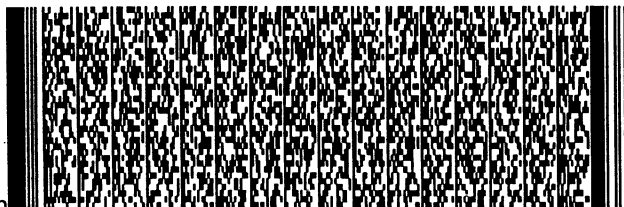


申請日期: 92-4-14	IPC分類
申請案號: 092108486	G06F 17/18

(以上各欄由本局填註)

## 發明專利說明書

一、 發明名稱	中文	設計實驗之方法及電腦系統
	英文	Method and computer system for designing experiments
二、 發明人 (共2人)	姓名 (中文)	1. 史安卓 2. 奧亞恩
	姓名 (英文)	1. Andreas SCHUPPERT 2. Arne OHRENBURG
	國籍 (中英文)	1. 2.
	住居所 (中文)	1. 德國庫頓區史沙克街46號 2. 德國克恩區泰庫街2號
	住居所 (英文)	1. Stockberggasse 46, 51515 Kurten, Germany 2. Takustr. 2, 50825 Koln, Germany
三、 申請人 (共1人)	名稱或姓名 (中文)	1. 德商拜耳廠股份有限公司
	名稱或姓名 (英文)	1. Bayer Aktiengesellschaft
	國籍 (中英文)	1. 德國 DE
	住居所 (營業所) (中文)	1. 德國利佛可生城拜耳工業區D 51368 (本地址與前向貴局申請者相同)
	住居所 (營業所) (英文)	1. D 51368 Leverkusen, Bayerwerk, Federal Republic of Germany
	代表人 (中文)	1. 白羅夫 2. 羅勞斯
	代表人 (英文)	1. Dr. Rolf Braun 2. Dr. Klaus Reuter



## 一、本案已向

國家(地區)申請專利	申請日期	案號	主張專利法第二十四條第一項優先權
德國 DE	2002/04/15	10216558.0	有

二、主張專利法第二十五條之一第一項優先權：

申請案號：

無

日期：

## 三、主

日期：

四、有

寄存國家：

無

寄存機構：

寄存日期：

寄存號碼：

有關微生物已寄存於國內(本局所指定之寄存機構)：

寄存機構：

寄存日期：

無

寄存號碼：

熟習該項技術者易於獲得, 不須寄存。

## 五、發明說明 (1)

發明所屬之技術領域：

本發明一般係關於使用一電腦來設計實驗的方法與系統，而且更尤其是關於使用一電腦來設計實驗，其中由電腦所進行用以設計實驗之處理係包括實驗資料之評估與資料之過濾。

先前技術：

在先前技術中，眾所皆知的乃是使用統計性實驗設計方法來設計實驗。此設計方法用在尤其以最小數目的實驗來決定經驗處理模型，用於一處理中之被控制之變數與造成影響之變數間之關係以及用於最終產品特性與處理特性。此統計性實驗設計方法可例如使用“STAVEX”（具有專家系統的統計性實驗設計，製造商為瑞士的 AICOS 科技）電腦軟體程式以及德國 StatSoft（歐洲）GmbH 所製造、名為“Statistica<sup>®</sup>”所出售的軟體而來進行。

種種不同的習知實驗設計技術存在於統計性實驗設計的領域中。所有的統計性實驗設計方法緣起於古典、完全之因素方法。該因素法乃藉由與變異分析之類比而將所有以品質來調整的因素互相比較。近幾十年來，因素方法的種種變化已經在研究與發展實驗室中發展並且確認。

根據 Taguchi 或 Shainin 的現代實驗設計方法係可與古典、完全的因素方法相區別。Shainin 的實驗設計（“DOE”）方法係為一合適的最佳化方法，因其將被認為具強烈影響的變數隔離，並且進行處理以測定它們的關

## 五、發明說明 (2)

連性與從屬性。Taguchi 之 DOE 乃以習知之部分因素、正交實驗設計為基礎。由於事先選定最重要的影響變數可大量節省必要的實驗循環，所以 Tagauchi 技術是一快速且相當經濟的實驗與處理之設計方法。

5 部分因素實驗設計型態的進一步已知統計性實驗設計技術包括 Plackett-Burmann 實驗設計、中央合成設計、Box-Behnken 實驗設計、D-最理想設計、混合設計、平衡塊設計、拉丁方塊、以及暴徒 (desperado) 設計 (參見例如 Eberhard Scheffler, Statische Versuchsplanung und  
10 Auswertung, Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, Stuttgart, 1997)。

設計實驗用的額外方法亦可從 Hans Bendemer, "Optimale Versuchsplanung" 【最佳實驗設計】，Reihe Deutsche Taschenbücher (DTB 第 23 冊與 ISBN3-87144-  
15 278-X ) 以及 Wilhem Kleppmann, Taschenbuch Versuchsplanung, "Produkte und Prozesse optimieren" 【將產品與方法最佳化】，第二次擴編，ISBN:3-446-21615-4 得知。實際上，常常為了成本而使用這些方法。

用以設計實驗之已知統計方法的缺點在於，與實驗設  
20 計與模型製造相關的處理會在無考量額外知識的情形下進行。因此，在某些特定情況之下，無法得到合適的最佳條件，而且所產生之結果與陳述的可靠度是可疑的。用於設計實驗之先前技術方法的進一步明顯缺點在於，在大量之影響變數需要列入考慮情況下，先前技術方法變得太廣

