

繁體中文 AI 書齋版

新材料設計與火箭推進工程的人工智慧

AI 勢能、自主實驗室與物理資訊機器學習 (PIML) 的融合

金京鎮律師

kimkj.com • AI 書齋 • 2026

新材料設計與火箭推進工程的人工智慧

AI 勢能、自主實驗室與物理資訊機器學習 (PIML) 的融合

金京鎮律師

從學習單一原子運動的機器學習勢開始，到先設定所需性質並反向生成晶體結構的生成模型、機器人自主重複實驗的自主實驗室、守護火箭高溫部位的高熵合金與陶瓷複合材料、金屬 3D 列印的缺陷監控與疲勞壽命保證、將物理定律納入損失函數以計算燃燒的物理資訊機器學習，以及冷卻通道設計、液體火箭發動機的即時診斷與強化學習控制，共整理為十章。本書為喜愛科學技術的一般讀者以無公式的方式深入淺出解說，每章皆附上經查證的佐證資料，是一部反映了兩位人工智慧審查者如指導教授般嚴格批判的審定修訂本。

公開研究資料庫

本書由人工智慧整理製作而成。彙整並綜合了來自全球主要語言的資料。NotebookLM 無論資料是以何種語言撰寫，皆不限制提問語言。讀者可以在用於準備本書的同一個研究資料庫中，以自己的語言提問。即使部分資料是以韓語、英語或其他語言撰寫也是如此。只要在 NotebookLM

中開啟設定，將輸出語言指定為所需語言，回答與生成結果就會以該語言呈現。

準備本書時使用的公開 NotebookLM 資料庫 (AI for Materials Science and Rocket Engine Engineering，資料 129 件)：<https://notebook.google.com/notebook/ac39e3ce-77a9-4e78-9aaf-b52c45c2934d>

本書的韓文原版位於 kimkj.com AI 圖書館：<https://kimkj.com/ai-library/?mod=document&uid=12453>

目錄

點擊各章標題即可前往該章內文。若想從頭閱讀，請選擇第 1 章。

第1章 材料資訊學的基礎與機器學習原子間勢（MLIP）

第2章 基於生成式AI與擴散模型（Diffusion Models）的晶體結構預測（CSP）及材料逆向設計

第3章 自主實驗室與科學多智慧體系統

第4章 高熵合金（HEA）與超合金之物理一致性預測及成分最佳化

第5章 航太用複合材料（CMC）及超高溫陶瓷（UHTC）的微觀結構控制與加熱壽命評估

第6章 金屬積層製造（LPBF/DED）製程熱應力建模與原位（In-situ）缺陷感知

第7章 3D列印航太合金的後加工與高週期疲勞壽命保證

第8章 透過物理資訊機器學習（PIML/PINNs）與運算子學習（FNO）進行氣體反應流動與燃燒化學建模

第9章 再生冷卻流道、氣膜冷卻孔及誘導輪的拓撲逆向設計最佳化

第10章 液體火箭發動機（LRE）的即時故障診斷、數位孿生及基於強化學習的推進即時自適應控制

第1章 材料資訊學的基礎與機器學習原子間勢（MLIP）

前言

我們使用的所有物品都是由材料製成的。湯匙用鐵製成，杯子用玻璃製成。火箭發動機的噴嘴也是用特殊的金屬和陶瓷製成。材料改變，物品的性質也會隨之改變。

材料的性質始於肉眼看不見的微小顆粒。那個顆粒就是原子。原子是構成物質的基本單位。根據原子如何結合與如何運動，鐵可能會變硬，也可能會變軟。

製造火箭的人希望能預先知道這些原子的運動。火箭發動機內部的溫度會上升到數千度。壓力也非常高。必須預先知道金屬在這種環境下能否不融化並承受住考驗。若製造實際零件進行測試，會耗費大量的金錢與時間。因此，科學家會在電腦中模擬原子的運動。這就是原子模擬。

要在電腦中讓原子運動，就需要規則。因為必須知道每個原子朝哪個方向受到多大的力。長期以來，精確制定這個規則的方法與快速制定這個規則的方法截然不同。精確的方法緩慢，而快速的方法則不精確。打破這兩者之間隔閡的新途徑，就是機器學習原子間勢（Machine Learning Interatomic Potentials, MLIP）。此後將這項技術稱為 MLIP。

本章將循序漸進地闡述 MLIP 是什麼，以及它是如何發展而來的。首先探討原子計算的兩種傳統方法。接著觀察機器學習如何銜接兩者。依序從早期的方法探討至最新的方法。最後指出將這項技術應用於火箭材料與新材料研究時需要注意的事項。不使用數學公式，而是用能聯想出畫面的語言來解說。

「材料資訊學」一詞也在這裡首次出現。這個詞代表材料資訊科學。這是一門收集大量材料相關數據，並透過電腦分析來尋找新材料的學問。MLIP 是其中負責原子尺度計算的核心工具。

在此先說明為何這段內容會與火箭連結。火箭開發與尋找新材料密不可分。若有更輕且能承受更高溫度的金屬，火箭的性能就會提升。如果在實驗室中逐一製造並測試這類材料，將耗費數年時間。若先在電腦中透過原子計算篩選出候選材料，就能縮短這個時間。MLIP

就是讓這項計算變得既快速又精確的關鍵。讀完本章後，您將能掌握新材料如何在電腦中誕生的整體架構。

1. 引言與背景：密度泛函理論（DFT）與機器學習的結合

本節探討的內容

要在電腦中處理原子，就必須知道原子之間的能量與力。計算這個數值的方法主要有兩種。一種是連電子的運動都一併計算的精確方法；另一種是用預先設定的簡易公式快速求解的方法。本節將說明這兩種方法各自擅長與不擅長之處。

接著將探討這兩種方法之間長期存在的問題。精確的方法太慢，而快速的方法則經常出錯。為了克服這個問題，機器學習應運而生。本節將先為大家勾勒出這個整體輪廓。

本節中的幾個詞彙在後續會持續使用，即能量、力與勢能面。現在掌握這些概念的含義，後面的章節就會變得容易理解。這裡沒有困難的數學公式，只能用能聯想出畫面的語言來解說。

在處理原子的計算中，最核心的兩個數值是能量與力。能量表示原子排列有多穩定。能量越低，該排列就處於越舒適穩定的狀態。力表示每個原子朝哪個方向受到推擠。只要知道力的大小與方向，就能計算出原子在下一瞬間會移動到何處。

能量與力實際上並非各自獨立的數值。力源自能量隨位置變化而變化的劇烈程度。如果將能量比作地面的起伏，力就是斜坡的斜率。球會朝著陡峭的斜坡往下滾，原子也會被推向能量較低的方向。因此，只要掌握了能量地圖，力就能透過該地圖的斜率求得。這個關係在後續內容中將再次變得至關重要。

密度泛函理論（Density Functional Theory, DFT）是一種透過計算電子分佈來求解能量與力的方法。此後將其稱為

DFT。電子是圍繞原子運轉的極微小帶電顆粒。電子聚集在何處以及聚集的量多寡，決定了化學鍵。DFT 依據量子力學原理計算這種電子分佈。量子力學是極微觀世界的物理定律。因此，DFT 能夠精確描繪化學鍵。

DFT 給出的數值也並非絕對真理。DFT

是用近似公式來處理電子之間的排斥與吸引。根據所選擇的近似公式不同，結果也會略有差異。因此，DFT 數值與其說是真值，不如說是在特定設定下獲得的基準值。機器學習會學習這個基準值。後文即使將 DFT 稱為正確答案，也應作此理解。

問題在於速度。隨著原子數量增加，DFT 的計算量會迅速暴增。當原子數量增加為兩倍時，計算時間的增加遠遠超過兩倍。即使使用大型超級電腦，通常能處理的原子數量也僅在數百個左右。能夠計算的時間尺度也僅限於極短暫的瞬間。這並不適用於像火箭材料那樣需要長期觀察龐大塊體的情形。

在另一端則是經驗力場（Empirical Force Field）。這種方法是使用預先設定的簡易公式來計算原子之間的力，而不逐一計算電子。取而代之的是，僅根據原子間距離等少數數值來確定力。由於計算量極輕，因此甚至可以處理數百萬個原子，觀察的時間也能長得多。

經驗力場雖然快速，卻有其缺點。假設化學鍵固定的力場，難以準確描繪化學鍵斷裂與重新生成的瞬間。後來出現的反應性力場或金屬專用力場，雖然能在有限範圍內處理某種程度的鍵結變化與缺陷，但仍難以在廣泛條件下維持精確度。原子位置大幅變動的相變處理起來也相當棘手。在火箭發動機這般高溫且嚴苛的環境中，這類現象經常發生。因此，單靠簡易的力場會產生極大的誤差。

在此可以用日常生活的事物來比喻這兩種方法的差異。DFT 就像仔細批改一名學生的作業，雖然精確，但要批改全校學生的作業就需要耗費很長的時間。經驗力場則像快速瀏覽答案看是否正確，雖然快速，但在遇到難題時容易出錯。長期以來，科學家都必須在精確與快速之間二選一。

機器學習原子間勢正是為了打破這種二選一的藩籬所做的嘗試。勢能就像是一幅能告訴我們每種原子排列具有多少能量的地圖。這幅地圖被稱為勢能面（Potential Energy Surface）。MLIP 透過機器學習來學習 DFT 計算出的基準值。機器學習是一種能從眾多範例中自行找出規則的計算方法。只要學習了足夠的範例，就能快速預測新原子排列的能量與力。

進一步說明 MLIP 是如何進行學習的。首先用 DFT 計算多種原子排列的能量與力。這些計算結果就像寫有解答的習題集。機器學習模型看著這本習題集來熟悉規則，自行領會某種排列為何會具有那樣的能量。訓練完成後，即使是習題集中未曾出現過的新排列，也能快速求解。

這種方法的目標非常明確：建立既有 DFT 的精確度，又有經驗力場般迅速的計算方法。一旦實現這個目標，就能在電腦中對火箭材料進行大規模且長時間的測試。可以在原子尺度上觀察金屬在高溫下如何振動、裂紋如何擴展。在進行實際測試之前，就能先篩選出候選材料。本章接下來的內容，正是圍繞著實現此目標的各項技術所展開的故事。

有一點需要事先說明。MLIP 並不能完全取代 DFT。因為必須有 DFT 產生的基準值，MLIP 才能進行學習。這兩種方法並非競爭關係，而是相輔相成。DFT 建立基準值，而 MLIP 則快速推廣該數值。這種協作使得大規模計算成為可能。

2. 基於傳統描述符的機器學習模型

本節探討的內容

若要透過機器學習來學習原子能量，首先必須將原子周圍的形貌轉換為數字。因為電腦處理的是數字而非圖像。這份數字清單被稱為描述符（Descriptor）。本節將探討早期 MLIP 所採用的三種描述符方法。

這三種方法各自具有不同的特點。一種使用神經網路，一種直接比較兩種環境的相似程度，另一種則透過深度學習連描述符一併學習。這三者都取得了良好的成果，但也同時顯露出局限性。正是這些局限性催生了下一代技術。

優秀的描述符必須遵守一條規則：同一種物質必須始終以相同的數字來表示。把書桌旋轉放置，書桌依然是書桌。即使將原子結構整體旋轉或平移，位置雖然改變，物質本身卻依然不變。描述符不應受到這類變化的影響。這種性質被稱為不變性（Invariance）。

若無法保持不變性，就會產生問題。模型會將同一種物質誤認為多種不同的物質。如此一來，就必須把相同的東西分開重複學習多次，導致學習變慢且預測變得不穩定。早期的 MLIP 研究將精力集中在透過人工設計將這種不變性納入描述符之中。

2.1 分別學習每個原子能量的神經網路（BPNN）

貝勒（Behler）與帕里內洛（Parrinello）於 2007 年提出了一個重要的構想：將總能量拆解為各原子能量之和。這種方式被稱為原子能量分解。每個原子僅根據自身周圍環境計算出微小的能量值，將所有原子的數值相加，即為整個結構的總能量。這種神經網路被稱為貝勒-帕里內洛神經網路（Behler-Parrinello Neural Network, BPNN）。

神經網路是模仿人類大腦神經元連結所建立的計算架構。它接收輸入並經過多個階段運算得出答案。透過大量範例進行訓練後，就能學習輸入與答案之間的規則。BPNN

將原子周圍的形貌作為輸入，並輸出該原子的能量作為答案。

此時將原子周圍環境轉換為數字的工具，就是原子中心對稱函數（Atom-Centered Symmetry Functions, ACSF）。該函數以一個原子為中心，觀察一定距離內的鄰近原子，並將與鄰近原子的距離以及鄰近原子之間構成的夾角轉化為數字記錄下來。它分為僅記錄距離的部分與同時記錄角度的部分。以這種方式產生的數字，即使旋轉或平移結構也不會改變。

這種方法對火箭材料研究也具有重要意義。當金屬受熱時，原子會在其原位劇烈振動，與鄰近原子的距離和夾角會不斷改變。ACSF 能將這些變化捕捉為數字，因而成為學習材料隨溫度變化之動態行為的第一步。

然而，其局限性也十分明顯。隨著元素種類增多，所需的數字量會迅速增加。火箭用合金通常會混合多種元素。若有五種元素，元素對的組合數量就會大幅增加；涉及角度的三原子組合增長速度則更為驚人。像這樣隨著種類增加而使計算負擔急劇加重的問題，被稱為維度詛咒（Curse of Dimensionality）。

另一個局限性在於描述符必須由人工手動設計。涵蓋哪些距離與角度、取樣的密集程度如何，皆由人工決定。一旦選擇失誤，就會遺漏關鍵資訊。構建優秀的描述符本身就是一道艱難的課題。為了減輕這種負擔所做的努力，進而促成了後續方法的發展。

儘管如此，這種方法留下的深遠意義依然不可磨滅。將總能量按原子進行分解的構想至今仍然沿用。現代最新模型也大多遵循這項分解原理：每個原子僅觀察自身周圍環境得出數值，最後再將所有數值加總。得益於這種方式，即使原子數量再多，也能分塊進行計算。貝勒與帕里內洛的構想奠定了 MLIP 的基石。

2.2 衡量兩種環境相似度的勢（GAP）

巴托克（Bartók）與恰尼（Csányi）等人於 2010 年選擇了另一條道路。他們不使用神經網路，而是直接比較兩種環境的相似程度。這種方法被稱為高斯近似勢（Gaussian Approximation Potential, GAP）。當遇到新的原子環境時，會將其與已學習過的環境進行比較；若有許多相似的環境，便參考其能量來得出答案。

這項比較的關鍵工具是原子位置平滑重疊（Smooth Overlap of Atomic Positions, SOAP）。SOAP 將原子周圍描繪為柔和的雲霧，而非生硬的點。這相當於在每個鄰近原子上各放置一個模糊的球體。若兩種原子環境的雲霧重疊程度高，便視為相似的環境。這種方法的設計使其在旋轉時也能保持穩定。

描繪成柔和雲霧是有原因的。原子總是處於微小的振動中。若僅將位置視為生硬的點，微小的晃動也會導致數值劇烈跳動。若以雲霧描繪，微小的晃動便能平滑帶過。因此，SOAP 在處理晶體中的缺陷或無序材料時表現優異。

高斯近似勢即便在數據量少的情況下也能展現高精確度。在 DFT 計算成本高昂的情況下，這一點帶來了極大的幫助。它被廣泛應用於晶體缺陷、液態以及無序非晶材料的研究。在火箭材料中，缺陷與無序也是重要的課題。因此，這種方法成為了長期被引用的基準。

其局限性在數據量增加時顯現出來。這種方法會將新環境與所有已學習的環境進行比較。訓練數據越多，需要比較的對象就越多。如此一來，計算與儲存的負擔也會隨之增加。要處理如今動輒數十萬筆以上的龐大數據，計算量實在過大。

因此，這種方法在大規模問題上讓位給了其他架構。若要在龐大數據中快速學習，深度學習神經網路更為合適。因為深度學習是一種數據越多越能發揮威力的架構。不過，高斯近似勢所建立的精確度基準至今依然存在，常在衡量新模型效能時作為比較的對象。

SOAP所留下的理念也延續了下來，也就是將原子周圍視為平滑密度的構想。這個構想融入了後續出現的多種模型中。若以平滑分布代替生硬的點來處理，計算就會變得穩定，因為數值不會因微小晃動而跳動。在像火箭材料這種原子劇烈振動的高溫計算中，這種穩定性大有裨益。

2.3 連描述符也能自主學習的深度學習 (DeePMD)

張與卡等人於2018年正式將深度學習引入原子計算。這種方法稱為深度勢分子動力學 (Deep Potential Molecular Dynamics, DeePMD)。分子動力學是隨時間追蹤原子運動的模擬。DeePMD利用深度學習來計算此模擬中所需的受力。

先前的方法皆由人工設計描述符。DeePMD大幅減輕了這一負擔。神經網路會自行將原子周圍的坐標轉換為理想的形式，人類無需逐一挑選距離與角度。同時，它依然保持了不受旋轉與平移影響的特性。

在此也對深度學習這個詞做進一步的說明。深度學習是指堆疊多層的神經網路。將層數堆疊得越深，就能學習越複雜的規則。淺層神經網路只能學習簡單的規則，深層神經網路則能涵蓋原子間錯綜複雜的關係。相對地，學習時需要大量的數據與計算。「深度」一詞便是源於層數很深之意。

這種方法的優勢在於大規模。深度學習即使原子數量龐大，計算負擔也不會大幅增加。因此DeePMD能夠處理數百萬個原子的運動。它已應用於水、金屬、半導體等多種材料，在長期觀察大型系統方面發揮了強大力量。

DeePMD對火箭材料研究也具有重要意義。若要觀察金屬塊在高溫下如何變化，必須具備大量的原子。若只看小碎片，就會忽略整體的行為模式。DeePMD能夠處理大型區塊，因此非常適合這類研究。

儘管如此，早期描述符方法共同面臨的局限性依然存在。這些方法僅各自單獨檢視固定距離內的鄰近原子。若要納入遠處原子的影響，就必須擴大觀察距離。如此一來，鄰近原子的數量便會大增，導致計算負擔加重。從結構上來說，很難涵蓋長距離的相互作用。

DeePMD開啟的另一扇大門是與大型計算工具的結合。這種方法促成了在大型超級電腦上處理數十億個原子的研究，也被用於大規模計算混合多種元素之合金。火箭用高溫合金研究正需要這種大規模計算，因為在大型系統中能夠觀察到僅看小碎片時所遺漏的行為模式。

這項局限性引發了新的構想，即跳脫出僅以單一原子為中心觀察周圍的方式。若讓原子與原子之間相互傳遞資訊會如何呢？只要多次傳遞資訊，遠處原子的影響也能接續傳達。這個構想便引申至下一節的圖神經網路。

3. 最新等變 (Equivariant) 圖神經網路 (GNN)

本節將探討當今成為MLIP主流的方法：圖神經網路 (Graph Neural Network, GNN)。這種方法將原子視為節點，將原子間的鄰近關係視為邊。這裡的邊並非化學鍵本身，而是指將一定距離內的鄰近原子連接起來。這條邊在計算過程中也可以發生改變。這類似於捷運路線圖將車站繪製為點、車站間的連接繪製為線。模型沿著點與線傳遞資訊，進而計算能量。

本節的關鍵詞是等變性 (Equivariance)，這是一項與上一節的不變性成對的特性。首先說明什麼是等變性、為何原子計算需要它。接著依序檢視從早期到最新涵蓋此特性的代表性模型。最後還將探討預先學習廣泛數據的大型模型。

圖神經網路以傳遞資訊的方式進行計算。每個原子向自己的鄰近原子發送訊息，並收集來自鄰近原子的訊息來更新自身狀態。這個過程會反覆進行多次。傳遞一次就能了解緊鄰的原子；傳遞兩次就能了解鄰近原子的鄰近原子

。反覆進行越多次，越遠處原子的影響就會接續傳遞而來。這種方式稱為訊息傳遞（Message Passing）。

這種架構在一定程度上解決了上一節的局限性。它無需勉強擴大觀察距離，因為只要多次傳遞訊息，鄰近原子之外的資訊也能接續傳遞而來。不過，若層數固定，資訊所能觸及的範圍也會固定。光靠這種方式難以涵蓋極遠距離的靜電或色散力等效應。這類效應必須透過額外建立的長程項來補充。儘管如此，圖神經網路依然是高效涵蓋廣泛相互作用的重大進展。

3.1 旋轉與翻轉皆適用的對稱性

在原子世界中存在著守恆的對稱性。即使將結構整體平移或旋轉，物理定律依然不變。包含平移、旋轉與翻轉的整體稱為 $E(3)$ 。其中僅包含旋轉的稱為 $SO(3)$ 。名稱看似艱深，含義卻很簡單，即平移、旋轉以及如鏡像般翻轉的集合。旋轉與翻轉是不同的動作。旋轉是保持形狀不變進行轉動，翻轉則是產生左右顛倒的鏡像。

前面所見的不變性，是指即便產生這類運動，數值也不會改變的特性。能量是不變量。即使旋轉結構，該結構的能量也必須相同。然而，並非所有數值都是不變量。受力是具有方向的數值。若旋轉結構，受力的方向也必須隨之旋轉。

正是這項特性被稱為等變性。等變性是指當輸入旋轉時，輸出也以相同方式旋轉的特性。受力是等變量。若將結構向右旋轉，作用在各原子上的受力也會向右旋轉。必須同時兼顧不變性與等變性，原子計算才能符合物理定律。

用一句話區分不變量與等變量：旋轉後數值保持不變者為不變量；旋轉後數值也隨之旋轉者為等變量。能量因無方向且為單一純量，故為不變量。溫度或密度等數值亦無方向，因而也是不變量。受力或速度等具有方向的數值則是等變量。模型必須辨明各數值屬於哪一類並加以處理。

在此延續上一節暫緩討論的話題。我們先前提到受力是能量地圖的梯度。優秀的模型不會單獨臆測受力，而是先求得能量，再由該能量地圖的梯度推導出受力。遵守這個順序是有原因的。若隨意輸出受力，可能會產生無法維持能量守恆的力。若用這種力進行長時間計算，原本不存在的能量會自行產生或消失，導致模擬逐漸膨脹或崩潰。從能量求取梯度來獲得受力，就不會產生這種偏差。在物理學中，由能量推導出的力稱為保守力。

若從一開始就將這兩種特性融入模型中，將帶來極大的好處。模型無需在不同方向上分別學習同一種物質，學過一次的規則會自動適用於所有方向。因此，即使數據量少也能穩定學習。鑑於DFT計算的高昂成本，節省數據量能帶來巨大的助力。

在火箭材料中，有許多與方向密切相關的現象。裂紋會朝特定方向蔓延；沿晶面滑移的變形也具有方向性；氧化反應亦依表面方向的不同而產生差異。若無法精確處理受力方向，就無法正確描繪這些現象。遵循等變性的模型在這一點上佔有優勢。

我們用更淺顯的圖景來說明這種對稱性。假設我們為同一個玩具積木結構拍攝多張照片。從正面拍的照片與從側面拍的照片看起來不同，但積木結構本身是一樣的。人類能輕易理解這一點，然而對電腦而言，這兩張照片卻是不同的輸入。未納入對稱性的模型可能會將這兩張照片視為不同物質；納入對稱性的模型則會將這兩張照片視為相同物質。這個差異極大地決定了學習效率。

總結來說，對稱性不是裝飾，而是骨架。遵循對稱性的模型能夠節省數據並使預測保持穩定；違反對稱性的模型則可能給出物理上異常的答案。因此，最新的MLIP研究聚焦於如何妥善納入這項特性。

3.2 從僅著眼距離的方法走向連方向也相互傳遞的方法

SchNet是2018年問世的早期圖神經網路。該模型僅在訊息中傳遞原子間的距離。距離是不具方向的數值，因此SchNet是僅處理不變資訊的不變圖神經網路。其架構簡潔且計算迅速。

僅使用距離的方法存在缺點。它難以直接呈現方向至關重要的鍵結。即使距離相同，若角度不同，鍵結也會有所差異。若忽略這個差異就會產生誤差。DimeNet彌補了這一點，將原子間的角度也納入訊息中。這延續了試圖涵蓋方向資訊的努力。

Batzner與Kozinsky等人於2022年邁出了一大步，推出了名為NequIP的模型。該模型超越了距離與角度，直接在訊息中傳遞方向本身。它直接傳遞並混合具有方向性的數值，這便是等變訊息傳遞。它能更加忠實地呈現受力方向以及原子周圍的三維形狀。

NequIP的一大優勢是數據效率。由於依循原理納入了方向資訊，即使範例很少也能學得很好。公開發表的論文指出，它以遠少於既有模型的訓練數據實現了高精確度。在每筆DFT計算都成本高昂的研究中，這種節省帶來了實質的效益。

在此再次強調數據效率為何重要。單次DFT計算需要耗費大量的電腦運算時間。若訓練需要數萬筆計算，計算成本將大幅膨脹。NequIP以遠少於此的筆數即可達到相近的精確度。如此一來，在相同預算下便能處理更具難度的材料。火箭用新材料往往缺乏數據，數據效率高的模型在此類情況下極具實用價值。

這項進展對火箭材料計算具有直接的意義。裂紋、缺陷、相變皆與方向息息相關。等變模型能更精確地描繪這些具有方向性的現象。即便只有少量的DFT數據，也能學習極端環境下的行為模式。因此自NequIP之後，等變方法已趨近於該領域的標準。

在NequIP問世的相近時期，提升效率的研究也接續展開。這是旨在處理方向資訊的同時減輕計算負擔的嘗試。近期一項研究提出了提升效率的等變模型，並發表於2025年的學術期刊上。這是朝著在維持精確度的同時減輕計算負擔的方向發展。隨著這些努力的累積，等變方法在實際研究中變得切實可用。

但這是有代價的。要依照原理混合方向資訊，需要進行繁重的數學運算。這種運算稱為張量積。雖然精確，但計算量與記憶體負擔很大。這個負擔之後會再次成為問題。這個話題將在第5節繼續探討。

3.3 一次涵蓋多個原子關係的方法（MACE）

巴塔查亞與恰尼等人於2022年推出了MACE。該模型將等變圖神經網路與稱為多體展開的經典物理理論相結合。多體是指多個原子共同產生的效應。在材料內部，並非只有原子與原子之間的單一關係才重要。三個原子、四個原子共同構成的排列配置也會改變性質。

先前的圖神經網路為了涵蓋這種多體效應，會多次傳遞訊息。傳遞次數一多，計算負擔就會加重，學習速度也會變慢。MACE找到了另一條途徑。它將收集一次的鄰近資訊相互相乘，一次產生多個原子的效應。因此僅憑少數幾次訊息傳遞，就能涵蓋四個原子以上的效應。

這種設計的好處在於兼顧了精確度與速度。減少訊息傳遞能讓計算更輕量。同時又不會遺漏多體效應，從而維持了精確度。在大尺寸晶體或長時間的分子動力學模擬中，這一優勢更為顯著。因此，MACE在許多研究中被用作強大的基準模型。

MACE也應用於火箭材料研究。最近有一個研究團隊探討了混合鋁、鈦、鉻、鉬、鎢的高熵合金。這種合金是以相近比例混合多種元素的材料。研究團隊利用MACE建立了該合金的原子間勢，並探討了隨溫度變化的相穩定性。這項研究於2026年發表在物理學期刊上，是MACE應用於高溫合金設計的實例。不過，該研究展示的是相穩定性計算，並未透過這一項研究就驗證實際零件的裂紋或壽命。

我們也需要看待其局限性。MACE在混合方向資訊時同樣使用張量積。因此，若提高稱為角動量的方向精確度，計算負擔就會迅速增加。在極大體系或極長時間的模擬中，這種負擔仍然是個問題。後文將介紹致力於減輕此問題的研究。

我們用簡單的例子來說明多體效應。在教室裡，如果只看兩名學生，只能知道他們關係好不好。三個學生聚在一起，氣氛就會改變。四個學生聚在一起，又會產生另一種動態。原子也是如此。僅憑兩個原子之間的關係，無法涵蓋材料的全部性質。多個原子共同構成的排列配置會改變性質。MACE僅用少數步驟就能涵蓋這種多個原子之間的關係。

另一個課題是超出學習範圍的情況。MACE再怎麼精確，遇到訓練中沒有的陌生排列時仍可能出錯。火箭環境總是極端且充斥著未知事件。因此，越精確的模型，越需要有一種能在遇到未知情況時主動示警的機制。這個機制就是第4節的主動學習。

3.4 預先學習廣泛材料的大型模型 (CHGNet, MatterSim)

先前的模型通常針對單一材料或狹窄範圍進行訓練。遇到新材料時，必須使用相應的數據重新訓練。基礎勢正是為了減輕這種負擔而發展的趨勢。基礎勢是預先學習了極為廣泛材料數據的大型模型。這就像熟練掌握多種料理的廚師，面對新食材也能迅速應對一樣。

CHGNet是2023年推出的代表性基礎勢。該模型使用稱為Materials Project的大型計算資料庫進行訓練。Materials Project是收集了無數材料DFT計算結果的公開資料。CHGNet在此基礎上，還一併學習了電荷與磁性狀態的線索。因此，它能很好地追蹤電池材料中的鋰離子遷移或過渡金屬氧化物的相變。

CHGNet學習電荷與磁性狀態是有原因的。在電池材料中，鋰離子的進出伴隨著電荷轉移。在過渡金屬氧化物中，原子的磁性狀態會改變其性質。如果遺漏這些變化，就會錯誤描繪材料的行為。CHGNet將這些線索融入原子環境表徵中，從而涵蓋更廣泛的材料。不過，它並不是將電荷作為守恆值逐一追蹤的電化學模型，理解為透過學習到的表徵來捕捉磁性狀態的線索更為恰當。火箭材料中也經常使用氧化物與過渡金屬，因此這項能力大有助益。

MatterSim是2024年公開的另一種基礎勢。該模型針對極寬的溫度與壓力範圍。公開論文指出，它涵蓋了從0克耳文到5000克耳文、從0吉帕斯卡到1000吉帕斯卡的範圍。克耳文是絕對溫度單位，吉帕斯卡是壓力單位。火箭發動機的高溫條件也落在這個範圍之內。不過，學習範圍重疊與實際預測精準是兩回事。1000吉帕斯卡遠高於火箭燃燒室的壓力。燃燒氣體或氧化表面等火箭特有的情況仍需單獨驗證。因此，該模型作為極端材料研究的起點而備受關注。公開論文指出，該模型節省了大量數據。由於預先學習了廣泛的條件，面對新材料也能迅速應對。

最近也出現了兼具更高精確度與速度的新基礎勢，即名為GRACE的模型。該模型以圖原子團簇展開的框架構建。研究團隊使用屈指可數的大型材料數據集中的一部分對該模型進行了訓練。公開的研究指出，該模型樹立了精確度與效率的新平衡點。這項研究於2026年發表在材料計算期刊上，展示了只要精心調整大型模型，就能在保持精確度的同時適應特定任務。

基礎勢正在改變研究方式。過去針對每種材料都要從頭構建模型。現在則是先使用大型模型，再僅針對需要的部分進行調整。這種只需少量修改調整的使用方式稱為微調。即使遇到新合金，也能以少量的數據快速應對。

公平比較這些大型模型的努力也日益增加。隨著多種基礎勢的出現，評判孰優孰劣變得更加困難。因此出現了在相同條件下衡量性能的公開評估平台，也就是多個研究團隊構建的基準測試平台。這些平台同時比較精確度、速度與穩定性，讓使用者可以選擇適合自身問題的模型。

儘管如此，仍有需要注意的事項。基礎勢並非在所有情況下都能自動得出正確結果。在訓練數據中較少見的合金或表面反應中，誤差可能會擴大。因此，越是優秀的模型，越需要伴隨驗證。對於陌生的結構，必須透過DFT重新計算來確認。這個確認程序就是下一節的主題。

4. 主動學習 (Active Learning) 迴圈與誤差及不確定性評估

再優秀的模型，在未學習過的情況下都可能出錯。問題在於模型出錯時卻仍給出自信滿滿的答案。這樣一來，人類就很難察覺誤差。本節將探討如何讓模型在遇到未知情況時主動示警。

這個方法就是主動學習 (Active Learning)。主動學習是一種循環程序，讓模型挑選出沒有把握的結構，並重新進行精確計算。我們將探討這種循環如何運作，以及如何用數值衡量其「缺乏把握」的程度。同時也會指出，在火箭材料這種極端且陌生的環境中，為何此程序是一道安全防線。

我們用日常生活中的例子來說明內插與外推。如果知道過去幾年的氣溫，就能推估今天的氣溫。在已經經歷過的範圍內進行推估，就是內插。然而，一旦遇到前所未有的熱浪，推估就會失準。走向未曾經歷過的範圍，就是外推。模型也是如此，在經歷過的範圍內預測精準，超出範圍就會動搖。

模型能安全預測的範圍是訓練數據的內部。這個區域稱為內插區域。在訓練數據所涵蓋的內部，預測是值得信賴的。但一旦超出這個範圍，情況就不同了。這個外部區域稱為外推區域。在外推區域中，模型可能會給出看似合理卻錯誤的答案。

外推區域的誤差非常危險。在模擬過程中，原子可能會相互重疊，或者結構出現異常崩解。如果這種情況在無聲無息中發生，整個結果將變得不可信。火箭環境總是處於極端狀態，因此外推頻繁發生。因為高溫、強烈碰撞、氧化與裂紋都是訓練數據中罕見的事件。因此，捕捉這些關鍵時刻的機制不可或缺。

主動學習迴圈包含四個步驟。首先，使用少量的DFT數據訓練模型。接著，利用該模型快速計算原子運動。計算過程中若出現模型缺乏把握的結構，便加以標記。只挑選這些結構使用DFT重新進行精確計算。將新結果加入數據中並修正模型。重複這些步驟，模型就能逐漸學習更廣泛的情況。這就像在陌生道路上的每個岔路口重新確認地圖一樣。

這個迴圈的核心在於將「缺乏把握」以數值衡量。這個數值稱為不確定性（Uncertainty）。衡量不確定性的方法有很多種。接下來的各小節將探討代表性的方法。

4.1 將模型未知的時刻以數值衡量（UQ）

衡量不確定性的第一種方法是使用外推度。名為矩張量勢（Moment Tensor Potential, MTP）的模型採用這種方式。該模型以數值衡量當前原子排列與訓練數據的差異程度。這個數值稱為外推度。外推度低表示是熟悉的排列，預測較安全；外推度高則表示是陌生的排列，必須重新計算。

第二種方法是比較多個模型的答案。利用相同的數據建立多個經過微小差異訓練的模型，這個組合稱為集成。在新結構中，若這些模型的答案彼此相近，通常值得信賴；若答案出現顯著分歧，該結構就是危險信號。不過，由相同數據學習而來的模型在面對陌生輸入時也可能集體出錯。因此，集成的吻合僅是參考指標，並非絕對保證。這就像向多人提出同一個問題，如果大家的答案分歧，就代表這是一個困難的問題。

第三種方法是讓模型自行給出誤差範圍。最近的研究在此方向上取得了進展。有一個研究團隊將稱為證據深度學習的方法應用於原子間勢。這種方法在輸出預測值的同時，也會一併輸出對該數值的信任程度。由於不需要分別運行多個模型，計算更為輕量。這項研究於2025年發表在期刊上。

也有研究致力於將不確定性更深入地結合到主動學習中。其中一種方法是讓模擬主動尋找不確定的區域，引導原子運動朝向模型缺乏把握的排列方向發展。這樣就能更快收集到具有高度新學習價值的結構。這是一種高效填補未知情況的方法。

此程序是火箭材料研究中保障安全的核心架構。在極端環境下，總是會出現意料之外的排列。若沒有不確定性機制，就有可能將錯誤的結果誤認為真。有了不確定性機制，就能在危險時刻停止計算並進行確認，使結果更加值得信賴。

處理不確定性的方法仍在不斷推陳出新。最近甚至有研究探討了模型設計不良的情況。如果模型從基本假設開始就出錯，計算出的不確定性也會失準。指出這個問題的研究於2025年發表在期刊上。這意味著衡量不確定性是一件極具挑戰性的工作。儘管如此，此方向的發展仍支撐著極端材料計算的安全性。

這種循環程序的另一個好處是節省數據。DFT計算成本高昂，因此若隨意計算任何結構將造成巨大浪費。主動學習只挑選具有高度學習價值的結構進行計算，能在相同預算下收集更多有用的數據，從而更快獲得優秀的模型。

這種方式可以比喻為準備考試。反覆做已經會的題目是浪費時間，專門挑做錯的題目來練習，實力才能快速提升。主動學習也是專門挑出模型的薄弱部分加以補強，是以少量的計算獲得重大進步的方法。火箭材料研究的計算預算往往十分緊湊，因此這種節省在實際開發中能發揮巨大力量。

然而，準確量化不確定性本身就是一項艱鉅的課題。有些方法計算負擔沉重，有些方法則準確度較低。如果模型最初設計有誤，甚至連不確定性的估算也會出錯。近來探討該問題的研究仍在持續。不確定性量化尚非成熟完善的技術，而是一個仍在發展中的領域。

5. 減輕張量積負擔的幾何神經網路：運算效率與曲線平滑度

等變模型雖然精準，卻背負著計算量龐大的負擔。而該負擔的一大主因，正是前文提及的張量積。本節將探討為何張量積的負擔如此沉重，以及旨在減少或消除張量積的最新研究。

此處另一個重要關鍵在於曲線的平滑度。原子計算的結果是作為能量地圖的勢能面。若該曲面凹凸不平，受力計算就會出現跳變，導致模擬崩潰。本節將說明新方法如何兼顧運算速度與平滑度。

張量積是依據物理原理將具方向性數值相互融合的數學運算。等變模型藉由此運算精準處理方向資訊。問題在於，方向精度要求越高，該運算的負擔就膨脹得越快。計算時間與記憶體需求亦隨之劇增。在大規模體系或長時間模擬中，此負擔便成了巨大的瓶頸。

我們嘗試用更淺顯的語言來描繪張量積。融合具有方向性的資訊時，規則相當嚴苛。絕不能單純將兩個具方向性的數值相加或相乘，而必須依循物理定律進行配對融合。張量積正是精確執行這種繁複配對的運算。雖然精確，但配對的數量會隨著方向精度的提高而急遽增加。因此，即便只稍微提高一點精度，計算負擔也會大幅增加。

為突破這道障礙，相關研究正朝著多個方向展開。其中一條路徑是開發能更快速計算張量積的專用程式。近來一項研究便以此種方式大幅加速了分子動力學計算。該研究於2026年發表於學術期刊上。這是保留張量積本身、但將計算過程最佳化的途徑。

5.1 完全不使用張量積的新架構

另一個方向則是完全摒棄張量積。名為 Geodite 的研究便選擇了這條路。該研究的題目為無張量積的等變原子間勢。它以其他方式取代了融合方向資訊時繁重的運算，同時依舊嚴格遵循旋轉對稱性原理。

在此簡要說明該方式取代張量積的原理。它建立局部座標系以取代繁重的配對運算，亦即在每個原子周圍設定作為基準的方向框架。若在此框架上處理資訊，便能以輕量的計算維持方向性。如此一來，既能完整保留對稱性，又能減輕計算負擔。

該研究指出了兩項成果。其一是速度。公開的摘要表明，其速度比具備相近準確度的模型快三到五倍。其二是準確度的涵蓋範圍。在材料穩定性預測、熱傳導、晶格振動以及奈秒級分子動力學中，均展現出足以與領先模型相提並論的準確度。可謂在大幅提升速度的同時守住了準確度。該研究為尚未經過同行評審的初步研究，因此被視為深具潛力的候選技術，而非既定的標準規範。

消除張量積不僅能提升速度，亦有助於改善曲線的平滑度。在張量積中若截斷方向精度，曲面上可能會產生微小的漣漪狀紋理。這些漣漪會導致受力計算出現跳變。不使用張量積的架構則能避免此類漣漪產生，即便在鍵結生成與斷裂的區間，曲線也能保持平滑。

這種平滑度在火箭材料計算中至關重要。在高溫環境下，原子會劇烈震動，鍵結亦頻繁斷裂。若曲線粗糙，在這些區間內受力便會跳變，導致模擬崩潰。平滑的曲線即使在極端條件下也能確保計算穩定。因此，平滑度是與準確度同等重要的特性。

亦有其他研究抱持著相似的目標。一項研究將方向資訊展開於球面網格上，再透過輕量神經網路進行融合。此方式同樣比張量積更快，且能維持表達能力。此外，亦有研究提出根據具體情境平滑調整截斷距離的方法。這些研究皆處於初期階段，多個團隊正朝著相同目標探索不同的技術路徑。

我們進一步探討為何平滑度如此關鍵。作用力源自勢能面的梯度。若曲面平滑，梯度也會平緩變化；若曲面存在微小漣漪，梯度就會突然跳變。跳變的作用力會將原子推向異常位置，進而破壞整個模擬。因此，平滑的曲面與精確的能量同等必要。即便表面誤差看似很小，但若曲面粗糙，在長時間計算中問題便會擴大。

這一趨勢的意義十分明確，即在維持等變模型準確度的同時減輕計算負擔。一旦計算變得輕量，便能觀察更大規模的體系與更長的時間尺度。這對長期觀察火箭零組件等大型材料結構能帶來直接助益。不過，由於實證數據仍在積累階段，仍需持續關注後續的驗證結果。

6. 電子密度建模與實現輕量設備運行的結構化剪枝

大型模型雖然精準，但負擔沉重且需要龐大的計算設備。本節將探討如何在維持物理定律的前提下使大型模型輕量化。我們將檢視兩種構想：其一是修剪掉次要計算通道的剪枝；其二是將電子分佈線索融入模型的方法。本節的核心在於實現輕量化卻不盲目修剪。原子計算中有許多必須恪守的物理性質，包括對稱性、作用力方向以及能量與受力的一致性。本節將說明如何在恪守這些性質的同時縮減模型規模。

剪枝 (Pruning) 是縮減神經網路中次要通道的方法。神經網路中傳遞資訊的通道被稱為通道。並非所有通道都同等重要，縮減較少使用的通道能使計算變得輕量。這就如同從背包中取出不常用的行李，背包便會隨之變輕一樣。

問題在於，若隨意修剪通道，物理定律便會動搖。在等變模型中，通道與方向緊密交織。若將屬於同一方向分組的通道隨意分散修剪，作用力的方向就會失真。在此需澄清一項誤解：若模型先輸出能量，再將受力計算為能量的梯度，那麼即使縮減通道，能量與受力之間的內在關係依然成立。剪枝並不會直接破壞這層關係，但處理方向的精度與預測準確度可能會下降。因此，剪枝必須謹慎進行。

6.1 保持物理一致性的結構化剪枝

結構化剪枝 (Structured Pruning) 是以方向分組為單位修剪通道的方法。它不是個別分散修剪，而是整組進行處理。唯有如此，方向的平衡才不會被打破。此外，還需妥善維持純量通道與向量通道的比例。純量是無方向的數值，向量則是有方向的數值。唯有維持此比例，對稱性與作用力方向才能保持完整。

我們以圖像化方式描繪為何必須成組修剪。指南針的指針必須同時指示東南西北才有意義；若只留下南北而切除東西，方向便會失真。等變模型的方向通道亦是如此。同一分組內的數值必須同時存在，才能正確指示方向。若僅分散修剪其中一部分，作用力的方向便會產生偏差。因此，修剪時必須以整組為單位。

修剪哪些通道取決於重要性判斷。我們會衡量各通道對輸出結果的貢獻程度，並從貢獻較小的通道開始縮減。此時同樣以方向分組為單位，綜合評估同一組內的所有數值。如此一來，便能在保留傳遞資訊之骨架的同時，剔除多餘的贅肉。

近來有一組研究團隊將該方法應用於基礎勢函數。該研究的題目為透過結構化剪枝構建的緊緻 $SO(3)$ 等變原子模型。公開的摘要指出，模型參數縮減了數倍。參數是模型所學習的數值量。預訓練所需的計算量亦減少了數倍。同時，在微調之後，能量與受力的誤差反而有所降低。該研究為2026年公開的初步研究，尚未經過同行評審，因此不視為定論。

該研究鎖定的目標是在輕量設備上亦能運行精密計算。大型模型通常需要多台高效能設備。若能妥善縮減模型，在較小型的設備上也能進行相似的計算。當研究門檻降低，便能有更多研究者參與材料計算。然而，究竟能相容至何種等級的設備，未來仍需進一步驗證。

在火箭材料研究中，此方向亦深具意義。若要長時間模擬極端環境，必須反覆進行多次計算。模型若足夠輕量，便能使用相同的設備運行更多次實驗，有助於快速篩選候選材料。在維持準確度的同時獲得運算速度正是核心所在。

