

【公報種別】特許法第17条の2の規定による補正の掲載  
 【部門区分】第6部門第1区分  
 【発行日】令和3年4月15日(2021.4.15)

【公開番号】特開2019-148583(P2019-148583A)  
 【公開日】令和1年9月5日(2019.9.5)  
 【年通号数】公開・登録公報2019-036  
 【出願番号】特願2019-8034(P2019-8034)  
 【国際特許分類】

G 0 1 J 3/02 (2006.01)  
 G 0 1 J 3/42 (2006.01)  
 G 0 1 N 21/359 (2014.01)  
 G 0 6 T 7/00 (2017.01)  
 G 0 6 T 7/90 (2017.01)

【F I】

G 0 1 J 3/02 Z  
 G 0 1 J 3/42 U  
 G 0 1 N 21/359  
 G 0 6 T 7/00 3 5 0 B  
 G 0 6 T 7/90 A

【手続補正書】

【提出日】令和3年3月5日(2021.3.5)

【手続補正1】

【補正対象書類名】特許請求の範囲

【補正対象項目名】全文

【補正方法】変更

【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項1】

一以上のメモリと、

前記一以上のメモリに通信可能に連結された一以上のプロセッサと、  
 を含み、

未知試料に対して実行された分光測定の結果を識別する情報を受信し、

定量化モデルの複数の第1の訓練セット試料が決定境界内にあり、かつ前記定量化モデルの複数の第2の訓練セット試料が前記決定境界外にあるように、構成可能なパラメータに基づいて前記定量化モデルの単一クラスを前記複数の第1の訓練セット試料と前記複数の第2の訓練セット試料とに分割するための前記定量化モデルのための前記決定境界を決定し、

前記決定境界に関連する、前記未知試料に対して実行された分光測定のための距離メトリックを決定し、

前記決定距離に関連する、前記定量化モデルの複数の第2の訓練セット試料のための複数の距離メトリックを決定し、

前記未知試料に対して実行された分光測定が、分光測定のための前記距離メトリックおよび前記複数の第2の訓練セット試料のための複数の距離メトリックに基づいて、前記定量化モデルに対応するか否かを判定し、

前記未知試料に対して実行された分光測定が、前記定量化モデルに対応しているか否かを示す情報を提供する、装置。

【請求項2】

前記一以上のプロセッサは、前記未知試料に対して実行された分光測定が前記定量化モ

デルに対応するか否かを判定するとき、

前記分光測定が前記定量化モデルに対応しないと判定し、

前記一以上のプロセッサは、前記未知試料に対して実行された分光測定が前記定量化モデルに対応するか否かを示す情報を提供するとき、

前記分光測定が前記定量化モデルに対応しないことを示す情報を提供する、請求項 1 に記載の装置。

【請求項 3】

前記一以上のプロセッサは、前記未知試料に対して実行された分光測定が前記定量化モデルに対応するか否かを判定するとき、

前記分光測定が前記定量化モデルに対応すると判定し、

前記一以上のプロセッサは、前記未知試料に対して実行された分光測定が前記定量化モデルに対応するか否かを示す情報を提供するとき、

前記分光測定が前記定量化モデルに対応することを示す情報を提供する、請求項 1 に記載の装置。

【請求項 4】

前記一以上のプロセッサは、前記未知試料に対して実行された分光測定が前記定量化モデルに対応するか否かを判定するとき、

前記複数の距離メトリックに対する前記距離メトリックのための統計メトリックを決定し、

前記未知試料に対して実行された分光測定が、前記統計メトリックに基づいて前記定量化モデルに対応するか否かを判定する、請求項 1 に記載の装置。

【請求項 5】

前記統計メトリックは対数正規標準偏差であり、

前記一以上のプロセッサは、前記未知試料に対して実行された分光測定が、前記統計メトリックに基づいて前記定量化モデルに対応するか否かを判定するとき、

前記対数正規標準偏差は閾値を満足すると判定し、かつ、

前記未知試料に対して実行された分光測定が、前記対数正規標準偏差が閾値を満足するとの判定に基づいて、前記定量化モデルに対応するか否かを判定する、請求項 4 に記載の装置。

