



(12) 发明专利申请

(10) 申请公布号 CN 117290780 A

(43) 申请公布日 2023. 12. 26

(21) 申请号 202311307168.2

(22) 申请日 2018.05.04

(30) 优先权数据

15/586,678 2017.05.04 US

(62) 分案原申请数据

201810419832.5 2018.05.04

(71) 申请人 唯亚威通讯技术有限公司

地址 美国亚利桑那州

(72) 发明人 C.熊 P.邹 孙岚

(74) 专利代理机构 北京安信方达知识产权代理

有限公司 11262

专利代理师 陆建萍 杨明钊

(51) Int. Cl.

G06F 18/2411 (2023.01)

G06F 18/214 (2023.01)

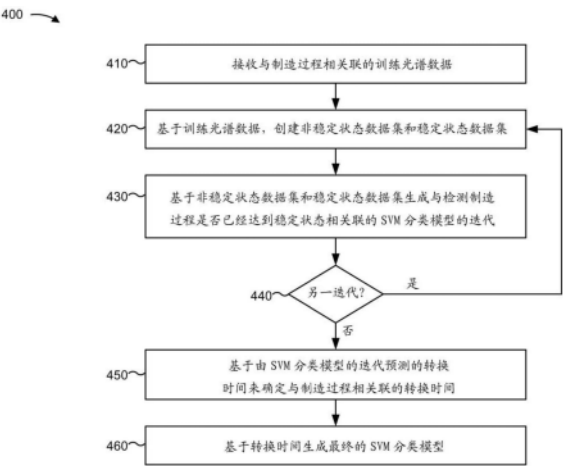
权利要求书2页 说明书18页 附图12页

(54) 发明名称

近红外光谱学和机器学习技术进行的制造过程的端点检测

(57) 摘要

本申请涉及近红外光谱学和机器学习技术进行的制造过程的端点检测。设备可以接收与从非稳定状态转换到稳定状态的制造过程相关联的训练光谱数据。该设备可以基于训练光谱数据生成支持向量机 (SVM) 分类模型的多次迭代。该设备可以基于SVM分类模型的多次迭代确定与制造过程相关联的多个预测的转换时间。多个预测的转换时间中的预测的转换时间可以识别在制造过程期间SVM分类模型的对应迭代预测制造过程从非稳定状态转换到稳定状态的时间。该设备可以基于多个预测的转换时间生成与确定制造过程是否已经达到稳定状态相关联的最终的SVM分类模型。



1. 一种方法, 包括:
通过设备识别支持向量机SVM分类模型;
通过所述设备并从一个或多个光谱仪接收在制造过程的执行期间测量的多变量光谱数据;
通过所述设备, 基于所述多变量光谱数据, 并使用所述SVM分类模型, 确定所述制造过程在特定时间是否处于稳定状态; 以及
通过所述设备并在确定所述制造过程在所述特定时间是否处于所述稳定状态之后, 提供所述制造过程已经达到所述稳定状态的指示。
2. 根据权利要求1所述的方法, 还包括:
基于与所述制造过程相关联的优势转换时间, 生成所述SVM分类模型。
3. 根据权利要求1所述的方法, 其中, 所述SVM分类模型考虑80个或更多个变量。
4. 根据权利要求1所述的方法, 其中, 确定所述制造过程在所述特定时间是否处于所述稳定状态包括:
将所述多变量光谱数据作为输入提供给所述SVM分类模型; 以及
基于所述SVM分类模型的输出, 确定所述制造过程在所述特定时间不处于所述稳定状态。
5. 根据权利要求1所述的方法, 其中, 所述特定时间是所述多变量光谱数据被测量的时间。
6. 根据权利要求1所述的方法,
其中, 确定所述制造过程在所述特定时间是否处于所述稳定状态包括:
确定所述制造过程已经达到所述稳定状态, 并且
其中, 所述方法还包括:
基于确定所述制造过程已经达到所述稳定状态, 确定与所述稳定状态相关联的定量度量; 以及
提供与所述定量度量相关联的信息。
7. 根据权利要求6所述的方法, 其中, 所述定量度量包括以下中的一项或多项:
化合物在所述稳定状态下的组分的浓度, 或
所述稳定状态下的粒子大小。
8. 根据权利要求6所述的方法, 其中, 确定所述定量度量包括:
基于确定所述制造过程已经达到所述稳定状态, 将所述多变量光谱数据作为输入提供给回归模型, 以及
从所述回归模型接收作为输出的所述定量度量。
9. 根据权利要求1所述的方法, 其中, 所述多变量光谱数据包括近红外 (NIR) 光谱数据, 所述近红外 (NIR) 光谱数据包括与多于一百个变量相关联的数据。
10. 一种设备, 包括:
一个或多个存储器; 以及
一个或多个处理器, 其耦合到所述一个或多个存储器, 所述一个或多个处理器被配置为:
识别分类模型;

从一个或多个光谱仪接收在制造过程的执行期间测量的光谱数据;

基于所述光谱数据并使用所述分类模型,确定所述制造过程在特定时间是否处于稳定状态;以及

在确定所述制造过程在所述特定时间是否处于所述稳定状态之后,提供所述制造过程已经达到所述稳定状态的指示。

11. 根据权利要求10所述的设备,其中,所述一个或多个处理器还被配置为:

基于与所述制造过程相关联的优势转换时间,生成所述分类模型。

12. 根据权利要求10所述的设备,其中,所述分类模型是支持向量机(SVM)分类模型。

13. 根据权利要求10所述的设备,其中,所述分类模型考虑80个或多个变量。

14. 根据权利要求10所述的设备,其中,所述特定时间是所述光谱数据被测量的时间。

15. 根据权利要求10所述的设备,

其中,当确定所述制造过程在所述特定时间是否处于所述稳定状态时,所述一个或多个处理器被配置为:

确定所述制造过程已经达到所述稳定状态,并且

其中,所述一个或多个处理器还被配置为:

基于确定所述制造过程已经达到所述稳定状态,确定与所述稳定状态相关联的定量度量;以及

提供与所述定量度量相关联的信息。

16. 根据权利要求10所述的设备,其中,所述光谱数据包括多变量光谱数据。

17. 一种存储指令集的非暂态计算机可读介质,所述指令集包括:

一个或多个指令,其当由设备的一个或多个处理器运行时,使所述设备:

从一个或多个光谱仪接收在制造过程的执行期间测量的多变量光谱数据;

基于所述多变量光谱数据,确定所述制造过程在特定时间是否处于稳定状态;以及

在确定所述制造过程在所述特定时间是否处于所述稳定状态之后,提供所述制造过程已经达到所述稳定状态的指示。

18. 根据权利要求17所述的非暂态计算机可读介质,其中,使用支持向量机(SVM)分类模型确定所述制造过程在所述特定时间是否处于所述稳定状态。

19. 根据权利要求17所述的非暂态计算机可读介质,其中,所述特定时间是所述多变量光谱数据被测量的时间。

20. 根据权利要求17所述的非暂态计算机可读介质,其中,所述多变量光谱数据包括近红外(NIR)光谱数据,所述近红外(NIR)光谱数据包括与多于一百个变量相关联的数据。

近红外光谱学和机器学习技术进行的制造过程的端点检测

[0001] 本申请是申请日为2018年05月04日,申请号为201810419832.5,发明名称为“近红外光谱学和机器学习技术进行的制造过程的端点检测”的申请的分案申请。

技术领域

[0002] 本公开总体上涉及制造过程中的端点检测。

背景技术

[0003] 作为实施制造过程(例如,连续制造过程、批量制造过程)的一部分,可以利用过程分析技术(PAT)系统来产生用于监控和控制制造过程的实时或接近实时的数据(例如,光谱数据)。连续制造过程允许以连续的方式将原材料输入到系统中并将成品(例如,药物产品)从系统中卸下(discharge)。换句话说,在连续制造过程中,制造过程的各个步骤被转换成单个的、集成的制造过程(例如,而不是像批量制造过程那样的一系列离散步骤)。

发明内容

[0004] 根据一些可能的实施方式,设备可以包括一个或多个处理器以:接收与从非稳定状态转换到稳定状态的制造过程相关联的训练光谱数据;基于训练光谱数据生成支持向量机(SVM)分类模型的多次迭代;基于SVM分类模型的多次迭代确定与制造过程相关联的多个预测的转换时间,其中,多个预测的转换时间中的预测的转换时间可以标识在制造过程期间,SVM分类模型的相应迭代预测到制造过程从非稳定状态转换到稳定状态的时间;并且基于多个预测的转换时间,生成与确定制造过程是否已经达到稳定状态相关联的最终的SVM分类模型。

[0005] 根据一些可能的实施方式,非暂态计算机可读介质可以存储一个或多个指令,在由一个或多个处理器运行时,所述一个或多个指令使所述一个或多个处理器:接收与从非稳定状态转换到稳定状态的制造过程的第一执行相关联的训练光谱数据;基于训练光谱数据迭代地生成与确定制造过程的另一执行是否已经从非稳定状态转换到稳定状态相关联的SVM分类模型;接收与制造过程的第二执行相关联的附加光谱数据;并且基于SVM分类模型和附加光谱数据,确定制造过程的第二执行是否已经从非稳定状态转换到稳定状态。

[0006] 根据一些可能的实施方式,一种方法可以包括:由设备接收与从非稳定状态转换到稳定状态的制造过程的第一执行相关联的第一光谱数据;由所述设备并且基于第一光谱数据生成SVM分类模型的多次迭代;由所述设备并且基于SVM分类模型的多次迭代来确定与制造过程的第一执行相关联的多个预测的转换时间;由所述设备并且基于多个预测的转换时间生成与确定制造过程的另一执行是否已经达到稳定状态相关联的最终的SVM分类模型;由所述设备接收与制造过程的第二执行相关联的第二光谱数据;以及由所述设备基于最终的SVM分类模型和第二光谱数据确定制造过程的第二执行是否已经达到稳定状态。

附图说明

- [0007] 图1A-图1C是本文描述的示例实施方式的概览的图；
- [0008] 图2是可以实施本文所描述的系统 and/或方法的示例环境的图；
- [0009] 图3是图2的一个或多个设备的示例组件的图；
- [0010] 图4是用于生成用于检测制造过程何时已经达到稳定状态的SVM分类模型的示例过程的流程图；
- [0011] 图5A和图5B是与基于通过制造过程相关联的SVM分类模型的迭代预测的转换时间确定制造过程的转换时间相关联的示例图形表示；
- [0012] 图6是用于基于光谱数据并且使用SVM分类模型来确定制造过程是否已经达到稳定状态的示例过程的流程图；
- [0013] 图7A和图7B是图示出与SVM分类模型相关联的简化决策边界的示例图形表示；以及
- [0014] 图8是基于图7A和图7B的决策边界确定的示例决策值的图形表示。

具体实施方式

[0015] 示例实施方式的以下详细描述参考附图。不同附图中的相同附图标记可以标识相同或相似的元件。

[0016] 制造过程(例如,用于制造药物产品的连续制造过程或批量制造过程)可以涉及一个或多个状态转换,诸如从非稳定状态(例如,材料和/或化合物的特性随时间变化的状态)到稳定状态(例如,材料和/或化合物的特性随时间基本保持恒定的状态)的转换。例如,包括在用于制造药物产品的制造过程中的混合过程可以涉及化合物的光谱特性从非稳定状态(例如,在混合过程开始时)到稳定状态(例如,表示混合过程完成)的转换。

[0017] 因此,为了提高效率和/或优化制造过程,应该监控制造过程以便(例如,实时或接近实时地)确定制造过程何时已达到稳定状态。用于检测制造过程的状态的可能技术是使用单变量技术的模型,该单变量技术基于与制造过程相关联的单个变量(诸如总的光谱强度(spectral intensity))来检测制造过程的状态。用于检测制造过程的状态的另一可能的技术是使用主分量分析(PCA)技术来识别用于检测制造过程的状态的变量集合(即,主分量),并且基于监测该变量集合检测制造过程何时达到稳定状态。然而,在一些情况下,在制造过程期间测量的数据可以是多变量(multivariate)数据(例如,包括与数百个变量相关联的数据的NIR光谱)。因此,由于根据单变量技术或PCA技术专注于相对较少的变量,所以这些技术可能导致不准确的状态检测和/或可能不够鲁棒以确保准确的状态检测。

[0018] 本文描述的实施方式提供了能够生成用于确定制造过程(例如,连续制造过程、批量制造过程等)是否已经到达稳定状态的支持向量机(SVM)分类模型、以及使用SVM分类模型并且基于与制造过程相关联的多变量光谱数据来确定制造过程是否已经达到稳定状态的检测设备。在一些实施方式中,SVM分类模型可以考虑多个变量(例如,80个变量、120个变量、150个变量等),从而增加SVM分类模型的准确性和/或鲁棒性(例如,相比较于上述技术)。

[0019] 图1A-图1C是本文描述的示例实施方式100的概览的图。如图1A所示,并且由附图标记102所示,检测设备可以接收与制造过程相关联的训练光谱数据。基于可能会生成哪些

与检测制造过程是否已经达到稳定状态相关联的支持向量机(SVM)分类模型的迭代,训练光谱数据(有时称为第一光谱数据)可以包括与制造过程相关联的光谱数据。例如,训练光谱数据可以包括在制造过程的执行期间由光谱仪测量的光谱(例如,诸如NIR光谱的多变量时间序列数据)。收集训练光谱数据的期间的制造过程的执行(performance)可以被称为制造过程的第一执行。

[0020] 如所示的,训练光谱数据可以包括在制造过程的开始时(时间 t_0)测量的光谱数据、在已知制造过程处于非稳定状态时(时间 t_{us0})测量的光谱数据、在已知制造过程处于稳定状态时(时间 t_{ss0})测量的光谱数据、在制造过程结束时(时间 t_e)测量的光谱数据以及不知道制造过程的状态的时间 t_0 和时间 t_e 之间测量的光谱数据。

[0021] 如附图标记104至116所示,检测设备可以基于训练光谱数据生成SVM分类模型的迭代。例如,如附图标记104所示,为了生成SVM分类模型的初始迭代(迭代0),检测设备可以基于训练光谱数据创建初始集非稳定状态数据(例如,包括从时间 t_0 到时间 t_{us0} 测量的光谱数据)和初始集稳定状态数据(例如,包括从时间 t_{ss0} 到时间 t_e 测量的光谱数据)。

