(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2023년01월31일
(11) 등록번호 10-2494073
(24) 등록일자 2023년01월26일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
G16C 20/30 (2019.01) *G01J 3/02* (2006.01)
G16C 60/00 (2019.01)
(52) CPC특허분류
G16C 20/30 (2019.02)
G01J 3/02 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2019-0078269
(22) 출원일자 2019년06월28일
심사청구일자 2022년01월20일
(65) 공개번호 10-2020-0002694
(43) 공개일자 2020년01월08일
(30) 우선권주장
62/692,248 2018년06월29일 미국(US)
16/448,914 2019년06월21일 미국(US)

(56) 선행기술조사문헌
E. Andries, Penalized eigendecompositions: motivations from domain adaptation for calibration transfer, J. Chemom. Vol.31, e2818(2017)*
X. Bian et al., Ensemble calibration for the spectral quantitative analysis of complex samples, J. Chemom. Vol.32, e2940(2017.10.17.)*
*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자
비아비 솔루션즈 아이엔씨.
미국 85286 애리조나주 챈들러 스위트 102 사우스 스퀘트럼 불러바드 1445
(72) 발명자
슝 창 멩
미국 캘리포니아주 94065 레드우드 시티 769 메디터래니언 레인
선 란
미국 캘리포니아주 95404 산타 로사 3772 셔브룩 드라이브
(74) 대리인
특허법인아주김장리

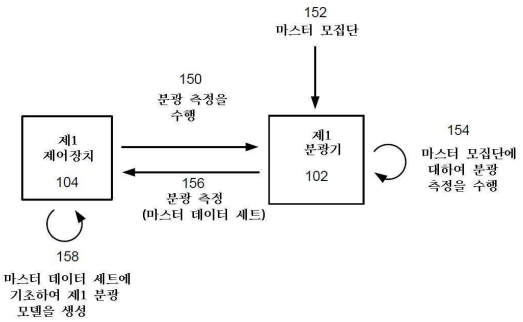
전체 청구항 수 : 총 17 항 심사관 : 권계민

(54) 발명의 명칭 **분광 모델의 교정에 기초하는 교차-유효성확인**

(57) 요 약

장치는, 제1 분광 모델에 대한 마스터 데이터 세트를 수신할 수 있고, 제1 분광 모델을 업데이트하도록 제1 분광 모델에 연관된 타깃 모집단에 대한 타깃 데이터 세트를 수신할 수 있고, 타깃 데이터 세트로부터의 제1 데이터 및 마스터 데이터 세트를 포함하는 트레이닝 데이터 세트를 생성할 수 있고, 타깃 데이터 세트로부터의 제2 데이터를 포함하고 마스터 데이터 세트를 포함하지 않는 유효성확인 데이터 세트를 생성할 수 있고, 교차-유효성확인을 사용하고 트레이닝 데이터 세트와 유효성확인 데이터 세트를 사용하여, 제1 분광 모델의 업데이트인 제2 분광 모델을 생성할 수 있고, 제2 분광 모델을 제공할 수 있다.

대 표 도 - 도1a



(52) CPC특허분류
G16C 60/00 (2019.02)

명 세 서

청구범위

청구항 1

장치로서,

하나 이상의 메모리; 및

상기 하나 이상의 메모리에 통신 가능하게 결합된 하나 이상의 프로세서를 포함하되,

상기 프로세서는,

제1 제어 장치에 의해 생성된 제1 분광 모델에 대한 마스터 데이터 세트를 수신하도록,

상기 장치는 상기 제1 제어 장치와는 상이한 제2 제어 장치이고,

상기 마스터 데이터 세트는 제1 분광기에 의해 수행된 제1 세트의 분광 측정(spectroscopic measurement)에 기초하며;

상기 제1 분광 모델을 업데이트하도록 상기 제1 분광 모델에 연관된 타깃 모집단에 대한 타깃 데이터 세트를 수신하도록,

상기 타깃 데이터 세트는 상기 제1 분광기와는 상이한 제2 분광기에 의해 수행된 제2 세트의 분광 측정에 기초하며,

상기 타깃 데이터 세트로부터의 제1 데이터 및 상기 마스터 데이터 세트를 포함하는 트레이닝 데이터 세트를 생성하도록;

상기 타깃 데이터 세트로부터의 제2 데이터를 포함하고 상기 마스터 데이터 세트를 포함하지 않는 유효성확인(validation) 데이터 세트를 생성하도록;

교차-유효성확인을 사용하고 상기 트레이닝 데이터 세트와 상기 유효성확인 데이터 세트를 사용하여, 상기 제1 분광 모델의 업데이트인 제2 분광 모델을 생성하도록;

상기 제2 분광기와 연관해서 상기 제2 분광 모델을 사용하는 정확도는 상기 제1 분광 모델을 사용하는 것에 비해서 증가되고; 그리고

상기 제2 분광 모델을 제공하도록 구성되고,

상기 트레이닝 데이터 세트는 복수의 트레이닝 데이터 세트이고, 상기 유효성확인 데이터 세트는 복수의 유효성확인 데이터 세트이고,

상기 하나 이상의 프로세서는, 상기 제2 분광 모델을 생성할 때,

상기 복수의 트레이닝 데이터 세트와 상기 복수의 유효성확인 데이터 세트에 기초하여 복수의 성능 메트릭(performance metric)을 생성하도록;

상기 복수의 성능 메트릭에 기초하여 총 성능 메트릭을 결정하도록;

상기 총 성능 메트릭에 기초하여 최적의 부분 최소 제곱(partial least square: PLS) 인자를 결정하도록; 그리고

상기 최적의 PLS 인자 및 병합된 데이터 세트에 기초하여 상기 제2 분광 모델을 결정하도록 구성되고,

상기 병합된 데이터 세트는 상기 마스터 데이터 세트와 상기 타깃 데이터 세트를 포함하는, 장치.

청구항 2

제1항에 있어서, 상기 하나 이상의 프로세서는,

분광 측정을 수신하도록;

상기 제2 분광 모델을 이용하여 분광 결정을 수행하도록; 그리고

상기 분광 결정을 식별하는 출력을 제공하도록

구성된, 장치.

청구항 3

삭제

청구항 4

제1항에 있어서, 상기 제1 분광 모델과 상기 제2 분광 모델은 정량화 모델인, 장치.

청구항 5

제1항에 있어서,

상기 제1 분광기는 마스터 분광기이고; 그리고

상기 제2 분광기는 타깃 분광기인, 장치.

청구항 6

방법으로서,

장치에 의해, 제1 제어 장치에 의해 생성된 제1 분광 모델에 연관된 타깃 모집단에 대한 타깃 데이터 세트를 수신하는 단계로서,

상기 장치는 상기 제1 제어 장치와는 상이한 제2 제어 장치인, 상기 타깃 데이터 세트를 수신하는 단계;

상기 장치에 의해, 상기 제1 분광 모델에 대한 마스터 데이터 세트를 취득하는 단계로서,

상기 마스터 데이터 세트는 제1 분광기에 의해 수행된 제1 세트의 측정에 기초하고,

상기 타깃 데이터 세트는 상기 제1 분광기와는 상이한 제2 분광기에 의해 수행된 제2 세트의 분광 측정에 기초하는, 상기 마스터 데이터 세트를 취득하는 단계;

상기 장치에 의해, 교차-유효성 확인을 활용하여 최적의 부분 최소 제곱(PLS) 인자를 결정하는 단계로서,

상기 최적의 PLS 인자는 복수의 트레이닝 데이터 세트 및 복수의 유효성확인 데이터 세트에 기초하여 결정되고, 각 트레이닝 데이터 세트는 상기 마스터 데이터 세트 모두 및 상기 타깃 데이터 세트의 각 부분을 포함하고, 각 유효성확인 데이터 세트는 상기 타깃 데이터 세트의 각 부분을 포함하고 상기 마스터 데이터 세트의 데이터를 포함하지 않는, 상기 PLS 인자를 결정하는 단계;

상기 장치에 의해, 상기 타깃 데이터 세트와 상기 마스터 데이터 세트를 병합하여 병합된 데이터 세트를 생성하는 단계;

상기 장치에 의해 그리고 상기 병합된 데이터 세트와 상기 최적의 PLS 인자를 사용하여, 제2 분광 모델을 생성하는 단계로서,

상기 제2 분광 모델은 상기 제1 분광 모델의 업데이트이고, 그리고

상기 제2 분광기와 연관해서 상기 제2 분광 모델을 사용하는 정확도는 상기 제1 분광 모델을 사용하는 것에 비해서 증가되는, 상기 제2 분광 모델을 생성하는 단계; 및

상기 장치에 의해, 상기 제2 분광 모델을 제공하여 상기 제1 분광 모델을 대체하는 단계를 포함하고,

상기 최적의 PLS 인자를 결정하는 단계는,

상기 복수의 트레이닝 데이터 세트의 각각 및 상기 복수의 유효성확인 데이터 세트의 각각에 대한 부분 최소 제곱(PLS) 성능 메트릭을 결정하는 단계;

상기 PLS 성능 메트릭에 기초하여 총 PLS 성능 메트릭을 결정하는 단계; 및

상기 총 PLS 성능 메트릭에 기초하여 PLS 인자를 최적화하여 상기 제2 분광 모델에 대한 상기 최적의 PLS 인자를 결정하는 단계

를 포함하는, 방법.

청구항 7

삭제

청구항 8

제6항에 있어서, 상기 총 PLS 성능 메트릭은 평균 제곱근 오차(root mean square error: RMSE) 값에 연관되고;

상기 PLS 인자를 최적화하는 단계는, 상기 PLS 인자를 최적화하여 상기 RMSE 값을 최소화하는 단계를 포함하는, 방법.

청구항 9

제6항에 있어서, 상기 복수의 유효성확인 데이터 세트는 상기 복수의 트레이닝 데이터 세트와는 다른 상기 타깃 데이터 세트의 데이터를 포함하는, 방법.

청구항 10

제6항에 있어서, 상기 총 PLS 성능 메트릭을 결정하는 단계는,

상기 PLS 성능 메트릭을 집산(aggregate)하는 단계를 포함하는, 방법.

청구항 11

제6항에 있어서, 상기 제2 세트의 측정은 상기 제1 세트의 측정 후에 수행되는, 방법.

청구항 12

제6항에 있어서, 상기 제2 분광 모델은 상기 제1 분광 모델의 교정 전달 모델인, 방법.

청구항 13

제6항에 있어서, 상기 제2 분광 모델을 제공하는 단계는,

상기 제2 분광기에 의한 후속 측정과 관련하여 사용하도록 상기 제2 분광 모델을 제공하는 단계를 포함하는, 방법.

청구항 14

명령어를 저장하는 비일시적 컴퓨터 판독가능 매체로서,

상기 명령어는 하나 이상의 명령어를 포함하되, 상기 하나 이상의 명령어는, 하나 이상의 프로세서에 의해 실행되는 경우, 상기 하나 이상의 프로세서가,

제1 제어 장치에 의해 생성된 제1 분광 모델에 대한 마스터 데이터 세트를 수신하게 하되,

상기 하나 이상의 프로세서는 상기 제1 제어 장치와는 상이한 제2 제어 장치에 있고; 그리고

상기 마스터 데이터 세트는 제1 분광기에 의해 수행된 제1 세트의 분광 측정에 기초하고;

상기 제1 분광 모델을 업데이트하도록 상기 제1 분광 모델에 연관된 타깃 모집단에 대한 타깃 데이터 세트를 수신하게 하되,

상기 타깃 데이터 세트는 상기 제1 분광기와는 상이한 제2 분광기에 의해 수행된 제2 세트의 분광 측정에 기초하고;

상기 마스터 데이터 세트 및 상기 타깃 데이터 세트에 기초하여 복수의 트레이닝 데이터 세트를 생성하

게 하고;

상기 타깃 데이터 세트에 기초하여 복수의 유효성확인 데이터 세트를 생성하게 하되,

상기 복수의 유효성확인 데이터 세트는 상기 마스터 데이터 세트의 데이터를 포함하지 않고;

상기 복수의 트레이닝 데이터 세트와 상기 복수의 유효성확인 데이터 세트를 기초로 교차-유효성확인을 활용하여 모델 설정을 결정하게 하고,

상기 모델 설정, 상기 타깃 데이터 세트 및 상기 마스터 데이터 세트에 기초하여 제2 분광 모델을 생성하게 하되,

상기 제2 분광기와 연관해서 상기 제2 분광 모델을 사용하는 정확도는 상기 제1 분광 모델을 사용하는 것에 비해서 증가되고; 그리고

상기 제2 분광 모델을 제공하게 하며,

상기 제2 분광 모델을 생성할 때,

상기 복수의 트레이닝 데이터 세트와 상기 복수의 유효성확인 데이터 세트에 기초하여 복수의 성능 메트릭(performance metric)을 생성하도록;

상기 복수의 성능 메트릭에 기초하여 총 성능 메트릭을 결정하도록;

상기 총 성능 메트릭에 기초하여 최적의 부분 최소 제곱(partial least square: PLS) 인자를 결정하도록; 그리고

상기 최적의 PLS 인자 및 병합된 데이터 세트에 기초하여 상기 제2 분광 모델을 결정하도록 구성되고,

상기 병합된 데이터 세트는 상기 마스터 데이터 세트와 상기 타깃 데이터 세트를 포함하는, 비일시적 컴퓨터 판독가능 매체.

