

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B2)

(11) 特許番号

特許第6968745号
(P6968745)

(45) 発行日 令和3年11月17日 (2021. 11. 17)

(24) 登録日 令和3年10月29日 (2021. 10. 29)

(51) Int. Cl.	F I
GO 1 N 21/35 (2014. 01)	GO 1 N 21/35
GO 6 N 20/00 (2019. 01)	GO 6 N 20/00 1 3 0

請求項の数 20 外国語出願 (全 27 頁)

(21) 出願番号	特願2018-78847 (P2018-78847)	(73) 特許権者	502151820
(22) 出願日	平成30年4月17日 (2018. 4. 17)		ヴァイアヴィ・ソリューションズ・インコーポレイテッド
(65) 公開番号	特開2018-189638 (P2018-189638A)		Viavi Solutions Inc.
(43) 公開日	平成30年11月29日 (2018. 11. 29)		.
審査請求日	令和3年2月5日 (2021. 2. 5)		アメリカ合衆国 カリフォルニア州 9 5
(31) 優先権主張番号	15/586, 678		002 サンノゼ アメリカ センター
(32) 優先日	平成29年5月4日 (2017. 5. 4)		ドライブ 6001
(33) 優先権主張国・地域又は機関	米国 (US)	(74) 代理人	100147485
			弁理士 杉村 憲司
早期審査対象出願		(74) 代理人	230118913
			弁護士 杉村 光嗣
		(74) 代理人	100169823
			弁理士 吉澤 雄郎
		最終頁に続く	

(54) 【発明の名称】 近赤外分光法及び機械学習技術による、製造工程におけるエンドポイント検出

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

1 つ以上のプロセッサを具えた装置であって、該プロセッサは、
非定常状態から定常状態に遷移する製造工程に関連する学習スペクトルデータを受信し

、
定常状態データの集合に関連する時刻のうち最も早い時刻が、前記製造工程が前記非定常状態であることを知った時刻からしきい値量の時間だけ異なるまで、前記学習スペクトルデータに基づいて、サポートベクターマシン (SVM) 分類モデルの複数回の反復を生成し、

前記 SVM 分類モデルの前記複数回の反復に基づいて、前記製造工程に関連する複数の
予測遷移時刻を決定し、

前記複数の予測遷移時刻に基づいて、前記製造工程が前記定常状態に達したか否かを判定することに関連する最終的な SVM 分類モデルを生成し、

前記複数の予測遷移時刻のうちの 1 つの遷移時刻は、前記製造工程中に、前記複数回の反復のうちの 1 回の反復が、前記製造工程が前記非定常状態から前記定常状態に遷移したことを予測する時刻を識別する、装置。

【請求項 2】

前記 1 つ以上のプロセッサが、さらに、

前記製造工程に関連する追加的スペクトルデータを受信し、

前記最終的な SVM 分類モデル及び前記追加的スペクトルデータに基づいて、前記製造

10

20

工程が前記定常状態に達していないものと判定する、請求項 1 に記載の装置。

【請求項 3】

前記 1 つ以上のプロセッサが、さらに、

前記製造工程に関連する追加的スペクトルデータを受信し、

前記最終的な SVM 分類モデル及び前記追加的スペクトルデータに基づいて、前記製造工程が前記定常状態に達しているものと判定する、請求項 1 に記載の装置。

【請求項 4】

前記 1 つ以上のプロセッサが、さらに、

前記製造工程が前記定常状態に達したことの指標を提供する、請求項 3 に記載の装置。

【請求項 5】

前記 1 つ以上のプロセッサが、さらに、

前記製造工程が前記定常状態に達したものと判定したことに基づいて、前記定常状態に関連する定量的測定基準を定め、

前記定量的測定基準に関連する情報を提供する、請求項 3 に記載の装置。

【請求項 6】

前記 1 つ以上のプロセッサが、前記 SVM 分類モデルの前記複数回の反復を生成する際に、

前記学習スペクトルデータに基づいて、非定常状態データの集合及び定常状態データの集合を作成し、

前記 1 回の反復を、前記非定常状態データの集合及び前記定常状態データの集合に基づいて生成する、請求項 1 に記載の装置。

【請求項 7】

前記 1 つ以上のプロセッサが、さらに、

前記学習スペクトルデータに基づいて、前記 SVM 分類モデルの前記複数回の反復を生成する前に次元縮小を実行する、請求項 1 に記載の装置。

【請求項 8】

命令を記憶する非一時的コンピュータ可読媒体であって、該命令は、

1 つ以上のプロセッサによって実行されると、該 1 つ以上のプロセッサに、

非定常状態から定常状態に遷移する製造工程の第 1 実行部分に関連する学習スペクトルデータを受信させ、

定常状態データの集合に関連する時刻のうち最も早い時刻が、前記製造工程の前記第 1 実行部分が前記非定常状態であることを知った時刻からしきい値量の時間だけ異なるまで、前記学習スペクトルデータに基づいて、サポートベクターマシン (SVM) 分類モデルの複数回の反復を決定させ、

前記 SVM 分類モデルの前記複数回の反復に基づいて、前記製造工程の他の実行部分が前記非定常状態から前記定常状態に遷移したか否かを判定することに関連する最終的なサポートベクターマシン (SVM) 分類モデルを生成させ、

前記製造工程の第 2 実行部分に関連する追加的スペクトルデータを受信させ、

前記 SVM 分類モデル及び前記追加的スペクトルデータに基づいて、前記製造工程の前記第 2 実行部分が前記非定常状態から前記定常状態に遷移したか否かを判定させるための 1 つ以上の命令を含む、非一時的コンピュータ可読媒体。

【請求項 9】

前記 1 つ以上のプロセッサに、前記製造工程の前記第 2 実行部分が前記非定常状態から前記定常状態に遷移したか否かを判定させるための前記 1 つ以上の命令が、前記 1 つ以上のプロセッサに、

前記製造工程の前記第 2 実行部分が前記非定常状態から前記定常状態に遷移したものと判定させ、

前記製造工程の前記第 2 実行部分が前記非定常状態から前記定常状態に遷移したことの指標を提供させる、

請求項 8 に記載の非一時的コンピュータ可読媒体。

10

20

30

40

50

【請求項 10】

前記 1 つ以上の命令が、前記 1 つ以上のプロセッサによって実行されると、前記 1 つ以上のプロセッサに、さらに、

前記製造工程の前記第 2 実行部分が前記非定常状態から前記定常状態に遷移したことに基づいて、前記製造工程の前記第 2 実行部分に関連する定量的測定基準を定めさせ、

前記定量的測定基準に関連する情報を提供させる、
請求項 9 に記載の非一時的コンピュータ可読媒体。

【請求項 11】

前記 1 つ以上の命令が、前記 1 つ以上のプロセッサによって実行されると、前記 1 つ以上のプロセッサに、さらに、

前記定量的測定基準に関連する回帰モデルを識別させ、

前記 1 つ以上のプロセッサに前記定量的測定基準を定めさせるための前記 1 つ以上の命令が、前記 1 つ以上のプロセッサに、

前記回帰モデルに基づいて前記定量的測定基準を定めさせる、
請求項 10 に記載の非一時的コンピュータ可読媒体。

【請求項 12】

前記 1 つ以上の命令が、前記 1 つ以上のプロセッサに、さらに、

前記学習スペクトルデータに基づいて、非定常状態データの第 1 集合及び定常状態データの第 1 集合を生成させ、

前記非定常状態データの第 1 集合及び前記定常状態データの第 1 集合に基づいて、前記 SVM 分類モデルの 1 回目の反復を生成させ、

前記学習スペクトルデータに基づいて、前記非定常状態データの第 2 集合及び前記定常状態データの第 2 集合を作成させ、

前記非定常状態データの第 2 集合及び前記定常状態データの第 2 集合に基づいて、前記 SVM 分類モデルの 2 回目の反復を生成させる、
請求項 8 に記載の非一時的コンピュータ可読媒体。

【請求項 13】

前記 1 つ以上の命令が、前記 1 つ以上のプロセッサによって実行されると、前記 1 つ以上のプロセッサに、さらに、

前記 SVM 分類モデルの前記 1 回目の反復に基づいて、前記 SVM 分類モデルの前記 1 回目の反復に関連する予測遷移時刻を決定させ、

前記 1 つ以上のプロセッサに前記非定常状態データの第 2 集合を作成させるための前記 1 つ以上の命令が、前記 1 つ以上のプロセッサに、

前記 SVM 分類モデルの前記 1 回目の反復に関連する前記予測遷移時刻に基づいて、前記非定常状態データの前記第 2 集合を作成させる、
請求項 12 に記載の非一時的コンピュータ可読媒体。

【請求項 14】

装置によって、非定常状態から定常状態に遷移する製造工程の第 1 実行部分に関連する第 1 スペクトルデータを受信するステップと、

前記装置によって、第 1 スペクトルデータに基づいて、サポートベクターマシン (SVM) 分類モデルの複数回の反復を生成するステップと、

定常状態データの集合に関連する時刻のうち最も早い時刻が、前記製造工程が前記非定常状態であることを知った時刻からしきい値量の時間だけ異なるまで、前記装置によって、前記 SVM 分類モデルの前記複数回の反復に基づいて、前記製造工程の前記第 1 実行部分に関連する複数の予測遷移時刻を決定するステップと、

前記装置によって、前記複数の予測遷移時刻に基づいて、前記製造工程の他の実行部分が前記定常状態に達したか否かを判定することに関連する最終的な SVM 分類モデルを生成するステップと、

前記装置によって、前記製造工程の第 2 実行部分に関連する第 2 スペクトルデータを受信するステップと、

10

20

30

40

50

前記装置によって、前記製造工程の前記第 2 実行部分が前記定常状態に達したか否かを、前記最終的な S V M 分類モデル及び前記第 2 スペクトルデータに基づいて判定するステップとを含む方法。

【請求項 1 5】

前記製造工程の前記第 2 実行部分が前記定常状態に達したか否かを判定するステップが、
前記製造工程の前記第 2 実行部分が前記定常状態に達していないものと判定することを含む、請求項 1 4 に記載の方法。

【請求項 1 6】

前記製造工程の前記第 2 実行部分が前記定常状態に達したか否かを判定するステップが、
前記製造工程の前記第 2 実行部分が前記定常状態に達したものと判定することを含む、請求項 1 4 に記載の方法。

【請求項 1 7】

前記製造工程が前記定常状態に達したことの指標を提供するステップをさらに含み、
前記指標を提供するステップが、前記製造工程に関連する動作を自動的に実行させる、請求項 1 6 に記載の方法。

【請求項 1 8】

前記製造工程に関連する回帰モデルに基づいて、前記定常状態に関連する定量的測定基準を定めるステップと、
前記定量的測定基準に関連する情報を提供するステップと
をさらに含む、請求項 1 6 に記載の方法。

【請求項 1 9】

前記 S V M 分類モデルの前記複数回の反復を生成する前に、前記第 1 スペクトルデータに関連する次元縮小を実行するステップをさらに含む、請求項 1 4 に記載の方法。

【請求項 2 0】

前記 1 つ以上のプロセッサが、さらに、
前記複数の予測遷移時刻に基づいて主要遷移時刻を決定し、
前記最終的な S V M 分類モデルを、前記主要遷移時刻を決定したことに基づいて生成する、請求項 1 に記載の装置。

【発明の詳細な説明】

【背景技術】

【0 0 0 1】

製造工程（例えば、連続製造工程、バッチ製造工程）を実現することの一部として、工程分析技術（P A T : process analytical technology）システムを利用して、製造工程の監視及び制御を可能にするリアルタイム・データまたは準リアルタイム・データ（例えば、スペクトルデータ）を生成することができる。連続製造工程は、原材料をシステム内に投入して、最終製品（例えば医薬品）をシステムから連続様式で送り出すことができる。換言すれば、連続製造工程では、製造工程の個別ステップが、（例えば、バッチ製造工程のような一連の離散的ステップではなく）単一の統合された製造工程に変換される。

