

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B2)

(11) 特許番号

特許第6595652号
(P6595652)

(45) 発行日 令和1年10月23日 (2019. 10. 23)

(24) 登録日 令和1年10月4日 (2019. 10. 4)

(51) Int. Cl. F I
GO 1 N 21/27 (2006. 01) GO 1 N 21/27 Z

請求項の数 16 外国語出願 (全 36 頁)

(21) 出願番号	特願2018-70588 (P2018-70588)	(73) 特許権者	518113199
(22) 出願日	平成30年4月2日 (2018. 4. 2)		グリーントロピズム
(65) 公開番号	特開2018-179982 (P2018-179982A)		フランス国、9 2 9 7 4 ・ パリ ・ ラ ・ デフ
(43) 公開日	平成30年11月15日 (2018. 11. 15)		ァンス ・ セデックス、ラ ・ デファンス ・ 4
審査請求日	平成30年4月2日 (2018. 4. 2)		、ブラス ・ ドゥ ・ ラ ・ デファンス ・ 4
(31) 優先権主張番号	17305412.3	(74) 代理人	110001173
(32) 優先日	平成29年4月7日 (2017. 4. 7)		特許業務法人川口国際特許事務所
(33) 優先権主張国・地域又は機関	欧州特許庁 (EP)	(72) 発明者	アントワヌ ・ ラボルド
			フランス国、9 4 1 1 0 ・ アルクイユ、リ
			ュ ・ ドゥ ・ ラ ・ ディビジオン ・ デュ ・ ジェ
			ネラル ・ ルクレール ・ 4 8
		(72) 発明者	オード ・ ブルドー
			フランス国、3 1 3 2 0 ・ カスタネ ・ トロ
			ザン、アンパッス ・ デ ・ コリブリ ・ 4

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 サンプル特性評価用の改良分光デバイス及び方法

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

サンプル (S) を特性評価する特性評価デバイス (50) であって、

- 半透明材料を通して実行される前記サンプルの測定スペクトル (A_{S+p}) と、前記半透明材料の測定スペクトル (A_p) とを記憶するメモリ (MEM) と、

- 処理ユニット (PU) であって、

* 前記半透明材料を通る前記サンプルの前記測定スペクトル (A_{S+p}) のスペクトルエネルギー (E_{S+p}) を決定し、スペクトルエネルギーは測定スペクトルの波長に関する積分に比例しており、

* 前記スペクトルエネルギー (E_{S+p}) から係数

【数 1】

 (\hat{y})

を推定し、

* 前記半透明材料を通る前記サンプルの前記測定スペクトル (A_{S+p}) と、前記半透明材料の補正スペクトル

【数 2】

 (\hat{A}_p)

とから、前記サンプルの補正スペクトル

10

20

【数 3】

$$(\hat{A}_s)$$

を決定するように構成されている処理ユニット (P U) と
を含み、

前記半透明材料の前記補正スペクトル

【数 4】

$$(\hat{A}_p)$$

を、前記半透明材料の前記測定スペクトル (A_p) と、前記推定係数

10

【数 5】

$$(\hat{\gamma})$$

とから決定することを特徴とする、特性評価デバイス (5 0) 。

【請求項 2】

参照サンプルのスペクトルの参照データベース (D B) から開発されている特性評価モデル (C M) を実行するように構成されているモデル化ユニット (M U) を更に含み、前記特性評価モデルは、前記サンプルの前記補正スペクトル

【数 6】

$$(\hat{A}_s)$$

20

を入力として使用し、前記サンプルの分類、又は前記サンプルに存在する化合物の分類又は定量化を送出することを特徴とする、請求項 1 に記載の特性評価デバイス (5 0) 。

【請求項 3】

主成分分析 (P C A) に基づいて前記補正サンプルスペクトル

【数 7】

$$(\hat{A}_s)$$

を構造化するように構成されているデータ構造化モジュール (D S M) を更に含み、前記データ構造化モジュールは、構造化補正サンプルスペクトル

30

【数 8】

$$(\hat{A}_{str})$$

を生成し、これによって、測定の波長 (λ) の数をより少数の変数 (μ_1 、 μ_2 、 μ_3) に減少させ、前記構造化補正サンプルスペクトル

【数 9】

$$(\hat{A}_{str})$$

は、前記参照データベース (D B) から開発されている改良特性評価モデル (C M_{imp}) の入力であり、前記改良特性評価モデルは、前記特性評価モデル (C M) の代わりに、前記サンプルの分類、又は前記サンプルに存在する化合物の分類又は定量化を送出することを特徴とする、請求項 2 に記載の特性評価デバイス (5 0) 。

40

【請求項 4】

- 測定デバイス (M e D) であって、
- サンプル (S) を照明するように構成されている光源 (L S) であって、前記サンプルを、半透明材料 (P) を通して照明する光源 (L S) と、
- 前記サンプルから反射される光又は前記サンプルによって透過される光を検出するように構成されている検出器 (D) と、

- 前記サンプルの測定スペクトル (A_{s + p}) を生成するように構成されている計算

50

モジュール (5 0 1) と

を含む測定デバイス (M e D) と、

- 請求項 1 ~ 3 のいずれか一項に記載の特性評価デバイス (5 0) と

を含む分光光度計 (S p e c t r o) 。

【請求項 5】

サンプル (S) の補正スペクトル

【数 1 0】

$$(\hat{A}_s)$$

10

を決定する方法 (1 0) であって、

- 半透明材料 (P) を通して実行される前記サンプルの測定スペクトル (A_{S+P}) を得るステップ (1 0 0) と、

- 前記半透明材料の測定スペクトル (A_P) を得るステップ (1 1 0) と、

- 前記半透明材料を通る前記サンプルの前記測定スペクトル (A_{S+P}) のスペクトルエネルギー (E_{S+P}) を決定するステップ (1 1 5) であって、スペクトルエネルギーは測定スペクトルの波長に関する積分に比例している、ステップと、

- 前記スペクトルエネルギー (E_{S+P}) から係数

【数 1 1】

$$(\hat{\gamma})$$

20

を推定するステップ (1 2 0) と、

- 前記サンプルの前記測定スペクトル (A_{S+P}) と、前記半透明材料の補正スペクトル

【数 1 2】

$$(\hat{A}_p)$$

とから、前記サンプルの前記補正スペクトル

【数 1 3】

$$(\hat{A}_s)$$

30

を決定するステップ (1 3 0) と

を含み、

前記半透明材料の前記補正スペクトル

【数 1 4】

$$(\hat{A}_p)$$

を、前記半透明材料の前記測定スペクトル (A_P) と、前記推定係数

【数 1 5】

40

$$(\hat{\gamma})$$

とから決定することを特徴とする、方法 (1 0) 。

【請求項 6】

前記測定スペクトルを吸光度で表すことを特徴とする、請求項 5 に記載の方法 (1 0)

。

【請求項 7】

前記半透明材料の前記補正スペクトル

【数 1 6】

$$(\hat{A}_p)$$

を、前記推定係数

【数 1 7】

$$(\hat{\gamma})$$

と前記半透明材料の前記測定スペクトル (A_p) との積から決定することを特徴とする、請求項 5 又は 6 に記載の方法 (10)。

10

【請求項 8】

前記サンプルの前記補正スペクトル

【数 1 8】

$$(\hat{A}_s)$$

を、前記半透明材料を通る前記サンプルの前記測定スペクトル (A_{s+p}) から前記半透明材料の前記補正スペクトル

【数 1 9】

$$(\hat{A}_p)$$

20

を引くことによって決定することを特徴とする、請求項 5 ~ 7 のいずれか一項に記載の方法 (10)。

【請求項 9】

前記推定係数を、前記半透明材料を通る前記サンプルの前記測定スペクトル (A_{s+p}) の前記スペクトルエネルギー (E_{s+p}) と前記推定係数

【数 2 0】

$$(\hat{\gamma})$$

との間の所定の関係 (R) によって決定することを特徴とする、請求項 5 ~ 8 のいずれか一項に記載の方法 (10)。

30

【請求項 10】

前記所定の関係 (R) は、線形関数であることを特徴とする、請求項 9 に記載の方法 (10)。

【請求項 11】

前記半透明材料を通る前記サンプルの前記測定スペクトル (A_{s+p}) を測定する前ステップを含むことを特徴とする、請求項 5 ~ 10 のいずれか一項に記載の方法 (10)。

【請求項 12】

分類モデル又は定量化モデルに対応する特性評価モデル (CM) を実行し、前記サンプルの前記補正スペクトル

40

【数 2 1】

$$(\hat{A}_s)$$

を入力として使用するステップ (250、350) を含むことを特徴とする、請求項 5 ~ 11 のいずれか一項に記載の方法 (10)。

【請求項 13】

主成分分析 (PCA) に基づいて前記補正サンプルスペクトル

【数 2 2】

(\hat{A}_s)

を構造化して、構造化補正サンプルスペクトル

【数 2 3】

(\hat{A}_{str})

を生成し、これによって、測定の波長 (λ_i) の数をより少数の変数 (μ_1 、 μ_2 、 μ_3) に減少させるステップ (140) を含むことを特徴とする、請求項 5 ~ 11 のいずれか一項に記載の方法 (10)。

10

【請求項 14】

サンプルの特性評価方法 (400、500、600) であって、請求項 13 に記載の前記サンプルの補正スペクトルを決定する方法 (10) と、前記構造化補正サンプルスペクトル

【数 2 4】

(\hat{A}_{str})

20

を入力として用いて改良特性評価モデル (CMimp) を実行するステップ (150) とを含むことを特徴とする、特性評価方法 (400、500、600)。

【請求項 15】

請求項 5 ~ 14 のいずれか一項に記載のステップを実行するように適合されているコンピュータプログラム。

【請求項 16】

請求項 15 に記載の前記コンピュータプログラムを組み込むコンピュータ可読媒体。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

30

本発明は、一般的に、分光分析によるサンプルの特性評価の分野に関する。特に、本発明は、透明包装体などの半透明材料を通して実行されるサンプルの初期測定スペクトルからサンプルの補正スペクトルを決定するデバイス及び方法に関する。次に、補正スペクトルを特性評価モデルに導入して、サンプルに関する分類又は定量化操作を実行することができる。

【背景技術】

【0002】

分光法、より詳細には、赤外 (IR) 分光法の枠組みにおいて、反射サンプル S の場合、図 1 に示すように、特定の領域 [λ_1 ; λ_2] 内の複数の波長に対して、サンプル S に入射する強度 I_0 、及びサンプルによって透過又は反射される強度 I を測定することによって、サンプルの光学的特性を決定する。光とサンプルとの間の相互作用は、サンプルの特性評価を可能にする。

40

【0003】

異なる波長を、光源 LS によって生成し、反射 (又は透過) 強度を、検出器 D で測定する。処理ユニット PU は、 I と I_0 との比 (又はその逆数) から決定された、 T に依存する、信号に対応するスペクトル S_s () を計算する。

