

-MY INDEPENDENT READING REPORT-

Name / ID: 曹心譯 / 0611527

Title of the book: AI FOR SCIENCE

Title of the chosen chapter: 01. Chemistry, Materials, and Nanoscience

- Reason of the chosen chapter -

作為材料系大四的學生，在閱讀章節的選擇上，選擇了和材料有所相關的部分，另外因為在專題實驗上的研究領域屬於生醫奈米材料，因此綜合自己所學以及擅長的研究範疇，選擇了“Chemistry, Materials, and Nanoscience”這個章節來作為我的閱讀主題。

- Introduction -

材料對於現今的科技發展一直都是十分關鍵的角色，材料本身的特性以及化學上各種化合物的能力都是所有科技工程應用上的基礎。舉例來說，金屬材料的發展從古時候的青銅時代到鐵器時代，意味著古文明的大躍進，可見材料的發展對於人類文明的貢獻是非常重要的；現今人手一隻的手機發展，也歸功於各種材料的發展演進，得以從原本重達一公斤，一次只能通話30分鐘的手機發展至輕巧又堅固、功能多元、耐用且電池持久的智慧型手機，這一切都是建立在材料的快速發展。然而，在傳統的科學研究手法下，化學以及材料領域更進一步的發展受困於各種複雜且艱難的理論模型，但人工智能的出現為這樣的困境帶來了更多的可能，它可以透過合理的計算方式去生成實驗上難以取得的科學數據，甚至得以去探索難以想像的原子尺度空間下的設計及開發。

- State of the Art -

在探索發掘新材料或是化學反應時，非常依賴實驗以及理論所得到的科學數據，而面對成千上萬種材料與化合物，機器學習的方法便開始發展出其潛力和優勢，像是文章中提到的可以利用機器學習來加速電池新材料的分類，從

14年縮短到不到5年，先不提及透過機器學習以及傳統實驗作為研究方法，本身就減少了多少人力資源與資金的開銷，縮短的這9年更是大大降低了各種成本的支出，並且加速了科技發展的腳步。

而隨著科技的快速發展，機器學習的計算功能也需要不斷增強，以擴展更大尺度範圍的材料結構計算，像是當尺度縮小到電子結構等級的計算，其計算上會越複雜且精確度的要求也隨之增加，所以在機器學習加速科技發展的同時，機器學習本身的計算性能的提昇也成為了非常重要的前提，只有黨計算技術也不斷精進才能趕上當今的科技發展需求。

- Major (Grand) Challenges -

目前在如何設計出並完善一個對於現實應用上有所需求的特殊新材料或化合物是最大的挑戰，而 Basic Energy Sciences Advisory Committee (BESAC) 就有在2015年提出了 “*Challenges at the Frontiers of Matter and Energy: Transformative Opportunities for Discovery Science.*” 這份報告，概述了在現今科技的變革上，物質以及能源領域中需要面臨的挑戰有哪些。

Design metastable phases and materials that persist out of equilibrium.

亞穩態的相和材料可以讓人們獲得超出平衡熱力學得出的極限之外的各種特性，而亞穩態若是要利用計算模擬的方式來有效的複製出來，對於在線即時的分析則不僅僅需要很快的速度還要可以負荷大量數據的反饋。

Understand and control interfacial processes and properties.

一般要控制兩種不同物質的界面重點在控制兩種不同相之間的原子鏈和分子的相互作用，而這一部分在透過人工智慧發展的協助下，得以更加精準的瞭解並控制界面之間較複雜的層次關聯性。

Design materials and molecules for quantum information sciences (QIS).

在這段內容特別提及了量子糾纏和相干集合的相互作用，將作為提供計算更大量物理信息進行處理的一大突破，從而實現更加快速、更有效率的機器學習結果，以解決更多當前往量子材料發展上遇到的各種問題。

Understand the critical roles of heterogeneity in complex systems.

材料所謂的異質性是作為動力學上的一大驅動力，而對於異質性的材料來說，根據其尺寸與時間的尺度等級，來研究不同情況下其電子和光電之間被激發導致交換的過程，以此來瞭解各種材料的多樣性影響的增長和行為。

Understand and master energy and information with capabilities rivaling those of biological systems.

