(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2022年6月23日(23.06.2022)

WIPO | PCT

(10) 国際公開番号
WO 2022/131336 A1

(51) 国際特許分類:
G01N 23/223 (2006.01) *G01N 21/65* (2006.01)
G01N 21/64 (2006.01)

(21) 国際出願番号： PCT/JP2021/046543

(22) 国際出願日： 2021年12月16日(16.12.2021)

(25) 国際出願の言語： 日本語

(26) 国際公開の言語： 日本語

(30) 優先権データ：
特願 2020-209487 2020年12月17日(17.12.2020) JP

(71) 出願人: 株式会社堀場製作所(**HORIBA, LTD.**) [JP/JP]; 〒6018510 京都府京都市南区吉祥院宮の東町２番地 Kyoto (JP).

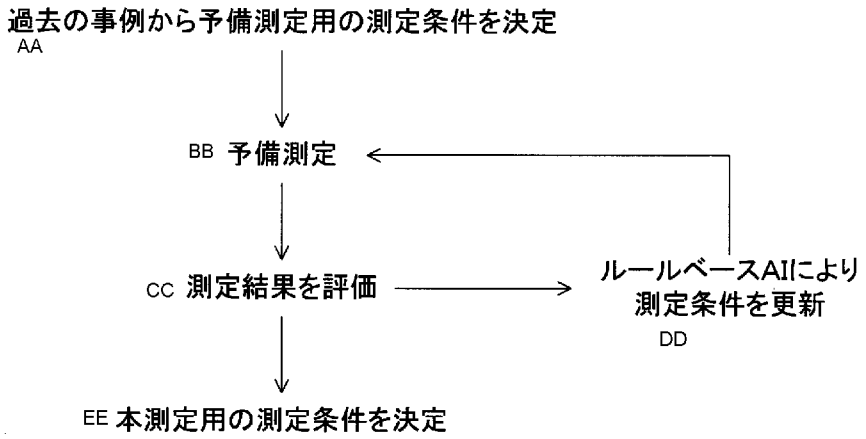
(72) 発明者: 佐藤 優穂(**SATO, Yusui**); 〒6018510 京都府京都市南区吉祥院宮の東町２番地 株式会社堀場製作所内 Kyoto (JP). 安藤 嘉健(**ANDO, Yoshitake**); 〒6018510 京都府京都市南区吉祥院宮の東町２番地 株式会社堀場製作所内 Kyoto (JP). 森 哲也(**MORI, Tetsuya**); 〒6018510 京都府京都市南区吉祥院宮の東町２番地 株式会社堀場製作所内 Kyoto (JP).

(74) 代理人: 河野 英仁，外(**KOHNO, Hideto** et al.); 〒5400035 大阪府大阪市中央区釣鐘町二丁目４番３号 河野特許事務所 Osaka (JP).

(81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ,

(54) **Title:** MEASUREMENT CONDITION SEARCH METHOD, COMPUTER PROGRAM, MEASUREMENT CONDITION SEARCH DEVICE, AND MEASURING SYSTEM

(54) 発明の名称： 測定条件探索方法、コンピュータプログラム、測定条件探索装置、及び測定システム



AA Determine measurement condition for preliminary measurement from past cases
BB Preliminary measurement
CC Evaluate measurement result
DD Update measurement condition by means of rule-based AI
EE Determine measurement condition for main measurement

(57) **Abstract:** Provided are a measurement condition search method, a computer program, a measurement condition search device, and a measuring system which enable appropriate measurement conditions to be searched for easily. This method for searching for a measurement condition when carrying out a specific measurement relating to a specimen involves: extracting from a database in which specimen information representing the content of specimens for which a specific measurement has been carried out in the past is stored in association with the past measurement conditions, a past measurement condition associated with specimen information representing content similar to the content of a specimen

WO 2022/131336 A1

[続葉有]

EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, IT, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.

(84) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

— 国際調査報告 (条約第21条(3))

being measured; determining a measurement condition for preliminary measurement, on the basis of the extracted past measurement condition; executing preliminary measurement in accordance with the determined measurement condition for preliminary measurement; evaluating the result of the preliminary measurement; updating the measurement condition for preliminary measurement in accordance with the evaluation result and the preliminary measurement result; and repeating the execution of the preliminary measurement, the evaluation and the updating.

(57) 要約:適切な測定条件を容易に探索することが可能になる測定条件探索方法、コンピュータプログラム、測定条件探索装置、及び測定システムを提供する。 試料に関する特定の測定を行う際の測定条件を探索する方法において、過去に前記特定の測定が行われた試料の内容を表す試料情報と、過去の測定条件とを関連付けて記録したデータベースから、測定対象の試料の内容と類似する内容を表す試料情報に関連付けられた過去の測定条件を抽出し、抽出した過去の測定条件に基づいて、予備測定用の測定条件を決定し、決定した予備測定用の測定条件に従って予備測定を実行し、予備測定の結果の評価を行い、前記評価の結果及び予備測定の結果に応じて、予備測定用の測定条件の更新を行い、予備測定の実行、前記評価及び前記更新を繰り返す。

明　細　書

発明の名称 ：

測定条件探索方法、コンピュータプログラム、測定条件探索装置、及び測定システム

技術分野

[0001] 本発明は、試料に関する特定の測定を行う際の測定条件を探索する測定条件探索方法、コンピュータプログラム、測定条件探索装置、及び測定システムに関する。

背景技術

[0002] 試料に関する物理量を測定し、測定結果に基づいて試料を分析することが行われている。例えば、蛍光Ｘ線、ラマン散乱光、蛍光又はカソードルミネッセンス等、試料から発せられる光又は放射線を測定し、スペクトルを取得し、スペクトルを含む測定結果に基づいて、組成分析等の試料に関する分析が行われる。また、生体試料を対象とした分析も行われている。特許文献１には、ラマン散乱光の測定結果に基づいて生体試料の分析を行う技術が開示されている。

先行技術文献

特許文献

[0003] 特許文献1：特開２０１４－２２４７２４号公報

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0004] 試料の分析を適切に行うためには、測定を行う際の測定条件を適切に調整する必要がある。例えば、ラマン散乱光を測定する際に、試料へ照射するレーザ光の強度、照射時間、又はラマン散乱光の強度の積算回数等、測定条件を適切に調整する必要がある。測定条件が適切でない場合は、Ｓ／Ｎ（シグナル／ノイズ）比が小さい測定結果等、不適切な測定結果が得られ、分析の

精度が低下する。そこで、分析を行う前に、予備測定を行うことにより適切な測定条件を探索する必要がある。通常、測定条件を変更しながら予備測定を繰り返すことにより、十分な精度の分析が可能になるような適切な測定条件が探索される。しかし、測定装置を使用する使用者の習熟度によって、適切な測定条件を探索する効率は異なる。使用者が高度に習熟するには時間を要し、高度に習熟した使用者の数は少ない。このため、効率的な試料の分析が困難である。

[0005] 本発明は、斯かる事情に鑑みてなされたものであって、その目的とするところは、適切な測定条件を容易に探索することが可能になる測定条件探索方法、コンピュータプログラム、測定条件探索装置、及び測定システムを提供することにある。

課題を解決するための手段

[0006] 本発明に係る測定条件探索方法は、試料に関する特定の測定を行う際の測定条件を探索する方法において、過去に前記特定の測定が行われた試料の内容を表す試料情報と、過去の測定条件とを関連付けて記録したデータベースから、測定対象の試料の内容と類似する内容を表す試料情報に関連付けられた過去の測定条件を抽出し、抽出した過去の測定条件に基づいて、予備測定用の測定条件を決定し、決定した予備測定用の測定条件に従って予備測定を実行し、予備測定の結果の評価を行い、前記評価の結果及び予備測定の結果に応じて、予備測定用の測定条件の更新を行い、予備測定の実行、前記評価及び前記更新を繰り返すことを特徴とする。

[0007] 本発明の一形態においては、試料に関する特定の測定を行う際に、データベースに記録された過去の測定条件に基づいて予備測定用の測定条件を決定し、予備測定の実行、予備測定の結果の評価、及び予備測定用の測定条件の更新を繰り返すことにより、測定条件を探索する。最終的に、予備測定の結果の評価が良好になる測定条件が得られ、適切な本測定用の測定条件が得られる。

[0008] 本発明に係る測定条件探索方法は、予備測定の結果に含まれる評価対象が

所定の基準を満たしているか否かを判定することにより、前記評価を行い、前記評価対象が前記所定の基準を満たしていない場合に、前記更新を行い、

前記評価対象が前記所定の基準を満たしている場合に、予備測定用の測定条件を、本測定用の測定条件に決定することを特徴とする。

[0009] 本発明の一形態においては、予備測定の結果に含まれる評価対象が所定の基準を満たしていない場合に、予備測定用の測定条件を更新し、評価対象が所定の基準を満たしている場合に、予備測定用の測定条件を本測定用の測定条件に決定する。所定の基準は、十分な精度で試料の分析が可能になるように予め定められており、適切な測定条件が探索される。

[0010] 本発明に係る測定条件探索方法は、決定した本測定用の測定条件に従って、本測定を行い、測定対象の試料の内容を表す試料情報と、本測定用の測定条件と、本測定の結果とを関連付けて、前記データベースに記録することを特徴とする。

[0011] 本発明の一形態においては、得られた本測定用の測定条件に従って、本測定を行い、本測定用の測定条件と本測定の結果とをデータベースに記録する。予備測定用の測定条件を決定する際に参照するデータベースに測定条件及び測定結果が蓄積され、データベースを参照して予備測定用の測定条件を決定する際に、より適切に測定条件が得られやすくなる。

[0012] 本発明に係る測定条件探索方法では、前記特定の測定は、試料へ光又は放射線を照射し、前記試料から発生する光又は放射線のスペクトルを取得することであり、測定条件は、前記試料へ照射する光若しくは放射線の強度、又は前記試料へ光若しくは放射線を照射する時間を含み、前記評価対象は、取得したスペクトルに含まれる信号強度、前記スペクトルのＳ／Ｎ比、又は前記スペクトルに含まれるピークの分解能を含むことを特徴とする。

[0013] 本発明の一形態においては、特定の測定は、ラマン散乱光の測定等、試料から発生する光又は放射線のスペクトルを取得するための測定である。測定条件は、試料へ照射する光若しくは放射線の強度、又は試料へ光若しくは放射線を照射する時間を含む。これらの条件は、試料の分析の精度に関わる条

