

# 光譜分析管理軟體升級與優化設計案

## 採購規格及特別條款

財團法人醫藥工業技術發展中心（以下稱本中心）辦理「光譜分析管理軟體升級與優化設計案」（以下稱本案）勞務採購，其採購規格及特別條款（下稱本條款）規定如下：

### 一、規格

#### （一）一般規定

1. 廠商應具執行製程分析開發相關專案經驗。
2. 廠商如有政府採購法第 101 條所列之情事，經刊登於政府採購公報者，依同法第 103 條規定之期限內，不得參加投標或作為決標對象或分包廠商。
3. 廠商應熟悉製藥產業 GMP 要求，並具實務經驗。
4. 本條款稱"以上"、"以下"、"以內"、"至少"、"高於"、"低於"者，俱含本數。

#### （二）執行期間

自本案簽約次日起至中華民國115年12月30日止。

#### （三）委託工作範圍

1. 本次設計顧問服務涵蓋十項新增功能設計：

##### （1）前提整合功能設計（2 項）

XPM 量測參數檔產生功能、BGK 背景掃描觸發功能

##### （2）分析化學計量功能設計（5 項）

PLS 完整定量模組、PCA 主成分分析模組、定性分析與光譜分類模組、異常光譜自動偵測與篩除、移動區塊歸零 — 批次啟動基線校正

##### （3）硬體連接與資料管理設計（1 項）

多光譜儀連接與資料擷取

##### （4）進階校準演算法設計（2 項）

校準模型建構用光譜模擬、IOT 迭代最佳化技術整合

#### 1.1 PRE-A XPM 量測參數檔產生功能

##### （1）功能說明

目標系統應內建產生 Bruker OPUS 實驗參數 (.xpm) 檔案之功能模組，使操作人員毋需切換至 OPUS 即可完成量測前置設定。

項次	內容
PRE-A-01	系統應提供專用 UI 面板，供設定所有標準 .xpm 參數，包含但不限於：解析度、掃描次數、掃描速度、偵測器。
PRE-A-02	系統應針對硬體限制進行參數有效性驗證，並在匯出前對無效組合顯示明確錯誤訊息。
PRE-A-03	系統應匯出符合 OPUS 格式之有效 .xpm 檔至使用者指定目錄。
PRE-A-04	系統應支援載入既有 .xpm 檔作為範本進行編輯。
PRE-A-05	參數設定應可命名儲存並從設定檔庫中載入。

(2) 驗收準則

- A. 系統產生之 .xpm 檔可在 Bruker OPUS 中無錯誤載入。
- B. 所有必要 OPUS 參數均正確呈現於匯出檔案。
- C. 無效參數組合於匯出前被阻擋，並顯示清楚的畫面提示。

1.2 PRE-B BGK 背景掃描觸發功能

(1) 功能說明

目標系統應能觸發連接光譜儀執行背景掃描，使操作人員可在單一介面內完成完整的量測前準備。

項次	內容
PRE-B-01	系統應在主量測介面提供「執行背景掃描」指令。
PRE-B-02	背景掃描應使用當前有效的 .xpm 參數集(或 PRE-A 中設定的參數)。
PRE-B-03	系統應即時顯示背景掃描狀態(閒置 / 執行中 / 完成 / 失敗)。
PRE-B-04	掃描成功完成後，背景干涉圖 / 光譜應自動儲存並套用於後續樣品量測。
PRE-B-05	每次背景掃描應在稽核日誌中記錄時間戳記。

