



(19) 대한민국특허청(KR)

(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2021년08월10일

(11) 등록번호 10-2288707

(24) 등록일자 2021년08월05일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
G01J 3/28 (2006.01) G01J 3/40 (2006.01)

(52) CPC특허분류
G01J 3/28 (2013.01)
G01J 3/40 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2016-0108533

(22) 출원일자 2016년08월25일

심사청구일자 2020년09월11일

(65) 공개번호 10-2017-0026228

(43) 공개일자 2017년03월08일

(30) 우선권주장
62/210,198 2015년08월26일 미국(US)

(56) 선행기술조사문헌
JP2015516570 A*
JP2015522249 A*
L. Xu, et al., Rapid discrimination of pork in Halal and non-Halal Chinese ham sausages by Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy and chemometrics. Meat Science. 2012, Vol.92, pp.506-510.
JP2014514572 A

*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자

비아비 솔루션즈 아이엔씨.

미국 캘리포니아주 95002 새너제이 6층 6001 아메리카 센터 드라이브

(72) 발명자

시영, 창명

미국 94065 캘리포니아 레드우드 시티 메디테레이니언 레인 789

페데르손, 크리스토퍼 쥐.

미국 95404 캘리포니아 산타 로사 울프베리 웨이 2174

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

특허법인 남앤남

전체 청구항 수 : 총 20 항

심사관 : 이병수

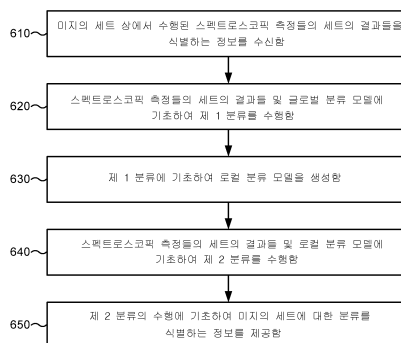
(54) 발명의 명칭 **스펙트로스코피를 이용한 식별**

(57) 요약

디바이스는 미지의 샘플의 스펙트로스코픽 측정의 결과들을 식별하는 정보를 수신할 수 있다. 디바이스는 스펙트로스코픽 측정의 결과들 및 글로벌 분류 모델에 기초하여 미지의 샘플의 제 1 분류를 수행할 수 있다. 디바이스는 제 1 분류에 기초하여 로컬 분류 모델을 생성할 수 있다. 디바이스는 스펙트로스코픽 측정의 결과들 및 로컬 분류 모델에 기초하여 미지의 샘플의 제 2 분류를 수행할 수 있다. 디바이스는 제 2 분류의 수행에 기초하여 미지의 샘플과 연관된 클래스를 식별하는 정보를 제공할 수 있다.

대표도 - 도6

600



(52) CPC특허분류

G01J 2003/2836 (2013.01)

(72) 발명자

조우, 팽

미국 06877 코네티컷 리지필드 탈리 호 로드 32

선, 란

미국 95401 캘리포니아 산타 로사 아파트먼트 238

랜지 애비뉴 2055

명세서

청구범위

청구항 1

디바이스로서,

메모리; 및

하나 이상의 프로세서들을 포함하고, 상기 하나 이상의 프로세서들은,

다른 디바이스로부터 글로벌 분류 모델을 수신하고 - 상기 글로벌 분류 모델은 상기 다른 디바이스에 의해 생성되고 그리고 복수의 디바이스들에 분배되고, 상기 복수의 디바이스들은 상기 디바이스를 포함하고, 상기 글로벌 분류 모델은 클래스(class)들의 세트를 포함함 -;

미지의 샘플의 스펙트로스코픽 측정(spectroscopic measurement)의 결과들을 식별하는 정보를 수신하고;

상기 스펙트로스코픽 측정의 결과들 및 상기 글로벌 분류 모델에 기초하여 상기 미지의 샘플의 제 1 분류를 수행하고;

상기 제 1 분류에 기초하여 로컬 분류 모델을 생성하고 - 상기 로컬 분류 모델은 상기 클래스들의 세트의 서브세트(subset)를 포함함 -;

상기 스펙트로스코픽 측정의 결과들 및 상기 로컬 분류 모델에 기초하여 상기 미지의 샘플의 제 2 분류를 수행하고; 그리고

상기 제 2 분류의 수행에 기초하여 상기 미지의 샘플과 연관된 클래스를 식별하는 정보를 제공하기 위한 것인,
디바이스.

청구항 2

제 1 항에 있어서,

상기 하나 이상의 프로세서들은 추가로,

상기 클래스들의 세트와 연관되는 각각의 확률들의 세트를 결정하고 - 상기 각각의 확률들의 세트 중의 특정 확률은 상기 미지의 샘플이 상기 클래스들의 세트의 특정 클래스와 연관되는 가능성을 나타냄 -; 그리고

상기 각각의 확률들의 세트에 기초하여 상기 클래스들의 세트의 서브세트를 선택하기 위한 것이고,

상기 하나 이상의 프로세서들은, 상기 로컬 분류 모델을 생성할 때,

상기 클래스들의 세트의 서브세트에 기초하여 상기 로컬 분류 모델을 생성하기 위한 것인,

디바이스.

청구항 3

제 1 항에 있어서,

상기 하나 이상의 프로세서들은 추가로,

오토스케일링 전처리 프로시저(autoscaling pretreatment procedure)를 수행하고; 그리고

상기 오토스케일링 전처리 프로시저의 수행에 기초하여 상기 제 1 분류 또는 상기 제 2 분류 중 적어도 하나를

수행하기 위한 것인,
디바이스.

청구항 4

제 1 항에 있어서,
상기 다른 디바이스는 제 1 스펙트로미터와 연관되고,
상기 글로벌 분류 모델은 상기 제 1 스펙트로미터에 의해 수행된 하나 이상의 스펙트로스코픽 측정들을 이용하여 생성되고,
상기 하나 이상의 프로세서들은 추가로, 상기 스펙트로스코픽 측정이 제 2 스펙트로미터에 의해 수행되게 하기 위한 것이고,
상기 제 2 스펙트로미터는 상기 제 1 스펙트로미터와 상이하고,
상기 하나 이상의 프로세서들은, 상기 미지의 샘플의 제 1 분류를 수행할 때,
상기 제 1 스펙트로미터에 의해 수행된 하나 이상의 스펙트로스코픽 측정들을 이용하여 생성된 글로벌 분류 모델에 기초하여 그리고 상기 제 2 스펙트로미터에 의해 수행된 스펙트로스코픽 측정의 결과들에 기초하여 상기 미지의 샘플의 제 1 분류를 수행하기 위한 것인,
디바이스.

청구항 5

제 1 항에 있어서,
상기 글로벌 분류 모델의 클래스들의 세트는 화합물들(compounds)의 세트에 대응하고, 상기 클래스는 상기 클래스들의 세트에 포함되고,
상기 하나 이상의 프로세서들은, 상기 클래스를 식별하는 정보를 제공할 때,
상기 클래스에 대응하는 화합물들의 세트 중의 화합물을 식별하는 정보를 제공하기 위한 것인,
디바이스.

청구항 6

제 1 항에 있어서,
상기 하나 이상의 프로세서들은, 상기 제 2 분류를 수행할 때,
상기 미지의 샘플과 연관된 스펙트럼이 상기 클래스와 연관된다고 결정하기 위한 것이고,
상기 스펙트럼은 상기 스펙트로스코픽 측정을 수행한 결과들에 의해 식별되고,
상기 하나 이상의 프로세서들은, 상기 클래스를 식별하는 정보를 제공할 때,
상기 미지의 샘플과 연관된 스펙트럼이 상기 클래스와 연관된다는 결정에 기초하여 상기 클래스를 식별하는 정보를 제공하기 위한 것인,
디바이스.

청구항 7

제 1 항에 있어서,

SVM(support vector machine) 분류자 기술은 상기 글로벌 분류 모델 또는 상기 로컬 분류 모델 중 적어도 하나를 생성하기 위해 활용되고,

상기 SVM 분류자 기술은,

레이디얼 기초 함수(radial basis function) 타입의 커널 함수,

선형 함수 타입의 커널 함수,

시그모이드 함수(sigmoid function) 타입의 커널 함수,

다항식 함수(polynomial function) 타입의 커널 함수, 또는

지수 함수 타입의 커널 함수 중 적어도 하나와 연관되는,

디바이스.

청구항 8

제 1 항에 있어서,

상기 하나 이상의 프로세서들은, 상기 제 2 분류를 수행할 때,

확률값 또는 판단값 중 적어도 하나에 기초하여 상기 클래스에 상기 미지의 샘플을 할당하기 위한 것인,

디바이스.

청구항 9

명령들을 저장한 컴퓨터-판독 가능 매체로서,

상기 명령들은 하나 이상의 명령들을 포함하고,

상기 하나 이상의 명령들은, 하나 이상의 프로세서들에 의해 실행될 때, 상기 하나 이상의 프로세서들로 하여금,

다른 디바이스로부터 글로벌 분류 모델을 수신하게 하고 - 상기 글로벌 분류 모델은 상기 다른 디바이스에 의해 복수의 디바이스들에 분배되고, 상기 복수의 디바이스들은 디바이스를 포함하고, 상기 글로벌 분류 모델은 클래스들의 세트를 포함함 -;

미지의 세트의 스펙트로스코픽 측정들의 세트의 결과들을 식별하는 정보를 수신하게 하고 - 상기 미지의 세트는 복수의 미지의 샘플들을 포함함 -;

상기 스펙트로스코픽 측정들의 세트의 결과들 및 상기 글로벌 분류 모델에 기초하여 상기 복수의 미지의 샘플들의 제 1 분류를 수행하게 하고 - 상기 글로벌 분류 모델은 SVM(support vector machine) 선형 분류자 기술을 활용함 -;

상기 제 1 분류에 기초하여 상기 복수의 미지의 샘플들에 대한 로컬 분류 모델들의 세트를 생성하게 하고 - 상기 로컬 분류 모델들의 세트는 상기 SVM 선형 분류자 기술을 활용하고, 상기 로컬 분류 모델들의 세트는 상기 글로벌 분류 모델의 상기 클래스들의 세트의 클래스들의 서브세트를 포함함 -;

상기 스펙트로스코픽 측정들의 세트의 결과들 및 상기 로컬 분류 모델들의 세트에 기초하여 상기 복수의 미지의 샘플들의 제 2 분류를 수행하게 하고; 그리고

상기 제 2 분류의 수행에 기초하여 상기 복수의 미지의 샘플들의 분류들을 식별하는 정보를 제공하게 하는,

컴퓨터-판독 가능 매체.

청구항 10

제 9 항에 있어서,

상기 글로벌 분류 모델은 제 1 스펙트로미터에 의해 수행된 하나 이상의 스펙트로스코픽 측정들에 기초하여 생성되고;

상기 하나 이상의 프로세서들로 하여금 상기 스펙트로스코픽 측정들의 세트의 결과들을 식별하는 정보를 수신하게 하는 상기 하나 이상의 명령들은, 상기 하나 이상의 프로세서들로 하여금,

제 2 스펙트로미터로부터 상기 스펙트로스코픽 측정들의 세트의 결과들을 식별하는 정보를 수신하게 하고,

상기 제 2 스펙트로미터는 상기 제 1 스펙트로미터와 상이하고,

상기 하나 이상의 프로세서들로 하여금 상기 제 1 분류를 수행하게 하는 상기 하나 이상의 명령들은, 상기 하나 이상의 프로세서들로 하여금,

상기 제 2 스펙트로미터로부터 수신된 스펙트로스코픽 측정들의 세트의 결과들 및 상기 제 1 스펙트로미터에 의해 수행된 하나 이상의 스펙트로스코픽 측정들에 기초하여 생성된 글로벌 분류 모델을 이용하여 상기 제 1 분류를 수행하게 하는,

컴퓨터-판독 가능 매체.

청구항 11

제 9 항에 있어서,

상기 하나 이상의 프로세서들로 하여금 상기 스펙트로스코픽 측정들의 세트의 결과들을 식별하는 정보를 수신하게 하는 상기 하나 이상의 명령들은, 상기 하나 이상의 프로세서들로 하여금,

상기 복수의 미지의 샘플들에 대응하는 복수의 스펙트럼들을 수신하게 하고,

상기 하나 이상의 프로세서들로 하여금 상기 제 1 분류를 수행하게 하는 상기 하나 이상의 명령들은, 상기 하나 이상의 프로세서들로 하여금,

상기 글로벌 분류 모델의 하나 이상의 클래스들에 상기 복수의 스펙트럼들을 할당하게 하고,

상기 글로벌 분류 모델의 하나 이상의 클래스들은 하나 이상의 화합물들에 대응하는,

컴퓨터-판독 가능 매체.

청구항 12

제 11 항에 있어서,

하나 이상의 명령들은, 상기 하나 이상의 프로세서들에 의해 실행될 때, 상기 하나 이상의 프로세서들로 하여금 추가로,

상기 복수의 스펙트럼들 중의 특정 스펙트럼 및 상기 하나 이상의 클래스들에 대한 하나 이상의 신뢰도 메트릭들(confidence metrics)을 결정하게 하고 - 상기 하나 이상의 신뢰도 메트릭들 중의 신뢰도 메트릭은 상기 특정 스펙트럼이 상기 신뢰도 메트릭에 대응하는 상기 하나 이상의 클래스들 중의 특정 클래스와 연관되는 가능성을 나타냄 -; 그리고

상기 하나 이상의 신뢰도 메트릭들에 기초하여 상기 특정 클래스에 상기 특정 스펙트럼을 할당하게 하고,

상기 하나 이상의 프로세서들로 하여금 상기 로컬 분류 모델들의 세트를 생성하게 하는 상기 하나 이상의 명령들은, 상기 하나 이상의 프로세서들로 하여금,

상기 하나 이상의 신뢰도 메트릭들에 기초하여 상기 하나 이상의 클래스들의 서브세트를 선택하게 하고; 그리고

상기 하나 이상의 클래스들의 서브세트에 기초하여 상기 로컬 분류 모델들의 세트 중의 특정 로컬 분류 모델을 생성하게 하는,

컴퓨터-판독 가능 매체.