청구항 15

제14항에 있어서, 상기 모델 설정은,

부분 최소 제곱(PLS) 모델의 PLS 인자,

주 성분 회귀(principal component regression: PCR) 모델의 구성 요소의 양, 또는

서포트 벡터 회귀(support vector regression: SVR) 모델의 SVR 파라미터

중 적어도 하나인, 비일시적 컴퓨터 판독가능 매체.

청구항 16

삭제

청구항 17

제14항에 있어서, 상기 하나 이상의 명령어는, 상기 하나 이상의 프로세서에 의해 실행되는 경우, 상기 하나 이상의 프로세서가,

측정을 수신하게 하고,

상기 측정에 기초하여 그리고 상기 제2 분광 모델을 사용하여 분광 결정을 수행하게 하고,

상기 분광 결정을 식별하는 출력을 제공하게 하는, 비일시적 컴퓨터 판독가능 매체.

청구항 18

제14항에 있어서, 상기 제1 분광 모델과 상기 제2 분광 모델은 정량화 모델인, 비일시적 컴퓨터 판독가능 매체.

청구항 19

제14항에 있어서, 상기 하나 이상의 프로세서로 하여금 상기 제2 분광 모델을 제공하게 하는 상기 하나 이상의 명령어는, 상기 하나 이상의 프로세서로 하여금,

상기 제2 분광기에 의한 후속 측정과 관련하여 사용하도록 상기 제2 분광 모델을 제공하게 하는, 비일시적 컴퓨터 판독가능 매체.

청구항 20

제14항에 있어서, 상기 하나 이상의 프로세서로 하여금 상기 타깃 데이터 세트를 수신하게 하는 상기 하나 이상의 명령어는, 상기 하나 이상의 프로세서로 하여금,

상기 제2 분광기로부터의 타깃 데이터 세트를 수신하게 하는, 비일시적 컴퓨터 판독가능 매체.

발명의 설명

기 술 분 야

[0001] 본 출원은, "UPDATING CALIBRATION MODELS BASED ON NEAR-INFRARED (NIR) SPECTRA"라는 명칭으로 2018년 6월 29일자로 출원된 미국 가특허 출원 제62/692,248호에 대한 35 U.S.C. § 119에 따른 우선권을 주장하며, 그 내용의 전문은 본 명세서에 참고로 원용된다.

배 경 기 술

[0002] 원료 식별은 의약품의 품질 관리에 이용될 수 있다. 예를 들어, 의료용 재료의 구성 성분들이 그 의료용 재료에 연관된 포장 라벨에 대응하는지를 결정하도록 의료용 재료에 대하여 원료 식별이 수행될 수 있다. 유사하게, 특정 샘플의 특정 화학 물질의 농도를 결정하도록 원료 정량화가 수행될 수 있다. 분광법은, 다른 화학계측 기법에 비해 준비 및 데이터 획득 시간이 단축된 비파괴 원료 식별 및/또는 정량화를 용이하게 할 수 있다.

발명의 내용

[0003] 일부 구현예에 따르면, 장치는, 하나 이상의 메모리; 및 하나 이상의 메모리에 통신 가능하게 결합된 하나 이상의 프로세서를 포함할 수 있고, 프로세서는, 제1 분광 모델에 대한 마스터 데이터 세트를 수신하고, 제1 분광 모델을 업데이트하도록 제1 분광 모델에 연관된 타깃 모집단에 대한 타깃 데이터 세트를 수신하고, 타깃 데이터 세트로부터의 제1 데이터 및 마스터 데이터 세트를 포함하는 트레이닝 데이터 세트를 생성하고, 타깃 데이터 세트로부터의 제2 데이터를 포함하고 마스터 데이터 세트를 포함하지 않는 유효성확인(validation) 데이터 세트를 생성하고, 교차-유효성확인을 사용하고 트레이닝 데이터 세트와 유효성확인 데이터 세트를 사용하여, 제1 분광 모델의 업데이트인 제2 분광 모델을 생성하고, 제2 분광 모델을 제공하도록 구성될 수 있다.

[0004] 일부 구현예에 따르면, 방법은, 장치에 의해, 제1 분광 모델에 연관된 타깃 모집단에 대한 타깃 데이터 세트를 수신하는 단계; 장치에 의해, 타깃 데이터 세트의 수신에 기초하여 제1 분광 모델에 대한 마스터 데이터 세트를 취득하는 단계; 장치에 의해, 교차-유효성 확인을 활용하여 최적의 부분 최소 제곱(partial least square: PLS) 인자를 결정하는 단계로서, 최적의 PLS 인자는 복수의 트레이닝 데이터 세트 및 복수의 유효성확인 데이터 세트에 기초하여 결정되고, 각 트레이닝 데이터 세트는 마스터 데이터 세트 모두 및 타깃 데이터 세트의 각 부분을 포함하고, 각 유효성확인 데이터 세트는 타깃 데이터 세트의 각 부분을 포함하고 마스터 데이터 세트의 데이터를 포함하지 않는, 단계; 장치에 의해, 타깃 데이터 세트와 마스터 데이터 세트를 병합하여 병합된 데이터 세트를 생성하는 단계; 장치에 의해 그리고 병합된 데이터 세트와 최적의 PLS 인자를 사용하여, 제2 분광 모델을 생성하는 단계로서, 제2 분광 모델은 제1 분광 모델의 업데이트인, 단계; 및 장치에 의해, 제2 분광 모델을 제공하여 제1 분광 모델을 대체하는 단계를 포함할 수 있다.

[0005] 일부 구현예에 따르면, 비일시적 컴퓨터 판독가능 매체는 하나 이상의 명령어를 저장할 수 있다. 하나 이상의 명령어는, 하나 이상의 프로세서에 의해 실행되는 경우, 하나 이상의 프로세서가, 제1 분광 모델에 대한 마스터 데이터 세트를 수신하게 하고, 제1 분광 모델을 업데이트하도록 제1 분광 모델에 연관된 타깃 모집단에 대한 타깃 데이터 세트를 수신하게 하고, 마스터 데이터 세트 및 타깃 데이터 세트에 기초하여 복수의 트레이닝 데이터 세트를 생성하게 하고, 타깃 데이터 세트에 기초하여 복수의 유효성확인 데이터 세트를 생성하게 하고, 복수의 트레이닝 데이터 세트와 복수의 유효성확인 데이터 세트를 기초로 교차-유효성확인을 활용하여 모델 설정을 결정하게 하고, 모델 설정, 타깃 데이터 세트 및 마스터 데이터 세트에 기초하여 제2 분광 모델을 생성하게 하고,

제2 분광 모델을 제공하게 할 수 있고, 복수의 유효성확인 데이터 세트는 마스터 데이터 세트의 데이터를 포함하지 않는다.

도면의 간단한 설명

[0006] 도 1a 내지 도 1e는 본 명세서에서 설명하는 예시적인 구현예의 개략도이다.

도 2는 본 명세서에서 설명하는 시스템 및/또는 방법이 구현될 수 있는 예시적인 환경의 도면이다.

도 3은 도 2의 하나 이상의 장치의 예시적인 구성요소들의 도면이다.

도 4 내지 도 6은 분광 모델의 교차-유효성확인 기반 교정을 위한 예시적인 프로세스의 흐름도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0007] 이하의 예시적인 구현예들의 상세한 설명은 첨부 도면을 참조한다. 상이한 도면에서의 동일한 참조번호는 동일하거나 유사한 요소를 식별할 수 있다. 다음에 따르는 설명은 분광기를 일례로서 사용하지만, 본 명세서에서 설명하는 교정 원리, 절차 및 방법은, 다른 광학 센서 및 분광 센서를 포함하되, 이들로 한정되지 않는 임의의 센서와 함께 사용될 수 있다.

[0008] 원료 식별(raw material identification: RMID)은, 식별, 검증 및/또는 기타 등을 위해 특정 샘플의 구성요소(예를 들어, 성분)를 식별하는 데 이용되는 기술이다. 예를 들어, RMID는 제약 재료의 해당 성분이 라벨 상에 식별된 성분들의 세트에 해당함을 검증하는 데 이용될 수 있다. 유사하게, 원료 정량화는, 특정 샘플 내의 특정 물질의 농도 결정과 같이 특정 샘플에 대한 정량화 분석을 수행하는 데 이용되는 기술이다. 분광기는, 샘플의 구성요소, 샘플의 구성요소의 농도 및/또는 기타를 결정하기 위해 샘플(예를 들어, 제약 재료)에 대한 분광을 수행하는 데 이용될 수 있다. 분광기는, 샘플의 측정 세트를 결정할 수 있으며, 분광 결정을 위한 측정 세트를 제공할 수 있다. 분광 분류 기술(예를 들어, 분류기)은 샘플의 측정 세트에 기초하여 샘플의 구성요소의 결정을 용이하게 할 수 있다.

[0009] 분광 분류 또는 정량화를 수행하기 위해, 분광 모델을 사용하여 미지 샘플의 하나 이상의 측정을 평가할 수 있다. 예를 들어, 제어 장치는, 미지 샘플의 하나 이상의 측정을 분광 모델의 특정 클래스, 분광 모델에 연관된 특정 레벨 및/또는 양 등에 대응하는 것으로서 분류하려고 시도할 수 있다. 그러나, 시간이 지남에 따라, 원료가 변할 수 있고, 이에 따라 분광 모델에서 부정확성을 초래할 수 있다. 예를 들어, 농산물에 적용되는 분광 분류의 경우, 상이한 연도에 연관된 상이한 수확은 상이한 스펙트럼을 가질 수 있다. 그 결과, 마스터 데이터 세트(예를 들어, 초기 시간에서의 초기 모집단의 분광 측정의 초기 세트)로 트레이닝된 분광 모델은, 타깃 데이터 세트(예를 들어, 후속 시간에서의 후속 모집단의 분광 측정의 후속 세트)에 적용되는 경우 부정확할 수 있다.

[0010] 다른 경우에는, 각 분광기에 대한 마스터 데이터 세트를 사용하여 각 분광기에 대한 분광 모델을 트레이닝하는 것이 비현실적일 수 있다. 그 결과, 제어 장치는, 마스터 데이터 세트로 단일 분광 모델을 트레이닝할 수 있고, 많은 상이한 분광기와 함께 사용하도록 단일 분광 모델을 배치할 수 있다. 그러나, 상이한 분광기는 상이한 교정에 연관될 수 있고/있거나 상이한 환경 조건에서 동작할 수 있다. 그 결과, 제1 분광기에 의해 수행된 분광 측정의 마스터 데이터 세트를 사용하여 트레이닝된 분광 모델은, 제2 분광기에 의해 수행된 분광 측정의 타깃 데이터 세트에 적용될 때 부정확할 수 있다.

[0011] 본 명세서에서 설명하는 일부 구현예들은 교차-유효성확인 기술을 사용하여 분광 모델에 대한 교정 업데이트 및 교정 전달을 가능하게 한다. 예를 들어, 타깃 데이터 세트로부터의 데이터를 마스터 데이터 세트로부터의 데이터와 병합하여 새로운 분광 모델을 생성할 수 있다. 이 경우, 마스터 데이터 세트로부터의 데이터는 분광 모델을 트레이닝하기 위한 트레이닝 세트에 사용되고, 타깃 데이터 세트로부터의 데이터는 트레이닝 세트 및 분광 모델을 유효성확인하기 위한 유효성확인 세트 모두에 사용된다. 이러한 식으로, 분광 모델의 정확도는 모델 생성 및/또는 모델 업데이트를 위한 다른 기술들에 비해 개선된다. 또한, 전달되는 분광 모델의 정확도 개선에 기초하여, 각 분광기에 대하여 마스터 데이터 세트를 취득할 필요성이 감소되어, 분광기 배치에 연관된 비용이 감소된다.

[0012] 도 1a 내지 도 1e는 본 명세서에서 설명하는 예시적인 구현예(100)의 도면이다. 1도 1a에 도시된 바와 같이, 예시적인 구현예(100)는 제1 분광기(102)와 제1 제어 장치(104)를 포함한다.

