(12) 按照专利合作条约所公布的国际申请

(19) 世界知识产权组织
国 际 局

(43) 国际公布日
2018 年 12 月 20 日 (20.12.2018)

WIPO | PCT

(10) 国际公布号
WO 2018/227338 A1

(51) 国际专利分类号:
G01N 21/65 (2006.01)

(21) 国际申请号: PCT/CN2017/087942

(22) 国际申请日: 2017 年 6 月 12 日 (12.06.2017)

(25) 申请语言: 中文

(26) 公布语言: 中文

(71) 申请人: 深圳前海达闼云端智能科技有限公司 (CLOUDMINDS (SHENZHEN) ROBOTICS SYSTEMS CO., LTD.) [CN/CN]; 中国广东省深圳市前海深港合作区前湾一路1号A栋201室（入驻深圳市前海商务秘书有限公司）, Guangdong 518000 (CN)。

(72) 发明人: 骆磊(LUO, Lei); 中国广东省深圳市前海深港合作区前湾一路1号A栋201室（入驻深圳市前海商务秘书有限公司）, Guangdong 518000 (CN)。 黄晓庆(HUANG, William Xiao-qing); 中国广东省深圳市前海深港合作区前湾一路1号A栋201室（入驻深圳市前海商务秘书有限公司）, Guangdong 518000 (CN)。

(74) 代理人: 深圳市爱迪森知识产权代理事务所（普通合伙）(SHENZHEN AIDISEN INTELLECTUAL PROPERTY OFFICE); 中国广东省深圳市南山区南海大道4050号上海汽车大厦206室, Guangdong 518057 (CN)。

(81) 指定国(除另有指明，要求每一种可提供的国家保护): 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, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK,

(54) **Title:** METHOD, APPARATUS AND DEVICE FOR DETECTING COMPOSITION OF SUBSTANCE

(54) **发明名称**: 物质成分检测方法、装置和检测设备

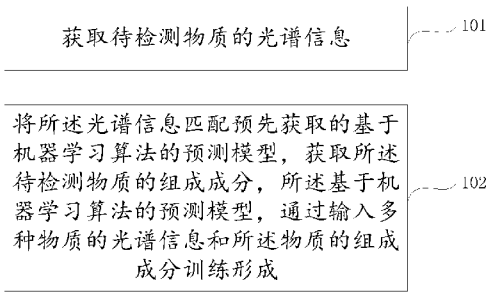


图 2

101 Acquire the spectral information of a substance to be detected

102 Match the spectral information with a machine learning algorithm based prediction model obtained in advance to obtain the composition of the substance to be detected, the machine learning algorithm based prediction model being trained by means of inputting spectral information of a plurality of substances and the composition of the substances

(57) Abstract: A method, apparatus and device for detecting the composition of a substance. The method comprises: acquiring spectral information of a substance to be detected (10) (101); and matching the spectral information with a machine learning algorithm based prediction model obtained in advance to obtain the composition of the substance to be detected (10), the machine learning algorithm based prediction model being trained by means of inputting spectral information of a plurality of substances and the composition of the substances (102). By acquiring the spectral information of the substance to be detected (10) and then matching the spectral information with the machine learning algorithm based prediction model, a prediction result of the composition of the substance to be detected (10) is obtained. The method combines machine learning algorithm with spectral recognition, discards traditional algorithm, improves recognition speed, and greatly enhances the efficiency of substance detection.

(57) 摘要: 一种物质成分检测方法、装置和检测设备，检测方法包括：获取待检测物质（10）的光谱信息（101）；将光谱信息匹配预先获取的基于机器学习算法的预测模型，获取待检测物质（10）的组成成分，基于机器学习算法的预测模型，通过输入多种物质的光谱信息和物质的组成成分训练形成（102）。通过获取待检测物质（10）的光谱信息（101），然后将光谱信息匹配基于机器学习算法的预测模型，获得对待检测物质（10）的组成成分的预测结果。检测方法将机器学习算法与光谱识别相结合，摒弃了传统的算法，提高了识别速度，使物质检测的效率得以大幅提升。

WO 2018/227338 A1

[见续页]

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, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW。

(84) 指定国(除另有指明，要求每一种可提供的地区保护)：ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), 欧亚 (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), 欧洲 (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)。

本国际公布:

— 包括国际检索报告(条约第21条(3))。

物质成分检测方法、装置和检测设备

技术领域

本申请实施例涉及物质成分检测领域，例如涉及一种物质成分检测方法、装置和检测设备。

背景技术

近年来，物质检测设备应用日趋广泛，包括安检中检测可疑物品、药监局检测药品成分、防化部队进行爆炸现场勘查等专业领域，也包括检测农药残留、检测是否存在三聚氰胺、检测地沟油和真假酒等民用领域，尤其在食品安全领域得到广泛应用。目前的检测设备，例如拉曼检测终端，采用拉曼光谱分析的方法，能够比较快速和准确的检测出物质分子成分。

在实现本申请过程中，发明人发现相关技术中至少存在如下问题：在使用拉曼检测终端进行混合物的检测时，限于算法本身和设备计算能力的问题，检测过程较慢，效率低下。

发明内容

本申请实施例的一个目的是提供一种新的物质成分检测方法、装置和检测设备，在用于检测混合物的成分时，能快速检测出混合物的成分。

第一方面，本申请实施例提供了一种物质成分检测方法，所述检测方法应用于检测设备，所述方法包括：

获取待检测物质的光谱信息；

将所述光谱信息匹配预先获取的基于机器学习算法的预测模型，获取所述待检测物质的组成成分，所述基于机器学习算法的预测模型，通过输入多种物质的光谱信息和所述物质的组成成分训练形成。

第二方面，本申请实施例还提供了一种物质成分检测装置，所述检测装置应用于检测设备，所述装置包括：

光谱测量模块，用于获取待检测物质的光谱信息；

物质成分获取模块，用于将所述光谱信息匹配预先获取的基于机器学习算

法的预测模型，获取所述待检测物质的组成成分，所述基于机器学习算法的预测模型，通过输入多种物质的光谱信息和所述物质的组成成分训练形成。

第三方面，本申请实施例还提供了一种检测设备，包括：

至少一个处理器；以及，

与所述至少一个处理器通信连接的存储器；其中，

所述存储器存储有可被所述至少一个处理器执行的指令，所述指令被所述至少一个处理器执行，以使所述至少一个处理器能够执行上述的方法。

本申请实施例提供的物质成分检测方法、装置和检测设备，通过获取待检测物质的光谱信息，然后将该光谱信息匹配基于机器学习算法的预测模型，由于基于机器学习算法的预测模型通过输入多种物质的光谱信息和所述物质的组成成分训练而成，因此将待检测物质的光谱信息匹配基于机器学习算法的预测模型，就能获得对待检测物质的组成成分的预测结果。本申请实施例将机器学习算法与光谱识别相结合，摒弃了传统的算法，提高了识别速度，使物质检测的效率得以大幅提升。

