【公報種別】特許法第１７条の２の規定による補正の掲載
【部門区分】第６部門第１区分
【発行日】令和4年2月21日(2022.2.21)

【公開番号】特開2020-20785(P2020-20785A)
【公開日】令和2年2月6日(2020.2.6)
【年通号数】公開・登録公報2020-005
【出願番号】特願2019-120431(P2019-120431)
【国際特許分類】
Ｇ０１Ｎ 21/27(2006.01)
Ｇ０１Ｎ 21/25(2006.01)
Ｇ０６Ｎ 20/00(2019.01)
【ＦＩ】
Ｇ０１Ｎ 21/27
Ｇ０１Ｎ 21/25
Ｇ０６Ｎ 20/00

【手続補正書】
【提出日】令和4年2月10日(2022.2.10)
【手続補正１】
【補正対象書類名】特許請求の範囲
【補正対象項目名】全文
【補正方法】変更
【補正の内容】
【特許請求の範囲】
【請求項１】
装置であって、
１つ又は複数のメモリと、
前記１つ又は複数のメモリに通信可能に結合された１つ又は複数のプロセッサであり、
第１制御装置により生成された第１分光モデルのマスターデータセットを受信し、
前記装置は、前記第１制御装置と異なる第２制御装置であり、
前記マスターデータセットは、第１分光計により実行された第１分光測定セットに基づき、
前記第１分光モデルに関連するターゲット母集団のターゲットデータセットを受信して前記第１分光モデルを更新し、
前記ターゲットデータセットは、前記第１分光計とは異なる第２分光計により実行された第２分光測定セットに基づき、
前記マスターデータセットと前記ターゲットデータセットからの第１データとを含むトレーニングデータセットを生成し、
前記ターゲットデータセットからの第２データを含み前記マスターデータセットを含まないバリデーションデータセットを生成し、
クロスバリデーションを用いると共に前記トレーニングデータセット及び前記バリデーションデータセットを用いて、前記第１分光モデルの更新である第２分光モデルを生成し、
前記第２分光計に関連する前記第２分光モデルを用いるときの精度は、前記第１分光モデルを用いる場合と比較して向上し、
前記第２分光モデルを提供する
よう構成されたプロセッサと
を備えた装置。
【請求項２】
請求項１に記載の装置において、前記１つ又は複数のプロセッサは、

分光測定値を受信し、
前記第２分光モデルを用いて分光判定を実行し、且つ
前記分光判定を識別する出力を提供する
よう構成される装置。
【請求項３】
請求項１に記載の装置において、前記トレーニングデータセットは複数のトレーニングデータセットであり、前記バリデーションデータセットは複数のバリデーションデータセットであり、
前記１つ又は複数のプロセッサは、前記第２分光モデルの生成時に、
前記複数のトレーニングデータセット及び前記複数のバリデーションデータセットに基づき複数の性能メトリックを生成し、
前記複数の性能メトリックに基づき総合性能メトリックを求め、
前記総合性能メトリックに基づき最適部分最小二乗（ＰＬＳ）因子を求め、且つ
前記最適ＰＬＳ因子及びマージ済みデータセットに基づき前記第２分光モデルを求める
よう構成され、前記マージ済みデータセットは前記マスターデータセット及び前記ターゲットデータセットを含む装置。
【請求項４】
請求項１に記載の装置において、前記第１分光モデル及び前記第２分光モデルは定量化モデルである装置。
【請求項５】
請求項１に記載の装置において、前記第１分光計は、マスター分光計であり、前記第２分光計は、ターゲット分光計である装置。
【請求項６】
第１制御装置により生成された第１分光モデルに関連するターゲット母集団のターゲットデータセットを装置により受信するステップであり、
　前記装置は、前記第１制御装置と異なる第２制御装置であるステップと、
前記装置により前記第１分光モデルのマスターデータセットを取得するステップであり、
　前記マスターデータセットは、第１分光計により実行された第１測定セットに基づき、
　前記ターゲットデータセットは、前記第１分光計とは異なる第２分光計により実行された第２測定セットに基づくステップと、
前記装置によりクロスバリデーションを用いて最適部分最小二乗（ＰＬＳ）因子を求めるステップであり、
前記最適ＰＬＳ因子は、それぞれが前記ターゲットデータセットの各部分及び前記マスターデータセットの全部を含む複数のトレーニングデータセットと、それぞれが前記ターゲットデータセットの各部分を含み前記マスターデータセットのデータを含まない複数のバリデーションデータセットとに基づき求められるステップと、
前記装置により前記ターゲットデータセット及び前記マスターデータセットをマージしてマージ済みデータセットを生成するステップと、
前記装置により前記マージ済みデータセット及び前記最適ＰＬＳ因子を用いて第２分光モデルを生成するステップであり、
前記第２分光モデルは、前記第１分光モデルの更新であり、
　前記第２分光計に関連する前記第２分光モデルを用いるときの精度は、前記第１分光モデルを用いる場合と比較して向上するステップと、
前記装置により前記第２分光モデルを提供して前記第１分光モデルと置き換えるステップと
を含む方法。
【請求項７】
請求項６に記載の方法において、前記最適ＰＬＳ因子を求めるステップは、
前記複数のトレーニングデータセットのそれぞれ及び前記複数のバリデーションデータセットのそれぞれについて部分最小二乗（ＰＬＳ）性能メトリックを求めるステップと、