### 五、發明說明 (3)

泛。此外，就某些實驗系統而言，例如在催化劑或者活性成分的研究中，目標功能則常常受到嚴重毀壞，因此以統計方法來記錄則有其困難度。

在此併入供參考的 WO 00/15341，其係揭露一種發展  
5 不均勻催化反應製程用之固體催化劑的方法，其係以根據漸進方法的平行化測試為基礎。以漸進方式而操作的相對應方法亦可從 WO 00/43411, J. chem. Inf. Compute. Sci. 2000,40,981-987 “使用推測最佳化演算法之不均勻催化劑設計”以及從應用催化劑 A:General 200(2000)63-77 “在催  
10 化材料之合併選擇與最佳化中的一種漸進研究”得知，各在此併入供參考。

此外，在此所併入供參考的美國專利第 6,009,379 號，其係揭露一種藉由一有效實驗設計而來控制一製造過程的方法。根據此專利，諸測試點係均勻地分佈於一多面  
15 球表面上，以便使各個製造參數可均勻地受到加權。

圖 1 顯示進行過濾實驗用之先前技術系統 20 的方塊圖，譬如可能使用於催化劑與材料與活性成分研究的領域中。應該理解的是，以下描述為進行資料處理操作之系統 20 的各功能性方塊圖，以及以下描寫並且於圖式中顯示為  
20 本發明組成具體實施例之系統的各功能性方塊圖，其係組成一軟體模組，或者，一硬體模組或者一合併的硬體/軟體模組。此外，各模組適當地包含一記憶體儲存區域，譬如 RAM，用來儲存進行處理操作的資料與指令。或者，用來進行處理操作的指令，其係可被儲存於一個或者

## 五、發明說明（4）

更多個模組的硬體中。

參考圖 1，系統 20 包括一物質庫(substance library)模組 1，譬如一組合庫(combinatorial library)模組，其係連接到一實驗設定模組 2。該模組 2 乃連接到一實驗資料模組 3 與一以資料驅動的最佳化工具 4。該最佳化工具 4 亦連接到該庫模組 1。該模組 2 進行高通量過濾（“HTS”）或者高速實驗（“HSE”）之實驗。此過濾實驗基本上用來在化學、生化、或者生物科技系統中，鑑別活性成分、催化劑研究（均勻與不均勻）、材料研究、與最佳反應條件之鑑定。該最佳化工具 4 為一黑盒最佳化工具，其係以資料來驅動的模型或者一漸進式演算法為基礎而來操作。該最佳化工具 4 並不具有關於實驗設計之結構與互動的先驗(a priori)知識。反而，該最佳化工具 4 卻受限於用來選擇儲存於組合庫模組 1 的實驗之實驗資料評估。該黑盒最佳化工具 4 乃藉由例如基因演算法、漸進演算或者策略、類神經網路或者其它以資料驅動的模型方式而來執行，這些模型研究係取決於推測或者決定性的最佳化結構或者合併前者與後者兩者的最佳化結構。

當操作時，實驗設定模組 2 通常在複數個實驗上進行處理。該模組 2 將資料檔形式的實驗結果提供到實驗資料模組 3。同時，模組 2 則將作為輸入資料的實驗結果資料或者至少其中一部份提供到以數據驅動的最佳化工具 4。在模組 3 的實驗資料包括造成影響之變數，譬如屬性、因數、結構特徵、描述符號、物理變數與材料特性，以及與

## 五、發明說明 (5)

這些變數對目標變數所產生之影響有關的資料。進行處理的最佳化工具 4 係典型地使用儲存於模組 3 的實驗資料，以在目標變數的空間內定義一最佳化的檢索方向。

類似先前技術系統 20 之系統的一般缺點在於，先驗  
5 訊息並不在黑盒最佳化工具 4 中具有影響，或者僅僅具有一有限的影響，以致使檢索策略經常緩慢地整合或者在不適當的次佳狀況上整合。結果，在時間花費與財務開銷上，先前技術方法常常無效率。此外，在實驗設計技術以漸進式演算為基礎之情況，其風險係當最佳化工具用來達  
10 到最佳化狀況時的花費與開銷會高於使用合理或者統計步驟者。

因此，需要使用以電腦為基礎之系統來設計實驗之方法與系統，其可改善整合速度以及確保在一合適最佳狀態的整合，而且亦增加該結果的可靠度。

15

發明內容：

根據本發明，使用以電腦為基礎的系統來設計實驗的方法與系統，包含使用與實驗相關的知識來影響在一以資料驅動之最佳化工具上的處理。該知識包括先驗知識以及  
20 由連續評估先前進行實驗所獲得的補充知識。

在一較佳具體實施例中，設計實驗之以電腦為基礎的系統，包括一媒介層模組，其使用先驗與補充得到的知識，以影響在一最佳化工具上的處理操作，從而有效地調整該最佳化工具。該知識較佳地包括與互動有關的規則，

## 五、發明說明（6）

譬如與資料探勘以及其它方法之結構互動有關的規則。該規則可在該最佳化工具為了設計實驗而進行之處理中被整合，以在最佳化製程步驟之前、期間或者之後，或者甚至連續性地影響最佳化工具的處理。

5 在一較佳具體實施例中，該媒介層模組可進行與類神經網路、混合模型、精密模型與資料探勘方法有關的處理模型對應之處理。該資料探勘方法可包括決策樹方法、一般分隔方法、子群檢索方法、一般隔開方法、群集方法、相關規則產生器、以及相關方法。

10 在一較佳具體實施例中，在最佳化工具上的處理係被對於由最佳化工具所進行之處理操作的直接介入所影響，或者間接被對於形成該最佳化工具所進行之最佳化處理的基礎之資料之過濾所影響。

15 在另一較佳具體實施例中，一種影響該最佳化工具的方法係調整該最佳化工具與該最佳化處理。就規則產生器而言，該調整方法可包括例如子群檢索方法、相關分析與屬性統計。

20 在一進一步的較佳具體實施例中，本發明系統包括複數個媒介層模組，以致使處理能夠在一先前媒介層中被改善，而介入則可發生在一先前媒介層或諸層中，且直接介入可發生在該最佳化工具所進行的黑盒最佳化處理中。

