

國科會工程處學門主題式計畫 「結合製程、結構與材料基因學開發先進工程材料」計畫 徵求公告

一、計畫背景

多元且高品質的製造業乃是奠基於多樣且先進的材料科技。基於數位及永續發展的國家願景，我國近年已由金屬、陶瓷材料等基礎研究，快速推展至半導體、光電、綠能、仿生、高性能合金等多功能性材料相關研究。為配合科技與產業發展策略，材料工程學門兼顧強化材料科學基礎研究及推展先進科技應用。在我國正面臨產業升級與轉型的階段，以及少子化的衝擊之下，除了提昇現有人才的專業程度外，如何促使材料領域學者與相關產業有更緊密的合作關係，培育新一代的創新研發人才，以回應人工智慧及數位時代的需求，為材料工程發展之重點之一。

美國拜登政府白宮科技政策辦公室 (the Whitehouse Office of Science and Technology Policy) 於 2022 年 2 月 8 日修訂發布「關鍵及新興科技清單 (2022 Critical and Emerging Technologies List)」，選定包括「先進工程材料」等 19 項重點科技，作為現階段及未來科技發展策略。其中，「先進工程材料」項下含有四個次領域，分別是(1)材料設計及材料基因學、(2)具有新特性的材料、(3)對現有性能進行重大改進的材料、(4)材料性能特徵及生命週期評估。其中次領域二~四項涵蓋了研發先進工程材料基礎手段與目的，係為我國產學研界長期以來所積極投入，其應用方向包含攸關經濟發展之半導體、光電、通訊、綠能、生醫等民生工程材料，以及維護國家安全之國防、航太所需之特殊金屬及陶瓷工程材料。我國在各項精密材料製造技術與良率領先國際，創造產業經濟價值，即為奠基於此。

至於第一項次領域「材料設計及材料基因學(Materials by Design and Material Genomics)」，為歐巴馬政府於 2011 年推動之材料基因組計畫 (Materials Genome Initiative) 之延續與擴展，主要目的為基於大量製程參數與材料特性數據，以人工智慧(AI)方法進行分析與快速學習，並搭配理論模型，加速新材料的設計與研發時程。工研院於 2017 年開始建立材料數位科技服務平台，整合材料產業與資料科學等數位技術，搭配產業領域豐富的專家經驗，將人

工智慧數位化技術導入在材料研發、產品設計與智能化生產管理上，協助材料產業進行數位化升級，同時也降低技術導入產業的門檻。國科會在 2018 年啟動「智慧仿生材料與數位設計平台」專案計畫，在此專案計畫的引領下，陸續帶動我國材料工程學界研究團隊積極使用人工智慧技術發展功能性材料，投入材料基因學相關研究。

美日兩國在 2011-2020 十年間，對於材料基因學的研究集中在利用第一原理之密度泛函理論(Density Functional Theory, DFT)計算產出足量理論計算數據，再利用神經網路機器學習(或深度學習)建立模型，以預測材料功能特性的「理論數值」。其中最顯著的成果為美國的 Materials Project 開放存取資料庫，其資料包含無機化合物的結晶結構(crystal structure)，能隙(energy gap)與生成焓(enthalpy of formation)，其中多數為密度泛函理論之計算數據。

由於美國在以理論計算產出材料特性數值之資料庫的規模已相當完備，就材料工程的應用，我國在發展以人工智慧方式推測材料功能特性時，應思考如何集中資源，投入結合實驗數據與基礎材料科學理論，例如：界面、微觀結構、熱力學、動力學等等，納入材料人工智慧模型中，這也是貫穿發展功能性材料的共同主題。如果可以根據材料分析實驗數據(例如：顯微結構照片)，快速計算且預測出材料特性(例如：應力(Stress)或應變(Strain)值)，將是新材料研發與設計的一項重要工具。

