不相關項的組合等），並且可以與“一個或多個”互換使用。當意圖表示只有一項時，使用術語“一個”或類似的語言。而且，如本文所使用的，術語“有”、“具有”等旨在是開放式術語。此外，除非另有明確說明，短語“基於”旨在表示“至少部分基於”。

【符號說明】

【0125】

100：實施方式

102~136：實施方式100的附圖標記

200：環境

210-1~210-X：光譜儀

220：檢測設備

230：使用者設備

240：網路

300：設備

310：匯流排

320：處理器

330：記憶體

340：存儲元件

350：輸入元件

360：輸出元件

370：通信介面

400：支援向量機（SVM）分類模型的示例過程的流程圖

410~460：流程圖的區塊

500：圖形表示

550：圖形表示

600：過程

610~650：區塊

700：圖形表示

800：圖形表示

【發明申請專利範圍】

【第1項】一種用於監控製造過程的狀態之設備，包括：

一個或多個處理器，用於：

接收與從非穩定狀態轉換到穩定狀態的製造過程相關聯的訓練光譜數據；

基於所述訓練光譜數據生成支援向量機（SVM）分類模型的多次疊代，直到與用於生成所述SVM分類模型的所述多次疊代中的疊代的穩定狀態數據集相關聯的最早時間是距已知所述製造過程處於所述非穩定狀態的時間的一時間閾值量為止；

基於所述SVM分類模型的所述多次疊代確定與所述製造過程相關聯的多個預測的轉換時間，

所述多個預測的轉換時間中的預測的轉換時間識別在所述製造過程期間的所述疊代預測所述製造過程從所述非穩定狀態轉換到所述穩定狀態的時間；以及

基於所述多個預測的轉換時間生成與確定所述製造過程是否已經達到所述穩定狀態相關聯的最終的SVM分類模型。

【第2項】根據請求項1所述的設備，其中所述一個或多個處理器還用於：

接收與所述製造過程相關聯的附加光譜數據；以及

基於所述最終的SVM分類模型和所述附加光譜數據確定所述製造過程尚未達到所述穩定狀態。

【第3項】根據請求項1所述的設備，其中，所述一個或多個處理器還用於：

接收與所述製造過程相關聯的附加光譜數據；以及

基於所述最終的SVM分類模型和所述附加光譜數據確定所述製造過程已經

達到所述穩定狀態。

【第4項】根據請求項3所述的設備，其中，所述一個或多個處理器還用於：

提供所述製造過程已達到所述穩定狀態的指示。

【第5項】根據請求項3所述的設備，其中，所述一個或多個處理器還用於：

基於確定所述製造過程已經達到所述穩定狀態，確定與所述穩定狀態相關聯的定量度量；以及

提供與所述定量度量相關聯的資訊。

【第6項】根據請求項1所述的設備，其中，當生成所述SVM分類模型的所述多次疊代時，所述一個或多個處理器用於：

基於所述訓練光譜數據創建非穩定狀態數據集和所述穩定狀態數據集；以及

基於所述非穩定狀態數據集和所述穩定狀態數據集，生成所述疊代。

【第7項】根據請求項6所述的設備，其中所述一個或多個處理器還用於：基於所述多個預測的轉換時間確定優勢轉換時間，

其中所述最終的SVM分類模型是基於確定所述優勢轉換時間生成。

【第8項】根據請求項1所述的設備，其中所述一個或多個處理器還用於：在生成所述SVM分類模型的所述多次疊代之前，基於所述訓練光譜數據執行降維。

【第9項】一種存儲指令的非暫態電腦可讀取媒體，所述指令包括：一個或多個指令，當由一個或多個處理器運行時，使得所述一個或多個處理器：

接收與從非穩定狀態轉換到穩定狀態的製造過程的第一執行相關聯的

訓練光譜數據；

基於所述訓練光譜數據確定支援向量機（SVM）分類模型的多次疊代，直到與穩定數據集相關聯的最早時間是距已知所述製造過程的所述第一執行處於所述非穩定狀態的時間的一時間閾值量為止；

基於所述SVM分類模型的所述多次疊代生成與確定所述製造過程的另一執行是否已經從所述非穩定狀態轉換到所述穩定狀態相關聯的最終的支援向量機（SVM）分類模型；

接收與所述製造過程的第二執行相關聯的附加光譜數據；以及

基於所述最終的SVM分類模型和所述附加光譜數據確定所述製造過程的所述第二執行是否已經從所述非穩定狀態轉換到所述穩定狀態。

【第10項】根據請求項9所述的非暫態電腦可讀取媒體，其中，當確定所述製造過程的所述第二執行是否已經從所述非穩定狀態轉換到所述穩定狀態的時候，所述一個或多個指令在由所述一個或多個處理器運行時還使得所述一個或多個處理器：