前記ＰＬＳ性能メトリックに基づき総合ＰＬＳ性能メトリックを求めるステップと、
前記総合ＰＬＳ性能メトリックに基づき前記第２分光モデルの前記最適ＰＬＳ因子を求めるようＰＬＳ因子を最適化するステップと
を含む方法。
【請求項８】
請求項７に記載の方法において、前記総合ＰＬＳ性能メトリックは、二乗平均誤差（ＲＭＳＥ）値に関連し、
前記ＰＬＳ因子を最適化するステップは、
前記ＲＭＳＥ値を最小化するよう前記ＰＬＳ因子を最適化するステップ
を含む方法。
【請求項９】
請求項７に記載の方法において、前記複数のバリデーションデータセットは、前記複数のトレーニングデータセットとは異なる前記ターゲットデータセットのデータを含む方法。
【請求項１０】
請求項７に記載の方法において、前記総合ＰＬＳ性能メトリックを求めるステップは、
前記ＰＬＳ性能メトリックを集約するステップ
を含む方法。
【請求項１１】
請求項６に記載の方法において、前記第２測定セットは、前記第１測定セットの後に実行される方法。
【請求項１２】
請求項６に記載の方法において、前記第２分光モデルは前記第１分光モデルの較正移行モデルである方法。
【請求項１３】
請求項６に記載の方法において、前記第２分光モデルを提供するステップは、
前記第２分光計による後続の測定に関連して用いるための前記第２分光モデルを提供するステップ
を含む方法。
【請求項１４】
命令を記憶する非一時的なコンピュータ可読媒体であって、前記命令は、
１つ又は複数のプロセッサにより実行されると、該１つ又は複数のプロセッサに
第１制御装置により生成された第１分光モデルのマスターデータセットを受信させ、
　　前記１つ又は複数のプロセッサは、前記第１制御装置と異なる第２制御装置にあり、
　　前記マスターデータセットは、第１分光計により実行された第１分光測定セットに基づき、
前記第１分光モデルに関連するターゲット母集団のターゲットデータセットを受信させて
前記第１分光モデルを更新させ、
　　前記ターゲットデータセットは、前記第１分光計とは異なる第２分光計により実行された第２分光測定セットに基づき、
前記マスターデータセット及び前記ターゲットデータセットに基づき複数のトレーニングデータセットを生成させ、
前記ターゲットデータセットに基づき前記マスターデータセットのデータを含まない複数のバリデーションデータセットを生成させ、
前記複数のトレーニングデータセット及び複数のバリデーションデータセットに基づき且つクロスバリデーションを用いてモデル設定を求めさせ、
前記モデル設定、前記ターゲットデータセット、及び前記マスターデータセットに基づき第２分光モデルを生成させ、
　　前記第２分光計に関連する前記第２分光モデルを用いるときの精度は、前記第１分光モデルを用いる場合と比較して向上し、
前記第２分光モデルを提供させる

１つ又は複数の命令を含む非一時的なコンピュータ可読媒体。
【請求項１５】
請求項１４に記載の非一時的なコンピュータ可読媒体において、前記モデル設定は、
ＰＬＳモデルの部分最小二乗（ＰＬＳ）因子、
主成分回帰（ＰＣＲ）モデルの成分の量、
サポートベクター回帰（ＳＶＲ）モデルのＳＶＲパラメータ、又は
前処理設定
の少なくとも１つである非一時的なコンピュータ可読媒体。
【請求項１６】
請求項１４に記載の非一時的なコンピュータ可読媒体において、前記１つ又は複数のプロセッサに前記モデル設定を求めさせる前記１つ又は複数の命令は、前記１つ又は複数のプロセッサに
前記複数のトレーニングデータセットのそれぞれ及び前記複数のバリデーションデータセットの対応するバリデーションデータセットについて複数の部分性能メトリックを生成させ、
前記複数の部分性能メトリックを集約して総合性能メトリックを生成させ、且つ
前記総合性能メトリックの誤差値を最小化する前記モデル設定を求めさせる
非一時的なコンピュータ可読媒体。
【請求項１７】
請求項１４に記載の非一時的なコンピュータ可読媒体において、前記１つ又は複数の命令は、前記１つ又は複数のプロセッサにより実行されると、該１つ又は複数のプロセッサに
測定値を受信させ、
前記測定値に基づき且つ前記第２分光モデルを用いて分光判定を実行させ、且つ
前記分光判定を識別する出力を提供させる
非一時的なコンピュータ可読媒体。
【請求項１８】
請求項１４に記載の非一時的なコンピュータ可読媒体において、前記第１分光モデル及び前記第２分光モデルは定量化モデルである非一時的なコンピュータ可読媒体。
【請求項１９】
請求項１４に記載の非一時的なコンピュータ可読媒体において、前記１つ又は複数のプロセッサに前記第２分光モデルを提供させる前記１つ又は複数の命令は、該１つ又は複数のプロセッサに
前記第２分光計による後続の測定に関連して用いるための前記第２分光モデルを提供させる
非一時的なコンピュータ可読媒体。
【請求項２０】
請求項１４に記載の非一時的なコンピュータ可読媒体において、前記１つ又は複数のプロセッサに前記ターゲットデータセットを受信させる前記１つ又は複数の命令は、該１つ又は複数のプロセッサに
前記第２分光計から前記ターゲットデータセットを受信させる
非一時的なコンピュータ可読媒体。