【0004】

スペクトルという用語は、例えば、下記のように、異なるタイプの信号を記述する。

透過では、サンプルの透過率を、下記のように定義する。

$T(\lambda) = I_t(\lambda) / I_0(\lambda)$ (但し、 I_t は透過強度である)

50

反射では、サンプルの反射率を、下記のように定義する。

$R(\lambda) = I_R(\lambda) / I_0(\lambda)$ (但し、 I_R は反射強度である)

反射の不透明度 $O_R(\lambda)$ を、 $1/R$ と定義し、透過の不透明度 $O_t(\lambda)$ を、 $1/T$ と定義する。

【0005】

吸光度 $A_s(\lambda)$ を、下記のように定義する。

反射の場合、 $A_{s/R}(\lambda) = \log_{10} [I_0(\lambda) / I_R(\lambda)]$

透過の場合、 $A_{s/t}(\lambda) = \log_{10} [I_0(\lambda) / I_t(\lambda)]$ (1)

【0006】

下記のように定義される物理量を、スペクトルとして使用することもできる。

反射の場合、 $A_{s/R}(\lambda) = \log_{10} [I_R(\lambda) / I_0(\lambda)]$

透過の場合、 $A_{s/t}(\lambda) = \log_{10} [I_t(\lambda) / I_0(\lambda)]$ (2)

【0007】

乗法関係を加法又は減法関係に変換するという利益を有する透過 ($I(\lambda) = I_t(\lambda)$) 又は反射 ($I(\lambda) = I_R(\lambda)$) 構成の両方において、吸光度 $\log_{10} [I_0(\lambda) / I(\lambda)]$ 又は $\log_{10} [I(\lambda) / I_0(\lambda)]$ を分光法で使用する。

【0008】

次に、例えば、サンプルを分類する、又はサンプルの特定の化合物を定量化するために、測定スペクトル $S_s(\lambda)$ を、特性評価モデル CM への入力として使用する。

【0009】

分類の例は、粉末の複数の所定のカテゴリの中の粉末サンプルのカテゴリの決定である。定量化の例は、粉末における湿度レベル、粉末におけるグルテンの定量化、布における綿の百分率である。別の可能性は、サンプルに存在する化合物が閾値よりも上又は下であるかを決定することによって、サンプルを分類することである。全てのこれらのタイプの特性評価モデルを、分類/定量化モデルと通常定義する。

【0010】

当業界で周知の特性評価モデルは、異なるカテゴリ(分類)の、又は定量化すべき化合物の異なる百分率(定量化)を有する、参照サンプルの相当な数の測定スペクトルの参照データベース DB に基づく。

【0011】

データベースの参照スペクトルは、例えば、部分最小二乗判別 (PLS-DA)、サポートベクタマシン (SVM)、線形判別分析 (LDA) 又は k 最近接 (kNN) などの周知のモデルに基づいて、モデルを校正するのに使用される。

【0012】

データベースの参照スペクトルとサンプルの既知のクラスに関連した関連情報との両方を用いて、モデルを訓練する。各タイプのモデルに対して、各クラスの統計的特性を推定するために、異なる基準を最適化する。

【0013】

一旦、校正されると、開発モデル CM は、図2に例示するように、入力として使用される未知のスペクトルに基づいて、クラス、定量化パラメータなどの探索情報を抽出することができる。

【0014】

サンプルの変動に起因する影響を減らすために、モデルに入れる前に、移動平均平滑化などの幾つかの前処理を、生スペクトルに適用して、信号対雑音比を向上させることができる。

【0015】

制限は、特性評価モデルが、データベースの参照スペクトルと同様なサンプルのスペクトルから探索情報を決定できることだけであり、即ち、参照サンプルの参照スペクトルを測定するのに使用された方法にできるだけ近い方法で、サンプルのスペクトルを測定することである。

10

20

30

40

50

【 0 0 1 6 】

幾つかの実際の場合、包装体又は窓などの透明又は半透明材料を通る測定を行う必要がある。これは、例えば、食品、布、又は一旦包装されたあらゆる種類の工業製品の場合であってもよい。典型的に、このような包装体は、ポリエチレン（PE）、ポリプロピレン（PP）、ポリエチレンテレフタレート（PET）などのプラスチック材料を含む。

【 0 0 1 7 】

これらの材料の化学的性質を考慮して、サンプルを照明する光に対する影響は、吸収、反射及び拡散のために、無視できない。

【 0 0 1 8 】

図3は、赤外スペクトルにおけるココナツ粉末（反射型サンプル）の吸光度に対するP
P包装体の影響を例示する。図3aは、粉末単独の測定吸光度 A_s （ ）を示し、図3b
は、包装体を通る粉末の測定吸光度 A_{s+p} （ ）を示し、図3cは、包装体単独の測定
吸光度 A_p （ ）を示す。包装体単独は、赤外スペクトルを横切る均一な反射率を有する
材料と粉末を交換することによって、粉末と同じ方法で測定されている。各スペクトルは
、平均30個の測定値を含む。

10

【 0 0 1 9 】

A_s 、 A_p 及び A_{s+p} は、同じ条件で同じプロトコルを用いて測定されている。測定
スペクトルは包装体によって変更されることが分かる。

【 0 0 2 0 】

例えば、本発明者は、8タイプの粉末の分類のモデルを開発している。粉末単独で、即
ち、包装体材料がない場合、各タイプの粉末を15回測定して、分類モデル用のデータベ
ースを生成している（120個の測定値）。データベースの測定値に基づいて、サンプル
粉末単独の測定吸光度から、8タイプの粉末のうち任意の1つのサンプル粉末を同定する
ことができる分類モデルを構成した。この特定の場合、kNN型モデルを用いて、分類モ
デルを開発した。

20

【 0 0 2 1 】

次に、4つの異なる種類の包装体を通るサンプル粉末の測定スペクトルを、モデルに提
示する。

【 0 0 2 2 】

ポリエチレン（PE）からなる、2つの物理的に異なる包装体タイプにそれぞれ、PE
1及びPE2という名前をつける。

30

【 0 0 2 3 】

ポリエチレンテレフタレート（PET）からなる、2つの物理的に異なる包装体タイプ
にそれぞれ、PET1及びPET2という名前をつける。

【 0 0 2 4 】

モデルの誤り率は、下記のようになる。

PE1：75%

PE2：61%

PET1：73%

PET2：78%

40

【 0 0 2 5 】

包装体によって生じるスペクトルの変更により、スペクトルを分類モデルに適用した場
合、誤り率は大幅に増大する。

【 0 0 2 6 】

出版物「Influence of packaging in the analysis of fresh cut *Valerianella locusta* L. and golden delicious apple slices by visible-near IR and near-IR spectroscopy」、R. Beghi et al、Journal of Food Engineering 171（2016）では、リンゴ及び葉の鮮度の分析におけるプラスチック包装体

50

の影響を検討している。論文では、モデル性能の点で影響を評価している。一つには、近赤外の波長領域で吸収が増大するため、包装体は可視領域よりも近赤外領域でより重要な影響を有すると、著者は説明している。

【 0 0 2 7 】

第1の分類モデルを、包装体を有しないリンゴのスペクトルのデータベースから構成し、第2のモデルを、包装体を有するリンゴのスペクトルのデータベースから構成する。2つのモデルの性能を比較しているが、この出版物では、包装体の影響を、説明しようともせず、抑えようともしていない。

【 0 0 2 8 】

従って、光学的測定を阻害する半透明材料を通して、特性評価につながる光学的測定を行う場合、サンプルの強固な特性評価（分類／定量化）のための改良デバイス及び方法が必要である。

【 先行技術文献 】

【 非特許文献 】

【 0 0 2 9 】

【 非特許文献 1 】 Influence of packaging in the analysis of fresh cut Valerianella locusta L. and golden delicious apple slices by visible - near IR and near - IR spectroscopy、 R. Beghi et al、 Journal of Food Engineering 171 (2016)

【 発明の概要 】

【 課題を解決するための手段 】

【 0 0 3 0 】

第1の態様によれば、サンプルを特性評価する特性評価デバイスであって、
 - 半透明材料を通して実行される前記サンプルの測定スペクトルと、半透明材料の測定スペクトルとを記憶するメモリと、
 - 処理ユニットであって、
 ・半透明材料を通るサンプルの測定スペクトルの前記スペクトルエネルギーを決定し、
 ・前記スペクトルエネルギーから係数

【 数 1 】

(\hat{p})

を推定し、

・半透明材料を通るサンプルの測定スペクトルと、半透明材料の補正スペクトルとから、サンプルの補正スペクトルを決定するように構成されている処理ユニットとを含み、

半透明材料の前記補正スペクトルを、半透明材料の測定スペクトルと、推定係数とから決定することを特徴とする、特性評価デバイスを提供する。

【 0 0 3 1 】

第1の態様の進展によれば、特性評価デバイスは、参照サンプルのスペクトルの参照データベースから開発されている特性評価モデルを実行するように構成されているモデル化ユニットを更に含み、前記特性評価モデルは、サンプルの補正スペクトルを入力として使用し、サンプルの分類、又はサンプルに存在する化合物の分類又は定量化を送出する。

【 0 0 3 2 】

第1の態様の更なる進展によれば、特性評価デバイスは、主成分分析に基づいて補正サンプルスペクトルを構造化するように構成されているデータ構造化モジュールを更に含み、前記データ構造化モジュールは、構造化補正サンプルスペクトルを生成し、これによ

10

20

30

40

50

て、測定の変数の数を少数の変数に減少させ、前記構造化補正サンプルスペクトルは、参照データベースから開発されている改良特性評価モデルの入力であり、前記改良特性評価モデルは、前記特性評価モデルの代わりに、サンプルの分類、又はサンプルに存在する化合物の分類又は定量化を送出する。

【 0 0 3 3 】

第 2 の態様によれば、

- 特性評価すべきサンプルを照明するように構成されている光源であって、前記サンプルを、半透明材料 (P) を通して照明する光源と、サンプルから反射される光又はサンプルによって透過される光を検出するように構成されている検出器と、前記サンプルの測定スペクトルを生成するように構成されている計算モジュールとを含む測定デバイスと、

10

- 特性評価デバイスと
を含む分光光度計を提供する。

【 0 0 3 4 】

第 3 の態様によれば、特性評価すべきサンプルの補正スペクトルを決定する方法であって、

- 半透明材料を通して実行されるサンプルの測定スペクトルをロードするステップと、
- 半透明材料の測定スペクトルをロードするステップと、
- 半透明材料を通るサンプルの測定スペクトルのスペクトルエネルギーを決定するステップと、

20

- 前記スペクトルエネルギーから係数を推定するステップと、
- サンプルの測定スペクトルと、半透明材料の補正スペクトルとから、サンプルの前記補正スペクトルを決定するステップと
を含む、