瞭解生物系統的信息可以讓我們對反應的機制有更加細微的瞭解，透過對反應環境的影響的能量變化等等資訊，可以綜合這些訊息以更加容易探索新的化學反應途徑等等。

- Advances in the Next Decade -

"In the next five to 10 years, AI will be an integral part of a scientist's discovery and design arsenal. Scientists will use AI to generate scientific data in a rational way, formulating new physical models and theoretical insights that drive new paths of rational design of materials and chemicals, exploring atomic design spaces currently unimaginable. "

以上從文章中擷取的片段直接點名了人工智能在推動新材料的設計上，是扮演什麼樣的角色，以及期許能夠探索原子尺度空間的設計。而這篇文章的發表其實是在2019年中，到現在其實也已經過了兩年了，在這短短的兩年間所面臨的挑戰也好，期許的研究發展趨勢也好，可能都有了不少進展或是轉變。然而我認為終歸不變的是人工智能得以做到更多，無論時實體的實驗操作或是根據理論計算推測，都會遇到其限制導致各種誤差的存在，而這種不精準則會導致進一步的科學研究發展無法延續。

這一大段的文章內容中提到了各種人工智能在接下來十年的發展趨勢，其中提到的都是在原有的科學發展基礎上，傳統實驗或是人工計算無法做到或是負荷的工作，在現今這樣的大數據時代，人工智能在這裡很明顯的體現了它的重要性。

另外文章內容還提到了對於更多罕見事件的檢測和識別也將會是重要的一大趨勢，對此我十分深有感觸，平時我們在做實驗的時候，或是在數學推導計算上，很長會去將所謂的“罕見事件”給忽略，在宏觀尺度下的觀察，我們會

因為一些偏差的微小而忽略不計，雖然我們就當前的研究可以得到準確的結果，然而若是進行更加深入的探討，隨著科技發展，我們越是重視微觀尺度下，尺度等級約小的情形，那麼原本因為微小或是罕見而被忽略刪除的那些現象或數據，則會成為使得科技發展停滯的一大因素。

- Accelerating Development -

這個部分提到了作者認為在發展上有迫切性的一些領域，包含了以下：

- Advance edge computing and integrated experimental instruments.
- Enable in situ multimodal analysis.
- Enable automated smart characterization.
- Enable AI/ML approaches to represent physics.
- Enable big-fast data at the signal-noise edge.
- Develop a workforce that can work across domains.

以上這些內容對我而言是相對比較陌生的，前面提到的比較是和材料及化學方面上各領域發展的重點與趨勢，讓我比較能夠連結我目前所接觸過的知識，然而這個部分比較是從人工智能及機器學習的角度來探討主要應該優先重視並且發展的領域。

讀完這一大段，讓我認識到了更多不同的人工智能及機器學習在進行計算模擬上各種各樣會利用的方式，來解決可能會遇到的問題，如何得以最大程度地減少不確定性，如何找到最佳的決策算法，如何最大化減少誤差達到高度的精確率等等。在既有的科學知識理論的基礎上，以及現有積累的各種科學數據，透過人工智能與機器學習去提昇預測結果的速率及品質，接著再針對這些預測結果進行的驗證工作也是非常重要的一環，期許最終可以得到材料結構及功能最完整的數據結果，以確保人工智能與機器學習為材料及化學領域的發展提供最精準且完善的基礎。

- Expected Outcomes & Conclusion -

當人工智能能夠達到自主進行實驗計算時，勢必會對科技的發展有非常大的影響，在不同的領域上有變革性的突破和進步的時候，針對各個領域的情況結合當前的社會問題，也會造成不同趨勢產生。

在材料的領域上，作者在這邊有提到材料性能的多樣性可能會超出一般的熱力學理論知識，出現那些超出我們原本的科學規則定義的框架，當有這樣的新的材料被發現，或是對於現有已知的材料發掘出了前所未見非常特殊的特性，那必定會進而影響到各大領域，尤其是工業及科技方面的發展。

讀完這一整個章節，對於人工智能與機器學習的發展潛力真的感到十分震撼，現今的社會發展處於一個大數據時代，人們對於資訊應用以及人工智能越來越重視。雖然我讀的這個章節，主要把視野放在材料與化學領域下進行分析探討，但是除此之外，人工智能對於其它各種各樣的領域都能成為加速發展的重要關鍵，而機器學習的應用範圍也非常廣泛，相信未來，且應該是不久的將來，因為人工智能而掀起的科技革命就會大大加速人類社會文明的發展。

Word count: 2723