確定所述製造過程的所述第二執行已經從所述非穩定狀態轉換到所述穩定狀態；以及

提供所述製造過程的所述第二執行已經從所述非穩定狀態轉換到所述穩定狀態的指示。

【第11項】根據請求項10所述的非暫態電腦可讀取媒體，其中，當由所述一個或多個處理器運行時，所述一個或多個指令還使得所述一個或多個處理器：

基於確定所述製造過程的所述第二執行已經從所述非穩定狀態轉換到所述穩定狀態，確定與所述製造過程的所述第二執行相關聯的定量度量；以及

提供與所述定量度量相關聯的資訊。

【第12項】根據請求項11所述的非暫態電腦可讀取媒體，其中，在由所述一個或多個處理器運行時，所述一個或多個指令還使得所述一個或多個處理器：

識別與所述定量度量相關聯的回歸模型；以及

其中使得所述一個或多個處理器確定所述定量度量的所述一個或多個指令使得所述一個或多個處理器：

基於所述回歸模型確定所述定量度量。

【第13項】根據請求項9所述的非暫態電腦可讀取媒體，其中，所述一個或多個指令進一步使得所述一個或多個處理器：

基於所述訓練光譜數據創建第一集非穩定狀態數據和第一集穩定狀態數據；

基於所述第一集非穩定狀態數據和所述第一集穩定狀態數據生成所述SVM分類模型的第一次疊代；

基於所述訓練光譜數據創建第二集非穩定狀態數據和第二集穩定狀態數據；以及

基於所述第二集非穩定狀態數據和所述第二集穩定狀態數據生成所述SVM分類模型的第二次疊代。

【第14項】根據請求項13所述的非暫態電腦可讀取媒體，其中，當由所述一個或多個處理器運行時，所述一個或多個指令還使得所述一個或多個處理器：

基於所述SVM分類模型的所述第一次疊代確定與所述SVM分類模型的所述第一次疊代相關聯的預測的轉換時間；以及

其中，使得所述一個或多個處理器創建所述第二集非穩定狀態數據的所述一個或多個指令使得所述一個或多個處理器：

基於與所述SVM分類模型的所述第一次疊代相關聯的所述預測的轉換時間創建所述第二集非穩定狀態數據。

【第15項】一種用於監控製造過程的狀態之方法，包括：

由設備接收與從非穩定狀態轉換到穩定狀態的製造過程的第一執行相關聯的第一光譜數據；

由所述設備並基於所述第一光譜數據生成支援向量機（SVM）分類模型的多次疊代；

由所述設備並且基於所述SVM分類模型的所述多次疊代確定與所述製造過程的所述第一執行相關聯的多個預測的轉換時間，直到與用於生成所述SVM分類模型的所述多次疊代中的疊代的穩定數據集相關聯的最早時間滿足與已知所述製造過程處於所述非穩定狀態的時間相關聯的一閾值時間為止；