[0013] 도 1a 및 참조번호 150으로 더 도시된 바와 같이, 제1 제어 장치(104)는, 제1 분광기(102)가 마스터 모집단(152)에 대한 분광 측정 세트를 수행하게 하는 명령어를 제1 분광기(102)에 전송할 수 있다. 예를 들어, 제1 제

어 장치(104)는, 제1 분광기(102)가, 분류 모델을 사용하여 분류될 각 클래스에 대해, 양자화 모델을 사용하여 정량화될 각 정량화에 대해, 그리고/또는 기타에 대해, 샘플에 대한 측정을 수행하게 할 수 있다. 분류 모델의 클래스는, (제약 관점에서 볼 때) 유당 물질, 과당 물질, 아세트아미노펜 물질, 이부프로펜 물질, 아스피린 물질 및/또는 기타 등의 하나 이상의 특성을 공통으로 공유하는 유사한 물질들의 그룹화를 가리킬 수 있다. 분류 모델을 트레이닝하고 분류 모델을 사용하여 원료 식별을 수행하는 데 사용되는 물질을 관심 물질이라고 할 수 있다.

[0014] 도 1a 및 참조번호 154 및 156으로 추가로 도시된 바와 같이, 제1 분광기(102)는, 분광 측정 세트를 수행할 수 있고, 처리를 위해 제1 제어 장치(104)에 분광 측정 세트를 제공할 수 있다. 예를 들어, 제1 분광기(102)는, 마스터 모집단(152)의 각 샘플에 대한 스펙트럼을 결정하여, 제1 제어 장치(104)가 미지 샘플을 정량화 모델을 위한 관심 물질들 중 하나로서 또는 정량화 모델과 관련하여 특정 양을 갖는 것으로서 분류하기 위한 클래스들의 세트를 생성하게 할 수 있다.

[0015] 도 1a 및 참조번호 158로 추가로 도시된 바와 같이, 제1 제어 장치(104)는 마스터 데이터 세트에 기초하여 제1 분광 모델을 생성할 수 있다. 예를 들어, 제1 제어 장치(104)는, 특정 결정 기술을 사용하고 분광 측정 세트에 기초하여, 제1 분광 모델을 생성할 수 있다. 일부 구현예에서, 제1 제어 장치(104)는, 서포트 벡터 기계(support vector machine: SVM) 기술(예를 들어, 정보 결정을 위한 기계 학습 기술)을 사용하여 정량화 모델을 생성할 수 있다. 부가적으로 또는 대안적으로, 제1 제어 장치(104)는 다른 유형의 정량화 기술을 사용하여 정량화 모델을 생성할 수 있다.

[0016] 정량화 모델은, 특정 스펙트럼을 관심 물질의 양의 특정 클래스에 지정하는 것에 연관된 정보를 포함할 수 있다. 일부 구현예에서, 정량화 모델은 양의 특정 클래스에 연관된 관심 물질의 유형을 식별하는 것에 연관된 정보를 포함할 수 있다. 이러한 식으로, 제1 제어 장치(104)는, 미지 샘플의 스펙트럼을 정량화 모델의 양의 특정 클래스에 지정하는 것에 기초하여 미지 샘플의 물질의 양을 식별하는 정보를 분광 출력으로서 제공할 수 있다.

[0017] 도 1b 및 참조번호 160으로 도시된 바와 같이, 제2 제어 장치(104)는 제1 분광 모델에 연관된 정보를 수신할 수 있다. 예를 들어, 제2 제어 장치(104)는 제1 분광 모델, 마스터 데이터 세트 및/또는 기타를 수신할 수 있다. 일부 구현예에서, 제2 제어 장치(104)는 제1 제어 장치(104)와는 다른 분광기에 연관될 수 있다. 예를 들어, 교정 전달 경우에 있어서, 제2 제어 장치(104)는, 제2 분광기(102)(예를 들어, 타깃 분광기)와 관련하여 사용될 수 있고, 제1 분광기 모델에 연관된 정보를 수신하여 제1 분광기(102)(예를 들어, 마스터 분광기)로부터 제2 분광기(102)로의 교정 전달을 가능하게 할 수 있다. 이 경우, 제2 제어 장치(104)와 제2 분광기(102)는, 본 명세서에서 더욱 상세히 설명하는 바와 같이, 타깃 모집단의 측정을 수행하고 제2 분광 모델을 생성할 수 있다. 대안적으로, 교정 업데이트 경우에 있어서, 제1 분광 모델을 제2 제어 장치(104)에 전달하기보다는, 본 명세서에서 더욱 상세히 설명하는 바와 같이, 제1 제어 장치(104)와 제1 분광기(102)가, 타깃 모집단의 측정을 수행하고 제2 분광 모델을 생성할 수 있다.

[0018] 도 1b 및 참조번호 162로 도시된 바와 같이, 제2 제어 장치(104)는, 제2 분광기(102)가 타깃 모집단(164)의 분광 측정 세트를 수행하게 하는 명령어를 제2 분광기(102)에 송신할 수 있다. 예를 들어, 제2 제어 장치(104)는 제2 분광기(102)가 제1 분광 모델을 수신하는 것에 기초하여 타깃 모집단(164)의 분광 측정을 수행하게 할 수 있다. 일부 구현예에서, 제2 제어 장치(104)는, 제1 분광 모델을 업데이트 또는 교정하도록 결정할 수 있고, 분광 측정 세트를 수행하도록 제2 분광기(102)를 트리거할 수 있다. 이 경우, 제2 제어 장치(104)는, 제2 분광 모델의 생성을 가능하게 하기 위해 마스터 데이터 세트를 식별하는 정보를 취득하도록 제1 제어 장치(104)와 통신할 수 있다.

[0019] 일부 구현예에서, 타깃 모집단(164)은 마스터 모집단(152)에 대응할 수 있다. 예를 들어, 타깃 모집단(164)은 마스터 모집단(152)에 포함된 것과 동일한 클래스의 추가 샘플일 수 있다. 이 경우에, 타깃 모집단(164)은, 샘플이 수집되었거나 측정된 시간, 위치, 환경 조건 및/또는 기타와 관련하여 마스터 모집단(152)과 다를 수 있다. 부가적으로 또는 대안적으로, 타깃 모집단(164)은, 상이한 분광기를 사용하여 측정되는 (예를 들어, 마스터 모집단(152)에 대해서와 같이 제1 분광기(102)보다는 제2 분광기(102)에 의해 측정되는) 것에 기초하여 마스터 모집단(152)과 다를 수 있다.

[0020] 도 1b 및 참조번호 166 및 168로 도시된 바와 같이, 제2 분광기(102)는, 분광 측정 세트를 수행할 수 있고, 제2 제어 장치(104)에 분광 측정 세트를 식별하는 정보를 제공할 수 있다. 예를 들어, 제2 분광기(102)는, 타깃 모집단(164)의 분광 측정을 수행할 수 있고, 처리를 위해 제2 제어 장치(104)에 (예를 들어, 타깃 데이터 세트로

서) 분광 측정을 식별하는 정보를 제공할 수 있다.

[0021] 도 1c 및 참조번호 170으로 도시한 바와 같이, 제2 제어 장치(104)는 총 성능 메트릭(total performance metric)을 결정할 수 있다. 예를 들어, 제2 제어 장치(104)는, 데이터를 다수의 폴드(fold)로 분할하고, 다수의 폴드에 대한 다수의 성능 메트릭을 결정하고, 다수의 성능 메트릭을 집산하여 평균 제곱근 오차(root mean square error: RMSE) 값을 결정하고, (최적의 PLS 인자라고 칭할 수 있는) 부분 최소 제곱(PLS) 인자를 최적화하여 RMSE 값을 최소화하는 것에 기초하여 총 성능 메트릭을 결정할 수 있다. 폴드는, 데이터 예측시 후보 모델의 정확성을 평가하기 위한 유효성확인 세트 및 후보 모델을 생성하기 위한 트레이닝 세트를 포함하는 교차-유효성확인을 위한 데이터의 서브그룹을 가리킬 수 있다. 다른 일례로, 제2 제어 장치(104)는, 주 성분 회귀(principal component regression: PCR) 인자, 서포트 벡터 회귀(support vector regression: SVR) 인자 및/또는 기타 등의 다른 유형의 최적화된 모델 설정을 결정할 수 있다. 일부 구현예에서, 제2 제어 장치(104)는 전처리 최적화를 수행할 수 있다. 예를 들어, 제2 제어 장치(104)는 모델 설정의 일부로서 최적화된 전처리 파라미터를 결정할 수 있다.

[0022] 일부 구현예에서, 제2 제어 장치(104)는 각 폴드에 대한 트레이닝 세트 또는 유효성확인 세트에 데이터를 지정할 수 있다. 예를 들어, 제2 제어 장치(104)는, N개의 폴드에 대한 다수의 트레이닝 세트(1 내지 N) 및 N개의 폴드에 대한 다수의 대응하는 유효성확인 세트(1 내지 N)를 결정할 수 있다. 일부 구현예에서, 트레이닝 세트는 마스터 데이터 세트와 타깃 데이터 세트를 병합함으로써 생성되는 병합된 데이터를 포함할 수 있다. 예를 들어, 트레이닝 세트(예를 들어, 트레이닝 세트 1)는 마스터 데이터 세트(예를 들어, MDS)로부터의 데이터 모두 및 타깃 데이터 세트(예를 들어, MDS)로부터의 데이터의 일부를 포함할 수 있다. 이 경우, 대응하는 유효성확인 세트는, 마스터 데이터 세트로부터의 데이터가 아닌 타깃 데이터 세트(예를 들어, $TDS_{1,TS}$)로부터의 데이터의 대응 부분을 포함할 수 있다. 대응하는 유효성확인 세트는, 트레이닝 세트에 포함된 것과 같이 동일한 물리적 샘플의 복제 스캔으로부터 파생된 데이터를 생략할 수 있다.

[0023] 데이터를 다수의 폴드에 지정하는 것에 기초하여, 제2 제어 장치(104)는 각 폴드에 대한 성능 메트릭을 결정할 수 있다. 예를 들어, 제2 제어 장치(104)는 각 폴드에 대한 성능 메트릭을 단념하고 집산하여 총 성능 메트릭을 결정할 수 있다. 예를 들어, 제2 제어 장치(104)는, 각 폴드에 대한 PLS 인자를 결정할 수 있고, 폴드마다 각 PLS 인자에 대한 RMSE 값을 결정할 수 있다. 폴드마다 각 PLS 인자에 대한 RMSE 값을 결정하는 것에 기초하여, 제2 제어 장치(104)는 총 RMSE 값을 결정할 수 있다. 예를 들어, 제2 제어 장치(104)는 RMSE 값을 모든 폴드의 모든 PLS 인자의 함수로서 결정할 수 있다. 이 경우, 총 RMSE 값을 결정하는 것에 기초하여, 제2 제어 장치(104)는 최저 RMSE 값을 갖는 PLS 인자일 수 있는 최적의 PLS 인자를 결정할 수 있다.

[0024] 이 경우, 교차 유효성확인 동안 N-폴드 트레이닝 세트에 마스터 데이터 세트와 타깃 데이터 세트를 포함하는 것에 기초하지만, 대응하는 유효성확인 세트에 타깃 데이터 세트만을 포함함으로써, 제2 분광 모델의 정확도가 다른 기술들에 비해 증가한다. 예를 들어, 이러한 기술에 의하면, 업데이트 없이 제1 분광 모델을 사용하는 경우, PLS 성능 메트릭을 결정하도록 타깃 데이터 세트만을 사용하는 경우, 타깃 데이터 세트의 데이터 모두와 마스터 데이터 세트의 데이터 모두를 병합하여 병합된 데이터 세트를 생성하고 트레이닝 세트와 유효성확인 세트 모두 내에 병합된 데이터 세트를 분할하는 경우 및/또는 기타 경우에 비해, 정확도를 개선할 수 있다.

[0025] 도 1d 및 참조번호 172로 도시된 바와 같이, 제2 제어 장치(104)는 제2 분광 모델을 생성할 수 있다. 예를 들어, 제2 제어 장치(104)는 마스터 데이터 세트(MDS), 타깃 데이터 세트(TDS) 및 최적의 PLS 인자를 사용하여 제2 분광 모델을 생성할 수 있다. 이러한 식으로, 제2 제어 장치(104)는 교정된 분광 모델, 업데이트된 분광 모델, 전달된 분광 모델 및/또는 기타를 생성할 수 있다.

[0026] 일부 구현예에서, 제2 제어 장치(104)는, 마스터 데이터 세트와 타깃 데이터 세트를 병합하여 병합된 데이터 세트(예를 들어, 제2 분광 모델을 트레이닝하기 위한 최종 트레이닝 세트)를 생성할 수 있다. 예를 들어, 제2 제어 장치(104)는 마스터 데이터 세트와 타깃 데이터 세트를 집산하여 병합된 데이터 세트를 생성할 수 있다. 병합된 데이터 세트를 생성하는 것에 기초하여, 제2 제어 장치(104)는 병합된 데이터 세트 및 (예를 들어, 최저 RMSE 값을 갖는) 최적의 PLS 인자를 사용하여 제2 분광 모델을 생성할 수 있다. 예를 들어, 제2 제어 장치(104)는, 정량화 모델 생성 기술을 사용하여 병합된 데이터 세트(예를 들어, 제2 분광 모델에 대한 트레이닝 세트일 수 있음) 및 최적의 PLS 인자와 관련하여 제2 분광 모델을 생성한다. 이러한 식으로, 병합된 데이터 세트를 사용하지 않고 최적의 PLS 인자를 결정한 다음 최적의 PLS 인자를 병합된 데이터 세트와 결합함으로써, 제2 제어 장치(104)가 다른 기술들보다 정확한 분광 모델을 달성한다.