附图说明

一个或多个实施例通过与之对应的附图中的图片进行示例性说明，这些示例性说明并不构成对实施例的限定，附图中具有相同参考数字标号的元件表示为类似的元件，除非有特别申明，附图中的图不构成比例限制。

图 1a 是本申请方法和装置的应用场景示意图；

图 1b 是本申请方法和装置的应用场景示意图；

图 2 是本申请检测方法的一个实施例的流程图；

图 3 是本申请检测方法的一个实施例中预先获取基于机器学习算法的预测模型步骤的流程图；

图 4 是物质的拉曼光谱示意图；

图 5 是本申请检测方法的一个实施例中获取语音命令步骤的流程图；

图 5 是本申请检测方法的一个实施例的流程图；

图 6 是本申请检测装置的一个实施例的结构示意图；

图 7 是本申请检测装置的一个实施例的结构示意图；

图 8 是本申请检测装置的一个实施例的结构示意图；以及

图 9 是本申请实施例提供的检测设备的硬件结构示意图。

具体实施方式

为使本申请实施例的目的、技术方案和优点更加清楚，下面将结合本申请实施例中的附图，对本申请实施例中的技术方案进行清楚、完整地描述，显然，所描述的实施例是本申请一部分实施例，而不是全部的实施例。基于本申请中的实施例，本领域普通技术人员在没有作出创造性劳动前提下所获得的所有其他实施例，都属于本申请保护的范围。

本申请实施例提供了一种基于机器学习算法检测物质成分的检测方案，适用于图 1a 和图 1b 所示的应用场景。在图 1a 所示的应用场景中，包括待检测物质 10、检测终端 21 和检测设备 20，其中，检测终端 21 用于获得待检测物质 10 的光谱信息，然后将待检测物质 10 的光谱信息传送给检测设备 20。检测设备 20 用于根据待检测物质 10 的光谱信息进行组成成分识别。检测终端 21 与检测设备 20 之间可以通过网络 30 互相通信，其中，网络 30 可以是例如家庭或公司的局域网，或一个特定网络等。检测终端 21 和检测设备 20 具有至少一个网络接口，与网络 30 建立通信连接。检测设备 20 可以是与检测终端 10 通过网络相连的云端服务器或者其他服务器。如图 1b 所示，检测设备 20 也可以将检测终端的功能集成在检测设备 20 中，由检测设备 20 单独完成从待检测物质 10 获取待检测物质 10 的光谱信息，并通过该光谱信息获取待检测物质的成分。

检测设备 20 预先将预设的单物质光谱库(预设的单物质光谱库为大数据库，包含多种单物质及其对应的光谱信息）中的单物质按照不同组成和不同占比获取大量的混合物以及混合物对应的光谱信息，然后将大量混合物的组成成分和混合物的光谱信息作为输入，基于机器学习算法进行模型训练，获取基于机器学习算法的预测模型。该预测模型基于机器学习算法和大量混合物光谱信息和组成成分的数据，因此当获取待检测物质的光谱信息后，将该光谱信息匹配该预测模型就能获得待检测物质的组成成分预测结果。本方案将机器学习算法与光谱识别相结合，摒弃了传统的算法，使物质检测的效率得以大幅提升。

需要说明的是，在实际应用过程中，该应用场景还可以包括更多的待检测物质 10 和检测设备 20 以及检测终端 21。

本申请实施例提供了一种物质成分检测方法，所述物质成分检测方法可由图 1a 和图 1b 中的检测设备 20 执行,如图 2 所示,所述物质成分检测方法包括：

步骤 101：获取待检测物质的光谱信息；

本申请实施例中的光谱识别方法可以采用拉曼光谱识别方法、红外光谱识别方法或者其他任何一种光谱识别方法，即所述光谱信息可以为拉曼光谱、红外光谱等。

步骤 102：将所述光谱信息匹配预先获取的基于机器学习算法的预测模型，获取所述待检测物质的组成成分，所述基于机器学习算法的预测模型，通过输入多种物质的光谱信息和所述物质的组成成分训练形成。

机器学习算法具有自学习功能，把大量不同物质的光谱信息和组成成分作为输入，训练预测模型，预测模型就会通过自学习功能，学会根据物质的光谱信息识别物质的组成成分。

因此将待检测物质的光谱信息匹配基于机器学习算法的预测模型，就能获得对待检测物质的组成成分的预测结果。其中，作为输入的多种物质可以是单物质也可以是混合物。考虑到现实生活中的物品基本都是以混合物的形式存在，所以也可以只将混合物的光谱信息和混合物的组成成分作为输入进行模型训练。

在实际应用中，返回的对所述待检测物质的组成成分的预测结果有可能为一个，也有可能为多个。预测结果为多个时，需要确认每个预测结果所占的概率。如果某个预测结果的概率最大且超过预设阈值，则确认该预测结果为待检测物质的成分；否则，将各预测结果中预设数量的概率相对较大的预测结果的共有成分作为所述待检测物质的成分。

例如，返回的预测结果为：y+a、y+b、y+c+d、…，如果 y+a 的概率最大且概率超过预设阈值，则可以直接将预测结果 y+a 作为最终结果，即作为待检测物质的成分。

如果 y+a 的概率最大但是概率没有超过预设阈值，如果预设数量为 3，且 y+a、y+b、y+c+d 的概率相对其他预测结果大，则将 y+a、y+b、y+c+d 的共有成

分 y 作为最终结果。

本申请实施例将机器学习算法与光谱识别相结合，摒弃了传统的算法，提高了识别速度，使物质检测的效率得以大幅提升。

为了提高模型预测的准确性，该模型训练需要基于大量数据进行训练。因此应用中，可以预设一个包含大量单物质和其对应的光谱信息的单物质光谱库，从该单物质光谱库中选取单物质，按照不同组成和不同比例组成混合物作为输入，进行模型训练。请参照图 3，检测设备预先获取基于机器学习算法的预测模型时，执行以下步骤：

步骤 201：从预设的单物质光谱库中获取各单物质的光谱信息；

如图 4 所示，为两种粉末状物质的拉曼光谱示意图，而实际应用中，检测设备实际获取的光谱信息是与光谱曲线对应的一组数据，示例如下：

0 0.002010

2 0.001219

……

12080.012633

12100.003053

12120.000525

……

1998 0.001028

2000 0.001232

每一组的第一个数字对应横坐标，第二个数字对应纵坐标。以拉曼物质检测设备为例，横坐标的步进一般来说为 2，横坐标一般取 1000-2000 个点。

步骤 202:将各单物质按照不同组成和不同占比进行混合，获得各混合物的光谱信息；

不同组成即混合物中包含单物质的种类，不同占比即混合物中各单物质的相对含量，也即每种单物质占混合物的比例。不同占比针对的是组成成分相同的混合物，即针对包含相同种类单物质的组合，按照每种单物质的占比不同，