청구항 13

제 9 항에 있어서,

상기 하나 이상의 프로세서들로 하여금 상기 스펙트로스코픽 측정들의 세트의 결과들을 식별하는 정보를 수신하게 하는 상기 하나 이상의 명령들은, 상기 하나 이상의 프로세서들로 하여금,

상기 복수의 미지의 샘플들에 대응하는 복수의 스펙트럼들을 수신하게 하고,

상기 하나 이상의 프로세서들로 하여금 상기 제 2 분류를 수행하게 하는 상기 하나 이상의 명령들은, 상기 하나 이상의 프로세서들로 하여금,

상기 로컬 분류 모델들의 세트의 하나 이상의 클래스들에 상기 복수의 스펙트럼들을 할당하게 하고,

상기 로컬 분류 모델들의 세트의 하나 이상의 클래스들은 하나 이상의 화합물들에 대응하고,

상기 하나 이상의 프로세서들로 하여금 상기 복수의 미지의 샘플들의 분류들을 식별하는 정보를 제공하게 하는 상기 하나 이상의 명령들은 추가로,

상기 하나 이상의 클래스들로의 상기 복수의 스펙트럼들의 할당에 기초하여, 상기 복수의 미지의 샘플들 중의 미지의 샘플과 연관되는, 상기 복수의 스펙트럼들 중의 스펙트럼이 할당되는, 상기 하나 이상의 클래스들 중의 클래스를 나타내는 정보를 제공하게 하는,

컴퓨터-판독 가능 매체.

청구항 14

제 9 항에 있어서,

상기 하나 이상의 프로세서들로 하여금 상기 제 2 분류를 수행하게 하는 상기 하나 이상의 명령들은, 상기 하나 이상의 프로세서들로 하여금,

상기 로컬 분류 모델들의 세트 중의 특정 로컬 분류 모델 및 상기 복수의 미지의 샘플들 중의 특정 미지의 샘플과 연관되는 판단값들의 세트를 결정하게 하고 - 판단값은 상기 특정 로컬 분류 모델의 클래스의 세트의 클래스에 대응함 -; 그리고

상기 판단값들의 세트에 기초하여 상기 클래스들의 세트의 클래스에 상기 특정 미지의 샘플을 할당하게 하는,

컴퓨터-판독 가능 매체.

청구항 15

방법으로서,

디바이스에 의해, 다른 디바이스로부터 글로벌 분류 모델을 수신하는 단계 - 상기 글로벌 분류 모델은 상기 다른 디바이스에 의해 생성되고 그리고 복수의 디바이스들에 분배되고, 상기 복수의 디바이스들은 상기 디바이스를 포함하고, 상기 글로벌 분류 모델은 클래스들의 세트를 포함함 -;

상기 디바이스에 의해, 제 1 스펙트로미터에 의해 수행된 미지의 샘플의 스펙트로스코픽 측정의 결과들을 식별하는 정보를 수신하는 단계;

상기 디바이스에 의해, 상기 스펙트로스코픽 측정의 결과들 및 상기 글로벌 분류 모델에 기초하여 상기 미지의 샘플의 제 1 분류를 수행하는 단계 - 상기 글로벌 분류 모델은 상기 다른 디바이스와 연관된 제 2 스펙트로미터에 의해 수행되는 스펙트로스코픽 측정들의 세트 및 SVM(support vector machine) 분류자 기술을 활용하여 생성됨 -;

상기 디바이스에 의해 상기 제 1 분류에 기초하여 로컬 분류 모델을 생성하는 단계 - 상기 로컬 분류 모델은 상기 SVM 분류자 기술을 활용하고, 상기 로컬 분류 모델은 상기 글로벌 분류 모델의 상기 클래스들의 세트의 클래스들의 서브세트를 포함함 -;

상기 디바이스에 의해, 상기 스펙트로스코픽 측정의 결과들 및 상기 로컬 분류 모델에 기초하여 상기 미지의 샘플의 제 2 분류를 수행하는 단계; 및

상기 디바이스에 의해, 상기 제 2 분류의 수행에 기초하여 상기 미지의 샘플과 연관되는 상기 클래스들의 서브세트 중의 클래스를 식별하는 정보를 제공하는 단계

를 포함하는,

방법.

청구항 16

제 15 항에 있어서,

상기 SVM 분류자 기술과 연관되는 커널 함수는,

레이디얼 기초 함수 타입의 커널 함수,

선형 함수 타입의 커널 함수,

시그모이드 함수 타입의 커널 함수,

다항식 함수 타입의 커널 함수, 또는

지수 함수 타입의 커널 함수 중 적어도 하나를 포함하는,

방법.

청구항 17

제 15 항에 있어서,

상기 제 2 분류를 수행하는 단계는,

상기 클래스와 연관되는 확률값 또는 상기 클래스와 연관되는 판단값 중 적어도 하나에 기초하여 상기 클래스들의 서브세트 중의 클래스에 상기 미지의 샘플을 할당하는 단계를 포함하는,

방법.

청구항 18

제 15 항에 있어서,

상기 제 1 스펙트로미터는 상기 제 2 스펙트로미터와 상이한,

방법.

청구항 19

제 15 항에 있어서,

상기 방법은, 상기 글로벌 분류 모델을 수신하는 단계 이후에, 데이터 구조를 통해 상기 글로벌 분류 모델을 저장하는 단계

를 더 포함하고,

상기 제 1 분류를 수행하는 단계는,
 상기 데이터 구조로부터 상기 글로벌 분류 모델을 획득하는 단계; 및
 상기 글로벌 분류 모델을 이용하여 상기 제 1 분류를 수행하는 단계를 포함하는,
 방법.

청구항 20

제 15 항에 있어서,
 상기 클래스를 식별하는 정보를 제공하는 단계는,
 상기 제 2 분류와 연관되는 신뢰도 메트릭을 식별하는 정보를 제공하는 단계를 포함하고,
 상기 신뢰도 메트릭은 상기 미지의 샘플이 상기 클래스에 할당되는 신뢰도의 측정(measure)을 표현하는,
 방법.

발명의 설명

기술 분야

배경 기술

[0001]

[0001] 미가공 물질 식별은 제약품들(pharmaceutical products)의 품질-제어를 위해 활용될 수 있다. 예를 들어, 미가공 물질 식별은 의료 화합물의 컴포넌트 성분들이 의료 화합물과 연관된 패키징 라벨에 대응하는지를 결정하기 위해 의료 화합물 상에서 수행될 수 있다. 스펙트로스코피(spectroscopy)는 다른 화학적 기술들에 비해 감소된 준비 및 데이터 취득 시간을 갖는 비-파괴적 미가공 물질 식별을 용이하게 할 수 있다.

본 발명의 배경이 되는 기술은 다음의 특허공개공보들에 개시되어 있다.

[문헌 1] EP 1,992,939 A1 (2008.11.)

[문헌 2] US 2010/0036795 A1 (2010.02.)

[문헌 3] US 2010/0241598 A1 (2010.09.)

발명의 내용

해결하려는 과제

과제의 해결 수단

발명의 효과

[0003]

[0002] 일부 가능한 구현들에 따라, 디바이스는 하나 또는 그 초과 프로세서들을 포함할 수 있다. 하나 또는 그 초과 프로세서들은 미지의 샘플의 스펙트로스코픽 측정의 결과들을 식별하는 정보를 수신할 수 있다. 하나 또는 그 초과 프로세서들은 스펙트로스코픽 측정의 결과들 및 글로벌 분류 모델에 기초하여 미지의 샘플의 제 1 분류를 수행할 수 있다. 글로벌 분류 모델은 SVM(support vector machine) 분류자 기술을 활용할 수 있다. 글로벌 분류 모델은 클래스들의 글로벌 세트를 포함할 수 있다. 하나 또는 그 초과 프로세서들은 제

1 분류에 기초하여 로컬 분류 모델을 생성할 수 있다. 로컬 분류 모델은 SVM 분류자 기술을 활용할 수 있다. 로컬 분류 모델은 클래스들의 글로벌 세트의 클래스들의 서브세트를 포함할 수 있다. 하나 또는 그 초과 프로세서들은 스펙트로스코픽 측정의 결과들 및 로컬 분류 모델에 기초하여 미지의 샘플의 제 2 분류를 수행할 수 있다. 하나 또는 그 초과 프로세서들은 제 2 분류의 수행에 기초하여 미지의 샘플과 연관되는 클래스들의 서브세트 중의 클래스를 식별하는 정보를 제공할 수 있다.

[0004] [0003] 일부 가능한 구현들에 따라, 컴퓨터-판독 가능 매체는 하나 또는 그 초과 프로세서들에 의해 실행될 때, 하나 또는 그 초과 프로세서들로 하여금, 미지의 세트의 스펙트로스코픽 측정들의 세트의 결과를 식별하는 정보를 수신하게 할 수 있는 명령들을 저장할 수 있다. 미지의 세트는 미지의 샘플들의 세트를 포함할 수 있다. 하나 또는 그 초과 명령들은, 하나 또는 그 초과 프로세서들에 의해 실행될 때, 하나 또는 그 초과 프로세서들로 하여금, 스펙트로스코픽 측정의 세트의 결과들 및 글로벌 분류 모델에 기초하여 미지의 샘플들의 세트의 제 1 분류를 수행하게 할 수 있다. 글로벌 분류 모델은 SVM(support vector machine) 선형 분류자 기술을 활용할 수 있다. 하나 또는 그 초과 명령들은, 하나 또는 그 초과 프로세서들에 의해 실행될 때, 하나 또는 그 초과 프로세서들로 하여금, 제 1 분류에 기초하여 미지의 샘플들의 세트에 대한 로컬 분류 모델들의 세트를 생성하게 할 수 있다. 로컬 분류 모델들의 세트는 SVM 선형 분류자 기술을 활용할 수 있다. 하나 또는 그 초과 명령들은, 하나 또는 그 초과 프로세서들에 의해 실행될 때, 하나 또는 그 초과 프로세서들로 하여금, 스펙트로스코픽 측정의 세트의 결과들 및 로컬 분류 모델의 세트에 기초하여 미지의 샘플들의 세트의 제 2 분류를 수행하게 할 수 있다. 하나 또는 그 초과 명령들은, 하나 또는 그 초과 프로세서들에 의해 실행될 때, 하나 또는 그 초과 프로세서들로 하여금, 제 2 분류의 수행에 기초하여 미지의 샘플들의 세트의 분류를 식별하는 정보를 제공하게 할 수 있다.

[0005] [0004] 일부 가능한 구현들에 따라, 방법은 디바이스에 의해, 제 1 스펙트로미터에 의해 수행된 미지의 샘플의 스펙트로스코픽 측정의 결과들을 식별하는 정보를 수신하는 단계를 포함할 수 있다. 방법은 디바이스에 의해, 스펙트로스코픽 측정의 결과들 및 글로벌 분류 모델에 기초하여 미지의 샘플의 제 1 분류를 수행하는 단계를 포함할 수 있다. 글로벌 분류 모델은 제 2 스펙트로미터에 의해 수행되는 스펙트로스코픽 측정들의 세트 및 SVM(support vector machine) 분류자 기술을 활용함으로써 생성될 수 있다. 방법은, 디바이스에 의해 제 1 분류에 기초하여 로컬 분류 모델을 생성하는 단계를 포함할 수 있다. 로컬 분류 모델은 SVM 분류자 기술을 활용할 수 있다. 로컬 분류 모델은 글로벌 분류 모델의 클래스들의 세트의 클래스들의 서브세트를 포함할 수 있다. 방법은 디바이스에 의해, 스펙트로스코픽 측정의 결과들 및 로컬 분류 모델에 기초하여 미지의 샘플의 제 2 분류를 수행하는 단계를 포함할 수 있다. 방법은, 디바이스에 의해, 제 2 분류의 수행에 기초하여 미지의 샘플과 연관되는 클래스들의 서브세트 중의 클래스를 식별하는 정보를 제공하는 단계를 포함할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0008] [0005] 도 1a 및 도 1b는 본원에서 설명되는 예시적인 구현의 개요도들이다.

[0006] 도 2는 본원에서 설명되는 시스템들 및/또는 방법들이 구현될 수 있는 예시적인 환경의 도면이다.

[0007] 도 3은 도 2의 하나 또는 그 초과 디바이스들의 예시적인 컴포넌트들의 도면이다.

[0008] 도 4는 지원 벡터 머신 분류자에 기초하여 미가공 물질 식별을 위한 글로벌 분류 모델을 생성하기 위한 예시적인 프로세스의 흐름도이다.

[0009] 도 5는 도 4에서 도시된 예시적인 프로세스에 관한 예시적인 구현의 도면이다.

[0010] 도 6은 다중-스테이지 분류 기술을 이용하여 미가공 물질 식별을 수행하기 위한 예시적인 프로세스의 흐름도이다.