[0027] 일부 구현예에서, 제2 제어 장치(104)는 제2 분광 모델을 생성하는 것에 기초하여 제2 분광 모델을 제공할 수

있다. 예를 들어, 제2 제어 장치(104)는, 하나 이상의 다른 분광기 및/또는 기타 등에 배치하도록, 데이터 구조를 통한 저장을 위해 제2 분광 모델을 제공할 수 있다. 부가적으로 또는 대안적으로, 제2 제어 장치(104)는 제2 분광 모델을 생성하는 것에 기초하여 제2 분광 모델과 관련된 출력을 제공할 수 있다. 예를 들어, 제2 제어 장치(104)는, 본 명세서에서 더욱 상세히 설명하는 바와 같이, 제2 분광 모델의 사용에 기초하여 미지 샘플을 정량화하는 정보를 제공하여 미지 샘플을 분석할 수 있다.

[0028] 도 1e 및 참조번호 174로 도시된 바와 같이, 제2 제어 장치(104)는, 제2 분광기(102)가 미지 샘플(176)에 대한 분광 측정 세트를 수행하게 하는 명령어를 제2 분광기(102)에 송신할 수 있다. 예를 들어, 제2 제어 장치(104)는, 제2 분광기(102)가 제2 분광 모델을 생성한 후에 미지 샘플(176)에 대한 분광 측정을 수행하게 할 수 있다.

[0029] 도 1e 및 참조번호 178 및 180으로 추가로 도시된 바와 같이, 제2 분광기(102)는, 분광 측정 세트를 수행할 수 있고, 제2 제어 장치(104)에 분광 측정 세트를 식별하는 정보를 제공할 수 있다. 예를 들어, 제2 분광기(102)는, 미지 샘플(176)의 스펙트럼을 결정할 수 있고, 분류 및/또는 정량화를 위해 스펙트럼을 식별하는 정보를 제2 제어 장치(104)에 제공할 수 있다.

[0030] 도 1e 및 참조번호 182로 추가로 도시된 바와 같이, 제2 제어 장치(104)는 제2 분광 모델을 사용하여 분광 측정 세트의 분광 분석을 수행할 수 있다. 예를 들어, 제2 제어 장치(104)는 제2 분광 모델을 사용하여 미지 샘플(176)의 분류 및/또는 미지 샘플(176)의 정량화를 결정할 수 있다. 이 경우, 제2 제어 장치(104)는 분류 및/또는 정량화를 식별하는 출력을 제공할 수 있다. 이러한 식으로, 제2 제어 장치(104)는 제2 분광 모델을 생성하는 것에 기초하여 제2 분광 모델을 사용한다.

[0031] 전술한 바와 같이, 도 1a 내지 도 1e는 단지 하나 이상의 예로서 제공된 것이다. 다른 예들은 도 1a 내지 도 1e와 관련하여 설명된 것과 다를 수 있다.

[0032] 도 2는 본 명세서에서 설명하는 시스템 및/또는 방법이 구현될 수 있는 예시적인 환경(200)의 도면이다. 도 2에 도시된 바와 같이, 환경(200)은 제어 장치(210), 분광기(220), 네트워크(230) 및/또는 기타를 포함할 수 있다. 환경(200)의 장치들은 유선 접속, 무선 접속, 또는 유선 접속과 무선 접속의 조합을 통해 상호 접속될 수 있다.

[0033] 제어 장치(210)는 분광 분류에 연관된 정보를 저장, 처리 및/또는 라우팅할 수 있는 하나 이상의 장치를 포함한다. 예를 들어, 제어 장치(210)는, 트레이닝 세트의 측정 세트에 기초하여 분광 모델(예를 들어, 분류 모델 또는 정량화 모델)을 생성하고 유효성확인 세트의 측정 세트에 기초하여 분광 모델을 유효성확인하여 미지 샘플의 측정 세트에 기초하는 분광 분석을 수행하는 서버, 컴퓨터, 착용가능 장치, 클라우드 연산 장치 및/또는 기타를 포함할 수 있다. 일부 구현예에서, 제어 장치(210)는 특정 분광기(220)에 연관될 수 있다. 일부 구현예에서, 제어 장치(210)는 다수의 분광기(220)에 연관될 수 있다. 일부 구현예에서, 제어 장치(210)는, 분광기(220)와 같이 환경(200) 내의 다른 장치로부터 정보를 수신할 수 있고/있거나 이러한 다른 장치에 정보를 송신할 수 있다.

[0034] 분광기(220)는 샘플에 대한 분광 측정을 수행할 수 있는 하나 이상의 장치를 포함한다. 예를 들어, 분광기(220)는, 분광(예를 들어, 근적외선(NIR) 분광, 중간 적외선 분광(mid-IR), 라만 분광 등과 같은 진동 분광)을 수행하는 분광 장치를 포함할 수 있다. 일부 구현예에서, 분광기(220)는 착용가능 분광기 및/또는 기타 등의 착용가능 장치에 통합될 수 있다. 일부 구현예에서, 분광기(220)는 제어 장치(210)와 같은 환경(200) 내의 다른 장치로부터 정보를 수신할 수 있고/있거나 이러한 다른 장치에 정보를 송신할 수 있다.

[0035] 네트워크(230)는 하나 이상의 유선 네트워크 및/또는 무선 네트워크를 포함한다. 예를 들어, 네트워크(230)는, 셀룰러 네트워크(예를 들어, 롱텀 에볼루션(LTE) 네트워크, 3G 네트워크, 코드 분할 다중 접속(CDMA) 네트워크 등), 공중 육상 이동 네트워크(PLMN), 근거리 통신망(LAN), 광역 통신망(WAN), 대도시 통신망(MAN), 전화망(예를 들어, 공중 교환 전화망(PSTN)), 개인 네트워크, 애드혹 네트워크, 인트라넷, 인터넷, 광섬유 기반 네트워크, 클라우드 연산 네트워크 및/또는 기타, 및/또는 이러한 유형 또는 다른 유형의 네트워크의 조합을 포함할 수 있다.

[0036] 도 2에 도시된 장치와 네트워크의 수와 배열은 하나 이상의 예로서 제공된 것이다. 실제로는, 도 2에 도시된 것 이외의 추가 장치 및/또는 네트워크, 더 적은 장치 및/또는 네트워크, 상이한 장치 및/또는 네트워크, 또는 상이하게 배열된 장치 및/또는 네트워크가 있을 수 있다. 또한, 도 2에 도시된 두 개 이상의 장치가 단일 장치 내에 구현될 수 있고, 도 2에 도시된 단일 장치가 다수의 분산 장치로서 구현될 수 있다. 부가적으로 또는 대안적으로, 환경(200)의 장치들의 세트(예를 들어, 하나 이상의 장치)는, 환경(200)의 장치들의 다른 세트에 의해 수행되는 것으로서 기술된 하나 이상의 기능을 수행할 수 있다.

[0037] 도 3은 장치(300)의 예시적인 구성요소들의 도면이다. 장치(300)는 제어 장치(210) 및/또는 분광기(220)에 대응

할 수 있다. 일부 구현예에서, 제어 장치(210) 및/또는 분광기(220)는 하나 이상의 장치(300) 및/또는 장치(300)의 하나 이상의 구성요소를 포함할 수 있다. 도 3에 도시된 바와 같이, 장치(300)는, 버스(310), 프로세서(320), 메모리(330), 저장 구성요소(340), 입력 구성요소(350), 출력 구성요소(360) 및 통신 인터페이스(370)를 포함할 수 있다.

[0038] 버스(310)는 장치(300)의 다수의 구성요소 간의 통신을 허용하는 구성요소를 포함한다. 프로세서(320)는 하드웨어, 펌웨어, 및/또는 하드웨어와 소프트웨어의 조합으로 구현된다. 프로세서(320)는, 중앙 처리 유닛(CPU), 그래픽 처리 유닛(GPU), 가속 처리 유닛(APU), 마이크로컨트롤러, 디지털 신호 프로세서(DSP), 필드-프로그래머블 게이트 어레이(FPGA), 주문형 집적 회로(ASIC), 또는 다른 유형의 처리 구성요소일 수 있다. 일부 구현예에서, 프로세서(320)는 기능을 수행하도록 프로그래밍될 수 있는 하나 이상의 프로세서를 포함한다. 메모리(330)는, 랜덤 액세스 메모리(RAM), 판독 전용 메모리(ROM), 및/또는 프로세서(320)에 의한 사용을 위해 정보 및/또는 명령어를 저장하는 다른 유형의 동적 또는 정적 저장 장치(예를 들어, 플래시 메모리, 자기 메모리 및/또는 광학 메모리)를 포함한다.

[0039] 저장 구성요소(340)는 장치(300)의 동작 및 사용과 관련된 정보 및/또는 소프트웨어를 저장한다. 예를 들어, 저장 구성요소(340)는, 하드 디스크(예를 들어, 자기 디스크, 광학 디스크 및/또는 광자기 디스크), 솔리드 스테이트 드라이브(SSD), 컴팩트 디스크(CD), 디지털 버서타일 디스크(DVD), 플로피 디스크, 카트리지, 자기 테이프, 및/또는 대응하는 드라이브를 갖는 다른 유형의 비일시적 컴퓨터 판독가능 매체를 포함할 수 있다.

[0040] 입력 구성요소(350)는, 장치(300)가 사용자 입력(예를 들어, 터치 스크린 디스플레이, 키보드, 키패드, 마우스, 버튼, 스위치 및/또는 마이크로폰)을 통해 정보를 수신할 수 있게 하는 구성요소를 포함한다. 부가적으로 또는 대안적으로, 입력 구성요소(350)는, 위치를 결정하기 위한 구성요소(예를 들어, 글로벌 포지셔닝 시스템(GPS) 구성요소) 및/또는 센서(예를 들어, 가속도계, 자이로스코프, 액추에이터, 다른 유형의 위치 또는 환경 센서 및/또는 기타)를 포함할 수 있다. 출력 구성요소(360)는, (디스플레이, 스피커, 햅틱 피드백 구성요소, 오디오 또는 비주얼 표시자 및/또는 기타를 통해) 장치(300)로부터 출력 정보를 제공하는 구성요소를 포함한다.

[0041] 통신 인터페이스(370)는, 장치(300)가 예컨대 유선 접속, 무선 접속, 또는 유선 접속과 무선 접속의 조합을 통해 다른 장치들과 통신할 수 있게 하는 송수신기형 구성요소(예를 들어, 송수신기, 별도의 송신기 및/또는 기타)를 포함한다. 통신 인터페이스(370)는, 장치(300)가 다른 장치로부터 정보를 수신할 수 있게 하고 및/또는 다른 장치에 정보를 제공할 수 있게 한다. 예를 들어, 통신 인터페이스(370)는, 이더넷 인터페이스, 광 인터페이스, 동축 인터페이스, 적외선 인터페이스, 무선 주파수(RF) 인터페이스, 범용 직렬 버스(USB) 인터페이스, 와이파이(Wi-Fi) 인터페이스, 셀룰러 네트워크 인터페이스 및/또는 기타를 포함할 수 있다.

[0042] 장치(300)는 본 명세서에서 설명하는 하나 이상의 프로세스를 수행할 수 있다. 장치(300)는, 메모리(330) 및/또는 저장 구성요소(340)와 같은 비일시적 컴퓨터 판독가능 매체에 의해 저장된 소프트웨어 명령어를 실행하는 프로세서(320)에 기초하여 이들 프로세스를 수행할 수 있다. 본 명세서에서 사용되는 바와 같이, "컴퓨터 판독가능 매체"라는 용어는 비일시적 메모리 장치를 가리킨다. 메모리 장치는, 단일 물리적 저장 장치 내의 메모리 공간 또는 다수의 물리적 저장 장치에 걸쳐 분산된 메모리 공간을 포함한다.

[0043] 소프트웨어 명령어는, 통신 인터페이스(370)를 통해 다른 컴퓨터 판독가능 매체 또는 다른 장치로부터 메모리(330) 및/또는 저장 구성요소(340)로 판독될 수 있다. 메모리(330) 및/또는 저장 구성요소(340)에 저장된 소프트웨어 명령어는, 실행될 때, 프로세서(320)가 본 명세서에서 설명하는 하나 이상의 프로세스를 수행하게 할 수 있다. 부가적으로 또는 대안적으로, 본 명세서에서 설명하는 하나 이상의 프로세스를 수행하기 위해 소프트웨어 명령어 대신 또는 소프트웨어 명령어와 함께 하드웨어 회로가 사용될 수 있다. 따라서, 본 명세서에서 설명하는 구현예들은 하드웨어 회로와 소프트웨어의 임의의 특정 조합으로 한정되지 않는다.