在本發明的又一進一步較佳具體實施例中，在原先最佳化處理中的介入位置以及使用於媒介層之諸方法或者方法之組合，其乃在各最佳化步驟中被改變。此外，產生最

## 五、發明說明 (7)

佳規則之合適方法的選擇可自動地進行。

在另一較佳具體實施例中，該最佳化工具係被已經包含一評估之實驗資料的再評估所影響。該實驗資料可包括一評估，其中係直接由實驗測定適當的實驗資料，譬如產  
5 量資料。再評估可經由過濾該產量資料而進行。被應用之過濾方法乃以諸規則或者其它關係為基礎，其係以處理實驗資料的分析方法為基礎而被測定，該分析方法例如相關於類神經網路與資料探勘方法的處理方法。資料過濾進一步將特別良好產量之加權增加，並且進一步減少特別不好  
10 產量的加權，從而得到實驗序列的更快速整合。

在一替代性具體實施例中，實驗資料並不直接包含一由實驗測定的評估，而該評估乃僅僅被起因於該實驗的計算所測定，且過濾或者加權並不進行於由實驗所測定的資料，而進行於由計算所測定的評估。

15 在一進一步較佳具體實施例中，該最佳化工具之處理乃被降低、擴大、或者替代該實驗空間所影響。

在又一進一步的具體實施例中，該過濾可包括該實驗資料的預先選擇與加權。將特別不好的實驗資料，換句話說，將由例如一規則產生器所視為不適宜的實驗資料從該  
20 實驗空間預先選擇並且刪除。此外，假如該規則產生器測定出諸對應參數係無關係者，則全部列或行亦可從一實驗資料矩陣刪除，從而減少該實驗空間，並進而減少所需之整體處理時間。

實驗資料之加權可包括單次或者重複地在該實驗資料

## 五、發明說明(8)

矩陣中將特別相關的實驗資料複製。或者，該加權可包括引入一加權係數。

在本發明之進一步較佳具體實施例中，該最佳化工具包括至少一核心操作器模組與用來選擇新測試點的一模  
5 組。該最佳化工具之操作方法隨後則被由例如一規則產生器所確認之關係為基礎而對於該核心模組與該選擇新測試點的模組之至少一模組之影響所影響。

本發明之其它目的與優點將從目前較佳具體實施例之下述詳細說明而令人明瞭，該詳細說明應該連同圖式來考  
10 慮。

實施方式：

圖 2 以方塊圖形式顯示根據本發明來設計實驗之系統  
30 之具體實施例。相同的參考號碼在此用來描述具有實質  
15 類似、較佳相等於先前說明之結構與操作的系統元件。

參考圖 2，系統 20 包括一組合庫 5，該組合庫係依據  
對應於實驗空間的周圍條件而形成。一實驗設定模組 7 係  
連接到組合庫 5、實驗資料模組 8 以及媒介層模組 9。該  
20 模組 9 包括一最佳化工具 6，並且連接到組合庫 5。當操  
作時，最佳化工具 6 乃從組合庫 5 選出一個或多個實驗，  
該些實驗隨後例如藉由高通量篩選或者高速實驗的實驗方  
法而於實驗設定模組 7 中進行。產生於模組 7 的實驗資料  
係以一資料檔案的形式而提供到該實驗資料模組 8。

媒介層模組 9 經由考慮先驗(a priori)知識或者進行實

## 五、發明說明 (9)

驗時所得的知識而影響最佳化工具 6 的處理。在一較佳具體實施例中，最佳化工具 6 持續地評估在模組 8 中儲存作為資料檔案的資料，以得到形式為規則或者學習式類神經網路的知識。因此，該媒介層模組 9 乃藉由提供額外知識 5 到最佳化工具 6 而補充並且影響最佳化工具 6 上的處理，從而加速實驗系列的整合。

媒介層模組 9 亦使黑盒最佳化方法之整合速度改善，其係藉由將先前知識與規則結構整合而進行於最佳化工具 6 中。此種整合可以用多種方式進行，譬如藉由：A) 測試集合之由資訊支持的額外選擇，其使用由資料探勘所得的規則，以限制欲測試之組合庫 5 部份，而且不包含介入於在最佳化工具 6 所進行之處理；B) 在確認為最佳化之庫區域的方向中之最佳化步驟的選擇性加權，換句話說，介入於該最佳化工具 6 的搜尋方法內；以及 C) 調整黑盒最佳化方法的選擇規則，其係包含直接介入該最佳化工具 6 的評估方法，或者包含在將評估變數提供到最佳化工具 6 之前之評估變數的修改。在一較佳具體實施例中，介入 A、B 與 C 的形式可能以組合方式進行。例如，在一最佳化步驟中，諸介入可包括 A 與 B、B 與 C、A 與 C、或者 A 與 B 與 C。諸介入位置與介入組合以及在媒介層模組 9 中進行的方法可於各最佳化步驟逐一改變。諸介入亦可由包括在實驗設計系統之隨後的媒介層模組來進行。

當藉由統計實驗模組而進行最佳化時，所進行的處理則類似經由黑盒最佳化工具所進行者。該媒介層模組 9 以

## 五、發明說明 (10)

上述的一種或更多種形式而在最佳化過程中進行一介入。例如，先前知識在造成影響之變數受到選擇時會被整合，以致使它們的有效領域以及在該有效領域上的額外限制能夠包括在造成影響之變數的組合中。

- 5 造成影響之變數上的進一步資訊可被納入，用於藉由使用資料探勘方法或者上述的其它方法並且將它們整合於實驗設計用之處理，以進行諸實驗的順序統計設計。例如，該實驗空間可能在一實驗設計處理序列進行之後，依據額外的資訊而改變。藉由增加或者移除造成影響之變數、改變個別之造成影響之變數或者組合之造成影響之變數的有效領域、或者結合前者與後者，可進行該改變。