由所述設備並且基於所述多個預測的轉換時間生成與確定所述製造過程的另一執行是否已經達到所述穩定狀態相關聯的最終的SVM分類模型；

由所述設備接收與所述製造過程的第二執行相關聯的第二光譜數據；以及

由所述設備基於所述最終的SVM分類模型和所述第二光譜數據確定所述製造過程的第二執行是否已經達到所述穩定狀態。

【第16項】根據請求項15所述的方法，其中，確定所述製造過程的所述第二執行是否已經達到所述穩定狀態包括：

確定所述製造過程的所述第二執行尚未達到所述穩定狀態。

【第17項】根據請求項15所述的方法，其中，確定所述製造過程的所述第二執行是否已經達到所述穩定狀態包括：

確定所述製造過程的所述第二執行已經達到所述穩定狀態。

【第18項】根據請求項17所述的方法，還包括：

提供所述製造過程已經達到所述穩定狀態的指示，

其中，提供所述指示使得與所述製造過程相關聯的動作被自動執行。

【第19項】根據請求項17所述的方法，還包括：

基於與所述製造過程相關聯的回歸模型確定與所述穩定狀態相關聯的定量度量；以及

提供與所述定量度量相關聯的資訊。

【第20項】如請求項15所述的方法，還包括：

在生成所述SVM分類模型的所述多次疊代之前，執行與所述第一光譜數據相關聯的降維。

【發明圖式】

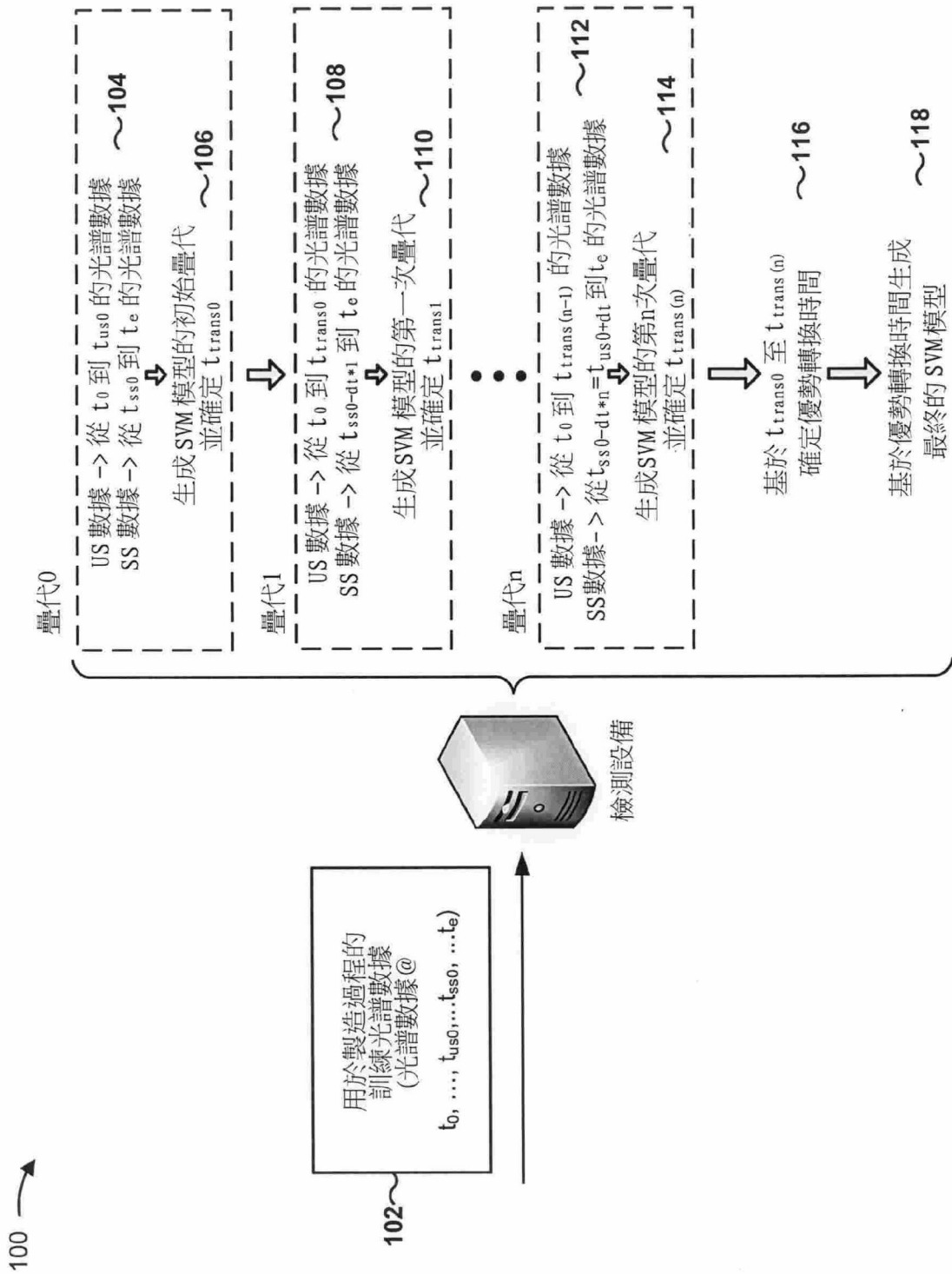


圖 1A

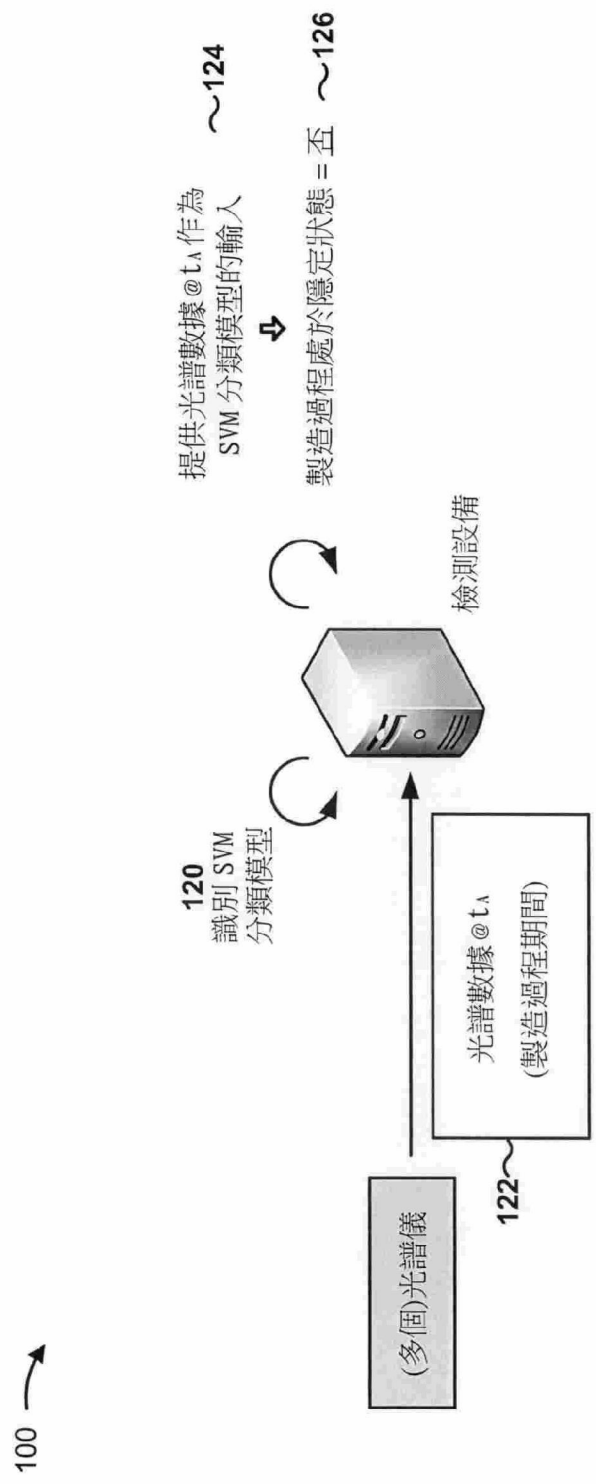


圖1B

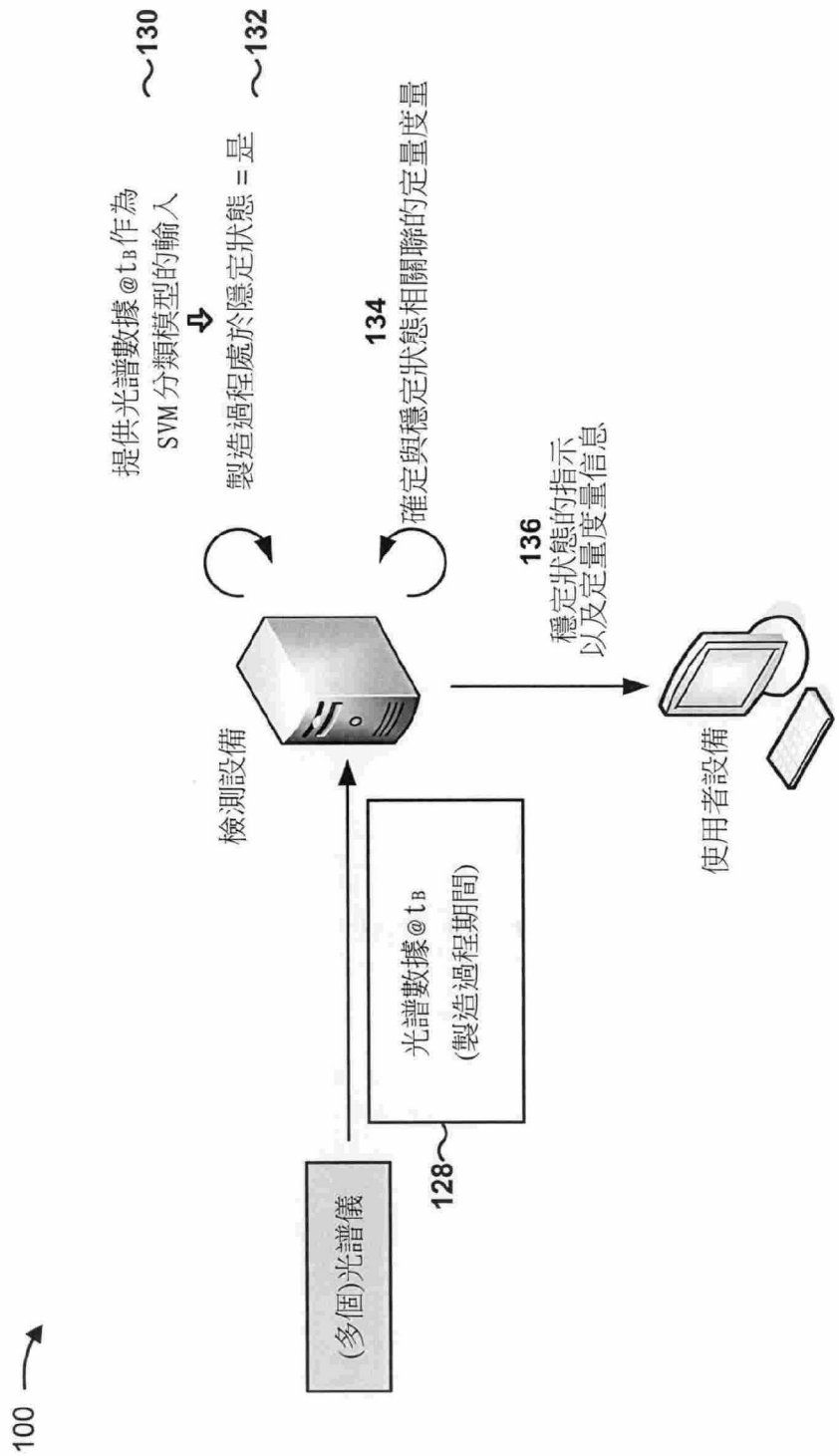
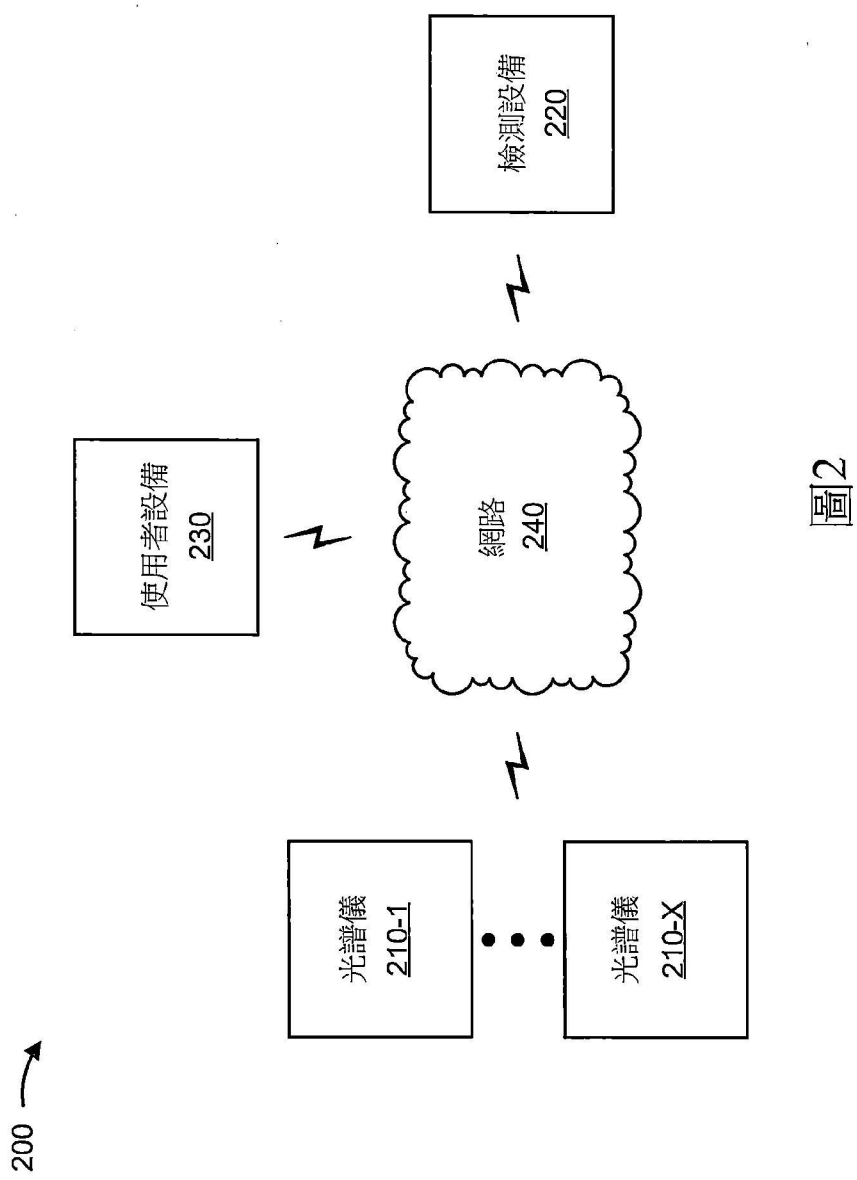