(2) 驗收準則

- A. 背景掃描可完全在目標系統內啟動並完成，無需開啟 OPUS。

- B. 背景正確從後續樣品光譜中扣除。
- C. 掃描狀態更新即時可見。

### 1.3 FR-01 PLS 完整定量模組

#### (1) 功能說明：

現有定量模組應擴展為完整功能的 PLS 定量分析模組，支援建模、驗證、預測及報告輸出。

項次	內容
FR-01-01	系統應支援匯入參考光譜及對應濃度數值 (CSV / Excel 格式)。
FR-01-02	系統應執行 PLS 迴歸建模，參數可設定：潛在變數數量、光譜預處理選項 (SNV、MSC、一階 / 二階導數等)、波數區間選取。
FR-01-03	系統應實作交叉驗證，並報告 RMSECV 及最佳潛在變數數量。
FR-01-04	系統應支援多成分預測，在單次預測執行中同步估算所有建模分析物之濃度。
FR-01-05	系統應顯示並匯出校準集與驗證集之 RMSEP、偏差、斜率及 R2。
FR-01-06	預測結果應可匯出為 CSV 並可列印為格式化報告 (PDF 或紙本)。
FR-01-07	已建立之模型應可依名稱與版本儲存及重新載入，附帶建立日期及操作人員元資料。

#### (2) 驗收準則：

- A. PLS 模型可在目標系統內完成建立、交叉驗證及新樣品預測，無需切換至外部工具。
- B. RMSEP 與 R2 數值的報告與參考計算結果相符 (相對誤差 < 0.1%)。
- C. 多成分預測可在單次批次執行中完成。

### 1.4 FR-02 PCA 主成分分析模組

#### (1) 功能說明：

目標系統應納入 PCA 模組，用於探索性資料分析、製程監控及異常偵測。

項次	內容
FR-02-01	系統應對使用者選定的光譜資料集執行 PCA，主成分數量可設定。
FR-02-02	系統應顯示互動式 Score Plot (PC1 vs PC2 及使用者可選 PC 配對)，支援樣本標記及依使用者定義類別分組。
FR-02-03	系統應顯示每個主成分的 Loading Plot。
FR-02-04	系統應計算並顯示 Hotelling's T2 管制限，標記超過設定信賴限 (預設 95%) 的樣本。
FR-02-05	系統應計算並顯示 Q 殘差 (SPE) 統計，標記超過 Q 限的樣本。

(2) 驗收準則

Score Plot、Loading Plot、T2 及 Q 圖表經參考資料集驗算，結果與驗證工具一致。

1.5 FR-03 定性分析與光譜分類模組

(1) 功能說明：

目標系統應提供定性鑑別功能，涵蓋光譜比對及監督式多變量分類。

項次	內容
FR-03-01	系統應支援建立及管理光譜參考資料庫 (新增、編輯、刪除、匯入)。
FR-03-02	系統應使用 HQI 評分 (相關係數) 對所有條目執行搜尋，並回傳排序後的命中清單。
FR-03-03	系統應支援使用下列至少一種演算法進行監督式分類(使用者可選擇): (a) 線性判別分析 (LDA) (b) SIMCA (類比較分類) (c) 支援向量機 (SVM)
FR-03-04	分類結果應包含類別歸屬及對應的信心評分或距離指標。
FR-03-05	系統應允許設定 HQI 閾值，低於閾值的樣本報告為「無匹配 / 未分類」。
FR-03-06	分類模型之儲存與重新載入方式應與 PLS 模型一致 (FR-01-07)。

(2) 驗收準則

A. 圖書館搜尋對已知參考樣品回傳正確的最高命中，HQI  $\geq 0.95$ 。

B. 監督式分類器在驗收測試提供的保留測試集達到正確類別歸屬。

C. 低於閾值的未分類樣品在結果中清楚標記。

#### 1.6 FR-04 異常光譜自動偵測與篩除

##### (1) 功能說明

自動化批次擷取期間，目標系統應自動偵測低品質或異常光譜，並在不中斷批次或刪除資料的情況下處理。

項次	內容
FR-04-01	系統應依可設定的品質準則評估每條擷取光譜，包含：信噪比閾值及 / 或與批次均值的馬氏距離。
FR-04-02	判定為異常的光譜應在資料儲存庫中自動旗標，並附標籤（如「OUTLIER - 低 SNR」、「OUTLIER - 統計」）。
FR-04-03	旗標光譜應保留於資料庫，不自動刪除。
FR-04-04	旗標光譜應從即時分析計算（如 PLS 預測趨勢）中排除，除非授權操作人員手動重新納入。
FR-04-05	操作人員應能審閱旗標光譜、覆蓋異常狀態（接受或拒絕）並新增評論。
FR-04-06	所有異常事件應在稽核日誌中記錄，含光譜 ID、時間戳記、原因及操作人員覆蓋記錄。