- 特別有利的是，可將設計實驗所用的先前技術古典方法繼續使用在黑盒或者統計性最佳化工具上。根據本發明，這些設計實驗用的方法乃經由考慮到先前知識或者在實驗程序期間內得到的知識而受到改善，其可加速該些方法的整合或實際上允許諸最佳化方法本身的整合。在本發明之一較佳實施過程中，在例如將實驗之設計最佳化，以用於催化劑、主動成分或者材料或者反應條件時，該整合速度則會經由根據本發明的調整而被相當程度地增加。一進一步之優點則是，實驗數目可以降低，同時可預期有相同結果，從而可降低時間與材料之花費並可較佳應用系統。另一優點則是整合先前知識會在單獨或在一組合步驟中使用 HSE 或者 HTS 技術時，避免研究投入的損失。

圖 3 顯示根據本發明一具體實施例而設計實驗的系統

## 五、發明說明 (11)

40，係包括實驗之再評估。參考圖 3，系統 40 包括連接到一實驗資料模組 8 的一實驗設定模組 7，該實驗資料模組 8 則接著連接到一評估模組 10。媒介層模組 9 包括連接到一規則與條件模組 12 的一資料分析模組 11，該規則與條件模組 12 則連接到一再評估模組 13。該分析模組 11 係連接到實驗資料模組 8 與評估模組 10。黑盒最佳化工具 6 連接到再評估模組 13 與一實驗設計模組 14，該實驗設計模組 14 則連接到設定模組 7。

系統 40 係操作如下。實驗設定模組 7 進行從一組合庫 (未顯示) 事先選出的一個或多個實驗。該模組 7 產生實驗資料，該實驗資料則以資料檔案之形式而被輸出到該模組 8。假如適當的資料能直接經由實驗方式而取得，譬如藉由產量的實驗測定，該產量的實驗測定是已進行實驗之一評估，則該實驗資料本身可能已經包含評估。

15 或者，實驗資料之評估可能必須額外地於評估模組 10 中進行。例如，該評估模組 10 進行一計算規則處理，以算出依據一個或多個實驗資料的評估。在模組 8 中的資料，以及假如適當的話，由模組 10 所評估的結果會提供到媒介層模組 9。在模組 9 中的資料分析模組 11 可進行一資料探勘 (DM) 演算法、一類神經網路、一混合方法、  
20 或者一些其它合適的資料分析方法。該模組 12 藉由應用例如此些資料分析方法而產生規則，該模組 12 亦產生與實驗中所考慮之化學系統有關的額外訊息與觀察。該模組 11 的功能因此如同一規則資料產生器，而且該模組 12 會

## 五、發明說明（12）

規劃出相對應的規則與次要條件。

假如適當的話，該模組 13 會依據包含於模組 12 中的諸規則與次要條件而再評估一實驗或者諸實驗。在一較佳具體實施例中，一實驗只有在超過一預定界限值的情形下  
5 會被再評估。或者，該使用者可介入，以建立或者撤銷該再評估。該再評估可能包括將一更糟的評估指定到被視為不好的實驗，以及將一改善的評估指定到被視為良好的實驗。該最佳化工具 6 加工處理在模組 8 中的資料，假如適當的話，該資料包含受到再評估的實驗資料，以產生一進  
10 一步的實驗設計，該實驗設計隨後則典型地儲存作為在實驗設計模組 14 中的資料。該實驗設定模組 7 隨後則進行與模組 14 中儲存的實驗設計對應之實驗。

圖 4 顯示一系統 50 的一替代性具體實施例，該系統 50 包括經由事先選擇與加權之至少其中一項來過濾資料的特徵。  
15 用來設計實驗的系統 50 實質地具有與系統 40 相同的元件結構，除了再評估模組 13 被事先選定與加權用之模組 15 所取代以外。因此該系統 50，不像該系統 40，並沒有以不同的方式來將該實驗資料再評估或者評估該實驗資料。取而代之地，在該系統 50 中，該模組 15 乃操作來  
20 依據儲存於模組 12 中的規則條件而刪除實驗或者給予它們更大或者更小的加權。結果，一預定選擇在沒有改變諸實驗的實際評估之下進行。

圖 5 顯示根據本發明而設計之系統 60 的一進一步具體實施例。該系統 60 類似系統 50，除了該系統 60 沒有包

## 五、發明說明 (13)

括模組 15 之外。此外，系統 60 乃提供用來直接介入於最佳化工具 6 所進行的處理操作內。參考圖 5，系統 60 包含有一個或多個核心操作器模組 16 的一最佳化工具 6，亦即部份程式的功用如同在演算法中，例如選擇、梯度的計算等等。模組 16 係連接到評估模組 10 以及連接到亦在最佳化工具 6 中之用來選定新測試點的模組 17。再者，一後選定模組 18 乃連接到各模組 12、14、16 與 17。

當操作系統 60 時，模組 12 所規劃的規則與次要條件會影響在模組 17 上所進行的處理。例如，依據該規則與次要條件資料，該模組 17 拒絕已經被選定並且沒有進行出自模組 12 之規則的新測試點，並且提供反饋資料到該核心模組 16。在該核心模組 16 之反饋資料的接收導致核心模組 16 選定測試點做為被拒絕之測試點的替代物。

在核心模組 16 進行實際最佳化之後，模組 17 則依據從模組 16 所接收的資料而提出新的實驗或者測試點，以將所考慮之該系統目標變數最佳化。該系統可例如包括一化學、生物科技、生物、或者酵素系統。在媒介層模組 9 中的規則產生器模組 12 則依據產生於模組 11 中的規則資料而將與規劃於模組 12 之規則相抵觸的實驗刪除。假如適當的話，最佳化工具 6 的核心模組 16 則產生新的替代實驗。該實驗可經由加權的施加程度而完全地或者部份地被刪除。該模組 17 隨後則作用在這些新設計的實驗上，以確保將沒有或者不會被核心模組 16 考慮的該資訊隨後地整合於核心模組 16 之設計實驗處理中。