[0011] 도 7a 및 도 7b는 도 6에서 도시된 예시적인 프로세스와 연관되는 예측 성공 레이트에 관한 예시적인 구현의 도면들이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0009] [0012] 예시적인 구현들의 아래의 상세한 설명은 첨부 도면들을 참조한다. 상이한 도면들에서의 동일한 참조 번호들은 동일하거나 유사한 엘리먼트들을 식별한다.

[0010] [0013] RMID(raw material identification)은 식별, 검증 등을 위해 특정한 샘플의 컴포넌트들(예를 들어, 성분들)을 식별하는데 활용되는 기술이다. 예를 들어, RMID는 제약 화합물들의 성분들이 라벨 상에서 식별된 성

분들의 세트에 대응한다는 것을 검증하는데 활용될 수 있다. 스펙트로미터(spectrometer)는 샘플(예를 들어, 제약 화합물)의 컴포넌트들을 결정하기 위해 샘플 상에서 스펙트로스코피(spectroscopy)를 수행하는데 활용될 수 있다. 스펙트로미터는 샘플의 측정들의 세트를 결정할 수 있고, 분류를 위해 측정들의 세트를 제공할 수 있다. 케모메트릭 분류(chemometric classification) 기술(예를 들어, 분류자)은 샘플의 측정들의 세트들에 기초하여 샘플의 컴포넌트들의 결정을 용이하게 할 수 있다. 그러나 일부 케모메트릭 분류 기술들은, 다른 기술들에 비해 열등한 이동성, 대형-스케일 분류를 수행하는데 불충분한 입도 등과 연관될 수 있다. 본원에서 설명되는 구현들은 RMID를 용이하게 하기 위한 계층적 지원 벡터 머신 분류자를 활용할 수 있다. 이러한 방식으로, 스펙트로미터의 제어 디바이스는 다른 RMID 기술에 비해 개선된 분류 정확도를 용이하게 한다.

[0011] [0014] 도 1a 및 도 1b는 본원에서 설명되는 예시적인 구현(100)의 개요도들이다. 도 1a에서 도시된 바와 같이, 예시적인 구현(100)은 제 1 제어 디바이스 및 제 1 스펙트로미터를 포함할 수 있다. 제 1 제어 디바이스는, 제 1 스펙트로미터가 트레이닝 세트(training set)(예를 들어, 분류 모델을 트레이닝하기 위해 활용되는 알려진 샘플들의 세트) 상에서 스펙트로스코픽 측정들의 세트를 수행하게 할 수 있다. 트레이닝 세트는 분류 모델의 각각의 클래스에 대한 샘플들의 임계량을 포함하도록 선택될 수 있다. 분류 모델의 클래스는 (제약 맥락에서) 락토오스 화합물들, 아세트아미노펜 화합물들, 프록토포스 화합물들, 이부프로펜 화합물들, 아스피린 화합물들 등과 같이 하나 또는 그 초과 특성들을 공통적으로 공유하는 유사한 화합물들의 그룹핑을 지칭할 수 있다.

[0012] [0015] 도 1a에서 추가로 도시된 바와 같이, 제 1 스펙트로미터는 제 1 제어 디바이스로부터 명령의 수신에 기초하여 트레이닝 세트 상에서 스펙트로스코픽 측정들의 세트를 수행할 수 있다. 예를 들어, 제 1 스펙트로미터는 트레이닝 세트의 각각의 샘플에 대한 스펙트럼을 결정할 수 있다. 제 1 스펙트로미터는 제 1 제어 디바이스에 스펙트로스코픽 측정들의 세트를 제공할 수 있다. 제 1 제어 디바이스는 스펙트로스코픽 측정들의 세트에 기초하여 그리고 특정 분류 기술을 이용하여 글로벌 분류 모델을 생성할 수 있다. 예를 들어, 제 1 제어 디바이스는 SVM(support vector machine) 기술(예를 들어, 정보 분류를 위한 머신 러닝 기술)을 이용하여 글로벌 분류 모델을 생성할 수 있다. 글로벌 분류 모델은 특정 스펙트럼을 특정 클래스에 할당하는 것과 연관된 정보를 포함할 수 있고, 특정 클래스에 연관되는 화합물의 타입을 식별하는 것과 연관되는 정보를 포함할 수 있다. 이러한 방식으로, 제어 디바이스는 미지의 샘플의 스펙트럼을 특정 클래스에 할당하는 것에 기초하여 미지의 샘플의 화합물의 타입을 식별하는 정보를 제공할 수 있다. 글로벌 분류 모델은 하나 또는 그 초과 다른 제어 디바이스들 등에 제공되는 데이터 구조를 통해 저장될 수 있다.

[0013] [0016] 도 1b에서 도시된 바와 같이, 제 2 제어 디바이스는 글로벌 분류 모델(예를 들어, 제 1 제어 디바이스로부터)을 수신할 수 있고, 데이터 구조를 통해 글로벌 분류 모델을 저장할 수 있다. 제 2 제어 디바이스는, 제 2 스펙트로미터가 미지의 세트(예를 들어, RMID가 수행되는 미지의 샘플들의 세트) 상에서 스펙트로스코픽 측정들의 세트를 수행하게 할 수 있다. 제 2 스펙트로미터는 제 2 제어 디바이스로부터 명령의 수신에 기초하여 스펙트로스코픽 측정들의 세트를 수행할 수 있다. 예를 들어, 제 2 스펙트로미터는 미지의 세트의 각각의 샘플에 대한 스펙트럼을 결정할 수 있다. 제 2 스펙트로미터는 제 2 제어 디바이스에 스펙트로스코픽 측정들의 세트를 제공할 수 있다. 제 2 제어 디바이스는 다중-스테이지 분류 기술을 이용한 글로벌 분류 모델에 기초하여 미지의 세트 상에서 RMID를 수행할 수 있다.

[0014] [0017] 도 1b에 관하여, 제 2 제어 디바이스는 글로벌 분류 모델을 이용하여 미지의 세트의 특정 샘플의 제 1 분류를 수행할 수 있다. 제 2 제어 디바이스는 특정 샘플 및 글로벌 분류 모델과 연관된 신뢰도 메트릭들의 세트를 결정할 수 있다. 신뢰도 메트릭은 특정 샘플을 특정 클래스에 할당하는 것과 연관된 신뢰도를 지칭할 수 있다. 예를 들어, 제 2 제어 디바이스는 특정 샘플 및 글로벌 분류 모델의 각각의 클래스와 연관된 신뢰도 메트릭들을 결정할 수 있다. 제 2 제어 디바이스는 하나 또는 그 초과 각각의 신뢰도 메트릭들에 기초하여 글로벌 분류 모델의 클래스들의 서브세트를 선택할 수 있고, 클래스들의 세트에 기초하여 로컬 분류 모델을 생성할 수 있다. 로컬 분류 모델은 SVM 기술 및 클래스들의 서브세트들을 이용하여 생성되는 인 시추 분류 모델(in situ classification model)을 지칭할 수 있다. 제 2 제어 디바이스는 특정 샘플을 특정 클래스에 할당하도록 로컬 분류 모델에 기초하여 제 2 분류를 수행할 수 있다. 이러한 방식으로, 제 2 제어 디바이스는 단일 스테이지 분류 기술 및/또는 다른 분류 모델들에 비해 개선된 정확도로 미지의 세트의 특정 샘플에 대한 RMID를 수행할 수 있다. 제 2 제어 디바이스는 미지의 세트의 각각의 샘플을 식별하기 위해 미지의 세트의 각각의 샘플에 대한 제 1 분류 및 제 2 분류를 수행할 수 있다. 다른 예에서, 제 1 제어 디바이스는 제 1 스펙트로미터에 의해 수행된 스펙트로스코피에 기초하여 글로벌 분류 모델 및 로컬 분류 모델을 이용하여 특정 샘플을 분류할 수 있다.

- [0015] [0018] 도 2는 본원에서 설명되는 시스템들 및/또는 방법들이 구현될 수 있는 예시적인 환경(200)의 도면이다. 도 2에서 도시된 바와 같이, 환경(200)은 제어 디바이스(210), 스펙트로미터(220) 및 네트워크(230)를 포함할 수 있다. 환경(200)의 디바이스들은 유선 연결, 무선 연결 또는 유선 및 무선 연결들의 결합을 통해 상호연결될 수 있다.
- [0016] [0019] 제어 디바이스(210)는 RMID와 연관된 정보를 저장, 프로세싱 및/또는 라우팅 가능한 하나 또는 그 초과 디바이스들을 포함할 수 있다. 예를 들어, 제어 디바이스(210)는 분류기 및 트레이닝 세트의 측정들의 세트에 기초하여 모델을 생성하고 미지의 세트의 측정들의 세트에 기초하여 RMID를 수행하도록 모델을 활용하는 서버, 컴퓨터, 웨어러블 디바이스, 클라우드 컴퓨팅 디바이스 등을 포함할 수 있다. 일부 구현들에서, 제어 디바이스(210)는 특정 스펙트로미터(220)와 연관될 수 있다. 일부 구현들에서, 제어 디바이스(210)는 다수의 스펙트로미터들(220)과 연관될 수 있다. 일부 구현들에서, 제어 디바이스(210)는 스펙트로미터(220)와 같이 환경(200) 내의 다른 디바이스로부터 정보를 수신하고 및/또는 거기에 정보를 송신할 수 있다.
- [0017] [0020] 스펙트로미터(220)는 샘플 상에서 스펙트로스코픽 측정을 수행 가능한 하나 또는 그 초과 디바이스들을 포함할 수 있다. 예를 들어, 스펙트로미터(220)는 스펙트로스코피(예를 들어, NIR(near infrared) 스펙트로미터, mid-IR(mid-infrared spectroscopy), 라만 스펙트로스코피 등과 같은 진동 스펙트로스코피)를 수행하는 스펙트로미터를 포함할 수 있다. 일부 구현들에서, 스펙트로미터(220)는 웨어러블 스펙트로미터 등과 같은 웨어러블 디바이스 내에 통합될 수 있다. 일부 구현들에서, 스펙트로미터(220)는 제어 디바이스(210)와 같이 환경(200) 내의 다른 디바이스로부터 정보를 수신하고 및/또는 거기에 정보를 송신할 수 있다.
- [0018] [0021] 네트워크(230)는 하나 또는 그 초과 유선 및/또는 무선 네트워크들을 포함할 수 있다. 예를 들어, 네트워크(230)는 셀룰러 네트워크(예를 들어, LTE(long-term evolution) 네트워크, 3G 네트워크, CDMA(code division multiple access) 네트워크 등), PLMN(public land mobile network), LAN(local area network), WAN(wide area network), MAN(metropolitan area network), 전화 네트워크(예를 들어, PSTN(Public Switched Telephone Network)), 사설 네트워크, 및 애드 혹(ad hoc) 네트워크, 인트라넷, 인터넷, 광섬유-기반 네트워크, 클라우드 컴퓨팅 네트워크 등 및/또는 이들 또는 다른 타입들의 네트워크들의 결합을 포함할 수 있다.
- [0019] [0022] 도 2에서 도시된 디바이스들 및 네트워크들의 수 및 어레이먼트(arrangement)는 예로서 제공된다. 실제로, 도 2에서 도시된 것들 이외의 부가적인 디바이스들 및/또는 네트워크들, 더 적은 디바이스들 및/또는 네트워크들, 상이한 디바이스들 및/또는 네트워크들 또는 상이하게 배열되는 디바이스들 및/또는 네트워크들이 있을 수 있다. 또한, 도 2에서 도시된 2개 또는 그 초과 디바이스들은 단일 디바이스 내에 구현될 수 있거나, 또는 도 2에서 도시된 단일 디바이스는 다수의 분배된 디바이스들로서 구현될 수 있다. 예를 들어, 제어 디바이스(210) 및 스펙트로미터(220)가 2개의 별개의 디바이스들인 것으로서 여기서 설명되지만, 제어 디바이스(210) 및 스펙트로미터(220)는 단일 디바이스 내에서 구현될 수 있다. 부가적으로, 또는 대안적으로, 환경(200)의 디바이스들의 세트(예를 들어, 하나 또는 그 초과 디바이스들)는 환경(200)의 디바이스들의 다른 세트에 의해 수행되는 것으로서 설명되는 하나 또는 그 초과 기능들을 수행할 수 있다.
- [0020] [0023] 도 3은 디바이스(300)의 예시적인 컴포넌트들의 도면이다. 디바이스(300)는 제어 디바이스(210) 및/또는 스펙트로미터(220)에 대응할 수 있다. 일부 구현들에서, 제어 디바이스(210) 및/또는 스펙트로미터(220)는 하나 또는 그 초과 디바이스들(300) 및/또는 디바이스(300)의 하나 또는 그 초과 컴포넌트들을 포함할 수 있다. 도 3에서 도시된 바와 같이, 디바이스(300)는 버스(310), 프로세서(320), 메모리(330), 저장 컴포넌트(340), 입력 컴포넌트(350), 출력 컴포넌트(360), 및 통신 인터페이스(370)를 포함할 수 있다.
- [0021] [0024] 버스(310)는 디바이스(300)의 컴포넌트들 간의 통신을 허용하는 컴포넌트를 포함할 수 있다. 프로세서(320)는 하드웨어, 펌웨어, 또는 하드웨어 및 소프트웨어의 결합으로 구현된다. 프로세서(320)는 명령들을 해석하고 및/또는 실행하는 프로세서(예를 들어, CPU(central processing unit), GPU(graphics processing unit), APU(accelerated processing unit) 등), 마이크로프로세서 및/또는 임의의 프로세싱 컴포넌트(예를 들어, FPGA(field-programmable gate array), ASIC(application-specific integrated circuit) 등)을 포함할 수 있다. 일부 구현들에서, 프로세서(320)는 기능을 수행하도록 프로그래밍될 수 있는 하나 또는 그 초과 프로세서들을 포함할 수 있다. 메모리(330)는 프로세서(320)에 의한 이용을 위해 정보 및/또는 명령들을 저장하는 RAM(random access memory), ROM(read only memory) 및/또는 다른 타입의 동적 또는 정적 저장 디바이스(예를 들어, 플래시 메모리, 자기 메모리, 광학 메모리 등)를 포함할 수 있다.
- [0022] [0025] 저장 컴포넌트(340)는 디바이스(300)의 동작 및 이용에 관련되는 정보 및/또는 소프트웨어를 저장할 수 있다. 예를 들어, 저장 컴포넌트(340)는 대응하는 드라이브와 함께, 하드 디스크(예를 들어, 자기 디스크, 광

학 디스크, 자기-광학 디스크, 고상 디스크 등), 콤팩트 디스크(CD), 디지털 다용도 디스크(DVD), 플로피 디스크, 카트리지, 자기 테이프 및/또는 다른 타입의 컴퓨터-판독 가능 매체를 포함할 수 있다.