圖1C



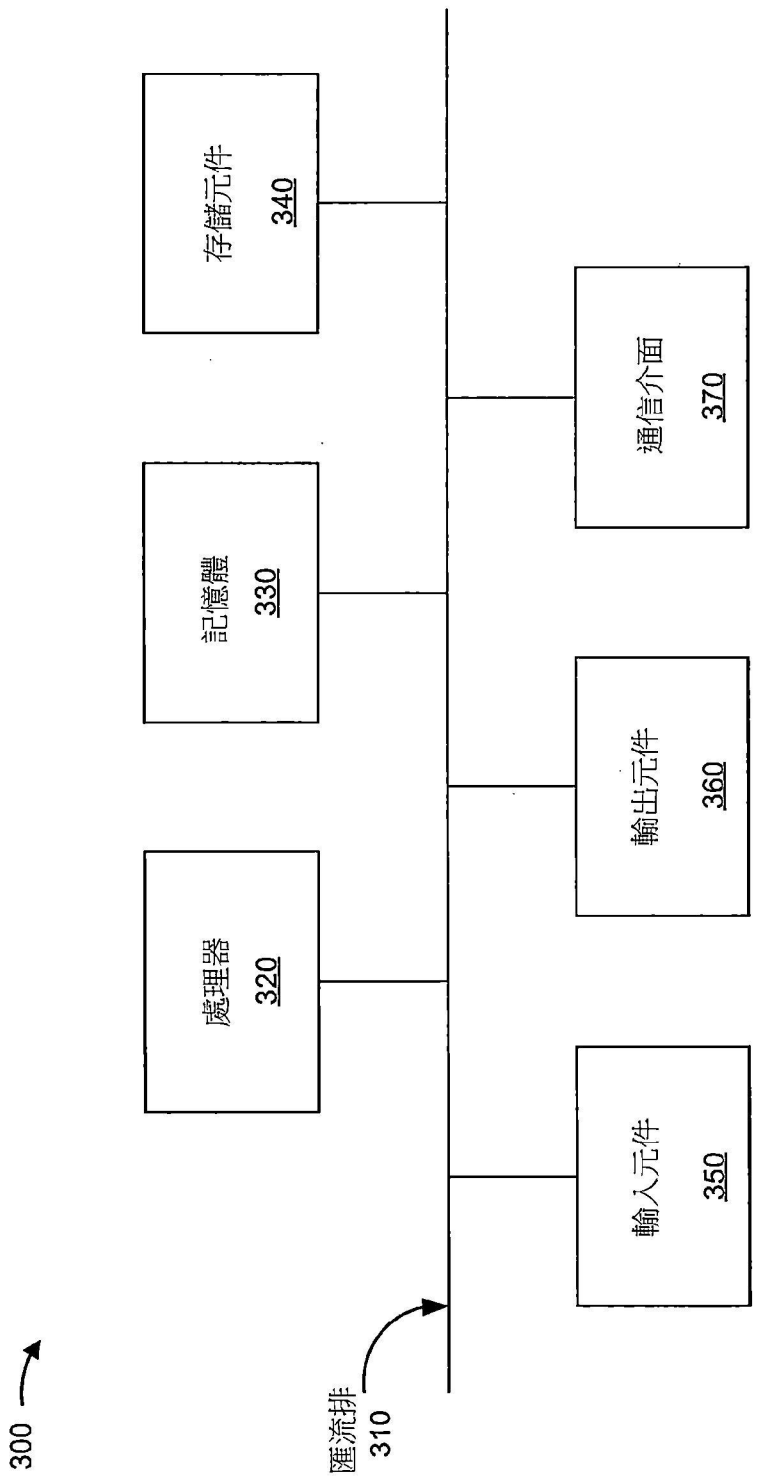


圖3

400 →

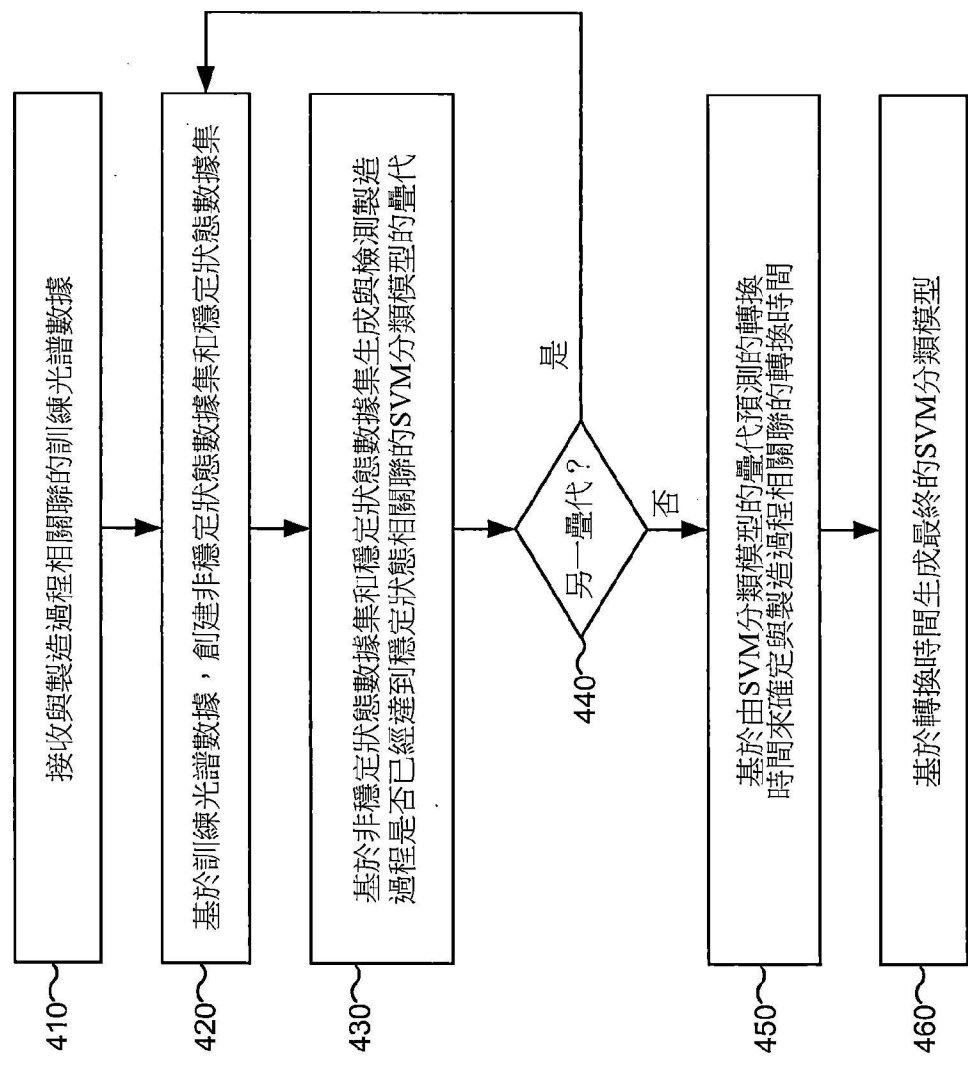