## 五、發明說明（14）

或者，該後選定模組 18 處理由最佳化工具 6 所提供的資料，並且進行由模組 17 所選擇之新測試點的後選擇。換句話說，該模組 18 進行一測試，以測定由模組 17 所產生的新測試點是否符合由模組 12 所提供的規則。假如將測試點於該測試中刪除的話，該模組 18 則提供反饋資料到該模組 16，以導致替代之新測試點的設計。

圖 6 係為根據本發明來設計實驗的系統 70，其係實質地類似系統 60，除了模組 18 不存在之外。因此，在系統 70 中，模組 17 的操作方法並不被後選定處理所影響，更者，該最佳化工具 6 之核心模組 16 的操作方法會被直接影響。在較佳具體實施例中，類神經網路的核心操作器包括並且於處理中考慮造成影響之變數之型態與數目以及個別資料點的加權。此外，漸進式演算法的核心操作器，譬如基因式演算法，其係包括提供用來選擇一新系列實驗的選擇操作器，變異操作器與交換(cross-over)操作器。

當操作系統 70 時，最佳化工具 6 的處理係依據規則產生器模組 12 所產生的規則與訊息。在包括連接到類神經網路之最佳化工具的較佳具體實施例中，該處理係依據該規則並且操作以限制該實驗空間，或者該處理以特定方式將資料之記錄予以加權。

就漸進式演算法之最佳化工具而言，該核心操作器係依據額外的訊息。在一較佳具體實施例中，特定的交換、選擇或者變異會依需求被禁止或者進行。就兩種最佳化工具而言，經由界面方式或者藉由最佳化參數的手動或者程

## 五、發明說明 (15)

式控制之改變以包括訊息於最佳化工具處理中之方式而介入最佳化工具之處理部份，會導致該工作流程的完整自動化。

5 在一較佳具體實施例中，系統 40 與 70 的特徵可彼此組合，以便將複數個規則產生器模組，即複數個媒介層模組，以彼此無關方式整合入最佳化序列內。規則產生器模組使用種種方法來產生規則，其中諸方法較佳地彼此無關，而所產生的規則會結合於模組 12 中。可藉由被定義的界面並且依照預定界限值以自動化方式，或者藉由該規則產生器所介入之最佳化工具部份之手動規則規劃方式，  
10 來考慮媒介層模組 9 之規則產生器模組所規劃的規則。

雖然已經將本發明之較佳具體實施例說明並且顯示，但是對那些熟諳此技藝者而言，種種變更顯然可能在不違背本發明原理的情形下進行。

15

圖式簡單說明：

圖 1 係為設計實驗之先前技術系統的方塊圖。

圖 2 係為根據本發明來設計實驗之系統的具體實施例之方塊圖。

20 圖 3 係為根據包括實驗資料之再評估之本發明來設計實驗之系統之具體實施例的方塊圖。

圖 4 係為根據包括實驗資料的預先選擇與加權之本發明來設計實驗之系統的具體實施例之方塊圖。

圖 5 係為根據包括在最佳化工具處影響新測試點的選

## 五、發明說明（16）

擇之本發明來設計實驗之系統的具體實施例之方塊圖。

圖 6 係為根據包括影響該最佳化工具之一核心模組之本發明來設計實驗之系統的具體實施例之方塊圖。

## 五、發明說明（17）

## 圖式代號說明：

- 1 物質庫模組
- 2 實驗設定模組
- 3 實驗資料模組
- 4 黑盒最佳化工具
- 5 組合庫
- 6 最佳化工具
- 7 實驗設定模組
- 8 實驗資料模組
- 9 媒介層模組
- 10 評估模組
- 11 資料分析模組
- 12 規則與條件模組
- 13 再評估模組
- 14 實驗設計模組
- 15 事先選定與加權的模組
- 16 核心操作器模組
- 17 用來選定新測試點的模組
- 18 後選定模組
- 20 先前技術系統
- 30 設計實驗系統
- 40 系統
- 50 系統
- 60 系統
- 70 系統

四、中文發明摘要（發明之名稱：

## 設計實驗之方法及電腦系統

設計實驗之方法及系統包括一由數據驅動的最佳化工具，其係從一實驗用空間選定至少一第一實驗，以及包括一媒介層模組，其係評估第一實驗之根據實驗而測定的實驗數據。該媒介層模組根據例如類神經網路模型、混合模型、精密模型或者一數據探勘模型而來處理該數據。該最佳化工具處理第一實驗之根據實驗而測定的實驗數據。進行於媒介層模組的評估結果係使用來影響進行於最佳化工具的處理。在最佳化工具進行此受到影響的處理之後，該最佳化工具則從該實驗用空間選出至少一第二實驗。

英文發明摘要（發明之名稱： Method and computer system for designing experiments

Method and system for designing experiments includes a data-driven optimizer, which selects at least a first experiment from an experimental space, and a meta layer module, which evaluates experimentally determined experiment data of the first experiment. The meta layer module processes the data in accordance with, for example, with a neural network model, a hybrid model, a rigorous model or a data mining model. The optimizer processes the experimentally determined experiment data of the first experiment. The results of the evaluation performed at the meta layer module are used to influence the processing performed at the optimizer. After the optimizer performs such influenced processing, the optimizer selects at least a second experiment from the experimental space.