【発明の概要】

【課題を解決するための手段】

【0 0 0 2】

一部の可能な実現によれば、装置が 1 つ以上のプロセッサを含んで：非定常状態から定常状態に遷移する製造工程に関連する学習スペクトルデータを受信し；学習スペクトルデータに基づいて、サポートベクターマシン（S V M : support vector machine）分類モデルの複数回の反復を生成し；S V M 分類モデルの複数回の反復に基づいて、製造工程に関連する複数の予測遷移時刻を決定し；これらの予測遷移時刻のうち 1 つの遷移時刻は、製

造工程中に、SVM分類モデルの対応する反復回が、製造工程が非定常状態から定常状態に遷移したことを予測する時刻を識別することができ；複数の予測した遷移時刻に基づいて、製造工程が定常状態に達したか否かを判定することに関連する最終的な分類モデルを生成する。

【0003】

一部の可能な実現によれば、非一時的コンピュータ可読媒体が1つ以上の命令を記憶することができ、これらの命令は、1つ以上のプロセッサによって実行されると、これらの1つ以上のプロセッサに：非定常状態から定常状態に遷移する製造工程の第1実行部分に関連する学習スペクトルデータを受信させ；この学習スペクトルデータに基づいて、製造工程の他の実行部分が非定常状態から定常状態に遷移したか否かを判定することに関連するSVM分類モデルを反復的に生成させ；製造工程の第2実行部分に関連する追加的スペクトルデータを受信させ；SVM分類モデル及び追加的スペクトルデータに基づいて、製造工程の第2実行部分が非定常状態から定常状態に遷移したか否かを判定させる。

10

【0004】

一部の可能な実現によれば、方法が：装置によって、非定常状態から定常状態に遷移する製造工程の第1実行部分に関連する第1スペクトルデータを受信するステップと；この装置によって、第1スペクトルデータに基づいて、SVM分類モデルの複数回の反復を生成するステップと；上記装置によって、SVM分類モデルの複数回の反復に基づいて、製造工程の第1実行部分に関連する複数の予測遷移時刻を決定するステップと；上記装置によって、複数の予測遷移時刻に基づいて、製造工程の他の実行部分が定常状態に達したか否かを判定することに関連する最終的なSVM分類モデルを生成するステップと；上記装置によって、製造工程の第2実行部分に関連する第2スペクトルデータを受信するステップと；上記装置によって、製造工程の第2実行部分が定常状態に達したか否かを、最終的なSVM分類モデル及び第2スペクトルデータに基づいて判定するステップとを含むことができる。

20

【図面の簡単な説明】

【0005】

【図1A】本明細書中に説明する実現例の概要を示す図である。

【図1B】本明細書中に説明する実現例の概要を示す図である。

【図1C】本明細書中に説明する実現例の概要を示す図である。

30

【図2】本明細書中に説明するシステム及び/または方法を実現することができる環境の例を示す図である。

【図3】図2の1つ以上の装置の構成要素の例を示す図である。

【図4】製造工程が定常状態に達した時点を検出するためのSVM分類モデルを生成するためのプロセスの例のフローチャートである。

【図5A】製造工程に関連するSVM分類モデルの反復によって予測した遷移時刻に基づいて、製造工程の遷移時刻を決定することに関連するグラフ表現の例を示す図である。

【図5B】製造工程に関連するSVM分類モデルの反復によって予測した遷移時刻に基づいて、製造工程の遷移時刻を決定することに関連するグラフ表現の例を示す図である。

【図6】スペクトルデータに基づいて、SVM分類モデルを用いて、製造工程が定常状態に達したか否かを判定するためのプロセスの例のフローチャートである。

40

【図7A】SVM分類モデルに関連する簡略化した決定境界を例示するグラフ表現の例である。

【図7B】SVM分類モデルに関連する簡略化した決定境界を例示するグラフ表現の例である。

【図8】図7A及び7Bの決定境界に基づいて決定される判定値の例のグラフ表現である。

【発明を実施するための形態】

【0006】

詳細な説明

50

以下の実現例の詳細な説明は、添付した図面を参照する。異なる図面中では、同じ参照番号が同一または同様の要素を識別することがある。

【0007】

製造工程（例えば、医薬品を製造するための連続製造工程またはバッチ製造工程）が、非定常状態（例えば、材料及び／または化合物の性質が時間と共に変化する状態）から定常状態（例えば、材料及び／または化合物の性質が経時的にほぼ一定のままである状態）への遷移のような1つ以上の状態遷移を含むことができる。例えば、医薬品を製造する製造工程に含まれる混合工程が、化合物のスペクトル特性が（例えば、混合工程の開始時における）非定常状態から（例えば、混合工程が完了していることを示す）定常状態に遷移する遷移を含むことができる。

10

【0008】

従って、効率を改善し、及び／または製造工程を最適化するためには、製造工程を監視して、製造工程が定常状態に達した時点（例えば、リアルタイムまたは準リアルタイムで）特定すべきである。製造工程の状態を検出するための可能な技術は、全スペクトル強度のような製造工程に関連する単一変数に基づいて製造工程の状態を検出する単変量技術を用いるモデルである。製造工程の状態を検出するための他の可能な技術は、主成分分析（PCA：principle component analysis）技術を用いて一組の変数（即ち、主成分）を識別し、これら一組の変数を監視することに基づいて、製造工程の状態を検出し、製造工程が定常状態に達した時点を検出するモデルである。しかし、一部の場合には、製造工程中に測定されるデータが多変量データ（例えば、何百もの変数に関連するデータを含む

20

【0009】

本明細書中に説明する実現は、製造工程（例えば、連続製造工程、バッチ製造工程、等）が定常状態に達したか否かを判定するためのサポートベクターマシン（SVM）分類モデルを生成し、このSVM分類モデルを用いて、製造工程に関連する多変量スペクトルデータに基づいて、製造工程が定常状態に達したか否かを判定することができる検出装置を提供する。一部の實現では、SVM分類モデルが、多数の変数（例えば、80変数、120変数、150変数、等）を考慮に入れ、これにより、SVMモデルの精度及び／またはロバスト性を（例えば、上述した技術に比べて）向上させることができる。

30

【0010】

図1A～1Cは、本明細書中に説明する実現例100の概要の図である。図1Aに参照番号102で示すように、検出装置が製造工程に関連する学習スペクトルデータを受信することができる。学習スペクトルデータ（時として第1スペクトルデータと称される）は、製造工程に関連するスペクトルデータを含むことができ、これらのデータに基づいて、製造工程が定常状態に達したか否かを検出することに関連する、サポートベクターマシン（SVM）分類モデルの反復を生成することができる。例えば、学習スペクトルデータは、製造工程の実行中に分光計（スペクトロメーター）によって測定したスペクトル（例えば、NIRスペクトルのような多変量時系列データ）を含むことができる。製造工程において学習スペクトルデータを収集する期間中の実行部分は、製造工程の第1実行部分と称することができる。

40

【0011】

図に示すように、学習スペクトルデータは、製造工程の開始時（時刻 t_0 ）に測定したスペクトルデータ、製造工程が非定常状態であることを知った時点（時刻 t_{us0} ）に測定したスペクトルデータ、製造工程が定常状態であることを知った時点（時刻 t_{ss0} ）に測定したスペクトルデータ、製造工程の終了時（時刻 t_e ）に測定したスペクトルデータ、及び時刻 t_0 と時刻 t_e との間の製造工程の状態が未知である時点に測定したスペクトルデータを含むことができる。

50

【 0 0 1 2 】

参照番号 1 0 4 ~ 1 1 6 で示すように、検出装置は、学習スペクトルデータに基づいて S V M 分類モデルの反復を生成することができる。例えば、参照番号 1 0 4 で示すように、S V M 分類モデルの初期反復（反復 0）を生成するために、検出装置は、学習スペクトルデータに基づいて非定常状態データの初期集合（例えば、時刻 t_0 から時刻 t_{us0} までに測定したスペクトルデータを含む）及び定常状態データの初期集合（例えば、時刻 t_{ss0} から時刻 t_e までに測定したスペクトルデータを含む）を作成することができる。

【 0 0 1 3 】

参照番号 1 0 6 で示すように、検出装置は、非定常状態データの初期集合及び定常状態データの初期集合に基づいて、S V M 分類モデルの初期反復を生成することができる。図 10 に示すように、学習スペクトルデータを S V M 分類モデルの初期反復への入力として提供することに基づいて、検出装置は、S V M 分類モデルの初期反復に関連する初期予測遷移時刻（ t_{trans0} ）（例えば、S V M 分類モデルの初期反復が、製造工程が非定常状態から定常状態に遷移したことを予測する時刻）を決定することができる。

【 0 0 1 4 】

参照番号 1 0 8 で示すように、S V M 分類モデルの 1 回目の反復（反復 1）を生成するために、検出装置は、学習スペクトルデータに基づいて、非定常状態データの第 1 集合（例えば、時刻 t_0 から時刻 t_{trans0} までに測定したスペクトルデータを含む）及び定常状態データの第 1 集合（例えば、時刻 $t_{ss0-dt \cdot 1}$ から時刻 t_e までに測定したスペクトルデータを含む）を作成することができる。特に、非定常状態データの第 1 集合は、S V M 分類モデルの初期反復によって予測した遷移時刻までに測定したスペクトルデータを含むのに対し、定常状態データの第 1 集合は、定常状態データの初期集合に含まれるデータ、並びに時刻 t_{ss0} より 1 タイムステップ前に測定したスペクトルデータを含む。

【 0 0 1 5 】

参照番号 1 1 0 で示すように、検出装置は、非定常状態データの第 1 集合及び定常状態データの第 1 集合に基づいて、S V M 分類モデルの 1 回目の反復を生成することができる。図 11 に示すように、学習スペクトルデータを S V M 分類モデルの 1 回目の反復への入力として提供することに基づいて、検出装置は、S V M 分類モデルの 1 回目の反復に関連する第 1 予測遷移時刻（ t_{trans1} ）（例えば、S V M 分類モデルの 1 回目の反復が、製造工程が非定常状態から定常状態に遷移したことを予測した時刻）を決定することができる。

【 0 0 1 6 】

一部の実現では、製造工程が非定常状態であることを知った時刻から、S V M 分類モデルの n 回目の反復を生成するために使用する定常状態データに関連する最も早い時刻が時間のしきい値量（例えば 1 タイムステップ）になるまで（例えば、定常状態データの集合が、 $t_{ss0-dt \cdot n} = t_{us0+dt}$ から時刻 t_e までに測定したスペクトルデータを含むまで）、検出装置は、この方法で、S V M 分類モデルの n （ $n > 1$ ）回の反復を生成して予測遷移時刻を決定することができる。

【 0 0 1 7 】

例えば、図 1 A に参照番号 1 1 2 で示すように、S V M 分類モデルの n 回目の反復（反復 n ）を生成するために、検出装置は、学習スペクトルデータに基づいて、非定常状態データの n 番目の集合（例えば、時刻 t_0 から時刻 $t_{trans(n-1)}$ までに測定したスペクトルデータを含む）及び定常状態データの n 番目の集合（例えば、時刻 $t_{ss0-dt \cdot n} = t_{us0+dt}$ から時刻 t_e までに測定したスペクトルデータを含む）を作成することができる。特に、非定常状態データの n 番目の集合は、S V M 分類モデルの $(n - 1)$ 回目の（即ち、前回の）反復によって予測した遷移時刻までに測定したスペクトルデータを含むのに対し、定常状態データの n 番目の集合は、定常状態データの $(n - 1)$ 番目の集合に含まれるスペクトルデータ、並びに時刻 $t_{ss0-dt \cdot (n-1)}$ より 1 タイムステップ前に測定したスペクトルデータを含む。

【 0 0 1 8 】

10

20

30

40

50

参照番号 114 で示すように、検出装置は、非定常状態データの n 番目の集合及び定常状態データの n 番目の集合に基づいて、SVM 分類モデルの n 回目の反復を生成することができる。図に示すように、学習スペクトルデータを SVM 分類モデルの n 回目の反復への入力として提供することに基づいて、検出装置は、SVM 分類モデルの n 回目の反復に関連する n 番目の予測遷移時刻 ($t_{trans(n)}$) (例えば、SVM 分類モデルの n 回目の反復が、製造工程が非定常状態から定常状態に遷移したことを予測した時刻) を決定することができる。