##### (2) 驗收準則

A. 在包含刻意劣化光譜的測試批次中，所有注入的異常均被旗標並排除；所有正常光譜均被納入計算。

B. 批次執行期間不自動刪除任何光譜。

C. 手動覆蓋異常狀態後立即反映於後續計算。

#### 1.7 FR-05 移動區塊歸零 — 批次啟動基線校正

##### (1) 功能說明

現有移動區塊即時分析功能在觸發新批次時呈現非零基線偏移。應新增可選的操作人員觸發歸零功能，在批次開始時重設此偏移。

項次	內容
FR-05-01	系統應在移動區塊監控介面上顯示可選的「基線歸零」按鈕，於有效工

項次	內容
	作階段期間隨時可見。
FR-05-02	啟動「基線歸零」後，系統應擷取當前移動區塊輸出值，並作為補正偏移套用於該批次後續所有資料點。
FR-05-03	歸零動作僅套用於當前批次工作階段，不永久修改已儲存的光譜資料。
FR-05-04	系統應在監控圖表上並列顯示補正後及未補正的趨勢值(雙軌跡選項)。
FR-05-05	歸零事件應記錄於批次報告，含時間戳記及歸零前偏移值。

(2) 驗收準則

- A. 按下「基線歸零」後，即時趨勢值重設為零，後續值反映補正偏移。
- B. 歸零前的歷史資料點在資料庫中保持不變。
- C. 雙軌跡顯示正確呈現補正值與原始值。

1.8 FR-06 多光譜儀連接與資料擷取

(1) 功能說明：

目標系統應支援同步連接及操作多台光譜儀，並提供集中掃描排程及統一資料儲存庫。

項次	內容
FR-06-01	系統應支援同時連接至少二(2)台光譜儀(可透過設定擴展)。
FR-06-02	系統應提供設備管理面板，列出所有已連接光譜儀及其狀態(已連線 / 忙碌 / 閒置 / 錯誤)。
FR-06-03	系統應提供集中擷取佇列，允許操作人員將量測任務指定給特定光譜儀或下一台可用光譜儀。
FR-06-04	所有光譜儀擷取的資料應儲存於單一統一資料儲存庫，光譜儀 ID 為必填元資料欄位。
FR-06-05	系統應支援對多台光譜儀同步執行背景掃描，不阻塞擷取佇列。
FR-06-06	批次執行期間若光譜儀斷線，系統應記錄錯誤、僅暫停該光譜儀的任務，並繼續處理其他已連線光譜儀的任務。

(2) 驗收準則

- A. 驗收測試中演示至少兩(2)台實體光譜儀的同步擷取。

- B. 每台光譜儀的資料在儲存庫中正確標記光譜儀 ID。
- C. 模擬光譜儀斷線時可優雅處理，不造成當機或停止其他有效擷取。

### 1.9 FR-07 校準模型建構用光譜模擬

#### (1) 功能說明

目標系統應提供光譜模擬工具，從純成分參考光譜合成虛擬混合光譜，以擴展校準模型訓練集的變異範圍。

項次	內容
FR-07-01	系統應接受一組純成分光譜及其對應濃度範圍作為輸入。
FR-07-02	系統應透過使用者定義的濃度網格或指定範圍內的隨機取樣，以線性疊加產生合成混合光譜。
FR-07-03	使用者應能設定生成的合成光譜數量及隨機種子（以確保可重現）。
FR-07-04	應支援可選的雜訊添加，雜訊類型（高斯 / 泊松）及振幅可設定，以模擬真實量測變異。
FR-07-05	生成的合成光譜及其對應濃度標籤應可匯出，格式與實際擷取光譜相同，以直接用於 PLS 建模（FR-01）。
FR-07-06	每次生成執行所使用的模擬參數及種子應與輸出資料集一併儲存，以確保可追溯性。