半透明材料の前記補正スペクトルを、半透明材料の測定スペクトルと、推定係数とから決定することを特徴とする、方法を提供する。

【 0 0 3 5 】

第 3 の態様の進展によれば、前記測定スペクトルを吸光度で表す。

【 0 0 3 6 】

第 3 の態様の更なる進展によれば、半透明材料の補正スペクトルを、推定係数と半透明材料の測定スペクトルとの積から決定する。

30

【 0 0 3 7 】

第 3 の態様の更なる進展によれば、サンプルの補正スペクトルを、半透明材料を通るサンプルの測定スペクトルから半透明材料の補正スペクトルを引くことによって決定する。

【 0 0 3 8 】

第 3 の態様の更なる進展によれば、推定係数を、半透明材料を通るサンプルの測定スペクトルのスペクトルエネルギーと推定係数との間の所定の関係によって決定する。

【 0 0 3 9 】

第 3 の態様の更なる進展によれば、所定の関係は、線形関数である。

【 0 0 4 0 】

第 3 の態様の更なる進展によれば、方法は、半透明材料を通るサンプルの測定スペクトルを測定する前ステップを含む。

40

【 0 0 4 1 】

第 3 の態様の更なる進展によれば、方法は、分類モデル又は定量化モデルに対応する特性評価モデルを実行し、補正スペクトルを入力として使用するステップを含む。

【 0 0 4 2 】

第 3 の態様の更なる進展によれば、方法は、主成分分析に基づいて補正サンプルスペクトルを構造化して、構造化補正サンプルスペクトルを生成し、これによって、測定の変数の数を少数の変数に減少させるステップを含む。

【 0 0 4 3 】

第 4 の態様によれば、サンプルの特性評価方法であって、前記サンプルの補正スペクト

50

ルを決定する方法と、構造化補正サンプルスペクトルを入力として用いて改良特性評価モデルを実行するステップとを更に含むことを特徴とする、特性評価方法を提供する。

【0044】

本発明の実施形態、及び本発明の利点の更なる目的を、添付図面を参照して以下に詳述する。

【図面の簡単な説明】

【0045】

【図1】反射サンプルの分光測定略図である。

【図2】特性評価モデルの精巧さ及び実行を示す。

【図3a】図3は、異なるスペクトルを示す。図3aは、粉末単独の測定吸光度である。

【図3b】図3は、異なるスペクトルを示す。図3bは、プラスチック包装体を通して実行される粉末の測定吸光度である。

【図3c】図3は、異なるスペクトルを示す。図3cは、包装体単独の測定吸光度である。

【図4a】図4は、光源から検出器までの光路を示すことによって、半透明材料を通るサンプルのスペクトルの測定を例示する。図4aは、反射サンプルを用いた測定を例示する。

【図4b】図4は、光源から検出器までの光路を示すことによって、半透明材料を通るサンプルのスペクトルの測定を例示する。図4bは、半透明材料を2回横断する、透過サンプルを用いた測定を例示する。

【図4c】図4は、光源から検出器までの光路を示すことによって、半透明材料を通るサンプルのスペクトルの測定を例示する。図4cは、半透明材料を1回横断する、透過サンプルを用いた測定を例示する。

【図5】本発明によって特性評価すべきサンプルの補正スペクトルを決定する方法を例示する。

【図6】図5の方法に基づく、サンプルの分類である、補正スペクトルの用途の第1の例を例示する。

【図7】図5の方法に基づく、サンプルに存在する化合物の定量化である、補正スペクトルの用途の第2の例を例示する。

【図8-1】スペクトルに適用され、データ行列上の空間の変更を可能にする、主成分分析PCAの原理を例示する。

【図8-2】図5の方法のステップ100で得られる測定スペクトルでPCAを使用して構造化スペクトルを生成する第1の選択肢を例示する。

【図9】から μ への変数の変更を考慮して開発された新しい特性評価モデルの使用を例示し、このモデルは、特性評価されるべきサンプルのスペクトルに適用される。

【図10】図5の方法によって得られる補正スペクトル

【数2】

$$\hat{A}_s$$

にPCAを適用する場合の本発明の好ましい実施形態に対応する第2の選択肢を例示する。特性評価方法は、改造特性評価モデルC M i m pを使用する。

【図11】改造分類モデルを用いた分類方法を例示する。

【図12】改造定量化モデルを用いた定量化方法を例示する。

【図13】測定スペクトルのスペクトルエネルギーと推定係数との間の関係を決定する方法の例を示す。

【図14a】図14は、粉末の分類の例で得られる曇り点を例示し、図14aは、半透明材料PとしてPEの場合を例示する。

【図14b】図14は、粉末の分類の例で得られる曇り点を例示し、図14bは、材料PとしてPETの場合を例示する。

【図15】本発明の別の態様によるサンプルを特性評価する特性評価デバイスを示す。

【図 16】本発明による特性評価デバイスの特定の実施形態を例示する。

【図 17】本発明による特性評価デバイスの好ましい実施形態を例示する。

【図 18 a】本発明の別の態様による分光光度計を示す。

【図 18 b】本発明による別の分光計を示す。

【図 19】測定デバイス、特性評価デバイス及び材料データベースを異なる要素に設置する場合の本発明の実施形態を例示する。

【図 20】インターネットを介してコンピュータの通信サブシステムにリンクされた遠隔サーバに特性評価デバイス及び／又は材料データベースを設置する場合の本発明の別の実施形態を例示する。

【図 21】本発明の実施形態の実行に適した一般的な計算システムを示す。

10

【図 22】本発明の実施形態を構成するのに適合できるコンピュータデバイスを示す。

【発明を実施するための形態】

【0046】

図 4 は、半透明材料 P（プラスチック包装体又は窓であってもよい）を通るサンプル S のスペクトル測定における光路、及び対応する強度を示す。図 4 a は、反射の場合を示し、図 4 b は、光が材料を 2 回通過する、透過の場合を示し、図 4 c は、光が材料を 1 回通過する、透過の場合を示す。

【0047】

検出器 D に到達する前に、光は、最初に、材料 P を通過し、次に、サンプル S を通過してから、再度、材料 P を通過する（反射、又は図 4 b の通過の場合）。通過において、光は、P を 1 回だけ通過することもできる。

20

【0048】

ここで、光学的測定を歪曲する半透明材料を通して光学的測定を行い、即ち、サンプルに加えて、光源と検出器との間の光路に、透明材料を置く。半透明材料を、サンプルと接触して置いてもよい。これは、皿のプラスチック包装体の場合である。半透明材料とサンプルとの間に、空気が存在してもよく、これは、サンプルが封入物を有し、窓を通る測定である場合である。いずれの場合でも、半透明材料は固体材料である。

【0049】

光学的測定の場合、半透明材料は、光が材料を通過するようにさせる必要があり、材料は透明でもよい。反射による反射サンプル、又は透過による透明又は半透明サンプルに対して、測定を行うことができる。

30

【0050】

この文書全体にわたって、限定されない方法で、明確にするために、吸光度 A () を、スペクトル S () に対する信号として使用する。しかし、スペクトルの他の定義（例えば、透過率、反射率、又は不透明度）を使用することもできる。

【0051】

下記のように、定義する。

A_S () : サンプル単独の測定吸光度

A_{S+P} () : 半透明材料 P を通るサンプルの測定吸光度

A_P () : 半透明材料単独の測定吸光度

40

吸光度 A_P を、半透明材料を通る光の 1 方向通過、又は 2 方向、「往復」通過に対応する吸光度と定義してもよい。

【0052】

図 4 a 及び図 4 b の場合、下記の通りである。

$$A_{S+P} = \log_{10} [I_0 / I_3]$$

$A_P = \log_{10} [I_0 / I_1] = \log_{10} [I_2 / I_3]$ (但し、1 方向通過の A_P)

$$A_S = \log_{10} [I_1 / I_2]$$

【0053】

$$I_0 / I_3 = I_0 / I_1 * I_1 / I_2 * I_2 / I_3$$

50

この乗法関係は、吸光度と加法関係になる。

半透明材料を通るビームの1方向通過に対応する A_p の場合、下記のように書くことができる。

$$A_{S+P} = A_S + 2A_P$$

又は、

半透明材料を通るビームの往復に対応する A_p の場合、下記のように書くことができる。

$$A_{S+P} = A_S + A_P \quad (3)$$

【0054】

この文書全体にわたって、 A_p を、測定（測定の構成によって、往復又は1方向）に対する半透明材料の寄与に対応する吸光度と考える。

【0055】

光は、サンプル/材料Pの分子の分子振動による吸収の影響を受け、第1の近似では、各波長を、他の波長から独立であると仮定する。

【0056】

式(3)の数学モデルを使用することによって、 A_{S+P} から A_S を得るために、 A_{S+P} から A_P を引くのに十分であると推論することができる。

【0057】

従って、任意のサンプルがないことを意味する、半透明材料の各タイプの特徴を得ることがまず必要である。重要なパラメータは材料の化学的性質であり、半透明材料（PP、PET、PEなど）の候補化学的タイプのセットの測定スペクトル A_p () を得る必要がある。

【0058】

目的は、サンプル単独の「実際の」測定スペクトル A_S にできるだけ近い、 A_{S+P} 及び A_P の測定から

【数3】

$$\hat{A}_s(\lambda)$$

という名前のサンプル単独（半透明材料がないことを意味する）の推定測定スペクトルを決定することにある。

【0059】

式(3)を適用すると、推定スペクトルは、下記の通りである。

【数4】

$$\hat{A}_s = A_{S+P} - A_P \quad (4)$$

【0060】

このモデルを適用するために、測定毎にできるだけ近い条件及びプロトコルを用いて A_P 及び A_{S+P} の測定を行うことは有用であり得る。

【0061】

この簡易モデルは、満足のいく結果を与えない。なぜなら、式(2)を用いて再構成される幾つかのスペクトルパターンが物理的意味を有しないように見えるからである。例えば、この技法ではノッチが発生する。従って、分類/定量化モデルに導入されるスペクトルに対して非常に低い誤り率を可能にする特性評価デバイス及び方法が必要となり、スペクトルは、包装体又は窓などの半透明材料Pを通る測定から得られる。

【0062】

推定量

【数5】

$$\hat{A}_s$$

の性能を評価するツールを与えて、二乗平均平方根誤差又はRMSEなどの指標を計算する。計算を行うために、サンプル単独に対応する「実際の」吸光度 A_s が必要となり、 A_p 及び A_{s+p} の測定と同じプロトコルを用いて計算する。RMSEは、下記の通りである。

【数6】

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m [\hat{A}_s(\lambda_i) - A_s(\lambda_i)]^2} \quad (5)$$