[0023] [0026] 입력 컴포넌트(350)는 예컨대, 사용자 입력(예를 들어, 터치 스크린 디스플레이, 키보드, 키패드, 마우스, 버튼, 스위치, 마이크로폰 등)을 통해 디바이스(300)가 정보를 수신하도록 허용하는 컴포넌트를 포함할 수 있다. 부가적으로 또는 대안적으로, 입력 컴포넌트(350)는 정보를 감지하기 위한 센서(예를 들어, GPS(global positioning system) 컴포넌트, 가속도계, 자이로스코프, 액추에이터 등)를 포함할 수 있다. 출력 컴포넌트(360)는 디바이스(300)로부터의 출력 정보를 제공하는 컴포넌트(예를 들어, 디스플레이, 스피커, 하나 또는 그 초과 발광 다이오드(LED들) 등)를 포함할 수 있다.

[0024] [0027] 통신 인터페이스(370)는 예컨대, 유선 연결, 무선 연결, 또는 유선 및 무선 연결들의 결합을 통해 디바이스(300)가 다른 디바이스들과 통신하는 것을 가능케 하는 트랜시버-유사 컴포넌트(예를 들어, 트랜시버, 별개의 수신기 및 송신기 등)를 포함할 수 있다. 통신 인터페이스(370)는 디바이스(300)가 다른 디바이스로부터 정보를 수신하고 및/또는 정보를 다른 디바이스에 제공하도록 허용할 수 있다. 예를 들어, 통신 인터페이스(370)는 이더넷 인터페이스, 광학 인터페이스, 동축 인터페이스, 적외선 인터페이스, 라디오 주파수(RF) 인터페이스, 범용 직렬 버스(USB) 인터페이스, Wi-Fi 인터페이스, 셀룰러 네트워크 인터페이스 등을 포함할 수 있다.

[0025] [0028] 디바이스(300)는 본원에서 설명되는 하나 또는 그 초과 프로세스들을 수행할 수 있다. 디바이스(300)는 프로세서(320)가 메모리(330) 및/또는 저장 컴포넌트(340)와 같은 컴퓨터-판독 가능 매체에 의해 저장된 소프트웨어 명령들을 실행하는 것에 대한 응답으로 이들 프로세스들을 수행할 수 있다. 컴퓨터-판독 가능 매체는 본원에서 비-일시적인 메모리 디바이스로서 정의된다. 메모리 디바이스는 단일 물리적 저장 디바이스 내에 메모리 공간 또는 다수의 물리적 저장 디바이스들에 걸쳐 분산된 메모리 공간을 포함한다.

[0026] [0029] 소프트웨어 명령들은 통신 인터페이스(370)를 통해 다른 디바이스로부터 또는 다른 컴퓨터-판독 가능 매체로부터 메모리(330) 및/또는 저장 컴포넌트(340)로 판독될 수 있다. 실행될 때, 메모리(330) 및/또는 저장 컴포넌트(340)에 저장된 소프트웨어 명령들은 프로세서(320)가 본원에서 설명되는 하나 또는 그 초과 프로세스들을 수행하게 할 수 있다. 부가적으로 또는 대안적으로, 하드와이어드 회로(hardwired circuitry)는 본원에서 설명되는 하나 또는 그 초과 프로세스들을 수행하도록 소프트웨어 명령들과 결합하여 또는 그 대신 이용될 수 있다. 따라서, 본원에서 설명되는 구현들은 하드웨어 회로 및 소프트웨어의 임의의 특정 결합으로 제한되지 않는다.

[0027] [0030] 도 3에서 도시된 컴포넌트들의 수 및 어레이먼트는 예로서 제공된다. 실제로, 디바이스(300)는 도 3에서 도시된 것들 이외의 추가적인 컴포넌트들, 더 적은 컴포넌트들, 상이한 컴포넌트들, 또는 상이하게 배열되는 컴포넌트들을 포함할 수 있다. 부가적으로, 또는 대안적으로, 디바이스(300)의 컴포넌트들의 세트(예를 들어, 하나 또는 그 초과 컴포넌트들)는 디바이스(300)의 컴포넌트들의 다른 세트에 의해 수행되는 것으로서 설명되는 하나 또는 그 초과 기능들을 수행할 수 있다.

[0028] [0031] 도 4는 지원 벡터 머신 분류자에 기초하여 미가공 물질 식별을 위한 글로벌 분류 모델을 생성하기 위한 예시적인 프로세스(400)의 흐름도이다. 일부 구현들에서, 도 4의 하나 또는 그 초과 프로세스 블록들은 제어 디바이스(210)에 의해 수행될 수 있다. 일부 구현들에서, 도 4의 하나 또는 그 초과 프로세스 블록들은 스펙트로미터(220)와 같이 제어 디바이스(210)를 포함하거나 이와 별개의 다른 디바이스 또는 디바이스들의 그룹에 의해 수행될 수 있다.

[0029] [0032] 도 4에서 도시된 바와 같이, 프로세스(400)는 스펙트로스코픽 측정들의 세트가 트레이닝 세트 상에서 수행되게 하는 것을 포함할 수 있다(블록 410). 예를 들어, 제어 디바이스(210)는 스펙트로미터(220)가 트레이닝 세트의 각각의 샘플에 대한 스펙트럼을 결정하도록 샘플들의 트레이닝 세트 상에서 스펙트로스코픽 측정들의 세트를 수행하게 할 수 있다. 트레이닝 세트는 글로벌 분류 모델을 생성하는데 활용될 수 있는 하나 또는 그 초과 알려진 화합물들의 샘플들의 세트를 지칭할 수 있다. 예를 들어, 트레이닝 세트는 화합물들의 세트의 하나 또는 그 초과 버전들을 포함할 수 있다(예를 들어, 하나 또는 그 초과 버전들은 제조 차이들에 대한 제어를 위해 상이한 제조사들에 의해 제조됨). 일부 구현들에서, 트레이닝 세트는 RMID가 수행되는 화합물들의 예상된 세트에 기초하여 선택될 수 있다. 예를 들어, RMID가 제약 화합물들에 대해 수행될 것으로 예상될 때, 트레이닝 세트는 API들(active pharmaceutical ingredients), 첨가제들 등의 샘플들의 세트를 포함할 수 있다. 일부 구현들에서, 트레이닝 세트는 각각의 타입의 화합물에 대해 특정량의 샘플들을 포함하도록 선택될 수 있다. 예를 들어, 트레이닝 세트는 특정 화합물의 다수의 샘플들(예를 들어, 5 샘플들, 10 샘플들, 15 샘플들, 50 샘플들 등)을 포함하도록 선택될 수 있다. 이러한 방식으로, 제어 디바이스(210)에는, 분류 모델(예를

들어, 글로벌 분류 모델, 로컬 분류 모델 등)에 대해, 미지의 샘플들이 정확하게 할당될 수 있는 클래스의 생성을 용이하게 하도록 특정 타입의 화합물과 연관된 임계량의 스펙트럼들이 제공될 수 있다.

[0030] [0033] 일부 구현들에서, 제어 디바이스(210)는 하나 또는 그 초과 물리적 컨디션들을 참작하기 위해 다수의 스펙트로미터들(220)이 스펙트로스코픽 측정들의 세트를 수행하게 할 수 있다. 예를 들어, 제어 디바이스(210)는 제 1 스펙트로미터(220) 및 제 2 스펙트로미터(220)가, NIR 스펙트로스코피를 이용하여 진동 스펙트로스코픽 측정의 세트를 수행하게 할 수 있다. 부가적으로 또는 대안적으로, 제어 디바이스(210)는 다수의 상이한 실험실 컨디션들 등 하에서, 스펙트로스코픽 측정들의 세트가 다수의 위치들에서 여러 번 수행되게 할 수 있다. 이러한 방식으로, 제어 디바이스(210)는, 스펙트로스코픽 측정들의 세트가 단일 스펙트로미터에 의해 수행되게 하는 것에 대한 물리적 컨디션의 결과로서 스펙트로스코픽 측정이 부정확할 가능성을 감소시킨다.

[0031] [0034] 도 4에서 추가로 도시된 바와 같이, 프로세스(400)는 스펙트로스코픽 측정들의 세트의 결과들을 식별하는 정보를 수신하는 것을 포함할 수 있다(블록 420). 예를 들어, 제어 디바이스(210)는 스펙트로스코픽 측정들의 세트의 결과들을 식별하는 정보를 수신할 수 있다. 일부 구현들에서, 제어 디바이스(210)는 트레이닝 세트의 샘플들에 대응하는 스펙트럼들의 세트를 식별하는 정보를 수신할 수 있다. 예를 들어, 제어 디바이스(210)는 스펙트로미터(220)가 트레이닝 세트 상에서 스펙트로스코피를 수행할 때 관찰된 특정 스펙트럼을 식별하는 정보를 수신할 수 있다. 부가적으로 또는 대안적으로, 제어 디바이스(210)는 스펙트로스코픽 측정들의 세트의 결과로서 다른 정보를 수신할 수 있다. 예를 들어, 제어 디바이스(210)는 에너지의 흡수, 에너지의 방출, 에너지의 스캐터링 등을 식별하는 것과 연관되는 정보를 수신할 수 있다.

[0032] [0035] 일부 구현들에서, 제어 디바이스(210)는 다수의 스펙트로미터들(220)로부터 스펙트로스코픽 측정들의 세트의 결과들을 식별하는 정보를 수신할 수 있다. 예를 들어, 제어 디바이스(210)는 다수의 스펙트로미터들(220)에 의해 수행되고, 여러 번 다르게 수행되고, 다수의 상이한 위치들 등에서 수행된 스펙트로스코픽 측정들을 수신함으로써, 물리적 컨디션들에 대해, 예컨대, 다수의 스펙트로미터들(220) 간의 차이, 연구실 컨디션 간의 잠재적 차이 등을 제어할 수 있다.

[0033] [0036] 도 4에서 추가로 도시된 바와 같이, 프로세스(400)는 스펙트로스코픽 측정들의 세트의 결과들을 식별하는 정보에 기초하여 특정 분류자와 연관되는 글로벌 분류 모델을 생성하는 것을 포함할 수 있다(블록 430). 예를 들어, 제어 디바이스(210)는 스펙트로스코픽 측정들의 세트의 결과들을 식별하는 정보에 기초하여 SVM 분류자 기술과 연관되는 글로벌 분류 모델을 생성할 수 있다. 일부 구현들에서, 제어 디바이스(210)는 글로벌 분류 모델을 생성하도록 분류들의 세트를 수행할 수 있다. 예를 들어, 제어 디바이스(210)는 SVM 기술을 이용한 것에 기초한 클래스들의 세트에 스펙트로스코픽 측정들의 세트의 결과들에 의해 식별된 스펙트럼들의 세트를 할당할 수 있다.

[0034] [0037] SVM은 분류를 위해 패턴 인식을 수행하는 감독 러닝 모델(supervised learning model)을 지칭할 수 있다. 일부 구현들에서, 제어 디바이스(210)는 SVM 기술을 이용하여 글로벌 분류 모델을 생성할 때 특정 타입의 커널 함수를 활용할 수 있다. 예를 들어, 제어 디바이스(210)는 RBF(radial basis function)(예를 들어, SVM-rbf라 지칭됨) 타입의 커널 함수, 선형 함수(예를 들어, 다중-스테이지 분류 기술에 대해 활용될 때 SVM-선형으로 지칭되고 hier-SVM-선형으로 지칭됨) 타입의 커널 함수, 시그모이드 함수(sigmoid function) 타입의 커널 함수, 다항식 함수 타입의 커널 함수, 지수 함수 타입의 커널 함수 등을 활용할 수 있다. 일부 구현들에서, 제어 디바이스(210)는 특정 타입의 SVM, 예컨대, SVM에 기초한 확률값(예를 들어, 샘플이 클래스들의 세트의 클래스의 일원일 확률을 결정하는 것에 기초한 분류), 판단값 기반 SVM(예를 들어, 샘플이 일원인 클래스인 것으로서 클래스들의 세트 중의 클래스에 투표하기 위한 판단 함수를 활용하는 분류) 등을 활용할 수 있다.