[0022] 如附图标记106所示,检测设备可以基于初始集非稳定状态数据和初始集稳定状态数据生成SVM分类模型的初始迭代。如所示的,基于提供训练光谱数据作为SVM分类模型的初始迭代的输入,检测设备可以确定与SVM分类模型的初始迭代相关联的初始预测转换时间(t_{trans0}) (例如,SVM分类模型的初始迭代预测制造过程从非稳定状态转换到稳定状态的时间)。

[0023] 如附图标记108所示,为了生成SVM分类模型的第一次迭代(迭代1),检测设备可以基于训练光谱数据创建第一集非稳定状态数据(例如,包括从时间 t_0 到时间 t_{trans0} 测量的光谱数据)和第一集稳定状态数据(例如,包括从时间 $t_{ss0-dt*1}$ 到时间 t_e 测量的光谱数据)。值得注意的是,第一集非稳定状态数据包括直到通过SVM分类模型的初始迭代预测的转换时间为止测量的光谱数据,而第一集稳定状态数据包括初始集稳定状态数据中所包括的光谱数据、以及在时间 t_{ss0} 之前的一个时间步长测量的光谱数据。

[0024] 如附图标记110所示,检测设备可以基于第一集非稳定状态数据和第一集稳定状态数据生成SVM分类模型的第一次迭代。如所示的,基于提供训练光谱数据作为SVM分类模型的第一次迭代的输入,检测设备可以确定与SVM分类模型的第一次迭代相关联的第一预测的转换时间(t_{trans1}) (例如,SVM分类模型的第一次迭代预测制造过程从非稳定状态转换到稳定状态的时间)。

[0025] 在一些实施方式中,检测设备可以以这种方式生成SVM分类模型的 n ($n>1$) 次迭代并确定预测的转换时间,直到与用于生成SVM分类模型的第 n 次迭代的稳态数据集相关联的最早时间是距已知制造过程处于非稳定状态的时间的时间阈值量(例如,一个时间步长)为止(例如,直到该稳定状态集包括从 $t_{ss0-dt*n} = t_{us0+dt}$ 到时间 t_e 测量的光谱数据为止)。

[0026] 例如,如图1A中由附图标记112所示,为了生成SVM分类模型的第 n 次迭代(迭代 n),检测设备可以基于训练光谱数据创建第 n 集非稳定状态数据(例如,包括从时间 t_0 到时间 $t_{trans(n-1)}$ 测量的光谱数据)和第 n 集稳定状态数据(例如,包括从时间 $t_{ss0-dt*n} = t_{us0+dt}$ 到时间 t_e 测量的光谱数据)。值得注意的是,第 n 集非稳定状态数据包括直到通过SVM分类模型的第 $(n-1)$ 次(即,先前的)迭代预测的转换时间的时间为止测量的光谱数据,而第 n 集稳定状态数据包括第 $(n-1)$ 集稳定状态数据中所包括的光谱数据、以及在时间 $t_{ss0-dt*(n-1)}$ 之前的一个

时间步长测量的光谱数据。

[0027] 如附图标记114所示,检测设备可以基于第 n 集非稳定状态数据和第 n 集稳定状态数据生成SVM分类模型的第 n 次迭代。如所示的,基于提供训练光谱数据作为SVM分类模型的第 n 次迭代的输入,检测设备可以确定与SVM分类模型的第 n 次迭代相关联的第 n 个预测的转换时间($t_{\text{trans}(n)}$) (例如,SVM分类模型的第 n 次迭代预测制造过程从非稳定状态转换到稳定状态的时间)。

[0028] 如附图标记116所示,检测设备可以基于通过SVM分类模型的 n 次迭代所预测的 n 个转换时间来确定与制造过程相关联的优势(例如,最多预测的)转换时间。如附图标记118所示,检测设备可以基于与制造过程相关联的转换时间生成最终的SVM分类模型。例如,检测设备可以创建包括在所确定的优势转换时间之前测量的光谱数据的最终集非稳定状态数据,以及包括在所确定的优势转换时间处或在其之后测量的训练光谱数据的最终集稳定状态数据。如所示的,相应地,检测设备可以基于最终集非稳态数据和最终集稳定状态数据来生成最终的SVM分类模型。

[0029] 如图1B所示,并且通过附图标记120,检测设备可以(在稍后的时间)识别SVM分类模型(例如,基于存储如所描述的生成的最终的SVM分类模型)以用于检测制造过程的执行是否达到了稳定状态。例如,检测设备可以基于接收到制造过程正在开始或已经开始的指示来识别SVM分类模型。

[0030] 如附图标记122所示,检测设备可以在制造过程的第二执行期间接收与制造过程相关联的光谱数据(有时称为第二光谱数据或附加光谱数据)。例如,如所示的,光谱仪可以在制造过程的执行期间的给定时间(例如,时间 t_A)处测量光谱数据,并且可以将光谱数据提供给检测设备。期间收集光谱数据用于SVM分类模型的输入的制造过程的执行可以被称为制造过程的第二执行。

[0031] 如进一步所示的,检测设备可以基于光谱数据和SVM分类模型确定制造过程在时间 t_A 处是否处于稳定状态。例如,如附图标记124所示,检测设备可以提供在时间 t_A 处测量的光谱数据作为SVM分类模型的输入。如附图标记126所示,检测设备可以基于SVM分类模型的输出来确定制造过程在时间 t_A 处未处于稳定状态。在一些实施方式中,检测设备可以基于与SVM分类模型相关联的决策边界来确定制造过程是否处于稳定状态,如下所述。

[0032] 如图1C所示,并且通过附图标记128,检测设备可以在制造过程的执行期间的稍后时间(时间 t_B)接收与制造过程相关联的光谱数据。例如,如所示的,光谱仪可以在时间 t_B 处测量光谱数据,并且可以将光谱数据提供给检测设备。

[0033] 如进一步所示的,检测设备可以基于光谱数据和SVM分类模型来确定制造过程在时间 t_B 处是否处于稳定状态。例如,如附图标记130所示,检测设备可以提供在时间 t_B 处测量的光谱数据作为SVM分类模型的输入。如附图标记132所示,检测设备可以基于SVM分类模型的输出来确定制造过程在时间 t_B 处于稳定状态。

[0034] 如附图标记134所示,在一些实施方式中,检测设备可以(可选地)基于确定制造过程已经达到稳定状态来确定与稳定状态相关联的定量度量。定量度量可以包括指示与稳定状态相关联的定量属性的度量,例如,化合物在稳定状态下的组成部分的浓度、稳定状态下的粒子大小等。例如,检测设备可以存储或访问回归模型(例如,偏最小二乘(PLS)回归模型、支持向量回归(SVR)模型),该回归模型接收基于其检测到稳定状态的光谱数据作为输

入,并且提供与该稳定状态相关联的定量度量作为输出。

[0035] 如附图标记136所示,基于确定制造过程已经达到稳定状态,检测设备可以(例如,向与监测制造过程相关联的用户设备)提供制造过程已经达到稳定状态的指示。如进一步所示的,检测设备还可以提供与定量度量相关联的信息。

[0036] 以这种方式,检测设备可以生成用于确定制造过程是否已经达到稳定状态的SVM分类模型,以及使用该SVM分类模型并基于与制造过程相关联的多变量光谱数据来确定制造过程是否已达到稳定状态。

[0037] 如上所述,图1A-图1C仅作为示例被提供。其他的示例也是可能的并且可以不同于关于图1A-图1C所描述的示例。

[0038] 图2是可以实现本文所描述的系统和/或方法的示例环境200的图。如图2所示,环境200可以包括一个或多个光谱仪210-1至210-X($X \geq 1$) (此处统一地称为光谱仪210,并且单独地称为光谱仪210)、检测设备220、用户设备230和网络240。环境200的设备可以经由有线连接、无线连接或有线和无线连接的组合来互连。

[0039] 光谱仪210包括能够对样品(例如,与制造过程相关联的样品)执行光谱测量的设备。例如,光谱仪210可以包括执行光谱学(例如,振动光谱学,诸如近红外(NIR)光谱学、中红外光谱学(mid-IR)、拉曼光谱学等)的桌面型(即,非手持式)光谱仪设备。在一些实施方式中,光谱仪210可以能够提供由光谱仪210获得的光谱数据,用于由另一设备(诸如检测设备220)进行分析。

[0040] 检测设备220包括能够基于与制造过程相关联的分类模型和与制造过程相关联的光谱数据来检测制造过程是否已经达到稳定状态的一个或多个设备。例如,检测设备220可以包括服务器、一组服务器、计算机、云计算设备等。在一些实施方式中,检测设备220可以能够基于与制造过程相关联的训练光谱数据来生成分类模型。在一些实施方式中,检测设备220可以从环境200中的另一设备(诸如光谱仪210和/或用户设备230)接收信息和/或将信息发送给该另一设备。

[0041] 用户设备230包括能够接收、处理和/或提供与制造过程是否已经达到稳定状态相关联的信息的一个或多个设备。例如,用户设备230可以包括通信和计算设备,诸如桌面型计算机、移动电话(例如,智能电话、无线电话等)、膝上型计算机、平板电脑、手持式计算机、可穿戴通信设备(例如,智能腕表、一副智能眼镜等)或类似类型的设备。

[0042] 网络240包括一个或多个有线和/或无线网络。例如,网络240可以包括蜂窝网络(例如,长期演进(LTE)网络、3G网络、码分多址(CDMA)网络等)、公共陆地移动网(PLMN)、局域网(LAN)、广域网(WAN)、城域网(MAN)、电话网络(例如,公共交换电话网络(PSTN))、专用网、自组网络、内联网、互联网、基于光纤的网络、云计算网络等、和/或这些或其他类型的网络的组合。

[0043] 作为示例提供图2中所示的设备和网络的数量和布置。实际上,可能存在与图2中所示的那些相比附加的设备和/或网络、更少的设备和/或网络、不同的设备和/或网络、或者不同布置的设备和/或网络。此外,图2中示出的两个或更多个设备可以在单个设备内实现,或者,图2中示出的单个设备可以实现为多个、分布式的设备。另外或可选地,环境200的一组设备(例如,一个或多个设备)可以执行被描述为由环境200的另一组设备执行的一个或多个功能。

[0044] 图3是设备300的示例组件的图。设备300可以对应于光谱仪210、检测设备220和/或用户设备230。在一些实施方式中,光谱仪210、检测设备220和/或用户设备230可以包括一个或多个设备300和/或设备300的一个或多个组件。如图3所示,设备300可以包括总线310、处理器320、存储器330、存储组件340、输入组件350、输出组件360和通信接口370。

[0045] 总线310包括允许在设备300的组件之间进行通信的组件。处理器320以硬件、固件或硬件和软件的组合来实现。处理器320包括中央处理单元(CPU)、图形处理单元(GPU)、加速处理单元(APU)、微处理器、微控制器、数字信号处理器、现场可编程门阵列(FPGA)、特定应用集成电路(ASIC)或另一类型的处理组件。在一些实施方式中,处理器320包括能够被编程为执行功能的一个或多个处理器。存储器330包括存储由处理器320使用的信息和/或指令的随机存取存储器(RAM)、只读存储器(ROM)和/或另一类型的动态或静态存储设备(例如,闪存、磁存储器和/或光存储器)。

[0046] 存储组件340存储与设备300的操作和使用有关的信息和/或软件。例如,存储组件340可以包括硬盘(例如,磁盘、光盘、磁光盘和/或固态硬盘)、致密盘(CD)、数字多功能盘(DVD)、软盘、盒式磁带、磁带和/或另一类型的非暂态计算机可读介质以及相应的驱动器。

[0047] 输入组件350包括允许设备300诸如经由用户输入(例如,触摸屏显示器、键盘、键区(keypad)、鼠标、按钮、开关和/或麦克风)接收信息的组件。另外或可选地,输入组件350可以包括用于感测信息的传感器(例如,全球定位系统(GPS)组件、加速度计、陀螺仪和/或致动器)。输出组件360包括提供来自设备300的输出信息的组件(例如,显示器、扬声器和/或一个或多个发光二极管(LED))。

[0048] 通信接口370包括使得设备300能够诸如经由有线连接、无线连接或有线连接和无线连接的组合来与其他设备通信的、类似收发器的组件(例如,收发器和/或单独的接收器和发送器)。通信接口370可以允许设备300从另一个设备接收信息和/或向另一设备提供信息。例如,通信接口370可以包括以太网接口、光学接口、同轴接口、红外接口、射频(RF)接口、通用串行总线(USB)接口、Wi-Fi接口、蜂窝网接口等。

[0049] 设备300可以执行本文所描述的一个或多个过程。设备300可以响应于处理器320运行由非暂态计算机可读介质(诸如存储器330和/或存储组件340)存储的软件指令来执行这些过程。计算机可读介质在本文被定义为非暂态存储设备。存储设备包括单个物理存储设备内的存储器空间或分布在多个物理存储设备上的存储器空间。

[0050] 软件指令可以经由通信接口370从另一计算机可读介质或者从另一设备被读取到存储器330和/或存储组件340中。当被运行时,存储在存储器330和/或存储组件340中的软件指令可以使处理器320执行本文所描述的一个或多个过程。另外地,或可选地,可以使用硬连线电路来代替软件指令或与软件指令结合来执行本文所描述的一个或多个过程。因此,本文所描述的实施方式不限于硬件电路和软件的任何特定组合。

[0051] 作为示例提供图3中所示的组件的数量和布置。在实践中,设备300可以包括与图3中所示的那些相比附加的组件、更少的组件、不同的组件或者不同布置的组件。另外地,或者可选地,设备300的一组组件(例如,一个或多个组件)可以执行被描述为由设备300的另一组组件执行的一个或多个功能。

[0052] 图4是用于生成用于检测制造过程何时达到稳定状态的分类模型的示例过程400的流程图。在一些实施方式中,图4中的一个或多个过程框可以由检测设备220执行。在一些