## 六、申請專利範圍

1. 一種設計實驗之方法，包含以下步驟：  
    使用一資料驅動之最佳化工具而從一實驗性空間選擇至少一第一實驗；  
    接收第一實驗之實驗性測定的實驗資料；  
5      在一媒介層模組上評估第一實驗的實驗性測定實驗資料，其中該媒介層模組產生評估資料；以及  
    在該最佳化工具上處理第一實驗的實驗性測定實驗資料，其中在該最佳化工具的處理乃由該評估資料所影響。
- 10 2. 如申請專利範圍第 1 項之方法，進一步包含以下步驟：  
    使用該最佳化工具而從該實驗性空間選擇至少一第二實驗。
3. 如申請專利範圍第 1 項之方法，其中該最佳化工具與  
15 該媒介層模組之至少其中一項在選擇至少一第二實驗步驟之前，會改變該實驗空間。
4. 如申請專利範圍第 1 項之方法，其中該媒介層模組包含類神經網路模組、混合模型模組、精密模型模組與資料探勘模組之至少其中一項。
- 20 5. 如申請專利範圍第 1 項之方法，其中該實驗資料來自活性成分研究、材料研究、催化作用研究、生物工藝學與反應條件最佳化之至少其中一項的實驗為基礎。
6. 如申請專利範圍第 1 項之方法，其中在該媒介層模組

## 六、申請專利範圍

之評估以產生評估資料，包括過濾該實驗資料的步驟。

7. 如申請專利範圍第 6 項之方法，其中該過濾包括再評估該實驗資料。
- 5 8. 如申請專利範圍第 6 項之方法，其中該過濾包括將該實驗資料加權與事先選定的至少其中一項。
9. 如申請專利範圍第 8 項之方法，其中該加權包括使用一加權參數以及進行該實驗資料之至少一複製的至少其中一項。
- 10 10. 如申請專利範圍第 1 項之方法，其中該最佳化工具包括至少一核心模組與用來選擇新測試點的一模組。
11. 如申請專利範圍第 10 項之方法，其中在最佳化工具上的處理係依據選擇新測試點用之模組上的處理而受到影響。
- 15 12. 如申請專利範圍第 11 項之方法，其中在選擇新測試點用之模組上的處理係由超過一界限的一數值與一預定使用者值的至少其中一項所影響。
13. 如申請專利範圍第 10 項之方法，其中在該最佳化工具上的處理係依據核心模組上的處理而受到影響。
- 20 14. 如申請專利範圍第 13 項之方法，其中在核心模組上的處理乃由超過一界限的一數值與一預定使用者值之至少其中一項所影響。
15. 一種用來設計實驗的系統，包含：
  - 一最佳化工具，用來從一實驗空間選出至少一第