件である。評価対象は、スペクトルに含まれる信号強度、Ｓ／Ｎ比、又はスペクトルに含まれるピークの分解能を含む。

[0014] 本発明に係る測定条件探索方法では、前記データベースは、過去の測定条件に関連付けて、過去の測定結果を記録しており、過去の測定結果に応じて、抽出した過去の測定条件の中から測定条件を選択し、選択した測定条件を予備測定用の測定条件に決定することを特徴とする。

[0015] 本発明の一形態においては、データベースから抽出した過去の測定条件に関連付けられた測定結果に応じて、抽出した過去の測定条件の中から、予備測定用の測定条件を選択する。過去に良好な測定結果が得られたときの測定条件を、予備測定用の測定条件とすることができる。

[0016] 本発明に係る測定条件探索方法では、前記データベースは、過去の測定条件に関連付けて、過去の測定結果を記録しており、前記過去の測定結果及び前記過去の測定条件に基づくベイズ最適化を行うことにより、予備測定用の測定条件を決定し、前記過去の測定結果及び前記過去の測定条件に予備測定の結果及び予備測定用の測定条件を加えたデータに基づくベイズ最適化を行うことにより、前記更新を行うことを特徴とする。

[0017] 本発明の一形態においては、過去の測定結果及び測定条件に基づいたベイズ最適化により予備測定用の測定条件を決定し、予備測定の結果及び予備測定用の測定条件を更に加えたデータに基づくベイズ最適化を行うことにより、予備測定用の測定条件を更新する。これにより、予備測定用の測定条件はより適切になるように更新される。

[0018] 本発明に係る測定条件探索方法では、予備測定の結果が特定の状態である場合に予備測定用の測定条件をどのように修正するのかを規定したルールを予め定めてあり、前記ルールに従って予備測定用の測定条件を修正することにより、前記更新を行うことを特徴とする。

[0019] 本発明の一形態においては、予備測定の結果に応じて予備測定用の測定条件を修正するためのルールに従って、予備測定用の測定条件を更新する。ルールは、測定結果をより良好にすべく測定条件が修正されるように、予め定

められており、予備測定用の測定条件は適切に更新される。

[0020] 本発明に係る測定条件探索方法は、測定対象の試料の内容を表す試料情報と、予備測定用の測定条件と、予備測定の結果とを関連付けて、前記データベースに記録することを特徴とする。

[0021] 本発明の一形態においては、予備測定用の測定条件と予備測定の結果とをデータベースに記録する。データベースに予備測定用の測定条件及び予備測定の測定結果もが蓄積され、参照し得る事例が多く蓄積される。データベースを参照して予備測定用の測定条件を決定する際に、多くの事例に基づいて、適切に測定条件が得られる。

[0022] 本発明に係るコンピュータプログラムは、過去に特定の測定が行われた試料の内容を表す試料情報と、過去の測定条件とを関連付けて記録したデータベースから、任意の試料の内容と類似する内容を表す試料情報に関連付けられた過去の測定条件を抽出し、抽出した過去の測定条件に基づいて、予備測定用の測定条件を決定し、決定した予備測定用の測定条件に従って実行された予備測定の結果の評価を行い、前記評価の結果及び予備測定の結果に応じて、予備測定用の測定条件の更新を行い、前記評価及び前記更新を繰り返す処理をコンピュータに実行させることを特徴とする。

[0023] 本発明に係る測定条件探索装置は、試料に関する特定の測定を行う際の測定条件を探索する装置において、過去に前記特定の測定が行われた試料の内容を表す試料情報と、過去の測定条件とを関連付けて記録したデータベースから、測定対象の試料の内容と類似する内容を表す試料情報に関連付けられた過去の測定条件を抽出し、抽出した過去の測定条件に基づいて、予備測定用の測定条件を決定し、決定した予備測定用の測定条件に従って実行された予備測定の結果の評価を行い、前記評価の結果及び予備測定の結果に応じて、予備測定用の測定条件の更新を行い、前記評価及び前記更新を繰り返す処理を実行することを特徴とする。

[0024] 本発明に係る測定システムは、試料に関する特定の測定を行うシステムであって、過去に前記特定の測定が行われた試料の内容を表す試料情報及び過

去の測定条件を関連付けて記録したデータベースと、前記特定の測定を行う際の測定条件を探索する測定条件探索装置と、前記特定の測定を実行する測定装置とを備え、前記測定条件探索装置は、前記データベースから、測定対象の試料の内容と類似する内容を表す試料情報に関連付けられた過去の測定条件を抽出し、抽出した過去の測定条件に基づいて、予備測定用の測定条件を決定し、決定した予備測定用の測定条件に従って前記測定装置が実行した予備測定の結果の評価を行い、前記評価の結果及び予備測定の結果に応じて、予備測定用の測定条件の更新を行い、前記評価及び前記更新を繰り返す処理を実行することを特徴とする。

[0025] 本発明の一形態においては、測定条件探索装置は、データベースに記録された過去の測定条件に基づいて予備測定用の測定条件を決定し、測定装置による予備測定の実行、予備測定の結果の評価、及び予備測定用の測定条件の更新を繰り返すことにより、測定条件を探索する。最終的に、予備測定の結果の評価が良好になる測定条件が得られ、適切な本測定用の測定条件が得られる。測定装置は、得られた測定条件に従って、適切な本測定を実行することができる。

発明の効果

[0026] 本発明にあっては、測定装置の使用者が習熟度の低い初級者であっても、測定条件探索方法により、適切な測定条件を得ることができる。このため、効率的な試料の分析が可能となる等、本発明は優れた効果を奏する。

図面の簡単な説明

[0027] [図1]本実施の形態に係る測定条件探索方法の概要を示す概念図である。

[図2]測定システムの構成を示し、測定装置の構成例を示すブロック図である。

[図3]測定条件探索装置及び記憶装置の内部の機能構成例を示すブロック図である。

[図4]測定条件データベースの内容例を示す図表である。

[図5]知識ベースの内容例を示す概念図である。

[図6]測定システムが実行する処理の手順を示すフローチャートである。

発明を実施するための形態

[0028] 以下本発明をその実施の形態を示す図面に基づき具体的に説明する。

図１は、本実施の形態に係る測定条件探索方法の概要を示す概念図である。まず、試料に関する特定の測定を行う際に、類似する試料に対して測定を行った過去の事例に基づいて、予備測定用の測定条件を決定する。ここで、予備測定は、測定条件を探索するために行われる予備的な測定である。また、測定条件が決定された後に、決定した測定条件に従って行われる測定を、本測定と言う。次に、決定した測定条件に従って、予備測定を実行する。次に、予備測定による測定結果を評価する。測定結果が良好である場合は、本測定用の測定条件を決定する。測定結果が良好ではない場合は、ルールベースＡＩ（artificial intelligence ）により、測定条件を更新し、更新した測定条件に従って、予備測定を実行する。予備測定、測定結果の評価、及び測定条件の更新は、測定結果が良好であると評価されるまで、繰り返される。

[0029] 図２は、測定システム１００の構成を示し、測定装置３の構成例を示すブロック図である。測定システム１００は、測定条件探索方法を実行する。測定システム１００は、測定条件探索装置１と、記憶装置２と、測定装置３とを備えている。測定装置３は、試料に関する特定の物理量を測定するために試料に関する特定の測定を実行する装置である。例えば、測定装置３は、蛍光Ｘ線、ラマン散乱光、蛍光又はカソードルミネッセンス等、試料から発せられる光又は放射線を測定し、スペクトルを取得する装置である。図２には、測定装置３がラマン散乱光測定装置である例を示している。

[0030] 測定条件探索装置１は、測定装置３で測定を行う際の測定条件を探索する装置である。記憶装置２は、過去に測定が行われた際の測定条件である過去の測定条件を記録する測定条件データベースを記憶する。測定条件探索装置１、記憶装置２及び測定装置３は、互いに接続されている。測定条件探索装置１、記憶装置２及び測定装置３は、ＬＡＮ（Local Area Network）又はイ

ンターネット等の通信ネットワークを介して互いに接続されていてもよい。

[0031] 本実施形態では、主に、測定装置３がラマン散乱光測定装置である例を示す。測定装置３は、試料４を保持する試料保持部３５と、レーザ光を照射する照射部３１と、マスク３４１と、ビームスプリッタ３４２と、レンズ３４３とを備えている。例えば、試料４は細胞等の生体試料である。試料保持部３５は、例えば、試料４が載置される試料台である。試料保持部３５は試料台以外の形態であってもよい。照射部３１はレーザ光源を含んでいる。マスク３４１はスリットを有する。照射部３１が照射するレーザ光は、マスク３４１のスリットを通過することによって細い光束に絞られ、ビームスプリッタ３４２で反射し、レンズ３４３を通り、試料４へ照射される。

[0032] 測定装置３は、更に、分光器３３と、光を検出する検出部３２と、制御部３６とを備えている。試料４中のレーザ光が照射された部分では、ラマン散乱光が発生する。発生したラマン散乱光は、レンズ３４３で集光され、ビームスプリッタ３４２を透過し、分光器３３へ入射する。図２中では、レーザ光及びラマン散乱光を実線矢印で示している。分光器３３は、入射されたラマン散乱光を分光する。検出部３２は、分光器３３が分光した夫々の波長の光を検出する。測定装置３は、レーザ光及びラマン散乱光の導光、集光及び分離のためにミラー、レンズ及びフィルタ等の多数の光学部品からなる光学系を備えている。図２では、マスク３４１、ビームスプリッタ３４２及びレンズ３４３以外の光学系を省略している。なお、測定装置３は、照射部３１からのレーザ光がビームスプリッタ３４２を透過し、ラマン散乱光がビームスプリッタ３４２で反射する構成であってもよい。光学系は、マスク３４１、ビームスプリッタ３４２又はレンズ３４３を含んでいなくてもよい。

[0033] 照射部３１、検出部３２及び分光器３３は、制御部３６に接続されている。制御部３６は、測定条件探索装置１に接続されている。制御部３６は、測定装置３の各部を制御するための演算を実行する演算部と、メモリとを含み、測定条件探索装置１とデータの送受信を行う通信部を含んでいる。