圖4

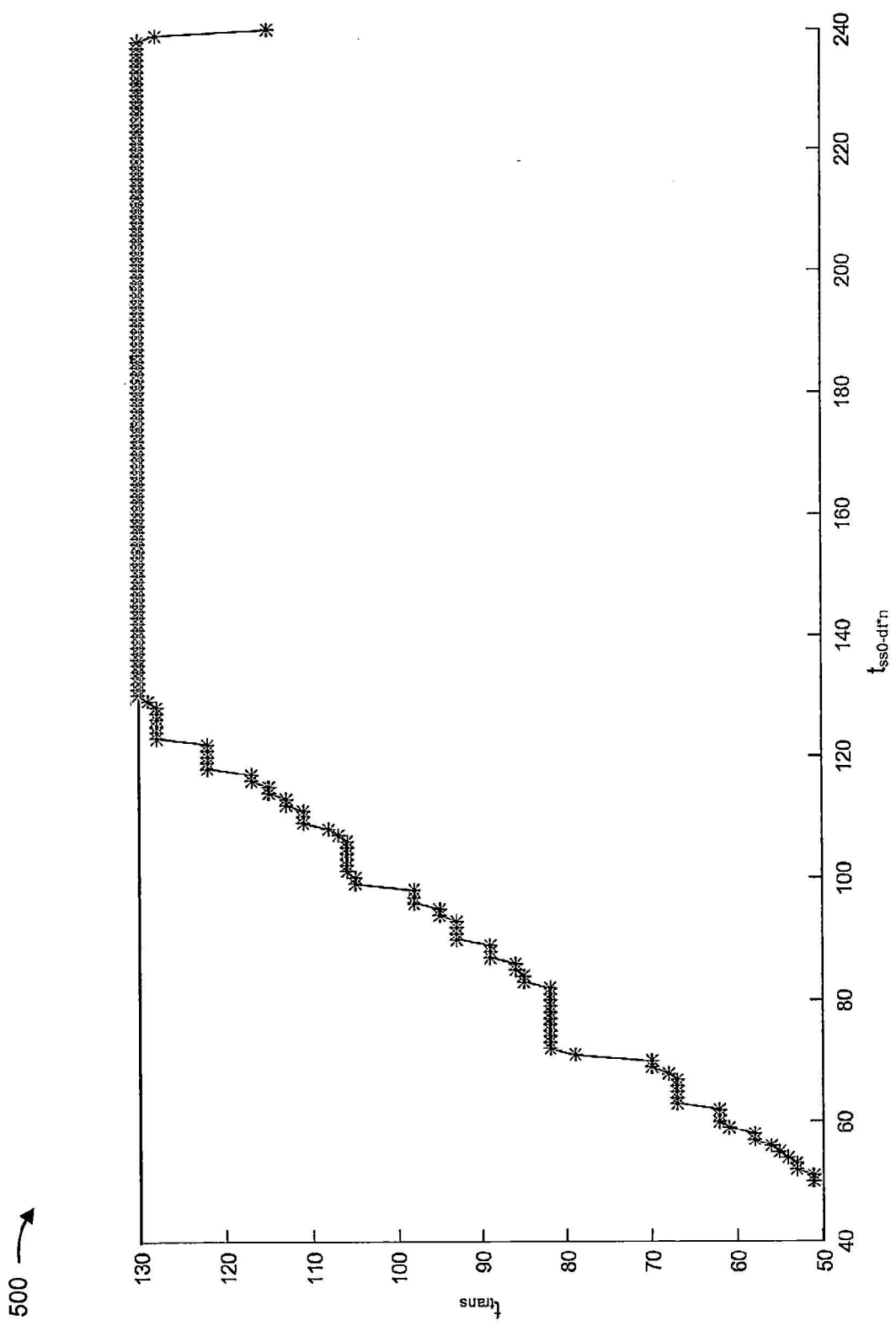


圖 5A

550 →

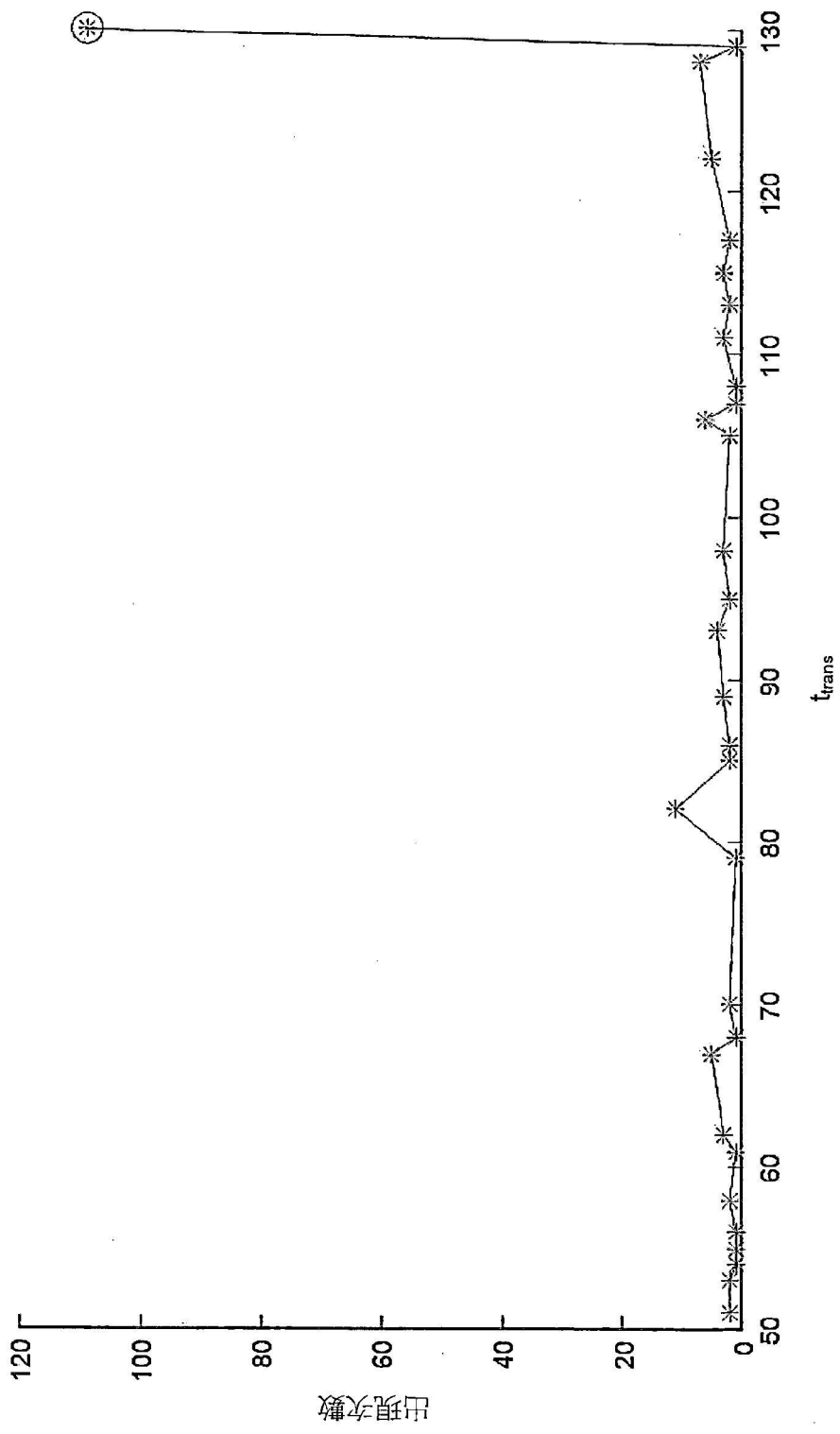