实施方式中,图4中的一个或多个过程框可以由与检测设备220分离或包括检测设备220的另一设备或设备组(诸如光谱仪210和/或用户设备230)执行。

[0053] 如图4所示,过程400可以包括接收与制造过程相关联的训练光谱数据(框410)。例如,检测设备220可以接收与制造过程相关联的训练光谱数据。

[0054] 基于可以生成SVM分类模型的哪些迭代,训练光谱数据可以包括与制造过程相关联的光谱数据。例如,训练光谱数据可以包括在制造过程的执行期间由光谱仪210测量的光谱(例如,诸如NIR光谱的多变量时间序列数据)。在一些实施方式中,制造过程可以是连续制造过程或批量制造过程。在一些实施方式中,检测设备220可以基于训练光谱数据生成SVM分类模型的迭代,如下所述。

[0055] 在一些实施方式中,训练光谱数据可以包括在制造过程的较早执行期间在不同时间(例如,周期性地在一系列时间步长处)测量的历史光谱。例如,训练光谱数据可以包括在制造过程的较早执行的开始时间(本文称为时间 t_0)处测量的光谱和在制造过程的较早执行的结束时间(本文称为时间 t_e)处测量的光谱。

[0056] 作为另一示例,训练光谱数据可以包括在已知制造过程的较早执行已经处于非稳定状态的时间(本文称为时间 t_{us0})处测量的光谱。在一些实施方式中,时间 t_{us0} 可以与时间 t_0 相同(例如,由于制造过程在制造过程开始时处于非稳定状态)。或者,时间 t_{us0} 可以是在时间 t_0 之后的时间,诸如时间 t_0 之后的一个时间步长的时间、时间 t_0 之后的5个时间步长的时间、时间 t_0 之后的40个时间步长的时间等。在一些实施方式中,时间 t_{us0} 可以是在时间 t_0 之后的时间,假定在该时间处制造过程的较早执行已经处于非稳定状态。

[0057] 作为额外的示例,训练光谱数据可以包括在已知制造过程的较早执行已经处于稳定状态(此处称为时间 t_{ss0})的时间处测量的光谱。在一些实施方式中,时间 t_{ss0} 可以是与时间 t_e 相同的时间(例如,由于制造过程在制造过程结束时处于稳定状态)。或者,时间 t_{ss0} 可以是时间 t_e 之前的时间,诸如,时间 t_e 之前的一个时间步长的时间、时间 t_e 之前的5个时间步长的时间、时间 t_e 之前的40个时间步长的时间等。在一些实施方式中,时间 t_{ss0} 可以是时间 t_e 之前的时间,假定在该时间处制造过程的较早执行已经处于稳定状态。

[0058] 作为另一示例,训练光谱数据可以包括在时间 t_0 和时间 t_e 之间的时间处测量的光谱,在该时间期间制造过程的较早执行的状态未知。

[0059] 在一些实施方式中,检测设备220可以从一个或多个其他设备(诸如,在制造过程的较早执行期间获得训练光谱数据的一个或多个光谱仪210或者存储由一个或多个光谱仪210在制造过程的较早执行期间测量的训练光谱数据的服务器设备)接收训练光谱数据。

[0060] 在一些实施方式中,训练光谱数据可以与制造过程的多个较早执行相关联,其中起始条件(例如,总重量、粒子大小、分布、湿度水平等)在制造过程的多个执行中变化。在这种情况下,可以对与制造过程的多个执行相关联的训练光谱数据的多个集合进行平均和/或另外组合,以形成训练光谱数据。在一些实施方式中,通过变化起始条件来测量训练光谱数据导致基于训练光谱数据生成的SVM分类模型的准确度和/或鲁棒性增加(例如,相比于基于具有单集起始条件的制造过程生成的SVM分类模型)。

[0061] 在一些实施方式中,检测设备220可以对训练光谱数据执行降维。降维可以包括减少可基于其生成SVM分类模型的多变量训练光谱数据的许多变量。在一些实施方式中,可以使用主成分分析(PCA)技术来执行降维,由此,主成分(即,多变量的子集)被识别以用于生

成SVM分类模型。另外,或可选地,可以使用变量选择技术来执行降维,由此,选择多变量中的变量,该变量与例如与制造过程相关联的化合物区分(discriminative)。这种变量选择技术的示例包括选择性比率(SR)技术、投影中的变量重要性(VIP)技术等。在一些实施方式中,执行降维可以通过例如在多变量之间移除干扰和/或减少噪声而致使SVM分类模型的可解释性提升和/或SVM分类模型的生成改进(例如,相比于在训练光谱数据的整个集合上生成的SVM分类模型)。

[0062] 如图4进一步所示,过程400可以包括基于训练光谱数据创建非稳定状态数据集和稳定状态数据集(框420)。例如,检测设备220可以基于训练光谱数据创建非稳定状态数据集和稳定状态数据集。

[0063] 为了生成SVM分类模型的迭代,非稳定状态数据集可以包括训练光谱数据中包括的、对应于制造过程被假定为处于非稳定状态的时间的光谱数据。例如,与生成SVM分类模型的初始迭代相关联的初始集非稳定状态数据可以包括在从时间 t_0 到时间 t_{us0} 的时间处测量的光谱数据。继续该示例,与生成SVM模型的下一次迭代相关联的另一集非稳定状态数据可以包括在从时间 t_0 到时间 t_{trans0} 的时间处测量的光谱数据,其中,时间 t_{trans0} 是如SVM分类模型的初始迭代所预测的转换时间(例如,从非稳定状态到稳定状态的转换的时间)。通常,与生成SVM模型的第 n 次迭代相关联的第 n 集非稳定状态数据可以包括在从时间 t_0 到时间 $t_{trans(n-1)}$ 的时间处测量的光谱数据,其中,时间 $t_{trans(n-1)}$ 是由SVM分类模型的第 $(n-1)$ 次(即,先前的)迭代确定的转换时间。以下描述关于生成SVM分类模型的迭代的附加细节。

[0064] 在一些实施方式中,可以通过例如将训练光谱数据中所包括的附加光谱数据添加到与生成SVM模型的先前迭代相关联的非稳定状态数据集中,来更新、修改和/或重新创建非稳定状态数据集以生成SVM模型的每次迭代。例如,用于生成SVM分类模型的第 n 次迭代的第 n 集非稳定状态数据可以包括用于生成SVM分类模型的第 $(n-1)$ 次迭代的第 $(n-1)$ 集非稳定状态数据中包括的光谱数据、以及在从第 $(n-1)$ 集非稳定状态数据中的最后时间到使用SVM分类模型的第 $(n-1)$ 次迭代预测的转换时间的时间处测量的光谱数据。作为特定的示例,用于生成SVM分类模型的第4次迭代的稳定状态数据集可以包括从时间 t_0 到时间 t_{trans3} (例如,从开始时间到使用模型的第3次迭代确定的转换时间)测量的光谱数据,而用于生成SVM分类模型的第5次(即,下一次)迭代的稳定状态数据集可以包括从时间 t_0 到时间 t_{trans4} (例如,从开始时间到使用SVM分类模型的第4次迭代确定的转换时间)测量的光谱数据。

[0065] 为了生成SVM分类模型的迭代,稳定状态数据集可以包括训练光谱数据中所包括的、对应于制造过程的较早执行被假定为处于稳定状态的时间的光谱数据。例如,与生成SVM分类模型的初始迭代相关联的初始集稳定状态数据可以包括在从时间 t_{ss0} 到时间 t_e 的时间处测量的光谱数据。继续该示例,与生成SVM模型的下一次迭代相关联的另一集稳定状态数据可以包括在从时间 $t_{ss0-dt*1}$ 到时间 t_e 的时间处测量的光谱数据,其中,时间 $t_{ss0-dt*1}$ 是时间 t_{ss0} 之前的一个时间步长的时间。换句话说,在生成SVM分类模型的每次迭代时,检测设备220可以将与时间 t_{ss0} 之前的时间步长相关联的光谱数据迭代地添加到每一集稳定状态数据中。通常,与生成SVM模型的第 n 次迭代相关联的第 n 集稳定状态数据可以包括在从时间 $t_{ss0-dt*n}$ 到时间 t_e 的时间处测量的光谱数据,其中,时间 $t_{ss0-dt*n}$ 是时间 t_{ss0} 之前的 n 个时间步长的时间。

[0066] 在一些实施方式中,可以通过例如将附加光谱数据添加到与生成SVM模型的先前

迭代相关联的稳定状态数据集中,来更新、修改和/或重新创建稳定状态数据集以生成SVM模型的每次迭代。例如,用于生成SVM分类模型的给定迭代的稳定状态数据集可以包括用于生成SVM分类模型的先前迭代的稳定状态数据集中所包括的光谱数据、以及在与用于生成SVM分类模型的先前迭代的光谱数据集相关联的最早时间步长之前紧接的时间步长处测量的光谱数据。作为特定的示例,用于生成SVM分类模型的第4次迭代的稳定状态数据集可以包括从时间 $t_{ss0-dt*4}$ 到时间 t_e 测量的光谱数据,而用于生成SVM分类模型的第5次(即,下一次)迭代的稳定状态数据集可以包括从时间 $t_{ss0-dt*5}$ 到时间 t_e 测量的光谱数据(即, $t_{ss0-dt*4}$ 之前的一个时间步长的光谱数据)。

[0067] 如图4中进一步示出的,过程400可以包括基于非稳定状态数据集和稳定状态数据集生成与检测制造过程是否已经达到稳定状态相关联的SVM分类模型的迭代(框430)。例如,检测设备220可以基于非稳定状态数据集和稳定状态数据集生成与检测制造过程何时已经达到稳定状态相关联的SVM分类模型的迭代。

[0068] 在一些实施方式中,检测设备220可以基于将SVM技术应用于非稳定状态数据集和稳定状态数据集来生成SVM分类模型的迭代。例如,检测设备220可以通过将非稳定状态数据集和稳定状态数据集映射为空间中的点,使得非稳定状态数据集与稳定状态数据集通过例如超平面相分离,来生成SVM分类模型。

[0069] 在一些实施方式中,检测设备220可以基于训练光谱数据和SVM分类模型的迭代来确定与SVM分类模型的迭代相关联(即,通过其预测)的预测的转换时间。例如,检测设备220可以基于稳定状态数据集和非稳定状态数据集生成SVM分类模型的迭代。这里,检测设备220可以将训练光谱数据(例如,与从时间 t_0 到时间 t_e 的每个时间步长相关联)映射到相同空间中,基于相同空间生成SVM分类模型的迭代。在该示例中,基于训练光谱数据项被映射的位置(例如,相对于超平面集),SVM分类模型可以识别与制造过程相关联、通过SVM分类模型的初始迭代预测的转换时间($t_{trans(n)}$)。在一些实施方式中,检测设备220可以确定用于SVM分类模型的每次迭代的预测的转换时间。在一些实施方式中,检测设备220可以存储标识与SVM分类模型的迭代相关联的预测的转换时间的信息,以便允许检测设备220确定与制造过程相关联的转换时间,如下所述。

[0070] 如图4进一步所示,过程400可以包括确定是否生成SVM分类模型的另一次迭代(框440)。例如,检测设备220可以确定是否生成SVM分类模型的另一次迭代。

[0071] 在一些实施方式中,检测设备220可以基于与稳定状态数据集相关联的时间来确定是否生成SVM分类模型的另一次迭代。例如,检测设备220可以被配置为继续生成SVM分类模型的迭代,直到与稳定状态数据集相关联的时间的最早时间满足与已知制造过程处于非稳定状态的时间(时间 t_{us0})相关联的阈值时间为止。作为特定的示例,检测设备220可以被配置为继续生成SVM分类模型的迭代(并确定预测的转换时间),直到与稳定状态数据集相关联的最早时间与时间 t_{us0} 相差阈值量为止(例如,直到 $t_{ss0-dt*n}$ 距 t_{us0} 一个时间步长($t_{ss0-dt*n} = t_{us0+dt}$)为止)。

[0072] 另外,或替代地,检测设备220可以基于迭代阈值来确定是否生成SVM分类模型的另一次迭代。例如,检测设备220可以被配置为在阈值时间量内继续生成SVM分类模型的迭代,直到已经生成了阈值次数的迭代等。这里,检测装置220可以基于是否满足阈值(例如,阈值时间量是否已经过去、是否已经生成了阈值次数的迭代等)来确定是否生成SVM分类模

型的另一次迭代。

[0073] 如图4进一步所示,如果要生成SVM分类模型的另一次迭代(框440-是),则过程400可以包括基于训练光谱数据创建另一集稳定状态数据和另一集非稳定状态数据(框420)。例如,检测设备220可以确定要生成SVM分类模型的另一次迭代(例如,当 $t_{ss0-dt*n} > t_{us0+dt}$ 时、当迭代阈值未被满足时等),并且,检测设备220可以基于训练光谱数据来创建另一集稳定状态数据和另一集非稳定状态数据。

[0074] 在一些实施方式中,检测设备220可以以上述关于框420所描述的方式创建另一集非稳定状态数据和另一集稳定状态数据。在一些实施方式中,在创建另一集稳定状态数据和另一集非稳定状态数据时,检测设备220可以生成SVM分类模型的另一次迭代并且确定通过SVM分类模型的另一次迭代预测的转换时间,如上面关于框430所描述的。

[0075] 作为上述迭代过程的示例,检测设备220可以创建初始集非稳定状态数据(例如,包括在从时间 t_0 到时间 t_{us0} 的时间处测量的训练光谱数据)和初始集稳定状态数据(例如,包括在从时间 t_{ss0} 到时间 t_e 的时间处测量的训练光谱数据)。在该示例中,检测设备220可以将SVM技术应用于初始集稳定状态数据和初始集非稳定状态数据,以便生成SVM分类模型的初始迭代。接下来,检测设备220可以将训练光谱数据作为输入提供给SVM分类模型的初始迭代,并且确定与SVM分类模型的初始迭代相关联的初始预测的转换时间(t_{trans0})作为输出。