[0034] 制御部３６は、測定装置３の各部を制御する。照射部３１は、オンとオフ

とを制御部３６に制御される。分光器３３は、分光して検出部３２に検出させる光の波長を制御部３６に制御される。検出部３２は、夫々の波長の光の検出強度に応じた信号を制御部３６へ出力する。制御部３６は、検出部３２が出力した信号を入力され、分光器３３に分光させた光の波長と入力された信号が示す光の検出強度とに基づいてラマンスペクトルを生成する。

[0035] 制御部３６は、ラマン散乱光を測定する際の測定条件を調整することができる。測定条件は、例えば、試料４へ照射されるレーザ光の強度、照射時間、ラマン散乱光の強度の積算回数、レーザ光が通過するスリットの幅、レーザ光の波長、又は焦点距離を含む。例えば、制御部３６は、照射部３１が含むレーザ光源の出力を変更することにより、レーザ光の強度を調整する。例えば、照射部３１は、レーザ光を減衰させるフィルタを含んでおり、制御部３６は、フィルタを変更することにより、レーザ光の強度を調整する。例えば、制御部３６は、分光器３３に分光させる光の波長を変更しながら検出部３２が検出した各波長のラマン散乱光の強度を計測し、各波長について検出を繰り返し、計測したラマン散乱光の強度を積算する回数を調整する。例えば、マスク３４１は幅の異なる複数のスリットを有しており、制御部３６は、レーザ光が通過するスリットを変更することにより、スリットの幅を調整する。例えば、照射部３１は波長の異なる複数のレーザ光源を含んでおり、制御部３６は、使用するレーザ光源を変更することにより、レーザ光の波長を調整する。例えば、測定装置３は焦点距離の異なる複数のレンズ３４３を備えており、制御部３６は、使用するレンズ３４３を変更することにより、焦点距離を調整する。測定装置３は、焦点距離を調整する際に、光学系を構成する各部品の位置の変更、又は試料保持部３５の位置の変更を行う形態であってもよい。

[0036] 図３は、測定条件探索装置１及び記憶装置２の内部の機能構成例を示すブロック図である。記憶装置２は、サーバ装置等のコンピュータを用いて構成されている。記憶装置２は、演算部２１と、メモリ２２と、記憶部２３と、通信部２４とを備えている。演算部２１は、例えばＣＰＵ（Central Process

ing Unit ）、ＧＰＵ（Graphics Processing Unit）、又はマルチコアＣＰＵを用いて構成されている。また、演算部２１は、量子コンピュータを用いて構成されていてもよい。メモリ２２は、演算に伴って発生する一時的なデータを記憶する。メモリ２２は、例えばＲＡＭ（Random Access Memory）である。記憶部２３は、不揮発性であり、例えばハードディスクである。通信部２４は、測定条件探索装置１と接続されており、測定条件探索装置１との間でデータの送受信を行う。記憶部２３は、コンピュータプログラム２３１を記憶している。演算部２１は、コンピュータプログラム２３１に従って、記憶装置２に必要な処理を実行する。記憶装置２は、複数のコンピュータを用いて構成されていてもよい。

[0037] 記憶部２３は、測定条件データベース２３２を記憶している。図４は、測定条件データベース２３２の内容例を示す図表である。測定条件データベース２３２は、過去に行われた特定の測定に関する過去の測定条件を記録するデータベースである。測定条件データベース２３２は、過去に特定の測定が行われた試料の内容を表す試料情報を記録している。試料情報は、試料名と、測定の前に試料に対して行った前処理方法とを含んでいる。例えば、試料情報に含まれる試料名はＨｅＬａ細胞であり、前処理方法は、試料を生理食塩水又は緩衝液に分散させて懸濁液の状態にし、試料を室温で保管したことである。

[0038] 測定条件データベース２３２は、試料情報に関連付けて、測定条件を記録している。測定条件は、測定装置３で測定を行う際の各種の設定である。測定条件には複数種類の条件が含まれている。記録されている測定条件は、試料情報で表される試料に対して予備測定又は本測定を行った際の測定条件である。予備測定は、測定条件を探索するために行われる予備的な測定である。本測定は、測定条件が決定された後に、決定した測定条件に従って行われる測定である。図４に示す例では、特定の測定がラマン散乱光の測定であり、測定条件として、試料へ照射されるレーザ光の強度、照射時間、及びラマン散乱光の強度の積算回数等が記録されている。

[0039] 測定条件データベース２３２は、試料情報及び測定条件に関連付けて、測定結果を記録している。測定結果は、予備測定又は本測定の結果である。図４に示す例では、測定結果として、複数の測定結果のスコアが記録されている。スコアは、測定結果を評価した値である。図４に示す例では、測定結果のスコアとして、ラマン散乱光のスペクトルに含まれる信号強度、Ｓ／Ｎ比、及び分解能等に関するスコアが記録されている。夫々のスコアは、測定結果が良好であるほど増加し、１．０が最も良好な状態を示す。

[0040] 図３に示すように、測定条件探索装置１は、サーバ装置等のコンピュータを用いて構成されている。測定条件探索装置１は、演算部１１と、メモリ１２と、ドライブ部１３と、記憶部１４と、操作部１５と、表示部１６と、通信部１７とを備えている。演算部１１は、例えばＣＰＵ、ＧＰＵ、又はマルチコアＣＰＵを用いて構成されている。また、演算部１１は、量子コンピュータを用いて構成されていてもよい。メモリ１２は、演算に伴って発生する一時的なデータを記憶する。メモリ１２は、例えばＲＡＭである。ドライブ部１３は、光ディスク等の記録媒体１０から情報を読み取る。記憶部１４は、不揮発性であり、例えばハードディスクである。操作部１５は、使用者からの操作を受け付けることにより、テキスト等の情報を受け付ける。操作部１５は、例えば、キーボード又はポインティングデバイスである。表示部１６は、画像を表示する。表示部１６は、例えば液晶ディスプレイ又はＥＬディスプレイ（Electroluminescent Display）である。通信部１７は、記憶装置２及び測定装置３と接続されている。通信部１７は、記憶装置２及び測定装置３との間でデータの送受信を行う。

[0041] 演算部１１は、記録媒体１０に記録されたコンピュータプログラム１４１をドライブ部１３に読み取らせ、読み取ったコンピュータプログラム１４１を記憶部１４に記憶させる。演算部１１は、コンピュータプログラム１４１に従って、測定条件探索装置１に必要な処理を実行する。なお、コンピュータプログラム１４１は、測定条件探索装置１の外部からダウンロードされてもよい。この場合は、測定条件探索装置１はドライブ部１３を備えていなく

てもよい。測定条件探索装置１は、複数のコンピュータを用いて構成されていてもよい。例えば、測定条件探索装置１は、通信ネットワークを介して互いに接続された複数のコンピュータを用いて構成されていてもよい。或は、測定条件探索装置１及び記憶装置２は一体で構成されていてもよい。例えば、記憶部１４が測定条件データベース２３２を記憶しており、測定条件探索装置１が記憶装置２の機能を兼ねていてもよい。

[0042] 測定条件探索装置１は、予備測定用の測定条件を決定し、測定結果を評価し、ルールベースＡＩにより測定条件を更新するための処理を実行する。ルールベースＡＩは、例えばエキスパートシステムである。記憶部１４は、ルールベースＡＩの処理に利用される知識ベース１４２を記憶している。知識ベース１４２は、予備測定の結果に応じて予備測定用の測定条件をどのように更新するのかを規定した複数のｉｆ－ｔｈｅｎルールの組み合わせで構成されている。

[0043] 図５は、知識ベース１４２の内容例を示す概念図である。知識ベース１４２には、複数のｉｆ－ｔｈｅｎルールが含まれている。夫々のｉｆ－ｔｈｅｎルールは、判定条件を表すｉｆ部と、帰結を表すｔｈｅｎ部とからなる。ｉｆ部には、予備測定の結果が記録されている。ｉｆ部にはｔｈｅｎ部が関連付けられている。ｔｈｅｎ部には、測定条件の更新の内容が記録されている。ｉｆ部に記録された予備測定の結果が得られた場合に、当該ｉｆ部に関連付けられたｔｈｅｎ部に記録された測定条件の更新が行われるように、ｉｆ－ｔｈｅｎルールが定められている。例えば、図４に示す例では、信号強度が低いという予備測定の結果が得られた場合に、レーザ光の強度を強くし、レーザ光の照射時間を長くし、マスク３４１のスリット幅を広くし、レーザ光の波長を変更するというルールが定められている。

[0044] 複数のｉｆ－ｔｈｅｎルールには、判定の順番が定められている。一つのｉｆ部に記録された予備測定の結果が得られたか否かの判定が行われ、ｉｆ部に記録された予備測定の結果が得られた場合に、ｔｈｅｎ部に記録された測定条件の更新が行われる。ｉｆ部に記録された予備測定の結果が得られな

い場合には、次のｉｆ部に記録された予備測定の結果が得られたか否かの判定が行われる。例えば、図５に示す上から順にｉｆ－ｔｈｅｎルールが利用される。知識ベース１４２に含まれる複数のｉｆ－ｔｈｅｎルールは、予備測定の結果に応じて、測定結果をより良好にすべく測定条件が修正されるように、予め定められている。知識ベース１４２の内容は修正可能であってもよい。例えば、操作部１５を使用者が操作することにより、知識ベース１４２の内容を修正する指示が入力され、演算部１１は、入力された指示に従って、知識ベース１４２の内容を修正してもよい。

[0045] 試料４に関してラマン散乱光の測定等の特定の測定を測定装置３で行う際に、測定システム１００は、測定条件を探索するための処理を実行する。図６は、測定システム１００が実行する処理の手順を示すフローチャートである。以下、ステップをＳと略す。測定条件探索装置１の演算部１１は、コンピュータプログラム１４１に従って以下の処理を実行する。測定条件探索装置１は、まず、測定対象である試料４の内容に基づいて、測定条件データベース２３２から過去の測定条件を抽出する（Ｓ１）。

[0046] Ｓ１では、操作部１５を使用者が操作することにより、試料４の内容を表す情報が測定条件探索装置１へ入力される。例えば、試料４の内容を表す情報には、試料名と前処理方法とが含まれる。演算部１１は、入力された情報を通信部１７から記憶装置２へ送信する。記憶装置２は、測定条件探索装置１から送信された情報を通信部２４で受信し、演算部２１は、記憶部２３に記憶している測定条件データベース２３２から、受信した情報が表す試料４の内容と類似する内容を表す試料情報を検索する。例えば、演算部２１は、試料４の内容を表す情報と試料名及び前処理方法が一致する試料情報を検索する。演算部２１は、試料名及び前処理方法の一部が一致する試料情報を検索してもよく、試料名が一致する試料情報を検索してもよく、試料名の一部が一致する試料情報を検索してもよい。例えば、演算部２１は、試料情報に含まれる要素を数値で表し、試料情報に応じた多次元座標点を生成し、試料４の内容を表す情報に応じた多次元座標点との距離が所定範囲に含まれる多