圖5B

600 →

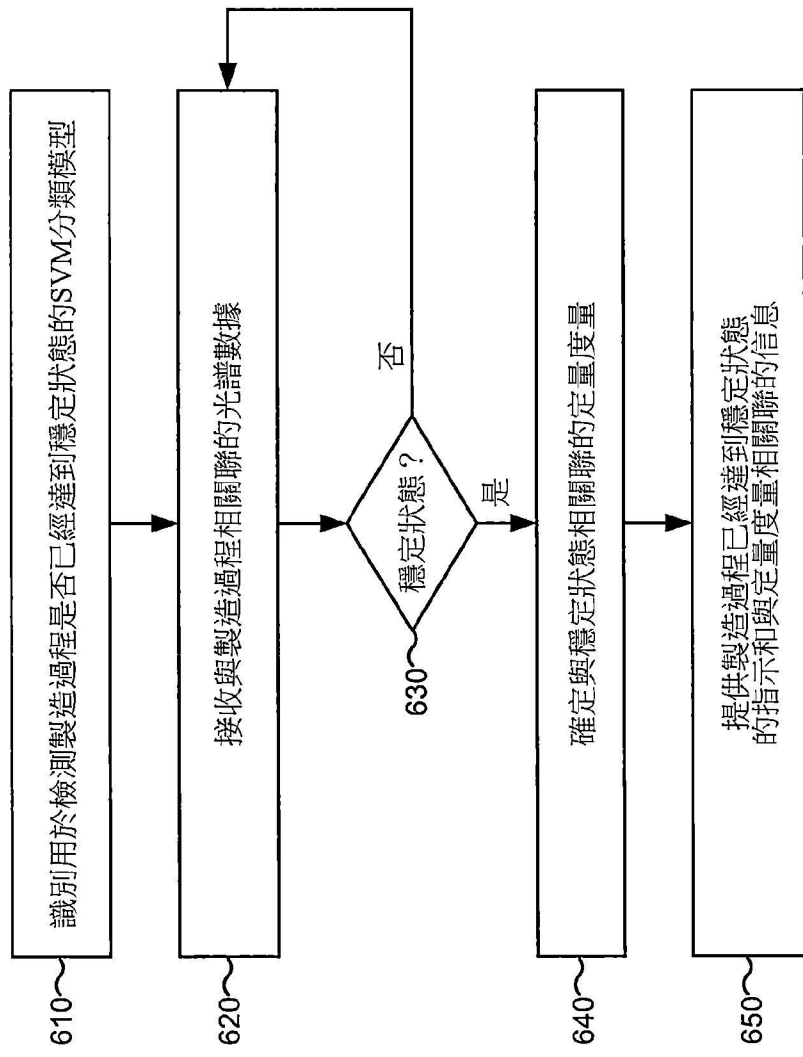


圖6

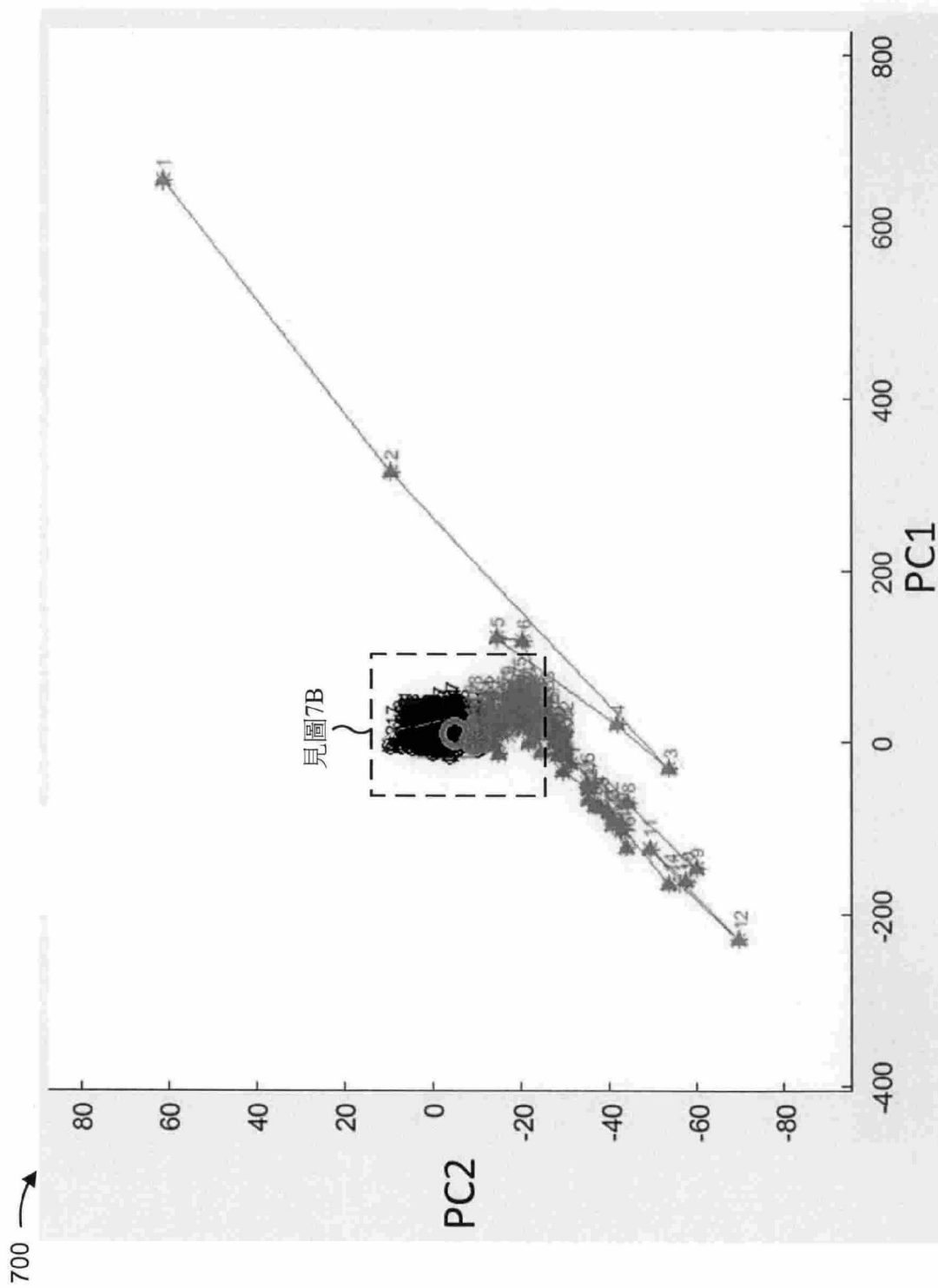


圖7A