获得一组混合物。这样针对组成成分相同的混合物，有大量占比不同的数据作为输入进行模型训练，提高了组成成分识别的准确性。

步骤 203:将各混合物的光谱信息和组成成分作为输入，基于机器学习算法进行模型训练，获得基于机器学习算法的预测模型。

即将步骤 202 中获取的混合物作为输入，基于机器模型算法，进行模型训练。其中，机器学习算法可以采用人工神经网络算法。人工神经网络是根据人的认识过程而开发出的一种算法，假如我们现在只有一些输入和相应的输出，而对如何由输入得到输出的机理并不清楚，那么我们可以把输入与输出之间的未知过程看成是一个“网络”，通过不断地给这个网络输入和相应的输出来“训练”这个网络，网络根据输入和输出不断地调节自己的各节点之间的权值来满足输入和输出。这样，当训练结束后，我们给定一个输入，网络便会根据自己已调节好的权值计算出一个输出。这就是神经网络的简单原理。

在本申请实施例中为了根据混合物的光谱信息（输入）识别混合物的组成成分（输出），先把大量不同混合物的光谱信息和组成成分输入人工神经网络，网络就会通过自学习功能，学会根据混合物的光谱信息识别混合物的组成成分。

具体的，在所述方法的某些实施例的步骤 202 中，可以列出各单物质的所有可能组合再基于不同比例获得混合物，如下：

步骤 2021：获取预设单物质光谱库中各单物质的可能组合，或者，获取预设单物质光谱库中单物质组合种类不超过预设阀值的各单物质的可能组合；

获取单物质的所有可能组合的混合物，例如，假设单物质光谱库中有 n 种物质，则单物质的所有可能组合的混合物种类为 $\sum_{x=2}^{n} C(n, x)$，其中，x 为混合物中单物质的种类。在实际应用中，过多种物质的混合情况并不多见，或者说，即使真的是很多种物质混合，使用者一般仅关心含量多的前若干种，含量很少的成分对使用者并不一定有意义，因此可以设置混合种类的上限 xmax，即预设阀值。那么，单物质的所有可能组合的混合物种类为 $\sum_{x=2}^{xmax} C(n, x)$，预设阀值 xmax 的值可以根据实际需要设定。

步骤 2022：根据每个组合中单物质的种类数量，按照预设的步进值，获取

每个组合的多个混合比例；

即将步骤2021中每个种类的混合物按其所含单物质的不同含量获得一组成分相同含量不同的混合物。假设x种单物质分别为j1，j2…jx，将其占比按照一定的预设步进值以排列组合方式分别置为z1%，z2%…zx%。假设x为3，则此处初始z1，z2，z3可分别设置为99.98、0.01、0.01，99.97、0.02、0.01，…，99.97、0.01、0.02，以此类推做所有可能排列组合，直到z1，z2，z3的值变为0.01，0.01，99.98。该例中预设步进值为0.01，预设步进制也可以为其他值，本申请对此不做限制，步进值越小，则训练的样本越多，整个训练时间也就越长。

步骤2023：根据各单物质的可能组合和每个组合的多个混合比例，获取多个混合物；

步骤2024：将每个混合物的各个组成成分的光谱信息按照混合比例进行线性叠加，获得混合物的光谱信息。

仍以步骤2022中x种单物质分别为j1，j2…jx为例，j1，j2…jx的占比分别为z1%，z2%…zx%，分别获得单物质j1，j2…jx的光谱信息中某一相同横坐标对应的纵坐标分量值（即光谱强度值），将该纵坐标分量值按照混合比例（即占比）相加得到混合物质在该横坐标点的纵坐标值。例如，假设在横坐标a1处， j1，j2…jx的光谱强度值分别为b11，b12…b1x，则此混合物在横坐标a1处的光谱强度值为b11 * z1% + b12 * z2% + … + b1x * zx%。例如单物质1和单物质2混合，单物质1在横坐标950处的纵坐标为0.4，单物质2在横坐标950处的纵坐标为0.2，单物质1和单物质2的占比为3：7，则可以得出该混合物在横坐标950处的纵坐标为0.4*30% + 0.2 * 70% = 0.26。通过对横坐标上的每一个点求混合物的纵坐标光谱强度值，即可得到该混合物的拉曼光谱信息。

进一步的，在所述方法的其他实施例中，还可以根据待检测物质的组成成分获取待检测物质中各组成成分的占比，包括以下步骤：

如果检测结果只包含一种组成成分，则该组成成分的占比为100%。

如果检测结果判定所述待检测物质包括至少两种组成成分，则从预设的单物质光谱库中获取所述待检测物质中各组成成分的光谱信息；根据待检测物质的光谱信息和待检测物质中各组成成分的光谱信息，获取各组成成分在待检测物质中的占比。

即如果所述待检测物质为包括多个单物质的混合物，则从单物质光谱库中获取各单物质的光谱数据，并对该混合物的光谱数据进行拟合，得到各单物质在混合物中的占比。实际计算时，如果该混合物包括 x 种单物质，则只要取该混合物光谱数据的 x－1 个特征较明显的横坐标点（有波的横坐标点），即可通过求解（x-1）元一次方程得到各单物质的占比。

如图 5 所示，为所述方法的一个实施例的流程示意图，在该实施例中，所述方法包括：

步骤 301：从预设的单物质光谱库中获取各单物质的光谱信息；

步骤 302：获取预设单物质光谱库中各单物质的可能组合，或者，获取预设单物质光谱库中单物质组合种类不超过预设阀值的各单物质的可能组合；

步骤 303：根据每个组合中单物质的种类数量，按照预设的步进值，获取每个组合的多个混合比例；

步骤 304：根据各单物质的可能组合和每个组合的多个混合比例，获取多个混合物；

步骤 305：将每个混合物的各个组成成分的光谱信息按照混合比例进行线性叠加，获得混合物的光谱信息。

步骤 306：将各混合物的光谱信息和组成成分作为输入，基于机器学习算法进行模型训练，获得基于机器学习算法的预测模型。

步骤 307：获取待检测物质的光谱信息；

步骤 308：将所述光谱信息匹配预先获取的基于机器学习算法的预测模型，获取所述待检测物质的组成成分。

步骤 309：根据待检测物质的组成成分获取待检测物质中各组成成分的占比。

相应的，本申请实施例还提供了一种物质成分检测装置，所述检测装置用于图 1a 或者图 1b 所示的检测设备，如图 6 所示，所述检测装置 400 包括：

光谱测量模块 401，用于获取待检测物质的光谱信息；

物质成分获取模块 402，用于将所述光谱信息匹配预先获取的基于机器学习算法的预测模型，获取所述待检测物质的组成成分，所述基于机器学习算法的预测模型，通过输入多种物质的光谱信息和所述物质的组成成分训练形成。