#### (2) 驗收準則

- A. 從已知純成分生成的合成光譜，加成誤差相對誤差 < 0.5%。
- B. 生成的資料集可直接匯入 PLS 建模模組，無需格式轉換。
- C. 可重現性：相同參數與種子產生相同輸出。

### 1.10 FR-08 IOT 迭代最佳化技術整合

#### (1) 功能說明

目標系統應整合 IOT(迭代最佳化技術，Anderson, Duquesne University) 方法論，以建立穩健且可跨儀器轉移的多變量校準模型。

項次	內容
FR-08-01	系統應實作 IOT 演算法用於多變量校準，接受純成分光譜及參考混合

項次	內容
	物光譜作為輸入。
FR-08-02	系統應對各成分貢獻進行迭代最佳化以最小化參考集的預測誤差；演算法停止條件可由使用人員設定。
FR-08-03	IOT 衍生模型應以與 PLS 預測相同的格式 (FR-01-06) 預測新樣品中分析物的濃度並報告結果。
FR-08-04	系統應支援模型轉移驗證：將在某台儀器建立的 IOT 模型套用於另一台儀器採集的資料 (結合 FR-06 多儀器架構)。
FR-08-05	IOT 模型檔案應可在目標系統內儲存、重新載入及版本管理。

## (2) 驗收準則

- A. IOT 模型達到設定停止條件後，預測效能達到與同一資料集上的 PLS 模型相當或更好的 RMSEP。
- B. 驗收測試中演示兩台光譜儀之間的模型轉移。

## 二、特別條款

### (一) 廠商同意：

1. 履行契約不得違反法令強制或禁止規定、公共秩序及善良風俗，對本中心經營、管理及客戶權益，不得有不利之影響，並應遵守個人資料保護法、營業秘密法及其他法令之規定。
2. 同意本中心、本中心主管機關或本中心委託獨立第三人進行辦理本案應辦事項之稽核。應提供本案之應辦事項相關資料或報告配合稽核，並於期限內提供相關資料或報告。
3. 因履行本案應辦事項所應負之損害賠償責任以直接實際損害為限，且其累計賠償總額以本案決標價金總額為上限。但有關人身傷害（包含死亡）、物之毀損、專利權及著作權之損害、廠商之故意或重大過失造成之損害賠償則不在此限。
4. 若有違反本案相關約定情事發生，除本條款另有約定外，本中心得於通知廠商後終止或解除本案契約，本中心於主管機關命為終止或解除本案契約時亦同。
5. 履行契約應辦事項，對外不得以本中心名義為之，亦不得進行不實廣告，若違反致本中心受損，應負賠償責任。
6. 本案應辦事項若有重大異常、缺失或發現疑似資訊安全或個人資料外洩等異常事件或事故時，應立即以口頭、電話等方式通知本中心，並配合本中心相關程序辦理異常排除及通報事宜。並於處理完成後，

