

近紅外光譜採集與化學計量分析委託勞務案 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「近紅外光譜採集與化學計量分析委託勞務案」（以下稱本案）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. 廠商應具執行藥品分析方法開發相關專案經驗。
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. 本條款稱"以上"、"以下"、"以內"、"至少"、"高於"、"低於"者，俱含本數。

（二）本案執行期間

自本案決標次日起至中華民國115年12月30日止。

（三）委託工作範圍

1. 近紅外光譜資料採集與管理

1.1 光譜採集執行

- （1）本採集數量：廠商應對本中心提供之樣品採集近紅外光譜，共計 100 筆（張），每一樣品至少進行 3 次重複量測，並取平均光譜作為正式分析用資料。
- （2）採集條件一致性：同批次樣品之量測條件（環境溫濕度、積分時間、掃描次數、背景參考量測方式）應保持一致，並於採集記錄表中逐一載明。
- （3）儀器預熱：每次量測前儀器應依儀器廠商建議預熱至穩定狀態（至少 30 分鐘），方可開始採集。
- （4）背景（白色參考）量測：每採集 10 個樣品或每隔 1 小時（以先到者為準），應重新進行背景量測，確保儀器基準穩定；背景量測時間應記錄於採集記錄表。
- （5）採集記錄：廠商應完整填寫光譜採集記錄表（格式詳附件一），逐批記錄樣品編號、採集日期時間、儀器型號與編號、操作人員姓名、環境溫溼度，以及任何異常情形備註。

- (6) 本案測試完畢後，剩餘之樣品按本中心指示由廠商依相關法規妥善銷毀或返還予本中心，相關衍生費用已包含於本案報價中。

1.2 資料彙整

- (1) 光譜資料應以 CSV 或 JCAMP-DX 格式儲存，並依統一編號規則命名，建立結構清晰之專案資料夾（原始光譜、整理後光譜、分析結果各設獨立子資料夾）。
- (2) 若發現樣品不足或光譜採集異常（如儀器故障、樣品外觀異常），應於採集後 2 個工作日內書面通知本中心，並提出建議處置方式。

1.3 光譜管理建議

廠商完成採集後，應視資料品質狀況，必要時提出近紅外光譜系統化整理與資料管理之書面建議，內容包含但不限於：資料命名規則、儲存格式標準、長期保存建議。

2. 近紅外光譜雜訊抑制與前處理

2.1 基線校正

廠商應評估並選用適合本案光譜特性之基線校正方法，選用方法應至少涵蓋下列範圍之評估：

- (1) 標準正態變量法 (SNV, Standard Normal Variate)
- (2) 多元散射校正法 (MSC, Multiplicative Scatter Correction)
- (3) (3SNV 結合去趨勢處理 (SNV+Detrend))

廠商應提供至少 2 種方法之評估比較結果，以圖示呈現校正前後光譜差異，並於報告中說明最終選用方法之依據。

2.2 雜訊消除

廠商應評估並執行適當之平滑處理，方法包含但不限於 Savitzky-Golay (SG) 平滑，並於分析成果報告中明確載明所使用之視窗大小、多項式次數等參數設定，以及選用依據。

2.3 微分處理

廠商應依分析目的評估是否執行一階或二階微分；若執行，應於報告中載明微分階數、SG 參數設定，及選用之技術說明。

2.4 前處理組合選擇

廠商應系統性評估前處理方法組合(散射校正 × 平滑 × 微分) 之效果，以交叉驗證均方根誤差 (RMSECV) 為主要選擇依據，提供比較結果及最終選用結論。

2.5 前處理建議

廠商應視光譜資料品質，必要時提出適合本中心後續應用之前處理建議方案，說明不同應用場景下之最適前處理策略。

3. 近紅外光譜化學計量分析運算

3.1 主成分分析 (PCA)

- (1) 對完成前處理之光譜資料執行主成分分析 (PCA)，解釋光譜資料之整體變異結構。
- (2) 產出主成分得分圖 (Score Plot，至少 PC1 vs PC2) 及負荷量圖 (Loading Plot)。
- (3) 報告前 5 個主成分之解釋方差比例；前 3 個主成分之累積解釋方差原則上應達 70% 以上，若未達應說明原因。

3.2 離群樣品偵測

- (1) 以 Hotelling T^2 統計量及 Q 殘差 (光譜殘差) 識別離群樣品，信賴水準設定為 95%。
- (2) 列出離群樣品清單 (含樣品編號及離群類型)，並標記於得分圖上；若無離群樣品，應於報告中說明判定依據。