次元座標点に対応する試料情報を検索してもよい。

[0047] 演算部２１は、検索した試料情報と、試料情報に関連付けられた過去の測定条件及び測定結果を、測定条件データベース２３２から抽出し、通信部２４から測定条件探索装置１へ送信する。測定条件探索装置１は、送信された試料情報、測定条件及び測定結果を通信部１７で受信する。

[0048] なお、測定条件探索装置１は、測定条件データベース２３２に記録された測定条件を直接に検索する処理を行ってもよい。又は、測定条件探索装置１は、試料４の画像に基づいて測定条件を抽出する処理を行ってもよい。例えば、試料情報の一部として試料の画像が測定条件データベース２３２に記録されていてもよい。試料４の画像が測定条件探索装置１へ入力され、測定条件探索装置１は、試料４の画像に類似した画像に関連付けられた測定条件を測定条件データベース２３２から抽出してもよい。

[0049] 演算部１１は、次に、抽出した過去の測定条件に基づいて、予備測定用の測定条件を決定する（Ｓ２）。測定条件には、レーザ光の強度及び照射時間等の複数種類の条件が含まれている。Ｓ２では、抽出した過去の測定条件が単一である場合に、演算部１１は、抽出した過去の測定条件を、予備測定用の測定条件に決定する。過去の測定条件が複数ある場合は、演算部１１は、測定結果が最も良好な過去の測定条件を選択し、選択した測定条件を予備測定用の測定条件に決定する。例えば、演算部１１は、測定結果に含まれる複数の測定結果のスコアの合計が最大になる測定条件を、予備測定用の測定条件に決定する。演算部１１は、複数の測定結果のスコアに含まれる特定のスコアが最大である測定条件を、予備測定用の測定条件に決定してもよい。過去に良好な測定結果が得られたときの測定条件を、予備測定用の測定条件とすることができる。Ｓ２では、演算部１１は、予備測定用の測定条件として、複数の測定条件を特定してもよい。

[0050] 測定装置３は、決定された予備測定用の測定条件に従って、予備測定を実行する（Ｓ３）。Ｓ３では、演算部１１は、決定した予備測定用の測定条件を表す情報を、通信部１７から測定装置３へ送信する。測定装置３の制御部

３６は、測定条件探索装置１から送信された情報を受信し、受信した情報が表す測定条件に従って、測定装置３の各部を制御することにより、予備測定を実行する。本実施形態の例では、測定装置３は、試料４を対象としたラマン散乱光の測定を行う。

[0051] 測定装置３は、測定条件を調整した上で、ラマン散乱光の測定を行う。例えば、制御部３６は、測定条件に含まれるレーザ光の強度に一致するように、照射部３１が照射するレーザ光の強度を調整する。例えば、制御部３６は、測定条件に含まれる照射時間に一致するように、照射部３１が照射するレーザ光の照射時間を調整する。例えば、制御部３６は、測定条件に含まれる積算回数に一致するように、検出部３２が検出したラマン散乱光の強度を積算する回数を調整する。例えば、制御部３６は、測定条件に含まれるスリット幅に一致するように、マスク３４１のレーザ光が通過するスリットの幅を調整する。例えば、制御部３６は、測定条件に含まれるレーザ光の波長に一致するように、照射部３１が照射するレーザ光の波長を調整する。例えば、制御部３６は、測定条件に含まれる焦点距離に一致するように、試料４へレーザ光を照射する際の焦点距離を調整する。このようにして、測定装置３は、決定した予備測定用の測定条件に従って、予備測定を実行する。

[0052] Ｓ３では、制御部３６は、予備測定の結果を取得する。例えば、制御部３６は、ラマン散乱光の測定を行った結果として、ラマンスペクトルを取得する。制御部３６は、ラマンスペクトルを表すデータ等の、予備測定の結果を表したデータを測定条件探索装置１へ送信し、測定条件探索装置１は、データを通信部１７で受信し、記憶部１４に記憶する。このようにして、測定条件探索装置１は、予備測定の結果を取得する。Ｓ２で複数の測定条件が特定されている場合は、Ｓ３では、複数の測定条件に従った複数の予備測定が実行され、複数の測定結果が取得される。

[0053] 測定条件探索装置１は、次に、予備測定の結果を評価する（Ｓ４）。Ｓ４では、演算部１１は、予備測定の結果に含まれる評価対象が所定の基準を満たしているか否かを判定する。所定の基準が満たされた場合に、予備測定の

結果が、十分な精度での試料４の分析が可能になるような適切な測定結果となるように、所定の基準は予め定められている。

[0054] 例えば、評価対象は、ラマンスペクトルに含まれるピークの信号強度であり、所定の基準は、信号強度が所定の閾値を超過していることである。例えば、評価対象は、ラマンスペクトルのＳ／Ｎ比であり、所定の基準は、Ｓ／Ｎ比が所定の閾値を超過していることである。例えば、評価対象は、ラマンスペクトルに含まれるピークの分解能である。ここで、分解能はピークの半値幅を意味する。例えば、所定の基準は、分解能が所定の閾値以下であることである。演算部１１は、ラマンスペクトルから、ピークの信号強度、Ｓ／Ｎ比又は分解能を特定し、所定の閾値と比較することにより、予備測定の結果を評価する。閾値は、予め記憶部１４に記憶されているか、又はコンピュータプログラム１４１に含まれている。Ｓ３で、複数の予備測定が実行された場合は、Ｓ４では、測定条件探索装置１は、複数の予備測定の結果を評価する。

[0055] Ｓ４では、演算部１１は、評価対象のスコアを計算してもよい。例えば、演算部１１は、ピークの信号強度を所定の閾値で除することにより、スコアを計算する。例えば、演算部１１は、Ｓ／Ｎ比を所定の閾値で除することにより、スコアを計算する。例えば、演算部１１は、所定の閾値を分解能で除することにより、スコアを計算する。演算部１１は、計算したスコアが１．０を超えた場合にスコアの値を１．０に決定してもよい。例えば、演算部１１は、評価対象のスコアが所定値以上である場合に、評価対象が所定の基準を満たしていると判定してもよい。

[0056] 測定条件探索装置１は、次に、予備測定を終了するか否かを判定する（Ｓ５）。Ｓ５では、演算部１１は、Ｓ４で評価対象が所定の基準を満たしていた場合に、予備測定を終了すると判定する。演算部１１は、Ｓ４で複数の評価対象の評価を行い、Ｓ５では、複数の評価対象の評価に応じて判定を行ってもよい。例えば、所定数以上の評価対象が夫々に所定の基準を満たしていた場合に、演算部１１は、予備測定を終了すると判定してもよい。例えば、

複数の評価対象のスコアの合計が所定数以上である場合に、演算部１１は、予備測定を終了すると判定してもよい。Ｓ４で複数の予備測定の結果を評価した場合は、測定条件探索装置１は、複数の予備測定の結果を評価する。

[0057] 予備測定を終了すると判定しない場合（Ｓ５：ＮＯ）、測定条件探索装置１は、予備測定用の測定条件を更新する（Ｓ６）。Ｓ６では、演算部１１は、ルールベースＡＩの処理により、予備測定の結果に応じて測定条件を更新する。より具体的には、演算部１１は、予備測定の結果に応じて、知識ベース１４２に含まれるｉｆ－ｔｈｅｎルールに従って測定条件を更新する。例えば、演算部１１は、図５に示す如き知識ベース１４２を参照し、予備測定の結果において信号強度が低いか否かを判定する。信号強度が低い場合に、演算部１１は、レーザ光の強度を強くし、照射時間を長くし、スリット幅を広くし、レーザ光の波長を変更するように、予備測定用の測定条件を更新する。信号強度が低くない場合は、演算部１１は、Ｓ／Ｎ比が低いか否かを判定する。Ｓ／Ｎ比が低い場合は、演算部１１は、積算回数を多くし、スリット幅を広くするように、予備測定用の測定条件を更新する。このようにして、測定条件探索装置１は、予備測定の結果に応じて予備測定用の測定条件を更新する。測定結果がより良好になるように、予備測定用の測定条件は適切に更新される。

[0058] Ｓ６が終了した後、測定条件探索装置１は、処理をＳ３へ戻す。Ｓ３～Ｓ６の処理により、測定条件探索装置１は、予備測定の実行、測定結果の評価及び測定条件の更新を繰り返す。例えば、演算部１１は、予備測定の結果に含まれる評価対象が所定の基準を満たすまで、Ｓ３～Ｓ６の処理を繰り返す。なお、Ｓ５では、演算部１１は、Ｓ３～Ｓ６の処理を繰り返した回数が所定の回数に達した場合に、予備測定を終了すると判定してもよい。演算部１１は、Ｓ３～Ｓ６の処理を繰り返した時間の長さが所定値に達した場合に、予備測定を終了すると判定してもよい。

[0059] 予備測定を終了すると判定した場合（Ｓ５：ＹＥＳ）、測定条件探索装置１は、本測定用の測定条件を決定する（Ｓ７）。Ｓ７では、演算部１１は、

評価対象が所定の基準を満たしている測定結果が得られた時点での予備測定用の測定条件を、本測定用の測定条件に決定する。Ｓ３～Ｓ６の処理を繰り返した回数又は時間の長さに応じて予備測定を終了した場合は、演算部１１は、最後の予備測定用の測定条件、又は評価対象が最も所定の基準に近づいた測定結果が得られた時点での予備測定用の測定条件を、本測定用の測定条件に決定してもよい。

[0060] 測定装置３は、決定された本測定用の測定条件に従って、本測定を実行する（Ｓ８）。Ｓ８では、演算部１１は、決定した本測定用の測定条件を表す情報を、通信部１７から測定装置３へ送信する。測定装置３の制御部３６は、測定条件探索装置１から送信された情報を受信し、受信した情報が表す測定条件に従って、測定装置３の各部を制御することにより、本測定を実行する。本実施形態の例では、測定装置３は、試料４を対象としたラマン散乱光の測定を行う。