亦有其他方法抱持著與剪枝相似的目標，即將大型模型的知識轉移至小型模型的方法。此方法被稱為知識蒸餾。訓練有素的大型模型成為小型模型的導師，小型模型藉由模仿導師的答案進行學習。如此一來，即使體量較小，也能展現接近大型模型的能力。剪枝與知識蒸餾皆是將大型模型輕量化遷移的途徑。

需要注意之處在於切勿遺漏物理驗證。透過剪枝獲得的輕量模型亦必須經過嚴格驗證。需一併檢驗能量與受力的一致性、受力方向、對稱性以及不確定性標示。唯有恪守這些性質，輕量模型才值得信賴。僅具備運算速度的模型在極端計算中是危險的。

6.2 加入電子密度線索的方法

縮減模型規模時，可能面臨表達能力亦隨之降低的風險。彌補此項損失的一種構想是引入電子密度。電子密度是呈現電子在空間中分佈狀態的地圖，原本就是 DFT 所處理的基本物理量。這種構想是將該線索直接引入模型中，以補充不足的表達能力。將此類不同資訊相互融合的方式被稱為混合 (Hybrid) 架構。

在此簡要回顧化學鍵的種類。離子鍵是藉由轉移電子而結合的鍵結，食鹽便是以此種鍵結構成。金屬鍵是電子在多個原子間自由流動的鍵結，金屬正因這種鍵結而具備優良的導電性。共價鍵則是相互共享電子的鍵結。各類化學鍵中的電子型態各有不同。

電子密度資訊有助於區分化學鍵的種類。材料內部的鍵結有多種類型，離子鍵、金屬鍵與共價鍵各不相同。觀察電子聚集的位置與數量，便能辨識出這種差異。若將該線索引入模型，便能更精準地掌握鍵結的特性。

該方式被認為在還原長程效應方面亦具實用價值。電子的影響力會延伸至近鄰原子之外。若將模型輕量化縮減，容易忽略這種長程效應。人們期望善用電子密度線索能在一定程度上捕捉此類長程影響。然而，引入電子密度並不會自動解決長程靜電作用與色散力。究竟該以何種方式引入何種密度以及如何進行驗證，相關研究仍在積累中。因此，將此方向理解為一項具前瞻性的提議而非既定的定論更為妥當。

火箭材料中常見多種化學鍵複雜交織的情況。金屬與陶瓷常併用，並會生成氧化層。若要處理這類材料，必須精準區分鍵結的特性。引入電子密度的方式能協助進行此項區分，從而為極端材料計算提供助力。

大規模計算的可能性亦隨之開展。近來一組研究團隊針對混合多種元素的合金進行了百萬原子規模的模擬。他們採用可處理多組分的原子間勢來應對龐大體系。該研究為2026年公開的初步研究。高熵合金是火箭高溫材料的重要候選。處理的體系越大，越能觀察到貼近實際零組件的行為表現。

我們將本節的內容對照火箭研發的現實環境。許多火箭企業與研究所的計算資源並不充裕。若大型模型只能在多台高效能設備上運行，門檻便顯得過高。模型若能輕量化，將有更多團隊能夠著手進行原子計算。快速篩選候選材料可減少實際測試的對象，這種在計算與實驗之間反覆迭代的循環能有效縮短研發週期。

本節探討的兩種構想指向同一個目標：在維持準確度的同時使計算輕量化。剪枝剔除了冗餘部分，而電子密度線索則補足了表達能力的不足。兩者結合使用，即使在小型設備上也能構建出具實用價值的模型。該方向目前仍在發展中，處於持續積累驗證數據的階段。

小結

本章講述了用電腦處理原子的規則。這個規則就是原子間勢。長久以來，科學家必須在精確的方法與快速的方法之間二選一。DFT雖然精確但速度緩慢，而經驗力場雖然快速但並不精確。機器學習原子間勢正是為了打破兩者之間的藩籬而誕生的工具。

簡短回顧這段歷程。最初是由人類將原子周圍環境轉換為數字。接著由模型自行學習這些數字。隨後讓原子之間能夠互相傳遞資訊。如今更出現了預先學習廣泛材料的大型模型。每前進一步，都減少了人力介入並增強了數據的力量。這一趨勢正是 MLIP 發展的主要脈絡。

初期的 MLIP 是將原子周圍的形貌轉換為人類設計的數字。這種描述符方式包括 BPNN、高斯近似勢與 DeePMD。它們取得了顯著成果，但也顯露了局限性。當元素種類增多時，計算負擔隨之加重，且難以納入遠距離效應。

下一代則是等變圖神經網路。這種方法將原子視為點，將相鄰關係視為線，並在彼此之間傳遞資訊。透過將符合旋轉與平移的對稱性融入模型內部，節省了數據。從 SchNet 接續至 NequIP、MACE，精確度與效率皆隨之提升。CHGNet、MatterSim 與 GRACE 等基礎勢，已確立其作為預先學習廣泛材料之大型模型的地位。

即便精確的模型也存在弱點。在未學習過的陌生情況下可能會出錯。因此，需要讓模型在遇到未知情況時能主動示警的主動學習與不確定性量化。火箭環境始終處於極端狀態，且充滿陌生的事件。唯有具備這種安全防護機制，極端材料的計算結果才值得信賴。

近期的研究同時追求速度、平滑度與輕量化。透過減少或消除張量積來加速計算。以結構化剪枝精簡模型規模，並利用電子密度線索來充實表達能力。這些方法中有相當一部分是尚未經過同行評審的早期研究。雖然前景看好，但要視為既定標準尚為時過早。

為閱讀本章的一般讀者歸納出五個值得記住的要點。原子計算中長久以來存在著精確性與速度之間的權衡取舍。機器學習架起了一座緩解這種權衡取舍的橋樑。保持對稱性是優秀模型的核心。無論多麼優秀的模型，都必須在遇到未知情況時主動示警才算安全。此外，最新技術的很大一部分仍是處於驗證階段的早期研究。

這五個要點在後續各章中同樣適用。建立晶體結構、設計合金以及處理陶瓷材料，全部都建立在這種原子計算的基礎之上。若沒有精確的原子計算，其上的設計也會隨之動搖。因此，本章的內容構成了全書的基石。

在此也保留一個平衡的視角。MLIP 雖是強大的工具，但並非萬能。若訓練數據的品質不佳，預測結果也會變差。若急於驗證，就容易被看似合理的誤差所矇騙。因此，這項技術並不能取代人類的判斷與實驗。計算負責縮小候選範圍，最終的確認則交由實驗進行。這種協同合作，正是將新材料安全推向世界的途徑。

所有這些技術的目標都匯聚於一點。那就是在電腦內部對火箭材料與新材料進行大尺度、長時間、精確且安全的測試。在製造實際零件之前先篩選出候選材料，能夠節省金錢與時間。從下一章開始，將進入以此奠定穩固基礎的原子計算之上，直接打造新材料的故事。

相關佐證資料

- Kohn, W., & Sham, L. J. (1965). Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical Review*, 140, A1133-A1138. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.140.A1133>
- Behler, J., & Parrinello, M. (2007). Generalized neural-network representation of high-dimensional potential-energy surfaces. *Physical Review Letters*, 98, 146401. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.98.146401>
- Bartók, A. P., Payne, M. C., Kondor, R., & Csányi, G. (2010). Gaussian approximation potentials: The accuracy of quantum mechanics, without the electrons. *Physical Review Letters*, 104, 136403. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.104.136403>
- Bartók, A. P., Kondor, R., & Csányi, G. (2013). On representing chemical environments. *Physical Review B*, 87, 184115. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.87.184115>
- Zhang, L., Han, J., Wang, H., Car, R., & E, W. (2018). Deep potential molecular dynamics: A scalable model with the accuracy of quantum mechanics. *Physical Review Letters*, 120, 143001. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.120.143001>
- Schütt, K. T., Sauceda, H. E., Kindermans, P. J., Tkatchenko, A., & Müller, K. R. (2018). SchNet: A deep learning architecture for molecules and materials. *Journal of Chemical Physics*, 148, 241722. <https://doi.org/10.1063/1.5019779>
- Gasteiger, J., Groß, J., & Günnemann, S. (2020). Directional message passing for molecular graphs (DimeNet). *International Conference on Learning Representations*. <https://arxiv.org/abs/2003.03123>
- Batzner, S., Musaelian, A., Sun, L., Geiger, M., Mailoa, J. P., Kornbluth, M., Molinari, N., Smidt, T. E., & Kozinsky, B. (2022). E(3)-equivariant graph neural networks for data-efficient and accurate interatomic potentials (NequIP). *Nature Communications*, 13, 2453. <https://doi.org/10.1038/s41467-022-29939-5>
- Batatia, I., Kovács, D. P., Simm, G. N. C., Ortner, C., & Csányi, G. (2022). MACE: Higher order equivariant message passing neural networks for fast and accurate force fields. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 35, 11423-11436. <https://arxiv.org/abs/2206.07697>
- Batatia, I., Batzner, S., Kovács, D. P., Musaelian, A., Simm, G. N. C., Drautz, R., Ortner, C., Kozinsky, B., & Csányi, G. (2025). The design space of E(3)-equivariant atom-centred interatomic potentials. *Nature Machine Intelligence*, 7, 56-67. <https://doi.org/10.1038/s42256-024-00956-x>
- Deng, B., Zhong, P., Jun, K., Riebesell, J., Han, K., Bartel, C. J., & Ceder, G. (2023). CHGNet as a pretrained universal neural network potential for charge-informed atomistic modelling. *Nature Machine Intelligence*, 5, 1031-1041. <https://doi.org/10.1038/s42256-023-00716-3>
- Yang, H., Hu, C., Zhou, Y., Liu, X., Shi, Y., Li, J., et al. (2024). MatterSim: A deep learning atomistic model across elements, temperatures and pressures. *arXiv:2405.04967*. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2405.04967>
- Deringer, V. L., Caro, M. A., & Csányi, G. (2021). Machine learning interatomic potentials as emerging tools for materials science. *Advanced Materials*, 33, 1902765. <https://doi.org/10.1002/adma.201902765>
- Shapeev, A. V. (2016). Moment tensor potentials: A class of systematically improvable interatomic potentials. *Multiscale Modeling and Simulation*, 14, 1153-1173. <https://doi.org/10.1137/15M1054183>
- Podryabinkin, E. V., & Shapeev, A. V. (2017). Active learning of linearly parametrized interatomic potentials. *Computational Materials Science*, 140, 171-180. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2017.08.031>
- Lysogorskiy, Y., Bochkarev, A., & Drautz, R. (2026). Graph atomic cluster expansion for foundational machine learning interatomic potentials (GRACE). *npj Computational Materials*, 12, 114. <https://doi.org/10.1038/s41524-026-01979-1>
- Reschützegg, T., Aykent, S., Perin, G. J., Nunes, B. H., Cipcigan, F., Ferreira, R. N. B., Steiner, M., & Thiemann, F. L. (2026). Equivariant interatomic potentials without tensor products (Geodite). *arXiv:2601.15492*. 預印本，尚未經同儕審查. <https://arxiv.org/abs/2601.15492>
- Wang, C., Hu, S., Tan, G., & Jia, W. (2026). Compact SO(3) equivariant atomistic foundation models via structural pruning. *arXiv:2605.08885*. 預印本，尚未經同儕審查. <https://arxiv.org/abs/2605.08885>
- Tan, C. W., Descoteaux, M. L., Kotak, M., de Miranda Nascimento, G., Kavanagh, S. R., Zichi, L., Wang, M., Saluja, A., Hu, Y. R., Smidt, T. E., Johansson, A., Witt, W. C., Kozinsky, B., & Musaelian, A. (2026). High-performance training and inference for deep equivariant interatomic potentials. *Digital Discovery*, 5, 1558-1567. <https://doi.org/10.1039/d5dd00423c>
- Miklaucic, N., Wei, L., Dong, R., Fu, N., Omee, S. S., Li, Q., Dey, S., Fung, V., & Hu, J. (2025). Facet: Highly efficient E(3)-equivariant networks for interatomic potentials. *arXiv:2509.08418*. 預印本，尚未經同儕審查. <https://arxiv.org/abs/2509.08418>

- Han, K., Cong, H., Deng, B., & Barati Farimani, A. (2026). Smooth dynamic cutoffs for machine learning interatomic potentials. arXiv:2601.21147. 預印本，尚未經同儕審查. <https://arxiv.org/abs/2601.21147>
- Xu, H., Cui, T., Tang, C., Ma, J., Zhou, D., Li, Y., Gao, X., Gong, X., Ouyang, W., Zhang, S., & Su, M. (2025). Evidential deep learning for interatomic potentials. *Nature Communications*, 16, 937. <https://doi.org/10.1038/s41467-025-67663-y>
- Kulichenko, M., Barros, K., Lubbers, N., Li, Y. W., Messerly, R., Tretiak, S., Smith, J. S., & Nebgen, B. (2023). Uncertainty-driven dynamics for active learning of interatomic potentials. *Nature Computational Science*, 3, 230-239. <https://doi.org/10.1038/s43588-023-00406-5>
- Perez, D., Subramanyam, A. P. A., Maliov, I., & Swinburne, T. D. (2025). Uncertainty quantification for misspecified machine learned interatomic potentials. *npj Computational Materials*, 11, 263. <https://doi.org/10.1038/s41524-025-01758-4>
- Yang, Z., Wang, X., Li, Y., Lv, Q., Chen, C. Y.-C., & Shen, L. (2025). Efficient equivariant model for machine learning interatomic potentials. *npj Computational Materials*, 11, 49. <https://doi.org/10.1038/s41524-025-01535-3>
- Shuang, F., Ying, P., Liu, K., Wei, Z., Liu, F., Fan, Z., Jiang, M., & Dey, P. (2026). Benchmarking chemically scalable machine-learning interatomic potentials for large-scale simulations of multicomponent alloys. arXiv:2604.01642. 預印本，尚未經同儕審查. <https://arxiv.org/abs/2604.01642>
- Arnold, J. E., Woodgate, C. D., Hafizi, R., Harris, M. J., Mottura, A., García Fuentes, G., & Gurrutxaga-Lerma, B. (2026). Thermodynamics and phase stability of the AlTiCrMoW high-entropy alloy simulated using machine-learned interatomic potentials. *Physical Review Materials*, 10, 073605. <https://doi.org/10.1103/5tz1-zg9z>
- Chiang, Y., Kreiman, T., Zhang, C., Kuner, M. C., Weaver, E. J., Amin, I., Park, H., Lim, Y., Kim, J., Chrzan, D., Walsh, A., Blau, S. M., & Asta, M. (2025). MLIP Arena: Advancing fairness and transparency in machine learning interatomic potentials via an open, accessible benchmark platform. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 38. <https://arxiv.org/abs/2509.20630>

第2章 基於生成式AI與擴散模型（Diffusion Models）的晶體結構預測（CSP）及材料逆向設計

前言

我們在製作物品時，通常會先挑選材料。假設要做一個鍋子。首先會決定使用鐵或鋁。接著決定厚度與形狀。最後放到火上加熱，確認會展現出什麼樣的性質。

尋找新材料的傳統方式也與此相似。首先挑選一種已知的物質。接著透過電腦或實驗來測量其性質。性質優良就保留，不良就捨棄。這種方式值得信賴。但由於必須逐一確認，速度十分緩慢。

問題在於物質的世界太過廣闊。元素的種類繁多。原子的數量也可以改變。原子擺放的位置與晶格的大小同樣可以變更。將這一切組合起來，可能性便會像天上的繁星一樣暴增。單靠人類逐一測試，根本不可能窮盡。

本章講述的是將思考方向反轉的故事。不從挑選材料開始。而是先決定所需的性質。例如設定需要導電性良好的固態電解質。或者設定需要能夠承受高溫火箭噴嘴環境的催化劑。如此一來，人工智慧便會自主繪製出符合該性質的晶體結構。這種方式稱為材料逆向設計（Inverse Design）。

可以用烹飪來比喻逆向設計為何重要。傳統方式是用冰箱裡現有的食材來做菜。因為食材已經固定，能做的料理也就受限。逆向設計則是先決定想吃的料理。再反向尋找該料理所需的食材。即使是冰箱裡沒有的食材也會重新採購。這樣一來，便不會被冰箱裡的食材所束縛，能夠做出原本想像中的料理。

這裡的主角是生成式人工智慧（Generative AI）。聯想繪圖人工智慧會更容易理解。從一片模糊的點群開始。逐漸消除雜訊。最後顯現出人臉或風景。材料逆向設計的原理也是如此。從模糊的原子群開始。一邊消除雜訊，一邊塑造出具備規則性的晶體。這種消除雜訊的方法稱為擴散模型（Diffusion Model）。

在本章中，我們將逐步探討擴散模型如何生成晶體。探討遵循對稱規則的方法。探討加快計算速度的流匹配（Flow Matching）技術。探討填補空缺的圖像修復（Inpainting）以及海市蜃樓原子（Mirage Atom）等新概念。探討透過強化學習引導至優良結構的方法。最後，探討將該方法實際應用於電池固態電解質、催化劑及航太合金的案例。逐步解析火箭與新材料為何需要這項技術。

1. 從挑選材料的傳統方式，轉變為先定性質的逆向設計

本節探討的是材料探索的方向如何發生轉變。傳統方式是先挑選材料，事後再確認性質。新方式則是先決定性質，隨後再製造材料。我們將探討為何需要這種轉變，以及這對火箭與新材料具有何種意義。

傳統方式稱為正向物性篩選（Forward Property Screening）。所謂正向，是指從材料走向性質的方向。篩選則是從眾多候選中過濾篩選的過程。研究人員從已知的晶體資料庫中提取候選材料。其中有兩個代表性的資料庫：材料專案（Materials Project）與無機晶體結構資料庫（ICSD）。

提取候選材料後便會計算其性質。此時會使用名為密度泛函理論（Density Functional Theory, DFT）的物理計算方法。該計算透過求解原子內電子的運動來獲得能量與性質。結果十分精確。然而計算量龐大。電腦必須長時間運算。因此每天能夠檢視的候選數量相當有限。

這種方式的根本局限在於被困在狹窄的框架之中。檢測僅限於已知的物質。資料庫中不存在的新物質從一開始就無法成為候選。即使存在性質優異的未知物質也無法觸及。因此，傳統方式創造新事物的能力相當薄弱。

材料逆向設計打破了這個牢籠。它顛倒了順序。首先設定目標性質。例如設定需要高離子導電率。設定需要具備熱力學穩定性。接著由人工智慧直接繪製出滿足該條件的結構。甚至能繪製出資料庫中原本不存在的結構。材料探索的重心從檢驗轉向了創造。

舉例來說明可能性的組合數量有多麼龐大。自然界中可用的元素約有90種。假設在一個箱子裡只放置10個原子。為每個位置挑選要放入哪種元素。原子的位置也可以進行微調。僅僅考慮這些組合，數量就達到了天文數字。產生的候選數量比海灘上的沙粒還要多。單靠人類逐一計算，耗盡一生也無法完成。

單次計算所需的時間也不容小覷。DFT計算隨著原子數量增加，耗時會顯著變長。原子數量翻倍，計算量就會成倍增加。求解一個大型結構需要電腦連續運算數天。因此無法盲目計算大量候選材料。必須預先挑選好候選。人工智慧提供了挑選優先計算哪些候選的智慧。

繪製一個晶體需要同時決定三件事。首先決定晶格（Lattice）。晶格是容納原子的箱子之形狀與大小。接著決定原子的位置。即原子放置在箱子內的何處。最後決定原子的種類。即該位置由哪種元素佔據。這三者必須相互契合才能成為真正的晶體。只要有一處不合，原子就會發生碰撞或結構崩塌。

要同時處理這三者十分困難。晶格是具有長度與角度的連續數值。原子位置也是連續數值。然而原子種類卻是離散的數值。並不存在介於氯與半個氯之間的元素。必須同時處理性質如此迥異的數值。擴散模型完成了這項艱鉅的任務。將連續數值與離散數值一同從雜訊中還原出來。

進一步闡述擴散模型的原理。學習過程包含兩個方向。首先在正向過程中，逐步向清晰的晶體添加雜訊。經過多次添加後，晶體會轉變成無序的點群。人工智慧學習如何逆轉這一過程。練習在帶有雜訊的狀態下還原原本的晶體。完成這項訓練後，便能從無序的點群中塑造出新的晶體。

這種方式的力量在於善於從數據中學習。向模型展示世上已知的數萬個晶體。模型便能掌握何種配置較為合理。學習原子之間應當保持的距離。學習哪種元素適合位於何種位置。憑藉習得的直覺提出新的晶體。即使人類沒有逐一寫下規則，模型也能自主掌握。

逆向設計並不侷限於規則的晶體。也存在如玻璃般原子排列紊亂的物質。這類物質稱為非晶態（Amorphous）。2025年發表的一項研究利用擴散模型生成了非晶態結構。其生成速度比傳統計算方法快了數千倍。透過改變組成與製程條件，生成了多樣化的結構。這意味著逆向設計的觸角已延伸至晶體之外。

逆向設計模型也學習化學規則。每個原子能與相鄰原子形成的鍵結數量是固定的。這個數量稱為價數（Valence）。若違反價數規則，就會產生不可能存在的結構。2026年發表的一項研究將此價數規則納入生成過程中。結果成功篩選出實際可行的物質。將物理與化學常識融入模型的趨勢正在持續發展。

在火箭與新材料領域，這種轉變具有重大意義。火箭需要能夠承受極端環境的材料。燃燒室溫度極高。噴嘴會受到高速氣體的沖蝕。電池必須既輕量又安全。在自然界中很少有物質能同時滿足所有這些條件。因此需要從無到有全新繪製的逆向設計。人工智慧替人類涉足了未曾踏足的物質空間。

2. 遵循晶體對稱規則的生成模型

本節探討的是晶體的對稱規則。晶體並非將原子隨意丟棄的一堆雜物。而是原子依循規則重複排列的秩序。若人工智慧不了解這項規則，就會繪製出虛假的晶體。我們將分為兩代模型，探討如何將對稱性融入模型之中。

要理解晶體，首先必須掌握對稱這個詞。對稱是指進行某種操作後形狀仍保持不變的性質。當紙張對折後兩側重合，即為左右對稱。晶體中層疊交織著許多這樣的對稱性。向旁平移相同，旋轉相同，鏡像反射亦相同。

將所有這些對稱規則彙整並分類的成果就是空間群（Space Group）。在三維晶體中，空間群恰好有230種。每個晶體都屬於這230種中的一種。這種分類完全適用於理想的三維週期性晶體。如玻璃般的非晶態或準晶體則不在此列。只要掌握了空間群，就等於完全掌握了該晶體的重複與旋轉規則。

在空間群中，存在著原子可以佔據的固定位置。這組位置稱為威科夫位置（Wyckoff Position）。威科夫位置並非單一位置，而是透過對稱性連結的一群位置。在某個位置放置原子時，對稱規則會在成對的位置上也放置相同的原子。這就如同在鏡子前放一顆球，鏡子裡也會出現一顆球一樣。因此只要決定一個位置，多個原子的位置便會同時確定。這一組中包含多少個位置稱為多重度（Multiplicity）。生成模型若採納這項規則，便能避免原子互相重疊。

空間群的力量在於能以極少的資訊描繪出整體。高度對稱的晶體只需決定幾個原子即可。其餘部分會由對稱規則自動填補。聯想雪花結晶便很容易理解。向六個方向延伸的形狀完全相同。只要畫出一個方向，其餘五個方向透過旋轉即可獲得。晶體也是如此，透過微小的碎片來決定整體。

生成模型若不了解這項規則，就會產生問題。假設人工智慧自由地逐一放置原子。即使只摻入微小的計算雜訊，對稱性也會被打破。幾乎沒有對稱性的晶體稱為P1。P1也是名正言順的正式空間群。實際上確實存在屬於P1的物質。因此不能僅因其屬於P1就斷定為虛假。問題在於原本應具備高度對稱性的晶體坍塌為P1的情況。此時必須另外檢驗原子間距離、能量與穩定性。

因此，最新的研究試圖預先將對稱規則置入模型之中。採取了不同的步驟，而非逐一放置原子。首先建立包含所有對稱性的微小基本單元。接著套用對稱規則展開為完整的晶體。這樣一來，生成物保持對稱性的可能性便會提高。

處理對稱性的一種良好方法是等變性（Equivariance）這一性質。等變性是指當輸入旋轉時，輸出也隨之旋轉的性質。以手套為例很容易理解。將右手手套翻轉就會變成左手手套。手與手套一同翻轉。當晶體模型具備等變性時，即便旋轉結構，性質依然保持不變。無需強行湊合對稱性，也能自然維持。

使用具備這種等變性的神經網路，學習會變得更容易。因為模型能自主理解對稱性。無需從多個角度展示相同的結構。即使數據量少也能學得很好。因此，最新的晶體生成模型將等變性視為重要工具。這項性質在後續介紹的流匹配模型中也將成為核心。

2026年發表的晶體生成模型綜合回顧很好地梳理了這一趨勢。該回顧指出，遵循對稱性的能力是優良晶體生成模型的關鍵條件。認為遵循對稱性的模型能夠產生更多穩定的候選。該回顧並行比較了擴散模型與流匹配模型。

2.1 晶體生成擴散的起點（CDVAE）

晶體生成擴散研究始於一個早期模型。該模型的名稱為CDVAE。我們將逐一探討其優勢與不足之處。

CDVAE是晶體擴散變分自動編碼器（Crystal Diffusion Variational Autoencoder）的縮寫。該模型於2022年發表，開啟了該領域的大門。它建立了第一個同時處理晶體晶格、原子位置與原子種類的擴散框架。

CDVAE的重大貢獻在於考量了週期性邊界條件（Periodic Boundary Condition）。週期性邊界條件是指晶體以相同的形狀無止境地重複。聯想壁紙的花紋就很容易理解。一小塊圖案向上下左右延伸相連，覆蓋整面牆。晶體也是由微小的單位重複排列而構成塊體。

該模型透過名為朗之萬動力學（Langevin Dynamics）的方法逐步移動原子位置。此時推動原子的方向是模型所學到的機率梯度。這與實際原子之間的作用力或自由能不同。因此，僅憑此過程無法保證獲得穩定結構。在透過生成建立骨架後，還需利用DFT重新微調結構。這兩個階段必須分開來看。

然而CDVAE存在明確的侷限。它無法直接固定空間群對稱性。由於自由移動原子，對稱性很容易被打破。結果導致生成的結構經常坍塌為對稱性消失的P1狀態。在極度需要對稱性的晶體中，必須另外進行更多驗證。

另一個侷限在於必須預先決定原子數量。該模型先預測原子數量，然後根據該數量生成結構。數量一旦固定，靈活性就會降低。難以處理原子缺失或額外加入的情況。這項侷限將由後文介紹的海市蜃樓原子方法予以解決。

這些不足並非缺陷，而是墊腳石。CDVAE提出的課題成為了下一代模型的目標。如何保持對稱性？如何自由處理原子數量？這兩個問題引領了後續的研究。瞭解初期模型的侷限，正是進步的起點。

2.2 具備對稱性感知的條件式擴散模型

下一代模型試圖從一開始就遵守對稱性規則。為了避免混淆名稱相似的兩項研究，在此分開說明。效能數值僅在經過驗證的範圍內謹慎探討。

對稱感知模型的核心思想很簡單。它不逐一自由放置原子。而是先生成不對稱單元（Asymmetric Unit）。不對稱單元是能夠透過對稱性規則生成整個晶體的最小原子群。在這個小種子上應用空間群的對稱操作。經過此操作後，種子便會展開成完整的晶體。

這種方式的優點在於對稱性會自然而然地得以保持。由於是依照對稱性規則將種子展開，結果自然具備對稱性。無需另外調整原子。聯想剪紙就很容易理解。折疊一次後剪裁，展開時左右兩側就會完全相同。對稱感知模型就是以這種方式剪裁出晶體的。

在此必須區分兩項名稱相似的研究。其一是 SymmCD。這是一種保持對稱性的晶體生成擴散模型。由 Levy 等人於 2025 年在國際學習表徵會議 (ICLR) 上發表。這是一篇經過同儕審查的正式論文。該論文的識別碼為 arXiv:2502.03638。

另一項則是處理威科夫位置的獨立研究。這是 Ishii 等人於 2026 年發表的預印本論文。預印本 (preprint) 是指尚未經過同儕審查的初期研究。該論文提出了一種名為 WyckoffDiff-Adaptor 的方法。識別碼為 arXiv:2601.08115。這兩篇論文的目標相似，但方法與作者不同。本書不將兩項研究混為一談，而是分開介紹。

在 CDVAE 與對稱感知模型之間，也存在著過渡橋樑。其中之一便是 DiffCSP。該模型透過擴散同時生成晶格與分數座標。分數座標是將晶胞大小視為 1 時的相對位置。DiffCSP 比 CDVAE 更能保持對稱性。它為直接納入對稱性的後續世代模型鋪平了道路。模型就是這樣一代一代彌補不足、向前邁進。

在探討效能數值時必須謹慎。雖然有對稱性保持率超過 98% 的數字，但原文並未予以確定。因此本書不將特定數字當作確定的效能來使用。而是從發展方向來理解。對稱感知模型比舊模型更能保持對稱性。結果產生了更多接近實際晶體的候選材料。

對稱感知模型也能很好地處理條件式生成。條件式生成 (Conditional Generation) 是以所需性質作為條件提供的方式。假設設定了能隙這個數值。能隙是決定半導體性質的能量門檻。模型只挑選繪製符合該能隙的晶體。透過這種設定條件的方式，只會匯集符合目標的候選材料。因此大幅減少了篩選無效候選材料的浪費。

2026 年發表的一篇預印本論文進一步推進了這種條件式生成。它同時生成晶體結構與電子特性。由於一併學習電子特性，因此能更準確地符合目標性質。在以能隙與形成能作為條件的測試中，成功率有所提升。穩定且新穎的候選材料比例也提高了。兼顧對稱性與條件的趨勢仍在持續發展。

我們來探討這項技術為何在新材料領域不可或缺。對稱性與物質的性質深度交織。對稱性瓦解的虛假結構，其性質預測也會產生偏差。航太用合金或電池材料必須落實於實際合成才有意義。保持對稱性的生成模型能減少無效的候選材料。進入實驗階段的候選材料品質也隨之提升。

3. 更快速生成晶體的流匹配

擴散模型雖然精確，但步數繁多因而緩慢。流匹配透過減少步數來提高速度。我們也一併探討它是如何處理晶體所處的彎曲空間。

首先必須了解擴散模型為何緩慢。擴散模型透過逐步消除雜訊來生成結構。一次只消除一點點。因此完成生成需要數百到數千步。步數越多，計算所需時間就越長。生成單一候選材料需要花費時間。在需要篩選大量候選材料的材料探索中，這段時間是一大負擔。

流匹配 (Flow Matching) 從不同角度解決了這個問題。它不逐步消除雜訊，而是學習捷徑。它學習從起始狀態直達目標狀態的路徑。聯想河水的流動就很容易理解。一旦水道確定，樹葉就會順著那條路徑漂流。流匹配學習的正是水流流動的這條水道本身。

若將水道以數學公式表示，就是常微分方程。常微分方程 (Ordinary Differential Equation) 是描述數值變化的方程式。它表示數值如何隨時間變化。流匹配沿著這個方程式從起點前往終點。擴散在每一步都會隨機晃動，但這條路徑卻非如此。一旦起點確定，便會沿著既定路徑一路走到終點。因此路徑筆直且步數較少。只不過該起點本身仍然是隨機抽取的。即便路徑已確定，晶格的角度與體積畸變也不會自然減少。

擴散與流匹配的差異可以比喻為下山。擴散是在濃霧中一步一步摸索下山。雖然謹慎，但速度緩慢。流匹配則是沿著預先熟知的登山步道下山。因為認得路，所以步履大步且迅速。兩種方式雖然都能抵達山下的目的地，但所需的時間截然不同。

處理晶體時，存在著空間並非平坦的難題。晶格具有長度與角度。原子座標是重複晶胞內的位置。這種空間不像紙張那樣平坦，而是像球體一樣彎曲。彎曲的空間被稱為黎曼流形 (Riemannian Manifold)。

若將彎曲空間當作平坦紙張處理，就會產生誤差。這就像將地球儀展開成平坦地圖時面積會失真一樣。極地地區會被繪製得比實際更大。晶體也是如此。晶格的角度與體積會發生扭曲。因此，流匹配從一開始就使用彎曲空間的尺標。這把尺標被稱為黎曼度量（Riemannian Metric）。依其彎曲的本質來處理彎曲空間，扭曲就會減少。

3.1 在彎曲空間上尋找捷徑

我們透過代表性模型來探討流匹配如何處理彎曲空間。內容將以經過驗證的論文為主。

在彎曲空間中尋找捷徑，與在地球上飛行十分相似。從首爾飛往紐約的捷徑並非地圖上的直線。這是因為地球是圓的。實際的捷徑是沿著地球表面彎曲的曲線。這種曲線被稱為測地線（Geodesic）。晶體生成也是在彎曲空間上沿著測地線移動。

將這種構想首次成功應用於晶體的模型是 FlowMM。FlowMM 是將黎曼流匹配拓展以適用於晶體的模型。它同時考量了晶體特有的對稱性。平移、旋轉、置換原子順序以及週期性邊界條件皆能處理。該模型大幅減少了尋找穩定物質所需的步數。公開發表的論文指出，它以比現有方法少約三倍的步數找到了穩定的候選材料。

FlowMM 具備兩項功能。其一是當成分確定時，預測其穩定結構。其二是同時提出新成分及其結構。前者稱為晶體結構預測（Crystal Structure Prediction）。後者則是真正發掘新物質。流匹配能迅速完成這兩項工作。因此廣泛應用於材料探索的各個環節。

另一個經過驗證的案例是 CrystalFlow。這項研究於 2025 年發表在《自然-通訊》（Nature Communications）上。這是一篇經過同儕審查的正式論文。CrystalFlow 利用基於流的生成模型來建構晶體物質。它同時生成晶格與原子排列。該研究展現了流匹配比擴散模型更容易進行訓練。

流匹配也應用於有機晶體。2026 年發表的一篇預印本論文採用了晶胞流匹配（Unit Cell Flow Matching）。透過這種方法快速預測了有機晶體結構。該研究並非無機晶體的專用模型。因此必須注意避免將其推廣套用於無機材料的結果。但它確實展現了流匹配廣泛應用於各類晶體。

我們將速度的重要性與火箭聯繫起來探討。材料逆向設計必須篩選大量候選材料並加以過濾。即使挑選了一萬個，可用的可能也僅有寥寥數個。若生成單一候選材料的時間過長，整個探索過程就會受阻。流匹配解決了這個瓶頸。它能在相同時間內挑選出更多候選材料。在航太材料等條件嚴苛的領域中，這種速度更是發揮了極大作用。

流匹配能減少多少步數？FlowMM 論文指出，尋找穩定候選材料的步數減少了約三倍。它以更少的步數走完擴散模型所走的路徑。生成單一候選材料的時間也隨之縮短。縮短一百倍或將一天縮短至幾分鐘等誇大數字並沒有根據。僅從報告的數值來看，挑選的候選材料越多，節省下來的時間就越可觀。

流匹配也仍有待解課題。若要學習捷徑，就必須深入了解目標分佈。若訓練資料不足，就會學到錯誤的路徑。彎曲空間的計算也依然複雜棘手。因此流匹配並不能取代所有的擴散模型。應根據具體問題選擇使用這兩種方法。若急需精確度則使用擴散，若急需速度則使用流匹配。

4. 局部修補繪製與自主決定原子數量

晶體不一定要每次都從零開始繪製。也可以在既有結構中僅修改局部。填補空位與缺陷的修復（Inpainting）就是這樣的方法。此外，也有處理原子數量未定問題的海市蜃樓原子概念。

首先必須掌握修復（Inpainting）這個詞彙。修復是一種自然填補空白部分的技術。這在照片編輯中很常見。若抹除照片中的電線桿，該位置就會留下空白。人工智慧會參考周圍的天空來填補空缺。在晶體結構中也是進行相同的作業。在晶體中，它能自然填補空的原子位置與缺陷位置。

從零開始繪製晶體與修復有所不同。從零生成是從不放置任何原子的狀態開始。修復則是從既有結構開始。僅清空局部並重新繪製該部分。其餘部分保持原樣。這兩種方式的用途不同。在尋找全新物質時使用從零生成。在改良優良物質時則使用修復。

在材料研究中，這項技術之所以不可或缺，原因很明確。在實務作業中，極少需要從零開始重新繪製整個晶體。多數情況下，已經存在表現良好的母體晶體（Host Matrix）。只要在此基礎上添入或抽離少許其他元素，就能改

變其性質。像這樣將部分原子替換為其他原子的操作稱為摻雜（Doping）。原子脫落或嵌入非正常位置的狀態則稱為缺陷（Defect）。

摻雜是半導體產業長年使用的方法。純矽並不導電。若在其中加入極少量的磷或硼，電氣特性就會大幅改變。智慧型手機內的晶片就是依循這個原理運作。晶體修復技術將這種摻雜設計交由人工智慧處理，由模型提出應在何種位置填入何種元素的建議。

這項微小的變化能大幅改變整體性質。這就像在食鹽中稍微混入其他物質，味道便會隨之改變一樣。只要替換晶體中的一顆原子，電導率就會改變，催化性能也會隨之不同。因此，必須精準設計要在何處填入何種物質。修復技術正是協助進行這項精密設計的工具，它保留母體不變，僅重新繪製需要置換的位置。

修復技術比從白紙開始生成更具實用性，原因很明確。尋找優質母體晶體本身就耗費大量時間。若已有經過驗證的母體，在其基礎上進行改良會更迅速。這如同不重新建造一棟堅固的房子，而是僅翻修其中一間房間。由於地基穩固，風險自然較低。因此實務研究人員偏好採用修復方式。

要填補空缺位置，必須仔細觀察周圍的原子。若隨意填入元素，結構就會崩塌。選用的元素尺寸必須與相鄰原子相符，電中性平衡也必須維持。人工智慧透過學習母體的規則來符合這些條件。它利用名為遮罩（Masking）的方法，只遮蔽要替換的位置，僅重新繪製被遮蔽的區域，其餘部分則予以固定。

4.1 自主決定原子數量的海市蜃樓原子擴散（MiAD）

在自由處理原子數量的方法中，有一款名為 MiAD 的預印本論文模型。以下探討「海市蜃樓原子」這一概念為何具有實用價值。

MiAD 是海市蜃樓原子擴散（Mirage Atom Diffusion）的縮寫。這是 2025 年底發表的預印本論文，屬於尚未經過同行評審的早期研究。正式標題表達了從零開始建構新晶體的擴散模型之涵義，識別編號為 arXiv:2511.14426。

該模型的核心概念是海市蜃樓原子。Mirage 即為海市蜃樓之意。海市蜃樓原子是可能轉變為真實原子、也可能消失的虛擬位置。模型首先在空間內填入充裕的虛擬位置，接著在擴散過程中判斷每個位置是真實原子還是空缺。確定保留的位置會填入元素，其餘位置則直接消失。

這種方法的優勢在於不預先固定原子數量。以往的模型都是先定下原子數量後才建構結構。MiAD 則透過開啟或關閉虛擬位置，自行決定原子數量。該論文實際展現的是自主決定原子數量的生成過程。這項研究尚未驗證缺陷濃度、摻雜位置或非化學計量比等特性。不過，對於原子數量具有浮動性的物質，此方法確實留有應用的空間。

元素比例非整數比的物質稱為非化學計量化合物。這類物質在實際材料中相當常見。脫落一顆原子所形成的空缺會改變材料性質，也會產生由多個缺陷聚集而成的缺陷團簇。此外，還有原子擠入多餘空隙的間隙型結構。這種微小的無序排列決定了電導率與強度。能自由處理原子數量的生成方法，成為描繪這類無序結構的關鍵線索。

MiAD 在基準測試中回報了成果。該研究採用廣泛使用的 MP-20

測試集。代表穩定、獨特且新穎晶體比例的指標稱為 SUN 比例。論文指出在該指標上取得了一定成果。但此數值仍處於預印本論文階段，因此應將其視為初步結果，而非確定不變的性能表現。

探討這項技術對火箭與新材料所代表的意義。實際的航太材料並非完全規則對稱。結構中隨時存在原子微量脫落或更換位置的缺陷。正是這些缺陷決定了強度與導電性。能夠自由調控原子數量的模型能更精準地表達這種真實結構，進而產生更貼近實驗室實際結果的候選材料。不過由於該方法仍處於預印本論文階段，其缺陷設計性能仍需進一步驗證。

5. 透過強化學習引導生成優質候選材料

生成模型會產出大量候選材料，但並非全部都具備實用價值。透過強化學習能將方向引導至優質候選材料。以下探討強化學習如何發揮引導作用，以及其背後的原理與安全機制。

強化學習（Reinforcement Learning）是根據獎勵來修正行為的學習方式。這很容易讓人聯想到訓練幼犬的過程。表現良好就給予點心，表現不佳就不給。幼犬會逐漸增加能夠獲得點心的行為。人工智慧同樣會增加能獲取高

額獎勵的行為。

在材料生成領域，會針對優良結構給予高額獎勵。對於穩定且性能優異的晶體給予高分；對於原子發生碰撞或結構不穩定的情況則給予低分。模型會朝著獲取高分的方向調整其生成模式。因此隨著反覆測試，具備實用價值的候選材料比例便會持續增加。

生成模型與強化學習所扮演的角色不同。生成模型廣泛播撒看似合理的候選結構；強化學習則將這些候選結構導向既定目標。這就像播種的手與開闢水道的手各司其職一樣。雙手必須協同合作，才能結出豐碩的果實。僅靠生成或僅靠強化學習皆有所不足，唯有將兩者結合，才能逐步逼近所需的材料特性。

這項方法之所以必要，原因在於生成模型雖擅長產生看似合理的候選結構，但看似合理與實際穩定是兩回事。許多結構外表看似健全，在熱力學上卻容易崩解。因此僅靠生成是不夠的，必須同時兼顧穩定性、新穎性與可合成性。強化學習將这三項要素納入獎勵機制，藉此引導模型前進。

可合成性是一項極難處理的目標。在紙上計算穩定的物質，在實驗室中可能根本無法製造出來。合成途徑可能過於險阻，或者缺乏所需原料。因此單看穩定性遠遠不夠，還必須同步檢視是否能實際製成。強化學習的獎勵機制力求涵蓋這些現實條件，如此才能篩選出足以進入實驗室驗證階段的候選材料。

將強化學習導入材料生成的方法有很多種。具代表性的是近端策略最佳化（Proximal Policy Optimization）技術。這項技術每次只對策略進行小幅度的修改，因為若一次大幅度變動，學習過程便會產生動盪。它透過小幅度且謹慎地推進來逐步提高獎勵，從而穩定地提升性能。該技術在微調語言模型時也得到廣泛應用。

2025 年發表的一篇預印本論文充分展現了這個方向。該研究利用強化學習微調擴散模型，提高了逆向設計的成功率。模型產出了更多符合目標性質的結構，同時滿足穩定性、獨特性與新穎性條件的比例也隨之提升。這項研究仍處於初期階段，因此若要應用於工業領域，仍需要更多的 DFT 計算與實驗合成驗證。

5.1 強化學習的安全機制與性能指標

強化學習包含兩道安全機制。其一是防止模型偏離過遠的機制；其二是儲存優良候選結構以便重複運用的機制。以下同時檢視衡量性能的各项指標。

強化學習存在隱藏的風險。若僅一味追求獎勵，容易偏向異常結構，受困於給予高分的狹窄區域內。這樣會失去多樣化的候選結構，僅重複生成單一解答。這種現象稱為模式崩潰（Mode Collapse）。一旦發生崩潰，探索過程就會隨之停滯。

防止這種情況的機制是 KL 正則化（KL Regularization）。KL 是用來衡量兩種分佈差異程度的尺度。這項機制可防止微調後的模型過度偏離原本學到的分佈。這與繫上橡皮筋非常相似：朝新方向前進的同時，一旦偏離根基太遠就會被拉回。藉此，模型在尋找優質候選結構的同時也能維持多樣性。

另一項機制是經驗重放（Experience Replay）。它不會丟棄表現良好的候選結構，而是將其儲存起來，並在後續學習中重新調用。這就像將答對的考題收集在複習筆記中反覆演練一樣。如此一來，模型就不會遺忘好不容易尋獲的優良結構，使學習過程更加穩定延續。