【0019】

参照番号 116 で示すように、検出装置は、SVM 分類モデルの n 回の反復によって予測した n 個の遷移時刻に基づいて、製造工程に関連する主要 (例えば、最も予測される) 遷移時刻を決定することができる。参照番号 118 で示すように、検出装置は、製造工程に関連する遷移時刻に基づいて、最終的な SVM 分類モデルを生成することができる。例えば、検出装置は、決定した主要遷移時刻より前に測定したスペクトルデータを含む非定常状態データの最終集合、及び決定した主要遷移時刻以後に測定した学習スペクトルデータを含む定常状態データの最終集合を作成することができる。従って、図に示すように、検出装置は、非定常状態データの最終集合及び定常状態データの最終集合に基づいて、最終的な SVM 分類モデルを生成することができる。

【0020】

図 1B に参照番号 120 で示すように、検出装置は (その後に)、(例えば、上述したように生成した最終的な SVM 分類モデルを記憶することに基づいて) 製造工程のある実行部分が定常状態に達したか否かを検出するに当たり使用する SVM 分類モデルを識別することができる。例えば、検出装置は、製造工程が開始されているか開始されたことの指標を受信したことに基づいて、SVM 分類モデルを識別することができる。

【0021】

参照番号 122 で示すように、検出装置は、製造工程の第 2 実行部分中に、製造工程に関連するスペクトルデータ (時として第 2 スペクトルデータまたは追加的スペクトルデータと称される) を受信することができる。例えば、図に示すように、分光計は、製造工程のこの実行部分中の所定時刻 (例えば、時刻 t_A) にスペクトルデータを測定することができ、そして、このスペクトルデータを検出装置に提供することができる。当該実行部分中に SVM 分類モデルへの入力用にスペクトルデータを収集する製造工程の実行部分は、製造工程の第 2 実行部分と称することができる。

【0022】

さらに図示するように、検出装置は、スペクトルデータ及び SVM 分類モデルに基づいて、製造工程が時刻 t_A に定常状態であるか否かを判定することができる。例えば、参照番号 124 で示すように、検出装置は、時刻 t_A に測定したスペクトルデータを、SVM 分類モデルへの入力として提供することができる。参照番号 126 で示すように、検出装置は、SVM 分類モデルの出力に基づいて、製造工程が時刻 t_A に定常状態でないものと判定することができる。一部の實現では、以下に説明するように、検出装置が、製造工程が定常状態であるか否かを、SVM 分類モデルに関連する決定境界に基づいて判定することができる。

【0023】

図 1C に参照番号 128 で示すように、検出装置は、製造工程のその後の実行部分中 (時刻 t_B) に、製造プロセスに関連するスペクトルデータを受信することができる。例えば、図に示すように、分光計は時刻 t_B にスペクトルデータを測定することができ、そしてこのスペクトルデータを検出装置に提供することができる。

【0024】

さらに図示するように、検出装置は、スペクトルデータ及び SVM 分類モデルに基づいて、製造工程が時刻 t_B に定常状態であるか否かを判定することができる。例えば、参照番号 130 で示すように、検出装置は、時刻 t_B に測定したスペクトルデータを、SVM 分類モデルの入力として提供することができる。参照番号 132 で示すように、検出装置

は、SVM分類モデルの出力に基づいて、製造工程が時刻 t_B に定常状態であるものと判定することができる。

【0025】

参照番号134で示すように、一部の実現では、検出装置が（随意的に）製造工程が定常状態に達しているものと判定したことに基づいて、定常状態に関連する定量的測定基準を定めることができる。この定量的測定基準は、定常状態における化合物の成分の濃度、定常状態における粒径、等のような、定常状態に関連する定量的特性を示す測定基準を含むことができる。例えば、検出装置は、当該スペクトルデータに基づいて定常状態を検出したスペクトルデータを入力として受け取る回帰モデル（例えば、部分最小二乗（PLS : partial least square）回帰モデル、サポートベクター回帰（SVR : support vector regression）モデル）を記憶するか、こうした回帰モデルにアクセスして、定常状態に関連する定量的測定基準を出力として提供することができる。

10

【0026】

参照番号136で示すように、製造工程が定常状態に達したものと判定したことに基づいて、検出装置は、製造工程が定常状態に達したことの指標を（例えば、製造工程を監視することに関連するユーザ装置に）提供することができる。さらに図示するように、検出装置は、定量的測定基準に関連する情報も提供することができる。

【0027】

このようにして、検出装置は、製造工程が定常状態に達したか否かを判定するためのSVM分類モデルを生成し、このSVM分類モデルを用いて、製造工程に関連する多変量スペクトルデータに基づいて、製造工程が定常状態に達したか否かを判定することができる。

20

【0028】

以上に示したように、図1A～1Cは例として提供するに過ぎない。他の例が可能であり、図1A～1Cに関して説明したものと異なることができる。

【0029】

図2は、本明細書中に説明するシステム及び／または方法を実現することができる環境200の例を示す。図2に示すように、環境200は、1つ以上の分光計210 - 1～210 - X（X = 1）（ここでは集合的に分光計210で参照し、個別に210で参照する）、検出装置220、ユーザ装置230、及びネットワーク240を含むことができる。環境200内の装置は、有線接続、無線接続、あるいは有線接続と無線接続との組合せにより相互接続することができる。

30

【0030】

分光計210は、試料（例えば、製造工程に関連する試料）に対する分光計測を実行することができる装置を含む。例えば、分光計210は、分光法（例えば、近赤外（NIR）分光法、中赤外（mid-IR）分光法、ラマン分光法、等のような振動分光法）を実行するデスクトップ（即ち、非ハンドヘルド）型分光装置を含むことができる。一部の實現では、分光計210が、分光計210によって取得したスペクトルデータを検出装置220のような他の装置による分析用に提供することを可能にすることができる。

【0031】

装置220は、製造工程が定常状態に達したか否かを、製造工程に関連する分類モデル、及び製造工程に関連するスペクトルデータに基づいて検出することができる1つ以上の装置を含む。例えば、検出装置220は、サーバー、コンピュータ、クラウドコンピュータ装置、等のグループを含むことができる。一部の實現では、装置220が、製造工程に関連する学習スペクトルデータに基づいて分類モデルを生成することを可能にすることができる。一部の實現では、検出装置220が、環境200内の分光計210等のような他の装置から情報を受信し、及び／または他の装置に情報を送信することができる。

40

【0032】

ユーザ装置230は、製造工程が定常状態に達したか否かに関連する情報を受信し、処理し、及び／または提供することができる1つ以上の装置を含む。例えば、ユーザ装置2

50

30は、デスクトップ・コンピュータ、携帯電話（例えば、スマートホン、無線電話機、等）、ラップトップ・コンピュータ、タブレット・コンピュータ、ハンドヘルド・コンピュータ、ウェアラブル（装着型）通信装置（例えば、スマートウォッチ（腕時計）、スマートグラス（メガネ）、等）、または同種の装置のような通信兼コンピュータ装置を含むことができる。

【0033】

ネットワーク240は、1つ以上の有線及び/または無線ネットワークを含む。例えば、ネットワーク240は、セルラ・ネットワーク（例えば、ロングターム・エボリューション（LTE：long-term evolution）ネットワーク、3G（第3世代）ネットワーク、符号分割多元接続（CDMA：code division multiple access）ネットワーク、等）、公衆陸上移動ネットワーク（PLMN：public land mobile network）、ワイドエリア・ネットワーク（WAN：wide area network）、メトロポリタン・エリア（都市規模）ネットワーク（MAN：metropolitan area network）、電話網（例えば、公衆交換電話網（PSTN：public switched telephone network））、プライベート（私設）ネットワーク、アドホック・ネットワーク、イントラネット、インターネット、光ファイバー系ネットワーク、クラウドコンピュータ・ネットワーク、等、及び/または、これらもしくは他の種類のネットワークの組合せを含むことができる。

【0034】

図2に示す装置の数及び配置は例として提供する。実際に、図2に示すものに追加した装置及び/またはネットワーク、図2に示すものよりも少数の装置及び/またはネットワーク、図2に示すものとは異なる装置及び/またはネットワーク、あるいは図2に示すものとは異なるように配置された装置及び/またはネットワークが存在し得る。さらに、図2に示す2つ以上の装置を単一の装置内に実現することができ、あるいは、図2に示す単一の装置を複数の分散型装置として実現することができる。それに加えて、あるいはその代わりに、環境200内の装置の集合（例えば、1つ以上の装置）が、環境200内の装置の他の集合によって実行されるものとして説明した1つ以上の機能を実行することができる。

【0035】

図3は、装置300の構成要素の例の図である。装置300は、分光計210、検出装置220、及び/またはユーザ装置230に相当し得る。一部の實現では、分光計210、検出装置220、及び/またはユーザ装置230が、1つ以上の装置300及び/または装置300の1つ以上の構成要素を含むことができる。図3に示すように、装置300は、バス310、プロセッサ320、メモリ330、記憶構成要素340、入力構成要素350、出力構成要素360、及び通信インタフェース370を含むことができる。

【0036】

バス310は、装置300の構成要素間の通信を可能にする構成要素を含む。プロセッサ320は、ハードウェア、ファームウェア、あるいはハードウェアとソフトウェアの組合せで実現することができる。プロセッサ320は、中央演算装置（CPU：central processing unit）、グラフィック処理装置（GPU：graphical processing unit）、アクセラレーテッド・プロセッシング・ユニット（APU：accelerated processing unit：加速処理装置）、マイクロプロセッサ、マイクロコントローラ、デジタルシグナルプロセッサ、フィールド・プログラマブル・ゲートアレイ（FPGA：field programmable gate array）、特定用途向け集積回路（ASIC：application specific integrated circuit）、または他の種類の処理構成要素を含む。一部の實現では、プロセッサ320が、ある機能を実行するようにプログラムすることができる1つ以上のプロセッサを含む。メモリ330は、ランダムアクセスメモリ（RAM：random access memory）、読み出し専用メモリ（ROM：read only memory）、及び/または、プロセッサ320が利用する情報及び/または命令を記憶する動的または静的な記憶装置（例えば、フラッシュメモリ、磁気メモリ、及び/または光メモリ）を含む。

【0037】

記憶構成要素 340 は、装置 300 の動作及び利用に係る情報及び／またはソフトウェアを記憶する。例えば、記憶構成要素 340 は、ハードディスク（例えば、磁気ディスク、光ディスク、光磁気ディスク、及び／または半導体ディスク）、コンパクトディスク（CD：compact disc）、デジタル多用途ディスク（DVD：digital versatile disc）、フロッピー（登録商標）ディスク、カートリッジ、磁気テープ、及び／または他の種類の非一時的コンピュータ可読媒体を、対応するドライブ（駆動装置）と共に含むことができる。

【0038】

入力構成要素 350 は、装置 300 が例えばユーザ入力装置（例えば、タッチスクリーン・ディスプレイ、キーボード、キーパッド、マウス、ボタン、スイッチ、及び／またはマイクロホン）を介して情報を受信することを可能にする構成要素を含む。それに加えて、あるいはその代わりに、入力装置 350 は、情報を感知するためのセンサ（例えば、全地球測位システム（GPS：global positioning system）構成要素、加速度計、ジャイロスコープ、及び／またはアクチュエータを含むことができる。出力構成要素 360 は、装置 300 からの情報を提供する構成要素（例えば、ディスプレイ、スピーカ、及び／または 1 つ以上の発光ダイオード（LED：light emitting diode）を含む。