本申请实施例通过获取待检测物质的光谱信息，然后将该光谱信息匹配基于机器学习算法的预测模型，由于基于机器学习算法的预测模型通过输入多种物质的光谱信息和所述物质的组成成分训练而成，因此将待检测物质的光谱信息匹配基于机器学习算法的预测模型，就能获得对待检测物质的组成成分的预测结果。本申请实施例将机器学习算法与光谱识别相结合，摒弃了传统的算法，提高了识别速度，使物质检测的效率得以大幅提升。

可选的，在所述装置的其他实施例中，所述物质成分获取模块具体用于：

将所述光谱信息匹配预先获取的基于机器学习算法的预测模型，获取各针对待检测物质成分的预测结果及预测结果对应的概率；

如果预测结果的概率最大且超过预设阈值，则确认所述预测结果为待检测物质的成分；

否则，将各预测结果中预设数量的概率相对较大的预测结果的共有成分作为所述待检测物质的成分。

可选的，如图 7 所示，在所述装置的其他实施例中，所述检测装置 500 除了光谱测量模块 502 和物质成分获取模块 503 之外还包括：

预测模型获取模块 501，用于预先获取基于机器学习算法的预测模型；

所述预测模型获取模块 501 具体用于：

从预设的单物质光谱库中获取各单物质的光谱信息；

将各单物质按照不同组成和不同占比进行混合，获得各混合物的光谱信息；

将各混合物的光谱信息和组成成分作为输入，基于机器学习算法进行模型

训练，获得基于机器学习算法的预测模型。

可选的，在所述装置的某些实施例中，所述预测模型获取模块还用于：

获取预设单物质光谱库中各单物质的可能组合，或者，获取预设单物质光谱库中单物质组合种类不超过预设阀值的各单物质的可能组合；

根据每个组合中单物质的种类数量，按照预设的步进值，获取每个组合的多个混合比例；

根据各单物质的可能组合和每个组合的多个混合比例，获取多个混合物；

将每个混合物的各个组成成分的光谱信息按照混合比例进行线性叠加，获得混合物的光谱信息。

可选的，如图 8 所示，在所述装置的其他实施例中，所述检测装置 600 除了包括预测模型获取模块 601、光谱测量模块 602 和物质成分获取模块 603 之外还包括：

成分含量获取模块 604，用于根据待检测物质的组成成分获取待检测物质中各组成成分的占比；

所述成分含量获取模块 604 具体用于：

如果所述待检测物质包括至少两种组成成分，则从预设的单物质光谱库中获取所述待检测物质中各组成成分的光谱信息；

根据待检测物质的光谱信息和待检测物质中各组成成分的光谱信息，获取各组成成分在待检测物质中的占比。

可选的，在所述装置的某些实施例中，所述机器学习算法为人工神经网络学习算法。

需要说明的是，上述检测装置可执行本申请实施例所提供的检测方法，具备执行方法相应的功能模块和有益效果。未在检测装置实施例中详尽描述的技术细节，可参见本申请实施例所提供的检测方法。

图 9 是本申请实施例提供的检测设备 20 的硬件结构示意图，如图 9 所示，该检测设备 20 包括：

一个或多个处理器 22 以及存储器 23，图 9 中以一个处理器 22 为例。

处理器 22 和存储器 23 可以通过总线或者其他方式连接，图 9 中以通过总线连接为例。

存储器23作为一种非易失性计算机可读存储介质，可用于存储非易失性软件程序、非易失性计算机可执行程序以及模块，如本申请实施例中的检测方法对应的程序指令/模块（例如，附图6所示的光谱测量模块401和物质成分获取模块402）。处理器22通过运行存储在存储器23中的非易失性软件程序、指令以及模块，从而执行服务器的各种功能应用以及数据处理，即实现上述方法实施例的检测方法。

存储器23可以包括存储程序区和存储数据区，其中，存储程序区可存储操作系统、至少一个功能所需要的应用程序；存储数据区可存储根据检测装置的使用所创建的数据等。此外，存储器23可以包括高速随机存取存储器，还可以包括非易失性存储器，例如至少一个磁盘存储器件、闪存器件、或其他非易失性固态存储器件。在一些实施例中，存储器23可选包括相对于处理器22远程设置的存储器，这些远程存储器可以通过网络连接至检测装置。上述网络的实例包括但不限于互联网、企业内部网、局域网、移动通信网及其组合。

所述一个或者多个模块存储在所述存储器23中，当被所述一个或者多个处理器22执行时，执行上述任意方法实施例中的检测方法，例如，执行以上描述的图2中的方法步骤101至步骤102，图3中的方法步骤201至步骤203，图5中的方法步骤301至步骤309；实现图6中的模块401-402、图7中模块501-503，图8中模块601-604的功能。

上述产品可执行本申请实施例所提供的方法，具备执行方法相应的功能模块和有益效果。未在本实施例中详尽描述的技术细节，可参见本申请实施例所提供的方法。

本申请实施例提供了一种非易失性计算机可读存储介质，所述计算机可读存储介质存储有计算机可执行指令，该计算机可执行指令被一个或多个处理器执行，例如图9中的一个处理器22，可使得上述一个或多个处理器可执行上述任意方法实施例中的检测方法，例如，执行以上描述的图2中的方法步骤101至步

骤102，图3中的方法步骤201至步骤203，图5中的方法步骤301至步骤309；实现图6中的模块401-402、图7中模块501-503，图8中模块601-604的功能。

以上所描述的装置实施例仅仅是示意性的，其中所述作为分离部件说明的单元可以是或者也可以不是物理上分开的，作为单元显示的部件可以是或者也可以不是物理单元，即可以位于一个地方，或者也可以分布到多个网络单元上。可以根据实际的需要选择其中的部分或者全部模块来实现本实施例方案的目的。

通过以上的实施方式的描述，本领域普通技术人员可以清楚地了解到各实施方式可借助软件加通用硬件平台的方式来实现，当然也可以通过硬件。本领域普通技术人员可以理解实现上述实施例方法中的全部或部分流程是可以通过计算机程序来指令相关的硬件来完成，所述的程序可存储于一计算机可读取存储介质中，该程序在执行时，可包括如上述各方法的实施例的流程。其中，所述的存储介质可为磁碟、光盘、只读存储记忆体(Read-Only Memory，ROM)或随机存储记忆体(RandomAccessMemory，RAM)等。

最后应说明的是：以上实施例仅用以说明本申请的技术方案，而非对其限制；在本申请的思路下，以上实施例或者不同实施例中的技术特征之间也可以进行组合，步骤可以以任意顺序实现，并存在如上所述的本申请的不同方面的许多其它变化，为了简明，它们没有在细节中提供；尽管参照前述实施例对本申请进行了详细的说明，本领域的普通技术人员应当理解：其依然可以对前述各实施例所记载的技术方案进行修改，或者对其中部分技术特征进行等同替换；而这些修改或者替换，并不使相应技术方案的本质脱离本申请各实施例技术方案的范围。