【請求項 6】

前記定量化モデルは、単一クラスサポートベクトルマシン ( S C - S V M ) クラシフィアに関連付けられている、請求項 1 に記載の装置。

【請求項 7】

前記一以上のプロセッサは、更に、

前記複数の第 1 の訓練セット試料および前記複数の第 2 の訓練セット試料に関連する複数の分光測定を受信し、

前記複数の分光測定に基づいて前記定量化モデルを決定し、

複数の検証セット試料の別の複数の分光測定に基づいて前記定量化モデルを検証し、

前記定量化モデルを格納し、

前記一以上のプロセッサは、前記決定境界を決定するとき、

ストレージから前記定量化モデルを取得し、かつ、

ストレージから前記定量化モデルを取得した後に、前記決定境界を決定する、請求項 1 に記載の装置。

【請求項 8】

命令を格納する非一時的コンピュータ可読媒体であって、前記命令は、

一以上のプロセッサによって実行されるとき、前記一以上のプロセッサに、

特定の種類の対象材料に関連する定量化モデルを取得させ、

前記定量化モデルは、前記特定の種類の対象材料の試料における特定の成分の濃度を判定するように構成されており、

未知試料に対して実行された特定の分光測定の結果を識別する情報を受信させ、

前記定量化モデルの訓練セット試料の別の分光測定を前記定量化モデルのための単一クラスに集約させ、

前記訓練セット試料の別の分光測定を第 1 のグループおよび第 2 のグループに細分させ、

前記別の分光測定の第 1 のグループは決定境界内にあり、

前記別の分光測定の第 2 のグループは決定境界外にあり、

前記別の分光測定の第 2 のグループのための対応するメトリックに関連して、前記未知試料に対して実行された特定の分光測定のためのメトリックが、閾値を満足すると判定させ、

前記未知試料が前記特定の種類の対象材料ではないことを示す情報を提供させる、  
一以上の命令を含む、非一時的コンピュータ可読媒体。

【請求項 9】

前記未知試料は、前記特定の種類の対象材料とは異なる種類の材料である、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 10】

前記未知試料は、前記特定の種類の対象材料であり、かつ、前記未知試料に対する分光測定は不正確に取得された測定値である、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 11】

前記メトリックおよび対応するメトリックが決定値である、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 12】

前記閾値は、前記対応するメトリックの平均からの前記メトリックの標準偏差の閾量である、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】

前記メトリックおよび前記対応するメトリックは、単一クラスサポートベクトルマシン技術を使用して決定される、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 14】

前記定量化モデルはローカルモデルであり、

前記一以上の命令は、前記一以上のプロセッサによって実行されるとき、更に、前記一以上のプロセッサに、

前記特定の種類の対象材料に関連するグローバルモデルを使用して、前記未知試料の特定の分光測定に関連する第 1 の判定を実行させ、

前記第 1 の判定の特定の結果に基づいて、インサイチュローカルモデリング技術を使用して前記ローカルモデルを生成させ、

前記一以上のプロセッサに前記定量化モデルを取得させる前記一以上の命令は、前記一以上のプロセッサに、

前記ローカルモデルの生成に基づいて前記定量化モデルを取得させる、  
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 15】

装置によって、未知試料に対して実行された近赤外 (NIR) 分光測定の結果を識別する情報を受信するステップと、

装置によって、定量化モデルのための決定境界を決定するステップと、

前記決定境界は、前記定量化モデルの単一クラスを、前記決定境界内の定量化モデルの複数の第 1 の訓練セット試料と、前記決定境界外の定量化モデルの複数の第 2 の訓練セット試料とに分割し、

装置によって、前記未知試料に対して実行された前記 NIR 分光測定のための特定の距離メトリックが、前記複数の第 2 の訓練セット試料のための別の距離メトリックに関連する閾値を満足すると判定するステップと、

装置によって、前記未知試料に対して実行された前記 NIR 分光測定のための前記特定

の距離メトリックが、前記複数の第2の訓練セット試料のための別の距離メトリックに関連する前記閾値を満足するとの判定に基づいて、前記未知試料に対して実行された前記NIR分光測定が、前記定量化モデルに対応しないことを示す情報を提供するステップと、を含む、方法。

【請求項16】

分類モデルを使用する前記NIR分光測定に基づいて、かつ、前記未知試料に対して実行された前記特定の距離メトリックが、前記複数の第2の訓練セット試料のための別の距離メトリックに関連する前記閾値を満足するとの判定に基づいて、前記未知試料の種類を判定するステップと、

前記未知試料の種類を識別する情報を提供するステップと、を更に含む、請求項15に記載の方法。

【請求項17】

カーネル関数に基づいて前記決定境界を決定するステップを更に含む、請求項15に記載の方法。

【請求項18】

前記カーネル関数は、

ラジアル基底関数、

多項式関数、

線形関数、または

指数関数、

のうちの少なくとも1つである、請求項17に記載の方法。

【請求項19】

前記閾値は、

1 標準偏差、

2 標準偏差、または

3 標準偏差、

のうちの少なくとも1つよりも大きい、請求項15に記載の方法。

【請求項20】

前記複数の第1の訓練セット試料および前記複数の第2の訓練セット試料は、成分の一組の濃度に関連付けられており、

前記成分の一組の濃度のうちの成分の各濃度は、前記複数の第1の訓練セット試料および前記複数の第2の訓練セット試料の訓練セット試料の閾量に関連付けられている、請求項15に記載の方法。