【0039】

通信インタフェース 370 は、装置 300 が、例えば有線接続、無線接続、あるいは有線接続と無線接続との組合せにより他の装置と通信することを可能にするトランシーバ型構成要素（例えば、トランシーバ及び／または別個の受信機及び送信機）を含む。通信インタフェース 370 は、装置 300 が他の装置から情報を受信すること、及び／または他の装置に情報を提供することを可能にすることができる。例えば、通信インタフェース 370 は、イーサネット（登録商標）インタフェース、光インタフェース、同軸ケーブル・インタフェース、赤外線インタフェース、無線周波数（RF：radio frequency）インタフェース、ユニバーサル・シリアルバス（USB：universal serial bus）インタフェース、Wi-Fi インタフェース、セルラ・ネットワーク・インタフェース、等を含むことができる。

【0040】

装置 300 は、本明細書中に説明する 1 つ以上のプロセスを実行することができる。装置 300 は、メモリ 330 及び／または記憶構成要素 340 のような非一時的コンピュータ可読媒体が記憶しているソフトウェア命令をプロセッサ 320 が実行することに応答して、これらのプロセスを実行することができる。本明細書では、コンピュータ可読媒体を非一時的なメモリ装置として定義する。メモリ装置は、単一の物理的記憶装置内のメモリ空間、あるいは複数の物理的記憶装置に分散したメモリ空間を含む。

【0041】

ソフトウェア命令は、他のコンピュータ可読媒体から、あるいは他の装置から通信インタフェース 370 を介して、メモリ 330 及び／または記憶構成要素 340 内に読み込むことができる。実行時に、メモリ 330 及び／または記憶構成要素 340 内に記憶されたソフトウェア命令は、本明細書中に説明する 1 つ以上の工程をプロセッサ 320 に実行させることができる。それに加えて、あるいはその代わりに、ハードウェア回路をソフトウェア命令の代わりに、あるいはソフトウェア命令と組み合わせて用いて、本明細書中に説明する 1 つ以上の工程を実行することができる。従って、本明細書中に説明する実現は、ハードウェア回路とソフトウェアとのいずれの特定の組合せにも限定されない。

【0042】

図 3 に示す構成要素の数及び配置は例として提供する。実際に、装置 300 は、図 3 に示すものに加えた構成要素、図 3 に示すものよりも少数の構成要素、図 3 に示すものとは異なる構成要素、あるいは図 3 に示すものとは異なるように配置された構成要素を含むことができる。それに加えて、あるいはその代わりに、装置 300 の構成要素の集合（例えば、1 つ以上の構成要素）が、装置 300 の構成要素の他の集合によって実行されるものとして説明した 1 つ以上の機能を実行することができる。

【 0 0 4 3 】

図 4 は、製造工程が定常状態に達した時点を検出するための分類モデルを生成するためのプロセス 4 0 0 の例のフローチャートである。一部の実現では、図 4 の 1 つ以上のプロセス・ブロックを検出装置 2 2 0 によって実行することができる。一部の実現では、図 4 の 1 つ以上のプロセス・ブロックを、分光計 2 1 0 及び / またはユーザ装置 2 3 0 のような、検出装置 2 2 0 とは別個の、あるいは検出装置 2 2 0 を含む他の装置または装置グループによって実行することができる。

【 0 0 4 4 】

図 4 に示すように、プロセス 4 0 0 は、製造工程に関連する学習スペクトルデータを受信するステップを含むことができる (ブロック 4 1 0) 。例えば、検出装置 2 2 0 が、製造工程に関連する学習スペクトルデータを受信する。

10

【 0 0 4 5 】

学習スペクトルデータは、製造工程に関連するスペクトルデータを含むことができ、このスペクトルデータに基づいて、SVM 分類モデルの反復を生成することができる。例えば、学習スペクトルデータは、製造工程のある実行部分中に分光計 2 1 0 によって測定したスペクトル (例えば、NIR スペクトルのような多変量時系列データ) を含むことができる。一部の実現では、製造工程を連続製造工程またはバッチ製造工程とすることができる。一部の実現では、以下に説明するように、検出装置 2 2 0 が、学習スペクトルデータに基づいて SVM 分類モデルを生成することができる。

【 0 0 4 6 】

20

一部の実現では、学習スペクトルデータが、製造工程の以前の実行部分中の異なる時刻に (例えば、一連のタイムステップにおいて周期的に) 測定した履歴スペクトルを含むことができる。例えば、学習スペクトルデータは、製造工程の以前の実行部分の開始時 (本明細書では時刻 t_0 と称する) に測定したスペクトル、及び製造工程の以前の実行部分の終了時 (本明細書では時刻 t_e と称する) に測定したスペクトルを含むことができる。

【 0 0 4 7 】

他の例として、学習スペクトルデータは、製造工程の以前の実行部分が非定常状態になっていることを知った時点 (本明細書では時刻 t_{us0} と称する) に測定したスペクトルを含むことができる。一部の実現では、(例えば、製造工程の開始時に製造工程が非定常状態であるので) 時刻 t_{us0} を時刻 t_0 と同じ時刻にすることができる。その代わりに、時刻 t_{us0} を、時刻 t_0 の 1 タイムステップ後、時刻 t_0 の 5 タイムステップ後、時刻 t_0 の 4 0 タイムステップ後のような、時刻 t_0 より後の時刻にすることができる。一部の実現では、時刻 t_{us0} を、時刻 t_0 より後の、製造工程の以前の実行部分が非定常状態になっているものと想定される時刻にすることができる。

30

【 0 0 4 8 】

追加的な例として、学習スペクトルデータは、製造工程の以前の実行部分が定常状態になっていることを知った時点 (本明細書では時刻 t_{ss0} と称する) に測定したスペクトルを含むことができる。一部の実現では、(例えば、製造工程の終了時に製造工程が定常状態であるので) 時刻 t_{ss0} を時刻 t_e と同じ時刻にすることができる。その代わりに、時刻 t_{ss0} を、時刻 t_e の 1 タイムステップ前、時刻 t_e の 5 タイムステップ前、時刻 t_e の 4 0 タイムステップ前のような、時刻 t_e より前の時刻とすることができる。一部の実現では、時刻 t_{ss0} を、時刻 t_e より前の、製造工程の以前の実行部分が定常状態になっているものと想定される時刻にすることができる。

40

【 0 0 4 9 】

さらに他の例として、学習スペクトルデータは、時刻 t_0 と時刻 t_e との間の、製造工程の以前の実行部分の状態が未知である時点に測定したスペクトルを含むことができる。

【 0 0 5 0 】

一部の実現では、検出装置 2 2 0 が 1 つ以上の他の装置から学習スペクトルデータを受信することができ、これらの他の装置は、例えば、製造工程の以前の実行部分中に学習スペクトルデータを取得する 1 つ以上の分光計 2 1 0、あるいは製造工程の以前の実行部分

50

中に1つ以上の分光計210によって測定した学習スペクトルデータを記憶するサーバー装置である。

【0051】

一部の実現では、学習スペクトルデータが、製造工程の以前の複数の実行部分に関連することができ、開始条件（例えば、全重量、粒径、分布、湿度レベル、等）は製造工程のこれら複数の実行部分間で変動する。こうした場合には、製造工程の複数の実行部分に関連する学習スペクトルデータの複数の集合を平均化し、及び/または他の方法で組み合わせ、学習スペクトルデータを形成することができる。一部の実現では、変動する開始条件で学習スペクトルデータを測定することが、これらの学習スペクトルデータに基づいて生成されるSVM分類モデルの精度及び/またはロバスト性の（例えば、開始条件の単一集合を有する製造工程の1つの実行部分に基づいて生成されるSVM分類モデルに比べた）増加を生じさせる。

10

【0052】

一部の実現では、検出装置220が、学習スペクトルデータに対して次元縮小を実行することができる。次元縮小は、多変量学習スペクトルデータの変数の数を低減することを含むことができ、この多変量学習スペクトルデータに基づいてSVM分類モデルを生成することができる。一部の実現では、主成分分析（PCA）技術を用いて次元縮小を実行することができ、これにより、SVM分類モデルを生成するに当たり使用する主成分（即ち、複数の変数の部分集合）を識別する。それに加えて、あるいはその代わりに、変数選択技術を用いて次元縮小を実行することができ、これにより、これら複数の変数のうち、例えば製造工程に関連する化合物に特徴的な変数を選択する。こうした変数選択技術の例は、選択比（SR：selectivity ratio）技術、射影における変数重要度（VIP：variable importance in projection）技術、等を含む。一部の実現では、次元縮小を実行することが、例えば、これら複数の変数間の干渉を除去すること及び/またはノイズを低減することによって、（例えば、学習スペクトルデータの全体集合に基づいて生成したSVM分類モデルに比べて）SVM分類モデルの相互運用性の改善、及び/またはSVM分類モデルの生成の改善を生じさせることができる。

20

【0053】

図4にさらに示すように、プロセス400は、学習スペクトルデータに基づいて、非定常状態データの集合及び定常状態データの集合を作成するステップを含むことができる（ブロック420）。例えば、検出装置220が、学習スペクトルデータに基づいて、非定常状態データの集合及び定常状態データの集合を作成することができる。

30

【0054】

この非定常状態データの集合は、SVM分類モデルの反復を生成する目的で、学習スペクトルデータに含まれるスペクトルデータを含むことができ、このスペクトルデータは、製造工程が非定常状態であるものと想定される時刻に対応する。例えば、SVM分類モデルの初期反復を生成することに関連する非定常状態データの初期集合は、時刻 t_0 から時刻 t_{us0} までの複数の時刻に測定したスペクトルデータを含むことができる。この例を継続して、SVMモデルの次の反復を生成することに関連する非定常状態データの他の集合は、時刻 t_0 から時刻 t_{trans0} までの（1つ以上の）時刻に測定したスペクトルデータを含むことができ、ここに、 t_{trans0} はSVM分類モデルの初期反復によって予測した遷移時刻（例えば、非定常状態から定常状態への遷移の時刻）である。一般に、SVMモデルの n 回目の反復を生成することに関連する非定常状態データの n 番目の集合は、時刻 t_0 から時刻 $t_{trans(n-1)}$ までの（1つ以上の）時刻に測定したスペクトルデータを含むことができ、ここに、時刻 $t_{trans(n-1)}$ はSVM分類モデルの $(n-1)$ 回目の（即ち、前回の）反復によって決定された遷移時刻である。SVM分類モデルの反復を生成することに関する追加的な詳細は以下に説明する。

40

【0055】

一部の実現では、例えば、学習スペクトルデータに含まれる追加的スペクトルデータを、SVMモデルの前回の反復を生成することに関連する非定常状態データの集合に追加す

50

ることによって、非定常状態データの集合を更新し、修正し、及び／または再作成して、SVMモデルの各回の反復を生成することができる。例えば、SVM分類モデルの n 回目の反復を生成するための非定常状態データの n 番目の集合は、SVM分類モデルの $(n-1)$ 回目の反復を生成するために使用した非定常状態データの $(n-1)$ 番目の集合、並びに非定常状態データの $(n-1)$ 番目の集合における最終時刻からSVM分類モデルの $(n-1)$ 回目の反復を用いて予測した遷移時刻までの(1つ以上の)時刻に測定したスペクトルデータを含むことができる。特定例として、SVM分類モデルの4回目の反復を生成するための定常状態データの集合は、時刻 t_0 から時刻 t_{trans3} までに(例えば、開始時刻からモデルの3回目の反復を用いて決定した遷移時刻までに)測定したスペクトルデータを含むことができるのに対し、SVM分類モデルの5回目の(即ち、次の)反復を生成するための定常状態データの集合は、時刻 t_0 から時刻 t_{trans4} までに(例えば、開始時刻からSVM分類モデルの4回目の反復を用いて決定した遷移時刻までに)測定したスペクトルデータを含むことができる。