权利要求书

1、一种物质成分检测方法，所述检测方法应用于检测设备，其特征在于，所述方法包括：

获取待检测物质的光谱信息；

将所述光谱信息匹配预先获取的基于机器学习算法的预测模型，获取所述待检测物质的组成成分，所述基于机器学习算法的预测模型，通过输入多种物质的光谱信息和所述物质的组成成分训练形成。

2、根据权利要求 1 所述的方法，其特征在于，所述方法还包括：

预先获取基于机器学习算法的预测模型；

所述预先获取基于机器学习算法的预测模型，包括：

从预设的单物质光谱库中获取各单物质的光谱信息；

将各单物质按照不同组成和不同占比进行混合，获得各混合物的光谱信息；

将各混合物的光谱信息和组成成分作为输入，基于机器学习算法进行模型训练，获得基于机器学习算法的预测模型。

3、根据权利要求 2 所述的方法，其特征在于，所述将各单物质按照不同组成和不同占比进行混合，获得各混合物的光谱信息，包括：

获取预设单物质光谱库中各单物质的可能组合，或者，获取预设单物质光谱库中单物质组合种类不超过预设阀值的各单物质的可能组合；

根据每个组合中单物质的种类数量，按照预设的步进值，获取每个组合的多个混合比例；

根据各单物质的可能组合和每个组合的多个混合比例，获取多个混合物；

将每个混合物的各个组成成分的光谱信息按照混合比例进行线性叠加，获得混合物的光谱信息。

4、根据权利要求 1-3 任一项所述的方法，其特征在于，所述方法还包括：

根据待检测物质的组成成分获取待检测物质中各组成成分的占比；

所述根据待检测物质的组成成分获取待检测物质中各组成成分的占比，包括：

如果所述待检测物质包括至少两种组成成分，则从预设的单物质光谱库中获取所述待检测物质中各组成成分的光谱信息；

根据待检测物质的光谱信息和待检测物质中各组成成分的光谱信息，获取各组成成分在待检测物质中的占比。

5、根据权利要求 1-4 任一项所述的方法，其特征在于，所述将所述光谱信息匹配预先获取的基于机器学习算法的预测模型，获取所述待检测物质的组成成分，包括：

将所述光谱信息匹配预先获取的基于机器学习算法的预测模型，获取各针对待检测物质成分的预测结果及预测结果对应的概率；

如果预测结果的概率最大且超过预设阈值，则确认所述预测结果为待检测物质的成分；

否则，将各预测结果中预设数量的概率相对较大的预测结果的共有成分作为所述待检测物质的成分。

6、根据权利要求 1-5 任一项所述的方法，其特征在于，所述机器学习算法为人工神经网络学习算法。

7、一种物质成分检测装置，所述检测装置应用于检测设备，其特征在于，所述装置包括：

光谱测量模块，用于获取待检测物质的光谱信息；

物质成分获取模块，用于将所述光谱信息匹配预先获取的基于机器学习算法的预测模型，获取所述待检测物质的组成成分，所述基于机器学习算法的预测模型，通过输入多种物质的光谱信息和所述物质的组成成分训练形成。

8、根据权利要求 7 所述的装置，其特征在于，所述装置还包括：

预测模型获取模块，用于预先获取基于机器学习算法的预测模型；

所述预测模型获取模块具体用于：

从预设的单物质光谱库中获取各单物质的光谱信息；

将各单物质按照不同组成和不同占比进行混合，获得各混合物的光谱信息；

将各混合物的光谱信息和组成成分作为输入，基于机器学习算法进行模型训练，获得基于机器学习算法的预测模型。

9、根据权利要求 8 所述的装置，其特征在于，所述预测模型获取模块还用于：

获取预设单物质光谱库中各单物质的可能组合，或者，获取预设单物质光谱库中单物质组合种类不超过预设阀值的各单物质的可能组合；

根据每个组合中单物质的种类数量，按照预设的步进值，获取每个组合的多个混合比例；

根据各单物质的可能组合和每个组合的多个混合比例，获取多个混合物；

将每个混合物的各个组成成分的光谱信息按照混合比例进行线性叠加，获得混合物的光谱信息。

10、根据权利要求 7-9 任一项所述的装置，其特征在于，所述装置还包括：成分含量获取模块，用于根据待检测物质的组成成分获取待检测物质中各组成成分的占比；

所述成分含量获取模块具体用于：

如果所述待检测物质包括至少两种组成成分，则从预设的单物质光谱库中获取所述待检测物质中各组成成分的光谱信息；

根据待检测物质的光谱信息和待检测物质中各组成成分的光谱信息，获取各组成成分在待检测物质中的占比。

11、根据权利要求 7-10 任一项所述的装置，其特征在于，所述物质成分获取模块具体用于：

将所述光谱信息匹配预先获取的基于机器学习算法的预测模型，获取各针

对待检测物质成分的预测结果及预测结果对应的概率；

如果预测结果的概率最大且超过预设阈值，则确认所述预测结果为待检测物质的成分；

否则，将各预测结果中预设数量的概率相对较大的预测结果的共有成分作为所述待检测物质的成分。

12、根据权利要求 7-11 任一项所述的装置，其特征在于，所述机器学习算法为人工神经网络学习算法。

13、一种检测设备，其特征在于，包括：

至少一个处理器；以及，

与所述至少一个处理器通信连接的存储器；其中，

所述存储器存储有可被所述至少一个处理器执行的指令，所述指令被所述至少一个处理器执行，以使所述至少一个处理器能够执行权利要求 1-6 任一项所述的方法。

14、一种非易失性计算机可读存储介质，其特征在于，所述计算机可读存储介质存储有计算机可执行指令，当所述计算机可执行指令被检测设备执行时，使所述检测设备执行执行权利要求 1-6 任一项所述的方法。

15、一种计算机程序产品，其特征在于，所述计算机程序产品包括存储在非易失性计算机可读存储介质上的计算机程序，所述计算机程序包括程序指令，当所述程序指令被检测设备执行时，使所述检测设备执行权利要求 1-6 任一项所述的方法。