[0035] [0038] 일부 구현들에서, 제어 디바이스(210)는 분류 기술들의 세트로부터 글로벌 분류 모델을 생성하기 위해 활용되는 특정 분류자를 선택할 수 있다. 예를 들어, 제어 디바이스(210)는 다수의 분류자들에 대응하는 다수의 분류 모델들을 생성할 수 있고, 예컨대, 각각의 모델의 이동성(예를 들어, 제 1 스펙트로미터(220) 상에서 수행된 스펙트로스코픽 측정들에 기초하여 생성된 분류 모델이, 제 2 스펙트로미터(220) 상에서 수행되는 스펙트로스코픽 측정들에 적용될 때 정확한 정도), 대-규모 분류 정확도(예를 들어, 분류 모델이, 임계치를 충족하는 대량의 샘플들을 동시에 분류하는데 활용될 수 있는 정확도) 등을 결정함으로써 다수의 분류 모델들을 테스트할 수 있다. 이 경우에, 제어 디바이스(210)는, SVM 분류자가 다른 분류자들에 비해 우월한 이동성 및/또는 대-규모 분류 정확도와 연관된다는 결정에 기초하여 SVM 분류자(예를 들어, hier-SVM-선형)를 선택할 수 있다.

[0036] [0039] 일부 구현들에서, 제어 디바이스(210)는 트레이닝 세트의 샘플들을 식별하는 정보에 기초하여 글로벌

분류 모델을 생성할 수 있다. 예를 들어, 제어 디바이스(210)는 화합물들의 타입들과 관련하여 스펙트럼들의 클래스들을 식별하기 위해 트레이닝 세트의 샘플들에 의해 표현되는 화합물들의 타입들을 식별하는 정보를 활용할 수 있다. 일부 구현들에서, 제어 디바이스(210)는 글로벌 분류 모델을 생성할 때 글로벌 분류 모델을 트레이닝할 수 있다. 예를 들어, 제어 디바이스(210)는 스펙트로스코픽 측정들의 세트의 부분을 이용하여 모델이 트레이닝되게 할 수 있다. 부가적으로 또는 대안적으로, 제어 디바이스(210)는 글로벌 분류 모델의 평가를 수행할 수 있다. 예를 들어, 제어 디바이스(210)는 스펙트로스코픽 측정들의 세트의 다른 부분을 활용하여 글로벌 분류 모델(예를 들어, 예측 강도에 대해)을 검증할 수 있다. 일부 구현들에서, 제어 디바이스(210)는 다중-스테이지 분류 기술을 이용하여 글로벌 분류 모델을 검증할 수 있다. 예를 들어, 제어 디바이스(210)는, 도 6에 관하여 본원에서 설명된 바와 같이, 하나 또는 그 초과 로컬 분류 모델들과 관련하여 활용될 때 글로벌 분류 모델이 정확하다고 결정할 수 있다. 이러한 방식으로, 제어 디바이스(210)는, 글로벌 분류 모델이 다른 스펙트로미터들(220)과 연관된 다른 제어 디바이스(210)에 의한 활용을 위해 글로벌 분류 모델을 제공하기 이전에 임계 정확도로 생성된다는 것을 보장한다.

[0037] [0040] 일부 구현들에서, 제어 디바이스(210)는 글로벌 분류 모델을 생성한 이후, 다른 스펙트로미터들(220)과 연관된 다른 제어 디바이스(210)에 글로벌 분류 모델을 제공할 수 있다. 예를 들어, 제 1 제어 디바이스(210)는 글로벌 분류 모델을 생성할 수 있고, 활용을 위해 제 2 제어 디바이스(210)에 글로벌 분류 모델을 제공할 수 있다. 이 경우에, 제 2 제어 디바이스(210)는 글로벌 분류 모델을 저장할 수 있고, 도 6에 관하여 본원에서 설명된 바와 같이 하나 또는 그 초과 로컬 분류 모델들을 생성하고 미지의 세트의 하나 또는 그 초과 샘플들을 분류하는데 있어 글로벌 분류 모델을 활용할 수 있다. 부가적으로 또는 대안적으로, 제어 디바이스(210)는 하나 또는 그 초과 로컬 분류 모델들을 생성하고 하나 또는 그 초과 샘플들을 분류하는데 있어 제어 디바이스(210)에 의한 활용을 위해 글로벌 분류 모델을 저장할 수 있다. 이러한 방식으로, 제어 디바이스(210)는 미지의 샘플들의 RMID에서의 활용을 위해 글로벌 분류 모델을 제공한다.

[0038] [0041] 도 4가 프로세스(400)의 예시적인 블록들을 도시하지만, 일부 구현들에서, 프로세스(400)는 도 4에서 도시된 것들 이외의 부가적인 블록들, 더 적은 블록들, 상이한 블록들 또는 상이하게 배열되는 블록들을 포함할 수 있다. 부가적으로 또는 대안적으로, 프로세스(400)의 블록들 중 2개 또는 그 초과는 병렬로 수행될 수 있다.

[0039] [0042] 도 5는 도 4에서 도시된 예시적인 프로세스(400)에 관한 예시적인 구현(500)의 도면이다. 도 5는 지원 벡터 머신 분류자에 기초하여 미가공 물질 식별을 위한 글로벌 분류 모델을 생성하는 예를 도시한다.

[0040] [0043] 도 5에서 도시된 바와 같이, 제어 디바이스(210-1)는 트레이닝 세트(510) 상에서 스펙트로스코픽 측정들의 세트를 수행하도록 스펙트로미터(220-1)에 지시하기 위해 스펙트로미터(220-1)에 정보를 송신한다. 트레이닝 세트(510)는 트레이닝 샘플들의 제 1 세트(예를 들어, 그의 측정들은 글로벌 분류 모델을 트레이닝하기 위해 활용됨) 및 검증 샘플들의 제 2 세트(예를 들어, 그의 측정들은 글로벌 분류 모델의 정확도를 검증하기 위해 활용됨)를 포함한다고 가정한다. 참조 번호(515)에 의해 도시된 바와 같이, 스펙트로미터(220-1)는 명령을 수신하는 것에 기초하여 트레이닝 세트 상에서 스펙트로스코픽 측정들의 세트를 수행한다. 참조 번호(520)에 의해 도시된 바와 같이, 제어 디바이스(210-1)는 트레이닝 샘플들에 대한 스펙트럼의 제 1 세트 및 검증 샘플들에 대한 스펙트럼의 제 2 세트를 수신한다. 제어 디바이스(210-1)는 트레이닝 세트(510)의 각각의 샘플을 식별하는 정보를 저장한다고 가정한다.

[0041] [0044] 도 5에 관하여, 제어 디바이스(210-1)는 (예를 들어, 하나 또는 그 초과 다른 분류자들에 대해 hier-SVM-선형 분류자를 테스트하는 것에 기초하여) 글로벌 분류 모델을 생성하기 위해 hier-SVM-선형 분류자를 활용하도록 선택한다고 가정한다. 참조 번호(525)에 의해 도시된 바와 같이, 제어 디바이스(210-1)는 hier-SVM-선형 분류자 및 스펙트럼의 제 1 세트를 이용하여 글로벌 분류 모델을 트레이닝하고 hier-SVM-선형 분류자 및 스펙트럼의 제 2 세트를 이용하여 글로벌 분류 모델을 검증한다. 제어 디바이스(210-1)는 글로벌 분류 모델이 검증 임계치를 만족(예를 들어, 검증 임계치를 초과하는 정확도를 가짐)한다고 결정한다는 것을 가정한다. 참조 번호(530)에 의해 도시된 바와 같이, 제어 디바이스(210-1)는 (예를 들어, 스펙트로미터(220-2)에 의해 수행되는 스펙트로스코픽 측정들 상에서 RMID를 수행할 때 활용을 위해) 제어 디바이스(210-2)에, 그리고 (예를 들어, 스펙트로미터(220-3)에 의해 수행되는 스펙트로스코픽 측정들 상에서 RMID를 수행할 때 활용을 위해) 제어 디바이스(210-3)에 글로벌 분류 모델을 제공한다.

[0042] [0045] 위에서 표시된 바와 같이, 도 5는 단지 예로서 제공된다. 다른 예들이 가능하며 도 5에 관하여 설명된 것과 상이할 수 있다.

- [0043] [0046] 이러한 방식으로, 제어 디바이스(210)는, (예를 들어, 모델 이동성, 대-규모 분류 정확도 등에 기초하여 선택되는) 선택된 분류 기술에 기초한 글로벌 분류 모델의 생성 및 및 하나 또는 그 초과와 스펙트로미터(220)와 연관되는 하나 또는 그 초과와 다른 제어 디바이스들(210)에 의한 활용을 위한 글로벌 분류 모델의 분배를 용이하게 한다. 또한, 제어 디바이스(210)는 RMID를 수행하기 위한 것인 각각의 제어 디바이스(210)에 관한 글로벌 분류 모델을 생성하는 것에 비해 비용 및 시간 요건들을 감소시킨다.
- [0044] [0047] 도 6은 다중-스테이지 분류 기술을 이용하여 미가공 물질 식별을 수행하기 위한 예시적인 프로세스(600)의 흐름도이다. 일부 구현들에서, 도 6의 하나 또는 그 초과와 프로세스 블록들은 제어 디바이스(210)에 의해 수행될 수 있다. 일부 구현들에서, 도 6의 하나 또는 그 초과와 프로세스 블록들은 스펙트로미터(220)와 같이 제어 디바이스(210)를 포함하거나 이와 별개의 다른 디바이스 또는 디바이스들의 그룹에 의해 수행될 수 있다.
- [0045] [0048] 도 6에서 도시된 바와 같이, 프로세스(600)는 미지의 세트 상에서 수행되는 스펙트로스코픽 측정들의 세트의 결과들을 식별하는 정보를 수신하는 것을 포함할 수 있다(블록 610). 예를 들어, 제어 디바이스(210)는 스펙트로미터(220)에 의해 미지의 세트 상에서 수행되는 스펙트로스코픽 측정들의 세트의 결과들을 식별하는 정보를 수신할 수 있다. 미지의 세트는 RMID가 수행되는 샘플들(예를 들어, 미지의 샘플들)의 세트를 포함할 수 있다. 예를 들어, 제어 디바이스(210)는 스펙트로미터(220)가 샘플들의 세트 상에서 스펙트로스코픽 측정들의 세트를 수행하게 할 수 있고, 샘플들의 세트에 대응하는 스펙트럼의 세트를 식별하는 정보를 수신할 수 있다. 일부 구현들에서, 제어 디바이스(210)는 다수의 스펙트로미터들(220)로부터 결과들을 식별하는 정보를 수신할 수 있다. 예를 들어, 제어 디바이스(210)는 다수의 스펙트로미터들(220)이 미지의 세트(예를 들어, 샘플들의 동일 세트) 상에서 스펙트로스코픽 측정들의 세트를 수행하게 할 수 있고, 미지의 세트의 샘플들에 대응하는 스펙트럼의 세트를 식별하는 정보를 수신할 수 있다. 부가적으로 또는 대안적으로, 제어 디바이스(210)는 다수의 위치들 등에서 여러 번 수행된 스펙트로스코픽 측정들의 세트의 결과들을 식별하는 정보를 수신할 수 있고, (예를 들어 스펙트로스코픽 측정들의 세트의 평균에 기초하여 또는 다른 기술에 기초하여) 다수의 위치들 등에서 여러 번 수행된 스펙트로스코픽 측정들의 세트에 기초하여 특정 샘플을 분류할 수 있다. 이러한 방식으로, 제어 디바이스(210)는 스펙트로스코픽 측정들의 세트의 결과들에 영향을 줄 수 있는 물리적 조건들을 참작할 수 있다.
- [0046] [0049] 부가적으로 또는 대안적으로, 제어 디바이스(210)는 제 1 스펙트로미터(220)가 미지의 세트의 제 1 부분 상에서 스펙트로스코픽 측정들의 세트의 제 1 부분을 수행하게 할 수 있고, 제 2 스펙트로미터(220)가 미지의 세트의 제 2 부분 상에서 스펙트로스코픽 측정들의 세트의 제 2 부분을 수행하게 할 수 있다. 이러한 방식으로, 제어 디바이스(210)는 모든 스펙트로스코픽 측정들이 단일 스펙트로미터(220)에 의해 수행되게 하는 것에 비해 스펙트로스코픽 측정들의 세트를 수행하기 위한 시간량을 감소시킬 수 있다.
- [0047] [0050] 도 6에서 추가로 도시된 바와 같이, 프로세스(600)는 스펙트로스코픽 측정들의 세트의 결과들 및 글로벌 분류 모델에 기초하여 제 1 분류를 수행하는 것을 포함할 수 있다(블록 620). 예를 들어, 제어 디바이스(210)는 결과들 및 글로벌 분류 모델에 기초하여 제 1 분류를 수행할 수 있다. 일부 구현들에서, 제어 디바이스(210)는 제 1 분류를 수행하는데 있어 활용을 위해 글로벌 분류 모델을 수신할 수 있다. 예를 들어, 제 1 제어 디바이스(210)는 (예를 들어, SVM-선형 분류자를 이용하여 그리고 도 4에 관하여 본원에서 설명된 바와 같이 트레이닝 세트 상에서 수행되는 스펙트로스코픽 측정들의 세트에 기초하여) 글로벌 분류 모델을 생성할 수 있고, 미지의 세트의 제 1 분류를 수행하기 위해 글로벌 분류 모델을 제 2 제어 디바이스(210)에 제공할 수 있다. 부가적으로 또는 대안적으로, 제어 디바이스(210)는 (예를 들어, SVM-선형 분류자를 이용하여 그리고 도 4에 관하여 본원에서 설명된 바와 같이 트레이닝 세트 상에서 수행되는 스펙트로스코픽 측정들의 세트에 기초하여) 글로벌 분류 모델을 생성할 수 있고, 미지의 세트의 제 1 분류를 수행하기 위해 글로벌 분류 모델을 활용할 수 있다.
- [0048] [0051] 일부 구현들에서, 제어 디바이스(210)는 제 1 분류를 수행할 때 글로벌 분류 모델의 클래스들의 세트 중의 특정 클래스에 미지의 세트의 특정 샘플을 할당할 수 있다. 예를 들어, 제어 디바이스(210)는, 특정 샘플과 연관되는 특정 스펙트럼이 글로벌 분류 모델에 기초하여 화합물들의 클래스(예를 들어, 셀룰로오스 화합물, 락토스 화합물, 카페인 화합물들 등)에 대응한다고 결정할 수 있고 특정 샘플을 특정 클래스에 할당할 수 있다. 일부 구현들에서, 제어 디바이스(210)는 신뢰도 메트릭에 기초하여 특정 샘플을 할당할 수 있다. 예를 들어, 제어 디바이스(210)는 글로벌 분류 모델에 기초하여, 특정 스펙트럼이 글로벌 분류 모델의 각각의 클래스에 연관되는 확률을 결정할 수 있다. 이 경우에, 제어 디바이스(210)는 다른 클래스들과 연관된 다른 확률들을 초과하는 특정 클래스의 특정 확률에 기초하여 특정 클래스에 특정 샘플을 할당할 수 있다. 이러한 방식으로, 제어

디바이스(210)는 샘플이 연관되는 화합물의 타입을 결정하고 그리하여 샘플을 식별한다.