[0061] 制御部３６は、ラマンスペクトル等、本測定の結果を取得する。制御部３６は、ラマンスペクトル等の本測定の結果を表したデータを測定条件探索装置１へ送信し、測定条件探索装置１は、データを通信部１７で受信し、記憶部１４に記憶する。このようにして、測定条件探索装置１は、本測定の結果を取得する。

[0062] 測定条件探索装置１は、次に、測定条件及び測定結果を測定条件データベース２３２に記録する（Ｓ９）。測定条件探索装置１は、予備測定用の測定条件及び予備測定の結果と、本測定用の測定条件及び本測定の結果とを測定条件データベース２３２に記録する。Ｓ９では、演算部１１は、試料４の内容、予備測定用の測定条件及び予備測定の結果、並びに本測定用の測定条件及び本測定の結果を表す情報を、通信部１７から記憶装置２へ送信する。試料４の内容を表す情報は、操作部１５を使用者が操作することにより測定条件探索装置１へ入力されてもよい。予備測定又は本測定の結果は、測定結果のスコアであってもよい。

[0063] 記憶装置２は、測定条件探索装置１から送信された情報を通信部２４で受

信する。演算部２１は、記憶部２３に記憶している測定条件データベース２３２に、試料４の内容を表す試料情報と、予備測定用の測定条件と、予備測定の結果とを、互いに関連付けて記録する。また、演算部２１は、測定条件データベース２３２に、試料４の内容を表す試料情報と、本測定用の測定条件と、本測定の結果とを、互いに関連付けて記録する。なお、測定システム１００は、測定条件データベース２３２に、予備測定用の測定条件及び予備測定の結果を記録せずに、本測定用の測定条件及び本測定の結果を記録してもよい。

[0064] Ｓ９が終了した後、測定システム１００は、測定条件を探索するための処理を終了する。測定条件探索装置１は、Ｓ１～Ｓ９の処理が終了した後、本測定の結果に基づいて、試料４の分析を行ってもよい。例えば、演算部１１は、表示部１６にラマンスペクトルを表示してもよい。

[0065] 以上詳述した如く、本実施形態においては、測定条件探索装置１は、過去の測定条件に基づいて予備測定用の測定条件を決定し、予備測定の実行、予備測定の結果の評価、及び予備測定用の測定条件の更新を繰り返すことにより、測定条件を探索する。最終的に、予備測定の結果の評価が良好になる測定条件が得られる。また、測定条件探索装置１は、予備測定の結果に含まれる評価対象が所定の基準を満たしていない場合に、予備測定用の測定条件を更新し、評価対象が所定の基準を満たしている場合に、予備測定用の測定条件を本測定用の測定条件に決定する。所定の基準は、十分な精度で試料の分析が可能になるように予め定められており、適切な測定条件が探索される。

[0066] 測定装置３の使用者が、習熟度の低い初級者であっても、測定条件探索方法により、適切な測定条件を得ることができる。即ち、使用者の習熟度に関わらず、適切な測定条件を効率的に探索することができ、測定装置３を効率的に利用することができる。このため、効率的な試料４の分析が可能となる。適切な測定条件を効率的に探索することができるので、試料４の分析に必要な時間が短縮される。また、測定システム１００は、ほぼ自動で適切な測定条件を探索することができ、使用者が測定装置３を操作することをできる

だけ避けながら、適切な測定条件を取得し、本測定を実行することができる。従って、使用者が試料４を扱う時間が短くなり、試料４が細胞等の生体試料であった場合に、生体試料を原因とした使用者への感染の危険が低下する。

[0067] また、本実施形態では、測定条件及び測定結果が測定条件データベース２３２に蓄積される。予備測定用の測定条件を決定する次の機会には、蓄積された過去の測定条件及び測定結果を利用して、より適切に測定条件が得られやすくなる。予備測定用の測定条件及び予備測定の結果をも測定条件データベース２３２に記録することにより、参照し得る事例が測定条件データベース２３２に多く蓄積される。測定条件データベース２３２を参照して予備測定用の測定条件を決定する際に、多くの事例に基づいて、適切に測定条件が得られる。

[0068] 前述のＳ１～Ｓ９の処理の説明では、ｉｆ－ｔｈｅｎルールを利用して予備測定用の測定条件を更新する例を示したが、測定条件探索装置１は、ベイズ最適化を利用することにより、予備測定用の測定条件を更新する形態であってもよい。

[0069] ベイズ最適化は、目的変数ｙとｎ次元の説明変数ｘｉ（ｉ＝１、２、…ｎ）との関係をｙ＝ｆ（ｘｉ）で表す関数ｆが未知である場合に、関数ｆがガウス過程（Gaussian Process）に従うと仮定し、目的変数ｙを最大化又は最小化する説明変数ｘｉを探索する方法である。例えば、目的変数ｙを、測定結果のスコアとする。複数の測定結果のスコアの中の一つを目的変数ｙとしてもよく、複数の測定結果のスコアの合計を目的変数ｙとしてもよい。例えば、測定条件に含まれる複数の条件の夫々を、説明変数ｘｉとする。

[0070] ベイズ最適化を利用する形態では、Ｓ１で抽出した過去の測定結果のスコア及び過去の測定条件を、目的変数及び説明変数に対応するデータセットとする。演算部１１は、Ｓ１で得られた複数の過去の測定条件及び測定結果から、複数のデータセットを生成する。このとき、演算部１１は、過去の測定結果のスコア又は過去の測定条件を正規化してもよい。

[0071] データセットは、ガウス分布に従うと仮定する。Ｓ２では、演算部１１は、所定のガウス分布の確率密度関数の式を利用して、複数のデータセットから、説明変数が夫々の値をとるときの目的変数の平均及び分散の推定値を計算する。また、演算部１１は、目的変数の平均及び分散の推定値に基づいて、所定の獲得関数（Acquisition function）を最大にする説明変数を計算することにより、目的変数（測定結果のスコア）が最大になる説明変数（測定条件）の推定値を計算する。演算部１１は、計算した推定値を、予備測定用の測定条件とする。過去の測定結果及び測定条件から、適切であると推定される予備測定用の測定条件が得られる。

[0072] Ｓ６では、演算部１１は、予備測定の結果から計算された測定結果のスコアと、Ｓ３で利用した予備測定用の測定条件とを、新たなデータセットとする。演算部１１は、新たなデータセットを加えた複数のデータセットから、説明変数が夫々の値をとるときの目的変数の平均及び分散の推定値を計算する。また、演算部１１は、計算した推定値に基づいて、獲得関数を最大にする説明変数を計算することにより、測定結果のスコアが最大になる測定条件の推定値を計算する。演算部１１は、計算した推定値を、予備測定用の測定条件とすることにより、予備測定用の測定条件を更新する。予備測定の結果及び予備測定用の測定条件に基づいて、より適切になるように予備測定用の測定条件が更新される。

[0073] このように、ベイズ最適化を利用する形態では、測定条件探索装置１は、Ｓ３～Ｓ６の処理により、予備測定の実行、測定結果の評価及び測定条件の更新を繰り返す。演算部１１は、予備測定の結果に含まれる評価対象が所定の基準を満たすまで、Ｓ３～Ｓ６の処理を繰り返し、評価対象が所定の基準を満たす場合に、Ｓ７～Ｓ９の処理を行う。

[0074] ベイズ最適化を利用する形態においても、測定条件探索装置１は、使用者の習熟度に関わらず、適切な測定条件を効率的に探索することができる。このため、効率的な試料４の分析が可能となる。また、予備測定用の測定条件及び予備測定の結果をも測定条件データベース２３２に記録することにより

、ベイズ最適化の処理で利用できる事例が多くなり、適切な測定条件の探索に必要な時間が短縮される。

[0075] 本実施形態では、主に、特定の測定がラマン散乱光の測定であり測定装置３がラマン散乱光測定装置である例を示したが、特定の測定はラマン散乱光以外の物理量の測定であってもよい。例えば、特定の測定は、蛍光Ｘ線、ラマン散乱光、蛍光又はカソードルミネッセンス等、試料から発せられる光又は放射線の測定であり、測定装置３は、このような光又は放射線を測定し、スペクトルを取得する装置である。この形態であっても、同様に、測定システム１００は、信号強度、Ｓ／Ｎ比又は分解能を含む測定結果に応じて、試料へ入射する光若しくは放射線の強度又は照射時間を含む測定条件を探索することができる。或は、特定の測定は、光又は放射線の測定以外の測定であってもよく、測定装置３は、スペクトルを取得する装置以外の装置であってもよい。この形態でも、測定システム１００は、測定結果に応じて測定条件を探索することができる。

[0076] 本実施形態では、測定システム１００がほぼ自動で測定条件探索方法を実行する形態を示したが、測定条件探索方法は人により一部が実行されてもよい。例えば、予備測定の実行のために人による作業が行われてもよい。測定条件探索装置１が探索する測定条件には、測定の前に試料４に対して行う前処理方法を含んでいてもよい。この場合は、予備測定及び本測定を実行する過程の中に、試料４に対して前処理を実行する過程が含まれる。

[0077] 本実施形態では、測定システム１００が測定条件探索装置１、記憶装置２及び測定装置３からなる形態を示したが、測定システム１００は、更に、本測定の結果に基づいて試料４の分析を行う分析装置を備えていてもよい。分析装置は、本測定の結果を測定条件探索装置１又は測定装置３から取得し、組成分析等の試料４に関する分析を実行する。

[0078] 本実施形態では、記憶装置２が単一の測定条件探索装置１に接続された形態を示したが、記憶装置２は、インターネット等の通信ネットワークを介して複数の測定条件探索装置１に接続された形態であってもよい。この形態で

は、記憶装置２が記憶する測定条件データベース２３２は、複数の測定条件探索装置１から測定条件等の情報を抽出され、複数の測定条件探索装置１から測定結果等の情報を追加される。複数の測定装置３で得られた測定結果に基づいて、効率的に測定条件を探索することが可能となる。

[0079] 本発明は上述した実施の形態の内容に限定されるものではなく、請求項に示した範囲で種々の変更が可能である。即ち、請求項に示した範囲で適宜変更した技術的手段を組み合わせて得られる実施形態も本発明の技術的範囲に含まれる。