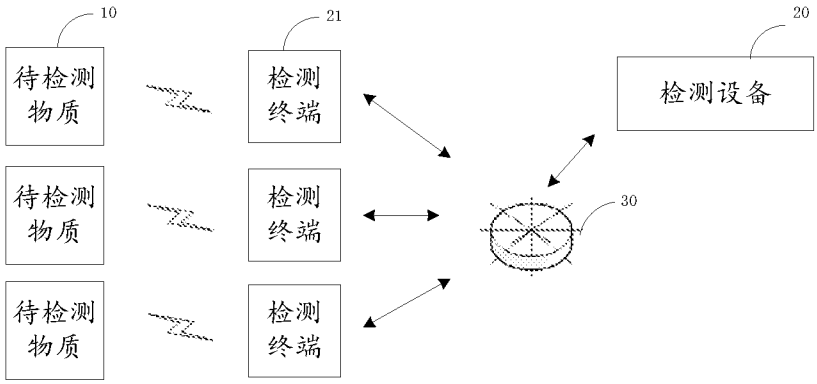

10
待检测物质
待检测物质
待检测物质
21
检测终端
检测终端
检测终端
20
检测设备
30

图 1a

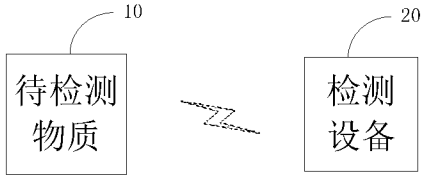

10
待检测物质
20
检测设备

图 1b

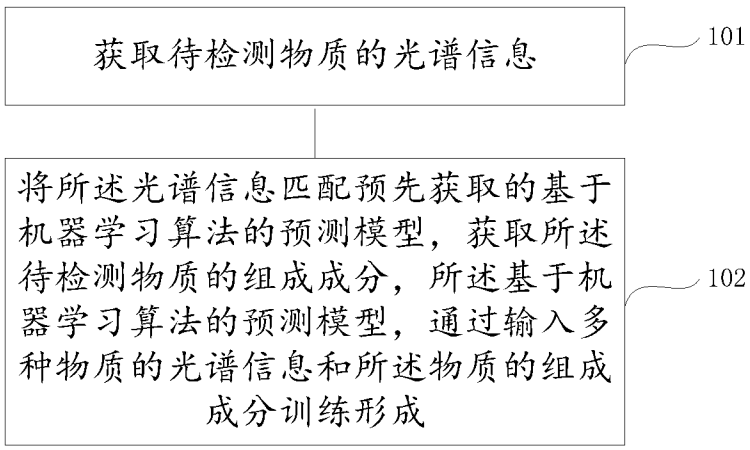

获取待检测物质的光谱信息
101
将所述光谱信息匹配预先获取的基于机器学习算法的预测模型，获取所述待检测物质的组成成分，所述基于机器学习算法的预测模型，通过输入多种物质的光谱信息和所述物质的组成成分训练形成
102

图 2

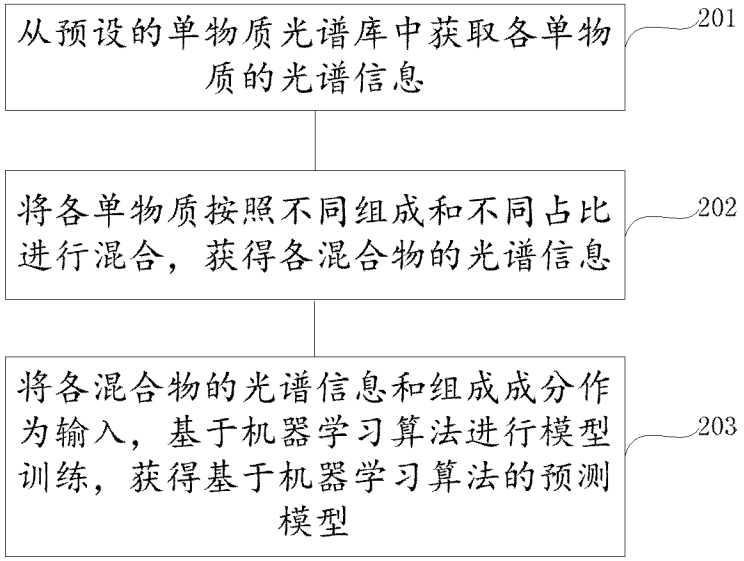

从预设的单物质光谱库中获取各单物质的光谱信息
201
将各单物质按照不同组成和不同占比进行混合，获得各混合物的光谱信息
202
将各混合物的光谱信息和组成成分作为输入，基于机器学习算法进行模型训练，获得基于机器学习算法的预测模型
203

图 3

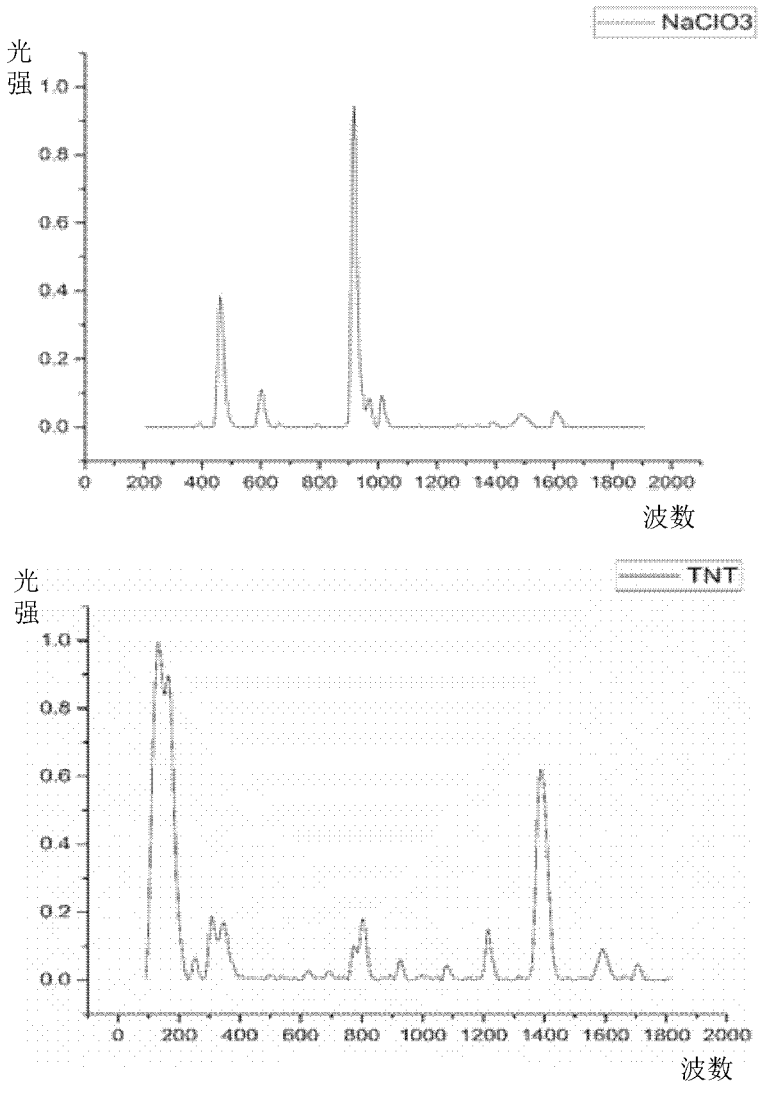

NaClO3
光强
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
0 200 400 600 800 1000 1200 1400 1600 1800 2000
波数
TNT
光强
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
0 200 400 600 800 1000 1200 1400 1600 1800 2000
波数