10

但し、 i は、測定中に使用される波長に対応する、 $1 \sim m$ の添字付きの i 番目の波長である。

【0063】

決定推定量

【数7】

\hat{A}_s

に対して得られるRMSEの絶対値は、推定量の質の不完全な指標である。しかし、RMSEは、異なる推定量を互いに比較するのに有用である。

20

【0064】

図5は、本発明によって特性評価すべきサンプルSの補正スペクトル

【数8】

\hat{A}_s

を決定する方法10を例示する。

【0065】

第1のステップ100では、半透明材料Pを通して実行されたサンプルの測定スペクトル A_{s+p} をロードする。

【0066】

半透明材料は、化学的タイプ及び特定の厚さを有し、異なる物理的側面を示してもよい。

30

【0067】

光路に位置決めされた半透明材料の存在によって歪曲される光学的測定によって、スペクトルを測定した。スペクトルを、半透明材料及びサンプルを通過した後に検出器に到達する、波長に依存する信号と定義する。

【0068】

第2のステップ110では、半透明材料単独の測定スペクトル A_p をロードする。

【0069】

このスペクトル A_p を、サンプルスペクトルと同等又は等価な方法で行われる測定によって得てもよく、又は半透明材料の化学的タイプが既知である限りにおいてデータベースDBPから入手してもよい。2つの測定スペクトル A_{s+p} 及び A_p を、同じ条件、同じ構成で、同じ装置を用いて実行してもよい。

40

【0070】

反射サンプルの場合、測定的光領域で中性反射材料とサンプルSを交換することによって、 A_p の測定を行ってもよい。

【0071】

透過サンプルの場合、サンプルSを単に除去することによって、 A_p の測定を行ってもよい。

【0072】

50

任意選択的に、平滑化又は平均化などの幾つかの前処理を、測定スペクトルに適用してもよい。

【 0 0 7 3 】

実施形態において、測定用のスペクトル領域は、可視領域（[0 . 4 μ m、0 . 8 μ m]）、及び／又は近赤外領域（例えば、[0 . 8、3 μ m]に含まれる）、及び／又は赤外における別の帯域幅である。

【 0 0 7 4 】

次に、方法は、半透明材料（ A_{s+p} ）を通るサンプルの測定スペクトル A_{s+p} のスペクトルエネルギー E_{s+p} を決定する第 3 のステップ 1 1 5 を含む。

【 0 0 7 5 】

信号処理において、信号 $S(x)$ のスペクトルエネルギーは、この信号の積分に比例する量である。ここで、信号は、波長 の測定スペクトル A_{s+p} の関数である。従って、スペクトルエネルギー E_{s+p} は、 A_{s+p} の波長に関する積分に比例する。

【 0 0 7 6 】

スペクトルの測定に対する波長 i （1 から m まで変化する添字 i ）の離散数を考えると、 E_{s+p} を下記のように書くことができる。

【数 9】

$$E_{s+p} \propto \sum_{i=1}^m A_{s+p}(\lambda_i) \quad (6)$$

又は、一般的な場合、下記の通りである。

【数 1 0】

$$E_{s+p} \propto \int_{\lambda_1}^{\lambda_m} A_{s+p}(\lambda) \cdot d\lambda \quad (7)$$

【 0 0 7 7 】

次に、方法は、半透明材料 P を通して実行されるサンプルの測定スペクトル A_{s+p} のスペクトルエネルギー E_{s+p} から係数

【数 1 1】

$$\hat{\gamma}$$

を推定するステップを含む第 4 のステップ 1 2 0 を含む。

【 0 0 7 8 】

更に、方法は、サンプルの測定スペクトル A_{s+p} 及び半透明材料の補正スペクトル

【数 1 2】

$$\hat{A}_p$$

から、サンプルの補正スペクトル

【数 1 3】

$$\hat{A}_s$$

を決定するステップ 1 3 0 を含む。

【 0 0 7 9 】

半透明材料の補正スペクトル

10

20

30

40

【数 1 4】

$$\hat{A}_p$$

を、半透明材料の測定スペクトル A_p 及び推定係数

【数 1 5】

$$\hat{\gamma}$$

から決定する。

【0 0 8 0】

実際には、多くの実験及び推論の後、スペクトル測定中に半透明材料 P の存在の影響の補正を可能にする係数

10

【数 1 6】

$$\hat{\gamma}$$

は、歪曲測定のスペクトルエネルギーと関連があり得ることを、本発明者は見出した。推定係数

【数 1 7】

$$\hat{\gamma}$$

を、下記のような E_{s+p} と

20

【数 1 8】

$$\hat{\gamma}$$

との間の所定の関係 R によって得てもよい。

【数 1 9】

$$\hat{\gamma} = f(E_{s+p}) \quad \dots (8)$$

【0 0 8 1】

このような関係の例につながる、この関係を決定できる方法を、この文書で更に説明する。

30

【0 0 8 2】

補正スペクトル

【数 2 0】

$$\hat{A}_s$$

は、ロードされた測定スペクトル A_{s+p} から得られるスペクトルであるが、測定中に材料 P の存在による歪曲がより小さい。これは、多分、材料のスペクトル A_p が事前に定められロードされているからである。スペクトル A_p を、測定してもよく、又は材料データベースからロードしてもよい。このロードの場合、材料 P の化学的タイプが既知である必要がある。

40

【0 0 8 3】

推定係数

【数 2 1】

$$\hat{\gamma}$$

は、測定スペクトル A_{s+p} を補正するのにそれ自体使用される半透明材料の補正スペクトル

【数 2 2】

$$\hat{A}_p$$

を決定することができる。

【0084】

補正スペクトル

【数 2 3】

$$\hat{A}_s$$

を、サンプルの分類、又は後述のようにサンプルに存在する化合物の分類又は定量化のために使用してもよい。スペクトルが補正されているという事実は、背景技術に記載のように、スペクトルを入力として用いた分類 / 定量化モデルの測定中に材料 P の存在のために誤り率を減少させる。

10

【0085】

好ましくは、測定スペクトル A_{s+p} 及び A_p を、文脈によって、一貫した方法で、式 (1) (又は式 (2)) によって定義される吸光度で表す。

【0086】

特許請求の範囲に記載の方法の実施形態において、半透明材料の補正スペクトル

【数 2 4】

$$\hat{A}_p$$

20

を、下記のように、推定係数

【数 2 5】

$$\hat{\gamma}$$

と半透明材料の測定スペクトル A_p との積から決定する。

【数 2 6】

$$\hat{A}_p = \hat{\gamma} A_p \quad (9)$$

30

【0087】

実施形態において、係数

【数 2 7】

$$\hat{\gamma}$$

を式 (3) に導入することができ、例えば、下記のように、半透明材料を通るサンプルの測定スペクトル A_{s+p} から半透明材料の補正スペクトル

【数 2 8】

$$\hat{A}_p$$

40

を引くことによって、サンプルの補正スペクトル

【数 2 9】

$$\hat{A}_s$$

を決定する。

【数 3 0】

$$\hat{A}_s = A_{s+p} - \hat{\gamma} A_p \quad (10)$$

【0 0 8 8】

式 (1 0) は、測定スペクトルに対する材料 P の影響を一層考慮するために、係数

【数 3 1】

$$\hat{\gamma}$$

10

を A_p に付加した式 (3) に記載のモデルに対応する。本発明によるこの係数は、スペクトルエネルギー E_{s+p} を介して A_{s+p} の測定自体の本質的特徴と特定の関係 R を有する。

【0 0 8 9】

一旦、方法 1 0 によって決定された推定スペクトル

【数 3 2】

$$\hat{A}$$

を得ると、このスペクトルを、特性評価モデルへの入力として使用してもよい。

20

【0 0 9 0】

図 6 に例示する、

【数 3 3】

$$\hat{A}$$

の用途の第 1 の例は、サンプルの補正スペクトル

【数 3 4】

$$\hat{A}_s$$

を決定する方法 1 0 に基づく、サンプル S の分類の方法 2 0 0 であって、方法 2 0 0 は、上述のように第 1 の参照データベース DB 1 から開発された分類モデル CM を実行するステップ 2 5 0 を更に含む。分類モデル CM は、サンプルの補正スペクトル

30

【数 3 5】

$$\hat{A}_s$$

を入力として使用し、サンプルの分類を送出する。初期スペクトル A_{s+p} は、

【数 3 6】

$$\hat{A}_s$$

に変換されることによって補正されているので、モデル CM の誤り率は減少する。例は、9 個の異なる所定のタイプの中で粉末タイプの決定である。

40

【0 0 9 1】

図 7 に例示する、

【数 3 7】

$$\hat{A}$$

の用途の第 2 の例は、サンプルの補正スペクトル

【数 3 8】

$$\hat{A}_s$$

50

を決定する方法 10 に基づく、サンプル S に存在する化学化合物 C の定量化の方法 300 であって、方法 300 は、第 2 の参照データベース DB2 から開発された定量化モデル QM を実行するステップ 350 を更に含む。定量化モデルは、サンプルの補正スペクトル【数 39】

$$\hat{A}_s$$

を入力として使用し、サンプルに存在する化合物 C の定量化を送出する。例えば、それは、粉末における湿度レベル又はグルテンレベルであってもよい。

【0092】

混合用途は、化合物の定量化を用いたサンプルの分類であり、サンプルのクラスを定量化に応じて決定する。例えば、粉末の 2 つの異なるクラスを、粉末における化合物の百分率が、所定の閾値よりも上又は下であるかによって定義してもよい。

【0093】

係数

【数 40】

$$\hat{\gamma}$$

の使用による方法 10 の精巧さと並行して、本発明者は、下記の段落で記載のように、次元縮小の方法を使用することによって、好ましくは吸光度で表される、参照サンプルの初期スペクトル A_s () (又は前処理スペクトル) を構造化する方法を開発している。

【0094】

実際には、スペクトル A_s () は一般的に、相当な数の横座標 i 、(i は、1 ~ m であり、 m は典型的に、数百又は数千に等しい) であり、後述のように、この数を減らすことが望ましい。このために、主成分分析 (PCA) と呼ばれる方法を使用する。

【0095】

測定スペクトルを含むデータ行列上の空間の変更を可能にする、本発明による PCA の原理を、図 8 に例示する。

【0096】

出発空間ベクトルは、波長に応じて測定スペクトルを含むスペクトル空間 S 、即ち、特性評価モデル (図 2 参照) を精巧にするのに使用される参照データベース DB の参照サンプル (n 個の参照サンプル) のスペクトルのデータ行列 DM_{sr} である。 S の次元は、 m である。

【0097】

PCA アルゴリズムを、 n 個のサンプルを含む DM_{sr} 上で使用する。

【0098】

到着ベクトル空間 F は、 n 個の「サンプル」 $A_{str}(\mu)$ の新しい行列 DM' を定義する、新しい座標 μ_j を有する次元 l (但し、 $l = m$) の直交空間である。

【0099】

実際には、PCA アルゴリズムは、下記のように、 S から F への転送行列である係数行列 M_{PCA} を決定した。

$$Y = X \times M_{PCA} \quad (11)$$

【0100】

主成分の分析は、データの分散を最大化するステップと、得られる座標を直交させるステップとを含む異なる基準を使用する。

【0101】

μ_j の中で、全ての必要な情報を集中させる 2 つ又は 3 つの第 1 の座標 (μ_1 、 μ_2 、 μ_3) のみを選択することができる。構成によって、データにおける分散の最大部分を第 1 の座標が記述するような方法で、座標をソートする。スペクトルデータは高い相関関係にあることが多いので、少数の新しい座標に情報を集約することができる。従って、通常