提供相關報告。

7. 因履行本案應辦事項所知悉一切有關本中心及本中心客戶等相關資料及內容，僅得揭露於本案目的範圍內有接觸需要之本案廠商聘雇人員，廠商及其聘雇人員應保守秘密不得洩漏，並採取必要之安全措施，如致本中心遭受損害應由廠商負賠償責任；契約經終止、解除或期限屆滿後亦同。但該等資料已合法公開、非因廠商違約而為公眾所知悉，或依法令、司法機關裁判應予揭露者，不在此限。
8. 應於履約期間提供經公司簽章之人員名冊（含專案負責人及專案成員等）及該名冊中各人員簽署之「保密同意書」至本中心備查，且對其操守行為負責。
9. 廠商交付之各項設計文件（含圖紙、規格）、程式原始碼、分析成果報告與光譜資料應為合法，不得侵犯他人智慧財產權。除涉及廠商既有核心軟體與原始碼之著作財產權仍歸屬廠商所有外，本案因客製化需求所產出之各項智慧財產權，均歸屬本中心；針對廠商保留智慧財產權之部分，廠商應不可撤回且無償授權本中心於本案目的及業務範圍內，擁有永久、非專屬之完整使用與修改權。惟廠商於本案執行前已取得、獨立開發之智慧財產權或一般性技術知識（背景智慧財產權），仍歸屬廠商所有，但廠商應不可撤回地授權本中心於本案目的範圍內無償使用。如有第三者主張本中心使用該交付項目有侵犯智慧財產權時，本中心同意以書面通知廠商，廠商應負責為本中心提出抗辯或和解談判，所有經法院判決確定或成立和解應由本中心負擔之費用、損害賠償及本中心因此所支付之費用（含委聘律師酬金）、所受之損害等均由廠商負擔。
10. 不得將本案契約或基於本案契約所生之權利義務，全部或部分轉讓或複委託予其他第三人，但經本中心書面同意者不在此限。
11. 經本中心書面同意之複委託，其範圍、限制及條件均不得超出本案契約；廠商應確認分包商具備資訊安全措施、遵循本中心資訊安全管理制度並簽署保密協議，如因分包商之不當行為致本中心發生損害時，廠商應與分包商負連帶損害賠償責任。
12. 違反本中心資訊安全要求或因人員疏失等原因，導致發生資安事件時，應依本案契約所定罰則計付懲罰性違約金予本中心，若因此造成本中心相關損害，廠商應依本案契約內容負賠償責任。
13. 資訊安全責任：
  - (1) 若需存取或交換本中心資料，應遵守本中心相關之資料傳輸與安全管理規範。
  - (2) 本案履行期間結束或契約終止時，廠商應將相關資料返還予本中心或依本中心指示銷毀。

- (3) 不得任意複製或攜出本中心非對外公開之業務資料。本中心所提供之資訊、資產及資料等，廠商均應於本案契約終止、解除或期限屆滿時返還予本中心，並刪除或銷毀因執行本案契約而儲存持有之個人資料檔案，且不得以任何形式留存備份，廠商履行本案契約相關事務之資料處理流程及傳輸方式，應依本中心資料安全管控規定辦理。
14. 禁止使用中國廠牌資通訊產品、軟體（如應用軟體、系統軟體、開發工具、客製化套裝軟體、APP及電腦作業系統等）、硬體（包括具連網能力、資料處理或控制功能者皆屬廣義之資通訊設備）及資通訊服務。
15. 廠商及其聘雇人員因執行本案致本中心蒙受損害，廠商應與其聘雇人員負連帶賠償責任。
16. 應遵循相關法令法規及其他適當資訊安全國際標準。

(二) 履約期限及交付項目

項次	履約期限	交付項目	交付格式
1	115 年 7 月 31 日	1. 軟體需求規格書 (SRS)，應符合委託工作範圍所載。 2. 整合驗收測試規格書，包含可作為本案後續 UAT 執行依據之各功能模組驗收測試案例 (Test Cases) 清單。	紙本及電子檔均 1 式 2 份
2	115 年 11 月 30 日	1. 功能設計規格書 (FDS)，應符合委託工作範圍所載，且詳述各功能模組的操作流程、邏輯規則、邊界條件、錯誤處理及資料格式定義。 2. 軟體建構規格書，應符合委託工作範圍所載，且包含以下各功能模組的技術設計細節： (1) 元件設計 (Component Design) (2) 資料模型 (Data Model) (3) 演算法規格 (含數學公式、參數定義)、API / 介面規格 (含通訊協定定義)。	紙本及電子檔均 1 式 2 份