700 →

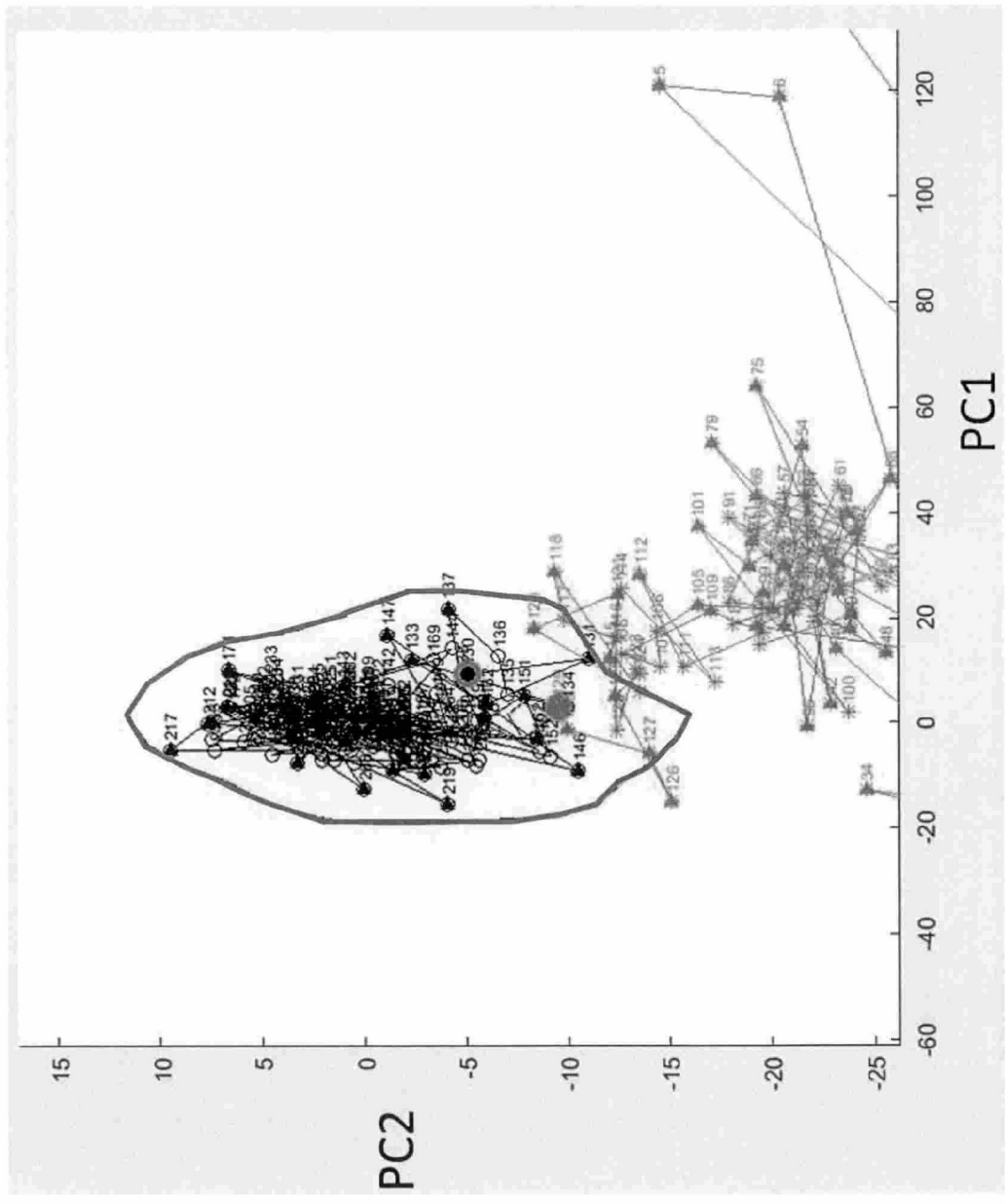


圖7B

800

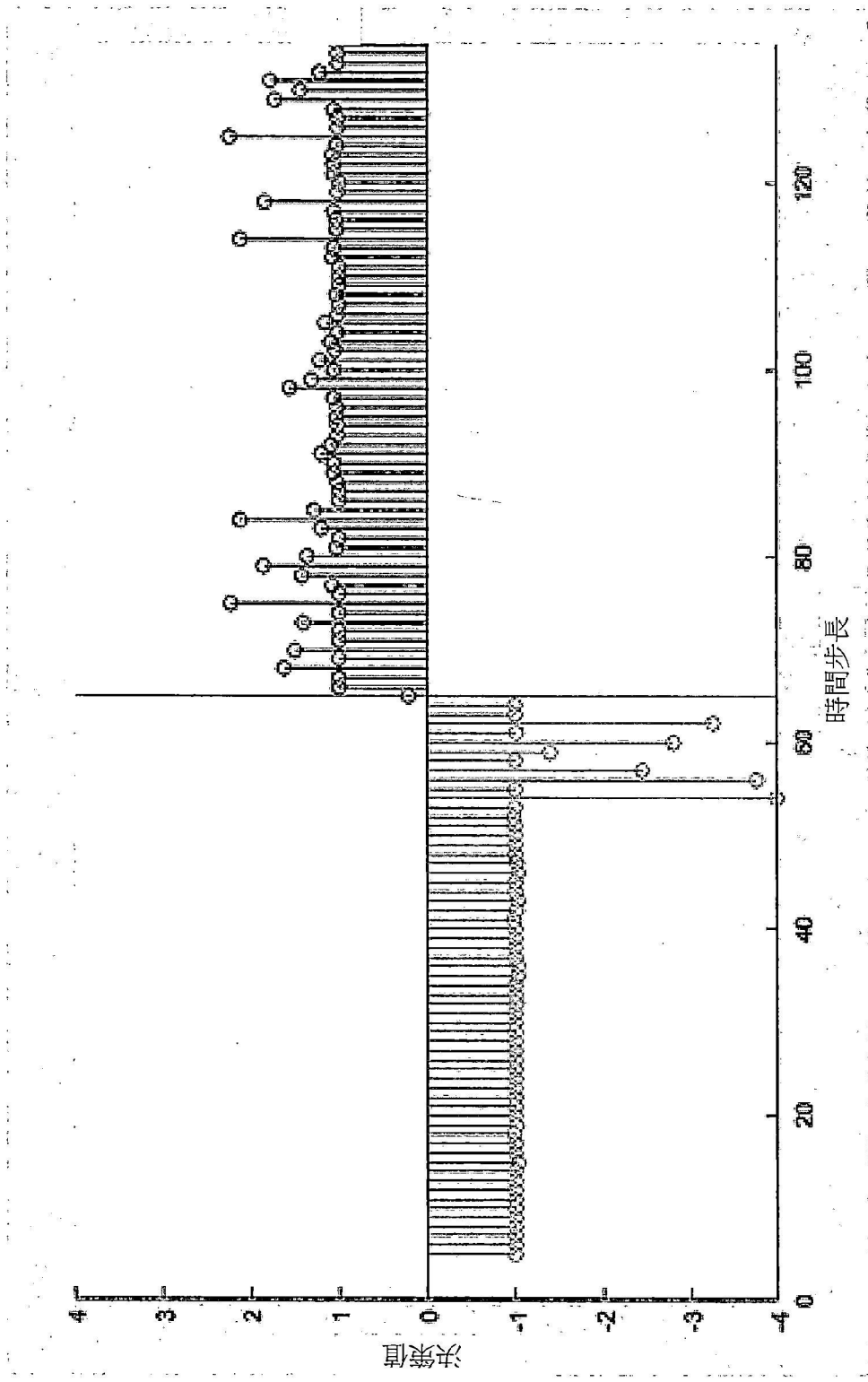


圖8