10

20

30

40

50

、3つの第1の新しい座標は、元のデータを表現するのに十分である。

【0102】

係数行列 M_{PCA} は、データを編成する方法を表す。粉末の例において、係数は、粉末間の差を強調する。実際には、係数は、 $DMsr$ のスペクトルの吸光度の値に加えられた重み付け係数であってもよい。

【0103】

PCA分析を、分析及び視覚化技法として使用してもよい。「スコア」という名前の新しい座標 μ_j に注目されたい。

【0104】

本発明の文脈において、(参照サンプルのデータ行列 $DMsr$ からの)決定係数 M_{PCA} を別の行列で使用する。

10

【0105】

第1の選択肢は、図8-2に例示するように、方法10によって得られる測定スペクトル A_{S+P} で係数 M_{PCA} を使用して構造化スペクトル $A'_{S+P}(\mu)$ を生成することである。

【0106】

図9に例示するように、 μ への変数の変更を考慮して、新しい特性評価モデル $CMimp$ を開発し、このモデル $CMimp$ を、特性評価されるべきサンプルのスペクトルに適用する。更に、初期スペクトル $A_{S+P}(\mu)$ を、 $CMimp$ に対する入力として使用される前にPCA係数によって構造化する必要がある、 $A'_{S+P}(\mu)$ に変換する。変数 μ の数は、1(但し、1 m)であり、これらの1の中で、2つ又は3つの第1の変数のみを、計算のために使用してもよい(μ_1 、 μ_2 、 μ_3)。

20

【0107】

半透明材料Pを通してスペクトルにPCA係数を適用することによって、このデータを、測定中に材料Pの存在にもかかわらず、分類/定量化操作を大幅に単純化するような方法で構造化された新しい空間に転置する。従って、改良特性評価モデル $CMimp$ は、分類モデル CM の代わりに、サンプルの分類、又はサンプルに存在する化合物の分類又は定量化を送出する。

【0108】

上述の粉末分類のモデルを適用することによって、本発明者は、PCAなどの次元縮小によるスペクトルの最適構造化、従ってPCA係数 M_{PCA} に基づく変換を使用することによって、半透明材料Pを通して実行されるサンプルのスペクトルの誤り率が下記のようになることを見出した(PCA無しの対応する誤り率を丸括弧の間に与える。下記の表1も参照)。

30

PE1: 2% (75%)

PE2: 6% (65%)

PET1: 34% (88%)

PET2: 15% (88%)

【0109】

従って、この第1の選択肢の結果、誤り率を次元縮小単独によって向上させることができる。

40

【0110】

本発明の別の実施形態に対応する第2の選択肢として、このようなPCA係数 M_{PCA} (上述のように計算される)を、方法10で得られる補正スペクトル

【数41】

$$\hat{A}_s$$

に適用する。

【0111】

従って、本発明の態様は、測定の複数の波長 i (i は、1と m との間である)をより

50

少数の変数 μ_1 、 μ_2 、 μ_3 に減少させるために、主成分分析 P C A に基づいて補正サンプルスペクトル

【数 4 2】

$$\hat{A}_s(\lambda)$$

を構造化して、構造化補正サンプルスペクトル

【数 4 3】

$$\hat{A}_{str}(\mu)$$

10

を生成するステップ 1 4 0 を含む方法 1 0 である。図 1 0 の例は、式 (5) の特定の実施形態を例示する。

【数 4 4】

$$\hat{A}_s$$

を構造化する追加ステップ 1 4 0 を、図 1 0 にも例示するステップ 1 5 0 で実行される改造特性評価モデル C M i m p を用いた特性評価方法 4 0 0 に含んでもよい。

【 0 1 1 2】

例えば、特性評価モデルは、分類又は定量化モデルであってもよい。

20

【 0 1 1 3】

図 1 1 は、ステップ 2 5 5 で実行される改造分類モデル C l M i m p を用いた分類方法 5 0 0 に含まれる

【数 4 5】

$$\hat{A}_s$$

を構造化する追加ステップ 1 4 0 を例示する。

【 0 1 1 4】

図 1 2 は、ステップ 3 5 5 で実行される改造定量化モデル Q M i m を用いた定量化方法 6 0 0 に含まれる

30

【数 4 6】

$$\hat{A}_s$$

を構造化する追加ステップ 1 4 0 を例示する。

【 0 1 1 5】

粉末の例において、次元縮小 (P C A) と組み合わせて式 (2) の補正を適用することによって、即ち、

【数 4 7】

$$\gamma=1$$

40

を用いて包装体スペクトルを引くことによって、誤り率は下記のようにになる (下記の表 1 も参照) 。

P E 1 : 2 %

P E 2 : 5 %

P E T 1 : 3 5 %

P E T 2 : 1 4 %

【 0 1 1 6】

P C A と組み合わせて「疑似補正」スペクトルを生成するのに式 (2)

【数 4 8】

$$(\gamma=1)$$

を適用しても、PCA 単独と比べて誤り率は向上しない。

【0 1 1 7】

しかし、推定係数

【数 4 9】

$$\hat{\gamma}$$

を使用することによって得られる改良スペクトル

10

【数 5 0】

$$\hat{A}_s$$

に PCA を適用することによって、誤り率は大幅に減少する。

【0 1 1 8】

粉末の分類の例において、上述の方法によって式 (5) を適用して

【数 5 1】

$$\hat{\gamma}$$

を推定することによって、下記の結果が得られる (表 1 参照)。

20

【0 1 1 9】

【表 1】

半透明材料 P	PCA + 式(5) ($\hat{\gamma}$) 誤り率	PCA + 式(2) ($\gamma=1$) 誤り率	PCA 単独 誤り率	初期 誤り率
PE1	0%	2%	2%	75%
PE2	4%	5%	6%	65%
PET1	15%	35%	34%	88%
PET2	10%	14%	15%	88%

30

表 1

【0 1 2 0】

上述の

【数 5 2】

$$\gamma=1$$

を用いて得られる結果と比較することによって、推定係数

【数 5 3】

40

$$\hat{\gamma} (\hat{\gamma} \neq 1)$$

の使用によるスペクトルの補正と補正スペクトルの PCA による構造化との組み合わせにより、非常に低い誤り率の回復を可能にする非常に強力な処理が得られ、その結果、測定中に阻害材料 P の存在に対して特性評価モデルを強固にすることが分かる。

【0 1 2 1】

ここで、測定スペクトル A_{S+P} のスペクトルエネルギー E_{S+P} と推定係数

【数 5 4】

$$\hat{\gamma}$$

50

との間の関係 R を決定する方法を、図 13 で説明して例示する。

【数 5 5】

$$R: \hat{\gamma} = f(E_{s+p})$$

【0 1 2 2】

開始点は、特性評価モデルを開発するのに使用される参照サンプルのデータベース DB の実現である。このデータベースは、参照サンプル S_j の測定スペクトル $A_s(j)$ (但し、 $j = 1 \sim m$) を含む。

【0 1 2 3】

第 1 のステップでは、 j 個のサンプル S_j の中の k 個のサンプル S_k ($k < j$) を、特定の基準で選択する。選択されたサンプルに対して、既知の化学的性質の半透明材料 P を通る測定スペクトル $A_{s+p}(k)$ における参照サンプル S_k を実行する。

【0 1 2 4】

第 2 のステップでは、各 k に対して、対応するスペクトルエネルギー $E_{s+p}(k)$ を、積分によって決定する。

【0 1 2 5】

第 3 のステップでは、各 k [$A_{s+p}(k)$ 、 $E_{s+p}(k)$] に対して、一方の側の

【数 5 6】

$$A_{s+p}(k) - \gamma A_p$$

と他方の側の $A_s(k)$ との間の誤りを最小化する最適化係数

【数 5 7】

$$\gamma_{opt}(k)$$

を決定する。それらのサンプル S_k に対して、 A_{s+p} 及び A_s の両方が既知であるので、この計算を実行することができる。

【0 1 2 6】

好ましくは、下記のように、 $\gamma_{opt}(k)$ は、 $RMSE(k)$ を最小化する。

【数 5 8】

$$\gamma_{opt}(k) = \underset{\gamma \in [0;2]}{\operatorname{argmin}} \{RMSE(k, \gamma)\} \quad (12)$$

但し、

【数 5 9】

$$RMSE(k, \gamma) = \sqrt{\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \{[A_{s+p}(k) - \gamma A_p](\lambda_i) - A_s(k)(\lambda_i)\}^2} \quad (13)$$

【0 1 2 7】

第 4 のステップでは、座標 $\{E_{s+p}(k), \gamma_{opt}(k)\}$ を有する P_k を用いた曇り点 P_k を考慮する。この曇り点は、特定の数のサンプルに対して最適化係数とスペクトルエネルギーとの間の関連の画像を与える。一般法則を得るために、補間によって、関係

【数 6 0】

$$R: \hat{\gamma} = f(E_{s+p})$$

10

20

30

40

50

を決定する。この関係は、方法 10 のステップ 120 で使用される所定の関係を構成する。

【0128】

この方法により、測定を誤る材料 P の影響を表す、実際の測定に基づく法則を定めることができ、従って、推定係数

【数 6 1】

$$\hat{\gamma}$$

によってこのような影響を補正することができる。

【0129】

図 14 は、粉末の例で得られる曇り点を例示し、図 14 a は、半透明材料として P E の場合を例示し、図 14 b は、材料 P として P E T の場合を例示する。

【0130】

回帰モデルを得るために、所与の包装体を用いた各タイプの粉末（分類モデルに対して考慮された、8 つの異なるタイプの粉末）に対して 30 個の測定値をとっている。図 14 a 及び図 14 b 上の各点は、各粉末の各測定値の { E、 } 座標に対応する（各回帰プロットに対して 240 点）。

【0131】

図 14 a 及び図 14 b に例示する場合、補間によって決定された関数 R は、下記のように、線形である。

【数 6 2】

$$\hat{\gamma} = aE_{s+p} + b \quad (14)$$

【0132】

別の態様によれば、本発明は、図 15 に例示する、サンプル S を特性評価する特性評価デバイス 50 に関する。

【0133】

デバイスは、半透明材料 P を通して実行されるサンプル S の測定スペクトル A_{s+p} と、半透明材料の測定スペクトル A_p とを記憶するメモリ MEM を含む。このスペクトル A_p を、サンプルスペクトルと同じような方法で行われる測定によって得てもよく、又は半透明材料の化学的タイプが既知である限りにおいてデータベース DBP から入手してもよい。