- [0049] [0052] 부가적으로 또는 대안적으로, 제어 디바이스(210)는 제 1 분류와 연관되는 다른 신뢰도 메트릭을 결정할 수 있다. 예를 들어, 제어 디바이스(210)가 제 1 분류를 수행할 때 특정 샘플을 특정 클래스에 할당하면, 제어 디바이스(210)는 특정 샘플이 특정 클래스와 연관되는 확률(예를 들어, 최대 확률이라 칭해짐)과 특정 샘플이 다음 가장 유망한 클래스와 연관되는 다른 확률(예를 들어, 제 2 최대 확률이라 칭해짐) 간의 차이를 결정할 수 있다. 이러한 방식으로, 제어 디바이스(210)는 다음 가장 유망한 클래스보다 오히려 특정 클래스에 특정 샘플을 할당하는 것과 연관되는 신뢰도를 결정한다. 최대 확률과 제 2 최대 확률이 둘 다 비교적 높고 비교적 유사한 경우(예를 들어, 최대 확률이 48%이고 제 2 최대 확률이 4%이기 보단, 최대 확률은 48%이고 제 2 최대 확률은 47%임), 제어 디바이스(210)는 최대 확률과 제 2 최대 확률 간의 차이를 제공함으로써 할당 정확도의 더 나은 표시를 제공한다. 즉, 최대 확률이 48%이고 제 2 최대 확률이 47%인 제 1 경우에, 가장 유망한 클래스에 대한 할당 정확도는, 최대 확률이 48%이고 제 2 최대 확률이 4%인 제 2 경우보다 비교적 더 낮지만, 최대 확률은 양자의 케이스들에 대해 동일하다. 최대 확률과 제 2 최대 확률 간의 차이의 메트릭을 제공하는 것은 양자의 케이스들을 구분할 수 있다.
- [0050] [0053] 도 6에서 추가로 도시된 바와 같이, 프로세스(600)는 제 1 분류에 기초하여 로컬 분류 모델을 생성하는 것을 포함할 수 있다(블록 630). 예를 들어, 제어 디바이스(210)는 제 1 분류에 기초하여 로컬 분류 모델을 생성할 수 있다. 로컬 분류 모델은 제 1 분류와 연관되는 신뢰도 메트릭들에 기초한 SVM 분류 기술(예를 들어 SVM-rbf, SVM-선형 등; SVM에 기초한 확률값, SVM에 기초한 판단값 등; 기타 등)을 이용하여 생성되는 인 시추 분류 모델을 지칭할 수 있다. 예를 들어, 신뢰도 메트릭들의 세트가 글로벌 분류 모델에 기초하여 샘플의 스펙트럼에 대해 결정될 때, 제어 디바이스(210)는 스펙트럼이 글로벌 분류 모델의 각각의 클래스와 연관되는 각각의 확률들에 기초하여 글로벌 분류 모델의 클래스들의 서브세트를 선택할 수 있다. 이러한 경우에, 제어 디바이스(210)는 클래스들의 선택된 서브세트에 기초하여 그리고 SVM 분류 기술을 이용하여 로컬 분류 모델을 생성할 수 있다.
- [0051] [0054] 일부 구현들에서, 오토스케일링 전처리 프로시저(autoscaling pretreatment procedure)가 수행될 수 있다. 예를 들어, 로컬 분류 모델을 생성하기 위해, 제어 디바이스(210)는 로컬 분류 모델에 대해 선택된 글로벌 분류 모델의 클래스들의 서브세트와 연관되는 스펙트럼에 대해 오토스케일링 전처리 프로시저를 수행할 수 있다. 일부 구현들에서, 오토스케일링 전처리 프로시저는 글로벌 분류 모델을 이용한 제 1 분류와 같이 다른 분류에 대해 수행될 수 있다. 일부 구현들에서, 센터링(centering) 프로시저, 변환 등과 같은 다른 타입의 전처리 프로시저가 수행될 수 있다.
- [0052] [0055] 일부 구현들에서, 클래스들의 서브세트는 최고의 각각의 신뢰도 메트릭들과 연관되는 클래스들의 임계량을 포함할 수 있다. 예를 들어, 제어 디바이스(210)는, 샘플의 스펙트럼이 글로벌 분류 모델의 다른 클래스들보다는 자신과 연관될 더 높은 각각의 확률들과 연관되는 10개의 클래스들에 기초하여 글로벌 분류 모델의 10개의 클래스들을 선택할 수 있고, 10개의 클래스들에 기초하여 로컬 모델을 생성할 수 있다. 일부 구현들에서, 제어 디바이스(210)는 임계치를 충족하는 클래스들의 서브세트에 기초하여 클래스들의 서브세트를 선택할 수 있다. 예를 들어, 제어 디바이스(210)는 임계치를 충족하는 확률과 연관되는 각각의 클래스를 선택할 수 있다. 부가적으로 또는 대안적으로, 제어 디바이스(210)는 임계치를 각각 충족하는 클래스들의 임계량을 선택할 수 있다. 예를 들어, 제어 디바이스(210)는 10개의 클래스들이 각각 최소 임계 확률을 충족하는 경우 10개까지의 클래스들을 선택할 수 있다. 부가적으로 또는 대안적으로, 제어 디바이스(210)는 다른 양의 클래스들(예를 들어, 2개의 클래스들, 5개의 클래스들, 20개의 클래스들 등)을 선택할 수 있다.
- [0053] [0056] 일부 구현들에서, 제어 디바이스(210)는 다수의 로컬 분류 모델을 생성할 수 있다. 예를 들어, 제어 디바이스(210)는 미지의 세트의 제 1 샘플의 제 1 스펙트럼에 대해 제 1 로컬 분류 모델 및 미지의 세트의 제 2 샘플의 제 2 스펙트럼에 대해 제 2 로컬 분류 모델을 생성할 수 있다. 이러한 방식으로, 제어 디바이스(210)는 다수의 로컬 분류 모델을 이용하여 다수의 미지의 샘플들 상에서 동시에 동작함으로써 다수의 미지의 샘플들의 동시적 분류를 용이하게 할 수 있다.
- [0054] [0057] 일부 구현들에서, 제어 디바이스(210)는 글로벌 분류 모델을 이용한 제 1 분류의 수행에 기초하여 정량화 모델(quantification model)을 생성할 수 있다. 예를 들어, 제어 디바이스(210)가 미지의 샘플의 물질의 농도를 결정하도록 활용되고, 다수의 미지의 샘플들은 물질의 농도를 결정하기 위한 상이한 정량화 모델들과 연관될 때, 제어 디바이스(210)는 미지의 샘플에 대한 클래스를 선택하기 위해 제 1 분류를 활용할 수 있고, 미지의 샘플의 클래스와 연관되는 로컬 정량화 모델을 선택할 수 있다. 이러한 방식으로, 제어 디바이스(210)는 미가

공 물질 식별 및/또는 그의 정량화를 개선하기 위해 계층적 분류 및 정량화 모델들을 활용한다.

- [0055] [0058] 도 6에서 추가로 도시된 바와 같이, 프로세스(600)는 스펙트로스코픽 측정들의 세트의 결과들 및 로컬 분류 모델에 기초하여 제 2 분류를 수행하는 것을 포함할 수 있다(블록 640). 예를 들어, 제어 디바이스(210)는 결과들 및 로컬 분류 모델에 기초하여 제 2 분류를 수행할 수 있다. 일부 구현들에서, 제어 디바이스(210)는 특정 스펙트럼에 대해 제 2 분류를 수행할 수 있다. 예를 들어, 제어 디바이스(210)는 로컬 분류 모델에 기초하여 특정 클래스에 특정 스펙트럼을 할당할 수 있다. 일부 구현들에서, 제어 디바이스(210)는 특정 스펙트럼 및 로컬 분류 모델과 연관된 신뢰도 메트릭들의 세트를 결정할 수 있다. 예를 들어, 제어 디바이스(210)는 특정 스펙트럼이 로컬 분류 모델의 각각의 클래스와 연관되는 확률을 결정할 수 있고, 로컬 분류 모델의 다른 클래스보다 더 높은 확률을 갖는 클래스에 특정 스펙트럼(예를 들어, 특정 스펙트럼과 연관되는 특정 샘플)을 할당할 수 있다. 이러한 방식으로, 제어 디바이스(210)는 미지의 세트의 샘플을 식별한다.
- [0056] [0059] 부가적으로 또는 대안적으로, 제어 디바이스(210)는 특정 스펙트럼 및 로컬 분류 모델과 연관되는 다른 신뢰도 메트릭을 결정할 수 있다. 예를 들어, 제어 디바이스(210)가 제 2 분류를 수행할 때 특정 샘플을 특정 클래스에 할당하면, 제어 디바이스(210)는 특정 샘플이 특정 클래스와 연관되는 확률(예를 들어, 최대 확률)과 특정 샘플이 다음 가장 유망한 클래스와 연관되는 다른 확률(예를 들어, 제 2 최대 확률) 간의 차이를 결정할 수 있다. 이러한 방식으로, 제어 디바이스(210)는 로컬 분류 모델에 기초하여 제 2 분류를 수행할 때, 다음 가장 유망한 클래스보다 오히려 특정 클래스에 특정 샘플을 할당하는 것과 연관되는 신뢰도를 결정한다.
- [0057] [0060] 일부 구현들에서, 제어 디바이스(210)는 다수의 제 2 분류들을 수행할 수 있다. 예를 들어, 제어 디바이스(210)는 제 1 로컬 분류 모델에 기초하여 제 1 샘플과 연관되는 제 1 스펙트럼에 대해 제 2 분류를 수행할 수 있고 제 2 로컬 분류 모델에 기초하여 제 2 샘플과 연관되는 제 2 스펙트럼에 대해 다른 제 2 분류를 수행할 수 있다. 이러한 방식으로, 제어 디바이스(210)는 미지의 세트의 다수의 샘플들의 동시적 분류를 용이하게 한다. 일부 구현들에서, 제어 디바이스(210)는 제 2 분류로부터 미지의 세트의 샘플들의 부분을 생략할 수 있다. 예를 들어, 제어 디바이스(210)가 글로벌 분류 모델에 기초하여 특정 클래스에 특정 샘플을 할당하도록 신뢰도 메트릭을 결정하고 신뢰도 메트릭이 임계치를 충족할 때, 제어 디바이스(210)는 제 2 분류로부터 특정 샘플을 생략할 수 있다. 이러한 방식으로, 제어 디바이스(210)는 미지의 세트의 모든 샘플들에 대해 제 2 분류를 수행하는 것에 비해 자원 활용을 감소시킬 수 있다.
- [0058] [0061] 일부 구현들에서, 제어 디바이스(210)는 제 1 분류를 수행한 이후(및/또는 제 2 분류를 수행한 이후) 정량화를 수행할 수 있다. 예를 들어, 제어 디바이스(210)는 하나 또는 그 초과 분류들의 수행에 기초하여 로컬 정량화 모델을 선택하고, 로컬 정량화 모델의 선택에 기초하여 특정 샘플에 관한 정량화를 수행할 수 있다. 일 예로서, 식물성 물질에서 특정 화학물질의 농도를 결정하기 위해 미가공 물질 식별을 수행할 때(여기서 식물성 물질은 (예를 들어, 식물이 겨울에 또는 여름에 실내 또는 실외에서 성장했는지 등에 관한) 다수의 정량화 모델과 연관됨), 제어 디바이스(210)는 특정 정량화 모델을 식별하기 위해 분류들의 세트를 수행할 수 있다. 이러한 경우에, 제어 디바이스(210)는 분류들의 세트의 수행에 기초하여 식물이 겨울에 실내에서 성장했다고 결정할 수 있고, 특정 화학물질의 농도를 결정하도록 겨울에 실내에서 성장한 식물에 관한 정량화 모델을 선택할 수 있다.
- [0059] [0062] 도 6에서 추가로 도시된 바와 같이, 프로세스(600)는 제 2 분류의 수행에 기초하여 미지의 세트에 대한 분류들을 식별하는 정보를 제공하는 것을 포함할 수 있다(블록 650). 예를 들어, 제어 디바이스(210)는 제 2 분류의 수행에 기초하여 미지의 세트의 샘플에 대한 분류를 식별하는 정보를 제공할 수 있다. 일부 구현들에서, 제어 디바이스(210)는 특정 샘플에 대한 특정 클래스를 식별하는 정보를 제공할 수 있다. 예를 들어, 제어 디바이스(210)는 샘플을 식별하도록 특정 샘플과 연관된 특정 스펙트럼이 특정 클래스와 연관되는 것으로 결정되었음을 표시하는 정보를 제공할 수 있다. 일부 구현들에서, 제어 디바이스(210)는 특정 샘플을 특정 클래스에 할당하는 것과 연관되는 신뢰도 메트릭을 표시하는 정보를 제공할 수 있다. 예를 들어, 제어 디바이스(210)는, 특정 샘플이 특정 클래스와 연관되는 확률을 식별하는 정보, 특정 샘플에 대한 최대 확률과 제 2 최대 확률간의 차이 등을 제공할 수 있다. 이러한 방식으로, 제어 디바이스(210)는 특정 스펙트럼이 특정 클래스에 정확히 할당된 가능성을 나타내는 정보를 제공한다.
- [0060] [0063] 일부 구현들에서, 제어 디바이스(210)는 다수의 샘플들에 대한 클래스를 식별하는 정보를 제공한다. 예를 들어, 제어 디바이스(210)는 미지의 세트의 제 1 샘플이 제 1 클래스와 연관되고 미지의 세트의 제 2 샘플이 제 2 클래스와 연관됨을 나타내는 정보를 제공할 수 있다. 이러한 방식으로, 제어 디바이스(210)는 다수의 샘플들의 동시적 식별을 제공한다.