10

【0056】

定常状態データの集合は、SVM分類モデルの反復を生成する目的で、学習スペクトルデータに含まれるスペクトルデータを含むことができ、このスペクトルデータは、製造工程の以前の実行部分が定常状態であるものと想定される時刻に対応する。例えば、SVM分類モデルの初期反復を生成することに関連する定常状態データの初期集合は、時刻 t_{ss0} から時刻 t_e までの(1つ以上の)時刻に測定したスペクトルデータを含むことができる。この例を継続して、SVMモデルの次の反復を生成することに関連する定常状態データの他の集合は、時刻 $t_{ss0-dt+1}$ から時刻 t_e までの(1つ以上の)時刻に測定したスペクトルデータを含むことができ、ここに、時刻 $t_{ss0-dt+1}$ は t_{ss0} より1タイムステップ前の時刻である。換言すれば、検出装置220は、SVM分類モデルの各回の反復を生成する際に、時刻 t_{ss0} より前のタイムステップに関連するスペクトルデータを、定常状態データの各集合に追加する。一般に、SVMモデルの n 回目の反復を生成することに関連する定常状態データの n 番目の集合は、時刻 $t_{ss0-dt+n}$ から時刻 t_e までに測定したスペクトルデータを含むことができ、ここに、時刻 $t_{ss0-dt+n}$ は時刻 t_{ss0} より n タイムステップ前の時刻である。

20

【0057】

一部の實現では、例えば、追加的スペクトルデータを、SVMモデルの前回の反復を生成することに関連する定常状態データの集合に追加することによって、定常状態データの集合を更新し、修正し、及び／または再作成して、SVMモデルの各回の反復を生成することができる。例えば、SVM分類モデルの所定回の反復を生成するための定常状態データの集合は、SVM分類モデルの前回の反復を生成するために使用した定常状態データの集合に含まれるスペクトルデータ、並びにSVM分類モデルの前回の反復を生成するためのスペクトルデータの集合に関連する最も早期のタイムステップの直前のタイムステップに測定したスペクトルデータを含むことができる。特定例として、SVM分類モデルの4回目の反復を生成するための定常状態データの集合は、時刻 $t_{ss0-dt+4}$ から時刻 t_e までに測定したスペクトルデータを含むことができるのに対し、SVM分類モデルの5回目の(即ち、次の)反復を生成するための定常状態データの集合は、時刻 $t_{ss0-dt+5}$ から時刻 t_e までに測定したスペクトルデータ(即ち、 $t_{ss0-dt+4}$ よりも1タイムステップ早いスペクトルデータ)を含むことができる。

30

40

【0058】

図4にさらに示すように、プロセス400は、非定常状態データの集合及び定常状態データの集合に基づいて、製造工程が定常状態に達したか否かを検出することに関連するSVM分類モデルの反復を生成するステップを含むことができる(ブロック430)。例えば、検出装置220が、非定常状態データの集合及び定常状態データの集合に基づいて、製造工程が定常状態に達した時点を検出することに関連するSVM分類モデルの反復を生成することができる。

【0059】

50

一部の実現では、検出装置 220 が、非定常状態データの集合及び定常状態データの集合に SVM 技術を適用することに基づいて、SVM 分類モデルの反復を生成することができる。例えば、検出装置 220 は、非定常状態データの集合が、例えば超平面の集合によって定常状態データの集合から分離されるように、非定常状態データの集合及び定常状態データの集合を空間内の点としてマッピングすることによって、SVM モデルを生成することができる。

【0060】

一部の実現では、検出装置 220 が、学習スペクトルデータ及び SVM 分類モデルの反復に基づいて、SVM 分類モデルの反復に関連する（即ち、SVM 分類モデルの反復によって予測される）予測遷移時刻を決定することができる。例えば、検出装置 220 は、非定常状態データの集合及び定常状態データの集合に基づいて、SVM 分類モデルの反復を生成することができる。ここで、検出装置 220 は、（例えば、時刻 t_0 から時刻 t_e までの各タイムステップに関連する）学習スペクトルデータを同じ空間内にマッピングすることができ、この空間に基づいて SVM 分類モデルを生成する。この例では、学習スペクトルデータのアイテムを（例えば、超平面の集合に対して）マッピングする場所に基づいて、SVM 分類モデルが、SVM 分類モデルの初期反復によって予測した、製造工程に関連する遷移時刻（ $t_{trans(n)}$ ）を識別することができる。一部の実現では、以下に説明するように、検出装置 220 が、SVM 分類モデルの各回の反復毎に予測遷移時刻を決定することができる。一部の実現では、検出装置 220 が、SVM 分類モデルの反復に関連する予測遷移時刻を識別する情報を記憶して、検出装置 220 が製造工程に関連する遷移時刻を決定することを可能にすることができる。

【0061】

図 4 にさらに示すように、プロセス 400 は、SVM 分類モデルの他回の反復を生成するか否かを決定するステップを含むことができる（ブロック 440）。例えば、検出装置 220 が、SVM 分類モデルの他回の反復を生成するか否かを決定することができる。

【0062】

一部の実現では、検出装置 220 が、SVM 分類モデルの他回の反復を生成するか否かを、定常状態データの集合に関連する時刻に基づいて決定することができる。例えば、検出装置 220 は、SVM 分類モデルの反復を生成することを、定常状態データの集合に関連する時刻のうち最も早い時刻が、製造工程が非定常状態であることを知った時刻（時刻 t_{us0} ）に関連するしきい値時刻を満足するまで継続するように構成することができる。特定例として、検出装置 220 は、定常状態データの集合に関連する最も早い時刻が、時刻 t_{us0} としきい値量だけ異なるまで（例えば、 $t_{ss0-dt \cdot n}$ が t_{us0} から 1 タイムステップになる（ $t_{ss0-dt \cdot n} = t_{us0+dt}$ になる）まで）、SVM 分類モデルの反復を生成すること（及び予測遷移時刻を決定すること）を継続するように構成することができる。

【0063】

それに加えて、あるいはその代わりに、検出装置 220 は、SVM 分類モデルの他回の反復を生成するか否かを、反復しきい値に基づいて決定することができる。例えば、検出装置 220 は、SVM 分類モデルの反復をしきい値量の時間分だけ生成することを、しきい値回数の反復が生成されるまで継続する、等のように構成することができる。ここで、検出装置 220 は、SVM 分類モデルの他回の反復を生成するか否かを、しきい値を満足したか否か（例えば、しきい値量の時間が経過したか否か、しきい値回数の反復が生成されたか否か、等）に基づいて決定することができる。

【0064】

図 4 にさらに示すように、SVM 分類モデルの他回の反復を生成する場合（ブロック 440 の「はい」）、プロセス 400 は、学習スペクトルデータに基づいて、定常状態データの他の集合及び非定常状態データの他の集合を作成することを含むことができる（ブロック 420）。例えば、検出装置 220 は、（例えば、 $T_{ss0-dt \cdot n} > t_{us0+dt}$ である際に、反復しきい値を満足しない際に、等）SVM 分類モデルの他回の反復を生成することを決定することができ、検出装置 220 は、学習スペクトルデータに基づいて、定常状態デ

ータの他の集合及び非定常状態データの他の集合を作成することができる。

【0065】

一部の実現では、検出装置220は、非定常状態データの他の集合、及び定常状態データの他の集合を、ブロック420に関して上述した方法で作成することができる。一部の実現では、非定常状態データの他の集合及び定常状態データの他の集合を作成する際に、検出装置220は、ブロック430に関して上述したように、SVM分類モデルの他回の反復を生成して、SVM分類モデルの他回の反復によって予測される遷移時刻を決定することができる。

【0066】

上述した反復プロセスの例として、検出装置220は、非定常状態データの初期集合（例えば、時刻 t_0 から時刻 t_{us0} までの（1つ以上の）時刻に測定した学習スペクトルデータを含む）及び定常状態データの初期集合（例えば、時刻 t_{ss0} から時刻 t_e までの（1つ以上の）時刻に測定した学習スペクトルデータを含む）を作成することができる。この例では、検出装置220は、SVM技術を定常状態データの初期集合及び非定常状態データの初期集合に適用して、SVM分類モデルの初期反復を生成することができる。次に、検出装置220は、学習スペクトルデータを、SVM分類モデルの初期反復への入力として提供し、その出力として、SVM分類モデルの初期反復に関連する初期予測遷移時刻（ t_{trans0} ）を決定することができる。

【0067】

この例を継続して、検出装置220は、 $t_{ss0} > t_{us0} + dt$ であるものと判定することができる。従って、検出装置220はSVM分類モデルの他回の反復を生成することができる。次に、検出装置220は、学習スペクトルデータ及び初期予測遷移時刻に基づいて、定常状態データの第1集合（例えば、時刻 $t_{ss0-dt+1}$ から時刻 t_e までに測定した学習スペクトルデータを含む）及び非定常状態データの初期集合（例えば、時刻 t_0 から時刻 t_{trans0} までに測定した学習スペクトルデータを含む）を作成することができる。次に、検出装置220は、SVM技術を定常状態データの第1集合及び非定常状態データの第1集合に適用して、SVM分類モデルの1回目の反復を生成することができる。次に、検出装置220は、学習スペクトルデータをSVM分類モデルの1回目の反復への入力として提供し、その出力として、SVM分類モデルの1回目の反復に関連する第1予測遷移時刻（ t_{trans1} ）を決定することができる。検出装置220は、この方法でSVM分類モデルの反復を生成する（そして予測遷移時刻を決定する）ことを、検出装置220が追加的反復を生成しないことを決定するまで継続することができる。

【0068】

図4にさらに示すように、SVM分類モデルの他回の反復を生成しない場合には（ブロック440の「いいえ」）、プロセス400は、SVM分類モデルの反復によって予測した遷移時刻に基づいて、製造工程に関連する遷移時刻を決定するステップを含むことができる（ブロック450）。例えば、検出装置220が、SVM分類モデルの他回の反復を生成しないことを決定することができ、そして検出装置220は、製造工程に関連する遷移時刻を、SVM分類モデルの反復によって予測した遷移時刻に基づいて決定することができる。

【0069】

一部の実現では、検出装置220が、製造工程に関連する遷移時刻を、SVM分類モデルの反復に関連する予測遷移時刻に基づいて決定することができる。例えば、検出装置220は、上述した方法で、SVM分類モデルの n 回の反復のそれぞれによって予測される n 個の遷移時刻を決定することができる。ここで、検出装置220は、製造工程に関連する遷移時刻を、SVM分類モデルの n 回の反復によって予測したうちの主要遷移時刻（例えば、最大の発生回数を有する予測遷移時刻）として決定することができる。

【0070】

図5A及び5Bは、製造工程に関連するSVM分類モデルの反復によって予測した遷移時刻に基づいて製造プロセスの遷移時刻を決定することに関連するグラフ表現500及び

10

20

30

40

50

550の例である。図5A及び5Bの目的で、検出装置220はSVM分類モデルのn回の反復に対応するn個の遷移時刻を決定しているものと仮定する。

【0071】

図5Aでは、各点が、SVM分類モデルの反復によって予測した遷移時刻を表し、SVM分類モデルの反復に関連する時刻 $t_{ss0-dt \cdot n}$ （即ち、SVM分類モデルの反復を生成することに関連する定常状態の集合に関連する時刻 $t_{ss0-d \cdot n}$ ）に対してプロットしている。図5Aに示すように、n個の遷移時刻の集合のうちの主要遷移時刻は、時刻130である（例えば、時刻130は他の遷移時刻よりも多数回の反復によって予測されている）。この例では、検出装置220が、製造工程に関連する遷移時刻を時刻130として決定することができる。

10

【0072】

代わりのグラフ表現を図5Bに示す。図5Bには、各遷移時刻の合計発生回数をプロットしている。ここでも、図5Bに示すように、n個の遷移時刻の集合のうちの主要遷移時刻は時刻130である。こうして、検出装置220は、製造工程に関連する遷移時刻を時刻130として決定することができる。

【0073】

以上に示したように、図5A及び5Bは例として提供するに過ぎない。他の例が可能であり、図5A及び5Bに関して説明したものと異なることができる。

【0074】

図4を参照すれば、プロセス400が、製造工程に関連する遷移時刻に基づいて最終的なSVM分類モデルを生成するステップを含むことができる（ブロック460）。例えば、検出装置220が、製造工程に関連する遷移時刻に基づいて、最終的なSVM分類モデルを生成することができる。