图 4

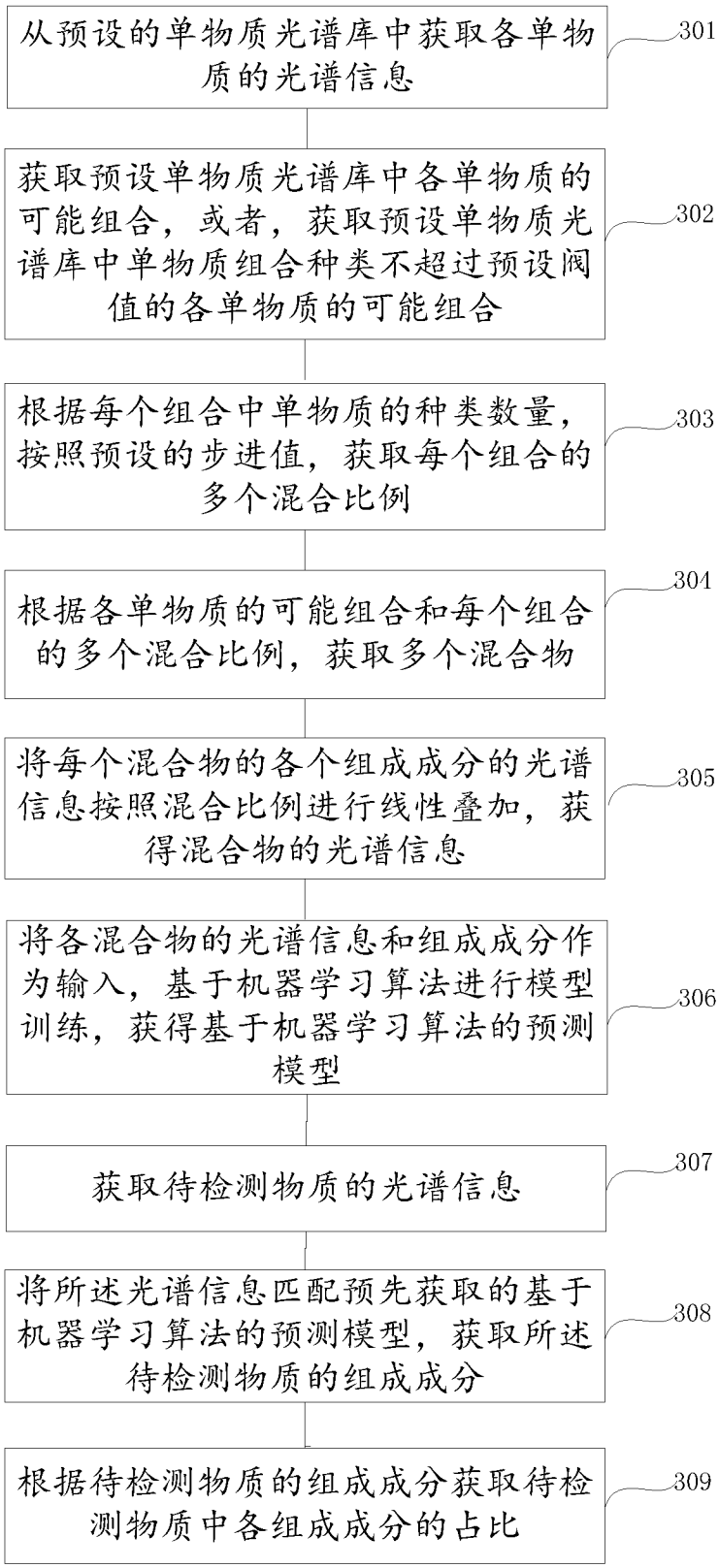

从预设的单物质光谱库中获取各单物质的光谱信息
301
获取预设单物质光谱库中各单物质的可能组合，或者，获取预设单物质光谱库中单物质组合种类不超过预设阈值的各单物质的可能组合
302
根据每个组合中单物质的种类数量，按照预设的步进值，获取每个组合的多个混合比例
303
根据各单物质的可能组合和每个组合的多个混合比例，获取多个混合物
304
将每个混合物的各个组成成分的光谱信息按照混合比例进行线性叠加，获得混合物的光谱信息
305
将各混合物的光谱信息和组成成分作为输入，基于机器学习算法进行模型训练，获得基于机器学习算法的预测模型
306
获取待检测物质的光谱信息
307
将所述光谱信息匹配预先获取的基于机器学习算法的预测模型，获取所述待检测物质的组成成分
308
根据待检测物质的组成成分获取待检测物质中各组成成分的占比
309

图 5

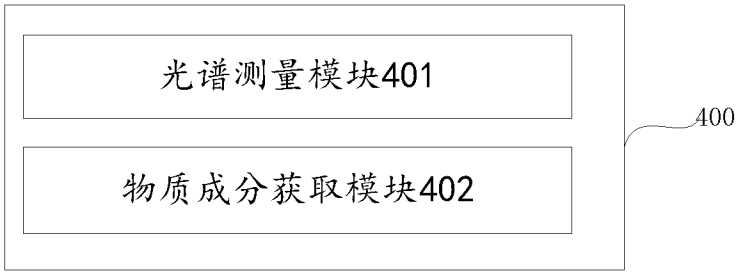

光谱测量模块401
物质成分获取模块402
400

图 6


预测模型获取模块501
光谱测量模块502
物质成分获取模块503
500

图 7


预测模型获取模块601
光谱测量模块602
物质成分获取模块603
成分含量获取模块604
600

图 8

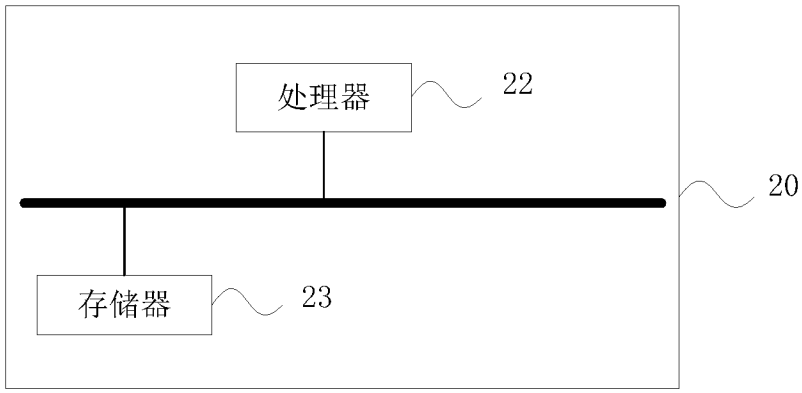

处理器
22
20
存储器
23

图 9

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/CN2017/087942

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

G01N 21/65 (2006.01) i

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)

G01N

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

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

CNPAT, EPODOC, WPI, CNKI: 深圳前海达闼云端智能科技有限公司, 骆磊, 黄晓庆, 无损, 鉴别, 检测, 处理器, 存储器, 指令, 光谱, 谱图, 色谱, 训练, 学习, 建模, 模型, 混合, 混合物, 机器学习？法, 线性, 叠加, 拟合, spectrum, module, model, mix+, linear, unidimensional, train+, learn+, detect+, CPU, overlap+, superpose+, stack+