[0076] 继续该示例,检测设备220可以确定 $t_{ss0} > t_{us0+dt}$,并且因此,检测设备220可以生成SVM分类模型的另一次迭代。然后,检测设备220可以基于训练光谱数据和初始预测的转换时间创建第一集稳定状态数据(例如,包括从时间 $t_{ss0-dt*1}$ 到时间 t_e 测量的训练光谱数据)和第一集非稳定状态数据(例如,包括在从时间 t_0 到时间 t_{trans0} 的时间处测量的训练光谱数据)。然后,检测设备220可以将SVM技术应用于第一集稳定状态数据和第一集非稳定状态数据,以生成SVM分类模型的第一次迭代。接下来,检测设备220可以将训练光谱数据作为输入提供给SVM分类模型的第一次迭代,并且确定与SVM分类模型的第一次迭代相关联的第一预测的转换时间(t_{trans1})作为输出。检测设备220可以以这种方式继续生成SVM分类模型的迭代(并且确定预测的转换时间),直到检测设备220确定将不生成附加的迭代。

[0077] 如图4进一步所示,如果将不生成SVM分类模型的另一次迭代(框440-否),则过程400可以包括基于通过SVM分类模型的迭代预测的转换时间来确定与制造过程相关联的转换时间(框450)。例如,检测设备220可以确定将不生成SVM分类模型的另一次迭代,并且检测设备220可以基于通过SVM分类模型的迭代预测的转换时间来确定与制造过程相关联的转换时间。

[0078] 在一些实施方式中,检测设备220可以基于与SVM分类模型的迭代相关联的预测的转换时间来确定与制造过程相关联的转换时间。例如,检测设备220可以以上述方式分别确定通过SVM分类模型的n次迭代预测的n个转换时间。这里,检测设备220可以将与制造过程相关联的转换时间确定为通过SVM分类模型的n次迭代预测的转换时间的优势转换时间(例如,具有最常出现的预测的转换时间)。

[0079] 图5A和图5B是与基于通过与制造过程相关联的SVM分类模型的迭代预测的转换时间来确定制造过程的转换时间相关联的示例图形表示500和550。为了图5A和图5B,假定检测设备220已经确定了与SVM分类模型的n次迭代相对应的n个转换时间。

[0080] 在图5A中,每个点表示通过SVM分类模型的迭代预测的转换时间,其相对于与SVM分类模型的迭代相关联的时间 $t_{ss0-dt*n}$ 绘制(即,时间 $t_{ss0-dt*n}$ 与关联于生成SVM分类模型的迭代的稳定状态集相关联)。如图5A所示,n个转换时间的集中的优势转换时间位于时间130处(例如,时间130通过比任何其他转换时间被预测了更多的迭代)。在该示例中,检测设备220可以将与制造过程相关联的转换时间确定为时间130。

[0081] 图5B中示出了另一图形表示。在图5B中,绘制了每个转换时间的出现的总次数。再次,如图5B所示,n个转换时间的集中的优势转换时间位于时间130。因此,检测设备220可以将与制造过程相关联的转换时间确定为时间130。

[0082] 如上所述,图5A和图5B仅作为示例提供。其他的示例也是可能的并且可以不同于关于图5A和图5B所描述的示例。

[0083] 返回到图4,过程400可以包括基于与制造过程相关联的转换时间生成最终的SVM分类模型(框460)。例如,检测设备220可以基于与制造过程相关联的转换时间生成最终的SVM分类模型。

[0084] 最终的SVM分类模型可以包括基于与制造过程相关联的转换时间生成的SVM分类模型,该转换时间是基于SVM分类模型的迭代而确定的。

[0085] 在一些实施方式中,检测设备220可以基于与制造过程相关联的转换时间生成最终的分类模型。例如,如上所述,检测设备220可以确定与制造过程相关联的转换时间。这里,检测设备220可以创建包括与转换时间之前的时间相关联的训练光谱数据的最终集非稳定状态数据,以及包括与转换时间处或其之后的时间相关联的训练光谱数据的最终集稳定状态数据。在该示例中,检测设备220可以将SVM技术应用于最终集非稳定状态数据和最终集稳定状态数据,并且可以以与上述类似的方式生成最终的SVM分类模型。

[0086] 在一些实施方式中,如上所述,SVM分类模型可以包括决策边界(例如,超平面),其可以充当用于确定制造过程的稍后执行是否已经达到稳定状态的基础。下面参照图6描述关于决策边界的附加细节。

[0087] 在一些实施方式中,检测设备220可以存储最终的SVM分类模型,使得检测设备220可以使用最终的SVM分类模型以确定制造过程的稍后执行是处于非稳定状态还是处于稳定状态,如下所述。以这种方式,检测设备220可以生成SVM分类模型,该SVM分类模型可以接收与制造过程相关联的光谱数据作为输入并且提供制造过程处于非稳定状态还是处于稳定状态的指示作为输出。

[0088] 在一些实施方式中,制造过程可以包括多个状态转换,并且检测设备220可以针对每个稳定状态重复过程400以确定与制造过程相关联的多个SVM分类模型。例如,制造过程可以从第一非稳定状态转换到第一稳定状态、从第一稳定状态转换到第二非稳定状态、并且从第二非稳定状态转换到第二稳定状态。在该示例中,检测设备220可以执行过程400(例如,基于与制造过程相关联测量的训练光谱数据)以生成与到第二稳定状态的转换时间相关联的SVM分类模型。接下来,检测设备220可以执行过程400(例如,基于不包括与第二稳定状态相关联的训练光谱数据的训练光谱数据的子集),以生成与到第一稳定状态的转换时间相关联的SVM分类模型。

[0089] 尽管图4示出了过程400的示例框,但是,在一些实施方式中,过程400可以包括与图4中所描绘的那些相比附加的框、较少的框、不同的框或不同布置的框。另外地,或可选

地,过程400中的两个或更多框可以并行执行。

[0090] 图6是用于基于光谱数据并使用SVM分类模型来确定制造过程是否已经达到稳定状态的示例过程600的流程图。在一些实施方式中,图6中的一个或多个过程框可以由检测设备220执行。在一些实施方式中,图6中的一个或多个过程框可以由与检测设备220分离的另一设备或包括检测设备220的设备组(诸如光谱仪210和/或用户设备230)执行。

[0091] 如图6所示,过程600可以包括识别用于检测制造过程是否已经达到稳定状态的SVM分类模型(框610)。例如,检测设备220可以识别用于检测制造过程是否已经达到稳定状态的SVM分类模型。

[0092] 在一些实施方式中,检测设备220可以基于检测设备220存储或可存取的信息来识别SVM分类模型。例如,检测设备220可以基于存储由检测设备220生成的最终的SVM分类模型来识别SVM分类模型,如以上关于过程400所描述的。

[0093] 在一些实施方式中,检测设备220可以在检测设备220接收到(例如,从光谱仪210、用户设备230、基于用户输入等)检测设备220要监测制造过程以确定制造过程何时达到稳定状态的指示时识别SVM分类模型。例如,检测设备220可以从光谱仪210和/或用户设备230接收特定的制造过程将要开始或已经开始的指示,并且可以(例如,自动地)基于接收到的例如当检测设备220被配置为自动监测制造过程以检测制造过程何时达到稳定状态时的指示来识别SVM分类模型。

[0094] 如图6进一步所示,过程600可以包括接收与制造过程相关联的光谱数据(框620)。例如,检测设备220可以接收与制造过程相关联的光谱数据。

[0095] 在一些实施方式中,光谱数据可以包括在制造过程的执行期间由一个或多个光谱仪210测量的光谱。在一些实施方式中,检测设备220可以在制造过程期间实时地或接近实时地接收光谱数据。例如,检测设备220可以相对于光谱仪210获得光谱数据实时或接近实时地接收在制造过程的执行期间由光谱仪210测量的光谱数据。在一些实施方式中,检测设备220可以基于光谱数据和SVM分类模型确定制造过程是否已经达到稳定状态,如下所述。

[0096] 如图6进一步所示,过程600可以包括基于光谱数据和SVM分类模型确定制造过程是否已经达到稳定状态(框630)。例如,检测设备220可以基于光谱数据和SVM分类模型确定制造过程是否已经达到稳定状态。

[0097] 在一些实施方式中,检测设备220可以基于与SVM分类模型相关联的决策边界来确定制造过程是否已达到稳态。例如,基于使用训练光谱数据来识别制造过程的转换时间(如上所述),检测设备220可以生成包括由光谱空间中的超平面表示的决策边界的SVM分类模型。这里,决策边界内的光谱空间中的点表示制造过程处于稳定状态的光谱条件,而决策边界外的点表示制造过程处于非稳定状态的光谱条件。在一些实施方式中,可以在确定与制造过程相关联的转换时间之后基于将SVM分类模型技术应用于训练光谱数据来生成决策边界,如上所述。

[0098] 图7A和图7B是示出与SVM分类模型相关联的简化决策边界的示例图形表示700。为了说明的目的,图7A和图7B所示的决策边界被示出为仅与第一主要分量(PC1)和第二主要分量(PC2)相关联。在实践中,决策边界可以与不同数量的分量(例如,80个变量、120个变量等)相关联。

[0099] 在图7A和图7B中,灰色的点和线表示在制造过程处于非稳定状态的时间(即,从 t_0

到与SVM分类模型相关联的转换时间)处测量的训练光谱数据,而黑色的点和线表示在制造过程处于稳定状态的时间(即,从与SVM分类模型相关联的转换时间到时间 t_e)处测量的训练光谱数据。浅灰色的圆圈表示制造过程处于非稳定状态时的最后一点,以及制造过程处于稳定状态时的第一点。图7A是与制造过程相关联的所有训练光谱数据(例如,从时间 t_0 到时间 t_e)的图形表示,而图7B是由图7A中的虚线矩形指示的空间内的点的特写视图。在图7B中,决策边界由与稳定状态相关联的点(以及与非稳定状态相关联的点的子集)周围的粗线表示。如上所述,图7A和图7B仅作为简化的说明性示例被提供。其他的示例也是可能的并且可以不同于关于图7A和图7B所描述的示例。

[0100] 在一些实施方式中,检测设备220可以基于决策边界(例如,如图7B中所示的决策边界)确定制造过程是否已达到稳定状态。例如,检测设备220可以接收与制造过程相关联的光谱数据,并且可以将光谱数据映射为与决策边界相关联的空间中的点。这里,如果与光谱数据相关联的点位于决策边界之上或之内,则检测设备220可以确定制造过程已经达到稳定状态。或者,如果与光谱数据相关联的点位于决策边界之外,则检测设备220可以确定制造过程尚未达到稳定状态(即,处于非稳定状态)。

[0101] 在一些实施方式中,检测设备220可以生成与确定制造过程是否已经达到稳定状态相关联的置信度量(本文称为决策值)。例如,检测设备220可以基于决策边界和表示光谱数据的点来确定从决策边界到表示光谱数据的点的距离(例如,到决策边界上的最近点的距离)。这里,决策边界内的点可以被分配正(或负)决策值,而决策边界外的点可以被分配负(或正)决策值。在该示例中,具有较高绝对值的决策值(例如,4.0、2.5、-2.5、-4.0等)表示确定制造过程的状态的置信度高于具有较低绝对值的决策值(例如,0.5、0.2、-0.2、-0.5等)的置信度。

[0102] 如上所述,图7A和图7B仅作为说明性示例提供。其他的示例也是可能的并且可以不同于关于图7A和图7B所描述的示例。

[0103] 图8是基于图7A和图7B的决策边界确定的示例决策值的图形表示800。在图8中,负决策值对应于在制造过程期间测量的具有落在决策边界之外的点的光谱数据,而正决策值对应于在制造过程期间测量的具有落在决策边界之内的点的光谱数据。如由图8中的垂直线所示,检测设备220在大致时间步长65处确定第一正决策值。

[0104] 在一些实施方式中,检测设备220可以基于决策值阈值来确定制造过程是否已达到稳定状态。例如,当与决策边界内的点相关联的决策值满足阈值时,检测设备220可以确定制造过程已经达到稳定状态。使用图8作为特定的示例,如果检测设备220被配置为当检测设备220确定大于或等于2.0的正决策值时确定制造过程已经达到稳定状态,则检测设备220可以在大致时间步长75处做出这样的确定。

[0105] 作为另一实例,当表示与连续时间步长的数量相关联的光谱数据的连续决策值的数量满足阈值时,检测设备220可以确定制造过程已经达到稳定状态。使用图8作为特定的示例,如果检测设备220被配置为当检测设备220确定5个连续的正决策值时确定制造过程已经达到稳定状态,则检测设备220可以在大致时间步长69处做出这样的确定。

[0106] 作为另一示例,当连续决策值的阈值数量满足阈值时,检测设备220可以确定制造过程已经达到稳定状态。使用图8作为特定的示例,如果检测设备220被配置为当检测设备220确定大于或等于1.0的3个连续正决策值时确定制造过程已经达到稳定状态,则检测设

备220可以在大致时间步长68处做出这样的确定。

[0107] 作为另一示例,当多个决策值(例如,一系列连续正决策值)的平均值或加权平均值满足阈值时,检测设备220可以确定制造过程已经达到稳定状态。在一些实施方式中,使用决策值阈值可以防止制造过程已经达到稳定状态的错误确定(例如,由于制造过程本质上可以是随机的)。

[0108] 如上所述,图8仅作为说明性的示例提供。其他的示例也是可能的并且可以不同于关于图8所描述的示例。

[0109] 返回至图6,如果制造过程尚未达到稳定状态(框630-否),则过程600可以包括接收与制造过程相关联的附加光谱数据(框620)。例如,检测设备220可以确定制造过程还没有达到稳定状态(例如,制造过程仍处于非稳定状态),并且可以等待接收附加光谱数据(例如,制造过程期间,在下一个时间步长处收集的)。

[0110] 在一些实施方式中,可以以上述方式基于附加光谱数据确定制造过程是否已经达到稳定状态。在一些实施方式中,检测设备220可以继续接收光谱数据并且确定制造过程是否已经达到稳定状态,直到检测设备220确定制造过程已经达到稳定状态为止。

[0111] 如图6进一步所示,如果制造过程已经达到稳定状态(框630-是),则过程600可以包括确定与稳定状态相关联的定量度量(quantitative metric)(框640)。例如,检测设备220可以确定制造过程已经达到稳定状态,并且可以确定与稳定状态相关联的定量度量。