20

【0075】

この最終的なSVM分類モデルは、SVM分類モデルの反復に基づいて決定した、製造工程に関連する遷移時刻に基づいて生成したSVM分類モデルを含むことができる。

【0076】

一部の実現では、検出装置220が、製造工程に関連する遷移時刻に基づいて最終的な分類モデルを生成することができる。例えば、検出装置220は、上述したように、製造工程に関連する遷移時刻を決定することができる。ここでは、検出装置220が非定常状態データの最終的な集合及び定常状態データの最終的な集合を作成することができ、非定常状態データの最終的な集合は、遷移時刻より前の（1つ以上の）時刻に関連する学習スペクトルデータを含み、定常状態データの最終的な集合は、遷移時刻以後の（1つ以上の）時刻に関連する学習スペクトルデータを含む。この例では、検出装置220が、非定常状態データの最終的な集合及び定常状態データの最終的な集合にSVM技術を適用することができ、そして最終決定されたSVM分類モデルを、上述した方法と同様な方法で生成することができる。

30

【0077】

一部の実現では、上述したように、SVM分類モデルが決定境界（例えば、超平面）を含むことができ、この決定境界は、製造工程のその後の実行部分が定常状態に達したか否かを判定する根拠として機能することができる。決定境界に関する追加的な詳細は、図6に関して以下に説明する。

40

【0078】

一部の実現では、検出装置220が最終的なSVM分類モデルを記憶することができ、これにより、上述したように、検出装置220はこの最終的なSVM分類モデルを用いて、製造工程のその後の実行部分が非定常状態であるか定常状態であるかを判定することができる。このようにして、検出装置220はSVM分類モデルを生成することができ、このSVM分類モデルは、製造工程に関連するスペクトルデータを入力として受信して、製造工程が非定常状態であるか定常状態であるかの指標を出力として提供することができる。

50

【 0 0 7 9 】

一部の実現では、製造工程が複数回の状態遷移を含むことがあり、検出装置 2 2 0 は、定常状態毎にプロセス 4 0 0 を反復して、製造工程に関連する複数の S V M 分類モデルを決定することができる。例えば、製造工程は、1 回目の非定常状態から 1 回目の定常状態に遷移し、1 回目の定常状態から 2 回目の非定常状態に遷移し、そして 2 回目の非定常状態から 2 回目の定常状態に遷移することができる。この例では、検出装置 2 2 0 が（例えば、製造工程に関連して測定した学習スペクトルに基づいて）プロセス 4 0 0 を実行して、2 回目の定常状態への遷移に関連する S V M 分類モデルを生成することができる。次に、検出装置 2 2 0 は、（例えば、2 回目の定常状態に関連する学習スペクトルデータを含まない学習スペクトルデータの部分集合に基づいて）プロセス 4 0 0 を実行して、1 回目

10

【 0 0 8 0 】

図 4 はプロセス 4 0 0 のブロックの例を示しているが、一部の実現では、プロセス 4 0 0 が、図 4 に示すものに加えた構成要素、図 4 に示すものよりも少数のブロック、図 4 に示すものとは異なるブロック、あるいは図 4 に示すものとは異なるように配置されたブロックを含むことができる。それに加えて、あるいはその代わりに、プロセス 4 0 0 のブロックのうちの 2 つ以上を並行して実行することができる。

【 0 0 8 1 】

図 6 は、スペクトルデータに基づいて、S V M 分類モデルを用いて、製造工程が定常状態に達したか否かを判定するためのプロセス 6 0 0 の例のフローチャートである。一部の実現では、図 6 の 1 つ以上のプロセス・ブロックを検出装置 2 2 0 によって実行することができる。一部の実現では、図 6 の 1 つ以上のプロセス・ブロックを、分光計 2 1 0 及び/またはユーザ装置 2 3 0 のような検出装置 2 2 0 とは別個の、あるいは検出装置 2 2 0 を含めた他の装置または装置グループによって実行することができる。

20

【 0 0 8 2 】

図 6 に示すように、プロセス 6 0 0 は、製造工程が定常状態に達したか否かを検出するための S V M 分類モデルを識別するステップを含むことができる（ブロック 6 1 0）。例えば、検出装置 2 2 0 は、製造工程が定常状態に達したか否かを検出するための S V M 分類モデルを識別することができる。

【 0 0 8 3 】

一部の実現では、検出装置 2 2 0 が、検出装置 2 2 0 が記憶している情報または検出装置 2 2 0 によってアクセス可能な情報に基づいて S V M 分類モデルを識別することができる。例えば、検出装置 2 2 0 は、プロセス 4 4 0 に関して上述したように、検出装置 2 2 0 によって生成した最終的な S V M 分類モデルを記憶することに基づいて、S V M 分類モデルを識別することができる。

30

【 0 0 8 4 】

一部の実現では、検出装置 2 2 0 が製造工程を監視するべきことの指標を、検出装置 2 2 0 が（例えば、分光計 2 1 0 から、ユーザ装置 2 3 0 から、ユーザ入力に基づいて、等で）受信すると、検出装置 2 2 0 は S V M 分類モデルを識別して、製造プロセスが定常状態に達した時点を特定することができる。例えば、検出装置 2 2 0 は、分光計 2 1 0 及び/またはユーザ装置 2 3 0 から、特定の製造工程を開始するべきこと、あるいは特定の製造工程が開始されたことの指標を受信することができ、例えば、検出装置 2 2 0 が製造工程を自動的に監視するように構成されている際に、この指標を受信したことに基づいて S V M 分類モデルを（自動的に）識別して、製造工程が定常状態に達した時点を検出することができる。

40

【 0 0 8 5 】

図 6 にさらに示すように、プロセス 6 0 0 は、製造工程に関連するスペクトルデータを受信するステップを含むことができる（ブロック 6 2 0）。例えば、検出装置 2 2 0 が、製造工程に関連するスペクトルデータを受信することができる。

【 0 0 8 6 】

50

一部の実現では、このスペクトルデータが、製造工程の実行中に1つ以上の分光計210によって測定したスペクトルを含むことができる。一部の實現では、検出装置220が、製造工程中にスペクトルデータをリアルタイムまたは準リアルタイムで受信することができる。例えば、検出装置220は、製造工程の実行部分中に分光計210によって測定したスペクトルデータを、分光計210がスペクトルデータを取得することに対してリアルタイムまたは準リアルタイムで受信することができる。一部の實現では、以下に説明するように、検出装置220が、スペクトルデータ及びSVM分類モデルに基づいて、製造工程が定常状態に達したか否かを判定することができる。

【0087】

図6にさらに示すように、プロセス600は、スペクトルデータ及びSVM分類モデルに基づいて、製造工程が定常状態に達したか否かを判定するステップを含むことができる(ブロック630)。例えば、検出装置220が、スペクトルデータ及びSVM分類モデルに基づいて、製造工程が定常状態に達したか否かを判定することができる。

【0088】

一部の實現では、検出装置220が、製造工程が定常状態に達したか否かを、SVM分類モデルに関連する決定境界に基づいて判定することができる。例えば、(上述したように)学習スペクトルデータを用いて製造工程の遷移時刻を識別することに基づいて、検出装置220は、分光空間内の超平面によって表される決定境界を含むSVM分類モデルを生成することができる。ここで、決定境界の内側にある分光空間内の点は、製造工程が定常状態である分光条件を表すのに対し、決定境界の外側にある点は、製造工程が非定常状態である分光条件を表す。一部の實現では、上述したように、製造工程に関連する遷移時刻を特定した後に、SVM分類モデル技術を学習スペクトルデータに適用することに基づいて、決定境界データを生成することができる。

【0089】

図7A及び7Bは、SVM分類モデルに関連する簡略化した決定境界を例示するグラフ表現700の例である。例示目的で、図7A及び7Bに示す決定境界は、第1主成分(PC1: principal component 1)及び第2主成分(PC2)に関連するものとして示している。実際には、決定境界は異なる数の構成要素(例えば、80変数、120変数、等)に関連することができる。

【0090】

図7A及び7Bでは、グレー色の点及び線が、製造工程が非定常状態である(1つ以上の)時刻に(例えば、 t_0 からSVM分類モデルに関連する遷移時刻までに)測定した学習スペクトルデータを表すのに対し、黒色の点及び線は、製造工程が定常状態である(1つ以上の)時刻に(例えば、SVM分類モデルに関連する遷移時刻から時刻 t_e までに)測定した学習スペクトルデータを表す。ライトグレー(薄灰)色の円は、製造工程が非定常状態であった最後の点及び製造工程が定常状態であった最初の点を表す。図7Aは、製造工程に関連する全部の(例えば、時刻 t_0 から時刻 t_e までの)学習スペクトルデータのグラフ表現であるのに対し、図7Bは、図7A中に破線の四角形で示す空間内の点の拡大図である。図7Bでは、決定境界は定常状態に関連する点(並びに非定常状態に関連する点の部分集合)を囲む太線で表される。以上に示すように、図7A及び7Bは簡略化した図示の例として提供するに過ぎない。他の例が可能であり、図7A及び7Bに関して説明したものと異なることができる。

【0091】

一部の實現では、検出装置220が、製造工程が定常状態に達したか否かを、決定境界(例えば、図7Bに示すような決定境界)に基づいて判定することができる。例えば、検出装置220は、製造工程に関連するスペクトルデータを受信することができ、そしてこのスペクトルデータを、決定境界に関連する空間内の点としてマッピングすることができる。ここで、スペクトルデータに関連する点が決定境界上または決定境界内にある場合、検出装置220は、製造工程が定常状態に達したものと判定することができる。その代わりに、スペクトルデータに関連する点が決定境界の外側にある場合、検出装置220は、

製造工程が定常状態に達していない（即ち、非定常状態である）ものと判定することができる。

【 0 0 9 2 】

一部の実現では、検出装置 2 2 0 が、製造工程が定常状態に達したか否かの判定に関連する信頼性測定基準（本明細書では決定値と称する）を生成することができる。例えば、検出装置 2 2 0 は、決定境界、及びスペクトルデータを表す点に基づいて、決定境界からスペクトルデータを表す点までの距離（例えば、決定境界上の最も近い点までの距離）を測定することができる。ここで、決定境界の内側の点は、正（または負）の決定値に割り当てることができるのに対し、決定境界の外側の点は、負（または正）の決定値に割り当てることができる。この例では、より大きい絶対値を有する決定値（例えば、4 . 0 . 2 . 5、- 2 . 5、- 4 . 0、等）が、より小さい絶対値を有する決定値（例えば、0 . 5、0 . 2、- 0 . 2、- 0 . 5、等）よりも、製造工程の状態の判定におけるより高い信頼性を表す。

10

【 0 0 9 3 】

以上に示すように、図 7 A 及び 7 B は例示として提供するに過ぎない。他の例が可能であり、図 7 A 及び 7 B に関して説明したものと異なることができる。

【 0 0 9 4 】

図 8 は、図 7 A 及び 7 B の決定境界に基づいて特定した決定値の例のグラフ表現 8 0 0 である。図 8 では、負の決定値が、製造工程中に測定した、決定境界の外側にある点によるスペクトルデータに対応するのに対し、正の決定値は、製造工程中に、決定境界の内側に入る点によるスペクトルデータに対応する。図 8 中に縦線で示すように、検出装置 2 2 0 は、およそタイムステップ 6 5 で第 1 の正の決定値を特定している。

20

【 0 0 9 5 】

一部の実現では、検出装置 2 2 0 が、製造工程が定常状態に達したか否かを、決定値のしきい値に基づいて判定することができる。例えば、検出装置 2 2 0 は、決定境界の内側にある点に関連する決定値がしきい値を満足する際に、製造工程が定常状態に達したものと判定することができる。図 8 を特定例として用いれば、検出装置 2 2 0 が、2 . 0 以上である正の決定値を特定した際に製造工程が定常状態に達したものと判定するように構成されている場合に、検出装置 2 2 0 はこうした判定をおよそタイムステップ 7 5 において行うことができる。