衡量性能時常用的指標是 SUN 比例。SUN 代表穩定（Stable）、獨特（Unique）且新穎（Novel）的晶體，即同時滿足這三項條件的候選結構比例。穩定代表不易分解為其他物質；獨特代表生成物之間互不重複；新穎則代表該物質先前未存在於資料庫中。

衡量穩定性時，通常參考凸包上方能量（Energy above Hull）這項數值。該數值是在絕對零度下透過 DFT 計算所得。數值越低，代表計算上的穩定性越高；若數值接近 0，表示在計算環境中能良好維持結構。然而實際的溫度與壓力、水與氧氣的影響以及反應速率並未包含在內，且計算本身亦存在誤差。因此該數值應視為指出計算上穩定候選結構的參考指標。強化學習的獎勵機制將此數值作為關鍵要素來使用。

獎勵機制會將多個目標一同置於天平上衡量。若僅追求穩定性，產出的物質性質往往平庸；若僅追求特定性能，則可能產出難以合成的物質。因此，必須為穩定性、性能與新穎性分別賦予權重，透過權重調整來決定側重哪一項目標。這項權重調整正是設計者的職責。只要依據目標調整好天平的比重，候選結構就會往預期的方向聚集。

探討這些安全機制對火箭材料設計所代表的意義。航太材料必須能夠實際合成才具備實質價值。僅存在於紙面上的優良結構毫無用處。強化學習將可合成性納入獎勵之中，而 KL 正則化與經驗重放則確保探索過程的穩定進行。其結果是，足以推進至實驗室階段的候選材料比例得以大幅提升。

6. 逆向設計管線的實務應用案例

上述技術在實際研究中究竟如何應用？以下探討電池固體電解質、催化劑以及航太合金等領域。本節以經過驗證的最新研究為依據，審視生成、計算與實驗三者如何緊密接合運作。

若要在實際環境中使用前面探討的技術，必須將多種工具串聯整合。擴散模型與流動匹配負責產出候選結構；對稱性感知與晶體修復技術提升候選材料的品質；強化學習則將候選材料導向目標方向。當這些工具串聯為單一流程時，便能發揮強大力量。這個流程稱為逆向設計管線（Pipeline）。管線意味著將多個工序像管道一樣串接起來。

實務上的逆向設計通常循序進行三個步驟。首先在生成階段，由人工智慧繪製符合目標性質的候選結構；接著在計算驗證階段，由 DFT 與機器學習原子間勢（MLIP）計算穩定性與物理性質；最後在實驗合成階段，由自主實驗室或研究人員實際製備並加以確認。

這三個步驟並非單向流動。實驗獲得的結果會重新回饋給生成模型，模型藉由此回饋能更精準地繪製下一批候選結構。這種形成反饋迴路的方式稱為主動學習（Active Learning）。2025 年發表的一項研究透過主動學習顯著提升了逆向設計的效率，藉由反覆進行候選生成與驗證，逐步逼近目標性質。

進一步探討第二步驟的計算驗證。生成模型所產出的候選結構目前仍只是紙上圖樣。必須透過計算來驗證這張圖樣是否真正穩定。DFT

雖然精確但運算緩慢，因此會搭配前一章所討論的機器學習原子間勢。這種方法能以快得多的速度達到接近 DFT 的精確度，迅速篩除大量不合格的候選結構，最後僅將其中少數極具潛力的候選者交由 DFT 進行重複驗證。

這種協同合作決定了探索的速度。即便生成速度再快，若驗證緩慢也無濟於事；一旦驗證成為瓶頸，候選材料只會不斷堆積。快速生成必須與快速驗證相互接合。因此，最新研究將這三個步驟串聯為單一自動化流程。下一章將探討的自主實驗室正是負責該流程的最終環節。

6.1 全固態電池用鹵化物固體電解質設計

第一個案例是電池固體電解質設計。以下探討為何這種材料如此重要，以及 AI 如何提供協助，並以經過驗證的數據為中心進行審視。

全固態電池（All-Solid-State Battery）是使用固體電解質的電池。一般電池的電解質是液態的。液態電解質有著火的危險。固體電解質能降低這種危險。但並非固態就總是安全的。它也會與金屬鋰、水分或電極發生反應。硫化物系與部分鹵化物系會產生有害的分解物，或在介面處產生電阻與裂痕。儘管如此，降低漏液與起火危險的優勢依然顯著，因而備受關注。

對固體電解質所要求的性質十分嚴格。鋰離子必須在固體內部快速通過。離子通過的順暢程度稱為離子電導率（Ionic Conductivity）。數值越高越好。同時它還必須承受高電壓。不能過於鬆軟且要能良好貼合。要同時滿足所有這些條件並不容易。

鹵化物系固體電解質（Halide Solid Electrolyte）被視為極具前景的候選材料。鹵化物是指氯、溴、碘等元素。該系列在高電壓下相對穩定。柔軟度與電導率之間的平衡也相當不錯。因此相關研究十分活躍。代表性物質有由鋰、鉍、氯構成的化合物。

人工智慧以多種方式協助這類材料的設計。2025 年的一項研究結合了機器學習與 DFT 計算。該研究透過同時預測多種性質，篩選出了優質的鹵化物候選材料。它同時預測了離子電導率、彈性模數與電化學穩定窗口。這種同時考量多種性質的方法提高了實用性。

2026 年發表的另一項研究則採用了從數據中提取規律的方法。該研究找出了決定離子電導率的核心化學特徵。並以此特徵為基礎設計了新成分。論文報告指出，所設計的一種物質在室溫下展現出約每公分 12 毫西門子（mS/cm）

m) 的離子電導率。該數值在該體系中屬於較高水準。這展現了從數據提取規律並延續至設計的流程。

要計算離子如何在固體內部穿梭並不容易。鋰離子是從一個位置躍遷到另一個位置來移動的。這種躍遷的能壘越低，電導率就越高。要計算這個能壘，必須長期追蹤原子的運動。這裡也運用了機器學習原子間勢（MLIP）。2025年的研究指出，該方法在固態離子導體計算中十分實用。透過生成模型提出候選材料，再藉由此方法驗證離子遷移。

在此探討該材料在航太與火箭領域的意義。人造衛星與探測器高度依賴電池。在沒有陽光的時間裡，必須依靠儲存的電力維持運作。若電池不穩定，整個任務都會受到動搖。安全且輕量化的全固態電池能降低這種風險。AI 逆向設計有助於更快找到這類電池材料。

6.2 尋找水分解催化劑的設計

下一個案例是催化劑設計。我們將了解催化劑是什麼，以及 AI 如何尋找優質催化劑。同時檢視與機器人實驗室攜手的最新案例。

催化劑（Catalyst）是協助加速化學反應的物質。它本身幾乎不發生變化，卻能提高反應速率。在從水中製造氫氣與氧氣的裝置中，催化劑不可或缺。這種裝置稱為水電解裝置。若有優質催化劑，就能以相同的電量獲得更多的氫氣。

催化劑的性能由表面的原子排列決定。反應發生在催化劑表面。反應物附著在表面後脫離並發生轉化。物質附著在表面的過程稱為吸附（Adsorption）。吸附太強會產生問題，因為不易脫離而阻礙反應。吸附太弱也是問題，因為在反應發生前就會脫落。優質的催化劑能以適當的強度進行吸附。

吸附強度由表面原子的排列決定。原子間的距離只要稍有改變，強度就會隨之變化。因此如何構建表面至關重要。人工智慧透過改變表面的原子位置來調控吸附強度，尋找能夠適度吸附反應中間產物的排列結構。這種排列正是優質催化劑的秘訣。

產生氧氣的反應十分繁複。該反應稱為析氧反應（Oxygen Evolution Reaction）。要引發此反應，必須施加高於理論所需電壓的電壓。這部分額外的電壓稱為過電位（Overpotential）。過電位是與作為反應速率阻障之活化能不同的概念。過電位越低，代表催化劑越優質。低過電位意味著消耗更少的電力。因此，降低過電位是催化劑設計的一大核心目標。

2026年發表的一項研究利用生成式 AI

進行了催化劑的逆向設計。該研究針對混合多種元素的高熵催化劑（High-Entropy Catalyst）展開。它將光譜資訊、生成模型與機器人實驗設備整合為一體。機器人合成候選材料、測量性能，並將結果回饋給模型。此反饋迴圈迅速運轉。

該研究報告的數據展現了其實用性。合成並測量單一樣品所需的時間大幅縮短。原本約需 20 小時的工作減少至 78 分鐘。此外，所找出最佳候選材料的過電位進一步降低了 32 毫伏特。該案例既是學術研究，同時也展示了機器人自動化。由此可見生成模型與實驗緊密結合時速度能提升多少。

這種趨勢正在改變人類的工作。過去研究人員整天只能製作一個樣品，如今機器人日夜不息地執行這項工作。人類則思考該設定什麼目標，並判斷哪些結果具有意義。工作型態從動手操作轉向動腦思考。人類的角色並未消失，而是提升到了更高層次。下一章將詳細介紹這種自主實驗室。

混合多種元素的高熵催化劑之所以備受矚目是有原因的。當混合多種元素時，表面會產生多樣化的活性位點。其中出現適於反應之位點的機率隨之提高。然而組合數量過於龐大，人類難以逐一測試。生成模型代替人類搜索這片廣闊的空間，縮小優良成分範圍以減少實驗次數。機器人則迅速合成這些候選材料進行驗證。

在此探討催化劑在火箭與太空探索中的意義。在長期的太空任務中，必須自行製造水和空氣。水分解獲取氧氣時需要使用催化劑，製造燃料時也需要催化劑。優質的催化劑能用相同的電量產生更多的氧氣與燃料。太空船所需承載的負荷也隨之減輕。AI 逆向設計讓這類催化劑的實現更加提前。

氫氣也用作火箭燃料。液態氫能提供強大的推力。若水分解製氫技術進一步發展，燃料生產將變得更加容易。此時催化劑同樣掌握著反應的關鍵。若能以低廉的元素製造出優質催化劑，就能降低成本。減少使用昂貴鉑金是其目標方向。生成式 AI 在探索此類非貴金屬催化劑方面發揮了強大威力。

6.3 航太用合金與超合金逆向設計

最後一個案例是火箭發動機用合金設計。我們將了解為何需要新合金，並探討生成模型如何尋找合金成分。本節將以經過驗證的最新研究為依據。

火箭發動機必須承受極端的高溫。燃燒室內部溫度高達數千度，噴嘴則受到高速氣體的沖刷侵蝕。長久以來，鎳基超合金（Superalloy）一直佔據著這個位置。超合金是在高溫下仍不失強度的合金。然而鎳基超合金也有其溫度極限。在更炙熱的環境下，它會融化或軟化。

作為其替代方案，高熵合金（High-Entropy Alloy）應運而生。一般合金是以單一主要元素為主，再摻入少量其他元素；高熵合金則是將多種元素以相近的比例混合。如此混合後，結構反而出乎意料地穩定。其中由高熔點元素製成的合金稱為難熔高熵合金（Refractory HEA）。這種合金被視為在超過 1100 度環境下取代鎳基超合金的候選材料。

高熵合金之所以穩定，原因在於無序性。當多種元素均勻混合時，排列的可能情況大幅增加。這種豐富的組合可能性穩固了結構。這種特性稱為高組態無序度。無序反而維持了秩序。得益於這種特性，它在極端環境下也能良好承受。火箭噴嘴與燃燒室正是需要這種耐受力的代表性部位。

問題在於組合數量多如繁星。即使僅混合五種元素，比例的組合情況也是無窮無盡。要逐一合成並進行測試非常困難。此時生成模型挺身而出。只要設定目標性質，它就能反向找出相應的成分。將強度與韌性數值作為條件輸入，模型便會提出能夠達到該數值的元素比例。

2026年發表的數項研究展示了這一方向。一項研究整理了生成合金成分的多種生成方法，同時探討了變分自動編碼器、生成對抗網路與擴散模型。另一項研究則透過彙整文獻與數據，展示了縮小高溫高熵超合金候選範圍的流程。透過挑選符合目標性質的成分，減少了需要測試的候選材料。兩項研究目前均處於縮小候選範圍的階段，而非實際製造出零組件的階段。

合金的性質並非僅由成分決定。即使成分相同，也會依製造方法的不同而有所差異。如何加熱與冷卻會改變微觀結構。微觀結構是指晶粒的大小與排列。因此，合金設計必須將成分與製程一同考量。生成模型也正朝著同時處理這兩者的方向發展。接下來的章節將進一步探討這種製程相關的內容。

但有一點需要注意。難熔高熵合金仍有亟待克服的壁壘。它在室溫下仍殘留容易斷裂的性質，且在高溫下易與氧氣反應導致表面受損。因此，實驗室的前景展望與實際零組件之間仍存在差距。即便生成模型能縮小候選範圍，這兩大障礙依然必須透過實驗來克服。解決室溫脆性與高溫氧化問題是下一個課題。

6.4 生成模型的比較與驗證的重要性

各類生成模型該如何進行比較？我們將探討使用何種指標來衡量，並審視為何驗證比結果更重要。同時也闡明為何需要警惕未經核實的數據。

在比較生成模型時，會綜合考量多項標準。其一是穩定性，檢視生成的晶體能否自行維持；其二是新穎性，考察是否為資料庫中不存在的物質；其三是衡量原子距離的合理性，確認原子之間是否靠得太近；其四是審視對稱性保持，檢視晶體對稱性是否得到維護；最後則是速度，一同測量生成單一候選材料所需的時間。

並非單一指標優秀就是好模型。即便速度快，若穩定性低則實用價值不高；即便對稱性保持良好，若缺乏新穎性則意義不大。因此需要關注各項指標的平衡。根據問題的不同，關鍵指標也會有所改變。若是電池材料，穩定性與電導率更為優先；若是急需快速搜索，速度則居於首位。

為了公平比較，必須使用相同的測試基準。在晶體生成領域有著廣泛使用的測試集，其中最具代表性的是 MP-20。這是從材料專案（Materials Project）中選取約兩萬個晶體的集合。此外也有僅收集鈣鈦礦晶體的測試集。所有模型都在相同的測試集上進行測試，如此才能比較出孰優孰劣。若測試試卷不同，分數就無法並列衡量。

。

此處需要格外注意。將多個模型性能並列呈現的數值，往往在原始文獻中無法得到證實。因此本書不採用未經驗證的表格數據。未經核實的數值會誤導讀者。

取而代之的是，我們透過一項經過驗證的研究成果來建立具體概念。這是微軟於 2025 年在《自然》（Nature）期刊上發表的生成模型研究。該模型的名稱為 MatterGen。該模型能跨越整個元素週期表生成無機材料，並可依目標性質進行微調。論文報告指出，該模型產生的結構比以往模型高出兩倍的機率兼具穩定性與新穎性，且距離能量最低點也接近十倍之多。

該模型可針對多種條件重新學習。若針對彈性數值進行學習，就能生成堅硬的物質；若針對磁性數值進行學習，就能生成磁性物質；也可以學習限定只使用特定元素。這是一種將單一基礎模型調整以適應多重目標的方式。該方法稱為微調（Fine-tuning）。無需從頭重建基礎，只需更換目標即可。

這項研究進展到了實驗驗證階段。以 200 吉帕斯卡為目標體積彈性模數，生成了新物質結構。並且實際合成了這種物質。不過合成出來的是原子無序混合的固溶體。研究團隊透過奈米壓痕測量楊氏模數，並利用計算所得數值推估體積彈性模數。如此獲得的推估值在四次當中最高為 169 吉帕斯卡，平均為 158 ± 11 吉帕斯卡。我們必須區分實驗值與換算值、計算結構與合成結構。儘管如此，這仍是從生成走向合成的罕見實證。

探討預印本論文時必須更加謹慎。本章介紹的許多模型仍處於預印本階段。預印本論文尚未經過同行評審。其研究結果日後可能會有所變動。因此本書特別註明預印本為初期研究來加以介紹。即使數值極為優異，在驗證之前也不會將其視為定論。這種態度能保護讀者不致產生錯誤的盲信。

我們來審視為何驗證比結果更重要。生成模型可以無限產出候選材料。但並非生成出來的都是真實可用的。必須透過計算加以篩選。必須透過實驗加以確認。材料逆向設計只有在生成、計算與實驗協同運作時才有意義。越是像航太材料這樣關乎安全的領域，這項原則就越要嚴格遵守。唯有經過計算驗證與實驗合成之後，候選材料才能令人信服。

總結

本章講述了將材料探索方向顛倒過來的故事。傳統方法是先挑選材料，事後再測量其性質。新方法則是先設定性質，隨後再描繪出材料結構。這種新方法稱為材料逆向設計。僅僅改變一個方向，探索的力量就大幅改觀。描繪出以往不存在之物質的途徑就此展開。

逆向設計的主角是生成式人工智慧。擴散模型從模糊的原子群中去除雜訊，塑造出晶體。其原理與圖像生成 AI 相似。晶體生成更加困難。因為必須同時協調晶格、原子位置以及原子種類。

晶體具有名為對稱性的嚴格規則。三維晶體屬於 230 種空間群之一。初期模型 CDVAE 因無法直接固定對稱性，結構往往容易瓦解。具備對稱性感知的條件擴散模型藉由建立微小種子並利用對稱性展開，減少了這個問題。將名稱相近的研究區分開來而非混為一談的態度至關重要。

提升速度的努力也接續展開。流匹配（Flow Matching）並非逐步消除雜訊，而是學習捷徑。FlowMM 與 CrystalFlow 就是代表案例。它們在彎曲空間中沿著測地線快速生成晶體。在需要大量篩選候選者的材料探索中，這種速度發揮了巨大作用。

僅替換局部的技術也得到了發展。圖像修補（Inpainting）能夠填補空位與缺陷。海市蜃樓原子擴散（Mirage atom diffusion）能自由處理原子數量。透過設置可有可無的虛擬位置，自行決定原子數量。這能更精準地表現真實材料的缺陷結構。

強化學習引導生成模型朝向更優質的候選材料發展。將穩定性、新穎性與可合成性納入獎勵之中。KL 正則化與經驗回放維持了探索的穩定性。透過 SUN 比率與凸包上方能量來衡量成果。

實務案例表明這項技術並非紙上談兵。在鹵化物固態電解質設計中，數據分析與設計緊密相連。在高熵催化劑設計中，機器人實驗與生成模型相互配合，大幅縮短了時間。微軟的生成模型實際合成了所設計的物質，並確認了其性質。

貫穿本章的核心思想只有一個。人工智慧是替我們在遼闊物質空間中行走的嚮導。人類一生都無法走遍的道路，它在數天之內就能瀏覽完畢。挑選出看起來優良的候選者呈現在眼前。然而是否採信這些候選者，則由計算與實驗來決定。嚮導縮小了路徑範圍，最後則由人類推開大門。

最後再次重申驗證的原則。生成模型能產出無數的候選材料。但並非生成出來的都是真實可用的。未經確認的數值絕不採用。必須透過計算加以篩選，並透過實驗加以確認。材料逆向設計只有在生成、計算與實驗協同運作時才有意義。在火箭與太空探索等關乎安全的領域，這項原則必須更加嚴格。AI描繪出的結構不是最終答案，而是經過精挑細選的實驗候選者。

相關佐證資料

- Xie, T., Fu, X., Ganea, O. E., Barzilay, R., & Jaakkola, T. (2022). Crystal diffusion variational autoencoder for periodic material generation. International Conference on Learning Representations. <https://arxiv.org/abs/2110.06197>
- Jiao, R., Huang, W., Lin, P., Han, J., Chen, P., Lu, Y., & Liu, Y. (2023). Crystal structure prediction by joint equivariant diffusion. Advances in Neural Information Processing Systems. <https://openreview.net/forum?id=DNdN26m2Jk>
- Merchant, A., Batzner, S., Schoenholz, S. S., Aykol, M., Cheon, G., & Cubuk, E. D. (2023). Scaling deep learning for materials discovery. Nature, 624, 80-85. <https://doi.org/10.1038/s41586-023-06735-9>
- Zeni, C., Pinsler, R., Zugner, D., Fowler, A., Horton, M., Fu, X., et al. (2025). A generative model for inorganic materials design. Nature, 639, 624-632. <https://doi.org/10.1038/s41586-025-08628-5>
- Levy, D., Panigrahi, S. S., Kaba, S. O., Zhu, Q., Lee, K. L. K., Galkin, M., Miret, S., & Ravanbakhsh, S. (2025). SymmCD: Symmetry-preserving crystal generation with diffusion models. International Conference on Learning Representations. <https://arxiv.org/abs/2502.03638>
- Ishii, T., Hisama, K., & Shinohara, K. (2026). Symmetry-aware conditional generation of crystal structures using diffusion models. arXiv. <https://arxiv.org/abs/2601.08115>
- Okhotin, A., Nakhodnov, M., Kazeev, N., Lazarev, M., Ustyuzhanin, A. E., & Vetrov, D. (2025). MiAD: Mirage atom diffusion for de novo crystal generation. arXiv. <https://arxiv.org/abs/2511.14426>
- Chen, J., Guo, J., Fako, E., & Schwaller, P. (2025). Accelerating inverse materials design using generative diffusion models with reinforcement learning. arXiv. <https://arxiv.org/abs/2511.03112>
- Miller, B. K., Chen, R. T. Q., Sriram, A., & Wood, B. M. (2024). FlowMM: Generating materials with Riemannian flow matching. Proceedings of Machine Learning Research, 235. <https://arxiv.org/abs/2406.04713>
- Luo, X., Wang, Z., Wang, Q., Shao, X., Lv, J., Wang, L., Wang, Y., & Ma, Y. (2025). CrystalFlow: A flow-based generative model for crystalline materials. Nature Communications, 16, 9267. <https://doi.org/10.1038/s41467-025-64364-4>
- Lo, A., Mucko, L., Cheng, A. H., Cai, A., Price, A. J. A., & Matusik, W. (2026). Fast organic crystal structure prediction with unit cell flow matching. arXiv. <https://arxiv.org/abs/2606.03199>
- Lipman, Y., Chen, R. T. Q., Ben-Hamu, H., Nicklas, M., & Le, M. (2022). Flow matching for generative modeling. International Conference on Learning Representations. <https://openreview.net/forum?id=PqvMRDCJT9t>
- Hoogeboom, E., Satorras, V. G., Vignac, C., & Welling, M. (2022). Equivariant diffusion for molecule generation in 3D. International Conference on Machine Learning, 8867-8887. <https://arxiv.org/abs/2203.17003>
- Schulman, J., Wolski, F., Dhariwal, P., Radford, A., & Klimov, O. (2017). Proximal policy optimization algorithms. arXiv. <https://arxiv.org/abs/1707.06347>
- Metni, H., Rupple, L., Walters, L. N., Torresi, L., Teufel, J., Schopmans, H., Ceder, G., & Friederich, P. (2026). Generative models for crystalline materials. Advanced Materials, 38(18), e23620. <https://doi.org/10.1002/adma.202523620>
- Mal, S., Ahmed, N., Jami, J., Mishra, S., & Sen, P. (2025). DiffCrysGen: A generative diffusion model for accelerated design of inorganic crystalline materials. arXiv:2510.12329. <https://arxiv.org/abs/2510.12329>
- Okuda, I., Takahara, I., & Mizoguchi, T. (2026). Inverse materials design via joint generation of crystal structures and local electronic descriptors. arXiv:2605.01286. <https://arxiv.org/abs/2605.01286>
- Yang, K., & Schwalbe-Koda, D. (2025). A generative diffusion model for amorphous materials. npj Computational Materials, 12(1), 29. <https://doi.org/10.1038/s41524-025-01901-1>
- Han, X.-Q., Guo, P.-J., Gao, Z.-F., Sun, H., & Lu, Z.-Y. (2025). InvDesFlow-AL: Active learning-based workflow for inverse design of functional materials. npj Computational Materials, 11(1), 364. <https://doi.org/10.1038/s41524-025-01830-z>
- Cheng, M., Luo, W., Tang, H., Yu, B., Cheng, Y., Xie, W., Li, J., Kulik, H. J., & Li, M. (2026). Enhancing materials discovery with valence-constrained design in generative modeling. Nature Computational Science. <https://doi.org/10.1038/s43588-026-01037-2>
- Choong, L. Y. A., Chen, Z., & Ng, M.-F. (2025). Discovery of effective halide solid electrolytes for solid-state rechargeable batteries via machine learning and DFT calculations. ACS Applied Energy Materials, 9(1), 507-520. <https://doi.org/10.1021/acsaem.5c03277>
- Li, D., Lin, Z., Luo, F., Xiao, C., Dai, Z., Ye, Z., Wang, Q., Guo, Y.-G., & Yang, C. (2026). Data-driven chemical feature extraction and material design for halide solid-state electrolytes. eScience, 100590. <https://doi.org/10.1016/j.esci.2026.100590>

- Zhou, D., Yang, R., Jia, Z., Cai, Y., Zhao, L., Guo, L., Ye, G., Wang, S., Chen, L., Liu, D., Smith, P. E. S., Huang, Y., Zhu, Q., & Jiang, J. (2026). A practical inverse design approach for high-entropy catalysts using generative AI. *Nature Synthesis*, 5(5), 730-739. <https://doi.org/10.1038/s44160-025-00983-5>
- Li, C., Xian, Y., Zhou, Y., Ding, X., Sun, J., & Xue, D. (2026). Generative design for alloys: Harnessing generative models for faster discovery. *Advanced Materials*, 38(29), e20478. <https://doi.org/10.1002/adma.202520478>
- Rousseau, F., Belmonte, T., Sur, F., & Nominé, A. (2026). Inverse design of high-entropy superalloys using machine learning and generative artificial intelligence. *Materials & Design*, 266, 116097. <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2026.116097>
- Du, H., Hui, J., Zhang, L., & Wang, H. (2025). Universal machine learning interatomic potentials are ready for solid ion conductors. *arXiv:2502.09970*. <https://arxiv.org/abs/2502.09970>

第3章 自主實驗室與科學多智慧體系統

前言

試想在家烤麵包的場景。決定麵粉和水的份量。攪拌麵團並調整烤箱溫度。切開烤好的麵包品嚐味道。若太硬就增加水量並降低溫度。下一次就會烤出稍微好一點的麵包。就這樣多次重複決定材料、製作、品嚐、修正的過程。

尋找新材料的研究也與此類似。研究人員決定成分比例。混合粉末並在高溫下燒結。測量製成物質的結構與性質。若結果不佳就改變條件。必須重複這個過程數百次，才能產生一種好材料。

問題在於時間。人工手動進行這項工作，一天只能做幾次。到了晚上實驗就會中斷。若要一點一點改變成分並搜尋廣泛範圍，需要花費數年時間。用於火箭的材料必須承受嚴苛的條件。因此候選物質的數量極多，單靠人力難以全部測試。

自主實驗室（Self-Driving Laboratory）是將這種重複性工作交給機器的實驗室。人工智慧（AI）挑選下一次要測試的條件。機器人稱量、混合並燒結粉末。分析儀器測量結果。該結果再次回傳給人工智慧。即使人員沒有每次下達指示，實驗也會自動持續進行。就像自行清掃的掃地機器人一樣，實驗室整夜自行運轉。

像這樣結果再次回饋至下一次選擇的結構稱為閉迴路（Closed-loop）。閉迴路是指如環般封閉的迴路。實驗、測量、學習、下一次實驗不間斷地循環運轉。本章探討這座自主實驗室如何運作。檢視人工智慧如何挑選下一次實驗。觀察機器如何讀取論文中的句子。探討機器人與人工智慧如何安全地對話。最後檢視世界各地的實際自主實驗室案例。

這裡也指明自主實驗室為何在現今備受矚目。近來人工智慧能快速預測材料性質。透過計算一天能產出數千個優秀候選材料。然而實際製造並驗證的速度卻很緩慢。預測變快了，驗證卻跟不上。填補這一差距的正是自主實驗室。機器人快速製造並確認計算產出的候選材料。可謂是調和預測與驗證速度的橋樑。

本章介紹的諸多系統中，多數仍處於初期研究階段。亦有剛在學會發表的預印本論文。預印本論文是未經同儕審查的早期研究。因此本章比起誇耀性能數據，更著重於共同檢視原理與限制。自主實驗室的目標不是快速實驗，而是可靠的實驗。

3.1 自主實驗室由哪些組件運轉

本節探討內容

本節檢視自主實驗室整體由哪些組件構成。大致分為四個部分。分別是決定下一次實驗的大腦、實際製作的雙手、測量結果的眼睛，以及更新所學知識的記憶。這四個部分如環般相連，將實驗結果傳遞至下一次實驗並循環運轉。

首先重新探討閉迴路一詞的含義。接著逐一檢視各部分所執行的工作。最後探討為何火箭材料研究需要這種結構。

自主實驗室由四個部分互相咬合運轉。在規劃層中，人工智慧挑選下一次要測試的成分與製程條件。這裡的製程條件是指燒結溫度、持溫時間、升溫速率與氣氛氣體。在執行層中，機器人稱量、混合並壓製粉末成顆粒。然後放入電爐中燒結。在測量層中，X射線繞射儀等工具測量製成物質的結構。在學習層中，測量結果輸入人工智慧模型以更新知識。

連結這四個部分的是資訊流。規劃層向執行層發送工作說明書。工作說明書是註明要做什麼、做多少、如何做的指示書。執行層將製作的試樣送往測量層。測量層將相純度與晶格常數等數值傳送至學習層。相純度意指目標晶體析出的純淨程度。學習層利用該數值修整下一次的規劃。資訊如此運轉一圈，一次實驗便告完成。

閉迴路的力量在於快速重複。即使一次實驗失敗，資料依然留存。失敗的條件也能說明何處行不通。人工智慧同時從成功與失敗中學習。因此下一次的條件會逐漸改善。人員只需每隔幾天確認一次大方向，細微的重複作業則交由機器負責。

檢視火箭材料為何需要這種結構。火箭噴嘴與燃燒室承受著極端條件。溫度高達數千度。壓力與振動也極大。用於此處的材料條件極為嚴苛。稍微改變成分，性質就會大幅變化。因此需要測試的候選材料多達數萬種。單靠人力無法搜尋如此廣大的空間。自主實驗室能快速縮小這個廣闊的空間。

2026年，將自主實驗室提升至更高層次的研究持續展開。英國皇家化學學會梳理了自主實驗室2.0的概念。第一代自主實驗室僅解決指定的一種問題。下一代則致力於靈活處理多種設備與問題。廣泛檢視自主實驗室的2025年綜述論文也已發表。該論文同時指明了技術成熟度與尚存的障礙。美國化學會媒體報導指出，自主實驗室正在改變化學家的工作方式。

這種結構也有明顯的限制。配備儀器設備需要龐大資金。串接機器人與分析儀器也相當棘手。就連精準稱量粉末都非易事。自動識別失敗的實驗也很困難。因此現今的自主實驗室僅適用於特定材料群。目前尚無能處理所有材料的萬能實驗室。本章其餘各節將檢視如何逐一跨越這些障礙。

3.1.1 挑選下一次實驗的貝氏主動學習

本小節探討相當於自主實驗室大腦的部分。人工智慧如何挑選下一次實驗是核心所在。這裡採用的方法是貝氏主動學習。用淺顯的語言解說該方法是什麼以及為何能減少實驗次數。

假說是對下一次實驗為何會更好的構想。優秀的自主實驗室會建立良好的假說。若隨意盲目測試任何條件，將浪費時間。必須挑選有潛力的方向進行測試。貝氏主動學習（Bayesian Active Learning）正是協助進行此項挑選的方法。主動學習是指機器自行挑選學習資料的方式。

該方法首先建立代理模型（Surrogate Model）。代理模型是代替並模擬高成本實驗的小型計算模型。利用截至目前獲得的實驗結果建立該模型。代理模型預測尚未測試條件下的性質。預測會同時產出兩個數值。一個是預期性能。另一個則是該預測的不確定性程度。

同時考量這兩個數值是關鍵所在。預期性能高的區域值得測試。不確定性大的區域也同樣值得測試。因為在未知的領域中，可能隱藏著意想不到的優良材料。若只追求性能，就只會在已知的範圍內打轉。若只追求不確定性，就會在無用之處徘徊。良好的方法會在兩者之間取得平衡。這被稱為探索與利用的平衡。這裡的探索是指考察未知領域，利用則是指深掘已知領域。

以數值衡量這種平衡的工具是獲取函數（Acquisition Function）。獲取函數為各候選條件進行評分。依分數高低排序後，名列前茅者即成為下一次實驗的條件。代表性的獲取函數是期望改善量（Expected Improvement）。期望改善量衡量下一次實驗能比截至目前的最佳結果提升多少。另一種方法則是信賴上限（Upper Confidence Bound）。該方法讓人同時考量優良性能與未知領域。自主實驗室利用這些評分決定下一次的成分、溫度與時間。

檢視該方法在火箭材料中為何如此重要。超高溫陶瓷或特殊合金每做一次實驗都需要龐大費用。使用昂貴原料並經歷長時間燒結。因此減少實驗次數即是節省金錢與時間。貝氏主動學習只挑選有潛力的條件進行測試。相比盲目全面測試，實驗次數大幅減少。有些自主實驗室報告指出，所需實驗次數減少了數十倍。

實際案例顯現了其成效。2026年，某研究團隊建置了自主生長薄膜的實驗室。薄膜是將原子逐層堆疊而成。該實驗室透過即時相機讀取電子繞射圖樣。繞射圖樣是顯示原子是否妥善堆疊的訊號。人工智慧觀察該圖樣並挑選下一次條件。其結果使所需實驗次數大幅減少。研究指出，相比逐一排查所有條件，實驗次數減少了三十倍以上。這表示更快找到了優良條件。該研究雖仍處於初期階段，卻清楚展現了發展方向。

2026年，針對自主實驗室調整並完善該方法的研究十分活躍。某篇預印本論文整理了適用於自主材料實驗室的貝氏最佳化。從演算法貫穿說明至實際實驗流程。另一篇預印本論文提出了自行縮小搜尋空間的方法。透過主動學習將候選空間縮小約一半，同時保留了大部分優良解。如此一來便能更快找到優良材料。適用於實驗科學的貝氏最佳化實務指南也在2026年出版。

該方法亦有其限制。代理模型初期因資料匱乏而預測粗糙。前幾次實驗可能抓錯方向。若成分空間極為廣闊，計算量將大幅增加。若測量雜訊過多，預測就會產生波動。因此人員不會盲目輕信代理模型的預測。將預測作為參考，並始終透過實際測量加以驗證。在自主實驗室中，人員的監督依然不可或缺。

3.2 擷取論文中的合成法並轉化為安全計畫

本節探討內容

本節探討兩件事。其一是使機器能夠讀取論文中的合成方法。其二則是將該方法轉化為計畫，讓機器人安全執行。

人類閱讀論文後會在腦海中勾勒出實驗步驟。機器卻無法如此。因此必須將句子轉換為機器能夠處理的形式。本節檢視該轉譯過程與安全計畫。

論文中的合成方法是以文字敘述呈現。記載著混合何種粉末、份量是多少。記載著在幾度下燒結幾小時。記載著在何種氣體氛圍下處理。數十年累積的論文中包含數百萬筆此類方法。這些知識是新材料研究的寶貴資產。但多數散落於人類日常的敘述語氣中。

問題在於這些文句因人而異。有的論文寫著「燒結整夜」。有的論文僅記載「在高溫下處理」。並未確切記載整夜是幾小時、高溫是幾度。人類能憑藉經驗填補這些空白。機器卻無法做到。因此需要將分散的文句轉化為精確的數值。

在火箭材料研究中，這項工作深具價值。超高溫陶瓷與特殊合金的合成法散見於古舊文獻中。若由人工逐一研讀並整理，需耗費漫長時間。機器自動擷取並整理文句，能大幅節省時間。自主實驗室將收集到的方法直接轉化為機器人指令，縮短了從文獻到實驗的距離。

若這些知識處於分散狀態，就會產生重複研究。會再次測試其他研究人員早已失敗的條件。因不知曉已有成功方法而從頭重新摸索。將文獻中的方法匯集於一處，便能減少此類浪費。人類難以讀完數百萬篇論文。因此由機器擷取並整理文句極具價值。整理妥當的方法將成為自主實驗室良好的起點。

這裡包含兩個階段。其一是從文句中擷取方法。這項工作由大型語言模型（Large Language Model）負責。大型語言模型是學習並處理人類文字的人工智慧。其二則是將擷取出的方法轉化為安全計畫。這項工作由規劃語言負責。接下來兩小節將詳細檢視各個階段。

3.2.1 從論文建立合成計畫的語言模型（MSP-LLM）

本小節探討從論文中擷取合成方法的方法。以 MSP-LLM 研究為代表案例進行探討。觀察該研究試圖解決何種問題，以及按照哪些步驟運作。

MSP-LLM 是一項制定材料合成計畫的大型語言模型研究。其名稱源自「用於完整材料合成規劃的統一大型語言模型框架」這一論文標題。這是 2026 年公開的早期研究。研究團隊為盧熙雄、羅慶洙、李南慶、朴贊榮。這項研究是在學術會議發表的預印本論文。因此應視為一項前沿嘗試，而非現場標準。

這項研究要解決的問題是合成規劃。合成規劃是制定製造目標材料整體順序的工作。這項工作分為兩個子問題。其一是前驅物預測。前驅物是為了製造目標材料而最初投入的原料。其二是合成操作預測。合成操作是混合、加熱烘烤與冷卻等動作的順序。必須同時解決這兩個問題，才能得出完整的計畫。

MSP-LLM 將這兩個問題串連為單一流程。首先確定目標材料屬於哪種類別。該類別成為中間判斷標準。接著挑選符合該類別的前驅物。最後規劃符合該前驅物的操作順序。如此便構建了從類別到原料、從原料到順序相連的鏈條。透過鏈條串連，就能得出符合化學邏輯且前後一致的計畫。

我們以更簡單的例子來看這個流程。決定要做什麼料理相當於目標材料的種類，就像決定做泡菜鍋一樣。接著決定要買什麼相當於前驅物預測，就像挑選泡菜、豬肉與豆腐一樣。最後決定按照什麼順序烹調相當於操作預測，就像安排先炒、加水、再煮滾的順序一樣。MSP-LLM 串連這三個步驟來完成計畫。

來看看為什麼這種自動規劃在火箭材料中深具價值。製造新型合金或陶瓷時，從挑選原料開始就很困難。即使目標相同，一旦更換原料，結果就會改變。改變加熱烘烤的順序，結果也會不同。若由人工逐一推敲這些組合，需要耗費漫長時間。自動規劃器能以論文知識為基礎，迅速提供良好的起點。自主實驗室便能以此起點展開實驗。

這種方法也有明確的局限性。大型語言模型有時會捏造不存在的事實，這被稱為幻覺。如果直接依據捏造的原料或條件進行實驗，將會浪費資源，甚至可能產生危險的組合。因此，擷取出的計畫必須由人工或其他驗證工具加

以確認。首先要檢視是否符合化學規則以及是否安全。自動規劃是輔助人類的工具，而非取代人類的工具。

3.2.2 以規劃語言防止機器人發生事故（PDDL）

本小節探討將擷取的合成方法轉化為安全的機器人計畫之工作。此處使用的工具是規劃語言 PDDL。我們將以通俗易懂的語言解釋這種語言如何防止機器人發生事故。

實驗計畫並非單純的順序表。每個動作都有必須預先具備的先決條件。電阻爐必須是空的才能放入樣品。電阻爐必須冷卻後才能取出樣品。粉末稱量完成後才能進行混合。如果違反這些先後條件就會發生事故。機器人隨意打開滾燙的電阻爐門是非常危險的。

PDDL（Planning Domain Definition Language）是用於記錄此類計畫的語言。意思是規劃領域定義語言。該語言為每個動作記錄兩項要素。其一是前提條件，記錄執行此動作之前何種條件必須為真。其二是執行效果，記錄執行此動作後會產生什麼變化。例如，加熱烘烤動作的前提條件是電阻爐處於待機狀態且溫度較低。而完成該動作後的執行效果則是樣品已完成熱處理。

只要記錄下這些條件，機器就能自行找出安全的順序。不符合條件的動作不會被執行。針對滾燙電阻爐的接近指令會被阻擋。尚未完成稱量的樣品不會進入混合階段。這些規則成為預防機器人事故的防護欄。相當於將人類遵守的實驗室安全守則轉換為機器語言。

然而，這道防護欄並不會自動保證安全。前提條件必須由人工逐一精確填入才能運作。若遺漏或寫錯條件，防護欄就會出現漏洞。因此，PDDL 並非直接保證安全執行的裝置。而是由人類預先衡量風險並轉化為規則的工具。規則的嚴密程度取決於人類判斷的周密程度。

這種計畫可以用圖形來表示。將各個動作設為節點，並以箭頭連結先後關係。這種圖稱為有向無環圖。意思是箭頭僅朝單一方向流動且不會循環折返。觀察這張圖就能知道哪些工作可以同時進行。例如在烘烤某個樣品的同時稱量另一個樣品的粉末。並行處理互不干擾的工作，實驗室整體的運轉速度就能隨之加快。

在火箭材料實驗中，這種安全計畫至關重要。超高溫電阻爐若操作不當會極具危險性。高活性原料則絕不能接觸空氣。多台設備在同一實驗室中同時運作。在無人值守且徹夜運轉的實驗室中，絕對需要防止事故的規則。像 PDDL 這樣的規劃語言能嚴密構建這些規則。自主實驗室的速度唯有建立在這種安全機制之上才有意義。

這種方式同樣存在局限。要將世上所有的條件都寫成規則十分困難。未曾記錄的情況在現實中仍可能發生。若規則過多，尋找計畫所需的運算量便會大增。突如其來的故障無法單靠規則來防止。因此僅靠規劃語言是不夠的。必須同時具備能即時監控設備狀態的其他裝置，該裝置將在下一節進行探討。

3.3 連結人工智慧與實驗設備的標準通訊（MCP）

本節探討人工智慧與實驗設備如何進行對話。語言模型處理的是文字語句。天平、電阻爐與機械手臂則需要精確的指令。兩者之間需要一個銜接的中間層。本節將探討該中間層。同時檢視標準通訊規則以及構建於其上的安全裝置。

語言模型擅長處理人類的文字。也能理解「緩慢升溫」這類句子。然而電阻爐無法理解自然語言。電阻爐必須接收每分鐘升溫幾度的精確訊號。天平與機械手臂亦是如此。因此需要有將語句轉換為設備語言的轉譯機制。

過去，這種轉譯機制必須為每台設備單獨建立。人們分別為天平、電阻爐與機器人編寫專屬的轉譯程式。每更換一台設備，就必須重新編寫轉譯程式。多個實驗室不斷重複相同的工作。造成了極大的浪費。由於缺乏標準，彼此之間也很難共享程式碼。

為了解決這個問題，標準通訊規則應運而生。有了標準規則，就能以相同的方式連接各台設備。新設備只要符合規則即可直接接入。實驗室之間共享程式碼也變得更加容易。近期的自主實驗室研究便在模型上下文協定中尋找這項標準。

有一項名為模型上下文協定（Model Context Protocol）的公開規則。簡稱 MCP。協定是彼此約定的通訊方式。MCP 是連結人工智慧與軟體工具的規則。它以標準方式告知人工智慧有哪些可用工具。人工智慧則能自主辨識並調用這些工具。

在此需要指出容易被誤解的一點。MCP 是連接軟體之間的高階規則。無法直接驅動天平或電阻爐等實體設備。轉動馬達與閥門的工作由各設備獨立的驅動程式負責。驅動程式是直接處理設備訊號的底層程式。MCP 則架構在這些驅動程式之上，將其與人工智慧相連。因此，單靠 MCP 並不能直接接上設備。MCP 既非工業用即時控制標準，亦非安全規範。若要連接設備，必須在其下方另外建立驅動程式層。

將此規則引入自主實驗室的案例便是 NIMO 控制器。這是 2026 年公開的早期研究。研究團隊為吉川成樹與田村亮。這項研究將自主實驗室的多項功能作為 MCP 伺服器呈現出來。在此，NIMO 是決定下一步實驗的決策引擎。控制器則是透過 MCP 將該引擎與多種工具連結的協調層。在此案例中，人工智慧操作了進行配色調校的自主實驗室。自行調整成分反覆實驗，直到調配出目標顏色為止。這項研究實際展示的正是這種協調機制與配色實驗。

該研究揭示的 NIMO 目標十分明確。自主實驗室存在多種最佳化方法。也有多種類型的工具。逐一連接這些方法與工具是個巨大的瓶頸。NIMO 控制器以共通的方式將兩者連結。使人類無需編寫程式碼即可構建實驗流程。只需在畫面上選取工具並加以串接即可。不過由於該研究仍處於早期階段，要視為廣泛應用的標準尚言之過早。