[0112] 定量度量可以包括指示与稳定状态相关联的定量属性(诸如化合物在稳定状态下的组分的浓度、稳定状态下的粒子大小等)的度量。在一些实施方式中,由检测设备220基于光谱数据检测到的稳定状态可以对应于具有特定物理属性(例如粒子大小)的组分化合物的特定组成。因此,可以基于与稳定状态相关联的光谱数据来预测定量度量。

[0113] 例如,在一些实施方式中,检测设备220可以存储或存取回归模型(例如,PLS回归模型、SVR模型),该回归模型接收基于其检测稳定状态的光谱数据作为输入,并且提供与稳定状态相关联的定量度量作为输出。在该示例中,回归模型的输出可以是例如化合物的每个组分的浓度、化合物的特定大小等。

[0114] 在一些实施方式中,检测设备220可以存储或存取回归模型。另外地或可选地,检测设备220可以基于训练光谱数据和训练定量数据(例如,标识与训练光谱数据对应的定量度量的信息)来生成回归模型(在较早的时间)。在一些实施方式中,定量度量的确定是可选的。

[0115] 如图6进一步所示,过程600可以包括提供制造过程已经达到稳定状态的指示、以及与定量度量相关联的信息(框650)。例如,检测设备220可以提供制造过程已经达到稳定状态的指示、以及与定量度量相关联的信息。

[0116] 在一些实施方式中,检测设备220可以将制造过程已经达到稳定状态的指示和/或与定量度量相关联的信息提供给另一设备,例如,用户设备230(例如,使得用户可以被通知制造过程已经达到稳定状态和/或查看与定量度量相关联的信息)。

[0117] 另外地,或可选地,检测设备220可以提供制造过程已经达到稳定状态的指示,以使动作自动地执行。例如,检测设备220可以将该指示提供给与执行制造过程相关联的设备,以使制造过程停止制造过程(例如,停止与稳定状态相关联的混合过程)、启动制造过程的下一个步骤、使得制造过程重新开始(例如,重新开始对新的原料的混合过程)等。

[0118] 尽管图6示出过程600的示例框,但是在一些实施方式中,过程600可以包含与图6中所描绘的那些相比较附加的框、较少的框、不同的框或不同布置的框。另外地或可选地,过程600中的两个或更多的框可以并行执行。

[0119] 本文所描述的实施方式提供了能够执行以下操作的检测设备:生成用于确定制造过程(例如,连续制造过程、批量制造过程等)是否已经达到稳定状态的SVM分类模型,以及使用SVM分类模型并基于与制造过程相关联的多变量光谱数据确定制造过程是否已经达到稳定状态。在一些实施方式中,SVM分类模型可以考虑多个变量(例如,80个变量、120个变量、150个变量等),从而增加SVM分类模型的准确性和/或鲁棒性(例如,相比于单变量技术或PCA技术)。

[0120] 前述公开内容提供了说明和描述,但并非旨在穷举或将实施方式限于所公开的精确形式。按照上述公开内容,修改和变化是可能的,或者可以从实施方式的实践中获得修改和变化。

[0121] 如本文所使用的,术语组件旨在被广义地解释为硬件、固件和/或硬件和软件的组合。

[0122] 本文中结合阈值描述了一些实施方式。如本文所使用的,满足阈值可以是指大于阈值、多于阈值、高于阈值、大于或等于阈值、小于阈值、少于阈值、低于阈值、小于或等于阈值、等于阈值等的值。

[0123] 显而易见的是,本文所描述的系统和/或方法可以以不同形式的硬件、固件或者硬件和软件的组合来实现。用于实施这些系统和/或方法的实际专用控制硬件或软件代码不限于实施方式。因此,此处描述了系统和/或方法的操作和行为而没有参考具体的软件代码-应当理解,软件和硬件可以被设计为基于本文的描述来实现系统和/或方法。

[0124] 尽管特征的特定组合在权利要求中被列举和/或在说明书中被公开,但这些组合不意图限制可能的实施方式的公开。实际上,这些特征中的许多特征可以以未在权利要求中具体列举和/或在说明书中公开的方式组合。尽管下面列出的每个从属权利要求可以直接依赖于仅一项权利要求,但是可能的实施方式的公开包括每个从属权利要求与权利要求集合中的每个其他权利要求的组合。

[0125] 除非明确地如此描述,否则这里的任何元件、动作或指令都不应被解释为关键或必要的。而且,如这里所使用的,冠词“一”和“一个”旨在包括一个或多个项目,并且可以与“一个或多个”互换使用。此外,如这里所使用的,术语“集”旨在包括一个或多个项(例如,相关项、不相关项、相关项和不相关项的组合等),并且可以与“一个或多个”互换使用。当意图表示只有一项时,使用术语“一个”或类似的语言。而且,如本文所使用的,术语“有”、“具有”等旨在是开放式术语。此外,除非另有明确说明,短语“基于”旨在表示“至少部分基于”。

[0126] 本申请还涉及以下方面:

[0127] 1). 一种设备,包括:

[0128] 一个或多个处理器,用于:

[0129] 接收与从非稳定状态转换到稳定状态的制造过程相关联的训练光谱数据;

[0130] 基于所述训练光谱数据生成支持向量机(SVM)分类模型的多次迭代;

[0131] 基于所述SVM分类模型的多次迭代确定与所述制造过程相关联的多个预测的转换时间,

[0132] 所述多个预测的转换时间中的预测的转换时间识别在制造过程期间所述SVM分类模型的对应迭代预测所述制造过程从非稳定态转换到稳定状态的时间;以及

[0133] 基于所述多个预测的转换时间生成与确定所述制造过程是否已经达到稳定状态相关联的最终的SVM分类模型。

[0134] 2).根据1)所述的设备,其中所述一个或多个处理器还用于:

[0135] 接收与所述制造过程相关联的附加光谱数据;以及

[0136] 基于所述最终的SVM分类模型和所述附加光谱数据确定所述制造过程尚未达到稳定状态。

[0137] 3).根据1)所述的设备,其中,所述一个或多个处理器还用于:

[0138] 接收与所述制造过程相关联的附加光谱数据;以及

[0139] 基于所述最终的SVM分类模型和所述附加光谱数据确定所述制造过程已经达到稳定状态。

[0140] 4).根据3)所述的设备,其中,所述一个或多个处理器还用于:

[0141] 提供所述制造过程已达到稳定状态的指示。

[0142] 5).根据3)所述的设备,其中,所述一个或多个处理器还用于:

[0143] 基于确定所述制造过程已经达到稳定状态,确定与所述稳定状态相关联的定量度量;以及

[0144] 提供与所述定量度量相关联的信息。

[0145] 6).根据1)所述的设备,其中,当生成所述SVM分类模型的多次迭代时,所述一个或多个处理器用于:

[0146] 基于所述训练光谱数据创建非稳定状态数据集和稳定状态数据集;以及

[0147] 基于所述非稳定状态数据集和所述稳定状态数据集,生成SVM分类模型的多次迭代中的迭代。

[0148] 7).根据6)所述的设备,其中,在确定所述多个预测的转换时间时,所述一个或多个处理器用于:

[0149] 基于所述训练光谱数据和所述SVM分类模型的迭代确定与所述SVM分类模型的迭代相关联的预测的转换时间,

[0150] 预测的转换时间是所述多个预测的转换时间中的一个。

[0151] 8).根据1)所述的设备,其中所述一个或多个处理器还用于:

[0152] 在生成所述SVM分类模型的多次迭代之前,基于所述训练光谱数据执行降维。

[0153] 9).一种存储指令的非暂态计算机可读介质,所述指令包括:

[0154] 一个或多个指令,当由一个或多个处理器运行时,使得所述一个或多个处理器:

[0155] 接收与从非稳定状态转换到稳定状态的制造过程的第一执行相关联的训练光谱数据;

[0156] 基于所述训练光谱数据迭代地生成与确定所述制造过程的另一执行是否已经从非稳定状态转换到稳定状态相关联的支持向量机(SVM)分类模型;

[0157] 接收与所述制造过程的第二执行相关联的附加光谱数据;以及

[0158] 基于所述SVM分类模型和所述附加光谱数据确定所述制造过程的第二执行是否已经从非稳定状态转换到稳定状态。

[0159] 10).根据9)所述的非暂态计算机可读介质,其中,使得所述一个或多个处理器确定所述制造过程的所述第二执行是否已经从非稳定状态转换到稳定状态的所述一个或多个指令使得所述一个或多个处理器:

[0160] 确定所述制造过程的第二执行已经从非稳定状态转换到稳定状态;以及

[0161] 提供所述制造过程的第二执行已经从非稳定状态转换到稳定状态的指示。

[0162] 11).根据10)所述的非暂态计算机可读介质,其中,当由所述一个或多个处理器运行时,所述一个或多个指令还使得所述一个或多个处理器:

[0163] 基于确定所述制造过程的所述第二执行已经从非稳定状态转换到稳定状态,确定与所述制造过程的所述第二执行相关联的定量度量;以及

[0164] 提供与所述定量度量相关联的信息。

[0165] 12).根据11)所述的非暂态计算机可读介质,其中,在由所述一个或多个处理器运行时,所述一个或多个指令还使得所述一个或多个处理器:

[0166] 识别与所述定量度量相关联的回归模型;以及

[0167] 其中使得所述一个或多个处理器确定所述定量度量的所述一个或多个指令使得所述一个或多个处理器:

[0168] 基于所述回归模型确定所述定量度量。

[0169] 13).根据9)所述的非暂态计算机可读介质,其中,使得所述一个或多个处理器迭代地生成所述SVM分类模型的所述一个或多个指令使得所述一个或多个处理器:

[0170] 基于所述训练光谱数据创建第一集非稳定状态数据和第一集稳定状态数据;

[0171] 基于所述第一集非稳定状态数据和所述第一集稳定状态数据生成所述SVM分类模型的第一次迭代;

[0172] 基于所述训练光谱数据创建第二集非稳定状态数据和第二集稳定状态数据;以及

[0173] 基于所述第二集非稳定状态数据和所述第二集稳定状态数据生成所述SVM分类模型的第二次迭代。

[0174] 14).根据13)所述的非暂态计算机可读介质,其中,当由所述一个或多个处理器运行时,所述一个或多个指令还使得所述一个或多个处理器:

[0175] 基于所述SVM分类模型的第一次迭代确定与所述SVM分类模型的第一次迭代相关联的预测的转换时间;以及

[0176] 其中,使得所述一个或多个处理器创建所述第二集非稳定状态数据的所述一个或多个指令使得所述一个或多个处理器:

[0177] 基于与所述SVM分类模型的第一次迭代相关联的预测的转换时间创建第二集非稳定状态数据。

[0178] 15).一种方法,包括:

[0179] 由设备接收与从非稳定状态转换到稳定状态的制造过程的第一执行相关联的第一光谱数据;

[0180] 由所述设备并基于所述第一光谱数据生成支持向量机(SVM)分类模型的多次迭代;

[0181] 由所述设备并且基于所述SVM分类模型的多次迭代确定与所述制造过程的第一执行相关联的多个预测的转换时间;

[0182] 由所述设备并且基于所述多个预测的转换时间生成与确定所述制造过程的另一执行是否已经达到稳定状态相关联的最终的SVM分类模型;

[0183] 由所述设备接收与所述制造过程的第二执行相关联的第二光谱数据;以及

[0184] 由所述设备基于所述最终的SVM分类模型和所述第二光谱数据确定所述制造过程的第二执行是否已经达到稳定状态。

[0185] 16). 根据15)所述的方法,其中,确定所述制造过程的第二执行是否已经达到稳定状态包括:

[0186] 确定所述制造过程的第二执行尚未达到稳定状态。

[0187] 17). 根据15)所述的方法,其中,确定所述制造过程的第二执行是否已经达到稳定状态包括:

[0188] 确定所述制造过程的第二执行已经达到稳定状态。

[0189] 18). 根据17)所述的方法,还包括:

[0190] 提供所述制造过程已经达到稳定状态的指示,

[0191] 其中,提供所述指示使得与所述制造过程相关联的动作被自动执行。

[0192] 19). 根据17)所述的方法,还包括:

[0193] 基于与所述制造过程相关联的回归模型确定与稳定状态相关联的定量度量;以及

[0194] 提供与所述定量度量相关联的信息。

[0195] 20). 根据15)所述的方法,还包括:

[0196] 在生成所述SVM分类模型的多次迭代之前,执行与所述第一光谱数据相关联的降维。

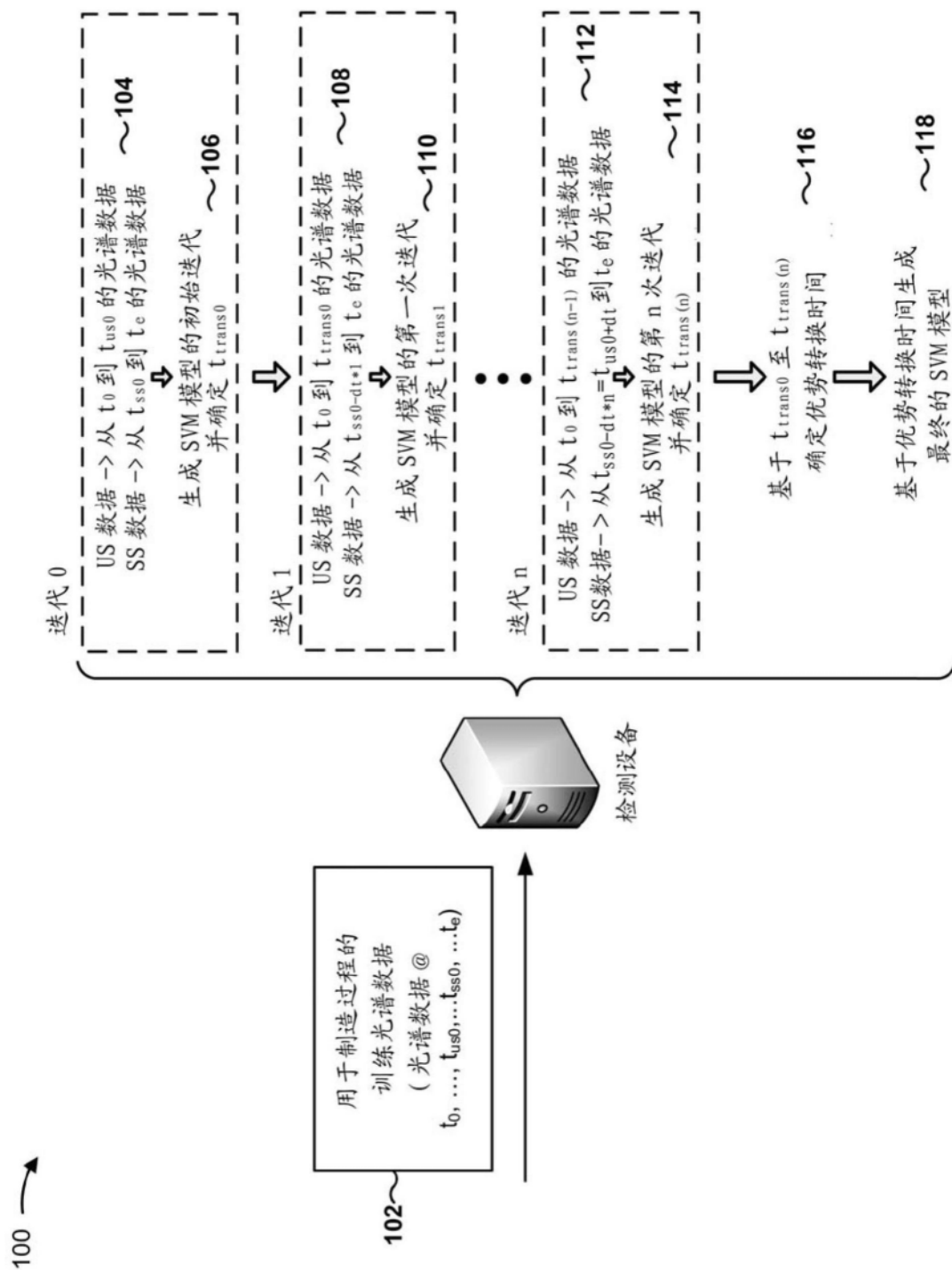


图1A

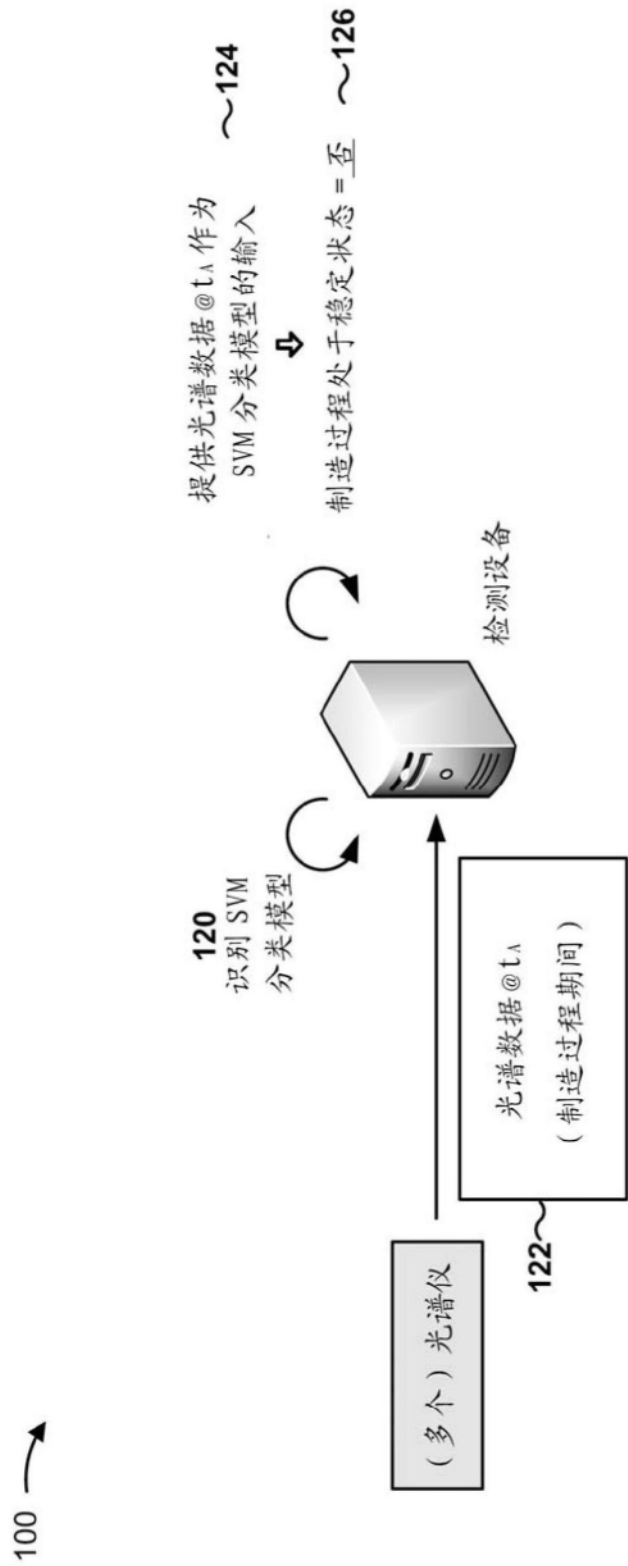


图1B

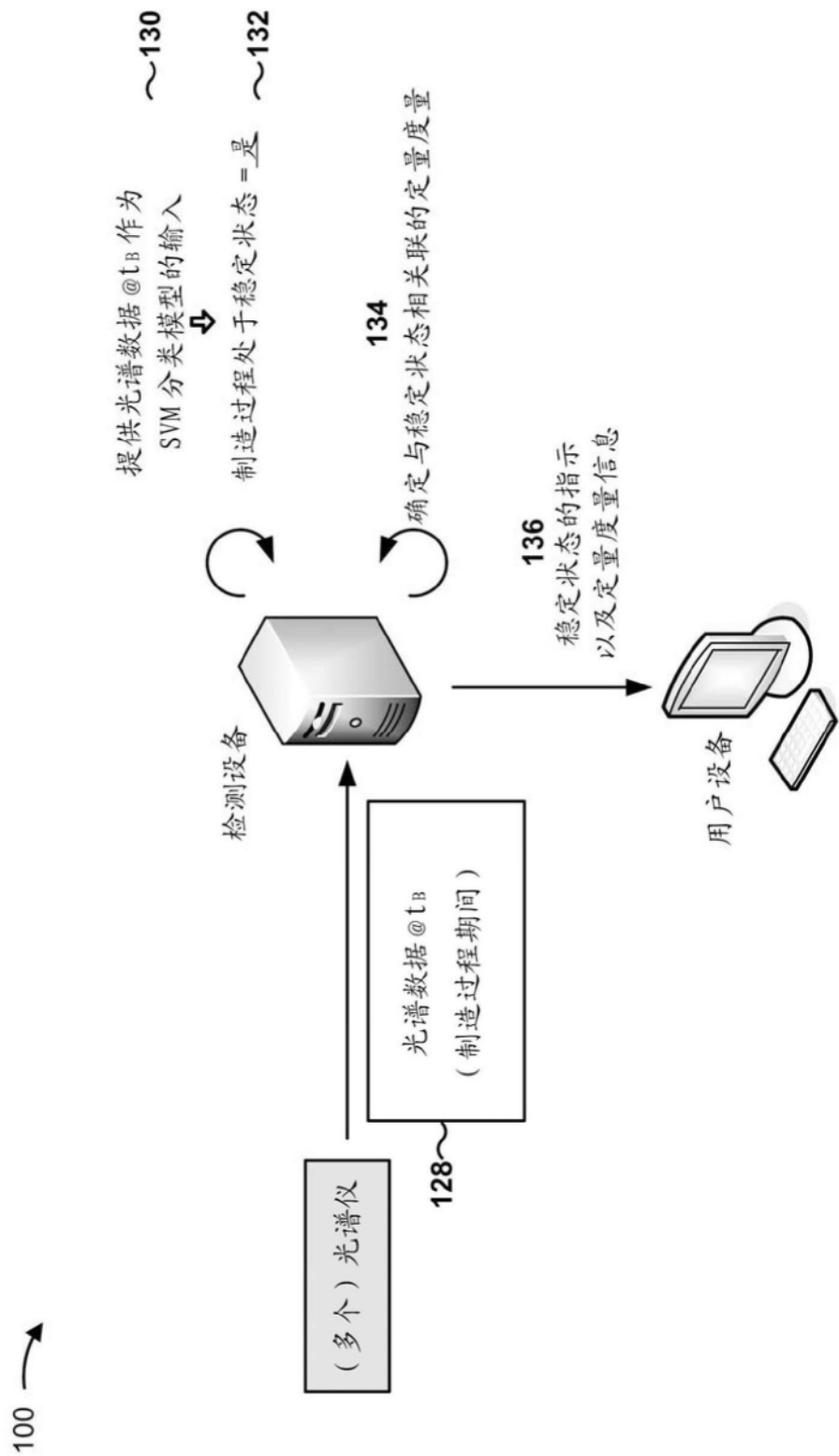


图1C