30

【 0 0 9 6 】

他の例として、検出装置 2 2 0 は、連続する複数のタイムステップに関連する連続する複数の決定値がしきい値を満足する際に、製造工程が定常状態に達したものと判定することができる。図 8 を特定例として用いれば、検出装置 2 2 0 が、連続する 5 つの正の決定値を特定した際に製造工程が定常状態に達したものと判定するように構成されている場合に、検出装置 2 2 0 は、こうした判定をおよそタイムステップ 6 9 で行うことができる。

【 0 0 9 7 】

他の例として、検出装置 2 2 0 は、連続するしきい値個数の決定値がしきい値を満足する際に、製造工程が定常状態に達したものと判定することができる。図 8 を特定例として用いれば、検出装置 2 2 0 が、1 . 0 以上である、連続する 3 つの正の決定値を特定した際に製造工程が定常状態に達したものと判定するように構成されている場合に、検出装置 2 2 0 は、こうした判定をおよそタイムステップ 6 8 で行うことができる。

40

【 0 0 9 8 】

他の例として、検出装置 2 2 0 は、複数の決定値（例えば、連続する一連の正の決定値）の平均値または加重平均値がしきい値を満足する際に、製造工程が定常状態に達したものと判定することができる。一部の実現では、検出値のしきい値を用いることにより、（例えば、製造工程が本質的に確率的であり得るので）製造工程が定常状態に達したものと誤判定することを防ぐことができる。

【 0 0 9 9 】

以上に示すように、図 8 は例示として提供するに過ぎない。他の例が可能であり、図 8

50

に関して説明したものと異なることができる。

【 0 1 0 0 】

図 6 に戻れば、製造工程が定常状態に達していない場合（ブロック 6 3 0 の「いいえ」）プロセス 6 0 0 は、製造工程に関連する追加的スペクトルデータを含むことができる。例えば、検出装置 2 2 0 は、製造工程が定常状態に達していないものと（例えば、製造工程がまだ非定常状態であるものと）判定することができ、そして（例えば、製造工程中の次のタイムステップで収集される）追加的スペクトルデータを待つことができる。

【 0 1 0 1 】

一部の実現では、この追加的スペクトルデータに基づいて、上述した方法で、製造工程が定常状態に達しているか否かを判定することができる。一部の実現では、検出装置 2 2 0 は、スペクトルデータを受信して製造工程が定常状態に達したか否かを判定することを、製造工程が定常状態に達したものと検出装置 2 2 0 が判定するまで継続することができる。

10

【 0 1 0 2 】

図 6 にさらに示すように、製造工程が定常状態に達した場合（ブロック 6 3 0 の「はい」）、プロセス 6 0 0 は、定常状態に関連する定量的測定基準を定めるステップを含むことができる（ブロック 6 4 0 ）。例えば、検出装置 2 2 0 は、製造工程が定常状態に達したものと判定することができ、そして定常状態に関連する定量的測定基準を定めることができる。

【 0 1 0 3 】

20

この定量的測定基準は、定常状態における化合物の成分の濃度、定常状態における粒径、等のような定常状態に関連する定量的特性を示す測定基準を含むことができる。一部の実現では、検出装置 2 2 0 がスペクトルデータに基づいて検出した定常状態が、粒径のような特定の物理特性を有する成分化合物の特定組成に対応することができる。従って、上記定量的測定基準は、定常状態に関連するスペクトルデータに基づいて予測することができる。

【 0 1 0 4 】

例えば、一部の実現では、検出装置 2 2 0 が、当該スペクトルデータに基づいて定常状態を検出したスペクトルデータを入力として受信し、定常状態に関連する定量的測定基準を出力として提供する回帰モデル（例えば、PLS 回帰モデル、SVR モデル）を記憶するか、こうした回帰モデルにアクセスすることができる。この例では、回帰モデルからの出力を、例えば、化合物の各成分の濃度、化合物の特定サイズ、等とすることができる。

30

【 0 1 0 5 】

一部の実現では、検出装置 2 2 0 が、上記回帰モデルを記憶するか、こうした回帰モデルにアクセスすることができる。それに加えて、あるいはその代わりに、検出装置 2 2 0 は、学習スペクトルデータ及び定量的学習データ（例えば、学習スペクトルデータに対応する定量的測定基準を識別する情報）に基づいて、上記回帰モデルを生成することができる。一部の実現では、定量的測定基準の決定が随意的である。

【 0 1 0 6 】

図 6 にさらに示すように、プロセス 6 0 0 は、製造工程が定常状態に達したことの指標、及び上記定量的測定基準に関連する情報を提供するステップを含むことができる（ブロック 6 5 0 ）。例えば、検出装置 2 2 0 は、製造工程が定常状態に達したことの指標、及び上記定量的測定基準に関連する情報を提供することができる。

40

【 0 1 0 7 】

一部の実現では、検出装置 2 2 0 が、製造工程が定常状態に達したことの指標、及び / または、ユーザ装置 2 3 0 のような他の装置向けの定量的測定基準に関連する情報を提供することができる（これにより、ユーザは、製造工程が定常状態に達したことを知ること、及び / または定量的測定基準に関連する情報を見ることができる）。

【 0 1 0 8 】

それに加えて、あるいはその代わりに、検出装置 2 2 0 は、製造工程が定常状態に達し

50

たことの指標を提供して、ある動作を自動的に実行させることができる。例えば、検出装置 220 は、製造工程を実行することに関連する装置にこの指標を提供して、製造工程を停止させて（例えば、定常状態に関連する混合工程を停止させて）、製造工程中の次のステップを開始させて、製造工程を再開する（例えば、新たな原材料に対して混合工程を再開する）ことができる。

【0109】

図 6 は、プロセス 600 のブロックの例を示しているが、一部の實現では、プロセス 600 が、図 6 に示すものに追加したブロック、図 6 に示すものよりも少数のブロック、図 6 に示すものとは異なるブロック、あるいは図 6 に示すものとは異なるように配置されたブロックを含むことができる。それに加えて、あるいはその代わりに、プロセス 600 のブロックのうち 2 つ以上を並行して実行することができる。

10

【0110】

本明細書中に説明した實現は、製造工程（例えば、連続製造工程、バッチ製造工程、等）が定常状態に達したか否かを判定するための SVM 分類モデルを生成すること、及び SVM 分類モデルを用いて、かつ製造工程に関連する多変量スペクトルデータに基づいて、製造工程が定常状態に達したか否かを判定することができる検出装置を提供する。一部の實現では、SVM 分類モデルが、多数の変数（例えば、80 変数、120 変数、150 変数、等）を考慮に入れ、これにより、SVM 分類モデルの精度及び／またはロバスト性を（例えば、単変量技術または PCA 技術に比べて）向上させることができる。

【0111】

20

以上の開示は、図示及び説明を提供するが、網羅的であること、あるいは實現を開示した明確な形態に限定することは意図していない。以上の開示を考慮した変更及び変形が可能であり、あるいは實現の実施より変更及び変形を獲得することができる。

【0112】

本明細書中に用いる構成要素とは、ハードウェア、ファームウェア、及び／またはハードウェアとソフトウェアの組合せとして広義に解釈されることを意図している。

【0113】

一部の實現は、しきい値に関連して本明細書中に説明している。本明細書中に用いる、しきい値を満足するとは、しきい値よりも大きい値、しきい値よりも多い値、しきい値よりも高い値、しきい値以上である値、しきい値よりも小さい値、しきい値よりも少ない値、しきい値よりも低い値、しきい値以下である値、しきい値に等しい値、等を参照する。

30

【0114】

本明細書中に説明したシステム及び／または方法は、ハードウェア、ファームウェア、あるいはハードウェアとソフトウェアの組合せの異なる形態で實現することができることは明らかである。これらのシステム及び／または方法を実現するために使用される実際の特化したハードウェアまたはソフトウェア・コードは、實現を限定するものではない。従って、本明細書中では、システム及び／または方法の動作及び挙動を特定のソフトウェア・コードを参照せずに説明したが、ソフトウェア及びハードウェアは、本明細書中の説明に基づくシステム及び／または方法を実現するように設計することができることは明らかである。

40

【0115】

特徴の特定の組合せを、特許請求の範囲に記載し、及び／または明細書中に開示しているが、これらの組合せは可能な實現の開示を限定することは意図していない。実際に、これらの特徴の多数は、特許請求の範囲に具体的に記載していない方法、及び／または明細書中に開示していない方法で組み合わせることができる。以下に挙げる各従属請求項は 1 つの請求項のみに従属することがあるが、可能な實現の開示は、特許請求の範囲中の各従属請求項を他のあらゆる請求項と組み合わせたものを含む。

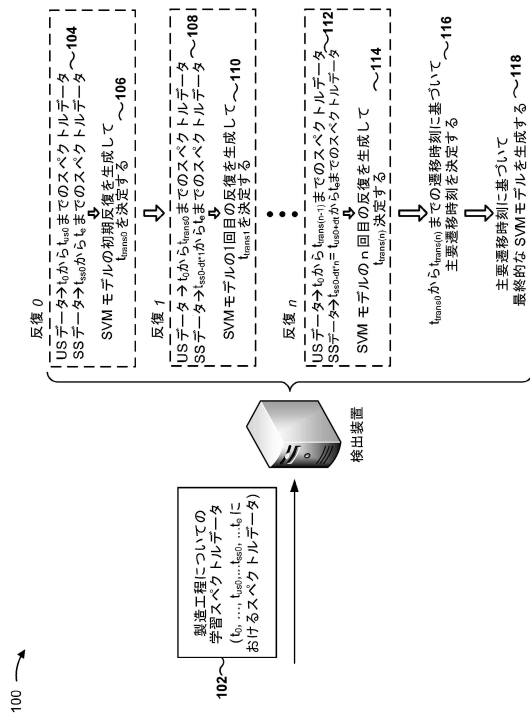
【0116】

本明細書中に用いるどの要素も動作も命令も、特に断りのない限り、決定的または不可欠なものとして解釈するべきでない。また、本明細書中に用いる「ある…」は、1 つ以

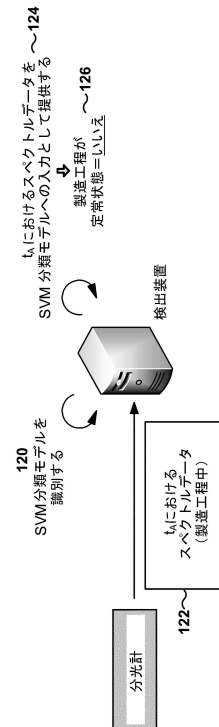
50

上のアイテムを含むことを意図しており、「１つ以上の」と互換的に用いることができる。さらに、本明細書中に用いる「集合」とは、１つ以上のアイテム（例えば、関係するアイテム、無関係なアイテム、関係するアイテムと無関係なアイテムとの組合せ、等）を含むことを意図している。１つだけのアイテムを意図している場合、「１つの」または類似の文言を用いている。また、本明細書中に用いる「有する」、「有している」等は、上限がない用語を意図している。さらに、「基づく」は、特に断りのない限り「少なくとも部分的にに基づく」ことを意味することを意図している。