【0134】

デバイス 50 は、

- 半透明材料 P を通るサンプルの測定スペクトル A_{s+p} のスペクトルエネルギー E_{s+p} から係数

【数 6 3】

$$\hat{\gamma}$$

を推定し、

- 半透明材料を通るサンプルの測定スペクトル A_{s+p} と、半透明材料の補正スペクトル

【数 6 4】

$$\hat{A}_p$$

とから、サンプルの補正スペクトル

【数 6 5】

$$\hat{A}_s$$

を決定する

10

20

30

40

50

ように構成されている処理ユニット P U を更に含む。

【 0 1 3 5 】

半透明材料の補正スペクトル

【 数 6 6 】

$$\hat{A}_p$$

を、半透明材料の測定スペクトル A_p と、推定係数

【 数 6 7 】

$$\hat{\gamma}$$

10

とから決定する。

【 0 1 3 6 】

サンプルの補正スペクトル

【 数 6 8 】

$$\hat{A}_s$$

は、サンプルの分類、又はサンプルに存在する化合物の分類又は定量化のために使用されるように意図されている。

【 0 1 3 7 】

図 1 6 に例示する特定の実施形態において、特性評価デバイス 5 0 は、サンプルの補正スペクトル

20

【 数 6 9 】

$$\hat{A}_s$$

を入力として用いた、参照データベース D B から開発されている特性評価モデル C M を実行するように構成されているモデル化ユニット M U を更に含む。モデル化ユニットは、サンプルの分類、又はサンプルに存在する化合物の分類又は定量化を送出する。

【 0 1 3 8 】

図 1 7 に例示するように、特性評価デバイス 5 0 は、データ構造化モジュール D S M を更に含む。D S M は、構造化補正サンプルスペクトル

30

【 数 7 0 】

$$\hat{A}_{str}$$

を生成するために、P C A などの主成分分析に基づいて補正サンプルスペクトル

【 数 7 1 】

$$\hat{A}_s$$

を構造化するように構成されている。この構造化により、測定の複数の波長 i が、より少数の変数（例えば、 μ_1 、 μ_2 、 μ_3 ）に減少する。

【 0 1 3 9 】

40

構造化補正サンプルスペクトル

【 数 7 2 】

$$\hat{A}_{str}$$

は、

【 数 7 3 】

$$\hat{A}_{str}$$

の構造化を考慮して、参照データベース D B から開発されている改良特性評価モデル C M $i m p$ の入力である。

50

【 0 1 4 0 】

別の態様によれば、本発明は、図 1 8 a に例示するような分光光度計 S p e c t r o に関する。分光光度計は、

- 測定デバイス M e D であって、

- 特性評価すべきサンプル S を照明するように構成されている光源 L S であって、サンプルを、半透明材料 P を通して照明する光源 L S (光源は、レーザ又はランプであってもよい) と、

- サンプルから反射される光又はサンプルによって透過される光を検出するように構成されている検出器 D と、

- サンプルを照明する測定入射光源と、サンプルによる反射 / 透過光とから、前記サンプルの測定スペクトル A_{S+P} を生成するように構成されている計算モジュール 5 0 1 (計算モジュールは、前処理を含んでもよい) と

を含む測定デバイス M e D と、

- 図 1 5 ~ 図 1 7 に例示するような特性評価デバイス 5 0 とを含む。

10

【 0 1 4 1 】

従って、本発明による分光計 S p e c t r o は、測定を低下させることがある材料 P を通るサンプル S のスペクトルを測定して、測定中に材料 P が存在するにもかかわらず、サンプルの正確な特性評価を実行することができる。

【 0 1 4 2 】

一実施形態において、光源 L S、検出器 D 及び計算モジュールを用いて、半透明材料のスペクトル A_P を、サンプルと同じような方法で測定する。この場合、半透明材料の化学的タイプを知る必要がない。

20

【 0 1 4 3 】

別の実施形態において、半透明材料 P の化学的タイプを同定し、図 1 8 b に示すように S p e c t r o に含まれる、又は異なる要素に設置されることができる、材料データベース D B P から、スペクトル A_P をロードする。

【 0 1 4 4 】

上述の実施形態は、単に限定されない例であることが分かる。特に、測定デバイス M e D、特性評価デバイス 5 0 及び材料データベース D B P を、異なる要素に設置して、任意の組み合わせで一緒に使用してもよい。

30

【 0 1 4 5 】

実施形態において、図 1 9 に例示するように、M e D を、入出力インターフェース 7 0 3 を介してコンピュータ C o m p にリンクし、特性評価デバイス 5 0 及び材料データベース D B P を、コンピュータに設置してもよく、計算モジュール 5 0 1 の一部を、特性評価デバイスに設置してもよい。

【 0 1 4 6 】

別の実施形態において、図 2 0 に例示するように、特性評価デバイス 5 0 及び / 又は材料データベース D B P を、インターネット 7 5 を介してコンピュータ C o m p の通信サブシステム 7 2 0 にリンクされた遠隔サーバ 7 6 に設置してもよい。

40

【 0 1 4 7 】

開示方法 1 0、2 0 0、3 0 0、4 0 0、5 0 0、6 0 0 は、全部ハードウェアの実施形態 (例えば、F P G A)、全部ソフトウェアの実施形態 (例えば、本発明によるデバイスを制御する実施形態)、又はハードウェア及びソフトウェア要素の両方を含む実施形態の形をとることができる。ソフトウェアの実施形態は、ファームウェア、常駐ソフトウェア、マイクロコードなどを含むが、これらに限定されない。本発明は、コンピュータ又は命令実行システムで用いる、又はコンピュータ又は命令実行システムと接続して、プログラムコードを提供するコンピュータが使える又はコンピュータが読める媒体からアクセス可能なコンピュータプログラム製品の形をとることができる。

【 0 1 4 8 】

50

コンピュータが使える又はコンピュータが読める実施形態は、命令実行システム、装置又はデバイスで用いる、又は命令実行システム、装置又はデバイスと接続して、プログラムを含む、記憶する、通信する、伝搬する、又は移送することができる任意の装置であることができる。媒体は、電子、磁気、光学、電磁、赤外線、又は半導体システム（又は、装置又はデバイス）、又は伝搬媒体であることができる。

【0149】

幾つかの実施形態において、ユーザデバイスによって、ここに記載の方法を全部又は一部実行してもよい。これらの方法及び処理を、コンピュータアプリケーションプログラム又はサービス、アプリケーションプログラミングインターフェース（API）、ライブラリ、及び/又は他のコンピュータプログラム製品、又はこのようなエンティティの任意の組み合わせによって実行してもよい。

10

【0150】

ユーザデバイスは、スマートフォン又はタブレットなどの携帯デバイス、ロボット又は他の接続デバイスなどの処理機能を有するコンピュータ又は任意の他のデバイスであってもよい。

【0151】

図21は、本発明の実施形態の実行に適した一般的な計算システムを示す。図21に示すように、システムは、論理デバイス701及び記憶デバイス702を含む。システムは、表示サブシステム711、入力サブシステム712、713、714、通信サブシステム720、及び/又は他の構成要素（図示せず）を任意選択的に含んでもよい。

20

【0152】

論理デバイス701は、命令を実行するように構成されている1つ又は複数の物理デバイスを含む。例えば、論理デバイス701は、1つ又は複数のアプリケーション、サービス、プログラム、ルーチン、ライブラリ、オブジェクト、構成要素、データ構造体、又は他の論理構成体の一部である命令を実行するように構成されてもよい。このような命令を実行して、タスクを行い、データタイプを実行し、1つ又は複数の構成要素の状態を変換し、技術的效果を達成し、又は別の方法で所望の結果に達してもよい。

【0153】

論理デバイス701は、ソフトウェア命令を実行するように構成されている1つ又は複数のプロセッサを含んでもよい。追加として又は代わりに、論理デバイスは、ハードウェア又はファームウェア命令を実行するように構成されている1つ又は複数のハードウェア又はファームウェア論理デバイスを含んでもよい。論理デバイスのプロセッサは、シングルコア又はマルチコアであってもよく、プロセッサ上で実行される命令は、順次、並列、及び/又は分散処理用に構成されてもよい。任意選択的に、論理デバイス701の個々の構成要素を、協調処理用に遠隔で設置及び/又は構成されることがある、2つ又は複数の分離デバイスの中で分散させてもよい。論理デバイス701の態様を、クラウド計算構成で構成されている遠隔でアクセス可能なネットワーク計算デバイスによって、仮想化して実行してもよい。

30

【0154】

記憶デバイス702は、ここに記載の方法及び処理を実行する論理デバイスによって実行可能な命令を保持するように構成されている1つ又は複数の物理デバイスを含む。このような方法を実行する場合、記憶デバイス702の状態を変換してもよく、例えば、異なるデータを保持する。

40

【0155】

記憶デバイス702は、取り外し可能及び/又は組み込みデバイスを含んでもよい。記憶デバイス702は、光メモリ（例えば、CD、DVD、HD-DVD、ブルーレイディスクなど）、半導体メモリ（例えば、RAM、EPROM、EEPROMなど）、及び/又は磁気メモリ（例えば、ハードディスクドライブ、フロッピーディスクドライブ、テープドライブ、磁気RAMなど）などを含む1つ又は複数のタイプの記憶デバイスを含んでもよい。記憶デバイスは、揮発性、不揮発性、動的、静的、読み書き、読み取り専用、ラ

50

ランダムアクセス、順次アクセス、位置アドレス可能、ファイルアドレス可能、及び／又は内容アドレス可能デバイスを含んでもよい。

【0156】

特定の構成において、システムは、論理デバイス701と他のシステム構成要素との間の通信を支援するように適合されている入出力インターフェース703を含んでもよい。例えば、追加のシステム構成要素は、取り外し可能及び／又は組み込み拡張記憶デバイスを含んでもよい。拡張記憶デバイスは、光メモリ732（例えば、CD、DVD、HD-DVD、ブルーレイディスクなど）、半導体メモリ733（例えば、RAM、EPROM、EEPROM、FLASHなど）、及び／又は磁気メモリ731（例えば、ハードディスクドライブ、フロッピーディスクドライブ、テープドライブ、磁気RAMなど）などを
10
含む1つ又は複数のタイプの記憶デバイスを含んでもよい。このような拡張記憶デバイスは、揮発性、不揮発性、動的、静的、読み書き、読み取り専用、ランダムアクセス、順次アクセス、位置アドレス可能、ファイルアドレス可能、及び／又は内容アドレス可能デバイスを含んでもよい。

【0157】

記憶デバイスは、1つ又は複数の物理デバイスを含み、伝搬信号自体を除くことが分かる。しかし、代わりに、ここに記載の命令の態様を、記憶デバイスに記憶されるのとは対照的に、通信媒体（例えば、電磁信号、光信号など）によって伝搬してもよい。

【0158】

論理デバイス701及び記憶デバイス702の態様を、1つ又は複数のハードウェア論理構成要素に一体化してもよい。このようなハードウェア論理構成要素は、例えばフィールド・プログラマブル・ゲート・アレイ（FPGA）、プログラム及び特定用途向け集積回路（ASIC/ASICs）、プログラム及び特定用途用標準品（SSP/ASSPs）、システムオンチップ（SOC）、複合プログラマブル論理デバイス（CPLDs）などを含んでもよい。