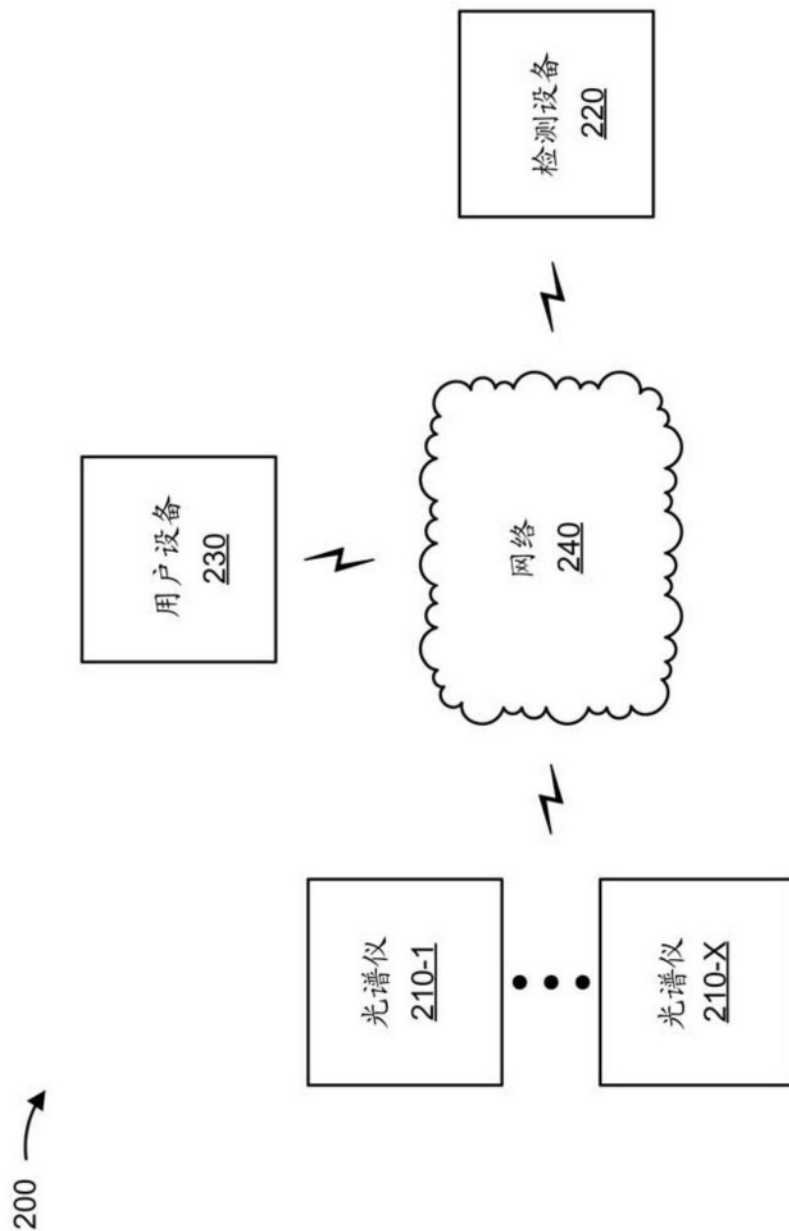


图2

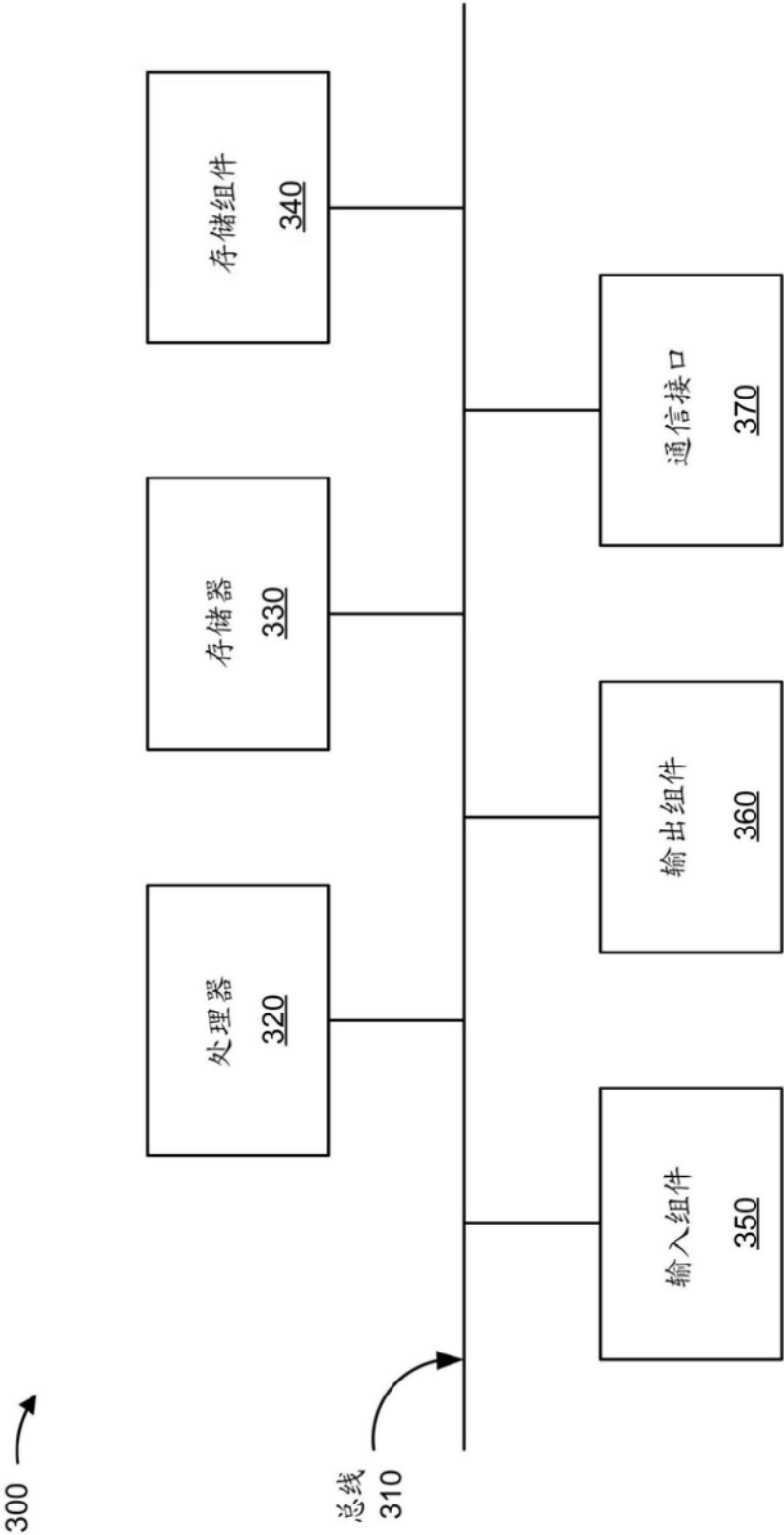


图3

400 →

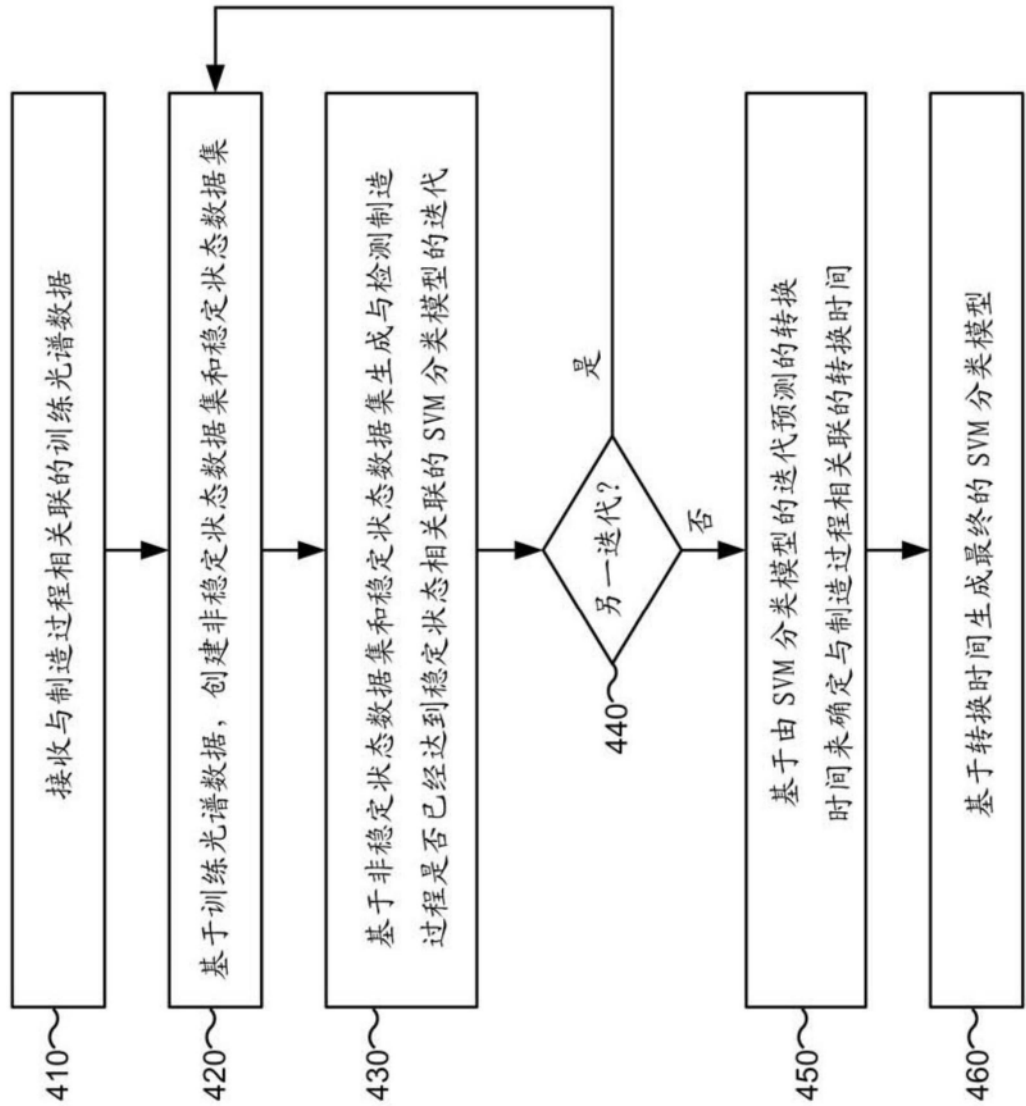


图4

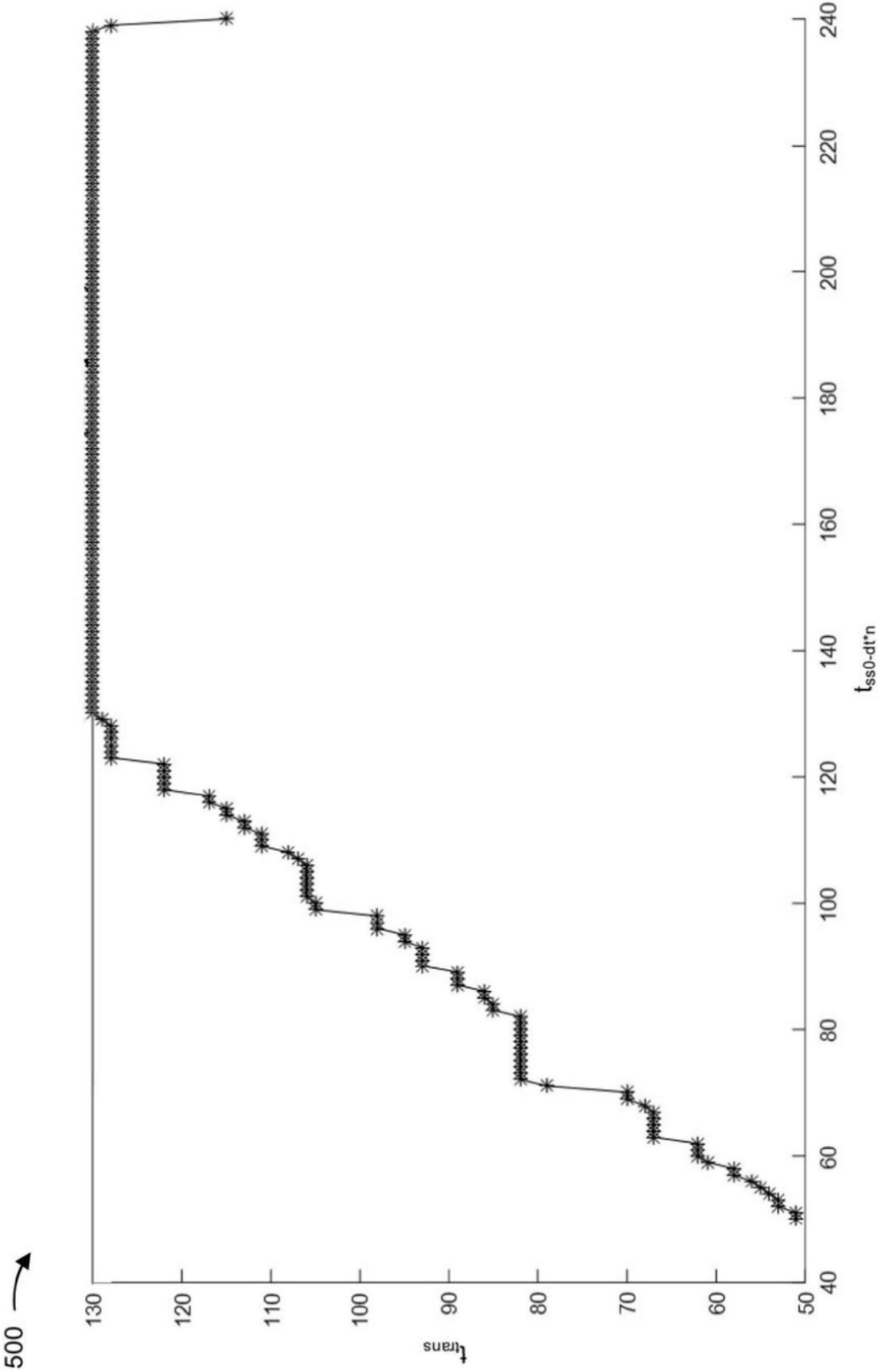


图5A

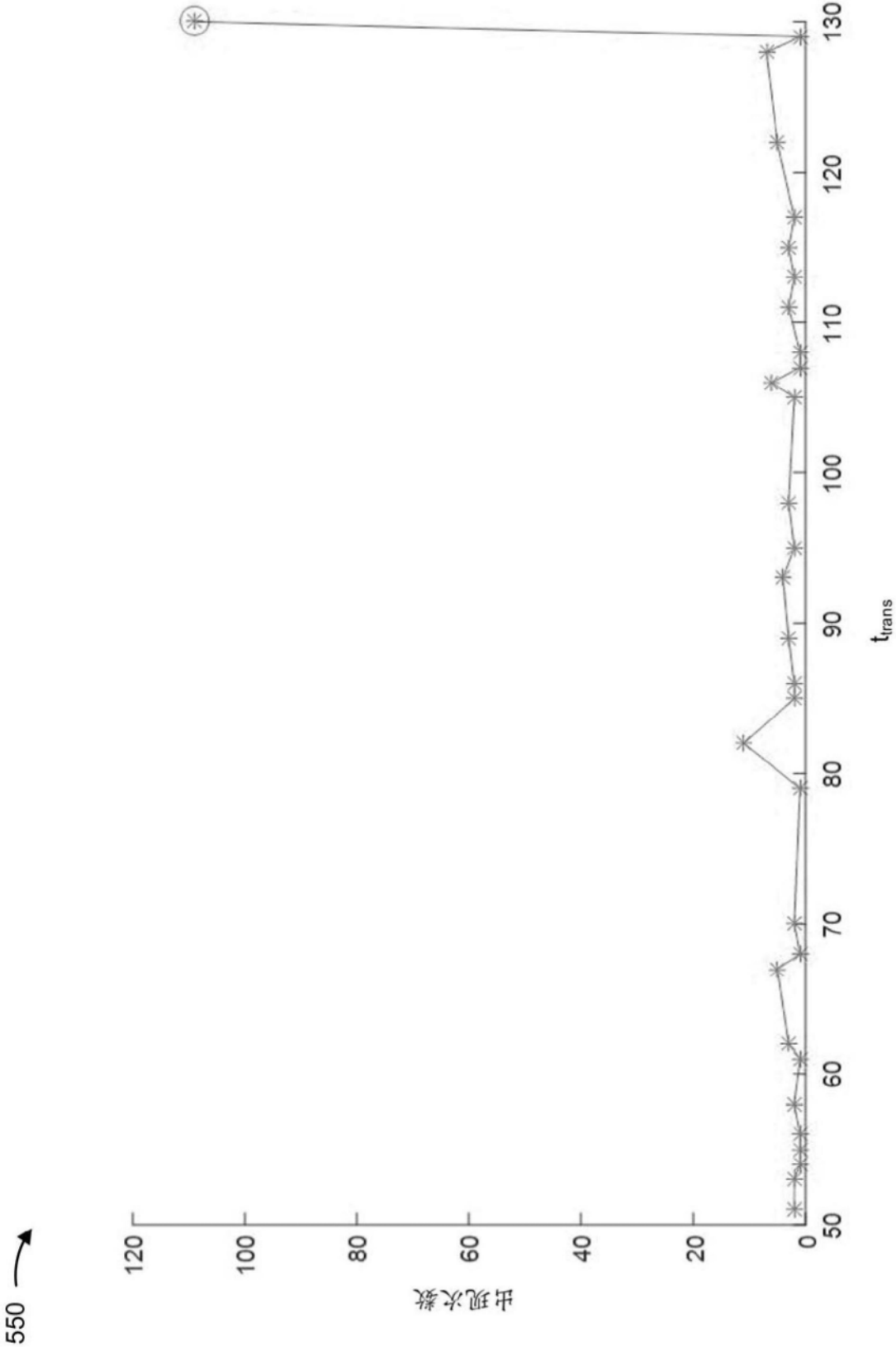