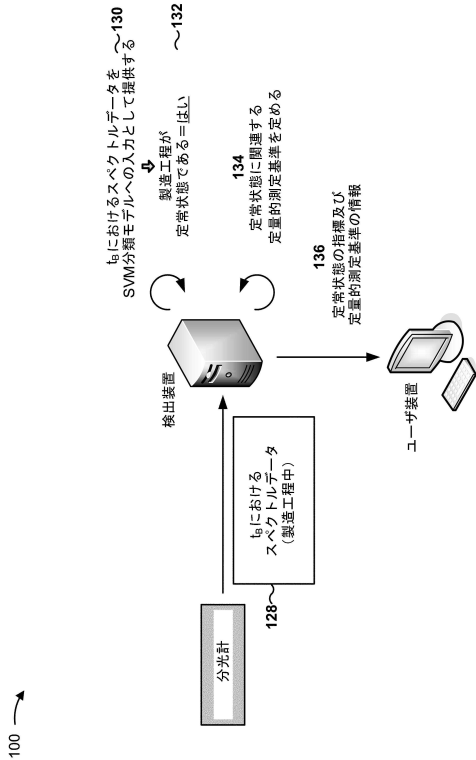
【 図 1 A 】



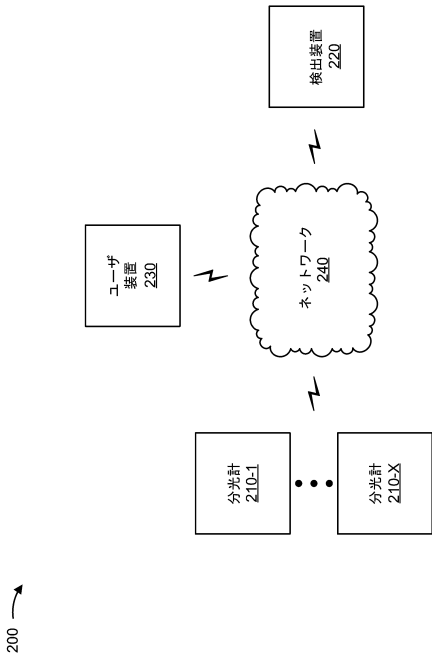
【 図 1 B 】



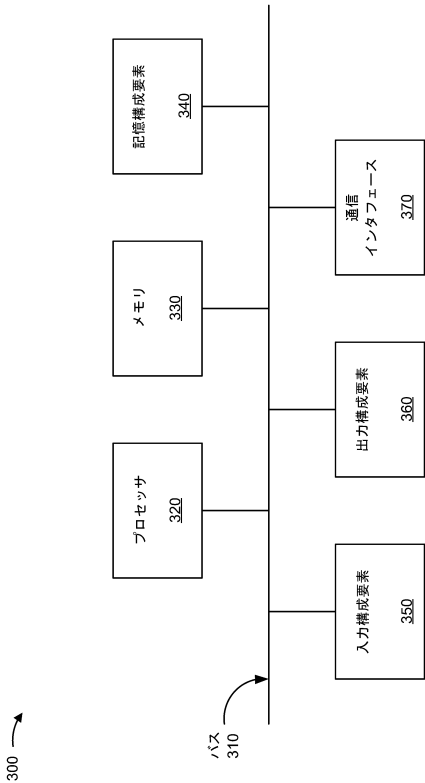
【図 1 C】



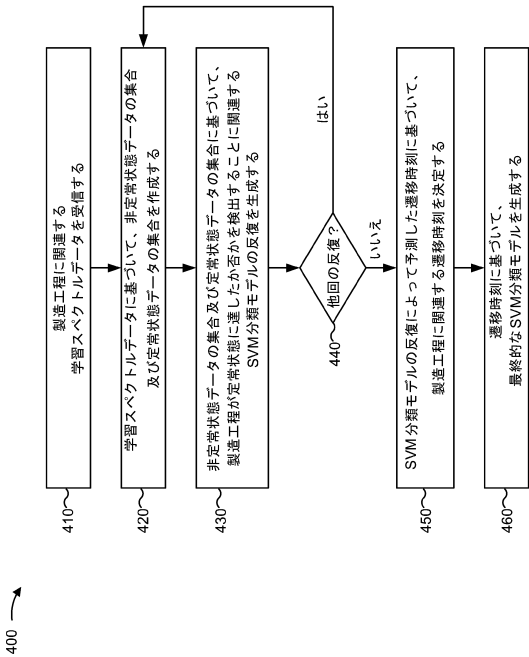
【図 2】



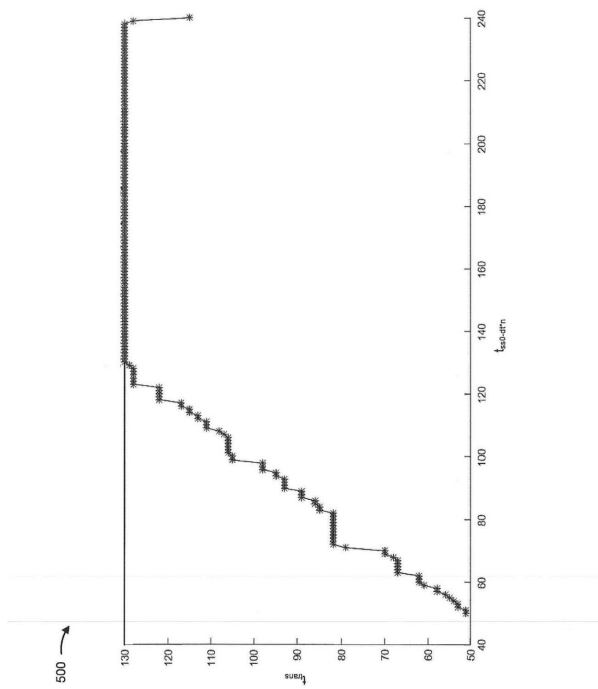
【図 3】



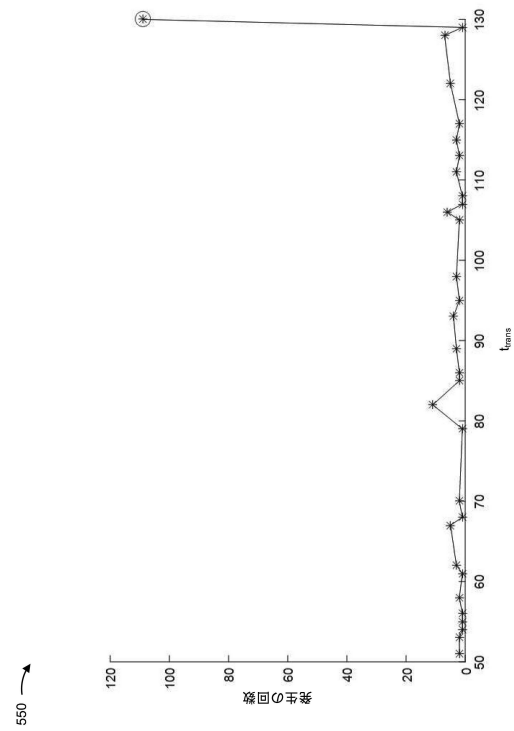
【図 4】



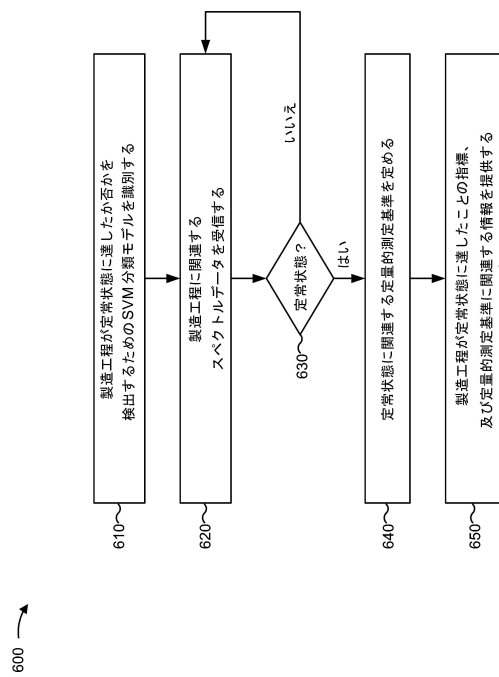
【図 5 A】



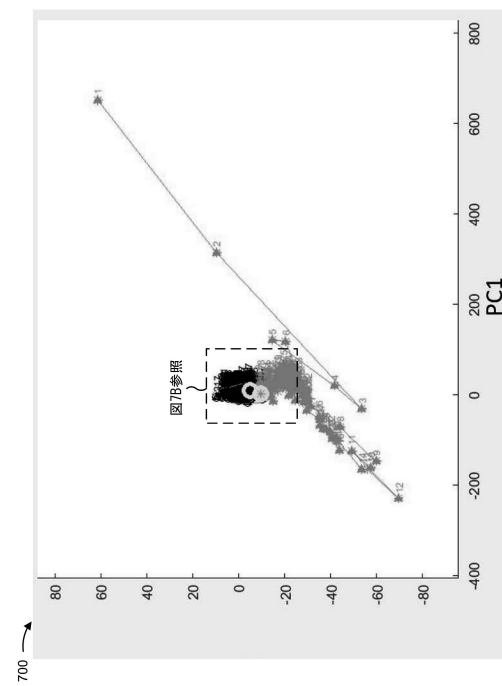
【図 5 B】



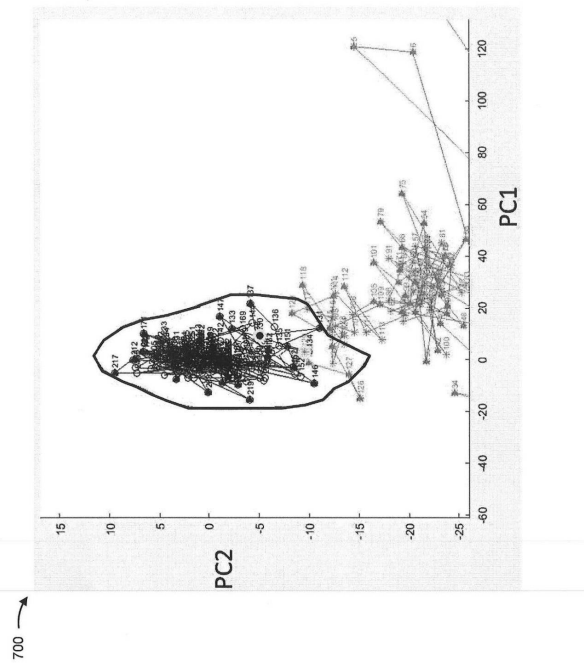
【図 6】



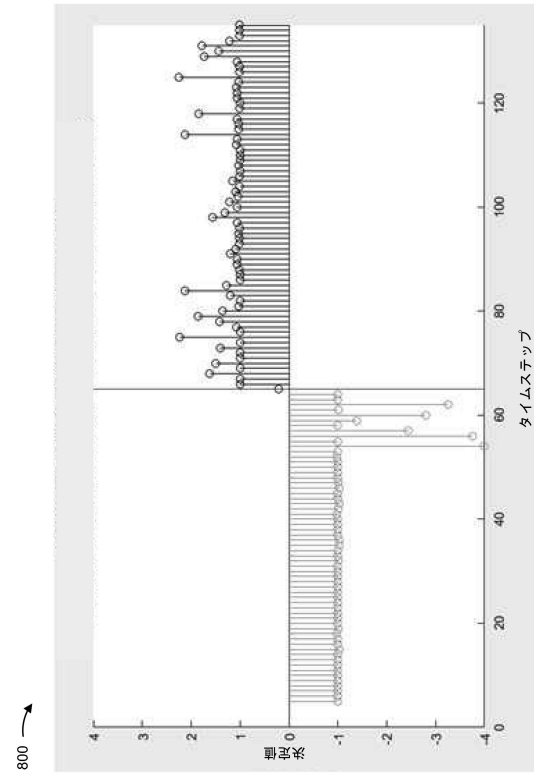
【図 7 A】



【図 7 B】



【図 8】



フロントページの続き

- (72)発明者 チャンメン ション
アメリカ合衆国 カリフォルニア州 94065 レッドウッド シティ メディテレーニアン
レーン 789
- (72)発明者 ペン ゴー
アメリカ合衆国 コネチカット州 06877 リッジフィールド タリ ホウ ロード 32
- (72)発明者 ラン スン
アメリカ合衆国 カリフォルニア州 95404 サンタ ローザ シェアブルック ドライブ
3772

審査官 嶋田 行志

- (56)参考文献 特表2010-527017(JP,A)
特開2017-049246(JP,A)
特表2003-529131(JP,A)
国際公開第2007/131185(WO,A2)
国際公開第2014/042919(WO,A1)

- (58)調査した分野(Int.Cl., DB名)
G01N 21/00 - G01N 21/61
G06N 20/00
JSTPlus/JST7580/JSTChina(JDreamIII)