[0044] 도 3에 도시된 구성요소의 수와 배열은 일례로서 제공된 것이다. 실제로, 장치(300)는, 도 3에 도시된 구성요소들 이외의 추가 구성요소, 더 적은 구성요소, 상이한 구성요소, 또는 상이하게 배열된 구성요소를 포함할 수 있다. 부가적으로 또는 대안적으로, 장치(300)의 구성요소들의 세트(예를 들어, 하나 이상의 구성요소)는 장치(300)의 구성요소들의 다른 세트에 의해 수행되는 것으로서 기술된 하나 이상의 기능을 수행할 수 있다.

[0045] 도 4는 분광 모델의 교차-유효성확인 기반 교정을 위한 예시적인 프로세스(400)의 흐름도이다. 일부 구현예에서, 도 4의 하나 이상의 프로세스 블록은 제어 장치(예를 들어, 제어 장치(210))에 의해 수행될 수 있다. 일부 구현예에서, 도 4의 하나 이상의 프로세스 블록은, 분광기(예를 들어, 분광기(220)) 및/또는 기타 등의, 제어 장치와는 별개이거나 이러한 제어 장치를 포함하는 다른 장치 또는 장치들의 그룹에 의해 수행될 수

있다.

[0046] 도 4에 도시된 바와 같이, 프로세스(400)는 제1 분광 모델에 대한 마스터 데이터 세트를 수신하는 단계를 포함할 수 있다(블록 410). 예를 들어, 제어 장치는, 전술한 바와 같이, (예를 들어, 프로세서(320), 메모리(330), 저장 구성요소(340), 입력 구성요소(350), 출력 구성요소(360), 통신 인터페이스(370) 및/또는 기타를 사용하여) 제1 분광 모델에 대한 마스터 데이터 세트를 수신할 수 있다.

[0047] 도 4에 또한 도시된 바와 같이, 프로세스(400)는, 제1 분광 모델을 업데이트하도록 제1 분광 모델에 연관된 타깃 모집단에 대한 타깃 데이터 세트를 수신하는 단계를 포함할 수 있다(블록 420). 예를 들어, 제어 장치는, 전술한 바와 같이, (예를 들어, 프로세서(320), 메모리(330), 저장 구성요소(340), 입력 구성요소(350), 출력 구성요소(360), 통신 인터페이스(370) 및/또는 기타를 사용하여) 제1 분광 모델을 업데이트하도록 제1 분광 모델에 연관된 타깃 모집단에 대한 타깃 데이터 세트를 수신할 수 있다.

[0048] 도 4에 또한 도시된 바와 같이, 프로세스(400)는, 마스터 데이터 세트 및 타깃 데이터 세트로부터의 제1 데이터를 포함하는 트레이닝 데이터 세트를 생성하는 단계를 포함할 수 있다(블록 430). 예를 들어, 전술한 바와 같이, 제어 장치는, (예를 들어, 프로세서(320), 메모리(330), 저장 구성요소(340), 입력 구성요소(350), 출력 구성요소(360), 통신 인터페이스(370) 및/또는 기타를 사용하여) 마스터 데이터 세트 및 타깃 데이터 세트로부터의 제1 데이터를 포함하는 트레이닝 데이터 세트를 생성할 수 있다.

[0049] 도 4에 또한 도시된 바와 같이, 프로세스(400)는, 마스터 데이터 세트가 아닌 타깃 데이터 세트로부터의 제2 데이터를 포함하는 유효성확인 데이터 세트를 생성하는 단계를 포함할 수 있다(블록 440). 예를 들어, 제어 장치는, 전술한 바와 같이, (예를 들어, 프로세서(320), 메모리(330), 저장 구성요소(340), 입력 구성요소(350), 출력 구성요소(360), 통신 인터페이스(370) 및/또는 기타를 사용하여) 마스터 데이터 세트가 아닌 타깃 데이터 세트로부터의 제2 데이터를 포함하는 유효성확인 데이터 세트를 생성할 수 있다.

[0050] 도 4에 또한 도시된 바와 같이, 프로세스(400)는, 교차-유효성확인을 사용하고 트레이닝 데이터 세트와 유효성확인 데이터 세트를 사용하여, 제1 분광 모델의 업데이트인 제2 분광 모델을 생성하는 단계를 포함할 수 있다(블록 450). 예를 들어, 제어 장치는, 전술한 바와 같이, (예를 들어, 프로세서(320), 메모리(330), 저장 구성요소(340), 입력 구성요소(350), 출력 구성요소(360), 통신 인터페이스(370) 및/또는 기타를 사용하여) 교차-유효성확인을 사용하고 트레이닝 데이터 세트와 유효성확인 데이터 세트를 사용하여 제1 분광 모델의 업데이트인 제2 분광 모델을 생성할 수 있다.

[0051] 도 4에 또한 도시된 바와 같이, 프로세스(400)는 제2 분광 모델을 제공하는 단계를 포함할 수 있다(블록 460). 예를 들어, 제어 장치는, 전술한 바와 같이, (예를 들어, 프로세서(320), 메모리(330), 저장 구성요소(340), 입력 구성요소(350), 출력 구성요소(360), 통신 인터페이스(370) 및/또는 기타를 사용하여) 제2 분광 모델을 제공할 수 있다.

[0052] 프로세스(400)는, 임의의 단일 구현예 또는 본 명세서의 다른 곳에서 설명하는 하나 이상의 다른 프로세스와 관련하여 그리고/또는 후술하는 구현예들의 임의의 조합 등의 추가 구현예를 포함할 수 있다.

[0053] 제1 구현예에서, 프로세스(400)는, 분광 측정을 수신하는 단계, 제2 분광 모델을 사용하여 분광 결정을 수행하는 단계, 및 분광 결정을 식별하는 출력을 제공하는 단계를 포함한다.

[0054] 제2 구현예에서, 단독으로 또는 제1 구현예와 조합하여, 트레이닝 데이터 세트는 복수의 트레이닝 데이터 세트이고, 유효성확인 데이터 세트는 복수의 유효성확인 데이터 세트이고, 프로세스(400)는, 복수의 트레이닝 데이터 세트와 복수의 유효성확인 데이터 세트에 기초하여 복수의 성능 메트릭을 생성하는 단계, 복수의 성능 메트릭에 기초하여 총 성능 메트릭을 결정하는 단계, 총 성능 메트릭에 기초하여 최적의 부분 최소 제곱(PLS) 인자를 결정하는 단계, 및 최적의 PLS 인자 및 병합된 데이터 세트에 기초하여 제2 분광 모델을 결정하는 단계를 포함하고, 병합된 데이터 세트는 마스터 데이터 세트와 타깃 데이터 세트를 포함한다.

[0055] 제3 구현예에서, 단독으로 또는 제1 및 제2 구현예 중 하나 이상과 조합하여, 제1 분광 모델과 제2 분광 모델은 정량화 모델이다.

[0056] 제4 구현예에서, 단독으로 또는 제1 내지 제3 구현예 중 하나 이상과 조합하여, 마스터 데이터 세트는 마스터 분광기에 의해 수행되는 분광 측정의 제1 세트에 기초하고, 타깃 데이터 세트는, 마스터 분광기와는 다른 타깃 분광기에 의해 수행되는 분광 측정의 제2 세트에 기초한다.

[0057] 제5 구현예에서, 단독으로 또는 제1 내지 제4 구현예 중 하나 이상과 조합하여, 마스터 데이터 세트는 특정 분

광기에 의해 수행되는 분광 측정의 제1 세트에 기초하고, 타깃 데이터 세트는, 그 특정 분광기에 의해 수행되는 분광 측정의 제2 세트에 기초한다.

[0058] 도 4는 프로세스(400)의 예시적인 블록들을 도시하고 있지만, 일부 구현예에서는, 프로세스(400)가, 도 4에 도시된 것 이외의 추가 블록, 더 적은 블록, 상이한 블록, 또는 상이하게 배열된 블록을 포함할 수 있다. 부가적으로 또는 대안적으로, 프로세스(400)의 블록들 중 두 개 이상은 병렬로 수행될 수 있다.

[0059] 도 5는 분광 모델의 교차-유효성확인 기반 교정을 위한 예시적인 프로세스(500)의 흐름도이다. 일부 구현예에서, 도 5의 하나 이상의 프로세스 블록은 제어 장치(예를 들어, 제어 장치(210))에 의해 수행될 수 있다. 일부 구현예에서, 도 5의 하나 이상의 프로세스 볼록은, 분광기(예를 들어, 분광기(220)) 및/또는 기타 등의, 제어 장치와는 별도이거나 이러한 제어 장치를 포함하는 다른 장치 또는 장치들의 그룹에 의해 수행될 수 있다.

[0060] 도 5에 도시된 바와 같이, 프로세스(500)는 제1 분광 모델에 연관된 타깃 모집단에 대한 타깃 데이터 세트를 수신하는 단계를 포함할 수 있다(블록 510). 예를 들어, 제어 장치는, 전술한 바와 같이, (예를 들어, 프로세서(320), 메모리(330), 저장 구성요소(340), 입력 구성요소(350), 출력 구성요소(360), 통신 인터페이스(370) 및/또는 기타를 사용하여) 제1 분광 모델에 연관된 타깃 모집단에 대한 타깃 데이터 세트를 수신할 수 있다.

[0061] 도 5에 또한 도시된 바와 같이, 프로세스(500)는, 타깃 데이터 세트의 수신에 기초하여 제1 분광 모델에 대한 마스터 데이터 세트를 취득하는 단계를 포함할 수 있다(블록 520). 예를 들어, 제어 장치는, 전술한 바와 같이, (예를 들어, 프로세서(320), 메모리(330), 저장 구성요소(340), 입력 구성요소(350), 출력 구성요소(360), 통신 인터페이스(370) 및/또는 기타를 사용하여) 타깃 데이터 세트의 수신에 기초하여 제1 분광 모델에 대한 마스터 데이터 세트를 취득할 수 있다.

[0062] 도 5에 또한 도시된 바와 같이, 프로세스(500)는 교차-유효성확인을 활용하여 최적의 부분 최소 제곱(PLS) 인자를 결정하는 단계를 포함할 수 있되, 최적의 PLS 인자는 복수의 트레이닝 데이터 세트 및 복수의 유효성확인 데이터 세트에 기초하여 결정되고, 트레이닝 데이터 세트는 타깃 데이터 세트의 각 부분 및 마스터 데이터 세트 모두를 포함하며, 각 유효성확인 데이터 세트는 마스터 데이터 세트의 데이터가 아닌 타깃 데이터 세트의 각 부분을 포함한다(블록 530). 예를 들어, 제어 장치는, 전술한 바와 같이, (예를 들어, 프로세서(320), 메모리(330), 저장 구성요소(340), 입력 구성요소(350), 출력 구성요소(360), 통신 인터페이스(370) 및/또는 기타를 사용하여) 최적의 부분 최소 제곱(PLS) 인자를 교차-유효성확인을 활용하여 결정할 수 있다. 일부 양태에서, 최적의 PLS 인자는, 복수의 트레이닝 데이터 세트 및 복수의 유효성확인 데이터 세트에 기초하여 결정되고, 트레이닝 데이터 세트는 타깃 데이터 세트의 각 부분 및 마스터 데이터 세트 모두를 포함하고, 각 유효성확인 데이터 세트는 타깃 데이터 세트의 각 부분 및 마스터 데이터 세트 모두를 포함한다.

[0063] 도 5에 또한 도시된 바와 같이, 프로세스(500)는 타깃 데이터 세트와 마스터 데이터 세트를 병합하여 병합된 데이터 세트를 생성하는 단계를 포함할 수 있다(블록 540). 예를 들어, 제어 장치는, 전술한 바와 같이, (예를 들어, 프로세서(320), 메모리(330), 저장 구성요소(340), 입력 구성요소(350), 출력 구성요소(360), 통신 인터페이스(370) 및/또는 기타를 사용하여) 타깃 데이터 세트와 마스터 데이터 세트를 병합하여 병합된 데이터 세트를 생성할 수 있다.

[0064] 도 5에 또한 도시된 바와 같이, 프로세스(500)는, 병합된 데이터 세트와 최적의 PLS 인자를 사용하여, 제2 분광 모델을 생성하는 단계를 포함할 수 있고, 제2 분광 모델은 제1 분광 모델의 업데이트이다(블록 550). 예를 들어, 제어 장치는, 전술한 바와 같이, (예를 들어, 프로세서(320), 메모리(330), 저장 구성요소(340), 입력 구성요소(350), 출력 구성요소(360), 통신 인터페이스(370) 및/또는 기타를 사용하여) 병합된 데이터 세트와 최적의 PLS 인자를 사용하여, 제2 분광 모델을 생성할 수 있다. 일부 양태에서, 제2 분광 모델은 제1 분광 모델의 업데이트이다.