【0159】

用語「プログラム」を、特定の機能を果たすのに実行される計算システムの態様を記述するのに使用してもよい。場合によっては、プログラムを、記憶デバイスによって保持された機械可読命令を実行する論理デバイスを介してインスタンス化してもよい。異なるモジュールを、同じアプリケーション、サービス、コードブロック、オブジェクト、ライブラリ、ルーチン、アプリケーションプログラムインターフェース（API）、機能などから
30
インスタンス化してもよいものと理解される。同様に、同じプログラムを、異なるアプリケーション、サービス、コードブロック、オブジェクト、ルーチン、アプリケーションプログラムインターフェース（APIs）、機能などによってインスタンス化してもよい。用語「プログラム」は、個々又は群の実行可能ファイル、データファイル、ライブラリ、ドライバ、スクリプト、データベースレコードなどを含んでもよい。

【0160】

特に、図21のシステムを、本発明の実施形態を実行するのに使用してもよい。

【0161】

例えば、図5、図6、図7、図10、図11又は図12に記載のステップを実行するプログラムを、記憶デバイス702に記憶して、論理デバイス701によって実行してもよい。材料データベースDBP、所定の関係R、及び構造化に必要なPCA係数を、記憶デバイス702、又は拡張記憶デバイス732、733又は731に記憶してもよい。論理デバイスは、カメラ716又は近接場インターフェース721に、測定デバイスMeDに命令を送信して、特性評価すべきスペクトルの測定 A_{s+p} を進めさせてもよい。

【0162】

従って、本発明を、コンピュータプログラムの形で具体化してもよい。

【0163】

図22は、実施形態を構成するのに適合できるコンピュータデバイスCompを示す。図21に示すように、コンピュータデバイスは、上述のように、要素701、702、7
50

03、720、730、732、714、715、716を組み込む。コンピュータデバイスは、同じコンピュータデバイスに組み込まれてもよい周辺デバイスとしての要素717、712及び713、及びネットワーク75を介してサーバ76と通信している。一方、要素733、721及び74を省略し、要素711は、タッチスクリーン機能を有する、又は有しない通常のディスプレイである。

【0164】

多数の変型例が可能であるので、ここに記載の構成及び／又は手法は、実際に例示であり、これらの特定の実施形態又は例は、限定する意味で考慮されるべきではないものと理解される。ここに記載の特定のルーチン又は方法は、任意の数の処理戦略のうち1つ又は複数の処理戦略を表してもよい。そのようなものとして、例示及び／又は記載の様々な動作を、例示及び／又は記載の順序で、他の順序で、並行して実行してもよく、又は省略してもよい。同様に、上述の処理の順序を変更してもよい。

10

【0165】

本開示の主題は、ここに開示の様々な処理、システム及び構成、及び他の特徴、機能、動作及び／又は特性の全ての新規で非自明な組み合わせ及び小さい組み合わせ、更にこれらのありとあらゆる均等物を含む。

【0166】

別の態様では、本発明は、特許請求の範囲に記載の方法のステップを実行するように適合されているコンピュータプログラムに関する。別の態様では、本発明は、コンピュータプログラムを組み込むコンピュータ可読媒体に関する。

20

【符号の説明】

【0167】

- 10 方法
- 50 特性評価デバイス
- 74 要素
- 75 インターネット
- 76 サーバ
- 100 第1のステップ
- 110 第2のステップ
- 115 第3のステップ
- 120 第4のステップ
- 130 ステップ
- 140 ステップ
- 150 ステップ
- 200 方法
- 250 ステップ
- 255 ステップ
- 300 方法
- 350 ステップ
- 355 ステップ
- 400 特性評価方法
- 500 分類方法
- 501 計算モジュール
- 600 定量化方法
- 701 論理デバイス
- 702 記憶デバイス
- 703 入出力インターフェース
- 711 表示サブシステム
- 712、713、714 入力サブシステム
- 716 カメラ

30

40

50

7 2 0 通信サブシステム
 7 2 1 近接場インターフェース
 7 3 1 磁気メモリ
 7 3 2 光メモリ
 7 3 3 半導体メモリ
 S サンプル
 P 半透明材料
 M E M メモリ
 P U 処理ユニット
 M U モデル化ユニット
 C M 特性評価モデル
 C M i m p 改良特性評価モデル
 D S M データ構造化モジュール
 S p e c t r o 分光光度計
 M e D 測定デバイス
 L S 光源
 D 検出器

10

【図 1】

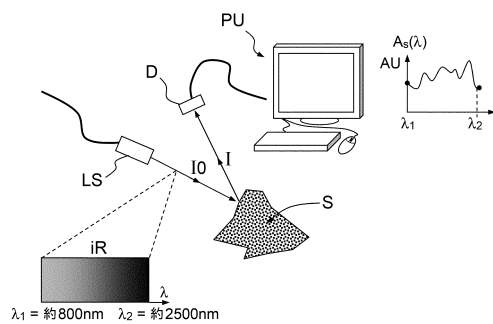


図 1

【図 3 a】

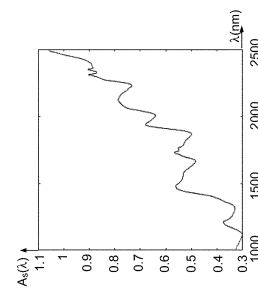


図 3a

【図 3 b】

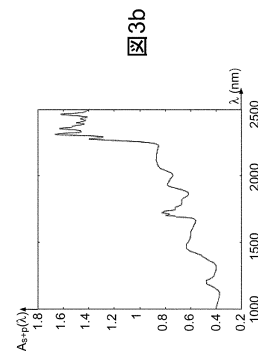


図 3b

【図 2】

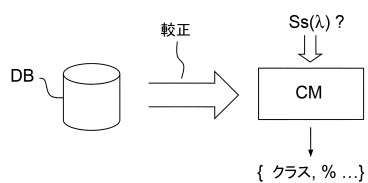
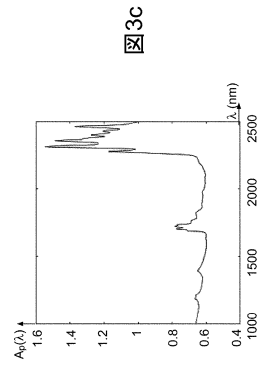
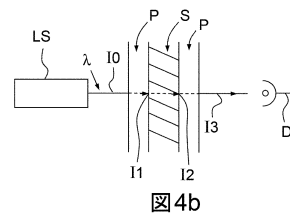