來看看為什麼這個通訊層在火箭材料實驗室中如此重要。材料實驗室中混雜著來自不同公司的設備。天平、電阻爐與繞射儀的製造商各不相同。若要讓單一的人工智慧操作這些設備，就必須有共通語言。標準通訊規則能將這些多樣的設備整合為單一流程。即使引進新設備，也無需大費周章即可接入。實驗室的擴展或改動也變得更加容易。

標準通訊還有另一項優勢。那就是即使不懂程式碼的人也能設計實驗。人工智慧能自主辨識具備哪些工具。並將這些工具呈現在畫面上。研究人員只需挑選工具並按順序串接即可。能像繪圖一樣構建出天平稱量、混合、烘烤及繞射測量的流程。降低設計實驗的門檻後，將有更多研究人員使用自主實驗室。

此層級同樣存在局限。通訊規則尚屬新興且仍在逐步成形中。各設備廠商對該規則的遵循程度不一。老舊設備更是難以相容。若通訊中斷或訊號延遲，實驗就會出現差錯。因此通訊層本身也需要安全機制。這種裝置不會立即執行指令，而是會先進行檢查，這就是所謂的狀態機。

3.3.1 狀態機守護的最後安全防線

本小節探討維護設備安全之狀態機。我們將檢視狀態機的定義，以及它如何阻擋危險指令。並探討為何此裝置是自主實驗室的最後一道安全防線。此處探討的狀態機並非特定產品已完全具備的功能。前面介紹的 NIMO 控制器是著重於工具串接協調的研究。狀態機與聯鎖機制則是必須額外構建於該協調機制之上的共通安全設計。本書將該安全設計視為自主實驗室必須具備的關鍵層級。

狀態機是一種將設備當前狀態劃分為特定狀態格的方法。有限狀態機（Finite State Machine）預先定義了所有可能的狀態格。例如待機、準備、稱量、傳送、反應、分析、錯誤、緊急停止等狀態格。設備始終處於其中一個狀態格中。從一個狀態格轉換到下一個狀態格的路徑也均已預先設定。

其核心在於僅執行特定狀態下所允許的動作。在反應狀態下，電阻爐處於高溫狀態。此時機械手臂打開電阻爐門的指令會被阻擋。只有接收到溫度已冷卻至安全值以下的訊號時，才會開啟爐門。該訊號由感測器進行確認。在確認訊號傳來之前，指令會在狀態機階段被阻截。這種阻截被稱為聯鎖。聯鎖是在條件不符時自動鎖定的安全防護鎖。

我們以簡單的例子說明這種方式為何安全。微波爐在爐門打開時會停止運作。唯有爐門關閉時才能運轉。爐門開著時，無論如何按按鈕都不會啟動。這就是依據狀態進行的動作限制。自主實驗室的狀態機也是依循相同原理運作。在危險狀態下，危險指令根本不會被執行。

人工智慧發出的文字指令必須通過這道規則。無論人工智慧多麼有信心地發出指令，規則始終優先。只有通過規則檢驗的指令才會傳送至設備驅動程式。驅動程式是驅動實際馬達與閥門的程式。被規則攔截的指令不會執行，只會留下紀錄。這些紀錄將成為日後排查原因的資料。

在火箭材料實驗中，這條安全界線彌足珍貴。因為實驗需要處理超高溫電爐與具反應性的原料。微小的失誤也可能導致重大事故。在無人值守的夜間更是危險。狀態機是人工智慧與設備之間的最後一道安全防線。即使人工智

慧出錯，設備也不會做出危險動作。自主實驗室的自由，僅在此防線之內被允許。

這種機制也有其局限。未預先設定的狀態難以處理。意料之外的故障無法套入既定的框架。若感測器傳送錯誤訊號，判斷也會出錯。因此，僅靠狀態機是不夠的。必須同時具備即時觀察設備並察覺異常的眼睛。這隻眼睛就是下一節將探討的感測器融合。

3.4 承受紊亂實驗環境的機器人執行框架（PUDA）

本節探討機器人在實際實驗環境中所面臨的困難。實驗室與工廠不同。粉末會流動、結塊並帶有靜電。坩堝會逐漸產生些微位移。感測器中會混入雜訊。本節將審視能承受這種紊亂環境的機器人執行框架。並以PUDA研究為代表案例進行探討。

實驗室機器人面臨比工廠機器人更艱鉅的任務。在工廠裡，相同的零件會出現在預定的位置。在實驗室中，粉末的特性每次都不同。某些粉末流動良好。某些粉末會結塊並堵塞噴嘴。某些粉末帶有靜電而到處附著。坩堝每次放置時位置也會有些許偏差。

這種紊亂被稱為擾動。擾動是計畫外的干擾。存在擾動時，僅靠預定動作無法完成工作。機器人必須具備視覺與感知能力。視覺是相機，感知則是力感測器。機器人即時讀取這些資訊並修正動作。

PUDA是處理此類機器人執行環境的案例。其全稱為物理統一設備架構（Physical Unified Device Architecture）。亦稱為自主實驗室專用的人工智慧友善硬體線束。線束是將多種設備整合並統一操作的架構。這是2026年公開的初期研究。研究團隊為任振坤（Zhenkun Ren）、譚洪昭（Hongzhao Tan）、余嘉恩（Jia En Ee）與凱達爾·希帕爾岡卡爾（Kedar Hippalgaonkar）。該研究實際展示的是便於人工智慧操作的命令列執行環境及其內部的記錄體系。下文將探討的感測器融合與錯誤復原並非該論文以性能展示的成果，而是此類執行架構未來前進的方向。

PUDA的方式與先前的系統略有不同。它不以人類專用的圖形介面為優先，而是建立便於人工智慧代理操作的命令列環境。每台設備都展現為可在命令列中調用的工具。指令與回應皆以標準記錄保存。哪個樣品執行了何種指令、產生了何種結果，皆如鏈條般相互串聯。這段歷程被稱為溯源記錄（Provenance）。溯源記錄是資料來源與產生過程的履歷。

來看看這類歷程記錄為何在火箭材料研究中彌足珍貴。航太零組件的品質追溯極為嚴格。採用何種原料、在何種條件下製造，都必須完整記錄。日後若發生問題，即可藉由這些記錄尋找原因。像PUDA這樣的系統會自動記錄這段歷程。比起人工手寫記錄，疏漏更少。自主實驗室所產生的資料也因而值得信賴並可供使用。

PUDA選擇命令列方式是有原因的。為人類設計的介面看起來賞心悅目，但人工智慧代理操作起來卻很不便。畫面中的按鈕對機器而言難以點擊。命令列工具則便於人工智慧直接調用。人工智慧觀察狀況、做出判斷並下達指令。設備則精準且可復現地執行該指令。這相當於將規劃實驗的大腦與操作設備的雙手分開。如此分離後，即使更換大腦，雙手仍可繼續使用。

這種方式也有其局限。命令列環境不便於人類直觀檢視。必須為每台設備重新打造命令列工具。老舊設備難以適應這種架構。要保存標準記錄，儲存與管理也需要投入相當心力。這項研究目前仍處於初期階段。若要在眾多實驗室中廣泛應用，仍需更多時間。

3.4.1 融合多重感測器進行判斷並復原失敗

本小節探討整合多重感測器資訊以進行判斷的感測器融合。並審視自我復原失敗的修復過程。分析這兩項功能為何能維持實驗品質。這兩項功能在機器人工程學中已受到廣泛研究。前一節提及如PUDA般的執行架構，正是用來承載此方法的載體。在此我們著眼的並非單一系統的成果，而是該方法的原理。

感測器融合是指整合多重感測器的資訊以進行判斷。相機觀察位置與形狀。力感測器檢測施加在機器人手腕上的力量。溫度感測器與壓力感測器監測設備是否安全。若僅依賴單一類型的感測器，容易遺漏許多細節。結合多種感測器共同觀察，判斷將更加精準。

舉例來說，觀察機器人夾取坩堝的情境。當相機被遮擋時，便無法看清位置。此時力感測器能捕捉到碰撞。若力量微弱無法察覺，相機則可觀察到粉末溢出。不同的感測器互補彼此的盲點。這類似於人類同時運用雙手與雙眼。在昏暗的房間裡用手摸索，在明亮的地方則用眼觀察。

當機器人撞擊到物體時，力感測器的數值會大幅跳動。一旦超過設定的閾值，機器人便會立即停止動作。停止後會重新檢視狀況。透過相機確認粉末是否灑落、坩堝是否滑脫。這個重新檢查的過程正是錯誤復原的起點。

錯誤復原通常分為三個階段。首先找出何處出錯並發現異常。接著將機器人復原至失敗前的安全狀態。最後微調夾取位置或力量並再次嘗試。經過這三個階段，微小的失誤即使無需人員介入也能順利解決。

錯誤復原對實驗品質同樣至關重要。若將稱量錯誤的樣品直接繼續進行實驗，便會累積不良數據。不良數據會引導人工智慧模型走向錯誤方向。因此，自主實驗室不隱瞞失敗而是忠實記錄。記錄下來的失敗會成為下次學習的資料。若知道在何處、為何失敗，下次就能避免該失誤。

這項功能也有其局限。感測器數值中也會混入雜訊。若將雜訊誤判為異常，正常的實驗就會被迫中止。中止次數過於頻繁會拖慢實驗進度。反之，若閾值設定過於寬鬆，則會錯失真正的事務。因此必須精準調整此機制的靈敏度。這項微調目前仍高度依賴人類的經驗。自主復原並非為了徹底排除人類，而是為了減少危險的重複操作，並在必要時呼叫人員處理。

3.5 實際運行的自主實驗室：柏克萊A-Lab

本節探討實際運行的自主實驗室代表案例：美國勞倫斯伯克利國家實驗室的A-Lab。檢視該案例達成了什麼成果，又遭遇了哪些阻礙。同時探討應如何正確解讀其成果數據。

A-Lab是勞倫斯伯克利國家實驗室建立的自主無機材料合成平台。無機材料是由金屬與氧等元素構成的物質，氧化物或磷酸鹽便屬於此類。A-Lab從計算資料中挑選出值得合成的候選物質。接著由機器人處理粉末並進行熱處理。再利用X射線繞射設備確認結果。在幾乎無需人工介入的情況下持續進行此流程。

準確解讀成果數據至關重要。A-Lab於2023年在《自然》（Nature）期刊發表論文。最初發表的成功數據在後續重新檢驗後有所下修。其他材料化學家重新分析了繞射圖譜。2026年《自然》刊登了勘誤聲明。更正後的數據為五十七個目標中成功三十六個。本書以更正後的數據為準，不再使用最初較高的數據。

這段勘誤過程本身就是寶貴的教訓。勘誤的核心有兩點。其一是自動分析所產生的誤判。成功判定是由自動X射線繞射分析負責。該分析將未反應殘留的原料訊號，誤判為目標新材料的訊號。表面上看來宛如形成了新晶體。直到人員重新仔細檢驗繞射圖譜後，這項誤判才被揭露。其二是「新物質」一詞的涵義。最初讀起來像是製造出了世上未曾存在的新物質。重新審視後發現，相當一部分是指「該實驗室資料庫中未記載的物質」。這與在整個科學界首度發現的物質截然不同。勘誤聲明指出，已由人員重新確認報告中的成功案例，並將部分歸為未確定。因此，自主實驗室的判定並非最終答案。必須經過精密分析與重現性測試，才是真正的成功。若僅因自主實驗速度快而跳過驗證，反而會累積錯誤。

來看看這個案例對火箭材料研究帶來的啟示。A-Lab證明了自主合成並非實驗室外的空想。氧化物與陶瓷體系與火箭的熱防護材料息息相關。探索這類材料的速度已開闢出超越人類的途徑。然而，成功判定的嚴謹性必須隨之跟進。航太零組件即使含有微量雜質也可能釀成大問題。因此驗證與速度同等重要。

A-Lab顯露了三道明顯的障礙。接下來的小節將逐一深入探討各項障礙。這些障礙也是其他自主實驗室共同面臨的問題。精準認識這些障礙，將成為建構下一代系統的基石。

3.5.1 系統架構與運作成果

本小節探討A-Lab由哪些組件構成，並檢視這些組件如何協同運作。具體描繪自主實驗室的真實樣貌。

A-Lab的架構可分為三個部分。計算層負責篩選候選物質與合成方法。執行層由機器人與設備實際製作樣品。測量層則由X射線繞射設備確認結果。這三個層級從計算到執行、由執行到測量相互銜接，形成一個完整的閉環迴路。

計算層從大型資料庫中篩選候選物質。使用了名為「材料專案」(Materials Project)的公開資料，同時也運用了Google的計算數據。這些資料預測了在熱力學上具備穩定性的物質。所謂穩定，是指該物質不易分解並能保持存在。A-Lab便將此類預測出的物質設定為目標。

執行層配有多支機器人手臂。機器人在稱量粉末、混合、壓製、燒結的工位之間搬運樣品。精準稱量粉末後使用球磨機進行混合。球磨機是在裝有小球的容器中將粉末研磨並混合的裝置。將混合後的粉末壓製成小顆粒，再將該顆粒置於高溫電爐中進行燒結。

測量層的核心設備為X射線繞射儀。X射線繞射(X-ray Diffraction)是藉由照射X射線來觀察晶體結構的方法。不同晶體所產生的X射線繞射圖譜各異。這些圖譜宛如物質的指紋。人工智慧判讀此圖譜以判斷是否合成了目標物質。若圖譜與目標相符，即計為成功。

A-Lab將此流程連續運行了數日。在人員夜間就寢時，實驗仍持續進行。這展現了自主實驗室已從論文中的構想轉化為實際設備。在無人工介入的情況下合成了多種目標物質。這項成果成為開啟自主材料合成大門的代表案例。

然而，這並非完全無人化的運作。人類研究人員負責準備並監督系統。對於失敗的實驗，人員會一同檢視。成功判定後續也由人員再次確認。自主實驗室減輕了人類的工作負擔，但並未徹底排除人類。人類承擔更高層次的判斷與驗證，繁瑣的重複操作則由機器負責。這種分工正是目前自主實驗室的真實樣貌。

3.5.2 A-Lab顯露的三道障礙

本小節逐一檢視A-Lab所顯露的三道障礙。這些障礙是自主實驗室必須克服的共同課題。唯有精準掌握問題，才能妥善建構下一代系統。

第一道障礙是合成結果判定的困難。計為成功的物質中，有一部分並非單相。單相是指僅純粹存在單一目標晶體的狀態。某些樣品殘留了未反應的原料，某些樣品則夾帶了第二相。第二相是指非目標的其他晶相。即使繞射圖譜與目標相似，也可能混有雜質。因此必須嚴格確認是否為單相。

第二道障礙是粉末處理。不同種類的粉末具有不同的性質。有些粉末帶有靜電。二氧化鈦或奈米粉末就是如此。這類粉末會附著在噴嘴內部。如此一來計量噴嘴就會堵塞。容易吸附濕氣的原料也難以處理。自動計量機面對這些多樣的粉末時經常停機。如果是人類只要用手輕輕拍打就能解決的問題，機器卻會卡住。

第三道障礙是環境控制。A-Lab是在對大氣開放的環境中運作。空氣中含有氧氣與水氣。對氧氣和水氣敏感的材料無法在這種環境中處理。因為剛製備完成性質就會改變或分解。全固態電池用的硫化物與鹵化物材料便面臨這個問題。這類材料一旦接觸空氣就無法使用。因此以對大氣開放的A-Lab無法探索這類材料。

這些障礙清楚展現了為何自主化如此困難。人類憑藉眼與手的經驗克服這些問題。粉末結塊時就輕敲容器。樣品有異常時便能透過氣味與顏色察覺。對機器而言則必須逐一傳授這些經驗。人類不假思索就能做到的事，對機器來說卻很困難。自主實驗室的發展，正是將這些細微感覺轉移給機器的過程。

這三道障礙彼此交織。粉末處理不良，計量就會出錯。計量出錯，結果的判定也會動搖。若無法控制環境，有些材料根本無法製備。若要拓展自主實驗室的範圍，就必須共同跨越這些障礙。僅修正其中一項很難取得重大進展。

在火箭材料研究中，這些障礙顯得更為巨大。用於火箭的新型電池材料或特殊化合物往往反應性極強。也有許多對空氣敏感的材料。若要處理這類材料，環境控制必須先行。對大氣開放的實驗室很難著手處理這一材料群。因此，環境控制這第三道障礙在火箭材料研究中顯得格外棘手。

跨越這道障礙的努力是下一節的主題。要處理對空氣敏感的材料，需要密閉的環境。那個環境就是手套箱。下一節將探討在密閉環境中運作的自主實驗室。這是一個正面迎擊A-Lab第三道障礙的系統。

3.6 在密閉環境中尋找對空氣敏感的材料 (A-Lab GPSS)

本節探討在密閉環境中運作的自主實驗室。這是試圖跨越前一節所見第三道障礙的系統。我們將檢視處理對空氣敏感材料的方法。

手套箱是附有手套的密閉箱體。箱壁上裝有厚橡膠手套。人員從外部將手伸入手套內操作內部。箱內通常充滿氫氣等惰性氣體。惰性氣體是不易與其他物質發生反應的氣體。因此箱內幾乎沒有氧氣和水氣。

該系統的名稱為A-Lab GPSS。GPSS代表手套箱保護合成系統。它是為了突破對大氣開放的A-Lab之極限而打造的下一代系統。將設備置於充滿超高純度氫氣的大型手套箱內。水氣與氧氣維持在百萬分之一以下。在此環境中完成原料儲存、計量、成型、密封與熱處理等所有工序。消除樣品接觸空氣的瞬間是其核心所在。

該案例已在2026年的預印本論文中得到確認。研究團隊為裴宇等人。這是針對對空氣敏感的鋰鹵化物尖晶石導體進行的早期研究。論文指出共合成了三百五十二個樣品。可能的金屬對組合有一百七十一種。其中百分之七十二透過實驗進行了探討。這裡的百分之七十二並非成功率，而是可能組合中被實驗覆蓋的比例。絕不能將此數字誤讀為成功率。

論文指出，隨著實驗的推進，結果逐漸好轉。前七十五個樣品中良好結果的比例較低。而在最後七十五個樣品中該比例有所上升。這表明人工智慧從先前的實驗中學習並改進了後續的實驗。這展現了閉環學習確實發揮了作用。不過該研究仍處於初期階段，因此不應過度推廣其結論。

我們來探討密閉自主實驗室在火箭產業中為何具有價值。太空船需要高性能的電池。全固態電池是安全且高能量的候選者。其核心就是固態電解質。然而優良的固態電解質往往對空氣敏感。密閉自主實驗室能夠安全地探索這類材料。在研究高反應性的火箭材料時，也採用相同的環境。

3.6.1 對空氣敏感的鋰鹵化物固態電解質

本小節將深入探討此處所處理的材料。以淺顯的語言解釋何謂鋰鹵化物固態電解質。檢視為何這種材料對空氣敏感，以及它為何具有價值。

首先解釋電池相關的術語。鋰離子是在電池內部攜帶電荷的微小粒子。當電池充放電時，這些離子會來回移動。電解質是這些離子穿梭的路徑。常見的電池使用液體電解質。液體可能洩漏或起火燃燒。

固態電解質則是將這條路徑做成固體。固態電解質必須讓鋰離子順暢通過，但必須有效阻擋電子。離子通暢而電子受阻的固體才是優良的電解質。固體不會洩漏且耐火。因此全固態電池被視為更安全的電池。

鋰鹵化物電解質是含有鹵素元素的固態電解質。鹵素包括氯、溴、碘等元素。化學式上是由鋰、金屬與鹵素依特定比例結合而成。該材料具有與高電壓電極良好匹配的潛力。電壓若高，相同體積就能蘊含更多能量。因此作為次世代電池材料而備受矚目。

問題在於這種材料對水極度敏感。這種性質被稱為潮解性。潮解性是指吸收空氣中的水氣而自行溶解的性質。即使接觸微量水氣，相結構也會分解。分解時可能會釋放出氯化氫等有害氣體。因此原料儲存、合成與測量都必須在密閉環境中進行。

這項條件增加了自主實驗室的難度。密閉箱內部狹窄且操作不便。機器人必須在狹小空間內精準移動。絕不能容許瞬間暴露於空氣中。人工智慧提出候選成分與合成條件。機器人在不接觸空氣的情況下重複相同程序。分析設備迅速確認離子電導率與晶相。這一切都在密閉環境中緊密協同運作。

測量離子電導率也至關重要。離子電導率是表示鋰離子通過順暢程度的數值。此數值越高，電池輸出功率越強。自主實驗室會立即測量製成樣品的電導率。並將該數值作為人工智慧的目標。朝著高電導率的成分選擇下一次實驗。同時觀察晶相與電導率，逐步縮小優良電解質的範圍。

探索這種材料仍存在局限。密閉環境中設備的置入與取出都很困難。由於空間狹窄，可操作的設備受到限制。潮解性材料只要稍有失誤便會報廢。因此每項實驗都必須格外謹慎。即使自主化提高了速度，這種謹慎程度絲毫不能降低。密閉自主實驗室目前能處理的材料範圍仍然有限。

3.6.2 穿梭於歸納與溯因的雙循環

本小節探討自主實驗室所採用的兩種思維方式：歸納與溯因。我們將檢視交替使用這兩者為何能加速探索。這種方式是本節A-Lab GPSS研究所揭示的推理結構。

歸納是從多個實驗結果中尋找共同規則的思維。收集繞射圖譜與電導率測量結果。檢視何種成分能成功製備。將多個樣品並列以掌握趨勢。掌握晶格擴大時電導率如何變化。如此累積的規則成為下一次實驗的基礎。

溯因是在遇到意外結果時尋找其原因的思維。溯因是挑選出能夠良好解釋異常結果之原因的推理。假設在某個樣品中出現了未預料到的雜質相。探討是原料反應不完全，還是溫度過低。從中選出最合乎常理的原因來調整下一次實驗。溯因能從單一令人驚訝的結果中直接找到下一步策略。這與從多個結果中提取規則的歸納方向截然不同。

自主實驗室交替運用這兩種思維。密度泛函理論（Density Functional Theory）計算預先篩選出可行的候選者。該計算在原子尺度求解物質的能量。實驗對此處選出的候選者進行測試。隨著實驗結果累積，歸納法從中找出規則。一旦出現意外結果，溯因法便找出原因並轉變方向。如此一來計算與實驗相互完善。思維不再僅朝單一方向流動，而是如環形般循環運作。

我們以簡單的例子來看這種方式。設想在陌生城市中尋找路徑的場景。多次行走並找出捷徑規律的過程就是歸納。當道路突然受阻時，推測原因並繞道而行的過程就是溯因。若只信賴規律，遇到突發狀況就會停滯不前。若只依賴推測原因，就會失去全局視野。兩者結合使用便能更快抵達目的地。自主實驗室同樣結合這兩種思維，從而更快獲取優良材料。

我們來探討這種雙循環在火箭材料研究中為何極具價值。新材料無法僅憑計算全盤掌握。計算假設的是理想條件。實際合成中存在雜質與雜訊。單憑實驗也無法完全了解。實驗耗費龐大的時間與成本。將兩種方法結合，便能以計算縮小範圍並以實驗加以驗證。在昂貴的火箭材料探索中，這種組合展現出強大力量。

這種方式亦存在局限。計算與實驗的語言彼此不同。將計算結果與實驗結果進行比對調整十分棘手。若計算出錯，就會因錯誤的候選材料而浪費實驗。若實驗雜訊過大，則會錯誤修正計算。因此必須妥善架設連接兩個循環的橋樑。而搭建這座橋樑的工作，目前仍高度依賴人類的判斷。

3.6.3 多個人工智慧分工合作

本小節探討多個人工智慧分工協作的方式。這被稱為多代理人。我們將檢視為何多個代理人優於單一代理人，以及存在哪些風險。

多代理人是多個人工智慧分工的架構。代理人是能自主判斷並行動的人工智慧單元。這就如同與其由一人包攬所有工作，不如由團隊分工合作。在自主實驗室中，這種角色分工十分自然。因為實驗同時需要化學知識、規劃、安全與分析。

分工後，每個代理人便能專注於單一任務。化學代理人檢查反應式是否正確。檢驗質量是否守恆、氧化數是否符合。同時檢視原料是否會與坩堝發生不良反應。規劃代理人安排設備使用順序。提前劃分長時熱處理等瓶頸作業。同時決定哪些工作可以平行進行。

安全代理人是守護實驗室的眼睛。監控手套箱內的氧氣與水氣濃度。觀察壓力變化與電爐冷卻水流。以極短週期重複確認這些數值。一旦發現異常數值便發出警報並記錄。然而實際的緊急停機並非由該代理人直接觸發。因為生成式代理人的回應可能延遲或判斷出錯。當氧氣或壓力達到危險數值時，獨立的感測器與經由驗證的安全控制器會立即停止設備。這種硬體互鎖（Hardware Interlock）不會等待語言模型的判斷。代理人負責監控與記錄，停機則由經由驗證的安全裝置負責。分析代理人負責解讀測量結果。將繞射圖譜與資料庫進行比對。將雜質含量量化為數值。並將該數值輸入學習機的目標值中。

2026年，此類多代理人實驗室的研究大幅增加。一項研究在協調器之下整合了多個人工智慧代理人。各代理人分工使用不同的工具。分為檢索知識的群組、將設計轉化為執行步驟的群組、操作機器人的群組，以及解讀資料的群組。如此分群協作實現了閉環材料探索。另一項名為ChatMat的研究則透過多個代理人自動串接物性預測流程。亦有論文探討了多代理人在自主實驗室管理中所具備的意義。

分工的優勢十分顯著。可以清晰看見每個代理人負責的工作。一旦發生問題，很容易找出出在哪個階段。即使修正單一代理人，也不必變更整個系統。添加新工具也十分容易。這與人類團隊協作所具備的優點如出一轍。

多智慧體也改變了科學研究本身的方式。過去是由人類研究人員逐一記錄每一項實驗。現在則是由智慧體將判斷過程留存為資料。為什麼選擇這個條件、為什麼將這個結果視為成功，都會被記錄下來。這些紀錄可用於日後回顧與檢視研究。然而，人工智慧的判斷並不總是透明的。人類很難完全理解它為何做出那樣的決定。這種不透明性仍是未來有待解決的課題。

然而，風險也隨之增加。大型語言模型可能會捏造不存在的事實。單一智慧體的錯誤可能會蔓延至其他智慧體。若多個智慧體彼此信任並直接傳遞資訊，就無法抓出錯誤。因此，最終權限必須保留給安全規則與人類監督者。即使人工智慧信心滿滿地發言，設備仍可能存在危險。隨著智慧體數量增加，人類的交叉核對與硬體安全防護機制變得更加重要。

整理

本章探討了自主實驗室如何運作。其核心在於稱為閉環的循環結構。人工智慧挑選下一個實驗。機器人進行製作。設備進行測量。結果再次回饋給人工智慧。這個循環日夜不停地運轉，迅速縮小廣闊的材料空間。

人工智慧挑選下一個實驗的方法是貝氏主動學習。這種方法會同時考量預期性能與不確定性。在有潛力的區域與未知的區域之間取得平衡並進行選擇。因此能以較少的實驗次數找到優質材料。在成本高昂的火箭材料探索中，這一點發揮了巨大的優勢。

論文中的合成方法由大型語言模型擷取。像 MSP-LLM

這樣的研究正是負責這項工作。擷取出的方法會安全地轉換為如 PDDL 般的規劃語言。規劃語言成為預先防止機器人發生事故的防護柵欄。人工智慧與設備透過如模型上下文協定（Model Context Protocol）之類的標準相互連結。NIMO 控制器就是其中的實例。狀態機則是最後用來阻擋危險指令的關卡。

機器人必須適應並承受混亂的實驗環境。結合讀取多個感測器的感測器融合技術有助於實現這一點。能自行復原失敗狀況的錯誤復原機制也會協同運作。像 PUDA

這樣的系統會將指令與結果留存為紀錄。這些紀錄對於航太零組件的品質追溯具有極高價值。

在實際案例中，我們探討了 A-Lab 與 A-Lab GPSS。A-Lab 在 17 天內從 57 個目標中合成了 36 個。該數值是經過 2026 年勘誤修正後的數據。這個案例顯示出，自主實驗室的判定依然需要人類的重新檢視。A-Lab GPSS 則在密閉環境中處理對空氣敏感的材料。它以 352 個試樣涵蓋了所有可能金屬配對組合的 72%。這個數字不是成功率，而是組合覆蓋率。

進入 2026 年，該領域迅速擴展。由多個分工不同的人工智慧組成的多智慧體實驗室日益增加。透過標準通訊協定連結設備的嘗試也接連展開。針對實驗流程調整最佳化貝氏最佳化的研究十分活躍。廣泛探討自主實驗室的綜述論文與指南手冊也相繼發表。大趨勢非常明確：將人力從細微重複的工作中解脫出來。然而，判斷與驗證的職責依然留在人類身上。

本章介紹的系統大多屬於早期研究。預印本論文佔多數，現場標準仍屬少數。因此，相較於一味強調性能數據，我們更著重於同時探討其原理與局限。自主實驗室並非用來抹煞人類角色的工具。而是將具危險性的重複作業交給機器，人類則專注於判斷與驗證。自主實驗室的真正意涵不在於追求快速的實驗，而在於實現值得信賴的實驗。唯有立足於此原則之上，火箭材料研究的自動化才能安全穩健地發展。

相關佐證資料

- King, R. D., Rowland, J., Oliver, S. G., Young, M., Aubrey, W., Byrne, E., Liakata, M., Markham, M., Pir, P., Soldatova, L. N., Sparkes, A., Whelan, K. E., & Clare, A. (2009). The automation of science. *Science*, 324(5923), 85-89. <https://doi.org/10.1126/science.1165620>
- MacLeod, B. P., Parlane, F. G. L., Morrissey, T. D., Häse, F., Roch, L. M., Dettelbach, K. E., Moreira, R., Yunker, L. P. E., Rooney, M. B., Deeth, J. R., Lai, V., Ng, G. J., Situ, H., Zhang, R. H., Elliott, M. S., Haley, T. H., Dvorak, D. J., Aspuru-Guzik, A., Hein, J. E., & Berlinguette, C. P. (2020). Self-driving laboratory for accelerated discovery of thin-film materials. *Science Advances*, 6(20), eaaz8867. <https://doi.org/10.1126/sciadv.aaz8867>
- Szymanski, N. J., Rendy, B., Fei, Y., Kumar, R. E., He, T., Milsted, D., McDermott, M. J., Gallant, M., Cubuk, E. D., Merchant, A., Kim, H., Jain, A., Bartel, C. J., Persson, K. A., Zeng, Y., & Ceder, G. (2023). An autonomous laboratory for the accelerated synthesis of inorganic materials. *Nature*, 624(7990), 86-91. <https://doi.org/10.1038/s41586-023-06734-w>

- Szymanski, N. J., Rendy, B., Fei, Y., Kumar, R. E., He, T., Milsted, D., McDermott, M. J., Gallant, M., Cubuk, E. D., Merchant, A., Kim, H., Jain, A., Bartel, C. J., Persson, K. A., Zeng, Y., & Ceder, G. (2026). Author correction: An autonomous laboratory for the accelerated synthesis of inorganic materials. *Nature*, 650, E1. <https://doi.org/10.1038/s41586-025-09992-y>
- Merchant, A., Batzner, S., Schoenholz, S. S., Aykol, M., Cheon, G., & Cubuk, E. D. (2023). Scaling deep learning for materials discovery. *Nature*, 624(7990), 80-85. <https://doi.org/10.1038/s41586-023-06735-9>
- McDermott, M. J., Dwaraknath, S. S., & Persson, K. A. (2021). A graph-based network for predicting chemical reaction pathways in solid-state materials synthesis. *Nature Communications*, 12, 3097. <https://doi.org/10.1038/s41467-021-23339-x>
- Tom, G., Schmid, S. P., Baird, S. G., Cao, Y., Darvish, K., Hao, H., Lo, S., Pablo-García, S., Rajaonson, E. M., Skreta, M., Yoshikawa, N., Corapi, S., Akkoc, G. D., Strieth-Kalthoff, F., Seifrid, M., & Aspuru-Guzik, A. (2024). Self-driving laboratories for chemistry and materials science. *Chemical Reviews*, 124(16), 9633-9732. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.4c00055>
- Boiko, D. A., MacKnight, R., Kline, B., & Gomes, G. (2023). Autonomous chemical research with large language models. *Nature*, 624, 570-578. <https://doi.org/10.1038/s41586-023-06792-0>
- Noh, H., Na, G. S., Lee, N., & Park, C. (2026). MSP-LLM: A unified large language model framework for complete material synthesis planning. *arXiv preprint*, arXiv:2602.07543. <https://arxiv.org/abs/2602.07543>
- Yoshikawa, N., & Tamura, R. (2026). NIMO Controller: a self-driving laboratory orchestrator based on the Model Context Protocol. *arXiv preprint*, arXiv:2605.15227. <https://arxiv.org/abs/2605.15227>
- Tamura, R., & Yoshikawa, N. (2026). NIMO: A software platform for closed-loop materials exploration with diverse AI algorithms. *arXiv preprint*, arXiv:2606.15522. <https://arxiv.org/abs/2606.15522>
- Ren, Z., Tan, H., Yee, J., & Hippalgaonkar, K. (2026). PUDA: An AI-native hardware harness for self-driving laboratories. *arXiv preprint*, arXiv:2607.26464. <https://arxiv.org/abs/2607.26464>
- Fei, Y., Rendy, B., Yang, X., Woo, J., Huang, X., Li, C., Wang, S., Milsted, D., Zeng, Y., & Ceder, G. (2026). Agentic LLM reasoning in a self-driving laboratory for air-sensitive lithium halide spinel conductors. *arXiv preprint*, arXiv:2604.11957. <https://arxiv.org/abs/2604.11957>
- Kusne, A. G., & McDannald, A. (2026). Managing autonomous materials labs with multi-agent AI and its implications for the science of science. *Communications Materials*, 7, 173. <https://doi.org/10.1038/s43246-026-01219-5>
- Lv, S., Peng, L., Jiao, S., Yao, Y., Wu, W., & Hu, W. (2026). ChatMat: a multi-agent chemist for autonomous material prediction and exploration. *Digital Discovery*, 5(7), 2886-2898. <https://doi.org/10.1039/d5dd00582e>
- Lee, H., Yoo, H. J., Jang, H. S., Park, B., Park, Y. J., & Han, S. S. (2026). Toward self-driving laboratory 2.0 for chemistry and materials discovery. *Materials Horizons*, 13(10), 4712-4739. <https://doi.org/10.1039/d5mh01984b>
- Zhu, J., Zhang, L., Zhu, Y., Lin, X., Wu, Y., Di, S., Liu, B., Luo, Y., & Zhang, T. (2026). A survey of agentic materials science and engineering: where are we and where are we going? *Journal of Materials Informatics*, 6, 7. <https://doi.org/10.20517/jmi.2026.07>
- Tobias, A. V., & Wahab, A. (2025). Autonomous 'self-driving' laboratories: a review of technology and policy implications. *Royal Society Open Science*, 12(7), 250646. <https://doi.org/10.1098/rsos.250646>
- Wakabayashi, Y. K., & Otsuka, T. (2026). Bayesian optimization for self-driving materials laboratories: From algorithms to physics-informed workflows. *arXiv preprint*, arXiv:2608.26016. <https://arxiv.org/abs/2608.26016>
- Ntagiantas, A., Tsilimidos, P., Giannakopoulos, G., Rekatsinas, C., & Krokidas, P. (2026). Active learning guided design space refinement for scalable multi-objective Bayesian optimization in materials discovery. *arXiv preprint*, arXiv:2608.04651. <https://arxiv.org/abs/2608.04651>
- He, C., Singull, M., & Jacobsson, T. J. (2026). Bayesian optimisation for the experimental sciences: A practical guide to data-efficient optimisation of laboratory workflows. *Advanced Intelligent Systems*, 8(5), e202501149. <https://doi.org/10.1002/aisy.202501149>
- Liang, H., Sun, Y., Paxson, R., Lee, C.-Y., Hall, A. T., Warecki, Z., Cumings, J., Koinuma, H., Kusne, A. G., Lippmaa, M., & Takeuchi, I. (2026). Autonomous epitaxial atomic-layer synthesis via real-time computer vision of electron diffraction. *arXiv preprint*, arXiv:2602.20432. <https://arxiv.org/abs/2602.20432>
- Anthropic. (2025). Model Context Protocol specification (version 2025-06-18). <https://modelcontextprotocol.io/specification/2025-06-18>
- Anthropic. (2024). Introducing the Model Context Protocol. <https://www.anthropic.com/news/model-context-protocol>

第4章

高熵合金（HEA）與超合金之物理一致性預測及成分最佳化

前言

在廚房裡，鍋子用久了底部會燻黑。常接觸火的部位會先受損。金屬越熱就越軟弱。受熱變弱的這種性質，所有金屬都一樣具有。

火箭發動機比任何機器都更嚴重地面臨這個問題。在燃燒室內，燃料燃燒並產生數千度的氣體。該氣體透過稱為噴嘴的狹窄通道快速噴出。噴嘴壁必須在近距離承受這種高溫氣體。這是鍋底難以比擬的嚴苛環境。

重返大氣層的飛行器也面臨同樣的困擾。以高速推擠空氣進入時，空氣會被壓縮而變熱。飛行器前端會燒得通紅。若無法承受此熱量，結構便會熔化或折斷。

我們可以用手掌感受這種空氣加熱。騎自行車速度快時，風會猛烈地吹在臉上。將手伸出窗外，風會推擠手掌。飛行器則是以快上數千倍的速度迎風。被推擠的空氣遭到壓縮而升溫，其熱量傳導至前端。重返大氣層表面的滯止點溫度超過攝氏 1,600 度。

極音速飛行器也會遇到同樣的熱量。極音速是比聲音快五倍以上的速度。以此速度飛行時，前翼末端會比其他部位更熱。這是因為熱量集中在狹窄且尖銳的部位。因此，該部位會採用耐高溫能力優異的材料。

因此，人們尋找在極高溫下也不失強度的金屬。長期占據該地位的金屬是鎳基超合金（Nickel-based superalloy）。超合金是為了在高溫下也能良好承受而特別設計的合金。但這種金屬也有其極限溫度。

本章探討試圖超越該極限的新金屬。其主角為高熵合金（High-Entropy Alloy, HEA）。這是將多種金屬以相近比例混合而成的合金。其中，若只挑選高熔點金屬進行混合，便會成為火箭材料的新候選者。此類合金稱為難熔高熵合金（Refractory High-Entropy Alloy, RHEA）。

本章說明尋找此類金屬的新方法。人工智慧（AI）代替人工逐一實驗，快速篩選出候選者。我們將一步步剖析原子排列、熱力學定律與大規模原子計算如何與人工智慧相結合。雖然是金屬的故事，但會換成如季節與學校故事般貼近我們身邊的例子來解釋。

我們預先構想為何需要人工智慧。要製造出一種優質合金，必須決定元素種類與比例。即使只有五種元素，比例的組合數量也難以計數。若逐一製造並測試，耗盡一生也無法看完。人工智慧能預先縮小這個龐大的候選範圍。

人工智慧的角色更接近嚮導。在山中識路的嚮導會指引捷徑。然而，登上山頂終究是人的責任。人工智慧縮小候選範圍後，由人透過實驗進行確認。本章將以實例展示這種協作是如何進行的。

4.1 極端航太環境需求條件與高溫合金之結構極限

本節探討的內容

本節首先描繪火箭與重返大氣層飛行器所面臨的熱環境有多麼嚴苛。接著探討長期使用的鎳基超合金在哪裡遇到了極限。最後說明難熔高熵合金為何成為新的替代方案。

簡而言之，本節是定義問題的環節。唯有精確了解問題，才能看出後續登場之人工智慧工具的用處。因此，比起數字，更著重於先理解狀況。

火箭燃燒室是一個壓力極高的筒體。燃料與氧化劑在其中一同燃燒並產生巨大壓力。此壓力高達數十百萬帕（MPa）。汽車輪胎壓力約為 0.2 百萬帕。火箭燃燒室要承受其數百倍的壓力。

燃燒室中產生的氣體會經由噴嘴排出。根據推進劑材料的不同，此氣體的溫度可升至數千度。不過，壁面金屬的溫度並不會升至與氣體溫度相同。冷卻與邊界層阻擋了熱量，使金屬維持在較低溫度。即便如此，壁面承受的熱量依然龐大。若無法承受此熱量，壁面便會熔化破洞，導致發動機報廢。

熱量並非只來一次。發動機會反覆啟動與關閉。啟動時急劇升溫，關閉時急劇冷卻。這種溫度劇烈升降的現象稱為熱衝擊（Thermal shock）。這與突然向玻璃杯倒入熱水時會產生裂痕是同樣的原理。

此外還會疊加受力。在高溫狀態下長期受力，金屬會緩慢伸長。這種現象稱為潛變（Creep）。這與長時間拿著麥芽糖時它會自行下垂類似。在高溫下，這種潛變與反覆載重共同作用，會逐漸侵蝕材料。

鎳基超合金是在這種環境下長期堅持下來的金屬。該金屬的強度來自其微觀組織。在作為基體的伽瑪（ γ ）相中，細密地鑲嵌著名為伽瑪質（ γ' ）的微小顆粒。這些顆粒起到了阻止金屬變形的障礙物作用。這就像麵糰中鑲嵌的小堅果能防止麵糰輕易拉伸一樣。

每種超合金中這種障礙物的種類都略有不同。含有大量鈮（Nb）的英高鎳 718（Inconel 718）就是這樣的例子。在該合金中，比起伽瑪質，名為伽瑪雙質（ γ'' ， Ni_3Nb ）的相更能提供強度。雖然障礙物的名稱不同，但原理是一樣的。微小顆粒阻止變形，使金屬變得堅固。

火箭在不同部位使用不同的金屬。在用燃料冷卻壁面的燃燒室中，常使用銅合金。這是因為其快速導熱的性質非常優異。鎳基超合金則用於渦輪等長期承受高溫的組件。在更熱的噴嘴喉部或重返大氣層表面，難熔金屬或陶瓷則成為候選材料。本章探討其中專門鎖定最高溫部位的新金屬。

問題出在溫度進一步升高時。一旦大致超過 1,150 度，這些微小顆粒就會變大或融合變形。這稱為粗化。一旦障礙物消失，金屬就容易拉伸，強度會驟降。鎳基超合金的熔點約為 1,350 度，因此其有效工作極限遠低於熔點。

此外，還可能產生有害相。長期處於高溫下，原子會依特定規則聚集，形成堅硬且易碎的塊狀物。這種相稱為有害相。一旦產生有害相，金屬就容易斷裂。越優秀的超合金，越會被設計成能抑制此類相的生成。

因為這些問題，鎳基超合金需要冷卻。在實際發動機中，會在零件內部開闢細小的通道。透過該通道通入低溫燃料來冷卻壁面。得益於這種冷卻，零件得以在低於熔點的溫度下運作。然而，開設冷卻通道會使零件結構變複雜，重量也會增加。

難熔高熵合金的目標就是減少這種冷卻。材料本身若能承受更高溫的環境，所需的冷卻就越少。冷卻減少後，結構就會變得更輕、更簡單。研究人員將在超過 1,400 度的環境下無需冷卻即可承受的材料，作為開發新合金的目標。

因此，人們轉而尋找完全不同的途徑。其構想是以熔點本身就極高的金屬作為骨架。鈮（Nb）、鉬（Mo）、鉭（Ta）、鎢（W）等金屬便屬於此類。它們的熔點遠超過 2,000 度。這類金屬稱為難熔金屬（Refractory metal）。

難熔高熵合金是將多種這類難熔金屬以相近比例混合而成的合金。近期研究指出，該合金在 1,600 度的壓縮測試中，仍展現出高於鎳基超合金的強度。因此，它被視為火箭推進、極音速飛行器前翼以及重返大氣層防熱盾的新候選材料。

然而，並非只有優點。該合金在常溫下有易脆的傾向。這稱為低延展性。此外，在高溫下與氧氣接觸時，表面會發生鬆散粉碎的氧化現象。這兩點是作為實際零件使用前必須解決的課題。人工智慧正是用於快速解決這些課題。

進一步探討氧化問題。富含鉬或鉬的合金在高溫下會與氧氣劇烈反應。表面氧化膜無法堅固附著，而是像粉末般脫落。這種鬆散崩解的氧化稱為鼠疫氧化（Pest oxidation）。其名稱源自於像蛀蝕糧食的害蟲一樣啃蝕表面的涵義。

防止此問題的方法是保護性氧化膜。若適量添加鋁或鉻，表面就會生成緻密的氧化膜。此薄膜能阻止氧氣向內部滲透。這與鍋底形成的焦膜反而保護了內部金屬類似。添加多少、如何添加才能形成良好的薄膜，是設計的核心所在。