[0065] 도 5에 또한 도시된 바와 같이, 프로세스(500)는, 제2 분광 모델을 제공하여 제1 분광 모델을 대체하는 단계를 포함할 수 있다(블록 560). 예를 들어, 제어 장치는, 전술한 바와 같이, (예를 들어, 프로세서(320), 메모리(330), 저장 구성요소(340), 입력 구성요소(350), 출력 구성요소(360), 통신 인터페이스(370) 및/또는 기타를 사용하여) 제2 분광 모델을 제공하여 제1 분광 모델을 대체할 수 있다.

[0066] 프로세스(500)는, 임의의 단일 구현예 또는 본 명세서의 다른 곳에서 설명하는 하나 이상의 다른 프로세스와 관련하여 그리고/또는 후술하는 구현예들의 임의의 조합 등의 추가 구현예를 포함할 수 있다.

[0067] 제1 구현예에서, 최적의 PLS 인자를 결정하는 단계는, 복수의 트레이닝 데이터 세트의 각각과 복수의 유효성확

인 데이터 세트의 각각에 대한 부분 최소 제곱(PLS) 성능 메트릭을 결정하는 단계, PLS 성능 메트릭에 기초하여 총 PLS 성능 메트릭을 결정하는 단계, 및 총 PLS 성능 메트릭에 기초하여 제2 분광 모델에 대한 PLS 인자를 최적화하는 단계를 포함한다.

[0068] 제2 구현예에서, 단독으로 또는 제1 구현예와 조합하여, 총 PLS 성능 메트릭은 평균 제곱근 오차(RMSE) 값에 연관되고, PLS 인자를 최적화하는 단계는 RMSE 값을 최소화하도록 PLS 인자를 최적화하는 단계를 포함한다.

[0069] 제3 구현예에서, 단독으로 또는 제1 및 제2 구현예 중 하나 이상과 조합하여, 복수의 유효성확인 데이터 세트는, 복수의 트레이닝 데이터 세트와는 다른 타깃 데이터 세트의 데이터를 포함한다.

[0070] 제4 구현예에서, 단독으로 또는 제1 내지 제3 구현예 중 하나 이상과 조합하여, 총 PLS 성능 메트릭을 결정하는 단계는 PLS 성능 메트릭을 집산하는 단계를 포함한다.

[0071] 제5 구현예에서, 단독으로 또는 제1 내지 제4 구현예 중 하나 이상과 조합하여, 타깃 데이터 세트는, 마스터 데이터 세트에 연관된 측정 후에 수행되는 타깃 모집단의 측정 세트에 연관된다.

[0072] 제6 구현예에서, 단독으로 또는 제1 내지 제5 구현예 중 하나 이상과 조합하여, 제2 분광 모델은 제1 분광 모델의 교정 업데이트 모델이다.

[0073] 제7 구현예에서, 단독으로 또는 제1 내지 제6 구현예 중 하나 이상과 조합하여, 타깃 데이터 세트는, 마스터 데이터 세트에 연관된 측정을 수행한 하나 이상의 분광기와는 다른 특정 분광기에 의해 수행되는 측정 세트에 연관된다.

[0074] 제8 구현예에서, 단독으로 또는 제1 내지 제7 구현예 중 하나 이상과 조합하여, 제2 분광 모델은 제1 분광 모델의 교정 전달 모델이다.

[0075] 제9 구현예에서, 단독으로 또는 제1 내지 제8 구현예 중 하나 이상과 조합하여, 제2 분광 모델을 제공하는 단계는, 특정 분광기에 의한 후속 측정과 관련하여 사용하도록 제2 분광 모델을 제공하는 단계를 포함한다.

[0076] 도 5는 프로세스(500)의 예시적인 블록들을 도시하지만, 일부 구현예에서는, 프로세스(500)가, 도 5에 도시된 것 이외의 추가 블록, 더 적은 블록, 상이한 블록, 또는 상이하게 배열된 블록을 포함할 수 있다. 부가적으로 또는 대안적으로, 프로세스(500)의 블록들 중 두 개 이상은 병렬로 수행될 수 있다.

[0077] 도 6은 분광 모델의 교차-유효성확인 기반 교정을 위한 예시적인 프로세스(600)의 흐름도이다. 일부 구현예에서, 도 6의 하나 이상의 프로세스 블록은 제어 장치(예를 들어, 제어 장치(210))에 의해 수행될 수 있다. 일부 구현예에서, 도 6의 하나 이상의 프로세스 블록은, 분광기(예를 들어, 분광기(220)) 및/또는 기타 등의, 제어 장치와는 별도이거나 이러한 제어 장치를 포함하는 다른 장치 또는 장치들의 그룹에 의해 수행될 수 있다.

[0078] 도 6에 도시된 바와 같이, 프로세스(600)는, 제1 분광 모델에 대한 마스터 데이터 세트를 수신하는 단계, 제1 분광 모델을 업데이트하도록 제1 분광 모델에 연관된 타깃 모집단에 대한 타깃 데이터 세트를 수신하는 단계, 마스터 데이터 세트와 타깃 데이터 세트에 기초하여 복수의 트레이닝 데이터 세트를 생성하는 단계, 및 타깃 데이터 세트에 기초하여 복수의 유효성확인 데이터 세트를 생성하는 단계를 포함할 수 있고, 복수의 유효성확인 데이터 세트는 마스터 데이터 세트의 데이터를 포함하지 않는다(블록 610). 예를 들어, 제어 장치는, 전술한 바와 같이, (예를 들어, 프로세서(320), 메모리(330), 저장 구성요소(340), 입력 구성요소(350), 출력 구성요소(360), 통신 인터페이스(370) 및/또는 기타를 사용하여) 제1 분광 모델에 대한 마스터 데이터 세트를 수신하고, 제1 분광 모델을 업데이트하도록 제1 분광 모델에 연관된 타깃 모집단에 대한 타깃 데이터 세트를 수신하고, 마스터 데이터 세트와 타깃 데이터 세트에 기초하여 복수의 트레이닝 데이터 세트를 생성하고, 타깃 데이터 세트에 기초하여 복수의 유효성확인 데이터 세트를 생성할 수 있고, 복수의 유효성확인 데이터 세트는 마스터 데이터 세트의 데이터를 포함하지 않는다. 일부 양태에서, 복수의 유효성확인 데이터 세트는 마스터 데이터 세트의 데이터를 포함하지 않는다.

[0079] 도 6에 도시된 바와 같이, 프로세스(600)는 제1 분광 모델에 대한 마스터 데이터 세트를 수신하는 단계를 포함할 수 있다(블록 610). 예를 들어, 제어 장치는, 전술한 바와 같이, (예를 들어, 프로세서(320), 메모리(330), 저장 구성요소(340), 입력 구성요소(350), 출력 구성요소(360), 통신 인터페이스(370) 및/또는 기타를 사용하여) 제1 분광 모델에 대한 마스터 데이터 세트를 수신할 수 있다.

[0080] 도 6에 도시된 바와 같이, 프로세스(600)는, 제1 분광 모델을 업데이트하도록 제1 분광 모델에 연관된 타깃 모

집단에 대한 타깃 데이터 세트를 수신하는 단계를 포함할 수 있다(블록 620). 예를 들어, 제어 장치는, 전술한 바와 같이, (예를 들어, 프로세서(320), 메모리(330), 저장 구성요소(340), 입력 구성요소(350), 출력 구성요소(360), 통신 인터페이스(370) 및/또는 기타를 사용하여) 제1 분광 모델을 업데이트하도록 제1 분광 모델에 연관된 타깃 모집단에 대한 타깃 데이터 세트를 수신할 수 있다.

[0081] 도 6에 도시된 바와 같이, 프로세스(600)는, 마스터 데이터 세트와 타깃 데이터 세트에 기초하여 복수의 트레이닝 데이터 세트를 생성하는 단계를 포함할 수 있다(블록 630). 예를 들어, 제어 장치는, 전술한 바와 같이, (예를 들어, 프로세서(320), 메모리(330), 저장 구성요소(340), 입력 구성요소(350), 출력 구성요소(360), 통신 인터페이스(370) 및/또는 기타를 사용하여) 마스터 데이터 세트와 타깃 데이터 세트에 기초하여 복수의 트레이닝 데이터 세트를 생성할 수 있다.

[0082] 도 6에 도시된 바와 같이, 프로세스(600)는 타깃 데이터 세트에 기초하여 복수의 유효성확인 데이터 세트를 생성하는 단계를 포함할 수 있고, 복수의 유효성확인 데이터 세트는 마스터 데이터 세트의 데이터를 포함하지 않는다(블록 640). 예를 들어, 제어 장치는, 전술한 바와 같이, (예를 들어, 프로세서(320), 메모리(330), 저장 구성요소(340), 입력 구성요소(350), 출력 구성요소(360), 통신 인터페이스(370) 및/또는 기타를 사용하여) 타깃 데이터 세트에 기초하여 복수의 유효성확인 데이터 세트를 생성할 수 있다. 일부 양태에서, 복수의 유효성확인 데이터 세트는 마스터 데이터 세트의 데이터를 포함하지 않는다.

[0083] 도 6에 또한 도시된 바와 같이, 프로세스(600)는 복수의 트레이닝 데이터 세트와 복수의 유효성확인 데이터 세트에 기초로 교차-유효성을 활용하여 모델 설정을 결정하는 단계를 포함할 수 있다(블록 650). 예를 들어, 제어 장치는, 전술한 바와 같이, (예를 들어, 프로세서(320), 메모리(330), 저장 구성요소(340), 입력 구성요소(350), 출력 구성요소(360), 통신 인터페이스(370) 및/또는 기타를 사용하여) 복수의 트레이닝 데이터 세트와 복수의 유효성확인 데이터 세트에 기초하여 모델 설정을 결정할 수 있다.

[0084] 도 6에 또한 도시된 바와 같이, 프로세스(600)는, 모델 설정, 타깃 데이터 세트, 및 마스터 데이터 세트에 기초하여 제2 분광 모델을 생성하는 단계를 포함할 수 있다(블록 660). 예를 들어, 제어 장치는, 전술한 바와 같이, (예를 들어, 프로세서(320), 메모리(330), 저장 구성요소(340), 입력 구성요소(350), 출력 구성요소(360), 통신 인터페이스(370) 및/또는 기타를 사용하여) 모델 설정, 타깃 데이터 세트, 및 마스터 데이터 세트에 기초하여 제2 분광 모델을 생성할 수 있다.

[0085] 도 6에 또한 도시된 바와 같이, 프로세스(600)는 제2 분광 모델을 제공하는 단계를 포함할 수 있다(블록 670). 예를 들어, 제어 장치는, 전술한 바와 같이, (예를 들어, 프로세서(320), 메모리(330), 저장 구성요소(340), 입력 구성요소(350), 출력 구성요소(360), 통신 인터페이스(370) 및/또는 기타를 사용하여) 제2 분광 모델을 제공할 수 있다.

[0086] 프로세스(600)는, 임의의 단일 구현예 또는 본 명세서의 다른 곳에서 설명하는 하나 이상의 다른 프로세스와 관련하여 그리고/또는 후술하는 구현예들의 임의의 조합 등의 추가 구현예를 포함할 수 있다.

[0087] 제1 구현예에서, 모델 설정은, PLS 모델의 부분 최소 제곱(PLS) 인자, 주 성분 회귀(PCR) 모델의 구성 요소의 양, SVR 모델의 서포트 벡터 회귀(SVR) 파라미터, 또는 전처리 설정 중 적어도 하나이다.

[0088] 제2 구현예에서, 단독으로 또는 제1 구현예와 조합하여, 프로세스(600)는, 복수의 트레이닝 데이터 세트의 각각과 복수의 유효성확인 데이터 세트의 대응하는 유효성확인 데이터 세트에 대한 복수의 부분 성능 메트릭을 생성하는 단계, 복수의 부분 성능 메트릭을 집산하여 총 성능 메트릭을 생성하는 단계, 및 모델 설정을 결정하여 총 성능 메트릭의 오차 값을 최소화하는 단계를 포함한다.

[0089] 제3 구현예에서, 단독으로 또는 제1 및 제2 구현예 중 하나 이상과 조합하여, 프로세스(600)는, 측정에 기초하고 제2 분광 모델을 사용하여 분광 결정을 수행하는 단계, 및 분광 결정을 식별하는 출력을 제공하는 단계를 포함한다.

[0090] 도 6은 프로세스(600)의 예시적인 블록들을 도시하고 있지만, 일부 구현예에서는, 프로세스(600)가, 도 6에 도시된 것 이외의 추가 블록, 더 적은 블록, 상이한 블록, 또는 상이하게 배열된 블록을 포함할 수 있다. 부가적으로 또는 대안적으로, 프로세스(600)의 블록들 중 두 개 이상은 병렬로 수행될 수 있다.

[0091] 전술한 개시 내용은, 예시와 설명을 제공하지만, 배타적임을 의도한 것이 아니며 또는 구현예를 개시된 구체적인 형태로 한정하려는 것이 아니다. 전술한 개시 내용에 비추어 볼 때 수정과 변형을 행할 수 있으며 또는 구현예의 실시로부터 수정과 변형을 획득할 수 있다.

