



推動新材料發展的人工智慧

技術主編：周子琪 T. C. Chou

現職：工研院(ITRI) 材料與化工研究所 先進陶瓷材料與材料資訊應用專案 研究員

學歷：國立臺灣大學(NTU) 化學系 博士

專長：陶瓷材料合成

材料是人類生存與文明發展的基礎，它與經濟、國防和人民的生活水準息息相關，新材料的發現在促進人類社會發展中發揮極大的作用，從舊石器時代到進行中的第四次工業革命，這數百萬年的人類歷史無不以新材料的投入為標誌。經過幾個世紀的發展，材料科學領域已累積了大量的數據，但因受限於人類計算分析的能力，使我們難以蒐集、吸收和處理每天產生的巨量資訊。目前，新材料研究與開發主要是以Trial-and-Error的方式進行，它是基於大量經驗指導以及少量的模擬計算作為補充下而執行的實驗，會消耗大量的人力、時間、材料和資金。因此，我們必須且亟須尋找一種新的研究方法，使大量的材料資訊數據能被妥善利用，來加速材料的創新。

正規化(Paradigm)這概念最早是由美國著名科學哲學家Thomas Samuel Kuhn於1962年提出，指的是常規科學所賴以運作的理論基礎和實踐規範，其基本理論和方法隨著科學的發展而發生變化。圖靈獎獲得者Jim Gray在2007年提出的第四種科學正規化(The Fourth Paradigm)，即一種將大數據(Big Data)和人工智慧(Artificial Intelligence; AI)相結合，來引領科學創新的數據密集型科學(Data-Intensive Science)。AI的出現為材料科學的發展帶來了新的曙光，經過60多年來的發展，AI從簡單的感知器發展成了複雜的多層神經網絡，一些先進的AI系統甚至可擊敗國際象棋、圍棋等領域的世界冠軍。在科學應用方面，AI技術下的重要分支—機器學習(Machine Learning; ML)可結合材料研究轉為材料資訊學，近年來該領域發展迅速，它是AI在材料科學研究中最有前途的應用，特別的是它可以從通過數據集和構建模型來進行材料研發方向的預測，幫助研究者有效地獲取不同特徵因子之間的隱藏關係、預測各種新功能材料的可能結構或屬性、優化合成參數使現有材料的特性表現升級。

在本期的技術專題中，我們將介紹機器學習如何幫助材料研發人員進行資料探勘，建立加值資料供使用者更有效率的利用；另外，並以陶瓷材料開發、紡織染整製程、噴墨用色漿安定化製程三方面為例，述說如何將實驗數據或蒐集所得的資訊進行分析清楚，建立機器學習神經網路模型，再由演算法參數的調整，導引或預測材料與製程的開發方向。希望藉此讓相關領域的人員對AI與ML如何協助材料發展有更深入的了解，以加速國內相關產業的研發速度，提高產業國際競爭力。🔗