## 六、申請專利範圍

一實驗；以及

一媒介層模組，連接到該最佳化工具，以用來評估用於第一實驗之實驗所決定的實驗資料，其中該媒介層模組產生實驗設計資料，以影響該最佳化工具上的處理。

5

16. 如申請專利範圍第 15 項之系統，其中該媒介層模組包含類神經網路模組、混合模型模組、精密模型模組與資料探勘模組之至少其中一項。

10

17. 如申請專利範圍第 15 項之系統，其中該媒介層模組包括一過濾模組，以用來將該實驗資料過濾。

18. 如申請專利範圍第 17 項之系統，其中該過濾模組係可操作來再評估該實驗資料。

15

19. 如申請專利範圍第 17 項之系統，其中該過濾模組係可操作來進行將該實驗資料加權與事先選定之至少其中一項。

20. 如申請專利範圍第 15 項之系統，其中該最佳化工具包括至少一核心模組與用來選定新測試點的一模組。

21. 如申請專利範圍第 20 項之系統，其中該媒介層模組係可操作來影響選定新測試點用的模組。

20

22. 如申請專利範圍第 20 項之系統，其中該媒介層模組係可操作來影響該核心模組。

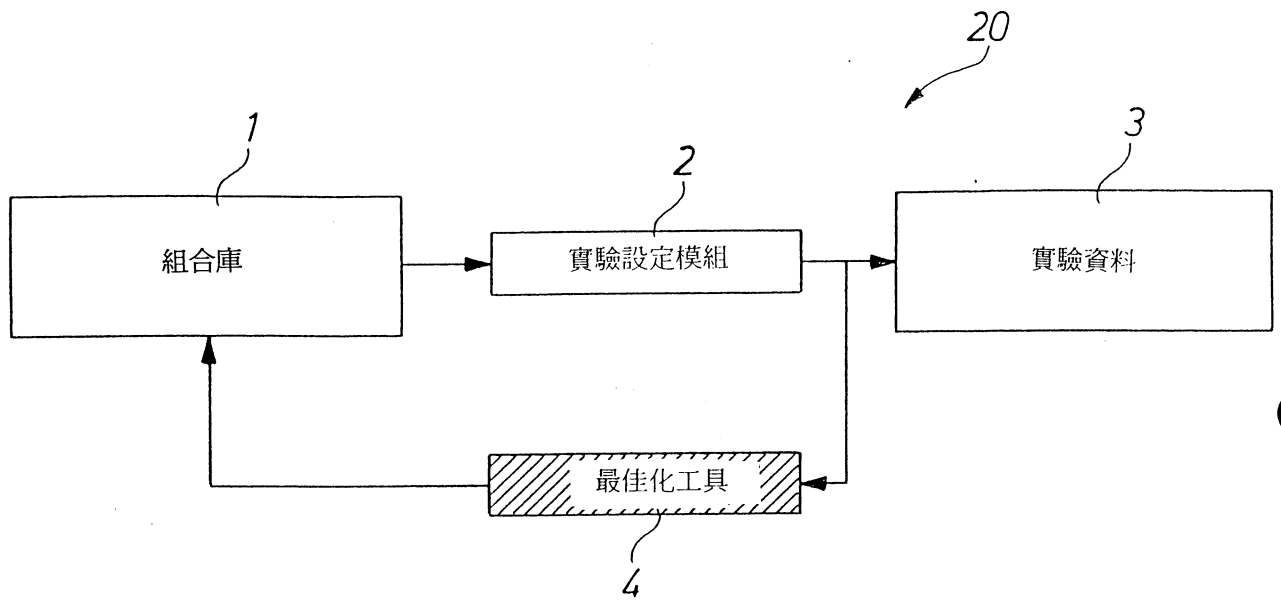


圖 1 先前技術

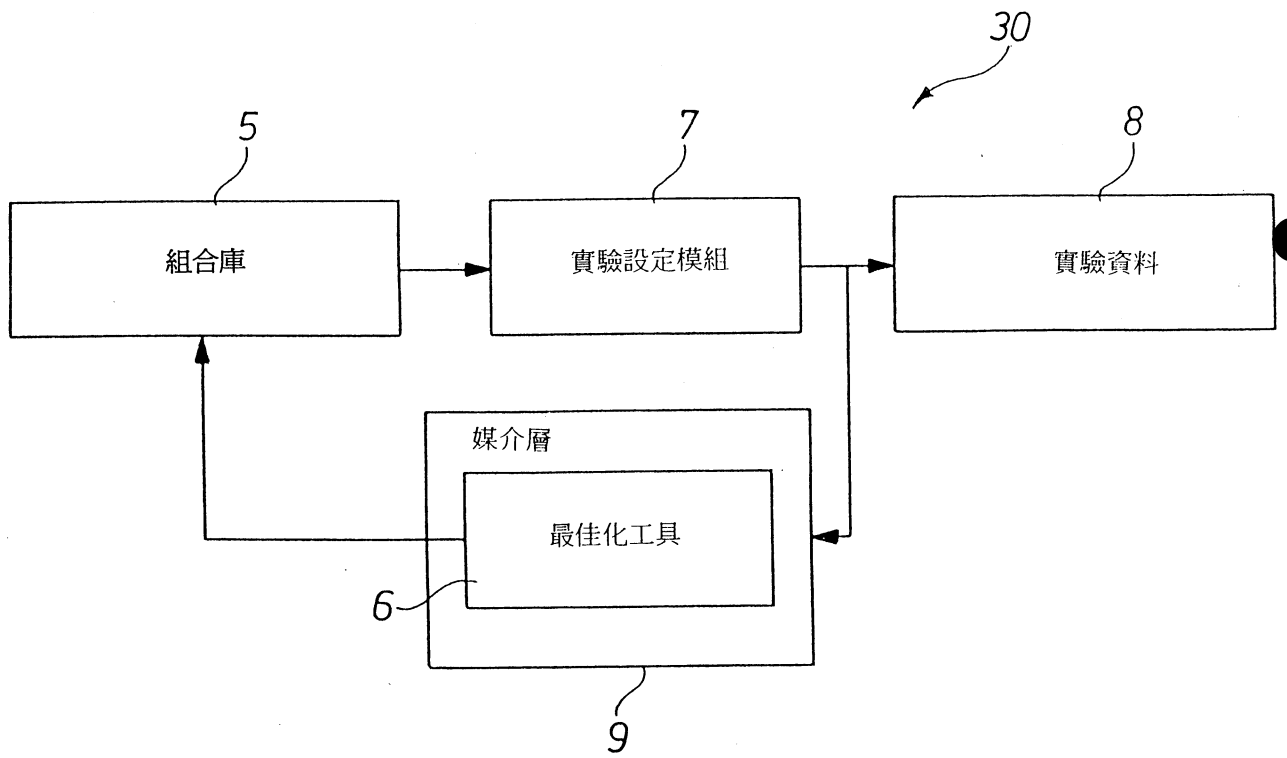


圖 2

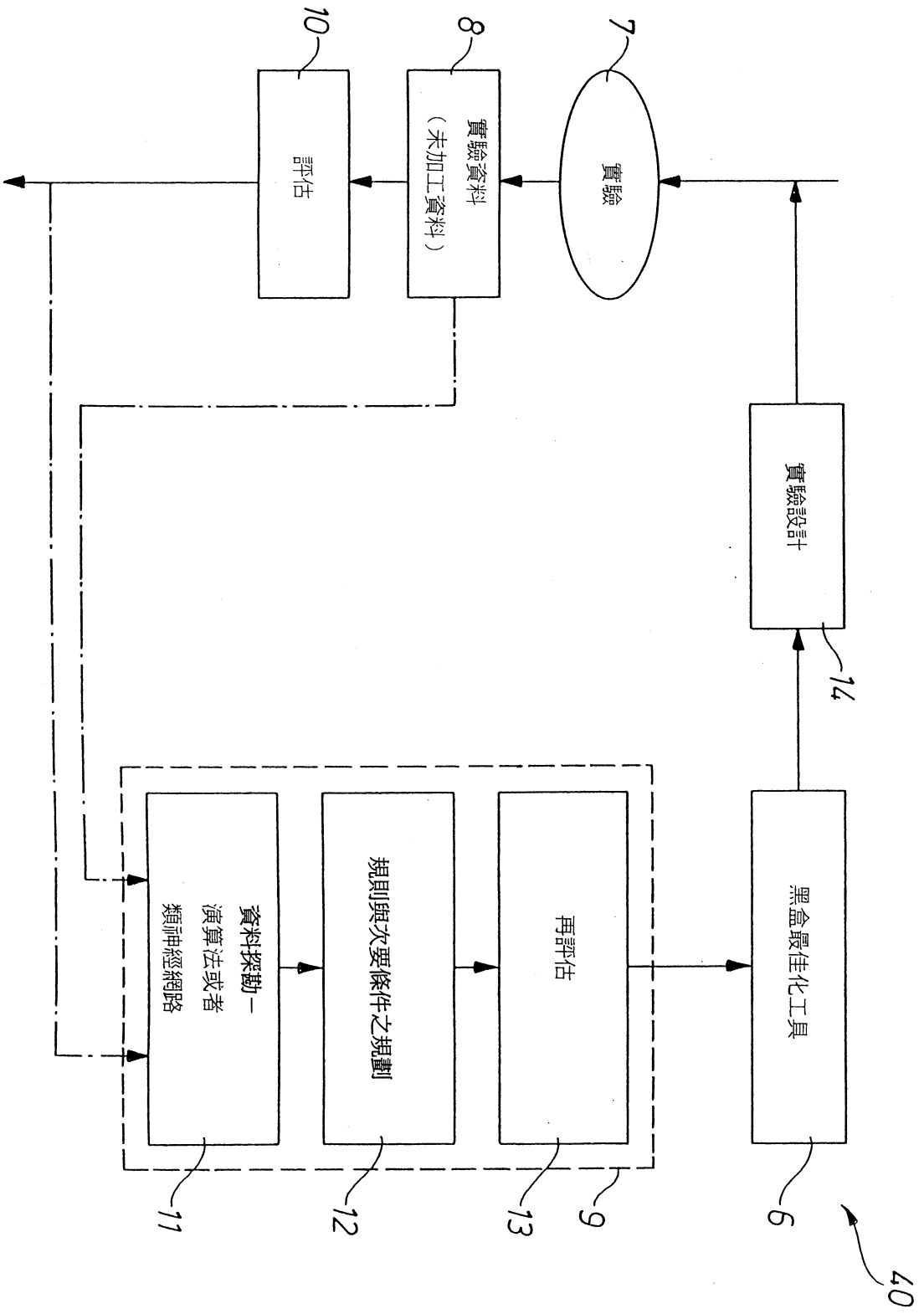


圖 3





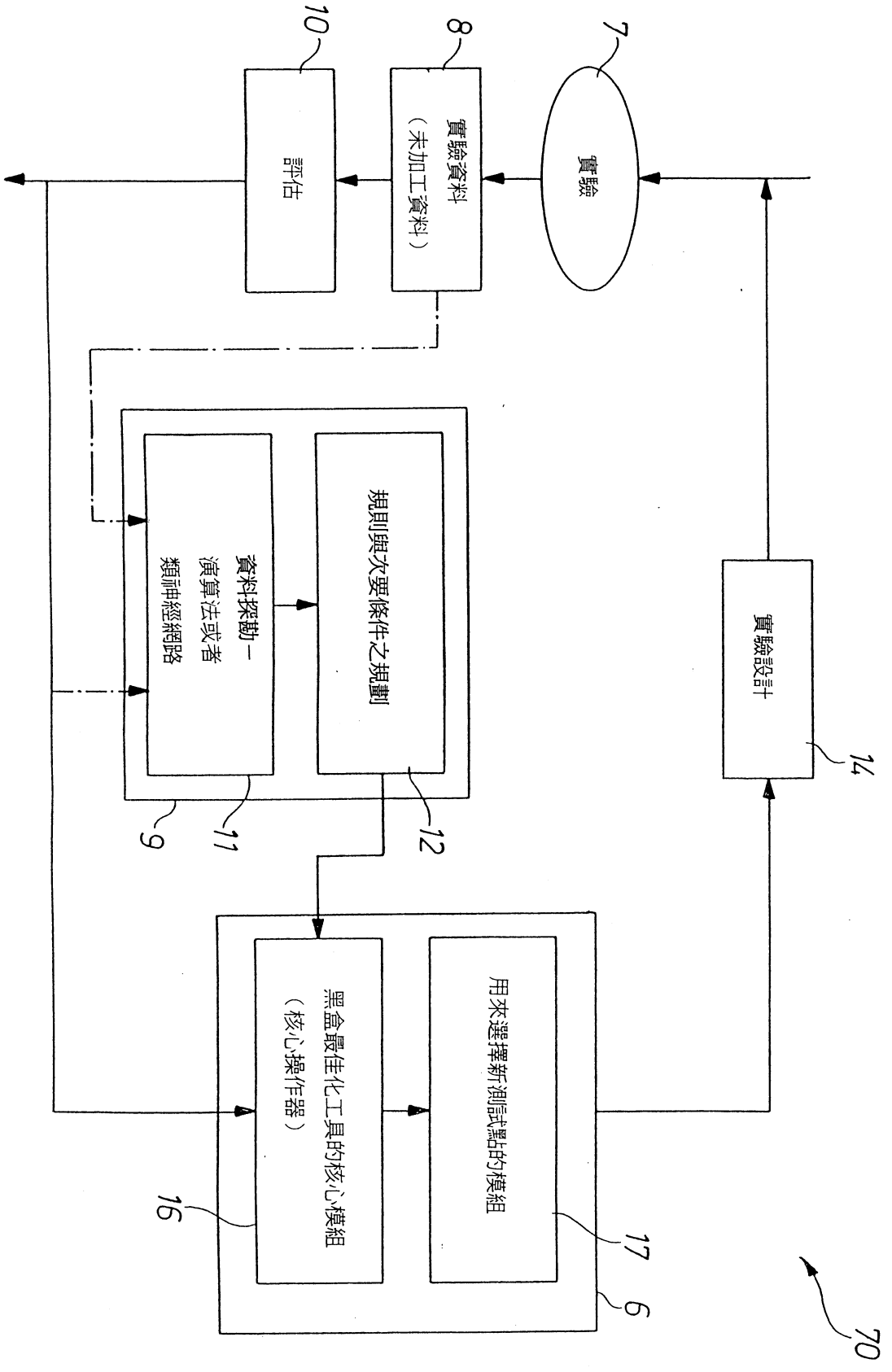


圖 6

(一)、本案指定代表圖為：第 2 圖

(二)、本代表圖之元件代表符號簡單說明：

- 5 組合庫
- 6 最佳化工具
- 7 實驗設定模組
- 8 實驗資料模組
- 9 媒介層模組
- 30 設計實驗系統

本案若有化學式時，請揭示最能顯示發明特徵的化學式：

無