[0092] 본 명세서에서 사용되는 바와 같이, "구성요소"라는 용어는, 하드웨어, 펌웨어, 및/또는 하드웨어와 소프트웨어의 조합으로서 넓게 해석되어야 한다.

[0093] 본 명세서에서 사용되는 바와 같이, 임계값을 만족하는 것은, 문맥에 따라, 값이 임계값보다 많거나, 임계값보다 크거나, 임계값 이상이거나, 임계값 미만이거나, 임계값보다 적거나, 임계값보다 작거나, 임계값 이하이거나, 임계값과 같음 등을 가리킬 수 있다.

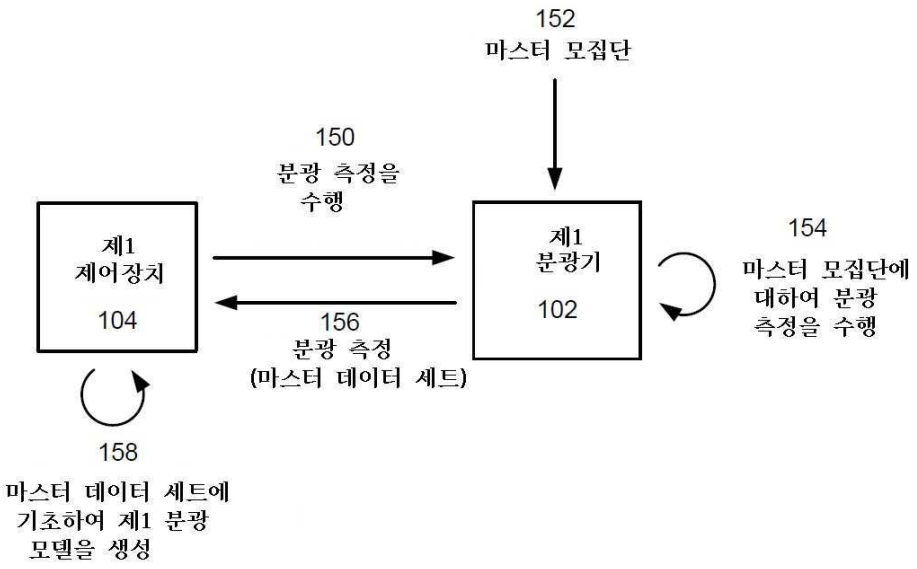
[0094] 본 명세서에서 설명된 시스템 및/또는 방법은 상이한 형태의 하드웨어, 펌웨어, 또는 하드웨어와 소프트웨어의 조합으로 구현될 수 있음이 명백할 것이다. 이러한 시스템 및/또는 방법을 구현하는 데 사용되는 실제 특수 제어 하드웨어 또는 소프트웨어 코드는 구현예를 한정하지 않는다. 따라서, 시스템 및/또는 방법의 동작과 거동은 본 명세서에서 특정 소프트웨어 코드를 참조하지 않고 설명되며, 소프트웨어 및 하드웨어는 본 명세서에서의 설명에 기초하여 시스템 및/또는 방법을 구현하도록 설계될 수 있는 것으로 이해된다.

[0095] 특징들의 구체적인 조합이 청구범위에 기재되거나 명세서에 개시되어 있더라도, 이들 조합은 다양한 구현예의 개시 내용을 한정하려는 것이 아니다. 실제로, 이들 특징 중 다수는 청구범위 및/또는 명세서에 구체적으로 언급되지 않은 방식으로 결합될 수 있다. 이하에서 열거되는 각각의 종속 청구항은 하나의 청구항만을 직접적으로 인용할 수 있지만, 다양한 구현예의 개시 내용은, 청구항 세트의 다른 모든 청구항과 함께 조합되는 각각의 종속 청구항을 포함한다.

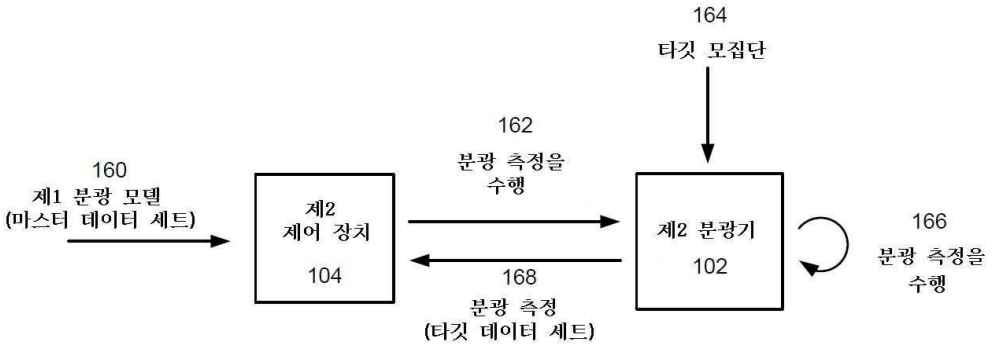
[0096] 본 명세서에서 사용된 어떠한 요소, 동작, 또는 명령어도 이처럼 명시적으로 기술되지 않는 한 결정적이거나 필수적이라고 해석해서는 안 된다. 또한, 본 명세서에서 사용된 바와 같이, "하나" 및 "한"이라는 관사는, 하나 이상의 항목을 포함하고자 하는 것이며, "하나 이상"과 호환 가능하게 사용될 수 있다. 또한, 본 명세서에서 사용된 바와 같이, "그"라는 관사는, "그"라는 관사와 관련하여 언급되는 하나 이상의 항목을 포함하고자 하는 것이며, "그 하나 이상"과 호환 가능하게 사용될 수 있다. 또한, 본 명세서에서 사용된 바와 같이, "세트"라는 용어는, 하나 이상의 항목(예를 들어, 관련 항목, 비관련 항목, 관련 및 비관련 항목들의 조합 등)을 포함하고자 하는 것이며, " 하나 이상"과 호환 가능하게 사용될 수 있다. 하나의 항목만을 의도한 경우 "하나만" 또는 이와 유사한 문구가 사용된다. 또한, 본 명세서에서 사용된 바와 같이, "가지고 있다", "갖는다", "갖는" 등의 용어는 개방형 용어를 의도한 것이다. 또한, "~에 기초하는"이라는 문구는, 명시적으로 달리 언급되지 않는 한, "에 적어도 부분적으로 기초하여"를 의미하도록 의도된 것이다. 또한, 본 명세서에서 사용된 바와 같이, "또는"이라는 용어는, 달리 명시되지 않는 한(예를 들어, "어느 하나" 또는 "중 하나만"과 조합하여 사용된다면) 시리즈로 사용되는 경우 포괄적인 것으로 의도된 것이며, "및/또는"과 호환 가능하게 사용될 수 있다.

도면

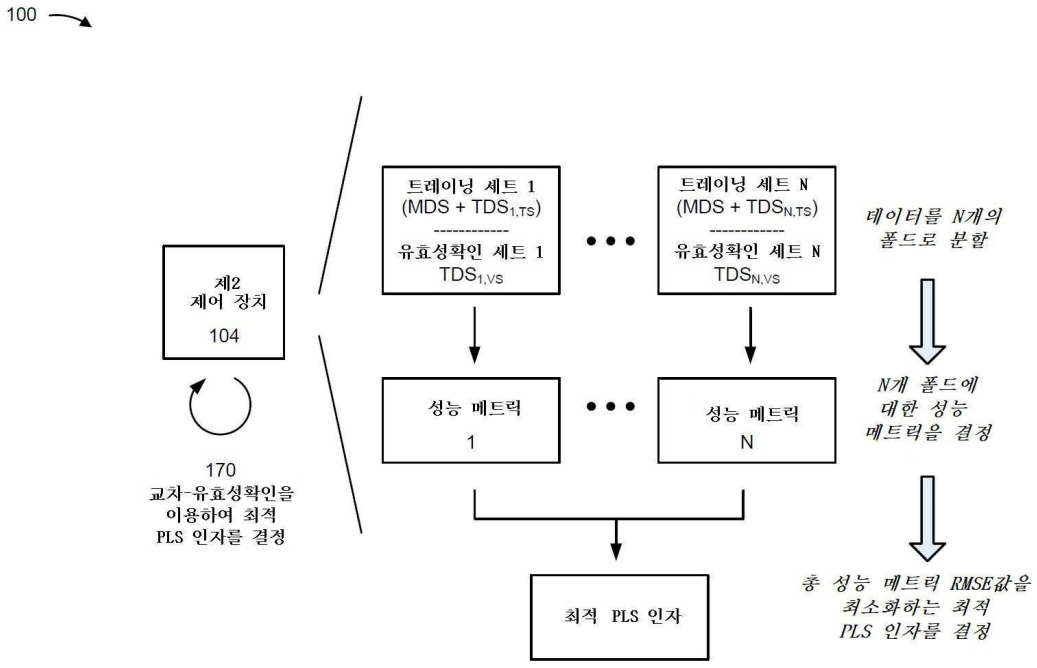
도면1a



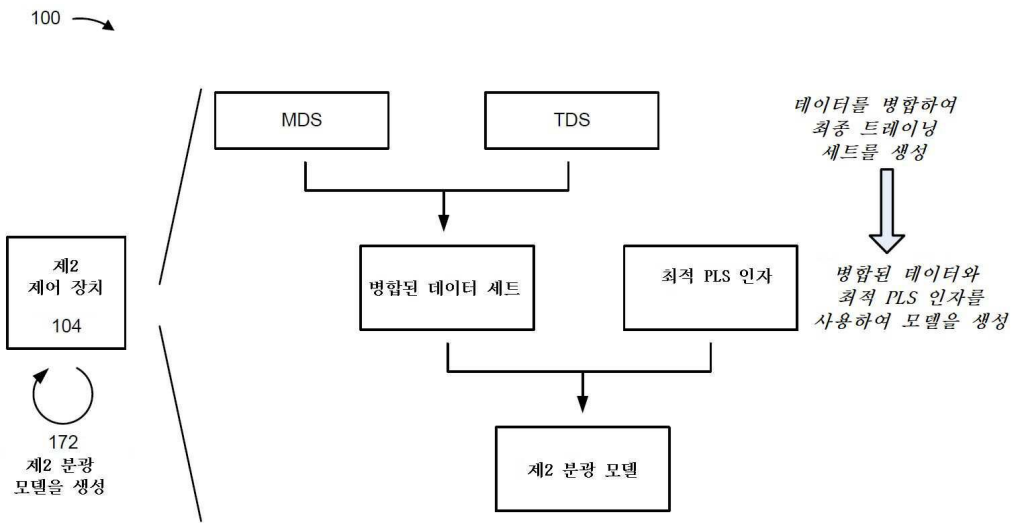
도면1b



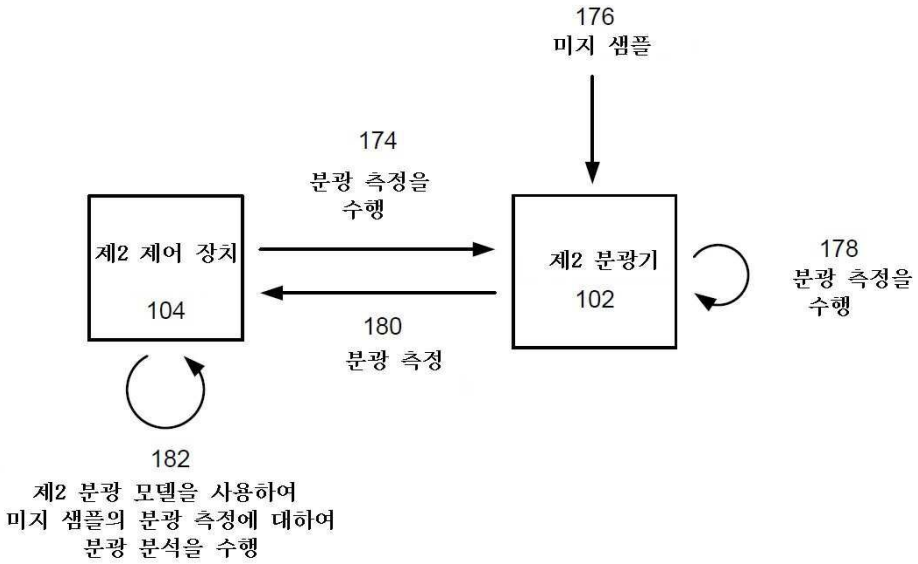
도면1c



도면1d



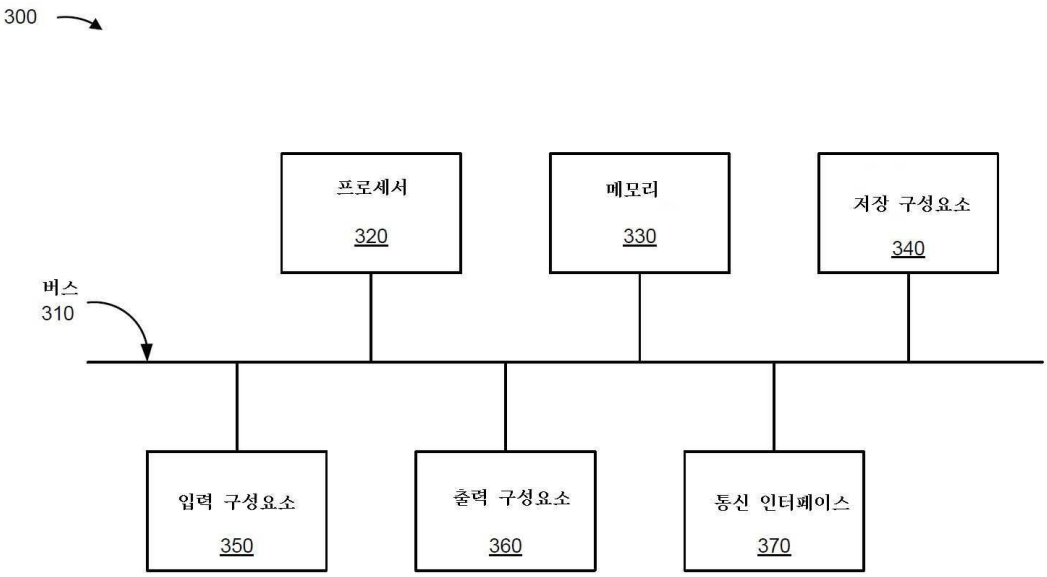
도면1e


176
미지 샘플
174
분광 측정을
수행
제2 제어 장치
104
제2 분광기
102
178
분광 측정을
수행
180
분광 측정
182
제2 분광 모델을 사용하여
미지 샘플의 분광 측정에 대하여
분광 분석을 수행

