

# HW2 報告

## 一、心得

材料開發與研究的過程中，主流可以分為實驗與模擬兩種方法，這兩種方法都是為了可以更好的探索材料內部的微結構演進以及在巨觀世界中產生我們所想要的特徵。實驗是利用精密儀器與高速相機觀測材料的微結構，並對材料的微結構進行操控與性質的量測。另一個則是使用 HPC(高效能計算)進行材料模擬，例如有限元素法，分子動力學模擬，第一原理計算等等。不同的模擬方法可以解決不同尺度下，不同的材料問題，並建構出數以千萬的分子或化合物資料庫。

然而沒有一個方法是完美的，也沒有一種方法是可以獨立存在的，一項方法的進步與使用，往往是與其他方法的進步習習相關的，文章列舉了目前研究過程中比較大的挑戰，而文章也指出了我們如何在過程中導入 ML/AI，解決目前遇到的問題。以文章中提出的挑戰為例，如果想要藉由 TEM 由下而上製造出處於亞穩態的材料，需要在過程中，重複的進行快速且高效的實時分析。傳統的計算方法在此時會導致延遲，使得實驗過程發生失敗。如果引入了訓練好的 ML/AI 模型，則可以帶來一個良好的解決方案，化解原本過

程中遇到的問題。其他在材料的開發、探索也是如此，如 Fig 1 所示，開發一款材料是相當耗時的，而 AI 的加入可以大幅節省傳統方法所需要消耗的時間，讓我們可以節省過程中等待的時間，將專注力放在對結果的分析。

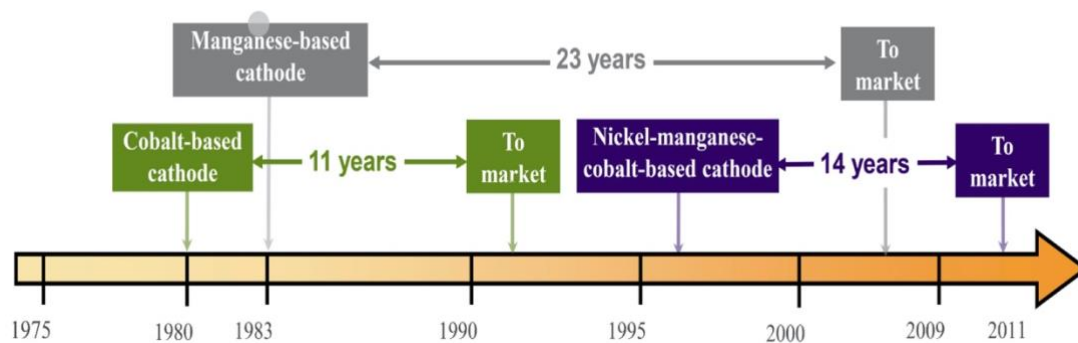


Fig 1. Timeline from discovery of  $\text{LiMn}_2\text{O}_4$  to NMC materials for batteries

而看完文章後感受最深刻的地方在於，充分地理解到實驗、模擬以及 ML/AI 間的關係是相輔相成的，彼此間互相的幫助，也互相依賴彼此進步。實驗儀器的進步，可以帶來更多高品質的資料，使得 AI 模型擁有更好的訓練數據，取得更好的效能；儀器的進步也能使我們更加瞭解材料背後蘊含的定理，這也能使得模擬的理論方法更加的全面。而模擬方法的進步將使我們可以更加精細的理解微觀世界原子的變化，也能減少實驗耗材的支出，甚至能比實驗端更早發現到新性質的產生，模擬方法也有助於產生大量的材料資料庫，利用這些龐大的數據，也能使 AI/ML 模型得到強化，得到更好的預測能力，例如我的研究，就是將基於 MD 方法產生的資料進行標注，並使用 GNN 進行學習，取代傳統的數值方法計算，相較於以

