



材料數位轉型新契機 —材料多尺度模擬與數位AI應用

技術主編：黃天榮 T. J. Huang

現職：工研院材化所(MCL/ITRI) 多尺度模擬研究室 經理

學歷：國立清華大學(NTHU) 化學工程系 博士

專長：高分子多尺度模擬、混合分散平台技術、高速運算/雲端/AI運算技術

根據Statista研究報告指出，預估全球2021年在機器學習等軟體營收將達349億美元，且預期五年後，2025年數位營收將達1,260億美元。在數位轉型發展的潮流下，數位經濟已逐漸地改變整個世界的形貌，促使全球產業格局翻轉。如何運用數位化基礎技術與模擬設計技術以縮減材料開發與驗證時間，將成為翻轉材料產業的關鍵分水嶺。根據美國的研究，新材料從技術研發到商品上市平均需要18年的時間，相較於新藥開發平均12年的時間還多了50%。台灣材化產業之產值約6.6兆元，但產業附加價值率偏低，當終端產品開發時間越趨緊湊（如手機3~5個月、NB僅4~6個月，傳產運動鞋ODM也僅6個月），材料產業即面臨加速設計變革的壓力，如何縮短新材料開發的時間與成本是材料業界在未來必須努力的課題。

台灣材料產業目前導入材料模擬與數位化技術的時程緩慢，材料新功能的開發都是採取 Trial and Error 的方式，不斷的試誤，需要耗費大量的時間金錢與成本物力。隨著現代電腦運算能力倍增、計算成本下降，以及在二十一世紀初數位設計與雲端分享經濟概念興起之下，世界各國大力投入奈米材料開發累積相當的材料數據，並運用量子力學、分子動力學、粒子動力學等微/介理論與巨觀連續體等多尺度模擬技術搭配，已經可以利用材料模擬技術，協助新材料的開發與試用驗證。有鑒於此，發展材料數位應用的契機來臨，透過模擬方法協助實驗累積足夠的資料庫，再經由機器學習AI技術建立正確的預測模型，能夠快速找出新材料配方、製程優化條件與產品可靠度失效模型，以提供新產品在性能設計、可製造性設計與可靠度設計上所需的參數，大幅縮減新產品開發時程與成本。

本期技術專題內容包含：「高分子混材之多尺度電腦模擬」、「量子力學模擬結合AI技術輔助材料設計」、「分子級反應型網實整合之材料模擬技術」、「離散耦合有限元素模擬於反應暨模壓製程應用」及「人工智慧於材化產業之應用技術」等數篇專文，內容豐富、深入淺出，值得產業布局與業界未來數位轉型應用之參考。運用多尺度模擬設計技術、機器學習及數位AI在材料化學領域應用，導入材料模擬設計、預測及分析、結合模擬與AI的平台技術，希望能協助國內產業研發人員拓展材料設計之視野，縮短材料研發時程，以加速材料之設計、改質、篩選及差異化產品開發進程。透過成功的理論、實驗與AI應用技術結合，期望對產、研、學與未來開發碳中和/淨零碳排放材料、循環經濟產業、數位AI產業、5G/6G材料、輕量化複合材料、高值材料與製程設計應用有所助益，創造應用轉型新機會。🔗