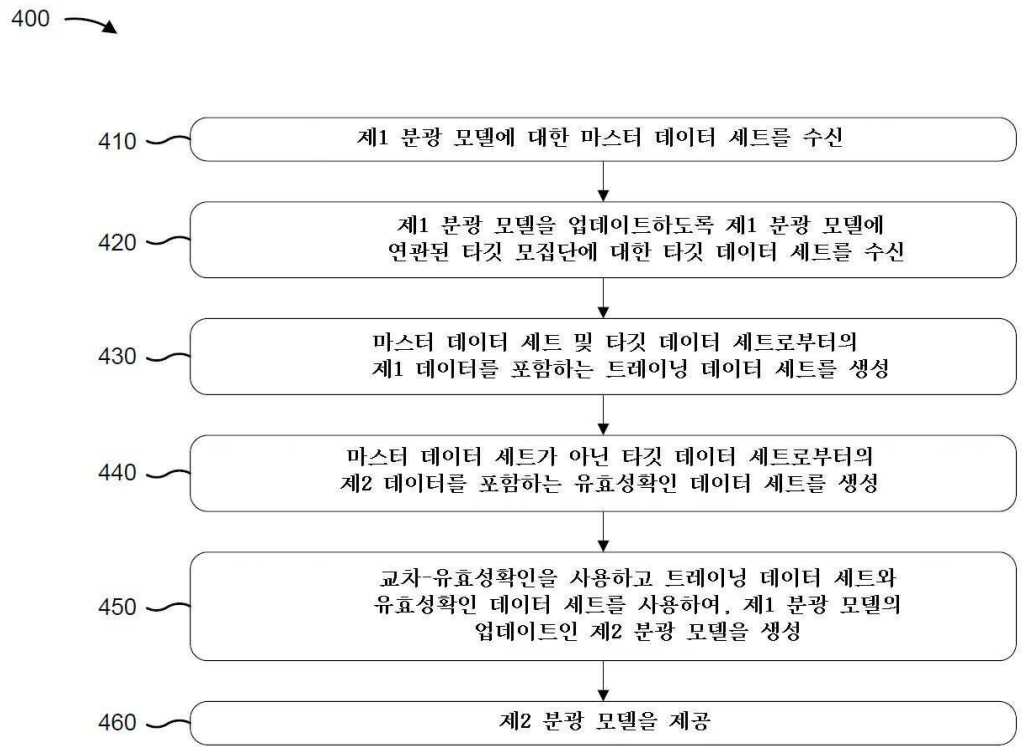
도면2


제어 장치
210
네트워크 230
분광기
220

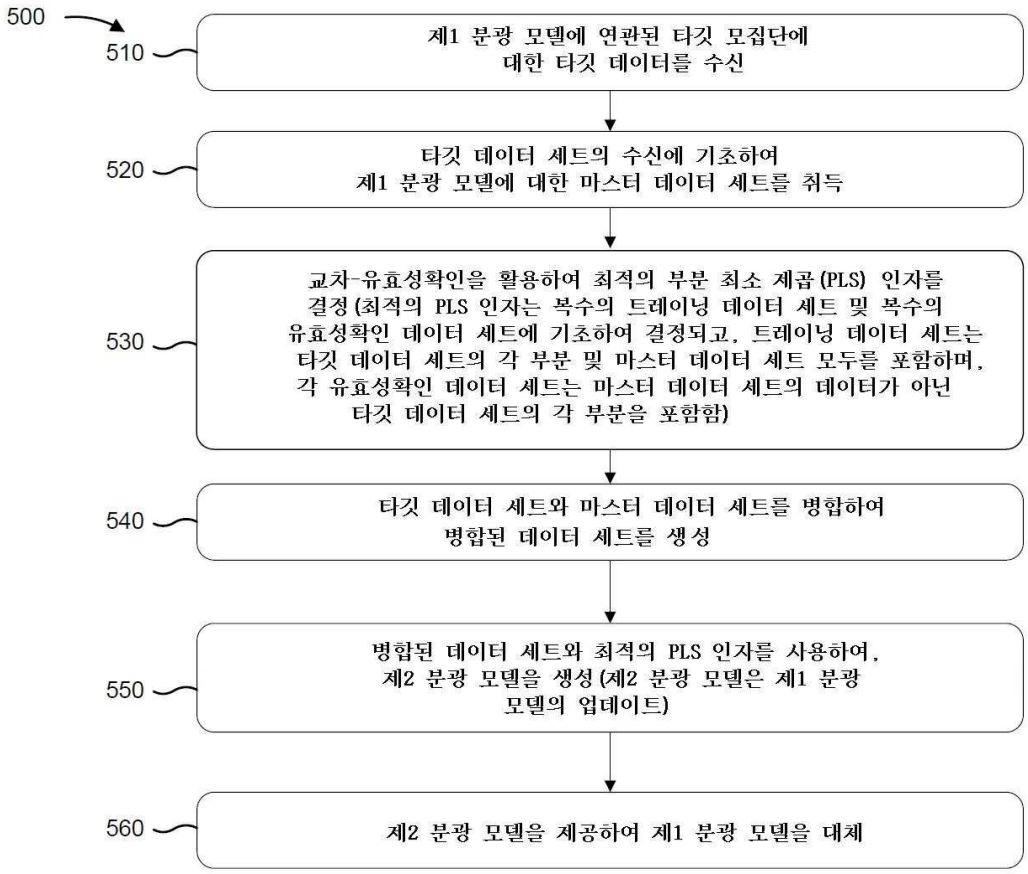
도면3


300
프로세서
320
메모리
330
저장 구성요소
340
버스
310
입력 구성요소
350
출력 구성요소
360
통신 인터페이스
370

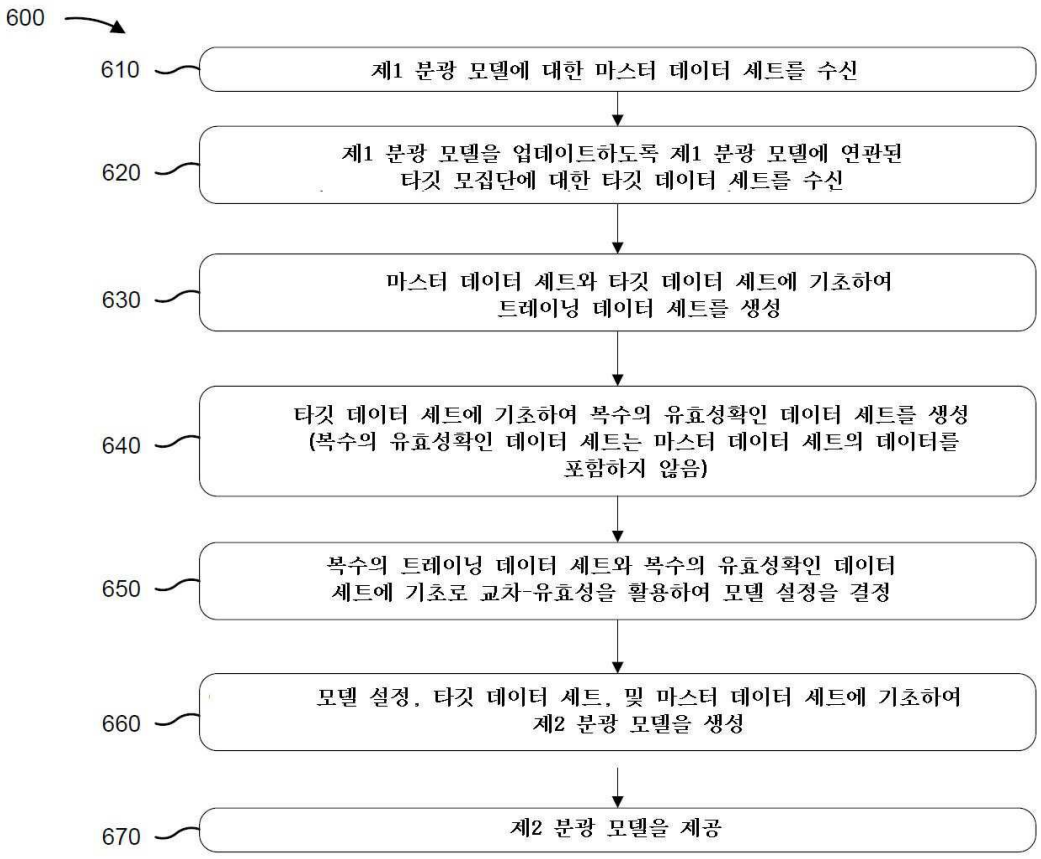
도면4


400
410
제1 분광 모델에 대한 마스터 데이터 세트를 수신
420
제1 분광 모델을 업데이트하도록 제1 분광 모델에
연관된 타깃 모집단에 대한 타깃 데이터 세트를 수신
430
마스터 데이터 세트 및 타깃 데이터 세트로부터의
제1 데이터를 포함하는 트레이닝 데이터 세트를 생성
440
마스터 데이터 세트가 아닌 타깃 데이터 세트로부터의
제2 데이터를 포함하는 유효성확인 데이터 세트를 생성
450
교차-유효성확인을 사용하고 트레이닝 데이터 세트와
유효성확인 데이터 세트를 사용하여, 제1 분광 모델의
업데이트인 제2 분광 모델을 생성
460
제2 분광 모델을 제공

도면5


500
510
제1 분광 모델에 연관된 타깃 모집단에
대한 타깃 데이터를 수신
520
타깃 데이터 세트의 수신에 기초하여
제1 분광 모델에 대한 마스터 데이터 세트를 취득
530
교차-유효성확인을 활용하여 최적의 부분 최소 제곱 (PLS) 인자를
결정 (최적의 PLS 인자는 복수의 트레이닝 데이터 세트 및 복수의
유효성확인 데이터 세트에 기초하여 결정되고, 트레이닝 데이터 세트는
타깃 데이터 세트의 각 부분 및 마스터 데이터 세트 모두를 포함하며,
각 유효성확인 데이터 세트는 마스터 데이터 세트의 데이터가 아닌
타깃 데이터 세트의 각 부분을 포함함)
540
타깃 데이터 세트와 마스터 데이터 세트를 병합하여
병합된 데이터 세트를 생성
550
병합된 데이터 세트와 최적의 PLS 인자를 사용하여,
제2 분광 모델을 생성 (제2 분광 모델은 제1 분광
모델의 업데이트)
560
제2 분광 모델을 제공하여 제1 분광 모델을 대체

도면6


600
610
제1 분광 모델에 대한 마스터 데이터 세트를 수신
620
제1 분광 모델을 업데이트하도록 제1 분광 모델에 연관된 타깃 모집단에 대한 타깃 데이터 세트를 수신
630
마스터 데이터 세트와 타깃 데이터 세트에 기초하여 트레이닝 데이터 세트를 생성
640
타깃 데이터 세트에 기초하여 복수의 유효성확인 데이터 세트를 생성 (복수의 유효성확인 데이터 세트는 마스터 데이터 세트의 데이터를 포함하지 않음)
650
복수의 트레이닝 데이터 세트와 복수의 유효성확인 데이터 세트에 기초로 교차-유효성을 활용하여 모델 설정을 결정
660
모델 설정, 타깃 데이터 세트, 및 마스터 데이터 세트에 기초하여 제2 분광 모델을 생성
670
제2 분광 모델을 제공