- [0061] [0064] 일부 구현들에서, 제어 디바이스(210)는 정량화 및 분류들의 세트의 수행에 기초하여 정량화를 제공할 수 있다. 예를 들어, 로컬 정량화 모델의 식별에 기초하여, 제어 디바이스(210)는, 분류들의 세트가 물질의 농도를 결정하기 위해 정량화 모델을 선택하는데 활용된 미지의 샘플의 물질의 농도를 식별하는 정보를 제공할 수 있다.
- [0062] [0065] 일부 구현들에서, 제어 디바이스(210)는 샘플의 클래스에 관한 출력을 제공할 수 있다. 예를 들어, 제어 디바이스(210)는, 클래스들의 제 1 세트 또는 클래스들의 제 2 세트 중 하나로의 미지의 샘플의 분류에 기초하여 클래스들의 제 1 세트가 제 1 이진 출력(예를 들어, 예)에 대응하고 클래스들의 제 2 세트가 제 2 이진 출력(예를 들어, 아니오)에 대응하는, 미지의 샘플의 분류에 관한 이진 출력(예를 들어, 예/아니오 출력)을 제공할 수 있다. 일 예로서, 클래스들의 제 1 세트(예를 들어, Kosher Beef Strip Steak, Kosher Beef Ribs, Kosher Chicken Thighs, Kosher Chicken Breasts 등을 포함할 수 있는 Kosher Meat) 및 클래스들의 제 2 세트(예를 들어, Non-Kosher Beef Ribs, Non-Kosher Pork, Non-Kosher Chicken Wings 등을 포함할 수 있는 Non-Kosher Meat)에 대해, 제어 디바이스(210)는 클래스들의 제 1 세트 또는 클래스들의 제 2 세트 중 특정 클래스로의 미지의 샘플의 분류에 기초하여 Kosher 또는 Non-Kosher의 출력을 제공할 수 있다. 다른 예로서, 제어 디바이스(210)는 Halal 또는 non-Halal로서 분류되는 음식에 관한 분류들의 세트를 활용할 수 있으며, 샘플이 Halal 분류 또는 non-Halal 분류(즉, 종교적 검증, 도축 동안 기도 등과 같은 Halal 분류에 대한 다른 기준들이 충족되는지에 무관하게, 샘플이 도출된 동물이 Halal 방식으로 도축되었는지 여부)에 대응하는지를 나타내는 출력을 제공할 수 있다. 이러한 방식으로, 제어 디바이스(210)는 특정 클래스의 식별이 제어 디바이스(210)의 사용자(예를 들어, 고기의 타입을 결정하도록 시도하기 보단, 고기의 아이템이 Kosher인지를 결정하도록 시도하는 사람)에게 중요하지 않을 때 특정 클래스의 식별을 제공하는 것에 비해 더 높은 가능성의 정확도를 갖는 분류를 제공할 수 있다.
- [0063] [0066] 도 6은 프로세스(600)의 예시적인 블록들을 도시하지만, 일부 구현들에서, 프로세스(600)는 도 6에서 도시된 것들 이외의 부가적인 블록들, 더 적은 블록들, 상이한 블록들 또는 상이하게 배열되는 블록들을 포함할 수 있다. 부가적으로 또는 대안적으로, 프로세스(600)의 블록들 중 2개 또는 그 초과는 병렬로 수행될 수 있다.
- [0064] [0067] 도 7a 및 도 7b는 도 6에서 도시된 예시적인 프로세스(600)와 연관되는 예측 성공 레이트들에 관한 예시적인 구현(700)의 도면들이다. 도 7a 및 도 7b는 기술에 기초하여 계층적 지원 벡터 머신(hier-SVM-선형)을 이용하는 미가공 물질 식별의 예시적인 결과들을 도시한다.
- [0065] [0068] 도 7a에서 도시된 바와 같이 그리고 참조 번호(710)에 의해, 신뢰도 메트릭들의 세트는 미지의 세트에 대해 제공된다. 미지의 세트의 각각의 샘플에 대해, 제어 디바이스(210)는, 샘플이 글로벌 분류 모델의 각각의 클래스와 연관되는 확률을 결정한다. 최대 확률은 미지의 세트의 각각의 샘플에 대한 제 2 최대(다음-최대) 확률과 비교된다. 참조 번호(712)에 의해 도시된 바와 같이, 미지의 세트에 대한 최대 확률들은 대략 5% 내지 대략 20% 범위에 있다. 참조 번호(714)에 의해 도시된 바와 같이, 미지의 세트에 대한 제 2 최대 확률들은 대략 0% 내지 대략 5% 범위에 있다. 참조 번호(716)에 의해 도시된 바와 같이, 글로벌 분류 모델에 기초하여 제어 디바이스(210)가 올바르게 분류한 미지의 세트의 샘플들은 강조된다(예를 들어, 미지의 세트의 2645 샘플들 중 84 샘플들은 올바르게 분류됨).
- [0066] [0069] 도 7a에서 추가로 도시된 바와 같이, 그리고 참조 번호(720)에 의해, 신뢰도 메트릭들의 세트는 미지의 세트에 대해 제공된다. 미지의 세트의 각각의 샘플에 대해, 제어 디바이스(210)는, 샘플이 대응하는 로컬 분류 모델의 각각의 클래스와 연관되는 확률을 결정한다. 최대 확률은 미지의 세트의 각각의 샘플에 대한 제 2 최대(다음-최대) 확률과 비교된다. 참조 번호(722)에 의해 도시된 바와 같이, 미지의 세트에 대한 최대 확률들은 대략 50% 내지 대략 98% 범위에 있다. 참조 번호(724)에 의해 도시된 바와 같이, 미지의 세트에 대한 제 2 최대 확률들은 대략 2% 내지 대략 45% 범위에 있다. 또한, 최대 확률과 제 2 최대 확률 간의 확률 차이는 (확률 차이가 대략 8%이고 그럼에도 올바른 분류가 수행된) 하나의 샘플을 제외하고, 미지의 세트의 각각의 샘플에 대해 대략 0.33(33%)보다 크다. 분류들의 세트의 수행에 기초하여, 제어 디바이스(210)는 미지의 세트의 모든 일원들을 올바르게 분류한다.
- [0067] [0070] 도 7b에 관하여, 분류 모델(예를 들어, 글로벌 분류 모델, 로컬 분류 모델 등)의 각각의 클래스의 대량의 샘플들이 임계치를 충족하는데 실패하면, 제어 디바이스(210)는 미지의 세트의 샘플들에 클래스를 할당할 때 감소된 신뢰도 메트릭들 및 연관된 예측 정확도를 결정할 수 있다. 참조 번호(730)에 의해 도시된 바와 같이, 각각의 클래스의 대량의 샘플들이 임계치를 충족하지 못할 때, 제어 디바이스(210)는 미지의 세트에 대하여 글

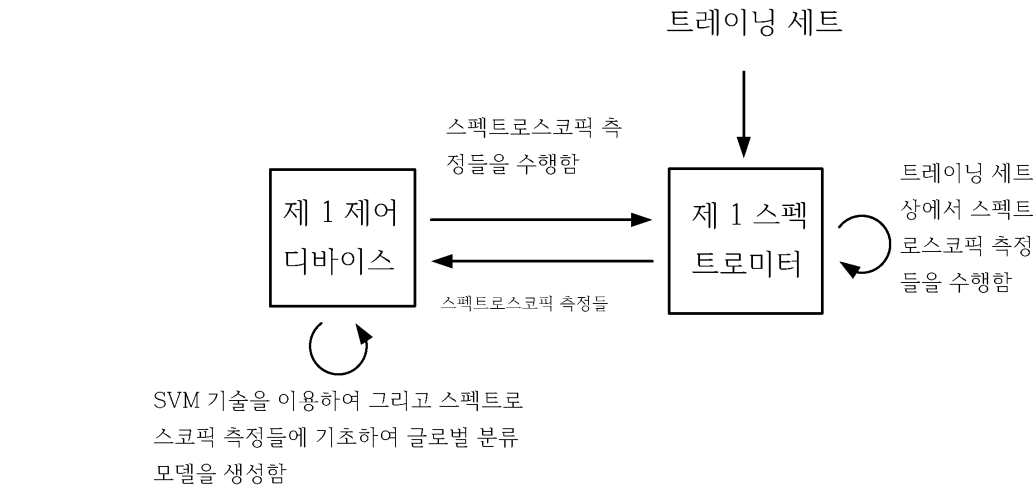
로컬 분류 모델에 기초한 제 1 분류 및 로컬 분류 모델들(예를 들어, 확률 기반 SVM 분류자 로컬 분류 모델들)의 세트에 기초한 제 2 분류를 수행한 이후 4451 샘플들 중 128 샘플들을 오분류한다. 참조 번호(740)에 의해 도시된 바와 같이, 제어 디바이스(210)가 글로벌 분류 모델에 기초한 다른 제 1 분류 및 로컬 분류 모델들(예를 들어, 판단값 기반 SVM 분류자 로컬 분류 모델들)의 다른 세트에 기초한 다른 제 2 분류를 수행할 때, 제어 디바이스(210)는 4451 샘플들 중 1 샘플을 오분류한다. 이러한 방식으로, 제어 디바이스(210)는, 확률 기반 SVM 분류자에 관한 분류 정확도를 개선하도록 판단값 기반 SVM 분류자를 활용한다.

- [0068] [0071] 위에서 표시된 바와 같이, 도 7a 및 도 7b는 단지 예로서 제공된다. 다른 예들이 가능하며 도 7a 및 7b에 관하여 설명된 것과 상이할 수 있다.
- [0069] [0072] 이러한 방식으로, 제어 디바이스(210)는 글로벌 분류 모델 및 RMID를 수행하기 위해 글로벌 분류 모델에 기초하여 생성된 로컬 분류 모델을 활용한다.
- [0070] [0073] 위의 개시는 예시 및 설명을 제공하지만, 개시된 바로 그 형태로 구현들을 제한하거나 총망라하는 것으로 의도되지 않는다. 변형들 및 변동들이 위의 개시를 고려하여 가능하거나 또는 구현들의 실시로부터 취득될 수 있다.
- [0071] [0074] 일부 구현들은 임계치들과 관련하여 본원에서 설명된다. 본원에서 이용되는 바와 같이, 임계치를 충족하는 것은 임계치보다 더 크고, 임계치를 초과하고, 임계치보다 더 높고, 임계치 이상이고, 임계치 미만이고, 임계치보다 더 적고, 임계치 아래이고, 임계치 이하이고 임계치와 동일한 값을 지칭할 수 있다.
- [0072] [0075] 본원에서 설명되는 시스템들 및/또는 방법들은 상이한 형태의 하드웨어, 펌웨어 또는 하드웨어 및 소프트웨어의 결합으로 구현될 수 있다는 것이 자명할 것이다. 이들 시스템들 및/또는 방법들을 구현하는데 이용되는 실제 특수 제어 하드웨어 또는 소프트웨어 코드는 구현들의 제한이 아니다. 따라서, 시스템들 및/또는 방법들의 동작 및 거동은 특정 소프트웨어 코드를 참조함 없이 본원에서 설명되고, 소프트웨어 및 하드웨어는 여기서의 설명에 기초하여 시스템들 및/또는 방법들을 구현하도록 설계될 수 있다는 것이 이해될 것이다.
- [0073] [0076] 특징들의 특정 결합들이 청구항들에서 인용되고 및/또는 명세서에서 개시되지만, 이들 결합들은 가능한 구현들의 개시를 제한하도록 의도되지 않는다. 사실상, 이들 특징들 중 다수는 특별히 청구항들에서 인용되고 및/또는 명세서에서 개시되지 않은 방식으로 결합될 수 있다. 아래에서 나열되는 각각의 종속 청구항은 단지 하나의 청구항만을 직접 인용할 수 있지만, 가능한 구현들의 개시는 청구범위의 각각의 다른 청구항과 결합되는 각각의 종속 청구항을 포함한다.
- [0074] [0077] 여기서 이용되는 어떠한 엘리먼트, 동작 또는 명령들도, 그러한 것으로서 명시적으로 설명되지 않으면 중요하거나 필수적인 것으로서 해석되어선 안 된다. 또한, 본원에서 이용되는 동안, 단수 표현들은 하나 또는 그 초과항의 아이тем들을 포함하도록 의도되며, 복수 표현들과 상호 교환 가능하게 이용될 수 있다. 또한, 본원에서 이용되는 동안, "세트(set)"란 용어는 하나 또는 그 초과항의 아이тем들(예를 들어, 관련된 아이тем들, 관련없는 아이тем들, 관련된 아이тем들 및 관련없는 아이тем들의 결합 등)을 포함하도록 의도되며, "하나 또는 그 초과"와 상호 교환 가능하게 이용될 수 있다. 단지 하나의 아이тем이 의도되는 경우, "하나" 또는 유사한 언어의 용어가 이용된다. 또한, 본원에서 이용되는 동안, "갖는", "가지는", "구비한" 등의 용어들은 오픈-엔드 용어(open-ended term)인 것으로 의도된다. 또한 "에 기초하는"이란 구문은 달리 명시적으로 언급되지 않으면 "적어도 부분적으로 기초하는"을 의미하도록 의도된다.