與塗層的適配性也很重要。合金表面通常會附上一層抗氧化塗層。問題在於金屬與塗層隨著溫度膨脹的程度不同。這種膨脹的程度稱為熱膨脹係數。若兩種材料的熱膨脹係數差異過大，當溫度升高時，交界面就會開裂。因此，合金不僅要具備強度，還必須與塗層相適配。

如此一來，噴嘴襯套合金必須同時滿足多項條件。高熔點、低密度、高溫強度、抗氧化性與塗層適配性皆不可或缺。各條件之間也往往相互衝突。要單憑人工實驗來解決這種錯綜複雜的問題非常吃力。人工智慧便作為快速梳理這種糾纏問題的工具應運而生。

4.2 四大核心效應之物理建模與相平衡熱力學

本節探討的內容

本節探討高熵合金為何特殊的初期解釋架構。在此領域剛開啟時，研究人員提出了四種效應。這四種效應稱為四大核心效應：構型熵、晶格畸變、遲滯擴散與雞尾酒效應。

這四種效應並非確定的物理定律，而更接近初期假說。正如後文所述，遲滯擴散以及由高熵帶來的單相穩定化並未被證實為普遍規律。儘管如此，唯有了解這個架構，才能理解人工智慧試圖計算什麼。我們將換成生活中的例子，逐一進行剖析。

首先釐清何謂高熵合金。通常合金是在一種主要金屬中添加少量的其他金屬。例如鋼鐵是以鐵為主角，加入少許碳。高熵合金則與這種方式不同。它是將五種以上的金屬以相近比例混合。相當於有多位主角。

此概念於 2004 年由兩個研究團隊各自發表：台灣的葉（Yeh）研究團隊與英國的坎特（Cantor）研究團隊。他們證明了即使不依賴單一主要元素，也能製造出穩定的金屬。這項發現開啟了全新合金設計的大門。

第一項原理是構型熵（Configurational entropy）。熵是與混合可能情況數相關的數值。在置物櫃中放置物品的方法越多，無序度就越大。將多種金屬以相近比例混合時，排列原子的方法會變得極多。這種巨大的無序度有助於維持金屬混合為單一整體的狀態。

這種混合狀態稱為固溶體（Solid solution）。固溶體是多種元素均勻溶入單一品格內的狀態。這類似於糖溶於水形成均勻液體。當熵很大時，能防止各元素單獨聚集形成堅硬的化合物。因此，高熵合金容易形成固溶體而非化合物。

第二項原理是晶格畸變（Lattice distortion）。金屬原子的尺寸各不相同。當大原子與小原子混合在同一個晶格中時，晶格就會凹凸不平地扭曲。這就像用大小不一的石頭代替平整的磚塊所砌成的石牆。這種扭曲的晶格成為阻礙變形的屏障。

變形是由稱為位錯（Dislocation）的微小缺陷在晶格內滑移所產生的。當晶格凹凸不平時，位錯就很難滑移。這就像在碎石路上難以拉動推車一樣。因此，晶格畸變大的合金不易拉伸且十分堅固。

第三項原理是遲滯擴散（Sluggish diffusion）。擴散是原子移動位置的運動。在高熵合金中，每個原子的周圍環境都不相同。有些位置容易移動，有些位置則很困難。這種參差不齊的特性被認為平均而言會減緩原子的移動。

原子若移動緩慢，即使在高溫下組織也不易改變。因此晶粒生長緩慢，並可能具備優異的抗潛變能力。然而，此效應並非在所有高熵合金中都表現得同樣強烈。實際的擴散速率取決於元素組合、溫度與晶體結構。因此，近期的研究將此效應視為需視情況確認的性質，而非普遍定律。

第四個原理是雞尾酒效應（Cocktail effect）。雞尾酒是將多種材料混合以產生新風味的飲品。各材料單獨風味的相加，與混合後的風味並不相同。金屬亦是如此。當多種元素共存時，會展現出單純將各元素性質相加難以解釋的特性。

這種非線性性質表現在強度、耐腐蝕性與韌性上。問題在於人類難以事先得知這類組合效應。這是因為元素組合的數量過於龐大。人工智慧正是用來從資料中發掘這類隱藏組合效應的工具。

這四個原理直接關聯到火箭材料。組態熵有助於在高溫下防止組織分解。晶格畸變能提高強度。緩慢擴散對抗潛變有利。雞尾酒效應則能帶來如抗氧化等意想不到的優勢。唯有這四個原理共同作用，才能承受極端環境。

然而，這些原理並非萬能鑰匙。在某些組合中表現強烈，在某些組合中則表現微弱。因此，即便了解原理，實際成分仍需逐一確認。原理指引方向，確認則交由計算與實驗負責。人工智慧大幅加速了這項確認過程。

這四個原理最終匯聚為一個問題：究竟何種成分能穩定維持為單一相？回答此問題的學科是相平衡熱力學。接下來的兩個小節將探討有助於進行此判斷的兩項指標。

4.2.1 衡量維持單相可能性的Omega參數

熱力學是研究能量與穩定性的學科。某個狀態是否穩定由自由能（Free energy）判定。自由能較低的狀態更穩定。如同水往低處流，物質總是傾向於走向自由能較低的狀態。

自由能由兩項數值共同決定。其一是焓（Enthalpy）。焓是與原子之間彼此喜好或排斥相關的數值。彼此契合的原子傾向於混合，相互排斥的原子則傾向於分離。其二是前面提到的熵。熵代表混合的混亂程度。

這兩者的角力隨溫度而異。溫度愈高，熵的作用力愈強。這如同在悶熱的房間裡人們會更自由地分散開來一樣。因此在高溫下，無序的固溶體更容易趨於穩定。這就是高熵合金在高溫下能夠良好維持單相的原因。

組態熵在以等莫耳比混合元素時最大。等莫耳比是指以相同的量加入各元素。若以相同比例混合五種元素，組態熵便會達到最大值。元素種類愈多，該數值就愈大。高熵這一名稱正是源自於組態熵極大的這項特性。

Omega參數是簡單評估形成單相固溶體可能性的數值。該數值綜合考量三項因素：平均熔點、組態熵以及混合焓的大小。當熵的有利影響大於焓的不利影響時，Omega值便會增大。一般認為Omega值愈大，愈容易維持為單相。

在此同時亦需確認原子尺寸差異。若原子尺寸差異過大，晶格將無法承受而破裂。因此，尺寸差異必須小於特定數值，才容易形成單相固溶體。研究人員採用當Omega值大且尺寸差異小時便會形成單相固溶體的經驗法則。

這項法則雖然便利，但並非確定性的工具。實際合金會受到局部有序度、冷卻速率、雜質與熱處理的影響。即使成分相同，組織結構也會因製程方法而異。因此，Omega法則僅用於初步篩選。

精確的判斷則交由計算量更大的方法負責。具代表性的方法為CALPHAD。CALPHAD是累積多個相的自由能資料以計算相平衡的方法。此外還結合了密度泛函理論（Density Functional Theory, DFT）計算與實驗。密度泛函理論是根據電子的行為來計算能量的量子計算方法。

將焓與熵的角力換作生活中的例子來看。假設教室裡男女學生混合就座。好友結群聚在一起的力量與焓相似。自由隨機混合座位的力量與熵相似。在安靜的時間裡，小團體會聚在一起；在熱絡的時間裡，大家則自由混合。這就像溫度愈高，混合的力量就愈強一樣。

人工智慧加速了這個過程。當資料量極其龐大時，如Omega等簡易指標可作為人工智慧的輸入特徵。人工智慧根據這些特徵快速篩選出哪些成分能維持為單相。接著僅針對縮小範圍後的候選成分，利用CALPHAD與實驗進行驗證。這種協同合作是探索廣闊成分空間的關鍵。

近期的研究大幅提升了這項預測準確度。若同時納入多項物理特徵，相預測準確度可從約70%提升至90%以上。達到此水準，便能快速篩選超過100萬種成分。這相當於人工智慧大幅減輕了人力負擔。進而將時間與資源集中於篩選出的少數候選材料上。

4.2.2 透過價電子濃度評估晶體結構

本小節探討用於評估合金將具備何種晶體結構的指標。該指標為價電子濃度（Valence Electron Concentration, VEC），意指外層電子的平均數量。首先探討何謂晶體結構。金屬原子並非隨意排列，而是堆疊成規則的晶格，如同依規則堆砌磚塊。堆疊方式不同，性質亦隨之改變。

在火箭材料中，有兩種重要的結構。其一是體心立方（Body-Centered Cubic, BCC），這是正立方體的八個頂點與正中心各有一個原子的排列結構。其二是面心立方（Face-Centered Cubic, FCC），這是八個頂點與六個面的中心各有一個原子的排列結構。

這兩種結構具有不同的性質。體心立方通常對高溫強度有利，但在常溫下容易表現出易碎的脆性。面心立方則通常具有良好的延展性。若能預先得知會形成何種結構，設計工作便會更加容易。

價電子濃度即是評估此結構的指標。價電子是原子的外層電子，負責參與鍵結。將各元素所提供的外層電子數按成分比例取平均所得的數值，即為價電子濃度。該數值指明了晶體結構的方向。

經驗法則如下：當該數值大致小於6.87時，體心立方較為穩定；大於8時，面心立方較為穩定；介於兩者之間時，兩種結構則會混合存在。難熔高熵合金因該數值較小，多呈體心立方結構。著名的康托合金因該數值較大而呈面心立方結構。

這項法則的實用性在近期的AI研究中亦可見一斑。2026年初公開了一項預印本研究。預印本研究是指尚未經過同儕審查的早期研究。該研究預測了難熔高熵合金的熔點。研究並未直接輸入晶體結構，僅使用了自元素成分中擷取的特徵。如價電子濃度等具備物理意義的特徵對預測產生了重大貢獻。這相當於人類累積的物理知識與人工智慧所挑選的特徵彼此契合。

此案例展現了兩點：其一是簡易指標至今依然實用；其二是人工智慧能夠在不違背物理原理的情況下進行學習。這兩點是貫穿本章整體的核心思想。

在此進一步探討為何結構決定了性質。形變是因差排在晶格內滑移而產生。面心立方具有原子排列密集的晶面，使差排能順暢滑移。因此延展性良好且不易斷裂。體心立方則缺乏這種密排晶面。這並非因為滑移路徑數量較少，而是因為差排要移動必須克服較大的能量能障。此能障對溫度極為敏感。因此，體心立方在常溫下易碎，而隨著溫度升高，差排更容易移動並維持強度。

這種差異直接延續至火箭材料的選擇上。噴嘴襯套首重高溫強度。因此體心立方系列的難熔高熵合金成為候選材料。但同時也伴隨著常溫脆性這一弱點。為了減少這項缺點，必須精細調整成分。價電子濃度便成為該調整過程的第一個指南針。

然而，價電子濃度法則亦有其局限。6.87與8的界限是從特定過渡金屬合金群體中獲得的經驗值，並不適用於其他合金群體。該數值為平均值，無法反映局部環境。即使平均值相同，實際結構仍可能依元素組合而異。此外，這項法則無法告知硬而易碎的金屬間化合物何時形成。拉維斯相（Laves phase）或西格瑪相（Sigma phase）即為此類例子。一旦混入這類相，合金就會變脆弱。因此，此指標亦僅用於初步篩選，並透過精密計算進行確認。人工智慧使這項篩選變得更加快速且廣泛。

4.3 從論文文本中擷取材料特徵

人工智慧無法用眼睛觀察金屬，只能透過轉換為數字的特徵來認識材料。這些特徵稱為描述符（Descriptor）。本節探討從論文文本中擷取此類特徵的方法。首先探討成分空間有多麼廣大。若混合五種以上元素並調整各自的比例，組合數量將呈現爆炸性增長。若咖啡中加入的材料只有兩種，組合僅有少數幾種；若材料有十種，組合數量便難以計數。多元合金正是處於這種狀態。

要透過實驗遍歷如此廣大的空間是不可能的。製造並測試一種合金需要耗費時間與金錢。CALPHAD計算針對每種成分也需要花費時間。因此，需要一個能快速縮小龐大空間範圍的引導者。人工智慧正是那個引導者。

要使用人工智慧，必須將材料轉換為數字。描述符就是這些數字。原子半徑、電負度、熔點、外層電子數是具代表性的描述符。電負度是原子吸引電子的力量。將這些數值配合成分進行計算後輸入人工智慧。

問題在於單靠這些數字仍有所不足。即便成分相同，性質也會因製造方式不同而產生巨大差異。熱處理溫度、持溫時間、冷卻方式都會改變組織結構。此類製程資訊難以用單一數值表達。然而，論文中正以文字記載著這些資訊。

自然語言衍生描述符（Natural language-derived descriptor）填補了這個缺口。這是人工智慧讀取論文語句並轉換為特徵值的產物。這相當於將人類閱讀的文字轉化為機器讀取的數值。近期的研究透過此方法，甚至將製程說明也納入了特徵之中。

2026年公開的一項預印本研究便是一個極佳的範例。這是美國賓州州立大學研究團隊的成果。他們將描述熱處理製程的語句輸入大型語言模型中，並能從該語句的數值表示中幾乎完整還原原始製程數值。接著將此表示作為特徵，使合金的硬度預測提升了約20%。該研究目前仍為尚未通過同儕審查的早期研究。

文獻探勘是規模化蒐集此類特徵的工作。其能從無數金屬論文中自動擷取相變溫度、固溶度極限、強度與延展性數值。過去由人工手動製作表格，如今則由大型語言模型閱讀語句並填寫表格。如此匯集的資料成為人工智慧訓練的基礎。

亦有研究將語言模型直接應用於性質預測。這是2025年發表於學術期刊的成果。該研究採用了名為Transformer的語言模型架構。Transformer是能解析語句中詞彙關聯的人工智慧。該研究將合金的成分與條件視同文字處理以預測性質。這是處理語言的技術跨足材料研究領域的範例。

近期亦出現利用大型語言模型建立高熵合金資料庫的研究。這是2026年發表於學術期刊的成果。該資料庫自動整理了論文中的成分與性質。大幅加速了過去依靠人工耗時費力的工作。如此累積的資料成為下一節將探討的預測模型的基石。

這種方法也有其局限性。每篇論文的測量條件與標註方式都不盡相同。若機器誤讀了句子，錯誤的數值就會混入資料中。因此，收集到的資料仍需由人工再次審查。由人工智慧收集、人工確認的協同作業，是目前的標準模式。

資料的品質決定了預測的品質。以錯誤的資料學習，就會得出錯誤的答案。若設計圖有誤，技藝高超的木匠也無法蓋出堅固的房屋。因此，收集資料的階段與預測本身同等重要。優質的資料是優秀人工智慧的基石。

近期，人工智慧甚至能自行擴展規則。刊登於2026年學術期刊的一項研究展示了一套知識增強的人工智慧架構。該研究擺脫了元素必須等量混合的限制，依據目標自由調整元素比例，成功設計出單相高熵合金。這是將人類累積的冶金學知識融入人工智慧所獲得的成果。

這種趨勢展現了人工智慧與人類知識的協同效應。若單純依賴人工智慧，在超出資料範圍時就會產生偏差；若僅使用人類制定的規則，則難以探索廣泛的空間。將兩者結合便能互補短長。唯有文獻探勘與知識增強齊頭並進，設計才會更加扎實。

與CALPHAD的結合也相當重要。人工智慧可以迅速模擬CALPHAD計算，或挑選下一個計算候選。將從文獻收集的資料、CALPHAD計算、密度泛函理論與實驗串聯在一起，候選設計的速度就會加快。這套整合管線是探索廣大成分空間的實際方法。

4.4 表達無序合金的圖神經網路

我們來看看人工智慧如何表達高熵合金的無序狀態。核心工具是圖神經網路（Graph Neural Network, GNN）。這是一種將材料轉化為節點與邊的圖形來進行學習的方法。首先說明什麼是圖。圖是由節點與連線來表達關係的圖形。地鐵路線圖就是一種圖，車站是節點，軌道是連線。晶體結構也可以繪製成圖，原子是節點，原子間的鍵結則是連線。

圖神經網路透過讀取這幅圖來預測材料的性質。每個節點包含原子的資訊，每條連線包含原子間的距離與方向。神經網路藉由相鄰節點之間互相傳遞資訊來理解材料。這種資訊交換稱為訊息傳遞（Message passing）。這就像和旁邊的同學互傳紙條，進而掌握全班的整體氛圍一樣。

這種方法非常適合理想的單晶。單晶是每個晶格位置都恰好由單一元素佔據的晶體，規則分明，如同食鹽晶體一般。既有的晶體圖神經網路正是基於這種前提構建的。只要在每個節點放入一個元素，計算就非常俐落明快。

問題在於高熵合金並非如此。在這種合金中，多種元素以機率方式混合在同一個晶格位置上。某個位置可能是鈮、可能是鉬，也可能是鉭。這稱為分數佔據（Fractional occupancy），也就是一個晶格位置同時具有多種可能性的狀態。

此外，還存在局部短程有序（Short-Range Order, SRO）。原子並非完全隨機混亂地混合，某些特定元素之間傾向於相鄰，而某些元素之間則互相排斥。這種近距離的偏好對材料性質有著重大影響。傳統模型無法捕捉這種微妙的有序性。

晶體分數圖神經網路正是解決此問題的一種嘗試。該方向的構想如下：在每個節點放入成分向量，而非單一元素。成分向量是記錄各元素存在於該位置之機率的數值清單。例如，將某個位置表示為25%的鈮、25%的鉬與50%

的鉅。如此一來，便能自然地納入分數佔據特徵。

冠以此名稱的前期研究所實際展現的內容既狹窄又明確。該研究結合約16個原子的局部環境與合金整體的元素分率，來預測晶體的能量，這是利用約一千個結構進行學習的結果。這項研究並非能一次性精確預測短程有序、熔點、混合焓乃至高溫強度。同時預測這些性質是未來有待探索的方向，而非已經達成的成果。透過在連線中加入元素對資訊以納入短程有序的方法，也處於相同的提案階段。

我們來探討訊息傳遞是如何轉化為學習過程的。起初，每個節點只知曉自身的資訊；進行一次資訊交換後，就能了解相鄰節點的資訊；經過多次重複，便能獲知更遠處的資訊。利用這樣擴展的資訊，即可預測整個材料的性質。若預測值與實際值出現偏差，就會修正神經網路的數值。透過無數次重複修正，模型變得越來越聰明。

利用單一模型同時預測多種性質也是一大優勢，這稱為多目標預測。熔點與強度之間彼此相關，在學習某種性質時獲得的資訊有助於預測另一種性質。這就像同時研讀多個學科時，彼此之間的理解會更加深入一樣。

然而，這個方向仍處於初期階段。晶體分數圖神經網路是近期才作為前期研究被提出。較大的超胞、複雜的短程有序以及實際的熱處理歷程，依然是棘手的難題。因此，該模型的預測結果仍必須透過實驗與原子模擬加以驗證。

另一方面，處理短程有序的其他人工智慧研究正迅速增加。刊登於2025年學術期刊的一項研究，比較了利用機器學習勢重現短程有序的方法。機器學習勢是利用人工智慧計算原子間作用力的工具。該研究顯示，即使能量精準度很高，也可能無法準確預測性質。這意味著如何挑選訓練資料將決定性質預測的成敗。

同年另一項研究則利用人工智慧加速了蒙地卡羅計算。蒙地卡羅法是一種透過隨機嘗試尋找平衡狀態的計算方法。該研究採用人工智慧代理模型，揭示了數十億個原子規模的奈米結構。這等於開啟了在大尺度下觀察高熵合金內部微觀有序結構的途徑。晶體分數圖神經網路也是在此趨勢下持續發展。

我們來探討為什麼這種無序表達對火箭材料如此重要。噴嘴內襯的強度取決於位錯受阻礙的程度。短程有序會改變位錯移動路徑的難易度。當某些特定元素聚集時，會更強力地阻擋位錯。因此，即使成分相同，強度也會隨短程有序的不同而有所差異。

這種微觀有序結構會隨著製程方法的不同而改變。快速冷卻會將無序狀態凍結下來；緩慢冷卻則使原子得以就位並產生有序結構。熱處理的溫度與時間同樣會改變有序度。因此，唯有將成分與製程一併考量，才能準確預測並調控材料性質。

人工智慧正是用於學習這種錯綜複雜的關聯。它將成分、製程、有序結構與性質一次性串聯起來。人類難以同時處理這麼多的變數，而人工智慧只要有足夠的資料，就能找出其中的關聯。晶體分數圖神經網路正是試圖在原子排列層次上捕捉這種關聯的嘗試。

這個方向目前仍處於初期階段。現階段預測精準度與資料量均顯不足。隨著實驗資料的積累與計算速度的提升，預測將會有所改善。在此之前，以實驗驗證人工智慧預測結果的程序是必不可少的。

4.5 洞悉單一原子的大尺度分子動力學

利用電腦模擬單一原子動態的方法稱為分子動力學（Molecular Dynamics, MD）。這是從原子層次觀察金屬斷裂過程的工具。將此計算擴展至極大規模的關鍵，是一種名為神經演化勢（Neuroevolution Potential, NEP）的人工智慧技術。首先說明為何需要大尺度。金屬的裂紋始於少數幾個原子，微小的裂隙逐漸擴大並擴展至晶界，最終導致結構斷裂。這個過程必須同時觀察極微觀與相當宏觀的現象才能被理解。這種現象稱為多尺度（Multi-scale）現象。

傳統的密度泛函理論難以勝任此任務。該計算雖然精準，但計算量龐大，難以處理超過數百個原子的體系。然而裂紋擴展的實際組織包含數十億個以上的原子。因此，單靠精確的量子計算無法看清全貌。

經驗勢則面臨相反的問題。勢是計算原子間作用力的規則。經驗勢輕量且迅速，但在包含五種以上元素的複雜合金中，其精準度會下降。不同元素的相鄰環境各異，經驗勢無法捕捉這種微妙的差異。

因此，需要一種兼具兩種方法優點的工具，也就是同時具備量子計算的精確度與經驗規則的速度。填補這一空缺的正是機器學習勢。人工智慧透過學習量子計算資料來預測作用力。神經演化勢則是該系列中在速度方面極具優勢的工具。

我們也來探討分子動力學的本質。這項計算將牛頓運動定律應用於所有原子。在求出作用於各原子的力之後，讓原子移動極短的時間。無數次重複此過程，就能如電影般觀察原子如何隨著時間移動。

4.5.1 兼顧精準度與速度的神經演化勢

神經演化勢是結合兩種構想的工具。其一是神經網路，神經網路是從資料中學習規律的人工智慧；其二則是演化策略，演化策略是生成多個候選者並挑選較佳者加以精煉的方法，是一種模擬自然選擇的學習法則。

這種勢函數會先將原子周圍的環境轉化為數值。將某個原子與鄰近原子的距離以及排列的角度構建為特徵，再將這些特徵輸入神經網路以預測單一原子的能量。將所有原子的能量相加即可得出總能量，並由能量的變化計算出作用於原子上的力。

我們來探討為何需要同時考量距離與角度。若僅看距離，只能得知原子的緊密程度；若連角度一併考量，則能得知原子的排列形狀。即使距離相同，三角形排列與直線排列的性質亦不相同。因此，必須同時納入距離與角度，才能完整描繪環境特徵。

這種方式切中了化學鍵結的本質。原子會根據周圍環境以不同方式結合。鄰近原子密集時鍵結較強，稀疏時則較弱。神經演化勢從資料中學習這種關係，並利用學得的關係迅速估算新排列結構的能量。

這種方式的優勢在於兼顧了精準度與速度。神經網路習得接近量子計算的精確度，而計算本身則如經驗規則般輕快。因此能迅速獲得精確的作用力，這正是開啟大尺度計算大門的關鍵。

速度的秘訣在於圖形處理器（Graphics Processing Unit, GPU）。此裝置原本是為了渲染遊戲畫面而製造，擅長同時繪製螢幕上的無數畫素點。這種平行處理能力非常契合原子計算，因為它能一次計算無數原子的作用力。

神經演化勢被設計成能在此裝置上高效運行。它與名為GPUMD的圖形處理器專用程式搭配使用。此組合已被廣泛應用於熱傳導、缺陷以及高溫變形等研究中。近期亦有後續研究進一步加快了訓練方法。這些改進使得更大規模的計算成為可能。

我們也來探討構建此勢函數的過程。首先利用密度泛函理論計算多種原子排列的能量與作用力，這些數值成為人工智慧的教科書。人工智慧參照這本教科書來調整自身的預測。演化策略則朝著預測與資料高度吻合的方向逐步優選參數。完成訓練後，一套快速且精準的作用力計算工具便告完成。

訓練過程中亦採用主動學習。人工智慧會主動找出把握度較低的原子排列，並僅針對該排列重新以密度泛函理論進行計算。將如此獲取的資料再次投入訓練中，是一種以較少計算量涵蓋廣泛範圍的明智方法。

然而，快速的答案並不總是正確的答案。人工智慧勢函數在已學習的範圍內十分精確，但在訓練資料中未包含的成分或溫度下可能會出錯。在高熵合金中，元素組合稍有變化，局部環境就會產生巨大改變。因此，訓練資料的代表性至關重要，必須另行評估預測的不確定性。

4.5.2 透過大尺度計算觀察變形與裂紋

一兆是難以想像的數字。將一兆個原子排列開來，就能達到接近實際顯微組織的尺寸。這意味著可以將微米級試樣精確描繪至單一原子的層次。在小規模計算中，只能觀察到單一裂紋與少數晶界；在大規模計算中，則能觀察到眾多晶界與缺陷彼此相互影響的樣貌。

2026年公開的一項預印本研究跨過了這個門檻。該研究利用神經演化勢計算了1兆6000億個原子。在中國新型超高效能電腦上同時使用了約4萬5000個運算單元。這項研究所展現的是運算規模與速度。報告指出，該運算的執行速度遠快於先前的最高紀錄。但這並不是一項在此規模下實際解析高熵合金位錯與裂紋結果的研究。展示達到該規模與用該規模揭示了什麼是兩回事。這項研究是尚未經過同儕審查的早期研究。

我們不妨對照一下這個數字意味著什麼。過去，計算100萬個原子也是一件大事。幾年前突破了1億個，隨後達到100億個。如今已突破1兆個。能夠計算的規模正在迅速擴大。不過，1兆個原子的計算是將超大型超級電腦運用

到極限的象徵性展示。在實際合金設計中，日常使用的計算規模在數千到數十萬個原子之間。人工智慧勢與高速電腦引領了這項成長。

大規模帶來的優勢在於統計。原子越多，越能捕捉到罕見事件。裂紋萌生的種子極為罕見。在小規模計算中可能看不到這些種子。在大規模計算中則可以同時觀察多個種子。因此預測也就更接近實際情況。

首先探討這種計算為何對火箭材料有用。實際噴嘴襯套的組織包含無數個原子。唯有了解這個龐大組織中發生了什麼，才能知道壽命。大規模計算描繪出了接近這種實際組織的圖景。因此，它可以用來評估哪種成分能夠持久耐用。

透過這種大規模分子動力學，原則上可以觀察到三種現象。以下是該方法所追求的目標，而非前述展示已揭示的結果。第一是位錯成核。位錯是變形開始時的微小缺陷。它即時追蹤體心立方晶格中位錯如何產生以及如何滑移。在高熵合金中，局部成分的波動會釘扎位錯。這種釘扎就是提高強度的原理。

第二是晶界滑移。晶界是晶粒之間的邊界。在高溫受力時，這個邊界會發生滑移。大規模計算在原子層級測量這種滑移與孔洞的聚集。這種行為決定了潛變壽命。

第三是裂紋擴展。裂紋尖端是裂縫的最前端。在這裡原子排列發生改變並產生變形。大規模計算觀察裂紋如何生長以及如何停止。這成為評估哪種成分更能耐受裂紋的線索。

這三種現象相互關聯。位錯堆積並聚集到晶界。晶界滑移產生孔洞。這些孔洞連成一片形成裂紋。在小規模計算中很難看到這種關聯。而在大規模計算中，則能將從開始到結束的全過程盡收眼底。

探討看清這種關聯為何有用。材料的壽命取決於最脆弱的環節。鏈條總是在最脆弱的環節斷裂。只要知道哪個階段最先崩潰，就可以對該處進行補強。大規模計算有助於提前找出這個薄弱環節在哪裡。

這些資訊對火箭噴嘴襯套的研究很有用處。噴嘴襯套同時承受高溫氣體與熱衝擊。若能在實驗前評估哪種成分能長久耐用，就能節省時間。大規模計算起到了縮小候選範圍的天平作用。

不過這種計算也是有條件的。結果的準確性取決於人工智慧勢的品質。在勢未曾學習過的情況下，計算也會出錯。因此，大規模計算的結果必須透過小規模精密計算與實驗來驗證。規模龐大與結果正確是兩回事。

4.6 與物理定律不相違背的金屬設計人工智慧

單純的資料學習可能會產生危險的預測。利用物理定律防止這種危險的方法稱為物理資訊神經網路（Physics-Informed Neural Network, PINN）。我們來看看如何將這種方法應用於冶金學，即研究金屬的學科。首先指出純資料學習的弱點。人工智慧在所學的資料範圍內能給出很好的回答。但在沒有資料的領域中，卻會給出離譜的答案。這種領域稱為分佈外（Out-of-Distribution）。這就像學生遇到了考試範圍之外的題目一樣。

在金屬設計中，這種荒謬的答案違反了物理定律。例如，溫度上升時穩定性數值反而反向變動。甚至可能預測體積增加但晶格能量卻減少。這種答案在自然界中是不可能發生的。如果盲目相信這種預測，設計就會出現偏差。

物理資訊神經網路在學習階段就遏止了這個問題。方法是在損失函數中加入物理定律。損失函數是衡量人工智慧出錯程度的標準。通常只衡量預測值與實際資料之間的差異。在此基礎上，再加上違反物理定律的程度。

這樣一來，人工智慧會試圖同時遵守兩件事。一是符合資料。另一是遵守物理定律。即使在沒有資料的領域，定律也會為答案指引方向。這就像即使遇到考試範圍外的題目，也能運用基本原理嘗試解題的學生。

在金屬設計中該加入哪些定律呢？自由能隨溫度如何變化就是一個例子。還加入了強度由多種強化貢獻總和決定的關係。也加入了相平衡必須遵守的條件。這些定律限制了人工智慧的自由度。縮減的自由度反而能產生值得信賴的答案。

進一步說明在損失函數中加入定律的方式。物理定律通常寫成方程式。將預測值代入該方程式時，兩邊應當相等。如果不相等，就會留下差值。這個差值稱為殘差。如果殘差很大，就給予懲罰項。

如此一來，人工智慧就會竭力避免受到懲罰。在符合資料的同時，也試圖遵守方程式。這就像交試卷時連計算式與單位都完全對準的學生。比起只死記答案的學生，這種學生在應用題上更具優勢。這正是物理資訊神經網路在

資料範圍外表現強大的原因。

這種方式的價值在資料匱乏時更為顯著。火箭用極限材料的實驗資料非常珍貴。進行一次測試需要耗費龐大的成本與時間。當資料稀少時，純資料學習很容易產生動搖。物理定律彌補了不足的資料。

這兩種方法必須加以區分。前一節所見的熔點預測研究並不是物理資訊神經網路。該研究是選取具有物理意義的特徵所構建的回歸模型。並未直接在損失函數中加入物理方程式。使用優質特徵的回歸與在損失函數中加入物理定律的學習是不同的方法。然而兩者朝向相同的目標，那就是使人工智慧的預測不違背冶金學。當優質特徵與物理約束並行時，將更接近該目標。

4.6.1 為超高溫噴嘴襯套設計匯聚工具

本小節探討前述工具在實際設計中如何協同應用。目標是研發用於超高溫噴嘴襯套的難熔高熵合金。比起單一完成的成果，更著重於設計與驗證的程序。同時也指明近期研究進展到何處、還留下哪些課題。優良的噴嘴襯套合金必須同時滿足多項性質。熔點必須要高。密度若太大，火箭就會過重。在高溫下必須保持強度。接觸氧氣時表面也必須良好耐受。必須與塗層的熱膨脹良好匹配。如果只有單一性質良好，就無法作為零件使用。

要同時達成這多個目標對人類而言十分吃力。若加入大量鎢，熔點會上升。但密度會變大，且容易脆裂。若加入鋁或鉻，抗氧化性會增強。但其他性質可能會受到影響。像這種相互交織的目標稱為多目標最佳化。

在火箭中，密度是極為敏感的問題。零件一重，整個火箭就會變重。沉重的火箭使用相同燃料飛行的距離較短。因此，即使強度很好，若太重也無法使用。必須將熔點、強度與重量一同放上天平權衡。

在這種權衡中沒有單一的標準答案。稍微犧牲強度就能減輕重量。稍微犧牲重量就能提高強度。這樣便會產生一組相互權衡取舍的候選集合。面對這個集合，由人類挑選出符合目的的一個。人工智慧則能迅速描繪出這個集合。

人工智慧能同時處理這些交織的目標。利用前面看過的描述符將成分轉換為數字。利用預測模型快速篩選熔點與強度。利用物理約束過濾掉不合理的候選項目。利用大規模原子計算觀察變形與裂紋。這個流程大幅縮小了候選範圍。

近期的研究展現了這個流程的用處。2024年發表在學術期刊上的一項研究，利用機器學習設計了超高溫用難熔高熵合金。利用人工智慧縮小了廣泛的成分空間，並選出了具潛力的候選成分。這是同時提高強度與延展性的嘗試。這類研究表明人工智慧設計在實驗室階段切實可行。

在氧化問題上人工智慧也開始介入。有一項於2025年底公開的預印本研究。該研究利用主動學習探索了耐高溫氧化的難熔複合濃縮合金。主動學習是人工智慧自主挑選下一次要測試之成分的方法。這是以較少實驗尋找優質候選成分的途徑。這項研究同樣是尚未經過同儕審查的早期研究。

然而，現在將其視為確定成果還為時過早。某種成分在特定溫度下究竟能發揮多少強度的具體數值，需要確認原文。未經驗證的性能數值不會寫入本書。相反地，本節強調設計必須經歷的驗證程序。

驗證分為三個階段。首先檢視候選成分在計算中是否穩定。利用CALPHAD與密度泛函理論確認相平衡。接著檢視是否能在實際中製備出合金。即使計算結果再好，若無法製造出來也毫無用處。最後測量高溫下的強度與抗氧化性。接近實際環境的測試是最後一道關卡。

不可忘記的是，在通過這些階段時誤差也會隨之傳遞。原子計算中的微小誤差會蔓延至微結構預測，並進一步放大到零件強度預測。當因氧化導致表面受侵蝕且邊界發生移動時，預測會更加動搖。每個製造製程產生的偏差也會疊加於此。因此，優良的設計給出的不是單一數值，而是包含壽命的範圍。最後必須經過與實際零件相同條件下的認證測試。

這三個階段並非只按順序單向進行。如果在測試中發現弱點，就會重新修改成分。將修改後的成分重新計算並重新製造。如此反覆循環。這個循環稱為閉迴路設計。自主實驗室則是讓此循環自動運轉的嘗試。

人工智慧介入了這個循環的每一個階段。挑選下一次要測試的成分、學習結果、然後再次挑選。即使人類沒有通宵守候，循環依然運轉。抵達優質成分的路徑也因而縮短。這股趨勢正在改變高溫合金開發的未來。

在鎳基超合金方面，人工智慧設計也十分活躍。2025年的多項研究利用機器學習預測了單晶超合金的潛變壽命。輸入成分與微結構資訊，選出了能夠持久耐用的成分。 γ' 晶粒的體積分率與形狀被用作重要特徵。這類研究表明，即使是歷史悠久的老牌金屬，人工智慧也能賦予其新的應用價值。

其中也有將相場計算與人工智慧結合的研究。相場是將組織的變化描繪為平滑場的計算方法。2025年的一項研究將此計算與機器學習串聯。共同預測了成分與組織對潛變變形的影響。串聯計算與人工智慧的這種方式正與日俱增。

這些案例給予了共同的啟示。人工智慧在具備優質特徵與充足資料時才能發揮力量。若特徵與物理原理緊密相連，預測便十分穩固。若資料偏向特定領域，在該領域之外就會產生動搖。因此，廣泛收集資料並精確挑選特徵是首要任務。

在此程序中，人工智慧的定位非常明確。人工智慧是縮減成分空間的引路人。當人工智慧將100種候選縮減為3種時，人類只需對這3種進行深入測試。當如此分工時，開發得以加速，失敗也得以減少。這便是與物理定律不相違背的金屬設計人工智慧的真實面貌。

整理

本章探討了守護火箭溫度升至最高之處的金屬。那些部位是燃燒室噴嘴與重返大氣層表面。在這些地方，熱量、壓力與受力共同對材料造成嚴峻考驗。

長年使用的鎳基超合金在約 1,150 度時面臨極限。瞄準更高溫度的全新候選材料便是難熔高熵合金。這種合金是將多種高熔點金屬以相近比例混合而成。

早期研究以四種效應來解釋這種合金的性質。即構型熵、晶格畸變、遲滯擴散與雞尾酒效應。其中部分效應後來出現反論，難以視為普遍法則。儘管如此，這個架構仍是思考何種成分能穩定維持單相的起點。Omega 參數與價電子濃度便是協助做出該判斷的簡易指標。

要處理廣闊的成分空間，就需要人工智慧。人工智慧將材料讀取為稱為描述符的數字。大型語言模型會從論文文本中擷取這些特徵。圖神經網路將材料以點與線的形式進行學習。晶體分數圖神經網路是試圖納入高熵合金無序性的全新嘗試。

原子尺度的行為是透過分子動力學來觀察的。稱為神經演化勢的人工智慧讓這種計算變得更加迅速。近期研究已達到超過 1 兆個原子的規模。這種大規模計算能在原子尺度下觀察差排、晶界滑移與裂紋。

將所有這些工具整合在一起的思維是物理一致性。純資料學習可能會產出違背物理的答案。物理資訊神經網路透過在損失函數中加入定律來防止這種情況。人工智慧是縮小候選範圍的引路人，最終判斷則由實驗做出。

本章的大多數案例仍處於早期研究階段。前期研究的數值並非確定值。企業的案例只是產業實例，而非學術實證。因此，優良的設計始終會同時經過計算與實驗的驗證。人工智慧縮小路徑、人類決定路徑的協同合作，正是該領域的現狀。

若將本章縮減為一句話，便是如此。人工智慧改變了高溫金屬設計的速度。過去測試單一候選材料需要很長時間。現在人工智慧會預先篩選掉大量候選材料。僅對剩下的少數候選材料進行精密計算與測試驗證。

未來的課題也十分明確。必須更廣泛且均勻地蒐集實驗資料。必須一併提供人工智慧預測的不確定性。必須將物理定律更緊密地融入學習之中。這三項條件越齊備，火箭材料設計的速度就越快。

相關佐證資料

Yeh, J. W., Chen, S. K., Lin, S. J., Gan, J. Y., Chin, T. S., Shun, T. T., Tsau, C. H., & Chang, S. Y. (2004). Nanostructured high-entropy alloys with multiple principal elements: Novel alloy design concepts and outcomes. *Advanced Engineering Materials*, 6(5), 299-303. <https://doi.org/10.1002/adem.200300567>

Cantor, B., Chang, I. T. H., Knight, P., & Vincent, A. J. B. (2004). Microstructural development in equiatomic multicomponent alloys. *Materials Science and Engineering A*, 375-377, 213-218. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2003.10.257>

Senkov, O. N., Wilks, G. B., Miracle, D. B., Chuang, C. P., & Liaw, P. K. (2010). Refractory high-entropy alloys. *Intermetallics*, 18(9), 1758-1765. <https://doi.org/10.1016/j.intermet.2010.05.014>

- Senkov, O. N., Wilks, G. B., Scott, J. M., & Miracle, D. B. (2011). Mechanical properties of Nb₂₅Mo₂₅Ta₂₅W₂₅ and V₂₀Nb₂₀Mo₂₀Ta₂₀W₂₀ refractory high entropy alloys. *Intermetallics*, 19(5), 698-706. <https://doi.org/10.1016/j.intermet.2011.01.004>
- Zhang, Y., Zuo, T. T., Tang, Z., Gao, M. C., Dahmen, K. A., Liaw, P. K., & Lu, Z. P. (2014). Microstructures and properties of high-entropy alloys. *Progress in Materials Science*, 61, 1-93. <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2013.10.001>
- Miracle, D. B., & Senkov, O. N. (2017). A critical review of high entropy alloys and related concepts. *Acta Materialia*, 122, 448-511. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2016.08.081>
- George, E. P., Raabe, D., & Ritchie, R. O. (2019). High-entropy alloys. *Nature Reviews Materials*, 4(8), 515-534. <https://doi.org/10.1038/s41578-019-0121-4>
- Rao, Z., Tung, P. Y., Xie, R., Wei, Y., Zhang, H., Ferrari, A., Klaver, T. P. C., Kormann, F., Sukumar, P. T., da Silva, A. K., Chen, Y., Li, Z., Ponge, D., Neugebauer, J., Gutfleisch, O., Bauer, S., & Raabe, D. (2022). Machine learning-enabled high-entropy alloy discovery. *Science*, 378(6615), 78-85. <https://doi.org/10.1126/science.abo4940>
- Raissi, M., Perdikaris, P., & Karniadakis, G. E. (2019). Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, 378, 686-707. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045>
- Fan, Z., Zeng, Z., Zhang, C., Wang, Y., Dong, H., Chen, Y., & Ala-Nissila, T. (2021). Neuroevolution machine learning potentials: Combining high accuracy and low cost in atomistic simulations and application to heat transport. *Physical Review B*, 104, 104309. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.104.104309>
- Fan, Z., Wang, Y., Ying, P., Song, K., Wang, J., Wang, Y., Zeng, Z., Xu, K., Lindgren, E., Rahm, J. M., Gabourie, A., Liu, J., Dong, H., Wu, J., Chen, Y., Zhong, Z., Sun, J., Erhart, P., Su, Y., & Ala-Nissila, T. (2022). GPUMD: A package for constructing accurate machine-learned potentials and performing highly efficient atomistic simulations. *Journal of Chemical Physics*, 157, 114801. <https://doi.org/10.1063/5.0106617>
- He, Q., Wu, D., Wang, H., et al. (2024). Machine learning assisted design of refractory high-entropy alloy for ultrahigh temperature applications. *Materials & Design*, 246, 113326. <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2024.113326>
- Divilov, S., et al. (2024). A comparative study of predicting high entropy alloy phase fractions with traditional machine learning and deep neural networks. *npj Computational Materials*, 10, 68. <https://www.nature.com/articles/s41524-024-01335-1>
- Hasnain, M. (2026). Physically Consistent Machine Learning for Melting Temperature Prediction of Refractory High-Entropy Alloys. arXiv 預印本 (尚未經同儕審查), arXiv:2601.03801. <https://arxiv.org/abs/2601.03801>
- Suo, P., Cao, W., Wu, X., Zhang, W., Fan, Z., Xian, S., et al. (2026). Trillion-atom molecular dynamics simulations with ab initio accuracy. arXiv 預印本 (尚未經同儕審查), arXiv:2604.24816. <https://arxiv.org/abs/2604.24816>
- Hsiao, L. C., Liu, Z. K., & Reinhart, W. (2026). Modeling High Entropy Alloys' Mechanical Property through Natural Language-Derived Descriptors. arXiv 預印本 (尚未經同儕審查), arXiv:2604.21807. <https://arxiv.org/abs/2604.21807>
- Kotama, T., & Huang, Y. (2026). Crystal Fractional Graph Neural Network for Energy Prediction of High-Entropy Alloys. arXiv 預印本 (尚未經同儕審查), arXiv:2605.08103. <https://arxiv.org/abs/2605.08103>
- Bejjipurapu, A., Karumuri, S., Flanagan, J. C., Tucker, V., Bilonis, I., Strachan, A., Sandhage, K. H., & Titus, M. S. (2025). Active Learning Discovery of High Temperature Oxidation Resistant Refractory Complex Concentrated Alloys. arXiv 預印本 (尚未經同儕審查), arXiv:2512.15958. <https://arxiv.org/abs/2512.15958>
- Cao, Y., Sheriff, K., & Freitas, R. (2025). Capturing short-range order in high-entropy alloys with machine learning potentials. *npj Computational Materials*, 11, 268. <https://doi.org/10.1038/s41524-025-01722-2>
- Liu, X., Yang, K., Liu, Y., Zhou, F., Fan, D., Pei, Z., Xu, P., & Tian, Y. (2025). Revealing nanostructures in high-entropy alloys via machine-learning accelerated scalable Monte Carlo simulation. *npj Computational Materials*, 11, 267. <https://doi.org/10.1038/s41524-025-01762-8>
- Huang, H., Yu, Y., Deng, W., Qian, Q., & Zheng, H. (2026). Breaking equiatomic constraints: knowledge-enhanced AI framework for function-oriented single-phase high-entropy alloy design. *npj Computational Materials*, 12, 209. <https://doi.org/10.1038/s41524-026-02071-4>
- Kamnis, S., & Delibasis, K. (2025). High entropy alloy property predictions using a transformer-based language model. *Scientific Reports*, 15, 11861. <https://doi.org/10.1038/s41598-025-95170-z>
- Chizhevskiy, V., Markovič, G., Benazzouq, S., Cvelbar, U., Nominé, A., & Zavařnik, J. (2026). High Entropy Alloys Database generated with Large Language Model. *Scientific Data*, 13, 612. <https://doi.org/10.1038/s41597-026-06930-z>
- Yao, J., Yu, W., Wang, J., Zhang, L., Liu, F., Li, W., Tan, L., Huang, L., & Liu, Y. (2025). Integrating Machine Learning and Thermodynamic Descriptors for Enhanced Ni-Based Single Crystal Superalloys Creep Life Prediction and Alloy Design. *Metals and Materials International*, 31, 2730-2748. <https://doi.org/10.1007/s12540-025-01906-x>
- Song, J., Shan, Y., Zhang, Z., Wang, S., Zhang, H., Muhammad, S., Huang, H., & Li, Y. (2025). Phase-field-informed machine learning on creep behavior of Ni-based single-crystal superalloys. *Journal of Materials Informatics*, 5, 2. <https://doi.org/10.20517/jmi.2025.02>