符号の説明

[0080] １００　測定システム

１　測定条件探索装置

１０　記録媒体

１４１　コンピュータプログラム

２　記憶装置

２３２　測定条件データベース

３　測定装置

４　試料

請求の範囲

[請求項1] 試料に関する特定の測定を行う際の測定条件を探索する方法において、

過去に前記特定の測定が行われた試料の内容を表す試料情報と、過去の測定条件とを関連付けて記録したデータベースから、測定対象の試料の内容と類似する内容を表す試料情報に関連付けられた過去の測定条件を抽出し、

抽出した過去の測定条件に基づいて、予備測定用の測定条件を決定し、

決定した予備測定用の測定条件に従って予備測定を実行し、

予備測定の結果の評価を行い、

前記評価の結果及び予備測定の結果に応じて、予備測定用の測定条件の更新を行い、

予備測定の実行、前記評価及び前記更新を繰り返す

ことを特徴とする測定条件探索方法。

[請求項2] 予備測定の結果に含まれる評価対象が所定の基準を満たしているか否かを判定することにより、前記評価を行い、

前記評価対象が前記所定の基準を満たしていない場合に、前記更新を行い、

前記評価対象が前記所定の基準を満たしている場合に、予備測定用の測定条件を、本測定用の測定条件に決定する

ことを特徴とする請求項１に記載の測定条件探索方法。

[請求項3] 決定した本測定用の測定条件に従って、本測定を行い、

測定対象の試料の内容を表す試料情報と、本測定用の測定条件と、本測定の結果とを関連付けて、前記データベースに記録する

ことを特徴とする請求項２に記載の測定条件探索方法。

[請求項4] 前記特定の測定は、試料へ光又は放射線を照射し、前記試料から発生する光又は放射線のスペクトルを取得することであり、

測定条件は、前記試料へ照射する光若しくは放射線の強度、又は前記試料へ光若しくは放射線を照射する時間を含み、

前記評価対象は、取得したスペクトルに含まれる信号強度、前記スペクトルのＳ／Ｎ比、又は前記スペクトルに含まれるピークの分解能を含む

ことを特徴とする請求項２又は３に記載の測定条件探索方法。

[請求項5] 前記データベースは、過去の測定条件に関連付けて、過去の測定結果を記録しており、

過去の測定結果に応じて、抽出した過去の測定条件の中から測定条件を選択し、選択した測定条件を予備測定用の測定条件に決定する

ことを特徴とする請求項１乃至４のいずれか一つに記載の測定条件探索方法。

[請求項6] 前記データベースは、過去の測定条件に関連付けて、過去の測定結果を記録しており、

前記過去の測定結果及び前記過去の測定条件に基づくベイズ最適化を行うことにより、予備測定用の測定条件を決定し、

前記過去の測定結果及び前記過去の測定条件に予備測定の結果及び予備測定用の測定条件を加えたデータに基づくベイズ最適化を行うことにより、前記更新を行う

ことを特徴とする請求項１乃至４のいずれか一つに記載の測定条件探索方法。

[請求項7] 予備測定の結果が特定の状態である場合に予備測定用の測定条件をどのように修正するのかを規定したルールを予め定めてあり、

前記ルールに従って予備測定用の測定条件を修正することにより、前記更新を行う

ことを特徴とする請求項１乃至５のいずれか一つに記載の測定条件探索方法。

[請求項8] 測定対象の試料の内容を表す試料情報と、予備測定用の測定条件と

、予備測定の結果とを関連付けて、前記データベースに記録する

ことを特徴とする請求項１乃至７のいずれか一つに記載の測定条件探索方法。

[請求項9] 過去に特定の測定が行われた試料の内容を表す試料情報と、過去の測定条件とを関連付けて記録したデータベースから、任意の試料の内容と類似する内容を表す試料情報に関連付けられた過去の測定条件を抽出し、

抽出した過去の測定条件に基づいて、予備測定用の測定条件を決定し、

決定した予備測定用の測定条件に従って実行された予備測定の結果の評価を行い、

前記評価の結果及び予備測定の結果に応じて、予備測定用の測定条件の更新を行い、

前記評価及び前記更新を繰り返す

処理をコンピュータに実行させることを特徴とするコンピュータプログラム。

[請求項10] 試料に関する特定の測定を行う際の測定条件を探索する装置において、

過去に前記特定の測定が行われた試料の内容を表す試料情報と、過去の測定条件とを関連付けて記録したデータベースから、測定対象の試料の内容と類似する内容を表す試料情報に関連付けられた過去の測定条件を抽出し、

抽出した過去の測定条件に基づいて、予備測定用の測定条件を決定し、

決定した予備測定用の測定条件に従って実行された予備測定の結果の評価を行い、

前記評価の結果及び予備測定の結果に応じて、予備測定用の測定条件の更新を行い、

前記評価及び前記更新を繰り返す

処理を実行することを特徴とする測定条件探索装置。

[請求項11] 試料に関する特定の測定を行うシステムであって、

過去に前記特定の測定が行われた試料の内容を表す試料情報及び過去の測定条件を関連付けて記録したデータベースと、

前記特定の測定を行う際の測定条件を探索する測定条件探索装置と、

前記特定の測定を実行する測定装置とを備え、

前記測定条件探索装置は、

前記データベースから、測定対象の試料の内容と類似する内容を表す試料情報に関連付けられた過去の測定条件を抽出し、

抽出した過去の測定条件に基づいて、予備測定用の測定条件を決定し、

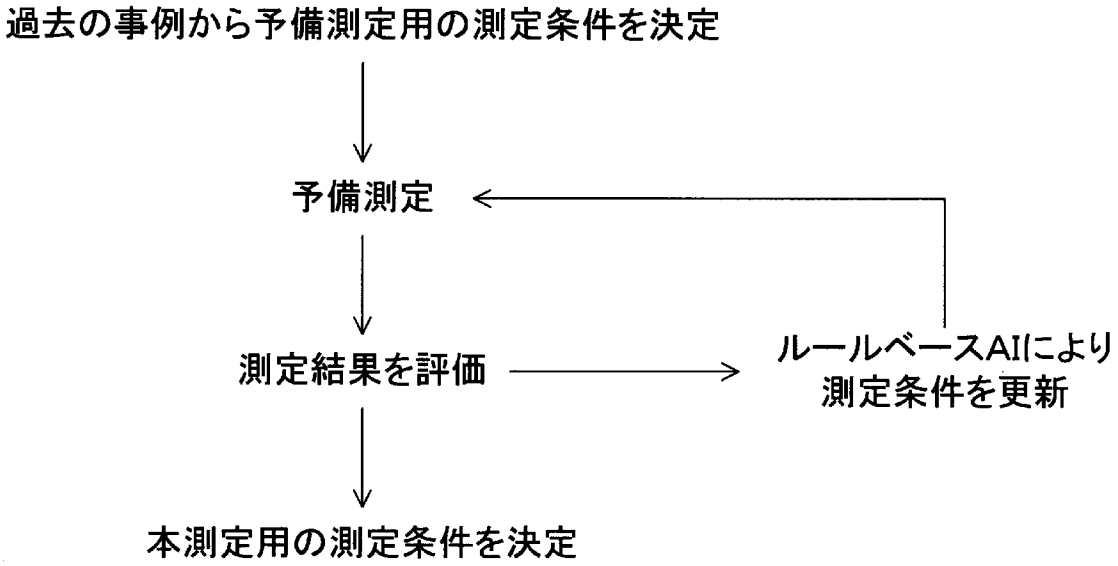
決定した予備測定用の測定条件に従って前記測定装置が実行した予備測定の結果の評価を行い、