도면

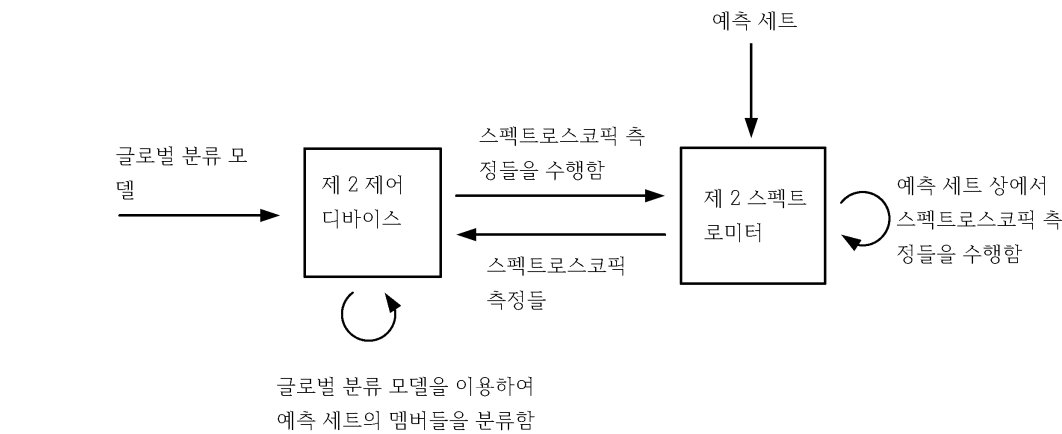
도면1a

100



도면1b

100



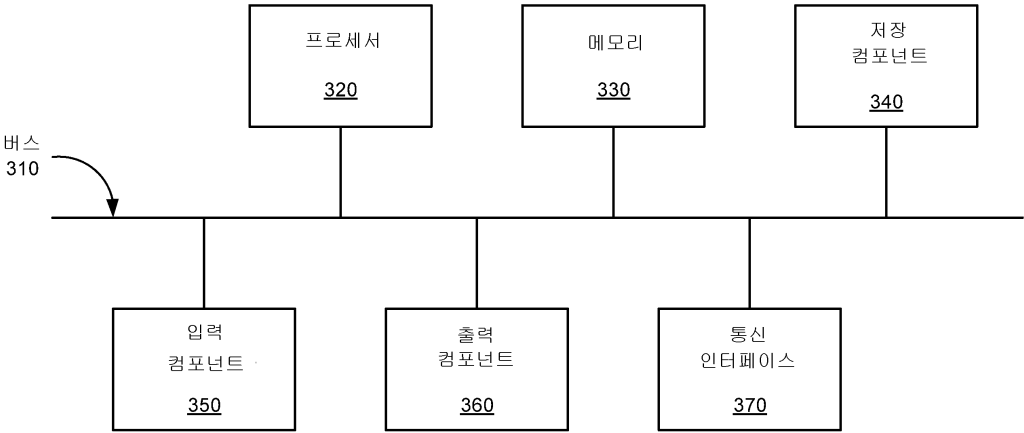
도면2

200 →



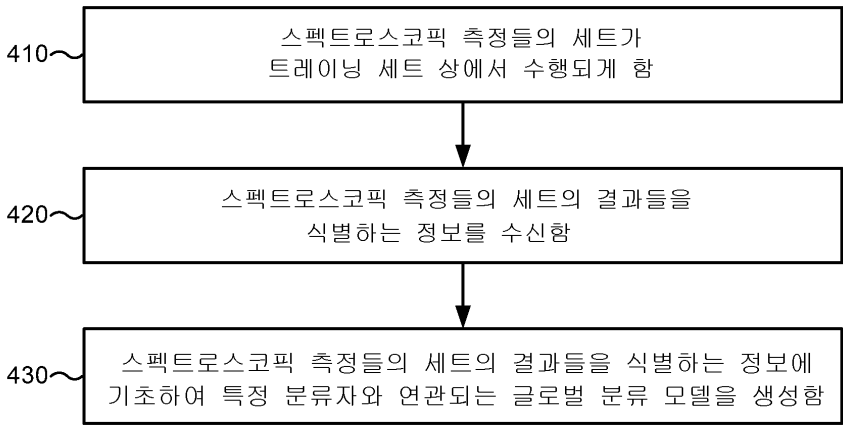
도면3

300 →



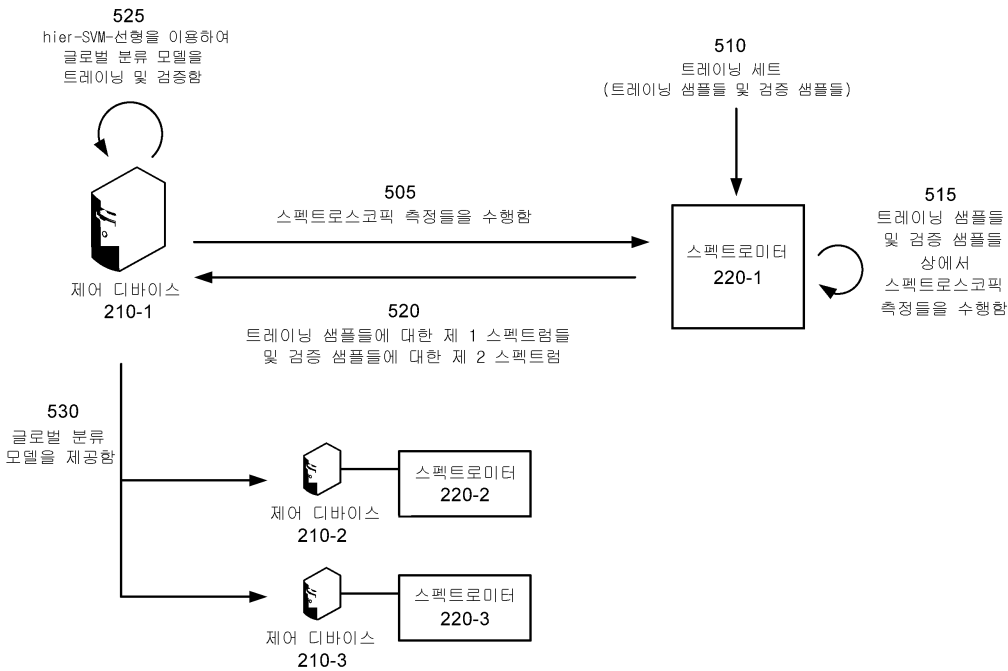
도면4

400



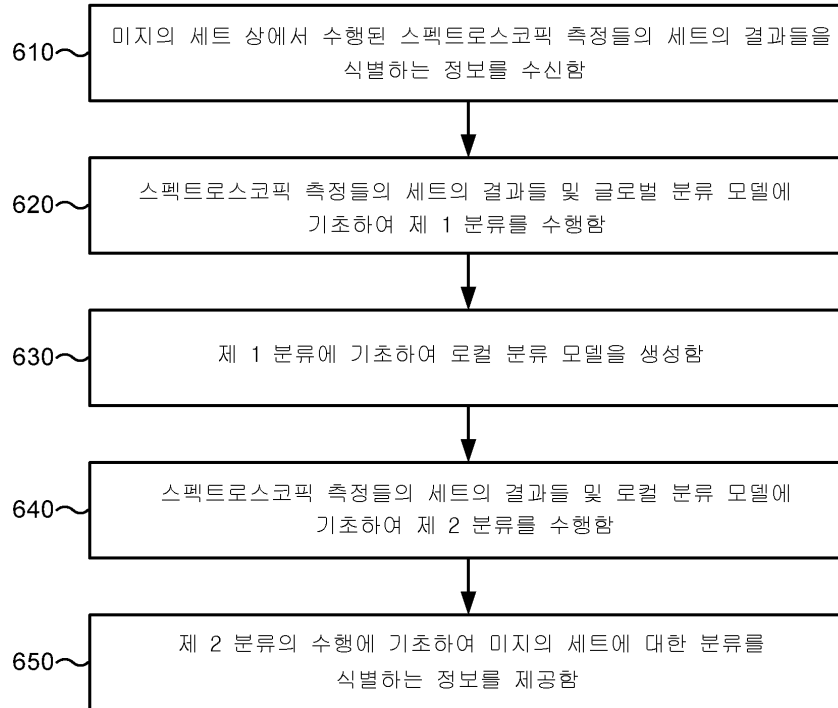
도면5

500



도면6

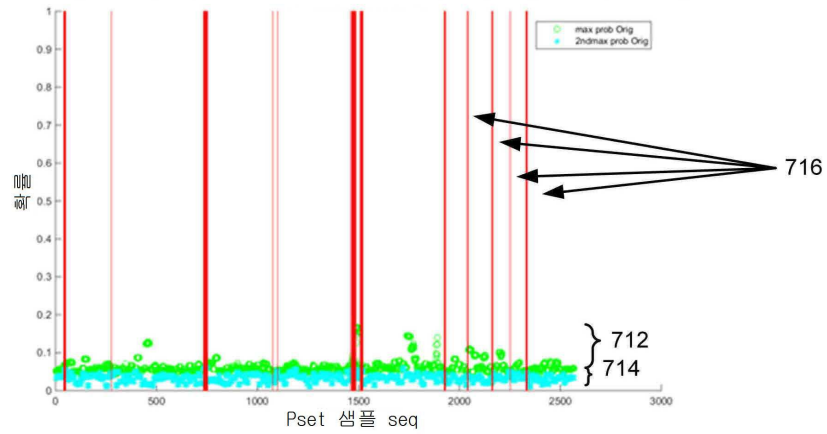
600 →



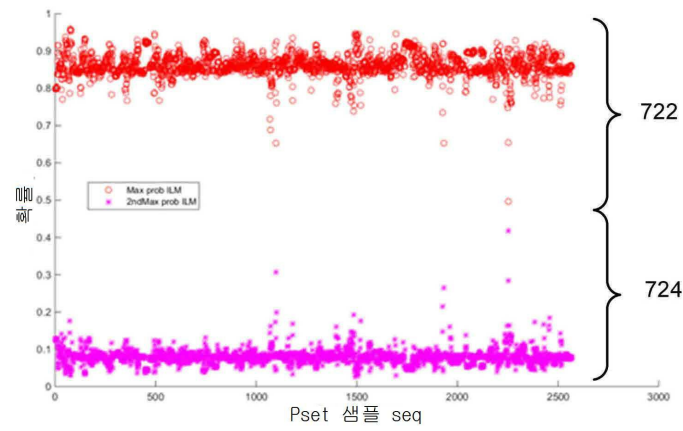
도면7a

700

710



720

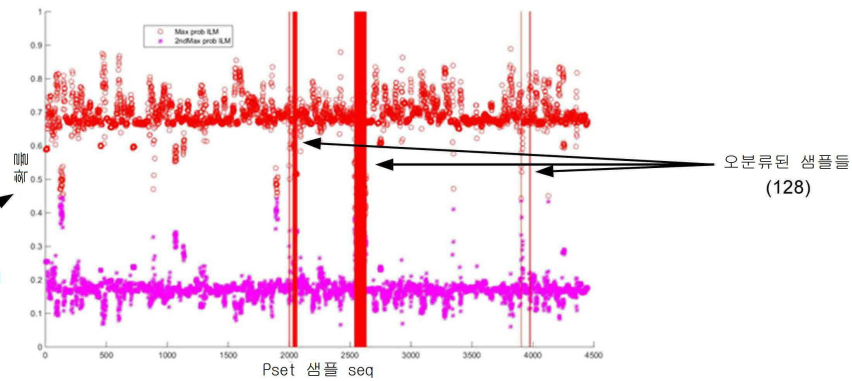


도면7b

700

730

(최대 클래스 또는 제 2 최대 클래스의 멤버십의 확률)



740

(최대 클래스 또는 제 2 최대 클래스에 관한 득표수)