図 2

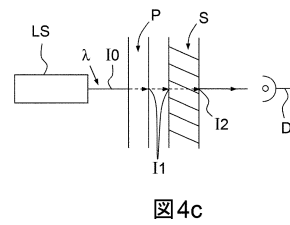
【図3c】



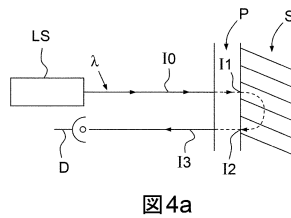
【図4b】



【図4c】



【図4a】



【図5】

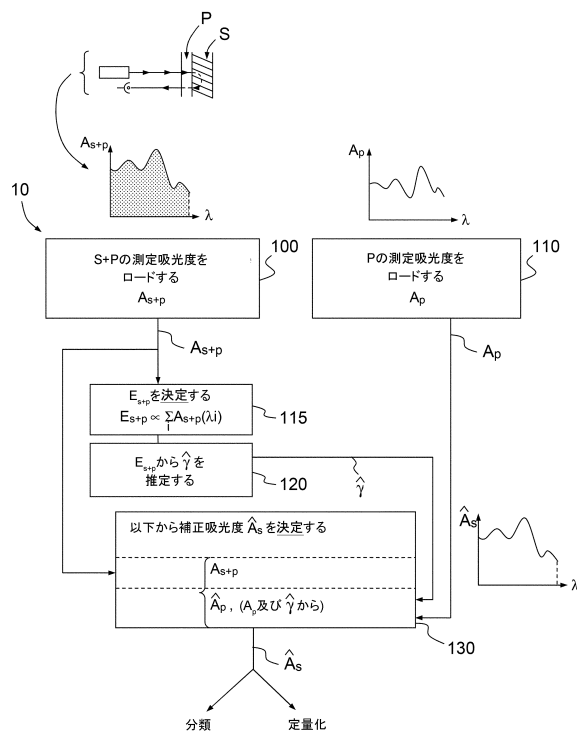


図5

【図6】

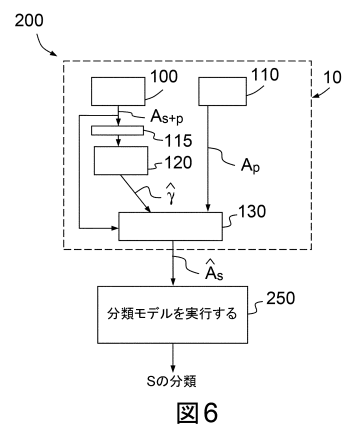


図6

【図 7】

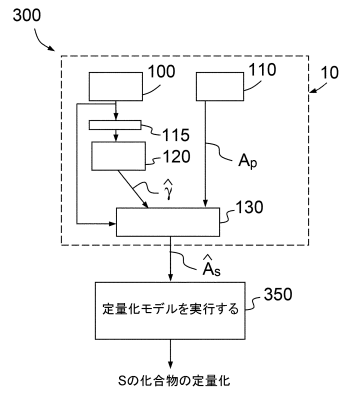


図 7

【図 8 - 1】

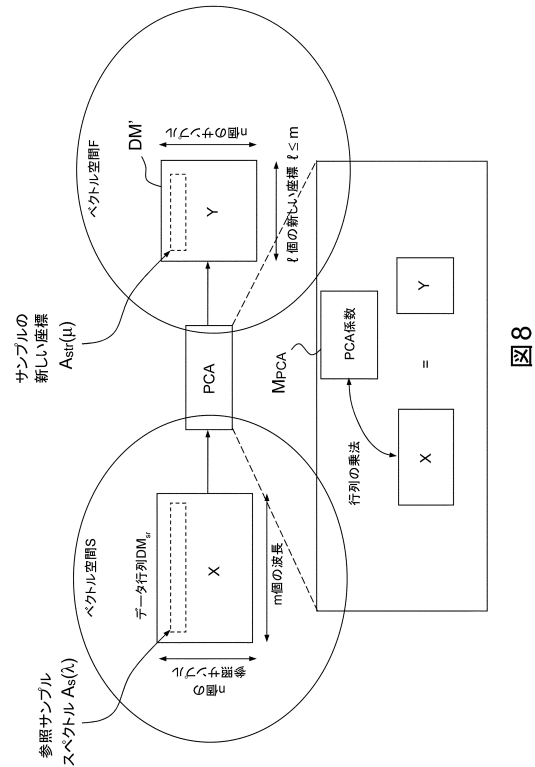


図 8

【図 8 - 2】

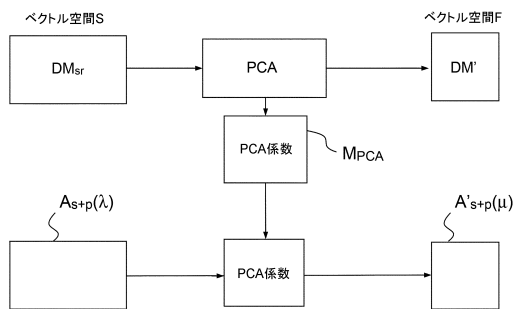


図8-2

【図 9】

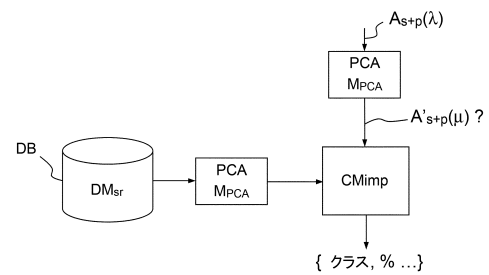
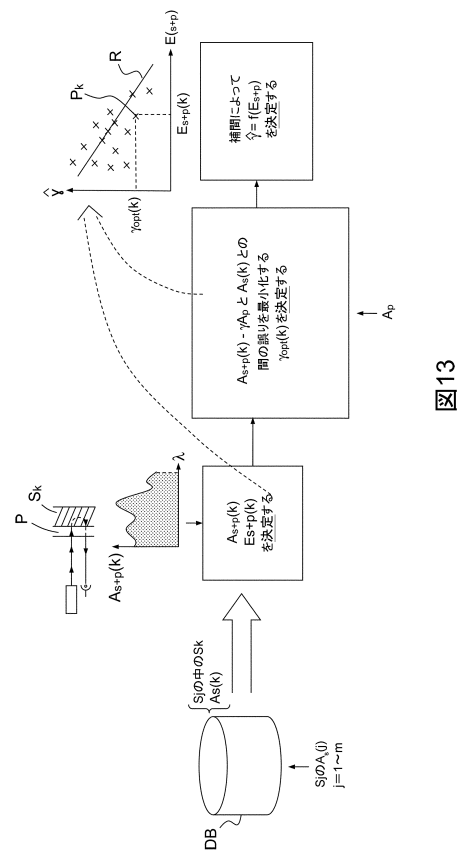


図9

【 図 1 1 】



【 図 1 3 】



【図14a】

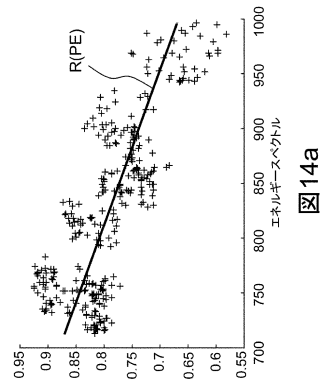


図14a

【図15】

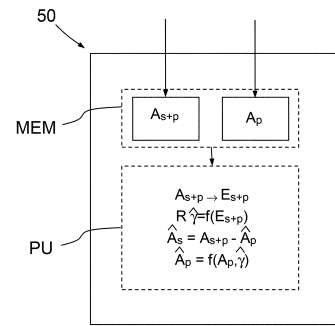


図15

【図14b】

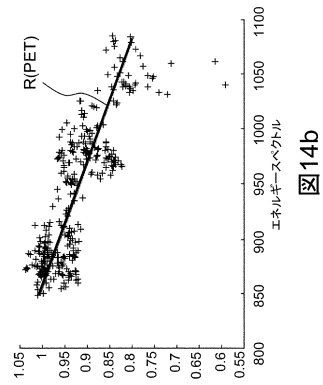


図14b

【図16】

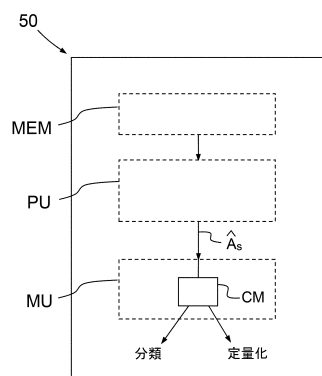


図16

【図17】

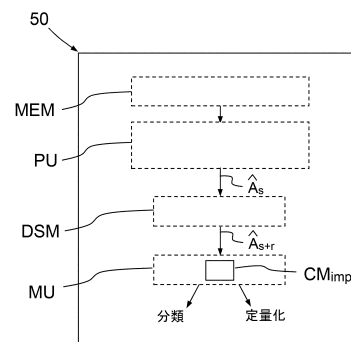


図17

【図18a】

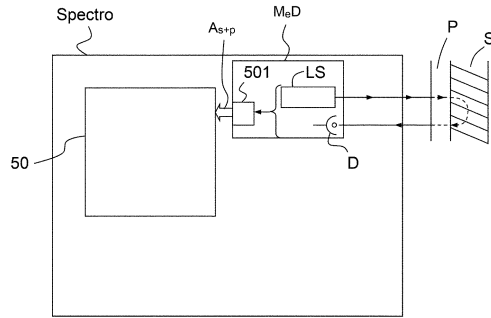


図18a

【図18b】

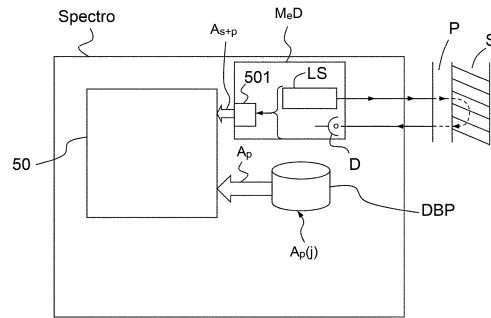


図18b

【図19】

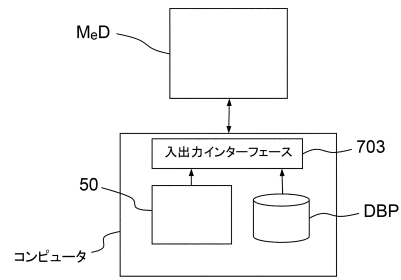


図19

【図20】

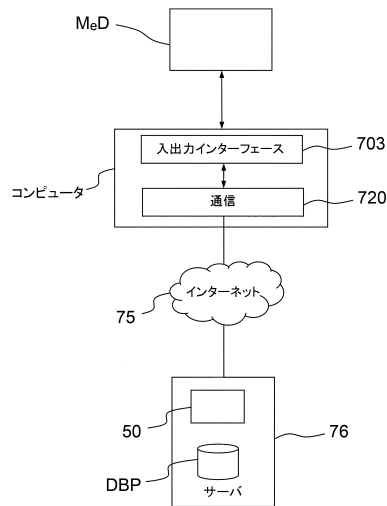


図20

【図21】

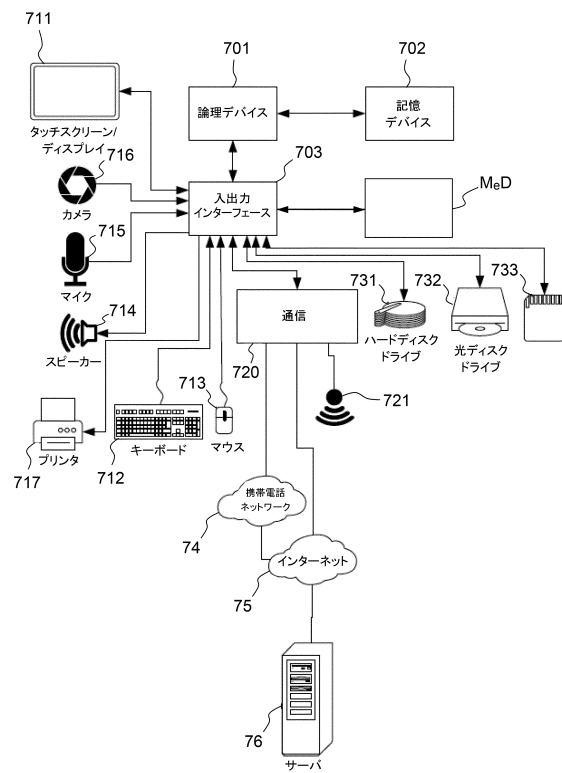
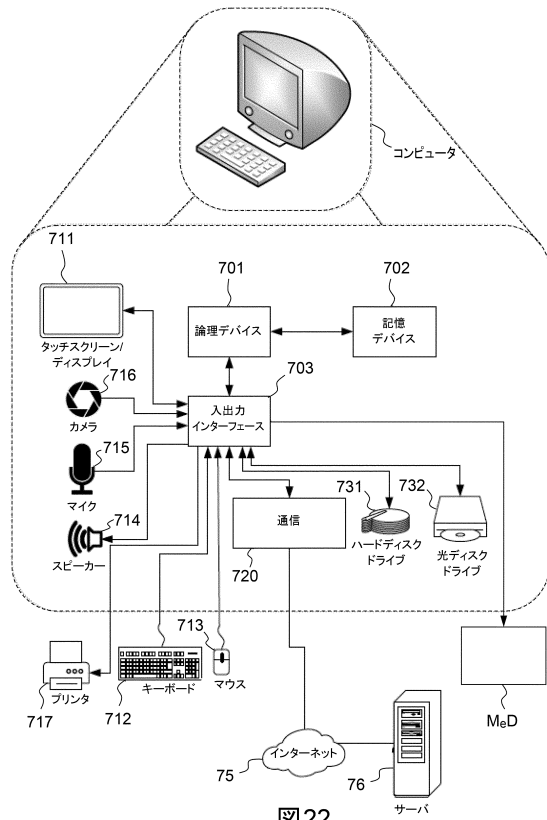


図21

【図 22】



フロントページの続き

(72)発明者 アンソニー・ブーランジェ

フランス国、75116・パリ、リュ・コペルニック・58

審査官 嶋田 行志

(56)参考文献 米国特許出願公開第2009/0321646(US, A1)

米国特許第05614718(US, A)

特開平08-210973(JP, A)

米国特許第05510621(US, A)

特開2015-057591(JP, A)

特開2012-020130(JP, A)

特開平11-352057(JP, A)

米国特許第06122052(US, A)

特表2012-515630(JP, A)

特表2013-537307(JP, A)

特開2016-202975(JP, A)

国際公開第2016/139649(WO, A2)

Influence of packaging in the analysis of fresh-cut *Valerianella locusta* L. and Golden Delicious apple slices by visible-near infrared and near infrared spectroscopy, Journal of Food Engineering, 2015年10月21日, Vol. 171, pp. 145-152, doi: 10.1016/j.foodeng.2015.10.021

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)

G01N 21/00 - 21/958

G01J 3/00 - 3/52

JSTPlus/JMEDPlus/JST7580(JDreamIII)