前記評価の結果及び予備測定の結果に応じて、予備測定用の測定条件の更新を行い、

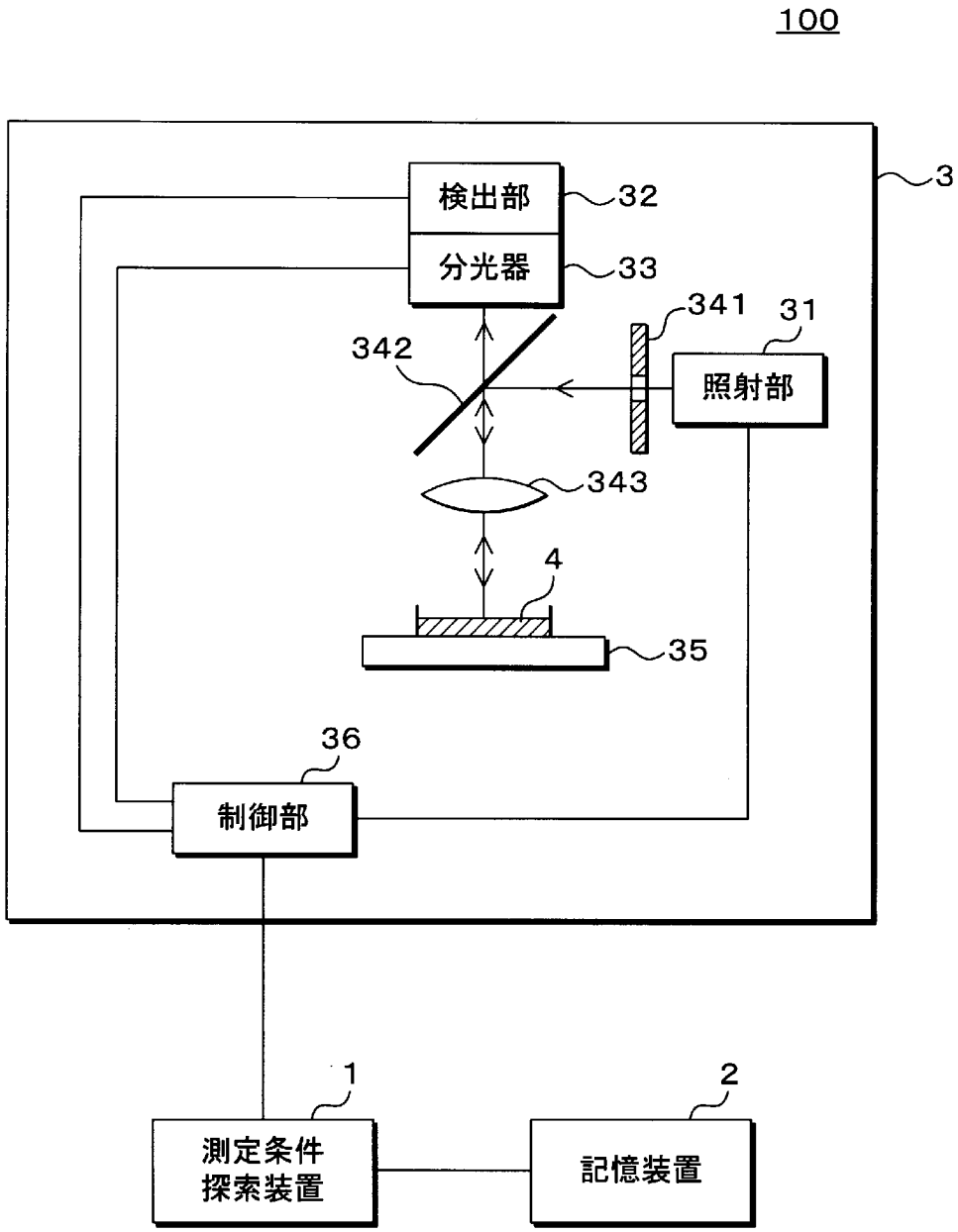
前記評価及び前記更新を繰り返す

処理を実行することを特徴とする測定システム。

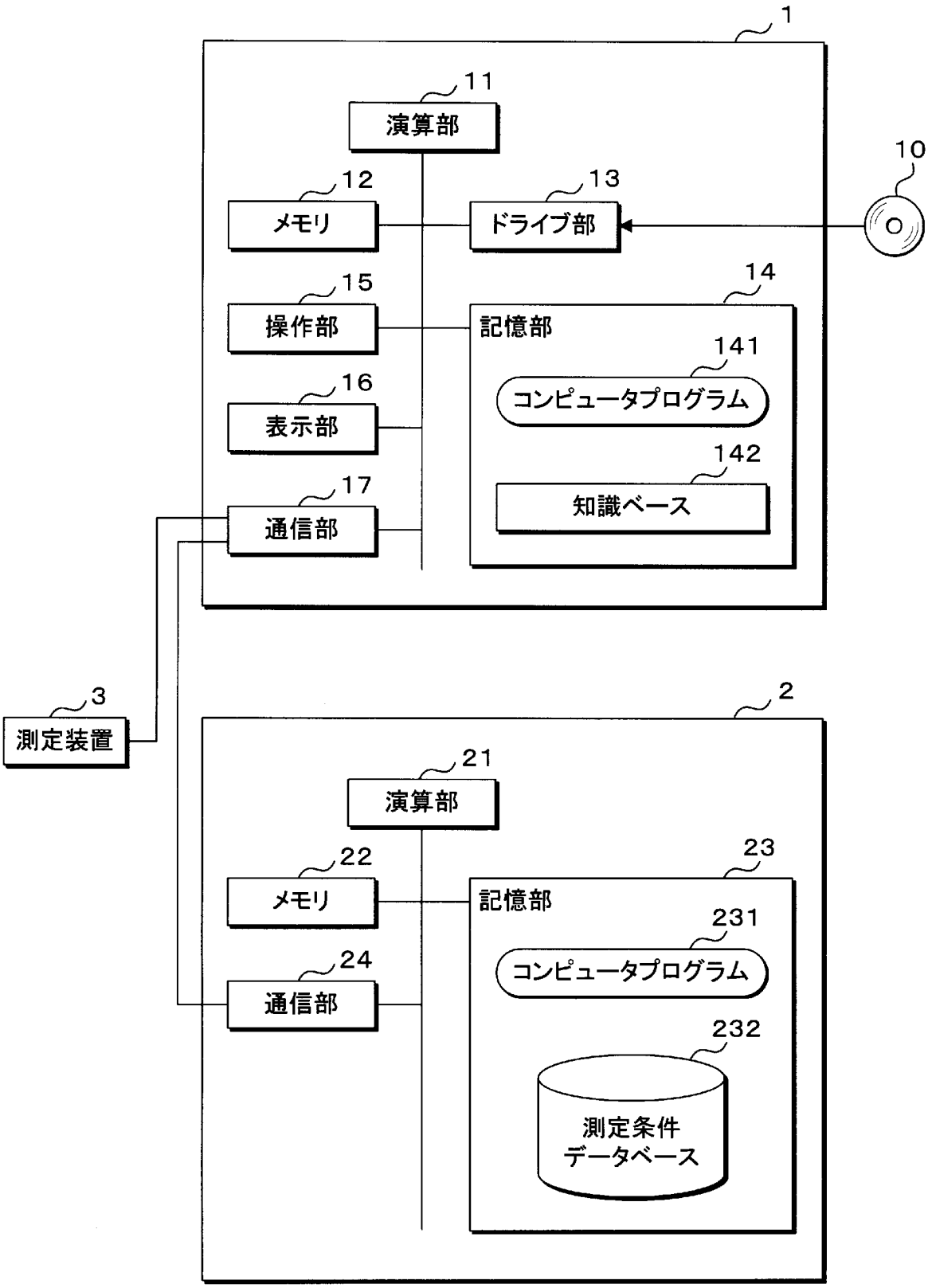
[図1]


過去の事例から予備測定用の測定条件を決定
予備測定
測定結果を評価
ルールベースAIにより
測定条件を更新
本測定用の測定条件を決定

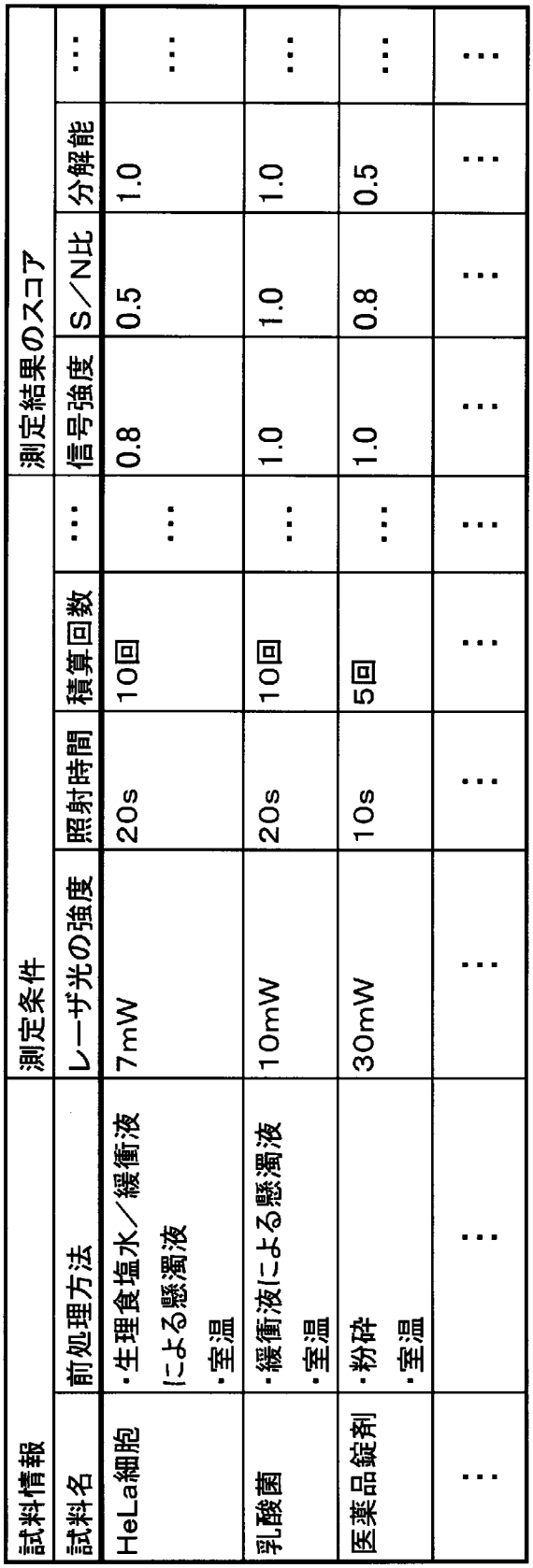
[図2]


100
3
検出部
32
分光器
33
341
31
342
照射部
343
4
35
36
制御部
1
測定条件
探索装置
2
記憶装置

[図3]

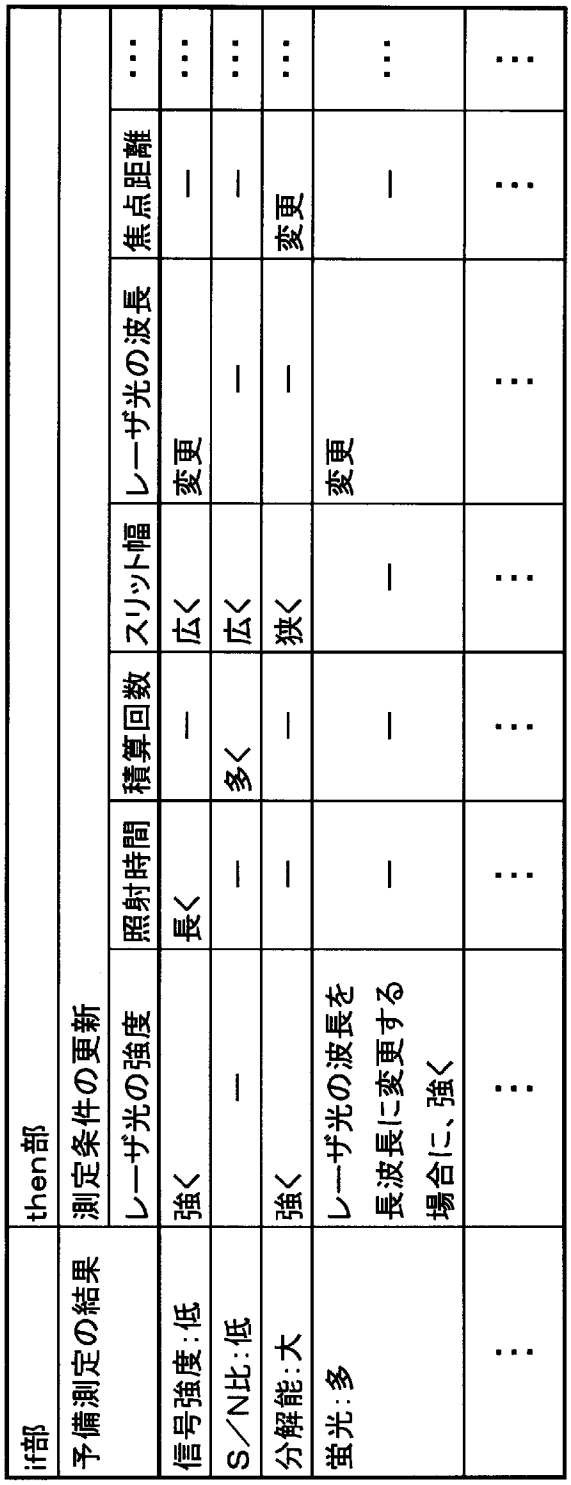

1
11
演算部
10
12
メモリ
13
ドライブ部
14
15
操作部
記憶部
141
コンピュータプログラム
16
表示部
142
知識ベース
17
通信部
3
測定装置
2
21
演算部
22
メモリ
23
記憶部
231
コンピュータプログラム
24
通信部
232
測定条件
データベース