图5B

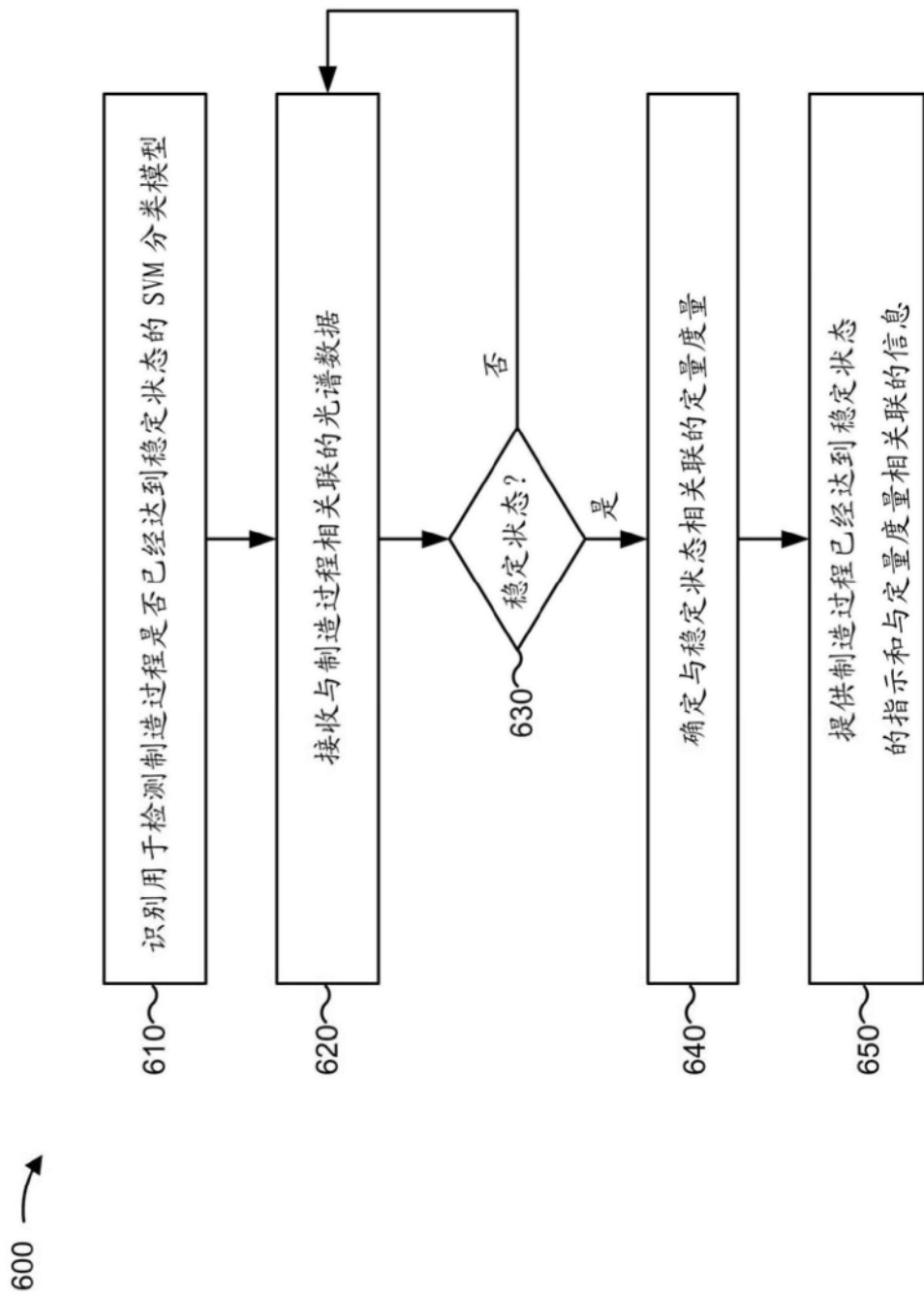


图6

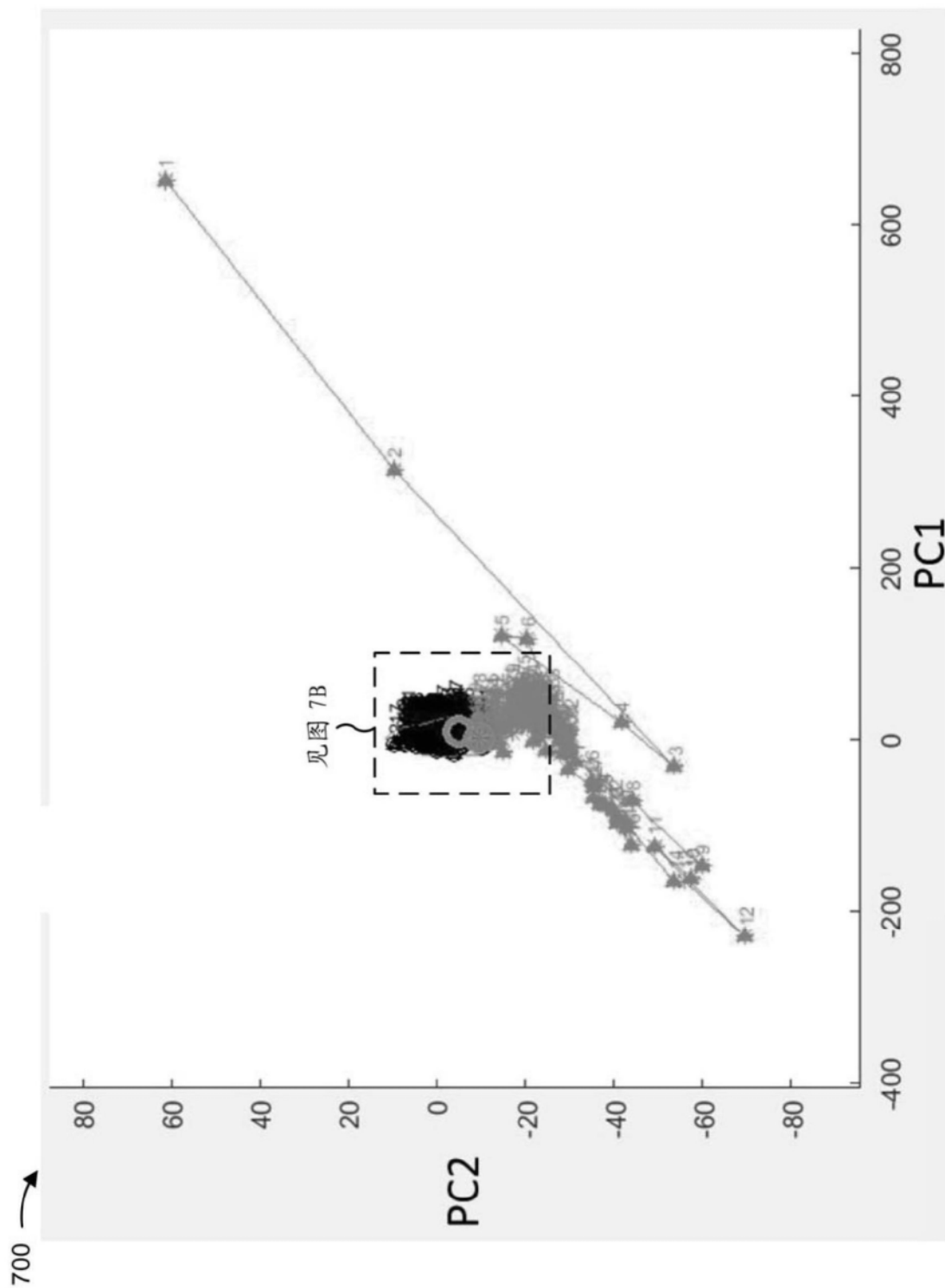


图7A

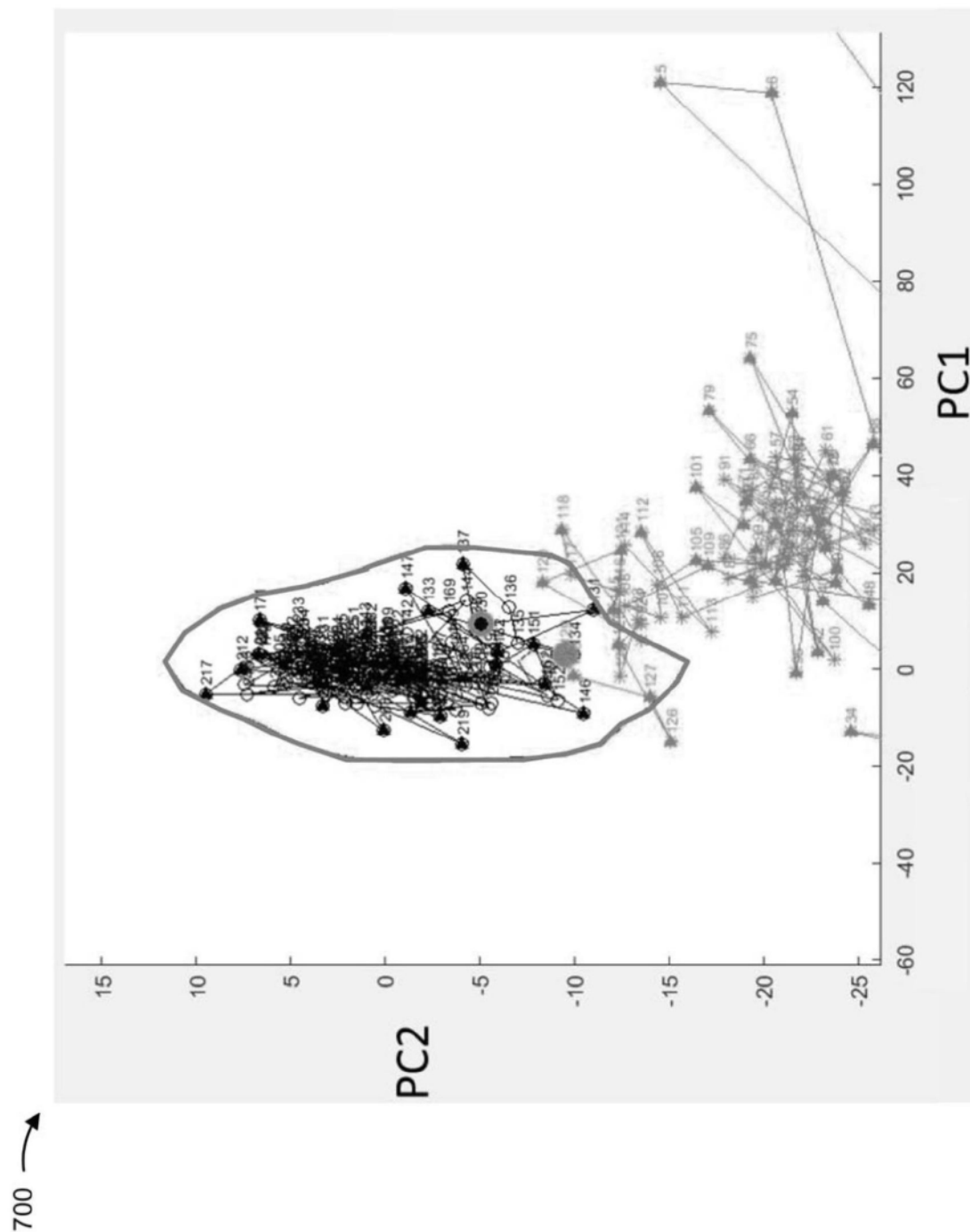


图7B

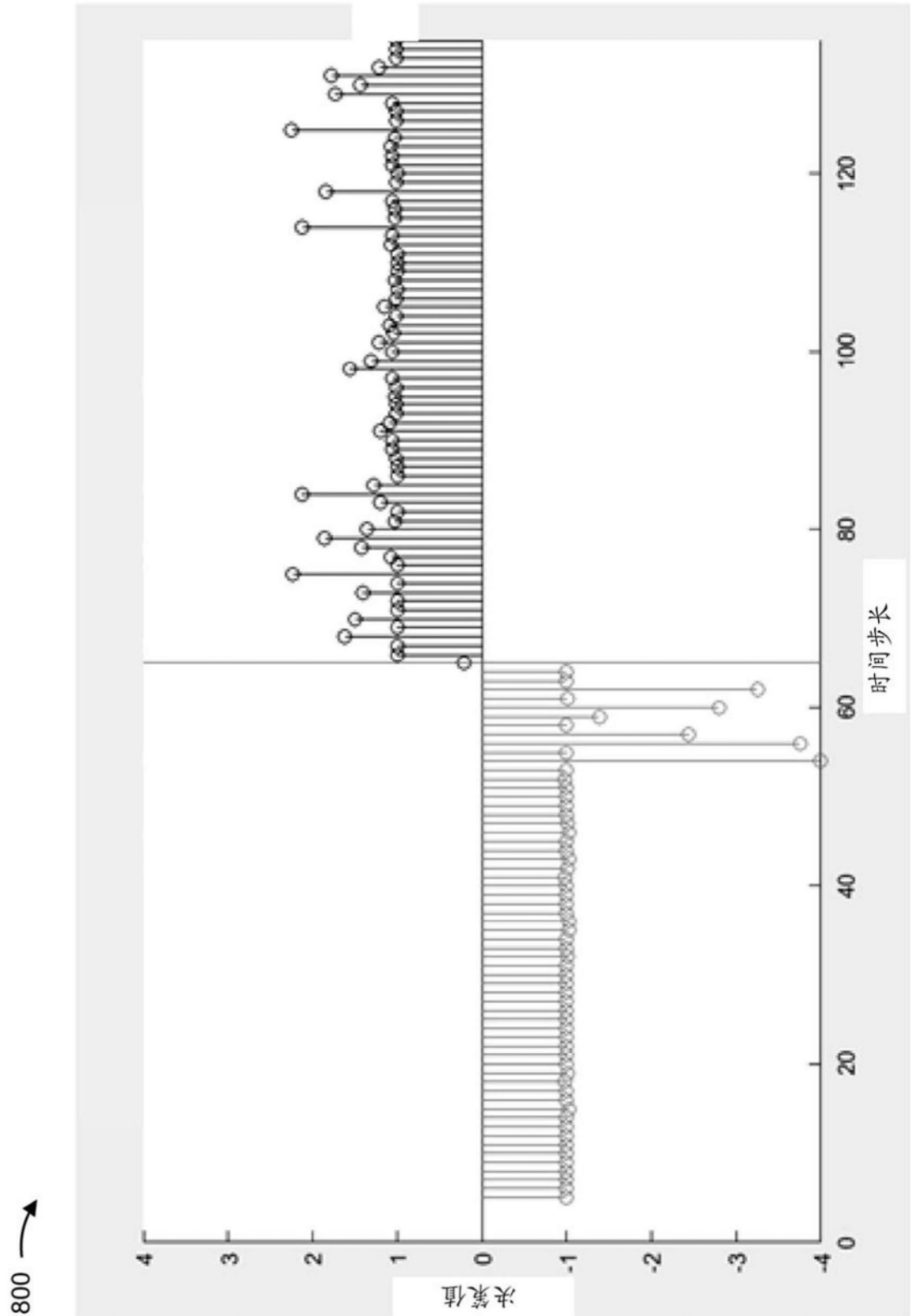


图8