第5章 航太用複合材料（CMC）及超高溫陶瓷（UHTC）的微觀結構控制與加熱壽命評估

前言

陶瓷器皿即使放入高溫烤箱也不會熔化。然而，若將滾燙的器皿直接浸入冷水中，就會產生裂痕。這是因為它雖然耐熱，卻難以承受劇烈的溫度變化與衝擊。保護火箭與極音速飛行器表面的材料，也是在這兩種性質之間尋求解答。只不過那裡的溫度與受力，根本無法與廚房相提並論。

火箭發動機的燃燒室內部充滿了數千度的高溫氣體。極音速飛行器的前端與空氣碰撞而自行升溫。這些部位的表面會同時承受熱、氧化、磨損與巨大的作用力。氧化是氧氣與材料接觸並侵蝕材料的現象。

金屬雖然堅固，但在極高溫度下會變軟。這就像麥芽糖在手中彎曲一樣。因此研究人員將目光轉向陶瓷。陶瓷就像陶器一樣耐熱，在高溫下也能良好承受。

本章探討的兩種材料是陶瓷基複合材料（CMC）與超高溫陶瓷（UHTC）。陶瓷基複合材料是在陶瓷基體內加入細纖維製成。超高溫陶瓷則是熔點極高的陶瓷。兩者的目標都是在高溫環境中維持形狀。

問題在於難以預先得知這些材料何時會損壞。在實驗室中很難完全重現真實的飛行環境。進行一次試驗的成本也相當高昂。因此，人工智慧（AI）作為減輕這種困難的工具應運而生。

人工智慧用於讀取材料內部的微小結構並預測其壽命。微小結構是指在顯微鏡下觀察到的晶粒、纖維、孔隙與晶界的形狀。本章將逐一說明如何將這些微小結構轉化為數字，以及如何預測未來。文中不使用數學公式，而是以文字娓娓道來。

本章貫穿著一個主軸，那就是將材料的微觀世界轉化為數字。顯微鏡照片、晶體位向、原子振動皆為處理對象。將這些資訊轉化為人工智慧可讀取的格式，人工智慧便能預測未來並塑造結構。

本章的順序如下：首先探討材料在極限環境下如何受損；接著探討將晶粒轉化為圖結構以預測壽命的方法；隨後介紹纖維編織結構的逆向設計方法；最後探討連結微觀世界熱流與整體組件熱流的方法。

在此預先申明一項原則。本章中的人工智慧無法取代實際試驗。人工智慧提出的性能數值必須透過實物驗證。未經確認的數值僅供參考。本書正文僅收錄經過驗證的資料。這項原則是材料開發中維護安全的基石。

5.1 極音速飛行與次世代火箭推進極限環境及熱結構劣化機制

本節探討內容

本節首先描繪材料必須承受的環境有多麼嚴苛。以極音速飛行的飛行器及高壓火箭發動機內部為例，闡明為何一般金屬無法勝任、為何需要陶瓷。

接著探討陶瓷材料實際上如何受損。依序檢視碳纖維複合材料的氧化，以及超高溫陶瓷的燒蝕與相變。燒蝕是指表面被高溫氣體熔化或剝蝕剝落的現象。唯有了解此損傷過程，才能理解下一節的人工智慧預測究竟在學習什麼。

5.1.1 非平衡氣動加熱與高焓燃燒氣體環境

氣動加熱是由於高速飛行導致空氣加熱表面的現象。與表面的摩擦也會產生熱量。然而在極音速下，空氣受到強烈壓縮而升溫所佔的比例更大。速度越快，這股熱量急遽攀升，使表面劇烈升溫。

極音速是指超過音速五倍的速度。馬赫 7 則是比音速快七倍的速度。在此速度下，空氣不會呈現常態流動。飛行器前方會產生震波。震波是空氣受到突如其來的壓縮而形成的薄薄壓力之壁。

通過震波後的空氣會在瞬間減速並急遽升溫。當溫度極高時，空氣分子會發生解離。氧分子與氮分子分解為單個原子。如此分解出的原子態氧，其活性遠高於一般氧氣，因而更容易侵蝕材料。

飛行器中承受熱量最為嚴苛的部位是前緣與機鼻。前緣是機翼最先接觸空氣的邊緣。機鼻是飛行器尖銳的前端頭部。此處的表面溫度可飆升至數千度。此外，將表面向側向推擠的剪切力也會疊加作用於此。

火箭發動機內部的情況也同樣嚴峻。燃燒甲烷與液態氧會產生高溫氣體。該氣體中混合了水、二氧化碳與一氧化碳，同時亦含有殘留的氧氣。燃燒室壓力高達數十個大氣壓。這種高壓氣體不斷衝擊燃燒室壁面。

這種環境稱為高焓環境。焓是氣體所蘊含的熱能總量。高焓意味著氣體含有極大的熱量。此氣體會向壁面傾瀉大量熱能。不過，壁面溫度會低於氣體溫度，因為熱量會擴散至材料內部，同時亦會進行冷卻。

此外，時間也是一個關鍵問題。火箭從發射到進入軌道需要燃燒數百秒。極音速飛行器則在大氣層中長時間滑翔。這意味著材料不是短暫受熱，而是長時間承受高溫。因此，材料僅僅支撐片刻是遠遠不夠的。

讓我們感受一下究竟有多熱。極音速前緣的停滯點已接近材料的耐受極限。停滯點是流動停滯、熱量最為集中的位置。此處的熱負載根本無法與廚房瓦斯爐火相提並論。將表面向側面推擠的剪切力也同時作用於該位置。

單一材料必須承受所有這些條件。熱、氧化、剪切力與長時間暴露相互疊加。2024年一篇綜述極音速飛行材料的文獻將此複合環境列為材料選擇的核心難題。這一難題正是陶瓷材料研究的起點。

人工智慧在此扮演的角色十分明確。實際試驗昂貴且稀少，因此必須藉由少數幾次試驗的資料來預測廣泛條件下的情況。人工智慧擅長從少量資料中擷取規律。然而，若缺乏物理定律的輔助，便可能給出荒謬的答案。這正是本章多種方法將物理與人工智慧結合運用的原因所在。

5.1.2 碳纖維複合材料受氧氣侵蝕之過程 (C/SiC)

碳纖維強化碳化矽 (C/SiC) 是代表性的熱結構材料。碳纖維細小輕盈且不易斷裂。碳化矽 (SiC) 對高溫與氧化具有相對良好的耐受性。將兩者結合，即可製成質輕且強韌的複合材料。本材料在下文中簡記為 C/SiC。

製造此材料的方法主要有兩種。其一是化學氣相滲透法，讓氣體滲透以在纖維之間填滿陶瓷。另一種是液相樹脂浸漬碳化法，注入樹脂後經燒結轉化為陶瓷。兩種方法皆是在纖維束之間填滿陶瓷。

問題在製造過程中便已開始。碳纖維與碳化矽基體受熱時膨脹的程度不同，這稱為熱膨脹係數差異。從高溫狀態冷卻至常溫時，兩者收縮的程度各不相同。結果在基體內部形成了細微的裂紋網。這些微裂紋在製造過程中不可避免地產生。

裂紋成為氧氣進入內部的通道。即使表面看起來完好無損，氧氣仍會滲入內部。這就像水從壁紙上的微小縫隙滲入一樣。進入內部的氧氣會侵蝕碳纖維與界面層。界面層是纖維與基體之間薄薄的交界面。

碳化矽基體與氧氣相遇時會以兩種方式反應。當溫度不是非常高且氧氣充足時，表面會形成一層玻璃質薄膜。這層薄膜是由二氧化矽構成的薄保護層，稱為鈍化氧化。這層玻璃膜可阻擋氧氣滲透，保護材料內部。

相反地，當溫度極高或氧分壓較低時，情況便有所不同。保護性玻璃膜無法形成，取而代之的是碳化矽直接揮發為氣體，這稱為主動氧化。在主動氧化中，表面在沒有保護膜的情況下持續被剝蝕。在更高海拔的極音速飛行中，此風險會進一步增加。

一旦界面層消失，複合材料的優勢便蕩然無存。原本纖維在裂紋擴展時會像橋樑一樣拉住裂紋，這稱為纖維架橋。若界面因氧化而消失，這種拉持力量便會瓦解，進而使材料陷入容易脆斷的狀態。層與層之間相互分離的脫層損傷也會隨之發生。

這種損傷在表面上並不明顯。即使表面完好，內部的界面也可能已先受損。因此單靠目視檢查是不夠的，必須評估材料內部的氧氣滲透與界面狀態。人工智慧壽命模型所讀取的正是隱藏在內部而非表面的這種損傷。

2026年發表的一項研究以具體數字呈現了這種損傷。Wu 研究團隊以物理模型預測了 2.5 維編織 C/SiC 的氧化損傷。在該研究中，常溫拉伸強度約為 264 兆帕。當溫度升至 1100 度時，強度降至約 184 兆帕。彈性模數在同一區間內亦降低了約 23%。該研究採用的是基於物理的本構模型，而非人工智慧模型。

阻絕氧氣還有另一條途徑，那就是在表面施加保護塗層的方法，這稱為環境障壁塗層。該塗層可阻止氧氣與水蒸氣滲入內部。在極音速研究中，目標是開發能承受攝氏 2000

度以上的塗層。人工智慧被用於確定塗層的厚度與成分組成。

這些結果指明了一點：若僅著眼於材料的平均性質，就會忽略界面損傷。必須精確考量氧氣從何處滲入、滲入了多少的位置分布，同時也必須考量溫度歷程與負載歷程。後文將介紹的人工智慧壽命模型所承擔的正是這項任務。

在此亦需指明其局限性。Wu 研究團隊的模型是基於物理的計算，即使沒有人工智慧也能預測損傷。人工智慧則是透過學習這類物理模型的資料，以朝向提升運算速度的方向應用。物理模型與人工智慧並非競爭對手，而是互補長短的夥伴。

5.1.3 超高溫陶瓷熔融與剝落過程 (UHTC)

超高溫陶瓷是熔點極高的陶瓷。代表性材料為二硼化鋯與二硼化鈦。二硼化鋯是鋯與硼的化合物。這些材料的熔點超過攝氏 3000 度。因此被作為極音速前緣與火箭組件的候選材料進行研究。

熔點高並不代表可以高枕無憂。真正的問題在於氧化。當二硼化鋯與氧氣相遇時，會產生兩種氧化物。一種是稱為氧化鋯的堅硬氧化物，另一種是稱為三氧化二硼的硼氧化物。

三氧化二硼在低溫下展現出有趣的特性。它在攝氏約 450 度時熔化為液體。這種液體會填補表面的微小縫隙，如同塗抹在傷口上的軟膏填補裂口般運作。這被稱為自我修復皮膜。在初期氧化階段，這層膜能保護材料。

然而，隨著溫度進一步上升，這道防線便會瓦解。超過攝氏約 1100 度時，三氧化二硼開始逐漸蒸發。到了攝氏 1500 度左右，這層膜實質上已不復存在。確切的極限溫度取決於氧分壓、氣體速度與壓力，因此難以給出單一的固定數值。

若加入碳化矽，情況則會好轉。碳化矽氧化形成的液態玻璃與三氧化二硼混合，兩種成分結合形成稱為硼矽酸鹽的玻璃相。這種玻璃相能夠覆蓋表面直到更高的溫度。

當溫度進一步升高時，連這種玻璃也無法承受。超過攝氏約 1700 度時，玻璃的黏度會降低。玻璃蒸發並被高速氣流撕扯剝離。當保護膜如此消失後，表面便會迅速被剝蝕。最終表面只留下布滿孔隙的氧化鋯骨架。這種多孔骨架更容易讓氧氣穿透進入內部。

氧化鋯還存在另一個陷阱。氧化鋯的晶體結構會隨溫度而改變。在冷卻過程中，它會由正方晶系轉變為單斜晶系。這兩個名稱代表原子堆積方式的差異。一旦發生這種轉變，體積會膨脹約 4.5%。

體積驟然膨脹會在氧化膜內部產生巨大的應力。這就像冬天水結冰脹破玻璃瓶一樣。這種應力會在氧化膜中產生裂紋。當裂紋相連時，氧化膜便會一片片剝落，這稱為剝落。剝落的位置會露出嶄新的表面，導致氧化再度開始。

高熵硼化物是針對這個問題的新方法。高熵陶瓷是將多種金屬元素以相近比例混合而成的陶瓷。有時甚至會將五種金屬放入同一個晶體中。由於成分範圍廣泛，非常適合人工智慧搜尋。可以用電腦先行篩選出哪種組合具備良好的抗氧化能力。

2026年綜述超高溫陶瓷的文獻清楚展現了這個趨勢。該綜述同時涵蓋了實驗、多尺度模擬以及數據驅動設計。所謂多尺度，是指將原子尺度到組件尺度等多個層級連結起來的方法。數據驅動設計則是由人工智慧挑選成分與微結構的方法。

人工智慧也用於預測氧化層厚度。一個研究團隊利用機器學習預測了超高溫硼化物的氧化損傷。他們透過隨機森林的方法預測氧化層厚度。隨機森林是一種匯集多個決策規則來得出答案的方法。不過，氧化層的實際行為仍需透過風洞與電弧加熱器試驗來確認。電弧加熱器是噴射超高溫氣體以模擬飛行環境的裝置。

預測熔點時也會使用機器學習原子間勢 (MLIP)。這是人工智慧快速計算原子間作用力的方法。2025年一個研究團隊利用MLIP預測了高熵陶瓷的熔點。他們先用電腦篩選出熔點較高的組合。這種方法在進行實驗前縮小了候選範圍，進而減少昂貴的合成與試驗次數。透過計算先行篩選，整個材料搜尋過程都得以加快。

即便如此，依然存在疑問：電腦挑選的組合實際上真的耐氧化嗎？計算通常假設理想條件，而實際表面存在雜質與缺陷，氣體的流動與壓力也與計算有所不同。因此，最終判斷仍取決於實物試驗。人工智慧的作用僅在於聰明

地挑選出值得試驗的候選組合。

5.2 將晶粒轉換為圖以預測壽命的方法

本節涵蓋的內容

本節探討將材料內部結構轉換為人工智慧可讀形式的方法，其工具就是時空圖神經網路。圖是用點與線描繪關係的圖形，地鐵路線圖就是一個很好的例子：車站是點，區間是線。

將材料內部的晶粒轉換為點，晶粒邊界轉換為線，並在此基礎上加入時間的流動。這是因為反覆承受熱與力會累積損傷。本節將說明如何建構該圖、損傷如何發展，以及如何將物理定律融入學習之中。由於同時考量時間與空間，因此稱為時空模型。

5.2.1 將微結構轉換為圖

晶粒是材料內部微小的晶體顆粒。金屬或陶瓷並非單一的大晶體，而是由無數微小的顆粒聚集而成。每個顆粒中原子的排列方向都略有不同，這個方向稱為晶體取向。

讀取晶體取向的代表性設備是電子背向散射繞射（EBSD）。它在電子顯微鏡內部發射電子以讀取每個晶粒的方向。該設備掃描表面並記錄每個晶粒的方向，其結果呈現為色彩豐富的取向分布圖。

晶界是兩個晶粒相遇的邊界。這個邊界往往是材料的薄弱環節。氧氣會沿著這條路徑滲入，裂紋也會沿著這個邊界擴展。因此，瞭解邊界的性質是預測壽命的核心關鍵。

轉換為圖的方法源自於簡單的構想：將單一晶粒設為點，即節點；若兩個晶粒相鄰接觸，則用線，即邊將兩者相連。如此一來，複雜的顯微鏡照片就轉變為清晰的關係圖。相較於照片，人工智慧更容易解讀這種關係圖。

節點中包含了晶粒的資訊，諸如晶粒的大小、形狀與方向，並且也會放入該位置的溫度與應力。應力是指壓迫或拉扯物體的作用力強度。如此一來，單一節點便能概括該晶粒的狀態。

邊中則包含了邊界的資訊，例如兩個晶粒之間的取向差、邊界的面積與方向，以及因氧化而受損的程度。取向差越大的邊界，氧氣往往越容易滲透。

這種方法已在其他材料上進行過測試。2023年一個研究團隊將此圖形方法應用於鋼材，分類出鋼材各晶粒中疲勞損傷嚴重的區域。疲勞是因反覆承受作用力而產生的損傷。他們將EBSD分布圖轉換為圖結構進行訓練。在這項研究中，圖形方法展現了辨識個別晶粒損傷位置的實用性。不過，該研究處理的是鋼材的疲勞分類，並非預測陶瓷的壽命、潛變斷裂或隨時間變化的研究。

將這種圖形方法移植到陶瓷的壽命預測中，是本書所提出的方向。針對陶瓷的實證目前尚未完成。以下的說明並非經過驗證的事實，而是描繪了未來研究發展的方向。

處理邊界資訊的新方法也相繼出現。2026年一個研究團隊透過圖學習填補了EBSD分布圖中的空白處。這是一項依據結晶學規則來填補測量遺漏區域的技術。該方法將結晶規則融入人工智慧中，以避免填入錯誤的取向。由於材料數據並非總是完整，因此這種補全技術非常實用。

圖形方法具有優於照片之處。照片處理的是一個個像素，因此本身無法得知晶粒從何處開始、在何處結束。圖結構則將晶粒整合為單一單元，更接近人類觀察材料的方式，因而更容易學習晶粒之間的關係。

圖結構即使尺寸不同也很容易處理。照片必須具備固定的尺寸，而圖結構無論晶粒數量增減都能以相同方式處理。由於不同材料的晶粒數量各異，這種特性非常實用。我們可以嘗試將從小試片中學習到的規則應用於大型組件。不過，當尺寸變大時，缺陷分布與溫度梯度也會改變，因此仍需要在大型組件上進行再次驗證。

如此建構的圖結構亦可轉移應用於陶瓷，因為陶瓷也是由晶粒與晶界所組成。超高溫陶瓷的氧化與潛變同樣始於晶界。潛變是材料長時間承受作用力而緩慢伸長變形的現象。因此，這種圖形方法成為預測陶瓷壽命的基礎。

5.2.2 同時考量鄰域與時間的圖學習

現在將時間的流動加入圖結構中。損傷並非瞬間結束，而是在熱與力反覆作用下逐漸累積。因此，即使是同一種材料，圖結構也會隨著時間而改變。追蹤這種變化正是時空模型的工作。

首先觀察空間層面。單一品粒的狀態會受到鄰近晶粒的影響。若相鄰晶粒承受較大的力，該力也會傳遞至自身的晶粒。匯集這些鄰近資訊的計算就是圖卷積。每個節點接收鄰近節點的資訊以更新自身的狀態。

模型不會對所有鄰近節點一視同仁。有些邊界對損傷的貢獻較大，有些則較小。因此，模型會給予不同的鄰近節點不同的權重。決定該權重的方式即為注意力機制，這是一種將更多關注放在重要鄰近節點上的方法。

將物理知識融入注意力機制是核心關鍵。若邊界的取向差較大，邊界能就較高；邊界能較高時，氧氣更容易進入。將這類物理規則反映在權重計算中，模型即便在數據較少的情況下也能避免得出荒謬的結論。

時間層面的處理方式亦十分相似。過去的狀態決定了未來的狀態，今日的損傷疊加在昨日累積的損傷之上。模型學習這一時間序列鏈條，為此採用了處理時間順序的神經網路結構。

本節所探討的重要損傷具有方向性。在陶瓷複合材料中，基體通常會先產生微細裂紋，纖維與基體的界面隨後沿著這些裂紋發生剝離。氧氣趁虛而入，使氧化層不斷擴展。損傷通常會沿著受力與氣體流動的方向擴散。

這種具方向性的損傷對材料壽命有重大影響。當裂紋與界面剝離朝單一方向連通時，該方向便會弱化。氣孔若相互連通，氧氣通道便會擴大。夾在晶界中的玻璃相在移動時也會傳遞損傷。這些變化會改變潛變速率並加速斷裂。斷裂是指材料無法承受負荷而斷開的瞬間。

晶界滑動也是本節探討的重要損傷機制。在高溫下，晶粒會沿著晶界相互滑動，類似於濕磚塊相互滑移的景象。這種滑動會加劇潛變變形。邊界的方向與性質決定了滑動的幅度，因此包含邊界資訊的邊至關重要。

高溫氣體通常朝單一方向流動並推擠表面，因此陶瓷的損傷也具有方向性地發展。時空圖模型試圖將這種方向性納入學習中，藉此預測損傷將朝何種方向擴展。然而，此類方向性預測目前仍缺乏足夠的驗證數據。

處理時間維度有兩種方式：一種是按順序讀取時間序列的方式，類似於從頭閱讀句子；另一種是直接處理變化速率的方式，學習損傷擴大的速度。兩種方式都能涵蓋損傷累積的過程。

注意力機制是當今人工智慧的核心工具。翻譯文本的人工智慧也採用這種機制，其原理是在句子中更加聚焦於重要的詞彙。在材料圖結構中，則是聚焦於對損傷至關重要的鄰近節點。相同的注意力原理同時應用於語言翻譯與材料分析之中。

這種時空圖方法仍是一項發展中的技術。針對陶瓷複合材料的大規模實證尚不多見。要做出良好的預測，需要大量優質的數據，然而收集超高溫試驗數據本身就非常困難。因此，我們需要下一小節中將探討的物理定律之協助。

5.2.3 考量方向性的潛變斷裂與融入物理規則的學習

潛變是材料長時間承受作用力而緩慢伸長變形的現象，如同懸掛許久的曬衣繩逐漸下垂一樣。在高溫下，這種現象會加速發生。火箭組件在處於高溫狀態下會長時間承受負荷，因此潛變成為決定火箭組件壽命的關鍵變數。

潛變損傷會因方向不同而以不同方式累積，這種現象稱為非等向性。非等向性是指不同方向具有不同性質的特徵，如同木材容易順著紋理方向裂開一樣。材料通常會在多個方向同時承受作用力，這稱為多軸負荷。

研究人員將這種損傷歸納為單一變數，稱為損傷變數。損傷變數為0代表材料完好無損；為1則代表該處已經斷裂。隨著損傷擴大，剩餘部分承受的作用力會增加，損傷擴大的速度也會加快。這種回饋機制會導致損傷失控擴大，進而加速斷裂。

溫度升高時，潛變會加速，這是因為原子運動更加劇烈。這種溫度相依性可透過指數函數來表示。溫度即便只上升一點，損傷速率也會急劇增加。因此，降低表面最高溫度的操作至關重要。前一節的塗層與本節的熱流在此交會。

氧化會使這種損傷加速惡化。隨著氧化層增厚，晶界會被削弱。因此，在損傷規律中需將氧化厚度一併納入考量。這意味著不能將潛變與氧化分開看待，而必須結合處理，因為在火箭環境中，這兩者總是同時發生。

此處有一條重要的物理規則：損傷只會單向增大。一旦產生裂紋，便不會自行癒合；隨著時間流逝，損傷變數也不會減少。這條規則稱為損傷的不可逆性，與熱力學第二定律有著相同的脈絡。

若人工智慧違反這條規則，預測就會出錯。如果得出損傷減少的答案，便與現實相悖。因此在學習過程中會引入懲罰機制，當輸出違反規則的答案時，就會被賦予很大的損失值。將這種懲罰項納入損失函數的方法，就是物理資訊學習。

物理資訊學習中還會加入其他規則，力的平衡便是其中之一：在同一個位置上，推力與拉力的總和必須維持平衡；同時也會納入質量不會憑空消失或產生的守恆規則。將這些規則加入損失函數中，模型就能避免得出違背物理定律的答案。

斷裂準則亦會同時考量方向性。材料對拉伸力的承受度較弱，因此會特別檢視拉伸力最大的方向，同時也會考量內部膨脹的壓力。將來自多個方向的作用力統合成單一的危險度指標，該危險度便決定了損傷擴展的速率。

這種方法的根源是物理資訊神經網路。2019年Raissi研究團隊確立了這一概念。他們將物理方程式直接納入神經網路學習中。這是即使數據稀少，物理規則也能填補空白的構想。這個構想直接延伸至陶瓷的壽命預測。

物理規則的真正價值體現在預測的拓展上。實驗數據通常集中在較低溫度。然而真正想了解的是攝氏2000度附近的行為。這種高溫下的數據幾乎不存在。只要有物理規則，即使在缺乏數據的領域也能做出合理的預測。

不過這種方法也有其局限。如果錯誤地引入物理規則，預測效果反而會變差。設定各規則之間的權重也是一項棘手的工作。我們無法跳過利用實際斷裂數據進行驗證的步驟。因此，人工智慧預測並非取代實驗，而是作為減少實驗次數的工具來使用。

5.3 設計纖維編織與塗層的生成模型

上一節探討了預測已製成材料的壽命。本節則轉換方向。先確定所需的性能，再反向尋找能實現該性能的結構。這稱為逆向設計。若以料理為喻，就如同先決定想要的風味，再尋找相應的食材配方。

本節的對象是三維編織纖維結構與界面塗層。也就是決定以何種角度編織纖維、塗布多厚塗層的問題。為此，我們使用稱為擴散模型的生成式人工智慧。擴散模型是一種從模糊雜訊中塑造出清晰結構的方法。在此基礎上，更加入了即使方向改變、結果也不受影響的性質。

5.3.1 立體編織纖維結構與不受方向影響的學習

三維編織複合材料是將纖維束以立體方式編織而成的材料。這與從三個方向緊密編織的籃子十分相似。一般的複合材料是透過堆疊薄層製成的。這樣一來，層與層之間較為脆弱，容易分離。這稱為層間剝離。

三維編織消除了這個弱點。由於纖維在多個方向相互交織，因此沒有層界線。這樣就不容易產生層間分離的損傷。這對於高超音速前緣等承受巨大熱衝擊的部位非常有利。熱衝擊是指急劇升溫或降溫時所產生的損傷。

編織方式有多種類型。有的將纖維朝四個方向編織，有的則朝更多方向編織。方向越多，越能均勻承受各種載荷。但相對地，編織工作也會變得更加困難。因此，必須選擇符合零件用途的編織方式。這種編織方式的選擇，也屬於逆向設計處理的範疇。

問題在於編織結構並非總是完美無瑕。在實際製造中，纖維會發生扭曲。也可能因受壓而導致截面變形。編織角度也會有些許偏差。塗層厚度在不同位置亦不均勻。這些波動會導致力量集中在特定位置。

這種波動是以機率來處理的。因為並非所有製品都完全相同，而是存在些許差異。因此，我們處理的不是單一的標準結構，而是結構的分佈。擴散模型非常適合處理這種分佈。擴散模型能夠生成多種合理的可能結構。

在此，稱為等變性的性質至關重要。等變性是指當物體旋轉時，結果也會以相同方式旋轉的性質。如果將零件向左旋轉，預測的力量也必須隨之向左旋轉。若缺乏這種性質，相同的結構會因放置方向不同而得出不同的判斷，這違背了物理規律。

在三維空間中，物體既可以旋轉，也可以平移。有一種數學工具能同時處理這兩種運動。這稱為特殊歐幾里得群。名稱雖然艱澀，但含義十分簡單。它是一套將旋轉與平移結合處理的規則集合。我們設計的人工智慧必須始終

遵循這套旋轉與平移規則。

這類等變擴散模型最初是在分子設計領域發展起來的。2025年Chen研究團隊提出了結合多尺度圖的等變擴散模型。他們利用該模型設計了三維分子。分子同樣是在三維空間中旋轉與平移的對象。因此，相同的數學原理也能遷移至纖維結構中。不過，該研究所探討的是分子，而非陶瓷纖維編織。纖維束、編織約束、孔隙率以及製造可行性尚未透過該模型進行驗證。將其應用於陶瓷編織，正是本書所勾勒的發展方向。

我們來看一個例子，說明等變性為何如此重要。試著將同一顆螺絲隨意擺放在桌上。螺絲的強度與其放置方向無關。人工智慧也必須遵循這一事實。如果沒有等變性，人工智慧就會對同一顆螺絲在不同方向上做出不同的判斷。這樣一來，就必須針對每個方向分別收集數據，導致學習資源的大幅浪費。

遵循等變性可以節省數據。僅憑單一方向的數據就能處理所有方向。在材料數據極為珍貴的情況下，這種節省效果非常顯著。因此，它非常適合超高溫陶瓷等數據稀缺的領域。這可以看作是將物理定律銘刻在結構中的一種方式。

總結來說，三個要素在此交會：三維立體結構、機率性波動，以及不受方向影響的性質。將這三者融合在同一個模型中，才能如實反映實際製造中的多樣性。接下來的小節將探討該模型如何塑造結構。

5.3.2 從雜訊中重建結構的擴散模型

擴散模型的基本構想分為兩個階段。前一階段是加入雜訊使結構模糊的過程；後一階段則是從雜訊中重建結構的過程。人工智慧學習的正是這一重建過程。這就如同將一滴墨水在水中擴散的過程倒放一般。

我們先看前一階段。在清晰的纖維結構中逐步加入雜訊。隨著時間推移，結構變得愈發模糊。最終只剩下完全的雜訊。這個過程依照特定規則緩慢進行。該規則稱為雜訊排程。

後一階段則是將此過程逆向進行。從雜訊開始，逐步重建結構。每一步都去除少許雜訊。此時，有一個數值會指示該朝哪個方向去除雜訊。這稱為分數。分數指向使結構更加合理的生成方向。

人工智慧學習的正是這個分數。它觀察模糊的結構，並推測出通往清晰結構的方向。訓練完成後，即使從純粹的雜訊中也能塑造出結構。這種方法稱為基於分數的擴散。現今的影像生成人工智慧也是根據相同原理進行繪圖。

這種方法之所以適合材料設計是有原因的。材料結構並非只有單一標準答案。存在著多種能夠達到相同性能的結構。擴散模型能夠生成這些多樣的候選方案。接著研究人員可以從中挑選易於製造的結構。它提供的不是單一答案，而是多種選擇，這一點非常實用。

在此加入條件約束是逆向設計的核心。隨機生成任何結構是沒有實用意義的。必須生成具備所需性能的結構。因此，我們將目標性能作為條件輸入。目標中包含了熱導率、抗拉強度、斷裂韌性、燒蝕速率等指標。

斷裂韌性是抵抗裂紋擴展的能力。燒蝕速率是表面被侵蝕剝落的速度。將這些數值設定為期望的水準，模型就會挑選並塑造出符合該條件的結構。我們也可以調節目標條件的引導強度。

這種基於條件約束的技術已應用於多種材料中。2025年一個研究團隊提出了引入物理約束的三維擴散模型。他們根據目標性能設計了纖維增強聚合物複合材料。在設定所需的應力-應變曲線後，反向尋找相應的結構。這種方法確保了在生成過程中直接遵循物理規則。

若條件約束過強，則會產生其他問題。如果只一味追求目標性能，可能會生成無法製造的結構。這是在紙面上看起來很完美、但實際上無法編織出來的結構。因此，必須讓模型在可製造的範圍內尋找答案。其方法是將製造規則一同納入約束條件中。在性能與可製造性之間取得平衡，正是逆向設計中最具挑戰性的部分。

要將這種方法應用於陶瓷複合材料，還有重重難關需要克服。必須收集大量的陶瓷三維結構數據。這些數據是透過X光斷層掃描獲得的。X光斷層掃描與醫院的電腦斷層掃描原理相同。無需切開零件，就能立體觀察其內部結構。如此獲取的結構數據便成為模型的基礎養分。

收集數據相當耗時。掃描一個試樣需要很長時間。將拍攝所得的數據分割為顆粒與纖維也十分費工。因此數據總是匱乏。前述的等變性有助於緩解這種匱乏，因為它能利用較少的數據學習更多種情況。

5.3.3 同步確定纖維角度與塗層厚度

逆向設計模型需要做出兩項決策。一是纖維的編織角度，二是界面塗層的厚度。這兩者極大程度地決定了材料的強度與耐熱性能。

先來看纖維角度。外力通常主要作用於特定方向。火箭噴嘴承受來自內部的推擠力量；高超音速前緣則承受沿氣流方向的剪切力。當纖維依受力方向排列時，材料便能良好地承受載荷。因此，模型會考量受力狀態來確定編織角度。

塗層厚度同樣至關重要。在此必須區分兩種類型的薄膜。一種是置於纖維與基體之間的薄界面層。該界面層由氮化硼或熱解碳製成。這層薄膜能防止裂紋直接切斷纖維。裂紋會沿著薄膜滑移，從而分散應力。若界面層過薄，此效果便會減弱；若過厚，則會引發其他問題。

另一種是塗覆在材料外部的環境障礙塗層。這種塗層能阻擋氧氣與水蒸氣滲入內部。稀土雙矽酸鹽是這種外層塗層的候選材料。該材料在高溫下能有效阻隔氧氣。界面層與外層塗層在位置與功能上各不相同。有時也會將兩層膜堆疊成多層結構，讓各層分別承擔不同的功能。

逆向設計模型同時處理這兩項決策。它試圖在提高強度的同時降低熱應力。這兩個目標往往相互衝突。顧及了一方，就難免犧牲另一方。這類問題稱為多目標最佳化。模型能在強度與熱應力之間尋找到良好的平衡點。

力量集中在某一處的現象稱為應力集中。這就像衣服總是從某一根脫落的線頭開始撕裂一樣。應力集中較大的部位會最先產生裂紋。因此，設計致力於均勻分攤受力。這正是精細調整纖維角度與塗層厚度的原因所在。

在尋求平衡的同時，也要兼顧平滑過渡。若纖維突然折彎，力量就會集中在該處；塗層厚度急劇變化時也是如此。因此，模型會引導角度與厚度平滑過渡。其具體方式是對角度或厚度劇烈變化的設計施加懲罰項。

這類逆向設計目前仍接近概念驗證階段。對於能將特定性能數值提升多少的主張，必須謹慎看待。必須驗證模型生成的結構是否確實具備該性能。這種驗證仍需回歸製造與實驗測試來進行。人工智慧主要承擔縮小候選範圍的角色。

2026年出現了透過文本給予條件約束的生成研究。一個研究團隊利用描述目標性質的語句生成了微觀結構。這項工作目前仍屬尚未經過同行評審的早期研究。然而其方向十分明確：即由人類描述所需的性能，人工智慧負責塑造相應結構的趨勢。這種趨勢可望延伸應用於陶瓷複合材料的設計之中。

5.4 連結微觀世界與整體零件的熱流

本節探討材料內部的熱流傳遞。熱是決定材料壽命的關鍵。唯有掌握熱流向何處、流速有多快，才能預測溫度；唯有掌握溫度，才能進一步預測後續的氧化與潛變速率。

問題在於熱流傳遞是由微觀世界所決定的。原子的振動傳遞著熱量。然而我們想知道的卻是整個零件的宏觀溫度。這就需要連結微觀世界與宏觀世界。這種連結稱為多尺度銜接。本節將說明如何利用深度算子神經網路來實現這一銜接。

5.4.1 從原子振動計算熱傳導（格林-久保分子動力學）

在陶瓷中，熱量是透過原子的振動來傳遞的。這種振動的量子粒子稱為聲子。將聲子想像成聲音的粒子便容易理解。振動沿著晶格傳播並傳遞熱量。這種振動傳播的順暢程度決定了熱導率。

在高溫下，這些振動會相互碰撞。聲子之間的碰撞會擾亂熱流傳遞。晶界、缺陷以及摻雜的原子也會造成振動散射。這種散射越多，熱傳遞就越慢。要理解超高溫陶瓷的熱傳導，就必須掌握這種散射現象。

高熵陶瓷在這一點上相當獨特。由於多種元素混合，晶格並不規則。這種不規則性會強烈散射振動。結果導致熱量不易傳播。如果以熱障遮蔽為目標，這種性質將大有裨益，因為表面的熱量較不易傳入內部。

計算這個微小世界的方法就是分子動力學。在電腦內部讓原子一個個動起來。追蹤原子如何振動與碰撞。這種計算處理奈秒級別的短暫時間。奈秒是十億分之一秒。就是如此微小而快速的世界。

導出熱導率的公式就是格林-久保公式。該公式是長期觀察熱流波動的方式。這與觀察平靜水面的漣漪來了解水的性質相似。它收集原子自行產生的熱流漲落。從這些漲落中計算出熱導率。該公式由格林和久保於1950年代建立。

計算的準確度取決於對原子間作用力的了解程度。處理這種作用力的規則稱為原子間勢。過去使用的是人工制定的簡單規則。這種規則雖然快速，但準確度較低。相反地，量子計算雖然準確，卻太過緩慢。

此時機器學習原子間勢（MLIP）架起了橋樑。人工智慧學習量子計算結果來預測作用力。能以飛快的速度達到接近量子計算的準確度。本書前面的章節對此方法進行了詳細探討。超高溫熱導計算中也使用了MLIP。

近期的研究展現了這種組合的威力。2021年一個研究團隊利用MLIP研究了二氧化銦。他們同時計算了隨溫度變化的相變與熱傳導。透過格林-久保方法導出了熱流。該方法完整涵蓋了原子振動的複雜影響。

這項計算存在需要指出的限制。格林-久保方法求得的是材料處於平衡狀態時的熱導率。此數值說明了材料內部的基本性質。然而發生燒蝕的表面並非處於平衡狀態。在該處，輻射與表面化學反應在很大程度上左右了熱量。因此僅憑格林-久保數值無法完整解釋表面的熱現象。將此數值作為組件內部熱傳導的輸入參數較為適當。

為何非得深入到如此微小的世界？直接測量熱導率不行嗎？在超高溫下進行測量相當困難。要測量攝氏2000度的陶瓷內部並不容易。隨著氧化進行，材料本身也會改變。因此需要透過計算獲取數值的途徑。

計算還有另一個優點。即使是尚未製造的成分也能提前預覽。高熵陶瓷有著無數種組合。要將這些全部製造出來並進行測量是不可能的。計算能提前揭示候選成分的熱導率。如此便可僅挑選有潛力的組合實際進行製造。

這種趨勢目前仍在延續。2026年的一項研究利用格林-久保與MLIP預測了極低的熱導率。在多種材料中，這種組合正逐漸確立地位。不過計算仍然需要大型電腦。時間截斷或統計漲落等誤差也需要處理。因此會進行多次計算並取平均值。

在此驗證的原則也是相同的。計算值必須與實驗值相互對照。使用幾種已知的材料對計算進行測試。若計算與實驗吻合良好，便能對新材料產生信心。未經過此對照過程的數值僅供參考。計算與實驗是相互驗證的雙眼。

5.4.2 整體組件的熱流方程式

前一個小節探討了極微小的世界。現在將視野擴大到整個組件。組件的溫度隨位置而異，隨時間而變。處理這種變化的規則就是熱傳導方程式。方程式雖以數學式書寫，但其涵義可以用語言解釋。

熱傳導方程式的意義很簡單。某一位置的溫度變化由流入熱量與流出熱量的差值決定。熱量由高溫處流向低溫處。這種流動的速率就是熱導率。前面所計算的該數值便應用於此。

這個方程式之所以困難有幾個原因。首先，熱導率隨溫度而變化。溫度上升，熱導率就會改變。這稱為非線性。非線性是指原因與結果並非直接成正比的關係。此外，材料在各個方向上的性質有所不同。沿著纖維排列的方向，熱量更容易傳導。

再加上材料本身發生變化的問題。隨著氧化進行，熱導率會改變。表面被磨損剝蝕時，厚度會減少。因此方程式的數值隨時間而變。前一節的氧化與潛變和本節的熱流交織在一起。因此不能將這些多重現象分開，而必須一併求解。

邊界上發生的情況也相當複雜。極音速表面疊加了多種熱量。空氣加熱帶來的熱量流入。還有表面以光的形式釋放熱量的輻射。這是熾熱物體發出紅光並散失熱量的現象。在此之上更增添了化學放熱。

化學放熱產生於原子在表面重新聚集之時。在極音速下，空氣分子會分解為原子。當這些原子在表面重新配對時便會釋放熱量。這稱為催化複合。此熱量的大小依表面材料而異。因此選擇何種材料在很大程度上左右了表面溫度。

將所有這些熱量納入單一方程式的邊界條件中。將流入的熱量、排出的輻射以及化學放熱放在一起。時間也隨之流逝。熱量沿著飛行軌跡持續變化。這稱為非穩態。這意味著處理的是流動的過程，而非靜止的單一瞬間。

求解此方程式的傳統方法是有限元素法。將組件細分為微小片段。求解每個片段的方程式並加以拼接。這種方法雖然準確，但計算耗時長久。每個時間點都需要重複計算。要在即時狀態下求解整個馬赫7飛行軌跡相當困難。在火箭與極音速開發中需要快速的答案。每當修改設計時都必須重新計算溫度。在測試過程中需要接近即時的預測。緩慢的計算無法滿足這些需求。因此，下一個小節的人工智慧算子應運而生。

5.4.3 將函數轉換為函數的神經網路 (DeepONet)

深度算子神經網路是學習將函數轉換為函數之關係的人工智慧。這被稱為DeepONet。一般的神經網路輸入數字便輸出數字。DeepONet則是輸入函數便輸出函數。這裡的函數是指隨時間變化的熱輸入之類的事物。

這個構想由Lu研究團隊於2021年整理提出。他們建立了學習算子的神經網路理論與架構。該研究植根於一項數學定理。即算子可以用神經網路來逼近的定理。該逼近定理成為支撐DeepONet的理論基礎。

DeepONet由兩個網路組成。一個是讀取輸入函數的網路。另一個是讀取待求答案之位置與時間的網路。將兩個網路的結果相乘以導出答案。前面的網路稱為分支，後面的網路稱為主幹。分支與主幹結合以輸出溫度。

為什麼將函數轉換為函數的工作如此重要？熱問題的輸入並非單一數字。隨時間變化的氣動加熱就是輸入。輸出也是隨位置與時間變化的溫度場。此類問題是將函數與函數相連結的關係。DeepONet能完整學習這種關係。

DeepONet的優勢在於速度。一旦完成學習，面對新的輸入也能立即給出答案。不必像有限元素法那樣每次都從頭求解。能夠快速瀏覽多種飛行條件。非常適合在不斷更改設計的同時觀察溫度。

問題在於訓練資料。要學習出良好的答案，需要大量準確的資料。然而產生準確資料的代價高昂。因為有限元素計算與分子動力學計算耗時漫長。資料不足時，人工智慧就無法良好學習。多保真度方法解決了這個問題。

保真度意指計算有多麼精準。高保真度是準確但代價高昂的計算。低保真度是粗略但成本低廉的計算。多保真度則是同時使用這兩者。大量收集低成本資料，僅少量收集高成本資料。

這種構想類似於打底與塗覆。先透過低成本計算勾勒出大體輪廓。再利用高成本計算在其上進行精細塗覆。人工智慧學習低保真度答案與高保真度答案之間的差異。此差異稱為殘差。只要學習了殘差，即使只有少量的高成本資料也能提高準確度。

2022年Lu研究團隊將這種多保真度DeepONet應用於奈米熱傳。他們處理的是極微小世界中的熱流問題。多保真度方法以相同數量的高成本資料大幅降低了誤差。同時大幅減少了高成本資料的需求量。不過該研究針對的是奈米熱傳。並非連結超高溫陶瓷之氧化、燒蝕與馬赫7熱負載的實證。

