機器學習於材料資訊的應用 Machine Learning on Material Informatics

針對你的專題或研究主題[,]説明有哪一部分有用到計算或量測[,]你用了什麼技術或儀器[,]計算或測量了什麼性質。(一張圖,篇幅不要超過一張 A4。)

A:

目前的研究主題隸屬於科技部工程司智慧仿生材料與數位設計平台四年期整合型計畫「利用仿生及材料基因技術平台設計並開發具優異機械性能之創新輕量化結構材料」,旨在設計與生成具可預測性質的輕量化仿生結構材料。

天然材料經數億年的演化,發展出有別於工程材料強度與輕量化、剛性與韌性無法兼具之限制,生物材料常由硬而脆的礦物質和軟而韌的蛋白質組成具複雜多階層結構之複合材料,其在奈米、微米、介觀、巨觀尺度下的韌化/強化機制,造就了兼具輕量化、高強度且高韌性的優異機械性質;透過釐清其背後的原理,如:階層式結構、多功能性、於常溫常壓下以少數幾種材料自體組成多樣化性質結構材料、自我修復與適應環境之能力...等,可望提升結構材料的機械性能。

在「利用仿生及材料基因技術平台設計並開發具優異機械性能之創新輕量化結構材料」計畫中,需要生成輕量化的結構並透過模擬(拉伸、壓縮、扭轉...等)驗證其性質(包含:應力、應變、彈性模數、降伏強度、強度、能量吸收...等)。生成結構的部分包含二維及三維多孔結構,有別於傳統在優化命題上使用貪婪演算法或基因演算法...等強化學習算法,我希望可以透過類似生成式對抗網路的演算法規避擬合過度的情形,並透過迭代逐步達到優化的效果,即產生的輕量化結構不會僅針對一種受力條件做優化,而是可以產生一個應對多數受力下都可以達到合格表現的結構;同時也希望可以透過合理的機器學習模型取代現有的物理模擬引擎(有限元方法不能解決隨機且不連續的裂紋生成、粒子模擬花費過多的計算時間),現有的模擬方式都會成為效能瓶頸,因為所需的計算量跟時間都過多,無法有效地應用於結構優化的模型當中。