3.3 化學計量分析方法選用

廠商應依本中心之分析目標 (定性或定量)，選用適當之化學計量分析方法，並於分析成果報告中說明選用依據；必要時，提出適用之化學計量分析方法與技術建議。

4. 化學計量校正模型建構與驗證

4.1 訓練集與驗證集分割

- (1) 於 100 筆光譜中，以隨機分層抽樣 (Stratified Random Sampling) 方式分割訓練集 (至少 70 筆) 與外部驗證集 (至多 30 筆)；分割比例及方式應於分析成果報告中載明。
- (2) 分層依據應考量樣品批次及濃度分布，確保訓練集與驗證集之樣品特性具代表性。

4.2 校正模型建立

- (1) 以偏最小二乘法 (PLS-1) 建立定量校正模型為基本要求；廠商得視資料特性評估採用其他方法 (如 PCR、PLS-2)，並說明選用依據。

- (2) 透過 5-fold 交叉驗證決定最佳潛在變數數 (LVs)，以 RMSECV 最小值為選用基準，並以 F 檢定 (顯著水準 $\alpha=0.05$) 確認增加 LV 之顯著性。
- (3) 提供 RMSECV 對潛在變數數目之曲線圖，並說明最佳 LV 數選用依據。

4.3 模型效能指標

廠商應計算並報告下列效能指標，以訓練集及外部驗證集分別呈現：

項次	指標	說明	最低要求值	理想目標值
1	RMSEC	校正均方根誤差 (訓練集)	—	$\leq 0.5\%$
2	RMSECV	交叉驗證均方根誤差	RMSECV/RMSEC ≤ 2	≤ 1.5
3	RMSEP	外部驗證均方根誤差 (驗證集)	$\leq 1.5\%$	$\leq 0.8\%$
4	R ²	決定係數 (外部驗證集)	≥ 0.85	≥ 0.95
5	Bias	系統偏差 (外部驗證集)	$< \pm 0.5\%$	$< \pm 0.2\%$
6	RPD	穩健性比值 (SD/RMSEP)	≥ 3	≥ 5

4.4 效能評估圖

- (1) 預測值 vs 參考值散點圖 (含 45° 對角線，訓練集與驗證集以不同符號或顏色標示)。
- (2) 殘差圖 (預測殘差 vs 預測值)，含 $\pm 2\sigma$ 水平參考線。
- (3) VIP 分數圖 (Variable Importance in Projection)，標示重要波長區間。

4.5 模型改善建議

廠商應依模型效能結果，提出準確度及穩定性之分析結論，以及可能之改善建議 (如增加樣品數、調整前處理方式)；無論效能是否達理想目標值，均應提出。

5. 資料品質與異常值分析

5.1 光譜品質分級

- (1) 廠商應對 100 筆光譜逐一進行品質評估，依訊雜比 (SNR)、基線穩定性及光譜完整性等標準，分為下列三級，並輸出光譜品質分級清單 (Excel 格式)：

【可用】：光譜品質良好，可直接納入分析。

【需謹慎使用】：光譜有輕微異常，需留意對模型之影響。

【建議排除】：光譜存在嚴重雜訊、截斷或明顯異常，不建議納入分析。

(2) 清單欄位至少包含：光譜編號、品質等級、判定依據說明。

5.2 異常光譜識別

(1) 以 PCA T² 統計量 (95% 信賴限) 及 Q 殘差、光譜疊圖 (Overlay Plot) 識別異常光譜。

(2) 輸出異常樣品清單，載明樣品編號、異常類型 (雜訊過大、基線異常、峰位移等) 及建議處置方式 (排除或保留並說明理由)；若 100 筆光譜中無異常，應說明判定依據。

5.3 參考值一致性查核

廠商應就本中心提供之參考值資料，以統計方式 ($\pm 3\sigma$ 或 Grubbs 檢定) 檢核是否存在明顯離群點；若有，應書面通知本中心確認，並於報告中載明處置結果。

5.4 品質控管建議

廠商應依資料品質分析結果，提出書面之後續光譜資料收集品質控管建議，至少提出 3 項具體可操作之建議，協助本中心提升後續資料品質。

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。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。
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。如有第三者主張本中心使用該成果報告或光譜資料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	決標次日起 45 日內	1. 分析試驗規劃書	紙本及電子檔均 1 式 2 份
		2. 光譜整合資料夾，包含以下內容： (1) 原始光譜 (2) 整理後光譜	電子檔均 1 式 2 份
2	決標次日起 120 日內	1. 分析成果報告（含圖表）包含以下內容： (1) 光譜整合資料夾（含原始光譜、整理後光譜） (2) 化學計量分析結果 (3) 校正模型效能（各項指標數值及圖表）	電子檔均 1 式 2 份
3	決標次日起 180 日內	1. 整體建議	紙本及電子檔均 1 式 2 份

（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）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」所載項次1及項次2內容，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35%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。
3. 第三期：交付本條款「履約期限及交付項目」所載項次3內容，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5%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

廠商應自驗收合格之日起無償提供1年保固服務，服務項目包含：

無償提供分析成果報告與光譜資料之技術諮詢、數據釋疑與錯誤更正服務。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、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。