在此也解釋一下均質化這個詞。陶瓷複合材料中纖維與孔隙交錯混雜。若逐一處理這種複雜結構，計算量將難以負荷。因此將微小區域轉換為平均性質。這稱為均質化。低保真度計算利用這種平均性質描繪出大體輪廓。

在此也指出連結這兩個世界為何如此困難。原子世界以奈秒為單位運作。組件世界處理的則是數百秒。時間尺度的差距超過十個數量級。空間尺度的差距也同樣懸殊。要一次計算跨越此一鴻溝是不可能的。

在陶瓷熱結構中以這種方式連結兩個世界，是本書所提出的途徑。低保真度成為簡化的均質化模型。高保真度則成為結合分子動力學與有限元素的精密分析。呈現出由人工智慧連結這兩者的藍圖。如此一來，極微小世界的熱導便可延伸至組件溫度。這種連結在陶瓷熱結構中尚未獲得廣泛驗證。

5.4.4 融入物理規則的學習與提升速度

人工智慧即使速度再快，也不能隨意給出答案。答案必須遵守物理定律。因此在學習中融入了物理規則。這種方法與前一節的壽命預測具有相同的根源。

首先進行擬合資料的學習。同時擬合低保真度資料與高保真度資料。引導人工智慧的答案接近資料。對答案與資料之間的差異給予懲罰。此懲罰稱為損失。

在此基礎上加入遵守方程式的學習。將人工智慧的答案代入熱傳導方程式中。若答案能良好滿足方程式，懲罰就很小。若偏離，懲罰就很大。如此一來，即使在缺乏資料的位置，也能給出符合物理規律的答案。

融入物理規則後，即使資料稀少也能維持成效。純粹的資料學習需要大量資料。資料不足時，其間的空隙會被胡亂填補。物理規則利用方程式填補了這一空白。這非常適合超高溫資料稀缺的陶瓷問題。即使資料少也能維持成效，是物理資訊學習的一大優勢。

邊界條件也以相同方式融入。使表面保持熱平衡。流入的熱量與排出的輻射必須吻合。若違反此規則便給予懲罰。表面溫度對材料壽命有著重大影響，因此該條件至關重要。

將這些多種懲罰匯總為一。把資料懲罰、方程式懲罰和邊界懲罰相加。為各項懲罰賦予權重。人工智慧學習使整體懲罰降至最低。如此便能做出迅速且符合物理規律的預測。

要融入物理規則，就需要進行微分計算。必須衡量溫度隨位置與時間變化的幅度。有一項技術能夠自動計算此微分。這稱為自動微分。只不過這種計算負荷沉重，會降低速度。

因此會採用多種減輕運算負擔的方法。透過分割計算來減少重疊部分。利用平滑函數變換座標以簡化微分。透過這些最佳化，可獲得遠快於傳統計算的推論速度。不過具體的加速倍數或誤差值因問題而異。這些數值應僅引用自經過驗證的案例。

這種方法的價值在設計階段得以彰顯。改變噴嘴形狀，溫度分佈就會改變。使用傳統計算，每次修改都需要漫長等待。人工智慧算子則能立即顯示新的溫度。這樣一來，一天內就能比較數十種形狀。設計者能更快找到最佳的解答。

在測試現場也相當實用。發動機測試過程中需要接近即時的預測。必須預先掌握哪個位置會達到危險溫度。人工智慧算子能快速給出這種預測。只不過必須持續利用測試資料進行校正才具可信度。縮小預測與實測差距的工作持續進行。

這種方法的局限性也很明確。若錯誤設定物理規則，答案就會變差。確定各規則間的權重也相當費工。由於超高溫實際資料稀缺，驗證亦很困難。因此這項技術目前仍處於研究與測試並進的階段。與其說是用來替代測試，不如說是作為減少測試次數的工具。

整理

本章探討了火箭與極音速飛行器的高溫表面。此處的材料必須同時承受熱、氧化、受力與長時間的考驗。僅靠金屬已不足夠，需要陶瓷材料。碳纖維複合材料與超高溫陶瓷即是其候選材料。預先掌握這些材料的壽命是研發的關鍵。

首先探討了材料如何受損。碳纖維複合材料會因氧氣沿著裂紋侵入而受損。碳化矽則隨溫度與氧氣壓力獲得或失去保護膜。超高溫陶瓷因氧化膜的蒸發與相變導致表面剝落。這一損傷過程便是壽命預測的對象。損傷通常在材料內部悄然開始，因此不能只看表面，而必須洞察內部。

接著探討了人工智慧如何處理這種損傷。將晶粒轉化為點、晶界轉化為線來構建圖結構。在此基礎上加入時間，以追蹤損傷累積的過程。將物理定律納入學習中，以預測資料匱乏的超高溫區域。其中最具代表性的規則便是損傷不可逆。

隨後探討了反向設計。先設定所需的性能，再反推其結構。擴散模型從模糊的雜訊中塑造結構。融入不受方向影響的性質，使其符合物理規律。同時決定纖維角度與界面塗層厚度。擴散模型提供的不是單一答案，而是多個候選方案。接著便由人從這些候選方案中挑選出易於製造的結構。

最後探討了熱流的多尺度整合。必須將原子振動的微觀世界與整個構件的巨觀世界串聯起來。格林—庫波（Green-Kubo）分子動力學計算微觀世界的熱傳導。深度運算元神經網路將該數值轉換為構件溫度。多保真度方法將低成本資料與高成本資料結合在一起。得益於這種整合，能夠快速預測構件溫度。這種快速預測在設計階段與測試現場都大有用處。

所有這些工具都有一個共同點：人工智慧並不能取代試驗。人工智慧負責縮小候選範圍並提早做出預測。最終的確認則由風洞、電弧加熱噴射（Arc-jet）及燃燒試驗承擔。唯有人工智慧與實際試驗攜手並進，研發步伐才能真正加快。

另一個共同點是與物理的結合。本章的人工智慧並非僅依賴資料學習。它將熱力學定律與力的平衡納入學習中。因此即使是資料匱乏的超高溫領域也能處理。這是純粹依賴資料學習難以跨越的高牆。物理與人工智慧的結合正是本章的核心關鍵。

本章的方法彼此相互關聯。熱流預測得出表面溫度。表面溫度決定氧化與潛變速率。氧化與潛變進而導向壽命預測。壽命預測則成為反向設計的目標。這宛如串成了一條完整的鎖鏈。

仍有許多課題有待解決。超高溫環境下的實際資料依然匱乏。反向設計模型所宣稱的性能需要實物驗證。將物理規則納入模型的方式也需要進一步完善。隨著這些課題逐步獲得解決，次世代熱防護系統的設計也將向前推進。熱防護系統是指保護飛行器免受高溫表面影響的整體結構。

韓國也正在踏入這一領域。世界號（Nuri）與次世代運載火箭都涉及高溫零組件。可重複使用火箭必須多次使用零組件。因此壽命預測變得格外重要。結合人工智慧與物理的這些方法便成為其基石。洞悉材料微觀世界的眼光，守護著宏大飛行的安全。

相關佐證資料

- Binner, J., Porter, M., Baker, B., Zou, J., Venkatachalam, V., Rubio Diaz, V., D'Angio, A., Ramanujam, P., Zhang, T., & Murthy, T. S. R. C. (2020). Selection, processing, properties and applications of ultra-high temperature ceramic matrix composites. *International Materials Reviews*, 65(7), 389-444. <https://doi.org/10.1080/09506608.2019.1652006>
- Fahrenholtz, W. G., & Hilmas, G. E. (2017). Ultra-high temperature ceramics: Materials for extreme environments. *Scripta Materialia*, 129, 94-99. <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2016.10.018>
- DiCarlo, J. A., Yun, H. M., Morscher, G. N., & Bhatt, R. T. (2004). SiC/SiC composites for 1200°C and above. NASA Technical Reports Server, 20040191405. <https://ntrs.nasa.gov/citations/20040191405>
- NASA. (2008). Ceramic Matrix Composite (CMC) thermal protection systems and hot structures for hypersonic vehicles. NASA Technical Reports Server, 20080017096. <https://ntrs.nasa.gov/citations/20080017096>
- Wu, T., Wang, Y., Qi, W., Luo, X., Luo, P., Gao, X., & Song, Y. (2026). Predictive constitutive modelling of oxidation-induced degradation in 2.5D woven C/SiC composites. *Materials*, 19(2), 307. <https://doi.org/10.3390/ma19020307>
- Qu, N., Zhou, W., Zhang, W., Liu, Y., Zheng, L., Cao, D., Tan, M., Zhu, J., & Zhang, X. (2026). Research progress and prospects of ultra-high-temperature ceramics: Experimentation, multiscale simulation and data-driven design. *Nanomaterials*, 16(11), 693. <https://doi.org/10.3390/nano16110693>
- Baier, L., Frieß, M., Hensch, N., & Leisner, V. (2024). Development of ultra-high temperature ceramic matrix composites for hypersonic applications via reactive melt infiltration and mechanical testing under high temperature. *CEAS Space Journal*, 17(4), 635-644. <https://doi.org/10.1007/s12567-024-00562-y>
- Peters, A. B., Zhang, D., Chen, S., Ott, C., Oses, C., Curtarolo, S., McCue, I., Pollock, T. M., & Eswarappa Prameela, S. (2024). Materials design for hypersonics. *Nature Communications*, 15, 3328. <https://doi.org/10.1038/s41467-024-46753-3>
- Bianco, G., Nisar, A., Zhang, C., Boesl, B., & Agarwal, A. (2022). Predicting oxidation damage in ultra high-temperature borides: A machine learning approach. *Ceramics International*, 48(20), 29763-29769. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2022.06.236>
- Meng, H., Liu, Y., Yu, H., Zhuang, L., & Chu, Y. (2025). Machine-learning-potential-driven prediction of high-entropy ceramics with ultra-high melting points. *Cell Reports Physical Science*, 6, 102449. <https://doi.org/10.1016/j.xcrp.2025.102449>
- Liu, Y., Meng, H., Zhu, Z., Yu, H., Zhuang, L., & Chu, Y. (2024). Exploring mechanical and thermal properties of high-entropy ceramics via general machine learning potentials. *arXiv*, 2406.08243. 預印本，尚未經同儕審查. <https://arxiv.org/abs/2406.08243>
- Thomas, A., Durmaz, A. R., Alam, M., Gumbsch, P., Sack, H., & Eberl, C. (2023). Materials fatigue prediction using graph neural networks on microstructure representations. *Scientific Reports*, 13, 12562. <https://doi.org/10.1038/s41598-023-39400-2>
- Zheng, B., Wen, J., Choy, Y.-S., & Fei, C. (2026). Physics-constrained EBSD image inpainting via adversarial graph learning: Bridging crystallographic rules and multimodal deep learning. *Expert Systems with Applications*, 298, 129667. <https://doi.org/10.1016/j.eswa.2025.129667>
- Raissi, M., Perdikaris, P., & Karniadakis, G. E. (2019). Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, 378, 686-707. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045>
- Chen, L., Li, Y., Ma, Y., Gao, L., & Yu, L. (2025). Multiscale graph equivariant diffusion model for 3D molecule design. *Science Advances*, 11(16), eadv0778. <https://doi.org/10.1126/sciadv.adv0778>
- Xu, P., Wu, Y., Zarei, A., Ahmed, S., Pilla, S., Li, G., & Luo, F. (2025). Physically constrained 3D diffusion for inverse design of fiber-reinforced polymer composite materials. *Composites Part B: Engineering*, 303, 112515. <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2025.112515>
- Dai, B., Wang, H., & Gui, J. (2026). Property-informed diffusion-based text-to-microstructure generation. *arXiv*, 2606.08150. 預印本，尚未經同儕審查. <https://arxiv.org/abs/2606.08150>

- Lu, L., Jin, P., Pang, G., Zhang, Z., & Karniadakis, G. E. (2021). Learning nonlinear operators via DeepONet based on the universal approximation theorem of operators. *Nature Machine Intelligence*, 3, 218-229. <https://doi.org/10.1038/s42256-021-00302-5>
- Lu, L., Pestourie, R., Johnson, S. G., & Romano, G. (2022). Multifidelity deep neural operators for efficient learning of partial differential equations with application to fast inverse design of nanoscale heat transport. *Physical Review Research*, 4, 023210. <https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.4.023210>
- Green, M. S. (1954). Markoff random processes and the statistical mechanics of time-dependent phenomena. *Journal of Chemical Physics*, 22, 398-413. <https://doi.org/10.1063/1.1740082>
- Kubo, R. (1957). Statistical-mechanical theory of irreversible processes. *Journal of the Physical Society of Japan*, 12, 570-586. <https://doi.org/10.1143/JPSJ.12.570>
- Verdi, C., Karsai, F., Liu, P., Jinnouchi, R., & Kresse, G. (2021). Thermal transport and phase transitions of zirconia by on-the-fly machine-learned interatomic potentials. *npj Computational Materials*, 7, 156. <https://doi.org/10.1038/s41524-021-00630-5>
- Zhang, X., Liu, N., Guo, Q., Shi, G., & Wang, Y. (2026). Beyond Boltzmann transport: Green-Kubo prediction of lattice thermal conductivity with machine-learned potentials. *Journal of Chemical Physics*, 164(7), 074101. <https://doi.org/10.1063/5.0297462>
- Mandal, S., Srivastava, A., Das, T., Singh, A. K., & Maiti, P. K. (2025). Probing lattice anharmonicity and thermal transport in ultralow- κ materials using machine learning interatomic potentials. *Small*, 22(8), 2513476. <https://doi.org/10.1002/sml.202513476>
- Arabha, S., Shokri Aghbolagh, Z., Ghorbani, K., Hatam-Lee, S. M., & Rajabpour, A. (2021). Recent advances in lattice thermal conductivity calculation using machine-learning interatomic potentials. *Journal of Applied Physics*, 130(21), 210903. <https://doi.org/10.1063/5.0069443>

第6章 金屬積層製造（LPBF/DED）製程熱應力建模與原位（In-situ）缺陷感知

引言

試想我們在廚房裡烤蛋糕。把麵糊倒進模具裡放進烤箱，就會烤出一整塊蛋糕。像這樣將材料倒入模具一次成型的方式，是一種古老的製造方法。火箭零組件在很長一段時間裡也是以這種方式製作的。要麼削切大塊金屬，要麼將多個單獨製作的零件拼接在一起。

然而，在火箭發動機的燃燒室與噴嘴內部，有數百條極為細微的冷卻通道穿過。為了保護內壁不受高溫火焰損害，必須讓低溫燃料流經這些通道。這種複雜的內部結構很難靠削切來製造。如果將零件拼接起來，接縫處就會成為脆弱點。

金屬積層製造開闢了一條不同的道路。這種方法透過將金屬逐層堆疊來製作零件。就像3D印表機逐行擠出塑膠堆疊一樣，它將金屬粉末或金屬絲熔化後堆疊起來。即使是內部中空的複雜通道，也能透過一道製程一次成型。由於沒有接縫，脆弱之處也隨之減少。

這種方法賦予了自由，但也帶來了新的隱憂。在將金屬逐層熔化堆疊的過程中，可能會產生微小的孔洞。各層在經歷反覆加熱與冷卻時，零件也可能發生變形。結晶形狀在不同方向上有所差異，強度甚至會偏向某一側。這些缺陷用肉眼很難看見。然而在火箭零組件中，一個微小的缺陷就可能引發重大事故。

本章將探討人工智慧如何協助解決這個問題。人工智慧主要執行三項工作：在製造過程中迅速發現缺陷；取代緩慢的計算以快速預測熱應力與變形；協助隨時調整製程條件。循序了解這三項工作，就能勾勒出自主製造近乎零缺陷火箭零組件的工廠藍圖。

本章所探討的技術背後蘊含著一個理念：僅靠人工智慧是不夠的，僅靠物理學也是不夠的。僅從數據中學習的人工智慧容易受到雜訊干擾，而僅使用物理計算則過於緩慢。將兩者結合，便能彌補彼此的不足。這種結合正是物理資訊機器學習（PIML）的核心，本章介紹的諸多技術就是其具體實例。

6.1 堆疊製造火箭零組件的兩種方法

本節探討的內容

以金屬堆疊製造火箭發動機零組件主要有兩種代表性方法。一種是在鋪平的薄金屬粉末上照射雷射的方法；另一種則是將金屬粉末或金屬絲送入雷射焦點並同時熔化堆疊的方法。這兩種方法所製造零件的尺寸與精度各有不同。

此外，本節還將介紹火箭中使用的三種金屬。這三種金屬性質各異，製造時的注意事項也不盡相同。我們必須了解金屬在熔化與凝固過程中內部發生的變化，才能理解後文提到的人工智慧技術為何不可或缺。本節透過介紹這三種金屬的性質來奠定基礎。

6.1.1 次世代火箭推進系統與金屬積層製造（Additive Manufacturing）

火箭發動機在極端條件下運作。燃燒室內部的壓力達到汽車輪胎壓力的數百倍。燃料燃燒處的溫度超過3000度。相反地，冷卻通道中流動著接近零下200度的液體燃料。單一零件必須同時承受這種極熱與極冷。

若用傳統方式製造此類零件，過程極為費工。必須逐一削切冷卻通道，並透過稱為硬焊的方法將多個零件拼接起來。硬焊是在金屬之間熔入另一種金屬來進行接合的方法。零件碎片越多，接縫就越多，製造往往需要耗費數月。這些接縫日後很容易成為洩漏或破裂的隱患。

金屬積層製造大幅縮短了這一過程。雷射粉床熔融（Laser Powder Bed Fusion; LPBF）先鋪上一層薄薄的金屬粉末，然後在其上方照射雷射。僅熔化接合所需的位置，再次鋪上一層薄粉末並再次熔化。將這個過程重複數千次，零件便製造完成。這種方法非常適合用於通道密集排列的燃燒室襯套等小巧而精密的零組件。

定向能量沉積（Directed Energy Deposition; DED）的方式則略有不同。它是將金屬粉末或金屬絲送入雷射焦點，一邊熔化一邊堆疊。這就像用筆刷層層疊加顏料一樣，不斷覆蓋堆積金屬。它的堆疊速度快，適合大型零件。製造直徑超過1公尺的噴嘴裙部時通常使用這種方法。

這兩種方法各有優缺點。雷射粉床熔融極為精密但速度較慢，因為必須鋪設數千層薄粉。能夠製造的零件尺寸也受限於成型室的大小。相反地，定向能量沉積成型快速且能製造大型零件，但表面較為粗糙，製造後需要額外的切削與修整工序。

粉末的品質也決定了最終結果。粉末顆粒必須均勻圓潤，才能均勻地鋪成薄層。如果顆粒大小參差不齊，就會產生空隙。粉末若吸收了濕氣，製造過程中就會產生氣泡。因此，粉末必須保存在乾燥狀態下進行管理。優質的零件始於優質的粉末。

這兩種方法都具備將零件一體成型的能力。燃燒室襯套、噴射器頭部、渦輪泵葉輪以及大型噴嘴都可以無縫成型。美國國家航空暨太空總署（NASA）的快速積層製造製程技術專案（RAMPT）一直使用這種方法製造大型噴嘴。根據公開資料，直徑約1.5公尺、長度約1.8公尺的冷卻通道噴嘴僅用90天就堆疊完成。該噴嘴的尺寸相當於太空發射載具大型發動機噴嘴的65%。

該專案也公布了測試成果。在整合多個噴射器、燃燒室與噴嘴的開發測試中，經受住了長時間的燃燒。累計燃燒時間大幅超過1萬秒，點火次數也重複了數百次。這意味著逐層堆疊材料製成的零件能夠承受實際的火箭燃燒。這一成果表明，積層製造正從實驗室走向飛行用零件。

這種方法帶來的優勢在於時間與零件數量。傳統方式需要單獨製作數百個零件碎片並進行拼接，積層製造則將這數百個零件縮減為少數幾個。零件減少，接縫隨之減少，製造時間也大幅縮短。當想要更改設計時，也能迅速重新製作驗證。這種敏捷性提升了開發新發動機的速度。

6.1.2 各類合金的冶金學特性與相變行為

火箭零組件所使用的金屬各有不同的任務。本節將探討三種代表性金屬：Inconel 718、GRCop-42與C-103。冶金學是研究金屬內部結構及其變化的學問。同一種金屬，根據冷卻方式的不同，其內部結構也會有所差異。

這三種金屬各司其職。Inconel 718負責承受受力的高強度零件；GRCop-42負責需要快速散熱的燃燒室壁；C-103則負責直接接觸火焰的噴嘴末端。在同一台發動機內部，三種金屬分擔了不同的任務。因此，需要相應的冶金學知識來完善每種金屬的製造製程。

Inconel 718是以鎳為基底的超合金。超合金是為了在高溫下仍能保持強度而製造的合金。這種金屬廣泛應用於渦輪泵、閥門與高壓管路。它強度高、易於焊接接合，且在高溫下耐受性良好，因此非常適合用於發動機中承受載荷的零件。

問題源於快速冷卻。被雷射熔化的金屬在轉瞬之間凝固。此時，鉕和鉬等元素會聚集在晶界處。這種聚集現象稱為微觀偏析。若偏析嚴重，該位置就會生成稱為拉夫斯相（Laves phase）的脆弱化合物。這種化合物會奪走使金屬強化的元素，進而降低其強度。

因此，Inconel 718在製造完成後需要進行熱處理。將零件重新加熱至高溫，使脆弱的化合物熔解除。隨後降低溫度，誘導生成微小且均勻的強化顆粒。必須經過這個過程，零件才能具備優異的抗疲勞性能。所謂疲勞，是指多次承受力量而逐漸產生裂紋的現象。

這些強化顆粒有其專有名稱。它是由鎳和鉕形成的微小相，稱為雙撇伽瑪相（ γ'' 相）。其化學式為三個鎳原子結合一個鉕原子。Inconel 718的強度絕大部分來自於這個相。它與其他鎳基超合金中常見的單撇伽瑪相（ γ' 相）不同。因此，妥善控制鉕元素是掌握這種金屬的關鍵。

GRCop-42是NASA專為火箭燃燒室開發的銅合金。銅具有極佳的導熱性能。若要迅速帶走燃燒室壁的高溫熱量，就需要這種特性。然而純銅在受熱時會變軟。因此，在銅中添加了少量的鉻和鉕。這兩種元素形成微小顆粒，進而固定並支撐銅基體。

使用雷射製造GRCop-42時存在一定難度。銅對光線具有很高的反射率，就像鏡子一樣會反射掉相當一部分雷射光。因此，為了使其充分熔化，需要高功率雷射或綠光雷射。製造完成後，還需經過高溫高壓熱均壓製程以消除

內部孔洞。經過這道製程後，即使在超過800度的高溫環境下，也能保持良好的導熱性與強度。

我們來探討一下燃燒室壁為何必須具備如此優異的散熱能力。內壁的一側接觸著超過3000度的高溫火焰，另一側則流動著低溫燃料。這道薄壁將兩種極端溫度隔開。如果無法迅速散熱，內壁就會熔化或破裂。因此，高導熱性的銅合金被選用為內壁材料。

這種合金與冷卻通道相輔相成。在內壁內部製作出密集交錯的細微通道，讓燃料流經通道帶走壁面的熱量。通道結構越複雜，散熱就越均勻。一次成型製造這種複雜通道的能力正是積層製造的優勢所在。材料與製造方法彼此成就。

C-103是以鈮為基底的高溫合金。鈮的熔點遠遠超過2000度。因此，它被應用於直接接觸火焰的噴嘴末端或姿態控制推力器。在此基礎上添加少量的鉛、鈦和鋳以微調其性能。在製造大型薄壁噴嘴時，通常使用DED方法。

製造C-103時必須嚴格防範空氣。熔化的鈮會迅速吸收空氣中的氧氣和氮氣。當氧含量超過一定限度時，金屬就會變得脆弱易碎，轉變為像玻璃一樣輕易碎裂的性質。因此，製造室內部會充入氬氣等保護氣體，將氧氣含量抑制在極低水準。

在使用過程中，氧化也是一個重大問題。高溫廢氣中的氧氣會不斷侵蝕鈮。因此，表面會塗覆一層含矽的矽化物保護膜。這層膜能阻擋氧氣接觸金屬。製造時的環境氛圍控制與使用時的保護膜兩者皆不可或缺。這兩項控制措施決定了C-103零件的成敗。

近期的研究深入探討了製造這種金屬的製程。一項2025年的研究利用雷射金屬絲沉積製造C-103薄板並探討了其性質。另一項研究則利用結合多物理場求解的熔池模型繪製了缺陷分布圖。也就是預先描繪出在何種條件下會產生缺陷。有了這種分布圖，就能挑選合適的條件加以應用。在製造之前就找到了避開缺陷的途徑。

6.2 原位 (In-situ) 缺陷感知機制與物理資訊影像模型

本節探討的內容

原位 (In-situ) 意指在製造進行的當下現場觀察。若等到零件全部製造完成後才發現缺陷，為時已晚。如果在製造過程中及時發現缺陷，就能在當場進行修復或終止製程。本節探討在製造過程中即時觀察缺陷的方法。

首先探討缺陷為何產生以及如何產生。接著介紹觀察雷射所形成的微小熔池的設備。最後探討人工智慧如何解讀所觀察到的影像。在此將介紹同時結合物理定律與人工智慧的方法。這種方法正是貫穿全書的物理資訊機器學習 (PIML) 的一個實例。

6.2.1 熔池缺陷形成之熱流體力學機制

雷射熔化金屬粉末時會形成一個微小熔池。這個熔池稱為熔池 (Melt pool)。其直徑小如數根頭髮絲。隨著雷射移動，這個熔池也隨之移動。零件的品質很大程度上取決於這個微小熔池的狀態。

在這個熔池內部，金屬不停地流動。溫度高處與溫度較低處的表面張力不同，這種差異推動熔融金屬四處流動。這種流動稱為馬蘭戈尼對流 (Marangoni convection)。這與裝有熱湯的鍋子表面產生漩渦的景象相似。這種漩渦既可能產生缺陷，也可能消除缺陷。

其中一種缺陷是匙孔氣孔 (Keyhole porosity)。當雷射過強或移動速度過慢時便會產生。強烈的光束深深穿透金屬，形成如鑰匙孔般狹窄而深的凹坑。這個凹坑極不穩定，會突然崩塌。崩塌時內部的氣體被困在金屬中，形成圓形氣泡。這樣被困住的氣泡就是匙孔氣孔。

匙孔並不全都是壞事。適當深度的匙孔能將金屬深層熔化並牢固結合。問題在於匙孔過深且不穩定之時。因此製程致力於維持適當的匙孔深度。雷射強度既不過高也不過低，尋找適當的製程視窗。找到合適的視窗正是製程管制的核心。

另一種缺陷是融合不良 (Lack-of-Fusion; LoF)。與匙孔相反，當雷射過弱或掃描路徑間距過大時就會產生。相鄰的雷射路徑或底層之間無法妥善融合在一起，其間會留下縫隙。這種縫隙形狀尖銳，內部還殘留未熔化的粉末。

這兩種缺陷的危險性質不同。匙孔氣孔呈現圓形，相對較不具危險性。融合不良則形狀尖銳，受力會集中在其尖端。這與尖銳玻璃碎片的尖端容易破裂是同樣的道理。因此，融合不良很容易成為疲勞裂紋的起點。火箭零件承受無數次振動，這種缺陷會帶來巨大的危險。

近期的研究更細緻地劃分缺陷。一項2026年的研究將孔隙分為三種：無孔隙、小於15微米的孔隙，以及大於15微米的孔隙。這15微米是該研究所設定的分類邊界。在該研究中，大型匙孔孔隙危害更大，而微小氣孔在該條件下危害較小。這項研究結合了光電二極體訊號與精密X射線影像來訓練這種分類。

不過，不能直接將此邊界作為合格標準。孔隙的危險性並非僅由尺寸決定，孔隙的位置、形狀、受力狀況、材料以及所需壽命都會共同決定。即使尺寸相同，若靠近表面則更為危險。因此，必須將分類邊界與結構安全標準分開來看。

如此細分缺陷是有原因的。如果對所有孔隙一視同仁，原本完好的零件也會被當作不良品廢棄；反之，若全盤忽視，則會遺漏危險的孔隙。唯有辨別出缺陷的種類與尺寸，才能做出恰當的因應。人工智慧正是負責進行這種細微的區分。

缺陷會留下肉眼可見的前兆。在匙孔產生前夕，熔池的形狀會產生晃動，呈現出凹坑變深變窄的紋理。人眼無法跟上這種快速的變化，而每秒拍攝數萬張的高速相機與人工智慧則能解讀這些前兆。其目標是在缺陷產生之前提前察覺。

粉末飛濺也與缺陷息息相關。飛濺是指雷射強烈照射時熔融金屬飛濺出來的現象。濺出的液滴落在尚未熔化的粉末上，當下一道雷射掃過該位置時便無法妥善熔化。因此，飛濺頻繁發生會導致融合不良增加，飛濺的程度也成為預警缺陷的訊號。

6.2.2 測量熔池溫度的眼睛與物理基準線

要觀察熔池，需要特別的眼睛。熔池極為明亮且變化極快。光學高溫計技術（Pyrometry）是利用高溫物體發出的光來測量溫度的方法。該方法運用了物體越熱發出的光越不同的原理，能夠以非接觸的方式測量物體溫度。

同軸（Coaxial）高溫測量技術是從與雷射行進路徑相同的方向觀察光線。這相當於雷射與相機共用同一個鏡頭，因此無論雷射移動到何處，都能始終正對著熔池進行觀察。每秒拍攝數萬張的高速相機能記錄熔池亮度與形狀的變化。比對兩種波長的光線，便能獲得較不受表面狀態影響的溫度。

這種雙波長方法也並非完美無缺。放射率是指物體發射輻射能力的程度。該方法假設兩種波長下的放射率比值是恆定的。若此假設不成立，所測得的溫度就會產生誤差。飛濺的金屬蒸氣或髒污的鏡頭也會使數值產生波動。因此，必須定期校正測量數值。

僅靠相機是不夠的，必須有基準來比對何為正常、何為異常。羅森塔爾（Rosenthal）熱傳導模型就是其中的一個基準。該模型是1946年提出的經典物理理論，是以解析方式推導出移動熱源加熱金屬時溫度分佈的公式。

羅森塔爾模型只是一個粗略的輪廓。它將金屬視為半無限大塊體，並將熱源設定為一個點；假設金屬的物理性質與溫度無關而保持恆定；忽略了熔化與沸騰時出入的潛熱；也無法涵蓋熔融金屬的流動與蒸發。

因此，該公式僅能提供大致的基準溫度。匙孔崩塌的快速動態無法用該公式來解釋。若需要更精密的基準，則會使用有限元素分析或流體動力學計算。直接將羅森塔爾數值作為即時監控基準線的案例目前仍屬罕見，在此僅作為設立一項物理基準之構想範例。

人工智慧可以將這種偏差作為輸入。透過學習實際溫度場與物理基準之間的差異來預測缺陷。若有了物理基準，人工智慧需要學習的負擔就會減輕。因為即使數據較少，物理規律也能發揮指引作用。物理基準正減輕了人工智慧的學習負擔。

為何即時性如此重要？雷射以每秒數公尺的速度移動，堆疊一層所需的時間極短。產生缺陷的位置很快就會被下一層覆蓋。唯有在被覆蓋之前察覺，才能修復該位置。因此，判斷速度必須達到毫秒等級的快捷。

監測設備也在持續進步。近期的研究提出了用單台相機同時捕捉兩種波長的方法。該方法每秒最高可記錄達10萬張的熔池溫度變化。如此獲得的精密溫度影像，成為以多種方式篩檢孔隙的基礎。唯有具備這種精密的眼睛，才

能準確辨識出孔隙。

6.2.3 物理資訊影像模型的設計原理

現在輪到解讀觀察到的影像了。本節提出了融入物理資訊的影像模型設計原理。首先檢視廣泛使用的影像類神經網路。視覺 Transformer (Vision Transformer) 是將圖像分割成小區塊以觀察彼此關係的類神經網路。它像拼布一樣將照片切片，觀察各個碎片之間如何相互關聯。在熔池影像中，中心明亮的部分、向後拖曳的尾部，以及飛濺粉末的光芒都各不相同。透過解讀這種關聯來辨識缺陷。

這種神經網路的威力在於連結距離較遠的部分。熔池前端的溫度與後方的尾部是相互關聯的。僅看單一碎片無法得知熱量如何流動。視覺 Transformer

能一次比對所有碎片，從而解讀整個熔池的熱流動。這種寬廣的視野有助於捕捉缺陷的前兆。

本書建議在此加入熱傳導定律。讓人工智慧在給出答案時，能夠自行檢查是否符合物理規律。損失函數 (Loss function) 是衡量人工智慧預測誤差程度的分數。我們的構想是在此分數中同時納入缺陷分類誤差、溫度場誤差與物理殘差。殘差是指方程式偏差程度的數值。

融入物理定律有顯著的優勢。相機影像中總是夾雜著雜訊，飛濺的粉末有時也會遮蔽光線。純粹只由數據學習的模型容易受這種雜訊干擾。同時學習了物理規律的模型則具備熱傳導定律這根支柱，即使影像有些模糊，也能維持符合物理原理的判斷。

實際研究也佐證了物理特徵的力量。一項研究從紅外線相機訊號中擷取了以物理為基礎的特徵，並藉由該特徵找出了 Inconel 718 零件中的孔隙。這是因為溫度變化的形態本身就包含了缺陷的線索。從物理中擷取的特徵抗雜訊能力強且意義明確，因此也更容易說明判斷的依據。

速度同樣至關重要。要在製造過程中進行判斷，必須在轉瞬之間得出答案。2026年的一項研究結合了預訓練神經網路與傳統分類器，該方法辨識鎳合金熔池影像的準確率約達0.95，判斷單張影像所需的時間僅為1.15毫秒。雖然該研究尚屬未經同儕審查的早期研究，但仍展現了在工廠現場實現快速判斷的可行性。

融入物理的方式需要權重調節。若物理殘差的權重過高，模型對數據的學習就會不足；若過度追隨數據，則會偏離物理規律。唯有妥善平衡這兩種力量，才能成為優良的模型。尋找這個平衡點正是物理資訊學習的微調工作，且依零件與設備的不同，合適的權重也會有所差異。

在此需區分已驗證之成果與所提出之構想。利用紅外線特徵尋找孔隙以及快速混合模型是實際研究所展現的成果；在視覺 Transformer 中融合熱傳導殘差的架構則是本書勾勒的方向。這在實際零件上尚未經過驗證，人工智慧所作出的判斷仍須透過切割截面與電腦斷層掃描進行再次確認。

6.3 減少大型噴嘴的扭曲變形

噴嘴裙部是安裝在發動機後端、呈喇叭狀的大型零件。它是將薄板如圓錐般環狀堆疊製造而成。這類大型薄件在製造過程中極易發生扭曲變形。本節將探討該變形的原因與防止方法。

首先探討零件內部應力累積的原因，接著介紹取代緩慢計算的高速人工智慧模型，最後探討利用該模型調控雷射運動以減少扭曲變形的的方法。零件越大，這種變形管理就越困難，也因而更加重要。

6.3.1 大型薄板積層製造時的熱應力累積與扭曲變形

殘餘應力 (Residual stress) 是殘留在零件內部的拉伸與壓縮作用力。雖然肉眼看不見，卻始終在內部起作用。讓我們來描繪這種力是如何產生的：當雷射加熱金屬的一條線路時，該部分會膨脹伸長，這是因為被加熱的金屬會膨脹。

當雷射通過後，該線路會再次冷卻。冷卻時它試圖收縮回原本狀態，但底層早已凝固並束縛了這種運動。收縮的力與束縛的力相互抗衡，便在內部殘留了應力。上部累積了拉伸力，下部則累積了壓縮力。

在薄而大的噴嘴裙部中，這種力會引發嚴重的問題。這類似於只拉扯紙張的一側時會產生起伏褶皺一樣。零件會在徑向產生扭曲，或者薄板會突然彎曲。這種突發性的彎曲稱為挫曲 (Buckling)。嚴重時零件甚至會從基板上

脫落。

零件越大，管理就越加困難。因為當層數達到數百層時，熱量會持續累積。堆疊前幾層時與堆疊後續幾層時的溫度狀態完全不同。即使給予相同的雷射條件，結果也會有所差異。因此，大型零件必須監測熱狀態並相應調整條件。

像 C-103 這樣的鈦合金，此問題更為棘手。因為其熔點極高，必須注入大量熱量才能熔化。龐大的熱量會導致巨大的應力。使用該金屬製造大型噴嘴時，變形管理決定了成敗。必須從一開始就將熱分析與路徑設計共同規劃。

變形在製造完成後很難再進行處理。若強行校正已固化的零件，會產生新的裂紋。因此，在製造過程中防止應力累積更為明智。這如同與其得病後治療，不如事先預防一樣。這種預防正是人工智慧預測與主動控制所承擔的任務。後續介紹的代理模型將有助於實現這種預防。

6.3.2 基於熱力學的代理模型 (Surrogate Model)

要預先得知零件內部的應力，就需要進行計算。有限元素分析 (Finite Element Analysis) 是將零件細分為微小單元以計算溫度與受力的方法。雖然非常精確，但對於大型零件而言耗時甚長。因為必須逐一求解數百萬個微小單元，大型噴嘴進行一次分析有時甚至需要數天時間。

取代這種緩慢計算的就是代理模型 (Surrogate model)。代理模型是預先學習緩慢計算結果的高速模型。多層感知機 (Multilayer Perceptron; MLP) 經常被採用。它是通過多個層將輸入轉換為輸出的基本類神經網路。在充分學習了精密分析結果之後，便能估算新條件下的結果。

這個模型接收什麼，又輸出什麼？輸入為雷射功率、移動速度、雷射掃描路徑以及層間等待時間。輸出則是整個零件的殘餘應力分佈與最終變形形狀。精確分析需要數天才能完成的工作，此模型在短時間內即可完成估算。如此一來，便能快速對比多種條件。

速度開闢了新道路。每改變一項條件就要等待數天，便很難找到優良的設計。即使只是估算，只要速度夠快，就能預先篩選數千種條件。僅挑選出優秀的候選方案，再透過精確分析重新確認。代理模型扮演了收窄廣泛候選範圍的濾網角色。

代理模型要學得好，必須有豐富的優質資料。透過在多種條件下預先執行精確分析來收集資料。同時也納入實際製造零件並測量所得的數值。資料越廣泛且均勻，估算就越準確。在未曾學習過的陌生條件下，估算會產生動搖。因此，代理模型僅在已學習的範圍內值得信賴與使用。

近期的研究在這個方向上取得了成果。一項2025年的研究利用機器學習快速估算殘餘應力並減少變形。該研究報告指出，橋狀試樣的彎曲程度大幅減少。預測的應力與精確分析之間的差異也很小。這意味著快速模型已大幅逼近精確分析的水準。

若加入物理資訊，效果會更好。另一項2025年的研究將物理定律融入神經網路，以接近即時的速度預測大型零件的變形。該研究採用稱為神經算子 (Neural Operator) 的結構，學習以廣泛適應多種條件。這項研究雖然是尚未經過同儕審查的早期研究，但依然展示了兼顧快速預測與物理一致性的途徑。

6.3.3 掃描軌跡與層間冷卻時間主動最佳化

現在是以預測為基礎改變實際製程的時候了。掃描軌跡 (Scan path) 是雷射移動的方向與順序。若讓雷射持續朝單一方向移動，熱量就會偏向一側。集中的熱量會留下巨大的應力。因此，必須不斷改變方向，將熱量均勻散佈。

現已發展出多種巧妙的軌跡。有將大面積劃分為小區域並交替填充的方法，也有在每個區域逐步旋轉雷射方向的方法，亦會採用緊密填滿空間的曲線路徑。目標只有一個，那就是將熱流均勻分散至四周，防止熱量偏向單側。

層間等待時間也同樣重要。在前一層依然高溫時就堆疊下一層，熱量便會層層累積。累積的熱量會引發嚴重的變形。因此，需要等待前一層冷卻至一定程度。這段等待過程稱為層間冷卻時間。

主動最佳化（Active optimization）是在製程中即時改變這些條件的方法。光學高溫計能告知當前零件的溫度，代理模型則快速預測下一條路徑的應力風險。綜合這兩者，隨時調整雷射功率、速度與等待時間。這是將人類長期積累的經驗轉化為數字與規則的過程。

調節方法也變得更加智慧。貝氏最佳化（Bayesian Optimization）是透過極少的嘗試來尋找優良條件的方法。它以既有的實驗結果為基礎，聰明地挑選下一次要嘗試的條件。基因演算法（Genetic Algorithm）則是將優良條件相互混合以尋求更佳條件的方法。透過這些方法，可以配合前一層的熱狀態來調整等待時間。

這種調節在每一層都各有不同。底層由於熱量被基板帶走而迅速冷卻，越往上層熱量越不易散去。在這種情況下，就需要增加上層的等待時間。然而，這只是一個例子。熱量累積的程度取決於零件形狀、基板、層面積以及堆疊順序。因此，需要透過感測器觀察每一層的熱狀態來決定等待時間。

若這種方式發揮良好效果，變形將顯著減少。應力分佈更加均勻，最大應力也會降低，零件便能控制在容許公差之內。然而，這種調節必須始終在安全的製程範圍內進行。必須同時兼顧感測器延遲、模型誤差以及設備響應極限。只有先透過試樣確認後，才能應用於真實零件。

數位孿生的概念亦由此萌芽。數位孿生是在電腦中建立實體零件的孿生體。將實際製程中的感測器數值持續輸入至孿生體中。孿生體能即時映照出當前零件內部所發生的情況，並預先展示下一層可能面臨的風險。代理模型正是協助這個孿生體快速思考的大腦。

6.4 控制晶粒形貌

金屬凝固時，內部會生成晶粒。這些晶粒的形貌決定了零件的強度。若晶粒僅朝單一方向拉長生長，各方向的強度就會有所差異。本節將探討隨心所欲控制晶粒形貌的方法。

首先探討晶粒的兩種形貌及其差異。接著介紹根據製程條件描繪晶粒形貌的生成模型。最後探討在製造過程中自主控制晶粒形貌的強化學習控制。肉眼看不見的晶體世界決定了零件的命運。

6.4.1 柱狀晶至等軸晶轉變（CET）與力學各向異性

金屬凝固時，晶粒會以兩種形態生長。柱狀晶（Columnar grain）是如柱子般朝單一方向拉長生長的晶粒，形態接近立著的多根木柱。等軸晶（Equiaxed grain）則是朝各個方向均勻生長至相近尺寸的晶粒，形態接近均勻鋪設的鵝卵石。

這種差異決定了零件的性質。柱狀晶較多時，沿著柱體方向強度較高，橫向強度則較弱。強度與疲勞壽命會隨方向而異。這種性質稱為各向異性（Anisotropy）。這與木材順著紋理容易劈開、橫向則不易劈開是同樣的道理。

對於火箭零件而言，各向異性有時會成為令人擔憂的問題。因為零件會承受來自多個方向的作用力。若僅有單一方向具備強度，較弱的方向就會率先開裂。等軸晶能緩解此問題。它在各方向上強度均勻，且在凝固時亦具備抗裂性。因此，在承受多向受力的零件中，等軸晶更具優勢。

然而，等軸晶並非總是最佳選擇。在潛變或熱疲勞為主要問題的零件中，柱狀晶有時表現更好。潛變是長期受力的緩慢伸長的現象。在熱量僅沿單一方向流動的零件中，定向晶粒有時更具優勢。根據零件所承受的作用力不同，所期望的晶粒形貌也有所差異。

在積層製造中容易形成柱狀晶。這是因為熱量會順著雷射堆疊的方向散去。晶粒會沿著熱量散失的方向如柱狀般生長。其結果是晶粒沿著堆疊方向排列成行。像這樣排列方向偏向一側的晶粒群體稱為織構。依據需求改變這種定向偏向，便是本節的目標。

晶粒形貌主要取決於兩個數值。溫度梯度（Temperature gradient; G ）代表溫度的陡峭程度，表示溫度隨位置變化的快慢。凝固速率（Solidification rate; R ）則是液固介面移動的速度。這兩個數值各自扮演不同的角色。

兩者的比值 G 除以 R 決定了晶粒的形貌。此比值較大時傾向形成柱狀晶，較小時則傾向形成等軸晶。兩者的乘積 G 乘以 R 則是冷卻速率。該數值越大，晶粒就越細化。因此，形貌與尺寸可以分開進行控制。改變雷射功率與速度時，這兩個數值也會隨之改變。