[図4]



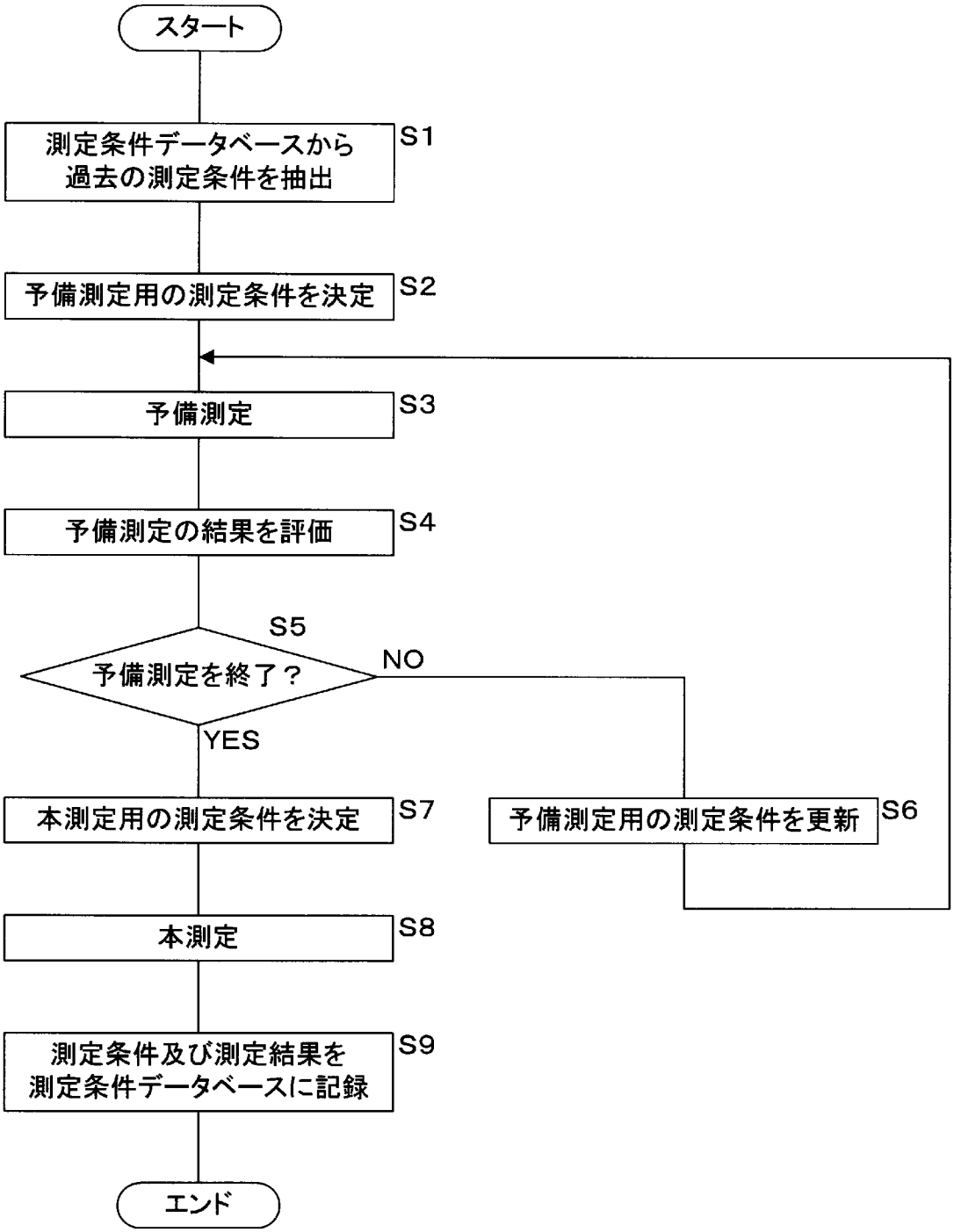
試料情報	測定条件				…	測定結果のスコア			…
試料名	前処理方法	レーザ光の強度	照射時間	積算回数	…	信号強度	S／N比	分解能	…
HeLa細胞	・生理食塩水／緩衝液による懸濁液 ・室温	7mW	20s	10回	…	0.8	0.5	1.0	…
乳酸菌	・緩衝液による懸濁液 ・室温	10mW	20s	10回	…	1.0	1.0	1.0	…
医薬品錠剤	・粉砕 ・室温	30mW	10s	5回	…	1.0	0.8	0.5	…
…	…	…	…	…	…	…	…	…	…

[図5]



if部	then部						
予備測定の結果	測定条件の更新						
	レーザ光の強度	照射時間	積算回数	スリット幅	レーザ光の波長	焦点距離	…
信号強度:低	強く	長く	—	広く	変更	—	…
S／N比:低	—	—	多く	広く	—	—	…
分解能:大	強く	—	—	狭く	—	変更	…
蛍光:多	レーザ光の波長を長波長に変更する場合に、強く	—	—	—	変更	—	…
…	…	…	…	…	…	…	…

[図6]


スタート
測定条件データベースから
過去の測定条件を抽出
S1
予備測定用の測定条件を決定
S2
予備測定
S3
予備測定の結果を評価
S4
S5
予備測定を終了？
NO
YES
本測定用の測定条件を決定
S7
予備測定用の測定条件を更新
S6
本測定
S8
測定条件及び測定結果を
測定条件データベースに記録
S9
エンド

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2021/046543

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

G01N 23/223(2006.01)i; ***G01N 21/64***(2006.01)i; ***G01N 21/65***(2006.01)i
FI: G01N21/65; G01N21/64 Z; G01N23/223

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

G01N21/00-21/958; G01N23/00-23/2276

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Published examined utility model applications of Japan 1922-1996
Published unexamined utility model applications of Japan 1971-2022
Registered utility model specifications of Japan 1996-2022
Published registered utility model applications of Japan 1994-2022

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	JP 4560503 B2 (HORIBA LTD) 13 October 2010 (2010-10-13) paragraphs [0010], [0015]-[0025], [0028], fig. 2	1-2, 4-5, 7, 9-11
Y	WO 2019/244474 A1 (SHIMADZU CORP) 26 December 2019 (2019-12-26) paragraphs [0038]-[0052], fig. 1-2	1-3, 5-6, 8-11
Y	WO 02/068963 A1 (HITACHI, LTD.) 06 September 2002 (2002-09-06) p. 6, line 12 to p. 17, line 18	1-3, 5-6, 8-11

☐ Further documents are listed in the continuation of Box C. ☑ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:
"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance
"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date
"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)
"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means
"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed
"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention
"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone
"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art
"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search	Date of mailing of the international search report
20 January 2022	**08 February 2022**
Name and mailing address of the ISA/JP **Japan Patent Office (ISA/JP)** **3-4-3 Kasumigaseki, Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915** **Japan**	Authorized officer Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.
PCT/JP2021/046543

Patent document cited in search report	Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)	Publication date (day/month/year)
JP 4560503 B2	13 October 2010	JP 2006-322954 A	
WO 2019/244474 A1	26 December 2019	US 2021/0089952 A1 paragraphs [0062]-[0081], fig. 1-2 CN 112154464 A	
WO 02/068963 A1	06 September 2002	JP 2006-313171 A paragraphs [0019]-[0062]	

国際調査報告

国際出願番号
PCT/JP2021/046543

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（ＩＰＣ））

G01N 23/223(2006.01)i; G01N 21/64(2006.01)i; G01N 21/65(2006.01)i
FI: G01N21/65; G01N21/64 Z; G01N23/223

B. 調査を行った分野

調査を行った最小限資料（国際特許分類（ＩＰＣ））

G01N21/00-21/958; G01N23/00-23/2276

最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの

日本国実用新案公報	１９２２－１９９６年
日本国公開実用新案公報	１９７１－２０２２年
日本国実用新案登録公報	１９９６－２０２２年
日本国登録実用新案公報	１９９４－２０２２年

国際調査で使用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語）

C. 関連すると認められる文献

引用文献のカテゴリー*	引用文献名　及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する請求項の番号
X	JP 4560503 B2 (株式会社堀場製作所) 13.10.2010 (2010-10-13) 段落［００１０］、［００１５］－［００２５］、［００２８］、図２	1-2, 4-5, 7, 9-11
Y	WO 2019/244474 A1 (株式会社島津製作所) 26.12.2019 (2019-12-26) 段落［００３８］－［００５２］、図１－２	1-3, 5-6, 8-11
Y	WO 02/068963 A1 (HITACHI, LTD.) 06.09.2002 (2002-09-06) 第６頁第１２行－第１７頁第１８行	1-3, 5-6, 8-11

☐ Ｃ欄の続きにも文献が列挙されている。

☑ パテントファミリーに関する別紙を参照。

＊ 引用文献のカテゴリー
“A” 特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの
“E” 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの
“L” 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す）
“O” 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献
“P” 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献
“T” 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と抵触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの
“X” 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの
“Y” 特に関連のある文献であって、当該文献と他の１以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの
“&” 同一パテントファミリー文献

国際調査を完了した日	国際調査報告の発送日
20.01.2022	08.02.2022

名称及びあて先
日本国特許庁(ISA/JP)
〒100-8915
日本国
東京都千代田区霞が関三丁目４番３号

権限のある職員（特許庁審査官）
越柴　洋哉 2W 1945
電話番号 03-3581-1101 内線 3256

国際調査報告
パテントファミリーに関する情報

国際出願番号
PCT/JP2021/046543

引用文献	公表日	パテントファミリー文献	公表日
JP 4560503 B2	13.10.2010	JP 2006-322954 A	
WO 2019/244474 A1	26.12.2019	US 2021/0089952 A1 par. [0062]-[0081], fig. 1-2 CN 112154464 A	
WO 02/068963 A1	06.09.2002	JP 2006-313171 A 段落［００１９］－［００６２］	