



材料數位設計服務平台-

以人工智慧機器學習技術加速創新材料設計應用

Digital Data Driven Machine Learning for Materials Design and Applications

□技術簡介

以往在材料產業中，無論是配方設計、製程機台參數亦或是後端產品特性，大多以土法煉鋼 trial-and-error 的方式來進行，不僅耗費大量人力物力與時間成本，新材料或新產品的開發周期更是長達數年。

如今，因電腦計算效能與數據分析技術日趨成熟，人工智慧機器學習已是顯學，在大量數據分析上已可完全取代人工，即便是在材料領域，與人工智慧機器學習技術的結合也已是國際趨勢。

機器學習技術是透過數學演算法，以舊有數據進行訓練產生預測模型，透過此模型在實驗之前篩選合適的參數，進而加速材料研發的時程，提早佈局下世代材料與產品；在材料產業中，數據累積不易，因此如何將機器學習技術應用於小樣本的材料研發上更是技術瓶頸。工研院材化所可提供的服務內容包含客製化預測模型軟體與技術服務、材料 AI 人才培育。

□創新特色

跨領域導入人工智慧機器學習分析技術於材料研發，解決材料產業在產品研發與開發上的各種議題。

□研發成果

高導熱環氧樹脂配方開發

以電腦模擬結合機器學習分析技術，從 53 組樹脂配方(環氧樹脂+硬化劑)的實驗結

果建立的導熱係數(Thermal Conductivity)預測模型準確度(R^2)可達 0.88；透過該預測模型針對多種新型環氧樹脂及硬化劑分子進行預測，在實驗之前找出最佳高導熱樹脂配方。

陶瓷材料耐化性預測

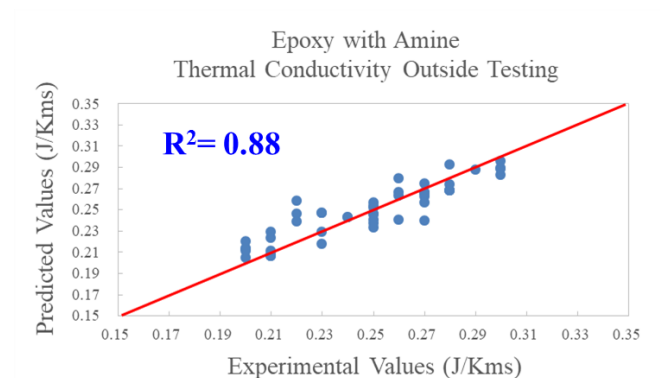
以 18 組燒結實驗結果，結合氧化鋁比例、助熔劑配比以及燒結製程參數…等機器學習所需參數，建立陶瓷閥片耐酸蝕、耐鹼蝕的快速預測模型，預測準確度(R^2)分別為 0.93、0.87。透過該預測模型，可針對耐酸鹼蝕不同的規格需求，快速設計燒結配方與燒結製程參數。

多層 PCB 板熱翹曲率

目前在 PCB 製造端，尚無工具可即時預測每一塊 PCB 板的熱翹曲率，而以模擬計算仍耗時過久，無法即時解決製造端的需求。因此我們以有限元素分析法(Finite Element Analysis)所建立的 800 組 PCB 熱翹曲的數據庫，透過機器學習分析，建立熱翹曲率預測模型，並開發成客製化軟體界面提供製造端使用，能以每一層的平均殘銅率快速預測整體板材的熱翹曲率，預測準確度(R^2)可達 0.94 以上，即時解決品質管控的問題。

可應用範圍

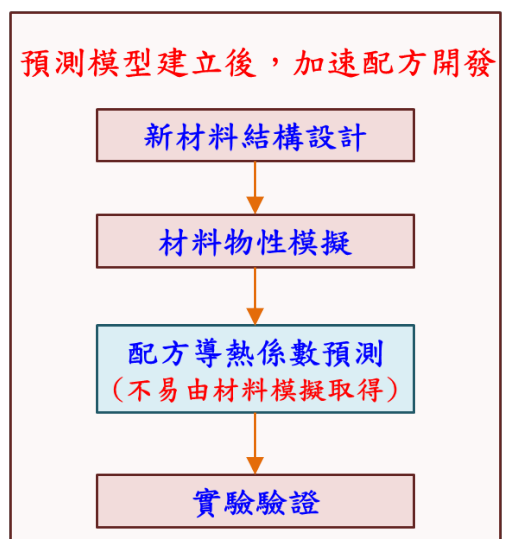
新材料分子設計、材料配方比例設計、製程參數最佳化以及元件模組特性預測。



純材料物性(輸入特徵)

- | | |
|--------|--------|
| 環氧樹脂 | 硬化劑 |
| • 比熱容 | • 比熱容 |
| • 密度 | • 密度 |
| • 導熱係數 | • 導熱係數 |

- Inside Testing R^2 : 0.97
- Outside Testing R^2 : **0.88**



圖一、機器學習導入高導熱樹脂配方案例說明

陶瓷材料耐化性
影響參數
(輸入特徵)

- 氧化鋁比例
- 助熔劑配方
- 助熔劑比例
- 粉體造粒
- 乾壓壓力
- 燒結溫度
-

以12組實驗結果進行學習驗證

酸蝕失重(%)預測準確度(R²)為0.89
鹼蝕失重(%)預測準確度(R²)為0.50

以18組實驗結果進行學習驗證

酸蝕失重(%)預測準確度(R²)提升至0.93
鹼蝕失重(%)預測準確度(R²)提升至0.87

藉由專家知識導入以及機器重複學習的過程，
可將鹼蝕失重預測準確度由0.50提升至0.87。

預測模型建立後，可快速協助廠商
進行配方與製程參數設計

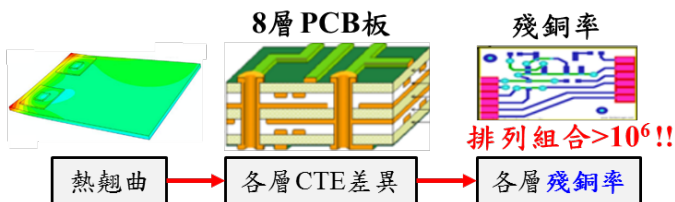
廠商提出耐化性規格

材料配比、製程條件
快速預測

進行實驗驗證與微調
協助水五金閥片廠商
快速取得工業等級耐
化性產品，提升產值
20倍。

159

圖二、以陶瓷配方及燒結製程參數預測陶瓷燒結閥片之耐化性



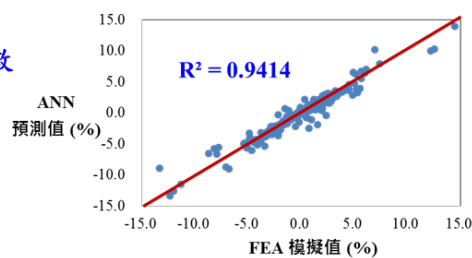
X 實務：無法預測製程與翹曲率關係

△ FEA模擬：耗時數月~1年

✓ AI客製化工具：僅需數分鐘~小時

PCB熱翹曲影響參數
(輸入特徵)

- 各層平均殘銅率



預測模型建立後，協助廠商分析
板材熱翹曲狀態及解決方案建議

即時熱翹曲率預測
(客製化預測工具)



解決方案建議
如何調整各層殘銅
率，降低熱翹曲率。

圖三、機器學習客製化軟體即時預測多層 PCB 板的熱翹曲率

研發部門及聯絡窗口：

工研院材化所：張哲銘(03-5916849)、張志祥(03-5914353)