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	CN 103217411 A (ZHEJIANG UNIVERSITY) 24 July 2013 (24.07.2013), description, paragraphs [0008]-[0015] and [0030]-[0038]	1, 2, 4-8, 10-12
Y	CN 103217411 A (ZHEJIANG UNIVERSITY) 24 July 2013 (24.07.2013), description, paragraphs [0008]-[0015] and [0030]-[0038]	13-15
Y	CN 104182251 A (XIAOMI TECHNOLOGY CO., LTD.) 03 December 2014 (03.12.2014), description, paragraphs [0066]-[0072] and [0201]-[0203], and figure 13	13-15
A	CN 101206463 A (SHENZHEN INSTITUTES OF ADVANCED TECHNOLOGY) 25 June 2008 (25.06.2008), entire document	1-15
A	CN 101403696 A (ZHEJIANG UNIVERSITY) 08 April 2009 (08.04.2009), entire document	1-15

☒ 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
27 February 2018	09 March 2018
Name and mailing address of the ISA State Intellectual Property Office of the P. R. China No. 6, Xitucheng Road, Jimenqiao Haidian District, Beijing 100088, China Facsimile No. (86-10) 62019451	Authorized officer WANG, Xiaoyan Telephone No. (86-10) 53962418

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/CN2017/087942

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	WO 2012045396 A2 (KARLSRUHER INSTITUTE FUR TECHNOLOGIE) 12 April 2012 (12.04.2012), entire document	1-15
A	CN 106770013 A (TIANJIN AGRICULTURAL UNIVERSITY) 31 May 2017 (31.05.2017), entire document	1-15
A	CN 101915744 A (BEIHANG UNIVERSITY) 15 December 2010 (15.12.2010), entire document	1-15

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.
PCT/CN2017/087942

Patent Documents referred in the Report	Publication Date	Patent Family	Publication Date
CN 103217411 A	24 July 2013	CN 103217411 B	25 March 2015
CN 104182251 A	03 December 2014	None	
CN 101206463 A	25 June 2008	CN 101206463 B	22 February 2012
CN 101403696 A	08 April 2009	None	
WO 2012045396 A2	12 April 2012	DE 102010047427 A1	05 April 2012
CN 106770013 A	31 May 2017	None	
CN 101915744 A	15 December 2010	CN 101915744 B	07 November 2012

国际检索报告

国际申请号
PCT/CN2017/087942

A. 主题的分类

G01N 21/65(2006.01)i

按照国际专利分类(IPC)或者同时按照国家分类和IPC两种分类

B. 检索领域

检索的最低限度文献(标明分类系统和分类号)

G01N

包含在检索领域中的除最低限度文献以外的检索文献

在国际检索时查阅的电子数据库(数据库的名称，和使用的检索词（如使用））

CNPAT, EPODOC, WPI, CNKI: 深圳前海达闼云端智能科技有限公司，骆磊，黄晓庆，无损，鉴别，检测，处理器，存储器，指令，光谱，谱图，色谱，训练，学习，建模，模型，混合，混合物，机器学习?法，线性，叠加，拟合，spectrum, module, model, mix+, linear, unidimensional, train+, learn+, detect+, CPU, overlap+, superpose+, stack+

C. 相关文件

类 型*	引用文件，必要时，指明相关段落	相关的权利要求
X	CN 103217411 A (浙江大学) 2013年 7月 24日 (2013-07-24) 说明书第[0008]-[0015]，[0030]-[0038]段	1-2，4-8，10-12
Y	CN 103217411 A (浙江大学) 2013年 7月 24日 (2013-07-24) 说明书第[0008]-[0015]，[0030]-[0038]段	13-15
Y	CN 104182251 A (小米科技有限责任公司) 2014年 12月 3日 (2014-12-03) 说明书第[0066]-[0072]，[0201]-[0203]段，图13	13-15
A	CN 101206463 A (深圳先进技术研究院) 2008年 6月 25日 (2008-06-25) 全文	1-15
A	CN 101403696 A (浙江大学) 2009年 4月 8日 (2009-04-08) 全文	1-15
A	WO 2012045396 A2 (KARLSRUHER INSTITUTE FÜR TECHNOLOGIE) 2012年 4月 12日 (2012-04-12) 全文	1-15
A	CN 106770013 A (天津农学院) 2017年 5月 31日 (2017-05-31) 全文	1-15

☑ 其余文件在C栏的续页中列出。

☑ 见同族专利附件。

* 引用文件的具体类型：

“A” 认为不特别相关的表示了现有技术一般状态的文件

“E” 在国际申请日的当天或之后公布的在先申请或专利

“L” 可能对优先权要求构成怀疑的文件，或为确定另一篇引用文件的公布日而引用的或者因其他特殊理由而引用的文件（如具体说明的）

“O” 涉及口头公开、使用、展览或其他方式公开的文件

“P” 公布日先于国际申请日但迟于所要求的优先权日的文件

“T” 在申请日或优先权日之后公布，与申请不相抵触，但为了理解发明之理论或原理的在后文件

“X” 特别相关的文件，单独考虑该文件，认定要求保护的发明不是新颖的或不具有创造性

“Y” 特别相关的文件，当该文件与另一篇或者多篇该类文件结合并且这种结合对于本领域技术人员为显而易见时，要求保护的发明不具有创造性

“&” 同族专利的文件

国际检索实际完成的日期	国际检索报告邮寄日期
2018年 2月 27日	2018年 3月 9日
ISA/CN的名称和邮寄地址 中华人民共和国国家知识产权局(ISA/CN) 中国北京市海淀区蓟门桥西土城路6号 100088 传真号 (86-10)62019451	受权官员 王小燕 电话号码 (86-10)53962418

表 PCT/ISA/210 (第2页) (2009年7月)

国际检索报告

国际申请号
PCT/CN2017/087942

C. 相关文件

类 型*	引用文件，必要时，指明相关段落	相关的权利要求
A	CN 101915744 A（北京航空航天大学）2010年 12月 15日（2010 - 12 - 15） 全文	1-15

国际检索报告
关于同族专利的信息

国际申请号
PCT/CN2017/087942

检索报告引用的专利文件	公布日（年/月/日）	同族专利	公布日（年/月/日）
CN 103217411 A	2013年 7月 24日	CN 103217411 B	2015年 3月 25日
CN 104182251 A	2014年 12月 3日	无	
CN 101206463 A	2008年 6月 25日	CN 101206463 B	2012年 2月 22日
CN 101403696 A	2009年 4月 8日	无	
WO 2012045396 A2	2012年 4月 12日	DE 102010047427 A1	2012年 4月 5日
CN 106770013 A	2017年 5月 31日	无	
CN 101915744 A	2010年 12月 15日	CN 101915744 B	2012年 11月 7日