材料工程之本質為實驗科學，以鏈結「製程-結構-性質 (Process-Structure-Property)」三者之間的相互關聯性，作為研發先進材料的核心理念。材料科學中幾乎所有關鍵都與「製程-結構-性質」關聯有關，從製程到結構到性質的演繹，基本上是多對一，許多製程方法可能會產生相同的材料結構，並且可能透過多種結構來實現材料的相同特性。每個加工方法、材料成分以及實驗觀察所得結構參數若是可以成功被轉為為數據點，集合大量數據點即成數據庫，以構建數據驅動的正向模型，連結到材料特性(性質)表現。這樣的模型不僅可以正向推測材料功能特性，還可以實現更具挑戰性的逆向模型。

隨著科技的發展，幾個世代以來，材料科學領域從實驗性質的冶金科學，逐漸進入以數學方程式制定理論和通則，來瞭解不同材料的物理性質。然而隨著時間的推移，理論模型的建立愈趨複雜，也難以分析解釋許多科學問題。當今「大數據」時代興起，資訊工程工具對於數據的收集能力與解析能力，已較之前有大

幅進步。利用正向模型（性質預測）和逆向模型（材料發現）的數據驅動技術，演譯材料中的「製程-結構-性質」相關性，由特定的材料性質作為出發點，反推材料結構，再反推製程（實驗）條件，對新材料開發和設計將更具有關鍵加速作用，也更具挑戰性。此即為美國「先進工程材料」科技策略中，將「材料設計及材料基因學」列為首要推動項目的主因。隨著人工智慧技術的進步，將機器學習與深度學習方法應用於材料與製程開發設計，已經成為主流趨勢。這個過程包含取得足量的材料資訊，數據化材料資訊，以及利用適當的演算法處理材料資訊建立有效模型，以落實材料科技數位智慧化之目的。

二、計畫目標與範圍

本專案以「材料基因學」為根基，推展數位化先進工程材料研發，達到數據驅動材料創新發展(data-driven material innovation)為目標，同時並兼顧材料基因學相關人才培育，維持我國在高科技製造業所需工程材料科技與人才優勢的國際競爭力。主要研究議題如下：

1. 建構數據驅動之「製程-結構-性質」關聯模擬技術

針對特定功能性(如：機械、電、光、磁、生醫等)材料之製程條件與材料結構，進行系統性數據收集並分析，為研發新材料的基本工作。每個實驗參數與量測皆可成為數據點，來自不同製程設備的實驗成果，可能屬於不同類型的數據，如何決定數據的「特徵」，以建構實用的數據資料庫，為材料科學及工程的專業知識(domain knowledge)須積極參與之處。

此外，不同製程條件可能會造就相同的材料結構，不同材料結構亦可能會具有類似的材料性能。根據材料研發階段與目的，採用適合之演算法，建構聯結「製程-結構」之數據驅動模型，或是聯結「結構-性質」之數據驅動模型，將各有其學理性或實用性之效益。亦可搭配材料熱力學(或動力學)或其他理論，發展多重尺度模擬技術或機器學習模型，由正向模型發展至逆向模型，以滿足正確的材料結構預測，有效定義製程參數，減少實驗或模擬的運作時間，亦為亟需發展之項目。所發展之數據驅動模型之可擴充性，將為其實務應用之重要評估指標。

2. 材料微觀結構之數值化策略

微觀結構為材料製程之結果，也是材料性能表現之根基。以數據驅動之材料基因學之基礎在於數據的收集，但微觀結構大多為圖像(例如，電子顯微鏡影像)，甚至是時空圖像(例如，斷層掃描、結構演化)，因此其數值化為一項重要工作。單純的影像數位化已有現成資訊工具可以協助，然而如何將材料微觀結構資料轉化成為恰當的數據形式，並且可有效「標示(label)」影響材料性能的「關鍵特徵」，以及處理其複雜性和多樣性，為材料基因學是否可以發揮實際應用的一大挑戰。此項工作需要仰賴資訊科學專家與材料科學專家的協力合作。將微觀結構以合宜的方式進行數值化之後，須進行「製程-結構」或是「結構-性質」的關聯，以驗證微觀結構數值化之應用性及擴充性。