往，能夠節省超過 75%的時間(整理於 Fig 2 ~ Fig 3)。

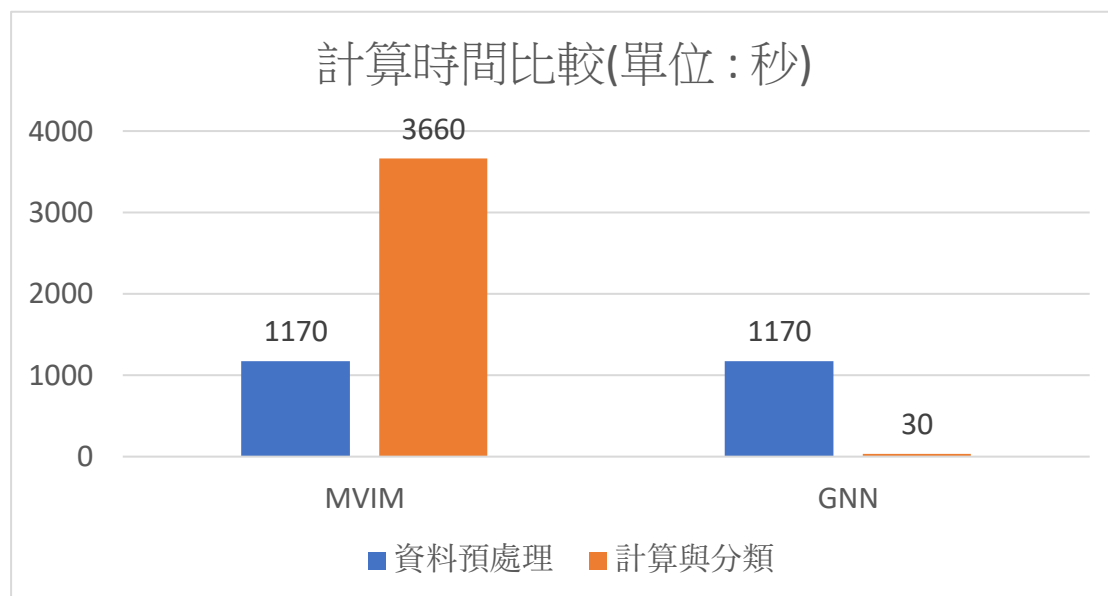


Fig 2. 傳統計算方法與使用 AI 模型進行分類任務的速度比較，MVIM 為傳統數值計算方法，GNN 則為圖神經網路

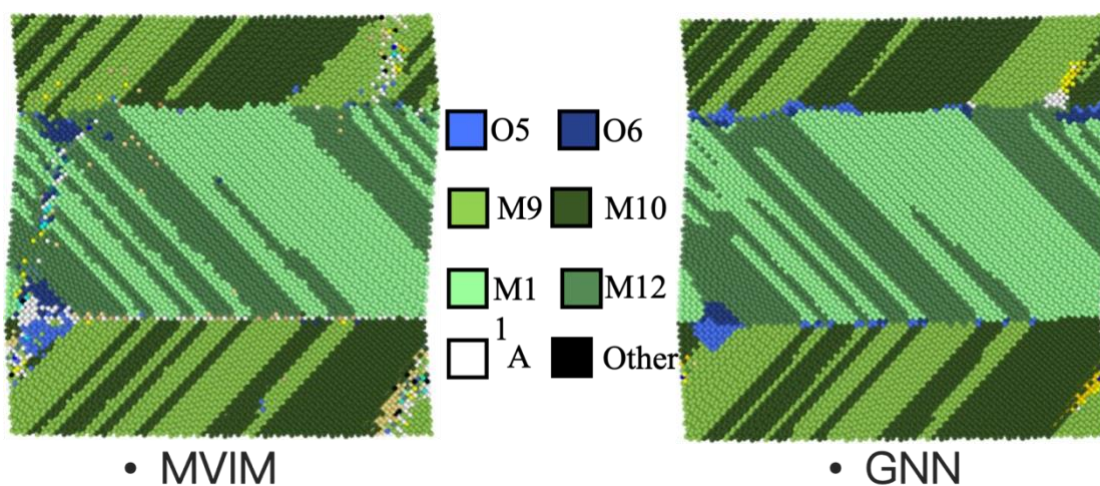


Fig 3. 傳統數值方法與 AI 模型進行分類任務的結果比較

因此，在 ML/AI 的幫助下，實驗跟模擬也能加速進步的幅度，讓做研究的人能夠更快速地瞭解材料蘊含的秘密。