		3. 成果報告，應符合委託工作範圍所載，彙整本案全部設計文件，包含目錄、文件索引、版本歷程等。	
		4. 系統安裝程式及編譯後之可執行檔，包含相依套件與系統部署所需之相關檔案。	
		5. 系統操作與維護手冊。	

### (三) 驗收

1. 本中心依前項所載交付項目進行驗收。驗收應符合下述原則，廠商應派員配合本中心驗收人員，就交付項目內容提供必要之解說，以完成驗收程序；交付項目如應改正者，廠商應於14日內完成改正，並書面通知本中心辦理複驗。
  - (1) 成果應逐條對應規格需求，並提供佐證數據。
  - (2) 報告應包含研究方法、設計流程、模擬數據及測試比對等項目。
  - (3) 數據應需具備來源、日期及操作者等紀錄。
  - (4) 內容應符合 GMP 與國際規範，技術合理可行。
2. 文件格式應按符合以下要求：
  - (1) 字體：新細明體或標楷體，字號 12。
  - (2) 行距：1.5 倍行距。
  - (3) 圖表：需編號與標題，並於內文引用。
  - (4) 文件封面：需載明本案名稱、文件名稱、日期、版本號。
  - (5) 版本控管：需建立修訂紀錄表。

### (四) 付款

1. 第一期：本案契約簽署，廠商即按決標價金總額60%開立發票向本中心請款，本中心應於收受發票後，按發票日起30日內之付款條件，以轉帳或匯款方式給付。
2. 第二期：交付本條款「履約期限及交付項目」所載，經本中心驗收合格且無待解決事項，廠商即按決標價金總額40%開立發票向本中心請款，本中心應於收受發票後，按發票日起60日內之付款條件，以轉帳或匯款方式給付。

### (五) 保固

廠商應自本案全案驗收合格日起無償提供1年保固服務，服務項目包含：無償提供各項設計成果、圖紙、分析成果報告與光譜資料與軟體系統之技術諮詢、數據釋疑與錯誤更正服務。於保固期間內，若發現設計規格或軟體運作與本合約要求或相關法規不符之瑕疵，廠商應無償修正其設計文件並修復軟體程式錯誤（Bugs）以維持系統正常運作。除雙方另有議定時間外，服務時間為每週星期一至星期五（含行政院人事行政總處公告之補行班日）上午9時至下午6時。

（六） 本案廠商對本案契約內容充分瞭解，並依本中心之解釋切實執行辦理。

## 附件、資訊安全與服務水準協定（SLA）罰則

- 一、履約期間廠商未達本中心所定服務水準，除有不可抗力或不可歸責於廠商事由外，依本項約定計算懲罰性違約金（同一評估項目具有二種（含）以上之評斷方式者，如廠商同時違反二種（含）以上時，其違約金係採罰責較重者）。
- 二、廠商如未依本條款「履約期限及交付項目」所定期限交付各階段成果，每逾期一日，本中心得按決標價金總額千分之一計算懲罰性違約金。
- 三、廠商應將文件品質保證納入本案品質保證項目，嚴謹製作本案各項文件，包含版面及內容皆應嚴格要求一致性及正確性。交付之文件經本中心書面通知限期修訂，屆期仍未修訂完成者，每逾期一日，得按決標價金總額千分之一計算懲罰性違約金。
- 四、廠商違反資訊安全規範時，每違反1次，本中心得按決標價金總額千分之一計算懲罰性違約金。
- 五、廠商指定之專案負責人未經本中心同意不得更換之；其餘專案成員之更換，應以書面通知本中心備查。違反前述規定者，每次依決標價金總額千分之一計算懲罰性違約金。
- 六、前述各項懲罰性違約金之累計總額，以決標價金總額之20%為上限。如懲罰性違約金累計達決標價金總額之20%時，本中心得通知廠商終止或解除本案契約之部分或全部，且不補償廠商所生之損失。
- 七、廠商依各項應付之懲罰性違約金，本中心得自決標價金總額、履約保證金或保固保證金中扣抵。