3. 高通量(High-throughput)材料實驗或快速材料特性分析技術發展

機器學習為運用人工智慧處理及探勘大數據的典型方法，但目前應用機器學習進行材料特性研究所使用的學習資料，經常為第一原理計算或其他理論計算的數據。若只從理論計算資料進行「製程-結構-性質」的預測，在實用上將有所極限。因此，發展並推廣高通量材料實驗及特性分析的技術，達到大量、快速且準確獲取材料計算關鍵數據，為材料基因學能夠應用人工智慧開發新材料的關鍵。高通量材料實驗所獲得數據，進一步搭配機器學習材料模擬工具，將可有效歸納正確或適當之製程參數，避免嘗試多重交錯參數實驗所需時間及成本，加速材料篩選和設計。

三、計畫書之撰寫與說明

1. 本項學門主題式計畫申請時請以三年期計畫進行規劃撰寫，並以單一整合型計畫之方式提案。計畫核定採分年核定，申請經費以每年 700 萬元為上限。
2. 計畫團隊成員(總主持人)以材料工程學門為主，並鼓勵跨領域共同組成研究團隊。計畫經核定補助後，僅由總計畫主持人列入本會專題研究計畫件數計算。

3. 整合型計畫各子計畫間應具備整合性、合作性或互補性。計畫內容必須陳述整體計畫目標，加強說明總計畫與各子計畫間整體配合與應用情境，以強調整合之邏輯性與必要性。
4. 計畫內容應針對本專案計畫所列重點研究項目進行深入研究分析，具體說明國內外相關現況，詳細訂定每年度預計達成之技術指標，並應以補強關鍵技術缺口、具有具體可行的應用情境、明確之學術或產業需求為目的，以證明本計畫之技術優勢與研究之必要性。

四、計畫審查與考評

(一) 計畫審查重點

1. 計畫團隊成員(總主持人)以材料工程學門為主，並鼓勵跨領域共同組成研究團隊。請於表 CM04「四、整合型研究計畫項目及重點說明」中說明總主持人及各子計畫主持人之所屬學門、專長領域與分工合作規劃，以便審查委員瞭解是否符合上述要求。
2. 總計畫與子計畫的整體應用情境需說明，以強化整合之必要性。總計畫主持人須擔任子計畫主持人；計畫主持人的研究績效表現、領導團隊經驗與協調能力為審查重點之一。
3. 計畫之研究主題應著重於創新性、前瞻性及應用性，並結合學界研發能量及現有產業發展需求。計畫書應敘述國內外研究與技術發展現況，導引規劃多年期的技術平台發展藍圖。尤以解決開發工程材料實務需求，結合量測與材料分析實驗結果，進行大數據處理，發展正向與逆向預測模型，推進材料設計與材料基因學發展為要。
4. 計畫書需逐年陳述執行內容，並具體說明每一年度研發成效與查核點。研發成效須著重實際產出模型、資料庫或高通量技術對學術或產業之貢獻，及與國際標竿之比較。查核點須說明所發展之材料數位模型、資料庫或高通量技術之量化評量指標，可擴充性及公開方式。

(二) 考評機制規劃

1. 計畫團隊於計畫執行期間得視業務需要，提供研究成果或參與專案計畫推動之相關活動。每年進行研究成果追蹤、查核點達成率與考評，以為評審委員

查核之依據。必要時進行實地訪視或請執行團隊出席年度成果審查會議，展示所開發之技術與系統成果。

2. 經審查計畫執行績效未達年度預期目標，得動態調整或停止補助次年度計畫經費。
3. 獲補助多年期計畫之計畫主持人應於每年計畫執行期滿前二個月至本會網站線上繳交執行(期中)報告。於全程計畫執行期限截止後三個月內至本會網站線上繳交完整版成果報告。