決定形貌的並非只有這兩個數值。作為晶種的微小顆粒、熔融金屬的流動以及重新熔化的程度也會產生影響。底層已生長的晶粒方向也會被繼承。因此，儘管溫度梯度越低且凝固越快越容易形成等軸晶，但情況並非總是如此。必須綜合考量多種數值，才能妥善控制晶粒形貌。

存在著從柱狀晶轉變為等軸晶的臨界點。這種轉變稱為柱狀晶至等軸晶轉變（Columnar-to-Equiaxed Transition; CET）。當溫度梯度與凝固速率超過特定條件時，便會發生這種轉變。若掌握該條件，就能更接近所期望的晶粒形貌。經典理論已用數學公式描繪出了這道分界線。

近期的研究進一步精確修訂了這道邊界。2025年的一項研究建立了根據合金成分預測 CET 的基準。該研究利用機器學習揭示了哪些元素會對晶粒形貌產生重大影響。這意味著僅僅微調成分也能改變晶粒形貌。若將製程與成分結合處理，晶粒控制的維度將大幅拓寬。

針對成分進行分析的機器學習研究亦持續開展。透過數據辨別哪些元素對晶粒形貌具有重大影響。研究結果顯示，矽或碳等元素的含量會改變晶粒形貌。這些研究正在逐步填補晶粒控制的藍圖。

6.4.2 根據製程條件描繪晶粒形貌的生成模型

若想根據製程條件預先觀察晶粒形貌，就需要一種輸入條件即可繪製微觀組織圖像的工具。條件生成對抗網路（Conditional GAN）便是這類工具之一。該神經網路是一種透過輸入條件生成所需圖像的生成模型。此處的條件指的是雷射功率、速度、溫度梯度與凝固速率等數值。將此模型應用於微觀組織控制目前仍處於提議階段。

該模型由兩個部分透過相互對抗來進行學習。生成器（Generator）負責生成微觀組織圖像，判別器（Discriminator）則負責辨別該圖像的真偽。生成器竭力欺騙判別器，判別器則竭力避免受騙。在反覆的博弈過程中，生成器所繪製的圖像將越來越逼真。這與偽造者和鑑定師彼此切磋提升實力的情景十分相似。

此處的真實圖像是電子背向散射繞射（EBSD）影像。此方法利用電子顯微鏡讀取晶粒的方位，並將每個晶粒的方位以顏色標註，如地圖般呈現。生成器學習模仿這種地圖，輸入條件後即可繪製出在該條件下呈現的晶粒方位分佈圖。

此模型若學習良好將極具實用價值。設計者可以在改變製程條件時，預先觀察晶粒會產生何種變化。無需實際製造並切割零件，即可進行推估，從而大幅節省時間與材料。在螢幕上對比多種條件，並挑選出較佳方案。

在實際操作中獲取晶粒方位分佈圖需要繁複的手續。必須切割零件並對表面進行精細研磨，再用電子顯微鏡逐點讀取晶粒方位。要完整讀取大面積區域需要耗費漫長時間。生成模型成為縮短這段漫長過程的捷徑。當然，這條捷徑偶爾仍需透過實際測量進行回溯確認。

但也有需要注意之處。生成模型非常擅長產生看似合理的圖像，然而看似合理並不同於物理上的真實。即使圖像看起來精美，也可能與實際情況不符。因此，需要一併檢驗晶粒尺寸、方位分佈、相比例等物理指標。唯有這些指標與實際吻合，圖像才值得信賴。

將物理規律納入損失函數中，可大幅提高可信度。若生成圖像的晶粒尺寸偏離實際分佈，便會給予懲罰項。如此一來，可引導生成器繪製符合物理規律的圖像，縮小美觀圖像與正確圖像之間的差距。生成模型唯有以物理這把尺進行衡量，才能應用於火箭零件。

6.4.3 在製造過程中控制晶粒形貌的強化學習

現在是在製造過程中自主控制晶粒形貌的時候了。強化學習（Reinforcement Learning）是透過嘗試與獎勵來學習良好行為的方法。這與嬰兒在跌跌撞撞中學習走路的過程相似。表現良好時給予獎勵，表現不佳時給予懲罰，逐漸增加能獲得豐厚獎勵的行為。

在積層製造中，所謂的行為是指對雷射的調控。雷射功率提升或降低的幅度、速度調整的多寡即為行為。然而，在製造過程中無法即時直接觀察晶粒形貌。因此，轉而觀察熔池的溫度與形狀，並藉由這些數值推測晶粒形貌。光學高溫計能即時回報此狀態。

獎勵取決於距離目標有多近。越接近所期望的晶粒形貌，給予的獎勵就越大。當等軸晶比例達到目標時，獎勵會提高。相反地，若出現匙孔或未熔合缺陷，則會給予懲罰。人工智慧便遵循這種獎勵機制來學習調控雷射。

如何設計獎勵決定了成敗。若獎勵設計得過於粗糙，就會走入歧途。甚至可能只盲目追求晶粒形態而浪費能量。因此，獎勵設計會同時納入晶粒形態、缺陷與能量。這是在天平上權衡多個目標以取得平衡。精心設計好這座天平，正是強化學習設計的核心。

為何需要這種即時控制？因為零件各處的形狀不同。邊角、薄壁和突出部分的散熱速度各異。即使給定相同的雷射條件，晶粒形態也會隨位置而異。即時控制旨在因地制宜改變條件，以保持均勻的晶粒形態。

這個方向尚未成為工業標準。目前多為模擬與試片階段的提案。以閉環即時調控晶粒形態的案例相當罕見。這是因為在製程中很難即時測量晶粒形態。此外，還必須克服感測器的延遲、模型的誤差以及設備的反應極限。

強化學習擅長預先經歷各種危險的嘗試。若用真實設備測試惡劣條件，就會報廢零件。在電腦模擬中則可以盡情失敗。系統能從無數次失敗中預先學會良好的調控。學習完成後，再於安全範圍內小心翼翼地轉移至實際設備。這相當於由電腦代為承擔了失敗的代價。

因此順序至關重要。首先在模擬中掌握控制。接著在有限的試片上進行確認。然後在經過驗證的製程範圍內作為輔助工具使用。唯有經過這些步驟，才能謹慎地將強化學習控制導入實際零件的製造。晶粒形態在製作完成後，會以 EBSD 再次確認，以檢視控制是否正確。

6.5 透過聲音探聽內部的缺陷監測

到目前為止，都是利用光來尋找缺陷。但光只能看到表面。在零件深處產生的裂紋很難用相機捕捉。本節將探討透過聲音探聽內部的方法。

首先探討缺陷會發出何種聲音。接著探討將該聲音轉換為圖像的方法。最後探討結合聲音與光學以做出更佳判斷的方法。融合不同的感官，就能補足單一感官所遺漏的資訊。

6.5.1 寬頻聲發射（AE）訊號的物理機制

聲發射（Acoustic Emission; AE）是材料內部發生突變時所發出的聲音。確切來說，是極微小的彈性波。這與玻璃杯產生裂紋時發出「喀」的一聲原理相同。也與木頭彎曲折斷時發出「咔嚓」聲類似。材料內部發生的事件會化為聲音洩漏出來。

在積層製造中，各種事件都會發出各自不同的聲音。高溫裂紋會在瞬間釋放巨大的能量。因此會發出高頻的尖銳聲音。這種聲音接近短暫的劈啪爆裂聲。其振幅巨大且突然竄升。

匙孔塌陷時也會發出聲音。熔池內部的空腔突然崩塌並產生衝擊。這種聲音在比裂紋略低的頻率下連續震盪。類似水中的氣泡破裂時產生的波動。其聲音紋理與裂紋截然不同。

粉末飛濺或設備摩擦時也會發出聲音。這種聲音處於更低的頻率。非缺陷的正常噪音也會混雜在聲音中。因此必須仔細辨別聲音。區分缺陷聲音與一般噪音是其關鍵。

每種聲音具有不同的紋理是有原因的。巨大的能量突然釋放時，會帶有高頻成分。緩慢釋放時，則帶有低頻成分。裂紋是在瞬間裂開，因而發出高音。粉末飛濺相對較慢，因此發出低音。然而，實際捕捉到的頻率會因感測器、傳遞路徑與濾波方式而有所不同。因此，這一順序應視為在特定測試中所觀察到的趨勢。

透過聲音聆聽的方法具有顯著優勢。光學只能看到表面，但聲音能穿透內部。積層體深處的裂紋也能透過聲音捕捉。若能察覺裂紋最初產生的瞬間，就能迅速應對。可以在當下暫停製程，標記該部位並重新檢驗。也可以考慮重新照射雷射進行熔化修復。然而，重熔並不總是能消除裂紋。甚至可能引發新的熱應力與新裂紋。經過驗證的修復製程與單純的重新熔化必須區別看待。

聆聽聲音的方法有兩種。其一是透過接觸零件的壓電感測器來聆聽。壓電感測器是受力時會產生電力的元件。將其貼在支撐零件的基板上，聆聽穿透內部的彈性波。另一種則是利用麥克風聆聽空氣中的聲音。這兩種方法的聲音傳播路徑與頻率截然不同。

6.5.2 時頻小波轉換

直接觀察聲音訊號很難做出判斷。僅憑隨時間變化的震動，很難得知是何種缺陷。因為在同一瞬間重疊了多種不同高低的聲音。必須同時觀察在何時發出了何種頻率高低的聲音。唯有如此，才能讀懂缺陷的指紋。

小波轉換（Wavelet Transform）正是執行這項任務。該方法能同時繪製時間與頻率。它將聲音訊號轉換為橫軸為時間、縱軸為音高的圖像。這張圖像稱為尺度圖（Scalogram）。這與樂譜同時呈現時間與音高十分相似。

這張圖像會針對不同缺陷繪製出不同的紋路。裂紋的尖銳聲音會在高處呈現為亮點。匙孔的震盪則在中段呈現為連續的紋路。噪音則模糊地鋪在低處。如此一來，當聲音化為圖像，就更容易以肉眼進行比對。

在解讀紋路時，必須妥善選擇母小波。母小波是作為聲音比對基準的短暫波形。唯有使用與聲音紋理相似的基準，紋路才會清晰。若使用紋理不同的基準，紋路就會變得模糊。選擇適當的基準也是前處理的一部分。選對合適的基準，才能獲得紋路清晰的圖像。

人工智慧會從這張圖像中學習紋路。用於判讀照片的神經網路會解讀尺度圖。它透過大量範例學習何種紋路對應何種缺陷。學習完成後，便能根據新圖像辨識出缺陷。多虧將聲音轉換為圖像，才能借助影像人工智慧的力量。

近期的研究利用此方法取得了良好成果。一項研究僅憑空氣中的聲音與雷射速度就估算了匙孔孔隙。該研究將麥克風捕捉到的聲音轉換為尺度圖並進行學習。代表結果可靠度的數值超過了0.8。這項研究發表於學術期刊中。它展示了僅靠聲音就能以毫秒為單位估算內部缺陷。

聲音監聽還具有成本低廉的優勢。高速相機與精密 X 光設備昂貴且操作困難。壓電感測器則相對便宜且易於安裝。若安裝多個感測器，還能推測聲音的來源。因此，基於聲音的監測被視為現場極具實用性的途徑而備受關注。

利用多個感測器進行定位的原理很簡單。同一聲音到達各感測器的時間不同。先到達較近的感測器，後到達較遠的感測器。透過比對這種到達時間差，即可估算發聲位置。這相當於利用到達多個麥克風的時間差來判定方向。如此定位出的位置能指出缺陷的所在之處。

6.5.3 結合光學與聲音的缺陷辨識

多模態（Multimodal）意指同時使用多種類型的數據。這如同人類同時使用眼睛和耳朵。只聽聲音會有所遺漏，只看光學影像也會有所遺漏。將兩者結合便能互補缺口。本節將探討結合聲音與光學的方法。

光學與聲音所觀察的對象不同。高溫計量術能良好呈現表面溫度。聲發射則能捕捉內部發生的突變。表面的溫度異常由相機率先發現。內部的裂紋則由聲音率先察覺。融合這兩種訊號，即可同時審視表面與內部。

結合的方法如下。聲音訊號由聲音專用神經網路讀取。光學影像由影像專用神經網路讀取。將兩個神經網路所提取的特徵匯聚在一起，做出最終判斷。這相當於讓各自負責擅長的工作，最後再於結論處合力。

實際研究展現了這種結合的力量。一項研究同時蒐集了高溫計量數據與聲音。透過融合兩種訊號，更精準地指出了匙孔孔隙。相較於僅使用單一訊號，遺漏的孔隙減少了。如何以這種方式同時捕捉裂紋，則是未來的課題。

結合時，時間對齊最為重要。必須精確對齊發聲瞬間與光學變化瞬間。若時間錯位，可能會將不同的事件誤判為同一事件。因此必須對兩個感測器進行極為精密的同步。由於各感測器的雜訊不同，也需要預先進行去噪整理。

融合兩種訊號的方式也有很多種。有從一開始就混合訊號並共同學習的方式。也有各自學習後僅在結論處結合的方式。近期的研究常採用將各自學習到的特徵透過輕量分類器進行融合的方式。這種方式運算輕量，且能良好適應新的缺陷。何種方式更佳取決於零件與設備。

融合多種感官的趨勢未來將更為廣泛。除了光與聲音之外，還會使用雷射反射訊號。同時也會蒐集所建層的照片與溫度分佈圖。多雙眼睛與耳朵層層審視同一個零件。感官越多，遺漏的缺陷就越少。將這些多重訊號串聯為一體，正是人工智慧的任務。

這種方式也存在明顯的局限。將人工智慧的判斷用於生產過程中的警報與候選篩選是較為安全的做法。真正的合格判定仍需透過非破壞檢測、截面觀察與電腦斷層掃描來進行。感測器之間的時間錯位與雜訊也可能導致誤判。人工智慧是為人類縮小觀察範圍的引導者。

總結

本章探討了以金屬堆疊製造火箭零件的技術。檢視了以雷射熔化粉末進行堆疊的方法，以及熔化金屬絲進行堆疊的方法。剖析了 Inconel 718、GRCop-42、C-103 三種金屬的特性與注意事項。每種金屬的任務各異，製造時需要克服的問題也不同。

積層製造在賦予自由度的同時，也帶來了缺陷的風險。匙孔氣孔與未熔合會成為疲勞裂紋的起點。殘留應力會使大型零件扭曲變形。晶粒的定向偏向會使強度失衡。這些缺陷直接關係到發動機的安全。

這些缺陷彼此交織。單一錯誤的雷射條件就會同時引發多種缺陷。有時為了避免匙孔反而導致未熔合。有時為了降低應力反而使晶粒形態惡化。因此，不能只著眼於單一缺陷就改變條件。必須將多種缺陷一併放在天平上權衡以尋求平衡。

人工智慧從三個方向協助解決此問題。其一是製造過程中快速找出缺陷。將物理定律融入高溫計量影像的模型能篩選出孔隙。將聲音轉換為圖像後加以判讀的模型能捕捉內部裂紋。融合光學與聲音即可同時審視表面與內部。

其二是取代緩慢的計算，快速預測熱應力與變形。代理模型將需要數天的分析大幅縮短。透過這種快速預測，可以預先篩選無數的製程條件。融入物理資訊後，預測便不會偏離物理規律。

最後是協助即時調整製程條件。透過調控掃描軌跡與冷卻時間來減少扭曲。透過調控雷射來保持晶粒形態均勻。生成模型能根據條件預先繪製晶粒形態。強化學習則在製造過程中自主調控條件。

有一點必須釐清。人工智慧無法取代所有檢測。本章探討的諸多模型雖然快速且智慧，但並非完美無缺。多數仍處於早期研究階段，確立為工業標準者甚少。將人工智慧的判斷用於警報與候選篩選是較為安全的做法。最終的品質保證仍需由試片、非破壞檢測與燃燒測試共同承擔。

也有使用語言模型的新趨勢。積層製造領域累積了堆積如山的論文與報告。大型語言模型（Large Language Model; LLM）能閱讀這些文獻並整理知識。我們可以詢問在何種條件下容易產生何種缺陷。一項 2025 年的研究嘗試利用語言模型來預測缺陷條件。這類工具成為了連結人類經驗與文獻的橋樑。

整體藍圖如下。感測器成為眼睛與耳朵，代理模型成為大腦，控制器成為雙手。當這三者連成一體，便能成為一邊自主檢視一邊製造零件的工廠。NASA 堆疊製造出大型噴嘴並經受住長時間燃燒測試，正是其起點。下一章將探討如何修整如此製成的零件，並評估該零件能否長久承受考驗。

相關佐證資料

- DebRoy, T., Wei, H. L., Zuback, J. S., Mukherjee, T., Elmer, J. W., Milewski, J. O., Beese, A. M., Wilson-Heid, A., De, A., & Zhang, W. (2018). Additive manufacturing of metallic components: Process, structure and properties. *Progress in Materials Science*, 92, 112-224. <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2017.10.001>
- King, W. E., Barth, H. D., Castillo, V. M., Gallegos, G. F., Gibbs, J. W., Hahn, D. E., Kamath, C., & Rubenchik, A. M. (2014). Observation of keyhole-mode laser melting in laser powder-bed fusion additive manufacturing. *Journal of Materials Processing Technology*, 214, 2915-2925. <https://doi.org/10.1016/j.jmatprotec.2014.06.005>
- Rosenthal, D. (1946). The theory of moving sources of heat and its application to metal treatments. *Transactions of the ASME*, 68, 849-866.
- Hunt, J. D. (1984). Steady state columnar and equiaxed growth of dendrites and eutectic. *Materials Science and Engineering*, 65, 75-83. [https://doi.org/10.1016/0025-5416\(84\)90201-5](https://doi.org/10.1016/0025-5416(84)90201-5)
- Mukherjee, T., Manvatkar, V., De, A., & DebRoy, T. (2017). Mitigation of thermal distortion during additive manufacturing. *Scripta Materialia*, 127, 79-83. <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2016.09.001>
- Gradl, P. R., Protz, C. S., Cooper, K., Ellis, D., Evans, L. J., & Garcia, C. (2019). GRCop-42 Development and Hot-fire Testing Using Additive Manufacturing Powder Bed Fusion for Channel-cooled Combustion Chambers. *AIAA Propulsion and Energy 2019 Forum*. <https://doi.org/10.2514/6.2019-4228>
- Gradl, P., Mireles, O. R., Katsarelis, C., Smith, T. M., Sowards, J., Park, A., et al. (2023). Advancement of extreme environment additively manufactured alloys for next generation space propulsion applications. *Acta Astronautica*, 211, 483-497. <https://doi.org/10.1016/j.actaastro.2023.06.035>
- NASA. (2023). Rapid Analysis and Manufacturing Propulsion Technology (RAMPT). <https://www.nasa.gov/rapid-analysis-and-manufacturing-propulsion-technology/>
- NASA. (2023). GRCop-42 additive manufacturing for high heat flux thrust chamber liners (Document ID 20230007103). NASA Technical Reports Server. <https://ntrs.nasa.gov/citations/20230007103>

- NIST. (2024). Additive Manufacturing Benchmark Test Series (AM Bench). National Institute of Standards and Technology. <https://www.nist.gov/ambench>
- NIST. (2022). AM Bench 2022 measurement results data: in-situ thermography and scan strategy laser scans. National Institute of Standards and Technology. <https://www.nist.gov/data-publications/am-bench-2022-measurement-results-data-situ-thermography-and-scan-strategy-laser>
- Levine, L. E., Lane, B. M., Heigel, J. C., et al. (2024). Outcomes and conclusions from the 2022 AM Bench measurements, challenge problems, and conference. *Integrating Materials and Manufacturing Innovation*, 13, 154-193. <https://doi.org/10.1007/s40192-024-00372-4>
- Aydogan, B., & Chou, K. (2024). Review of in situ detection and ex situ characterization of porosity in laser powder bed fusion metal additive manufacturing. *Metals*, 14(6), 669. <https://doi.org/10.3390/met14060669>
- Chen, L., Bi, G., Yao, X., Su, J., Tan, C., Feng, W., Benakis, M., Chew, Y., & Moon, S. K. (2024). In-situ process monitoring and adaptive quality enhancement in laser additive manufacturing: a critical review. *arXiv:2404.13673*. <https://arxiv.org/abs/2404.13673>
- Emmanuel, I., Yang, Z., Yeung, H., & Zhang, X. (2026). Machine learning modeling for real-time melt pool monitoring in laser powder bed fusion additive manufacturing: a hybrid approach. *arXiv:2606.23851*. <https://arxiv.org/abs/2606.23851>
- Liu, H., Guirguis, D., Zeng, X., Maurer, L., Rajan, V., Sanaei, N., Yang, C.-T., Beuth, J. L., Rollett, A. D., & Kara, L. B. (2026). Airborne acoustic emission enables sub-scanline keyhole porosity quantification and effective process characterization for metallic laser powder bed fusion. *Additive Manufacturing*, 116, 105062. <https://doi.org/10.1016/j.addma.2025.105062>
- Tian, M., Mu, H., Ding, D., Li, M., Ding, Y., & Zhao, J. (2025). Real-time distortion prediction in metallic additive manufacturing via a physics-informed neural operator approach. *arXiv:2511.13178*. <https://arxiv.org/abs/2511.13178>
- Zhang, R., Strickland, J., Hou, X., Yang, F., Li, X., de Oliveira, J. A., Li, J., & Zhang, S. (2025). Rapid residual stress simulation and distortion mitigation in laser additive manufacturing through machine learning. *Additive Manufacturing*, 102, 104721. <https://doi.org/10.1016/j.addma.2025.104721>
- Bostan, B., Hinnebusch, S., Anderson, D., & To, A. C. (2025). Accurate detection of local porosity in laser powder bed fusion through deep learning of physics-based in-situ infrared camera signatures. *Additive Manufacturing*, 101, 104701. <https://doi.org/10.1016/j.addma.2025.104701>
- Giri, S., Liu, S., Gorgannejad, S., Thampy, V., Quan, P., Nicolino, J. W., Strantz, M., Forien, J.-B., Martin, A. A., Calta, N. P., & Tassone, C. J. (2026). In-situ sensor monitoring of multi-class gas porosity formation in laser powder bed fusion using convolutional neural network. *Journal of Intelligent Manufacturing*. <https://doi.org/10.1007/s10845-026-02861-z>
- Zhang, H., Caputo, A. N., Neu, R. W., Vallabh, C. K. P., To, A. C., Alam, M. J., & Zhao, X. (2026). Process-agnostic multi-metric nondestructive characterization of porosity in additive manufacturing via specialized single-camera two-wavelength pyrometry. *Additive Manufacturing*, 127, 105282. <https://doi.org/10.1016/j.addma.2026.105282>
- Tempelman, J. R., Wachtor, A. J., Flynn, E. B., Depond, P. J., Forien, J.-B., Guss, G. M., Calta, N. P., & Matthews, M. J. (2022). Sensor fusion of pyrometry and acoustic measurements for localized keyhole pore identification in laser powder bed fusion. *Journal of Materials Processing Technology*, 308, 117656. <https://doi.org/10.1016/j.jmatprotec.2022.117656>
- Li, Z., Zheng, H., Zhang, Z., Wang, J., Wen, G., Grasso, M., & Colosimo, B. M. (2026). On the use of acoustic emission methods for in-situ monitoring in metal additive manufacturing: a review study. *Additive Manufacturing Frontiers*, 5(2), 200347. <https://doi.org/10.1016/j.amf.2026.200347>
- Brooke, R., Zhang, D., Qiu, D., Gibson, M. A., & Easton, M. (2025). Compositional criteria to predict columnar to equiaxed transitions in metal additive manufacturing. *Nature Communications*, 16, 5710. <https://doi.org/10.1038/s41467-025-60162-0>
- Prabhune, B., Panicker, N., Jordan, B., Lim, B., Snyder, K., Delchini, M., See, N. D., Nag, S., Plotnikov, Y., & Lee, Y. (2025). Multi-physics melt pool modeling and process optimization for laser direct energy deposition of Nb-based refractory C103. *Journal of Manufacturing Processes*, 154, 444-461. <https://doi.org/10.1016/j.jmapro.2025.09.082>
- Jeong, W., Cho, S., & Ryu, H. J. (2025). Optimization and characterization of C103 Nb alloy fabricated by laser wire directed energy deposition. *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials*, 133, 107318. <https://doi.org/10.1016/j.ijrmhm.2025.107318>
- Xu, Z. Y., Mao, J. Y., Ren, R. X., Wu, Z. Q., Lei, Y. J., Han, L. L., Chen, C., Fan, W., & Wang, Y. (2026). Research progress and challenges of intelligent in situ monitoring for laser additive manufacturing processes based on machine learning. *Advances in Mechanical Engineering*. <https://doi.org/10.1177/16878132261442327>
- Pak, P., & Barati Farimani, A. (2025). AdditiveLLM: Large Language Models Predict Defects in Metals Additive Manufacturing. *arXiv:2501.17784*. <https://arxiv.org/abs/2501.17784>

第7章 3D列印航太合金的後加工與高週期疲勞壽命保證

前言

讓我們想想家裡使用的3D印表機。它熔化塑膠絲，一層一層堆疊以製造出物品。火箭發動機零件也是以類似方式製造的。只不過材料不是塑膠，而是金屬粉末。雷射在瞬間熔化金屬粉末，一層一層使其凝固。如此一來，就能將複雜的形狀一體成型地印製出來。

這種方式極大地改變了火箭零件的製造。過去是分開製造多個零件後再焊接在一起。現在即使是內部帶有冷卻通道的零件也能一次成型。零件數量減少，重量變輕。隨著拼接多個零件的製程消失，製造時間也隨之縮短。

然而存在一個問題。剛從印表機印出的金屬無法直接安裝到火箭上。其外表面粗糙，內部留有小孔隙。肉眼看不見的應力也閉鎖在內部。如果在此狀態下高速旋轉，零件會有碎裂的危險。

因此，印出之後的修整至關重要。這種修整稱為後加工。透過切削表面將其修磨光滑。利用熱與壓力消除內部孔隙。透過熱處理使組織均勻。本章依序探討從表面修磨到消除內部缺陷的後加工過程。

讓我們想想在廚房切韌性肉塊的場景。柔軟的豆腐，刀子很容易切過。韌性肉塊則很難切入。火箭用超合金與韌性肉塊相似。極難進行切削。這種難以切削的性質稱為難削性。

還有一個更大的擔憂。那就是疲勞。疲勞是微小的力反覆多次施加而導致材料破裂的現象。迴紋針反覆折疊攤平就會斷裂。明明沒有一次施加很大的力，卻斷裂了。火箭渦輪泵的旋轉葉片就處於這種危險之中。

本章將探討人工智慧如何協助完成兩項工作。第一是尋找能夠良好切削難削金屬的條件。第二是預先得知零件能承受多少次重複載重。這兩項工作單憑人類的經驗都需要耗費很長時間。人工智慧透過學習數據，快速縮小答案的範圍。

不過，人工智慧並不能決定一切。火箭零件是關乎人命與巨額成本的物件。人工智慧的預測必須透過實驗與檢驗再次確認。本章將說明人工智慧與實驗如何相互驗證並協同工作的方法。

讀完本章後，將能明白兩件事。一是3D列印金屬為何需要修整。另一是人工智慧如何協助進行該修整與檢驗。文中不使用艱深的數學公式。而是以生活中的範例逐一解說。只要循序漸進，就能輕鬆掌握本章的全貌。

7.1 轉向3D列印的火箭零件與新挑戰

先說明本節所探討的內容。火箭發動機的核心區域環境極為嚴苛。一側流動著零下200度以下的極低溫燃料。另一側則流經高達數百度的高溫氣體。壓力既高，振動亦大。本節將探討為何用於此處的金屬要以3D列印製造，以及屆時會產生何種缺點。

火箭發動機零件必須輕巧且堅固。重量若重，可搭載的酬載就會減少。強度若弱，就無法承受高壓。這兩項要求相互衝突。因為若做得輕巧，就容易變脆弱。積層製造（Additive Manufacturing, AM）開啟了解決此問題的途徑。

再生冷卻燃燒室便是一個很好的例子。燃燒室壁面與高溫火焰直接接觸。若置之不理，壁面就會熔化。因此在壁面內部開鑿細微的冷卻通道。低溫燃料流經該通道以冷卻壁面。這種通道隱藏於壁面內部的結構，以過去的方式難以製造。積層製造能一次成型製造出此類複雜的內部結構。

製造零件的代表性技術為雷射粉床熔融（Laser Powder Bed Fusion, LPBF）。雷射掃過鋪設得薄薄的金屬粉末上方。雷射接觸之處瞬間熔化並隨即凝固。在其上方再次鋪設粉末並照射雷射。將此過程重複數千次以堆疊出零件。

火箭零件廣泛使用的金屬是鎳基超合金（superalloy）。超合金是在高溫下也不失強度的特殊金屬。代表性材料為Inconel 718（Inconel 718）。此外亦使用Haynes（Haynes）系列合金。這些金屬在高溫氣體中也能長久承受。

問題在於雷射熔化金屬的內部情況。雷射掃過的部位冷卻極快。快到每秒可降溫數十萬度。在這種急速冷卻下，組織會不均勻地凝固。晶粒沿著堆疊方向長成細長形狀。這種細長的晶粒稱為柱狀晶（columnar grain）。

同時也會產生性質隨方向而異的現象。這稱為非等向性（anisotropy）。想想木頭就容易理解。木頭順著紋理劈開就很容易裂開。橫切紋理則需要耗費更多力氣。積層製造金屬在各個方向上的強度也不同。這種性質使得零件設計與加工變得困難。

快速冷卻還會留下其他痕跡。冬天將熱水倒入結凍的玻璃杯中就會產生裂痕。這是因為內部與外部以不同的速率膨脹。積層製造金屬內部也會發生類似情況。各位置的凝固速率互不相同。因此力量被閉鎖在零件內部。這種閉鎖的力量稱為殘留應力（residual stress）。

此外還伴隨著成分偏析。熔化的金屬在凝固時，特定元素會聚集到一側。在Inconel 718中，鈮（Nb）元素會聚集。該處會形成堅硬的顆粒。這些顆粒稱為拉夫斯相（Laves phase）。拉夫斯相比基體金屬要堅硬得多，且容易碎裂。

由於這些內部情況，產生了兩項挑戰。第一是難以切削。堅硬的顆粒會損壞切削刀具。第二是內部孔隙會成為疲勞裂紋的種子。在高速旋轉的零件中，這個種子非常危險。因此在後續章節中將依序探討這兩項挑戰。

積層製造在火箭產業中迅速站穩腳跟是有原因的。因為製造單一零件的時間大幅縮短。過去光是製作鑄模就需要幾個月。積層製造無需模具即可直接堆疊出零件。若修改設計，隔天就能印出新零件。像這樣能在短週期內反覆進行設計與製造，使得開發速度得以加快。

減輕重量的效果也非常顯著。將多個組件整合為一體，接縫就會消失。接縫既增加重量，又容易成為薄弱之處。消除接縫後，便能實現輕量化與高強度。因此火箭公司對這項技術投入了大量資金。美國國家航空暨太空總署也長期對積層製造燃燒室進行測試。

後處理中不可或缺的是熱處理。熱處理是將金屬加熱後冷卻以改變組織的過程。首先加熱至高溫，使堅硬的顆粒固溶至基體中。這個階段稱為固溶處理。接著在適當溫度下保持較長時間，使強化顆粒均勻長大。這個階段稱為時效處理。必須經過這兩個階段，超合金才能發揮其原有的強度。

總結而言，積層製造帶來了巨大優勢的同時，也帶來了新挑戰。優勢在於複雜形狀與快速製造。挑戰則在於粗糙表面與內部缺陷。解決這些挑戰的關鍵在於後加工與檢驗。而人工智慧則在整個後加工與檢驗過程中提供輔助。

7.2 積層製造超合金難以切削的原因

先說明本節所探討的內容。難削性是指難以切削的性質。積層製造的超合金讓原本就難以切削的金屬變得更加難以切削。本節將分為三個原因來探討為何如此：晶粒組織的方向性、閉鎖的應力與加工硬化，以及刀具磨損的過程。

7.2.1 隨方向變化的晶粒組織

在本小節中，將探討晶粒組織的方向性對切削所產生的影響。前面提到柱狀晶沿著堆疊方向長成細長形狀。將詳細探討該組織為何會使切削變得困難。並且亦探討堅硬的Laves相對刀具造成的衝擊。

金屬是由微小晶粒聚集而成的。在每個晶粒內部，原子都依規則排列。這些晶粒朝向哪個方向決定了其性質。在積層製造金屬中，晶粒偏向單一方向。由於晶粒沿著堆疊方向長成細長形狀，因此性質在各個方向上互不相同。

切削刀具通過該組織時，阻力會發生變化。晶粒方向與刀刃方向相交的角度因位置而異。某些位置切削順暢，某些位置則強力抵抗。因此切削力會規律地上下起伏。力量不均勻導致加工變得不穩定，表面也變得不平整。

這種起伏會對刀具造成反覆衝擊。衝擊累積後，刀刃會逐漸受損。振動也會加劇。這種振動稱為顫振（chatter）。若顫振嚴重，表面會留下波浪紋。在精密零件中，此類紋路會構成重大缺陷。

此外，堅硬的顆粒使問題更加嚴重。Inconel 718凝固時，鈮會聚集至晶界。該處會形成板狀或塊狀的Laves相。這些顆粒比基體金屬堅硬得多，同時又具備容易碎裂的性質。

若切削刀具撞擊到這些堅硬的顆粒會如何？這就像用刀切過混在鬆軟泥土裡的碎石一樣。刀刃會產生微小的缺口。這類微小破損持續累積，最終會導致刀具的刀刃變鈍磨損。

要解決這個問題，必須先使組織均勻化。後文將探討的熱處理正扮演著這個角色。熱處理將堅硬的顆粒溶解並使其回歸基體內部。並將細長的柱狀晶轉變為稍微更圓潤的形狀。如此一來，性質隨方向而異的程度就會降低。

這種組織差異直接關係到零件的性能。若各方向的強度不同，設計就會變得困難。必須避開強度較弱的方向來放置零件。若使組織均勻化，這種擔憂就會減少。因此後處理不僅改善加工性能，也能提升零件性能。

人工智慧將這些組織資訊納入預測中。晶粒朝向哪個方向、堅硬顆粒有多少，都成為輸入值。人工智慧藉此學習切削阻力將如何隨之變化。人類難以用肉眼逐一檢視每一張組織照片。人工智慧則能快速讀取大量照片並找出規律。

晶粒的方向使用特殊設備進行量測。當電子束照射在試樣表面時，各晶粒會呈現不同的花紋。透過這些花紋即可得知各晶粒朝向何方。這些方向資訊成為人工智慧的優良輸入。人類難以用肉眼逐一計數方向。機器則能一次讀取無數晶粒的方向。

堆疊角度也會改變其性質。根據零件是立著堆疊還是橫著堆疊，組織會有所不同。即使是相同的設計圖，放置方向不同，強度也會不同。因此從設計階段就必須確定堆疊方向。這個角度也會對加工性與疲勞產生影響。人工智慧將角度作為變數納入，以學習其影響。

不過，各零件的組織仍有微小差異。即使以相同的設定製造，各位置之間也存在偏差。雷射的微小波動、粉末大小的差異都會產生偏差。因此模型的預測中也會殘留不確定性。後續章節將詳細探討如何處理這種不確定性。

7.2.2 閉鎖應力與越切削越硬的性質

在本小節中，將探討閉鎖應力與加工硬化。前面提到積層製造金屬內部會閉鎖力量。本節將探討這種閉鎖的力量在切削時會引起何種問題。同時亦檢視超合金在切削過程中變得更硬的性質。

首先再次回顧殘留應力。零件內部在多個方向上都閉鎖著力量。這組力量以稱為張量（tensor）的數學工具來表示。張量可以視為同時包含多個方向數值的表格。雖然肉眼看不見，但在零件內部相互推拉。

這種閉鎖的力量在切削的瞬間顯露出問題。一旦切削掉表面，該處的力量就會釋放。如此一來，剩餘部分便失去平衡。薄葉片或環狀零件會發生彎曲變形。為了符合精密尺寸，形狀反而走樣。因此，甚至必須預先決定先切削哪個面的順序。

接下來是加工硬化（work hardening）。加工硬化是金屬變形越大就越堅硬的性質。鐵絲反覆彎折幾次，該處就會變硬。超合金具有很強的這種性質。刀刃前方的薄層會在瞬間變得更加堅硬。

這樣一來，刀具就必須再次切削剛硬化的層。這需要更大的力量，也會產生更多的熱量。Inconel 718 是一種不易散熱的金屬。其熱導率僅為一般鋼材的三分之一左右。因此無法散逸的熱量積聚在刀刃與工件之間，使溫度進一步升高。

強化相也讓刀具難以負荷。Inconel 718

內部散布著微小的強化顆粒。該合金的主要強化顆粒是含鈮的伽瑪雙撇相（ γ' , Ni₃Nb）。這些顆粒將金屬牢牢鎖定強化。即使在高溫下，這些顆粒也不易溶解退化。因此，即使在熾熱的切削區域，金屬也不會軟化，刀具持續承受著巨大的作用力。

所有這些因素交織疊加，導致了表面損傷。已切削表面下方的薄層發生了變化。組織細化碎裂且顏色泛白。這一層被稱為白層（white layer）。白層中容易同時殘留拉伸殘餘應力與微裂紋。該層成為裂紋的起始點，大幅降低零件的疲勞壽命。

白層為何危險？因為該層存在著肉眼看不見的拉伸殘餘應力。拉伸應力是使裂紋張開的力量。若再加上微裂紋，就會形成裂紋源。承受反覆載荷時，裂紋便會從這些裂紋源萌生擴展。因此，在最後的精加工中絕不能殘留白層。

也有減輕此問題的方法。在切削後增加以微小顆粒撞擊表面的後處理。這種處理會在表面留下壓縮應力。壓縮應力是將裂紋壓緊閉合的力量，方向與拉伸應力相反。如此在表面植入壓縮應力，便能延長零件的疲勞壽命。

人工智慧也會同時學習這幾種後處理的效果。將切削條件、撞擊處理以及熱處理全部作為輸入。接著預測哪種組合能產生良好的結果。這大幅減少了以往人工逐一進行測試的工作。儘管如此，最終的確認仍須透過實際實驗來進行。

人工智慧用於預先察覺這種危險。輸入切削條件與殘餘應力值即可預測表面狀態。它能學習在何種條件下會產生白層，進而避開危險的條件。在鈦合金積層製造零件方面，已經出現了依據製程條件預測表面粗糙度與硬度的深度學習模型。本書提倡將相同的方法應用於超合金切削表面的方向。

然而，預測僅在訓練過的範圍內具備可信度。在未曾見過的條件下，誤差會變大。因此實際零件必須透過表面檢測進行確認。這是因為白層極薄，肉眼容易遺漏。人工智慧則能預先篩除危險條件，縮小候選範圍。

7.2.3 刀具磨損方式與表面損傷

本小節將探討刀具磨損的幾種形式。刀具磨損 (tool wear) 與生產品質直接相關。刀具一旦磨損，加工表面就會變得粗糙。粗糙的表面會成為疲勞裂紋的起始點。因此，在品質管制中，預先掌握刀具的磨損程度至關重要。

刀具磨損有許多種類。第一種是缺口磨損。在切削深度的交界處，刀具會被磨出深溝。該處是空氣中的氧氣與硬化金屬層共同摩擦的位置。氧氣與堅硬的金屬層共同摩擦，使得該處的凹槽越來越深。

第二種是熔著造成的剝離。鎢極易與刀具材料黏著。切削下來的金屬碎屑會黏結在刀刃上。這種積聚物稱為積屑瘤。當積屑瘤脫落時，會將刀具表面的塗層一併撕扯下來。此時隨著塗層被剝落，刀具表面會迅速損壞。

第三種是擴散磨損。切削區域的溫度極高。在高溫下，原子會相互滲透。刀具內部的原子會遷移至金屬碎屑端。如此一來，刀具表面便會留下凹陷的痕跡，這種痕跡稱為月牙窪。

第四種是表面白層與微裂紋。前面探討的白層在此處亦會出現。劇烈變形與快速冷卻交織，形成了薄薄的白層。這一層極易隱藏裂紋。即使外觀看起來光滑，內部卻潛藏著裂紋等缺陷。

所有這些磨損形式互相關聯。一旦某一種磨損加劇，其他磨損也會隨之擴大。因此不能只單看一種原因，必須綜合檢視多種訊號。切削力、振動、聲音、溫度皆為磨損的訊號。

人工智慧會綜合判讀這些訊號。感測器即時收集切削過程中的訊號。模型依據這些訊號估算目前刀具的磨損程度。近期的研究透過深度學習判讀磨損刀具的影像，直接預測磨損程度。以往需要人工停機並使用放大鏡觀察的工作，如今由機器代勞。

相同的方法在其他金屬上也同樣適用。一項研究利用資料驅動模型，預測了切削名為 Hastelloy C276 的鎢基金屬時的刀具磨損。這是因為多種超合金均表現出相似的磨損模式。這類成果亦可作為火箭用超合金的參考。

若能預測刀具磨損，無人加工也將成為可能。機器能夠自行監控刀具狀態。一旦出現危險，便會降低速度或更換刀具，無須人員時刻看守。在這種徹夜無人作業、自動切削零件的工廠中，預測模型為製程安全提供了堅實保障。

這四種磨損深受溫度的影響。切削區域溫度越高，磨損速度越快。因此冷卻至關重要。透過噴灑切削液來降溫，甚至能以高壓將切削液直接射向刀刃。這種冷卻方式也成為人工智慧的輸入變數。

總結而言，刀具磨損預測成為品質管制的眼睛。在磨損加劇之前即可更換刀具，在出現不良品之前即可修正加工條件。然而，感測器訊號中夾雜著雜訊。振動中也混雜著機台本身的抖動。因此必須妥善訓練模型以承受雜訊。若結合多個感測器使用，雜訊的影響便會降低。

7.3 實現良好切削的受力計算與後處理最佳化

上一節探討了難以切削的原因。本節將探討如何克服這些困難。依序探討三個主題：首先探討如何計算切削所受的作用力；接著探討可加工性如何隨後處理而變化；最後探討人工智慧如何尋找最佳加工條件。

7.3.1 切削受力與描述該受力的模型

本小節將探討切削所受的作用力及描述該受力的模型。切削力（cutting force）是刀具推擠金屬的力量。若能預先得知此作用力，便能妥善選擇刀具與加工條件。此處將一併探討計算作用力的基本概念與振動問題。

切削力並非僅朝單一方向作用。它同時包含向前推的力、向側邊推的力以及向下壓的力。因此，切削力以具備三個方向分量的向量來表示。向量是同時具有大小與方向的物理量。相較之下，材料內部所受的應力則以張量表示。張量是包含多個方向數值的量。切削力向量與應力張量是不同的物理量。該作用力的大小取決於切削厚度與材料的強度。

在切削過程中，三種現象同時發生：金屬變形、發熱以及產生摩擦。優秀的模型必須同時處理這三者。材料受到快速擠壓時的強度會隨溫度而變化。溫度升高時，金屬會稍微變軟。這種關係並非透過數學公式，而是以數據表的形式輸入模型中。

此模型針對不同材料使用不同的常數。常數由實驗決定。即使同為 Inconel 718，積層製造材料與鍛造材料的常數也互不相同。這是因為積層製造材料的組織不同。因此需要進行積層製造材料的專屬實驗。唯有累積足夠的積層製造材料專屬實驗數據，模型才能變得精準。

人工智慧亦能協助進行決定常數的實驗。有一種從切削訊號中反向求解常數的方法。量測切削力與溫度，並選取符合該數值的常數。以往由人工手動調整配對的工作，如今由機器快速完成。如此一來，面對新材料也能迅速校準模型。

振動問題亦十分重要。前面提到了顫振。顫振是刀具與工件相互引發晃動的振動。一旦發生振動，在下次旋轉時又會切削該震紋，導致晃動進一步加劇。微小的抖動會自行逐漸擴大，進而干擾加工。

為了防止這種振動，必須掌握安全的切削深度。切削過深會使振動加劇，淺切削則能平息振動。該界線會隨旋轉速度而變化。描繪此界限的圖形稱為穩定葉瓣圖。藉由參考此圖，可選定無振動的加工條件。

人工智慧能協助快速完成這些計算。單靠物理模型計算需耗費大量時間。每當條件稍作變更，就必須從頭重新求解。人工智慧預先學習物理模型的計算結果，隨後便能即時給出新條件下的答案。這種代替繁重計算的模型稱為代理模型。代理即代為執行的意思。預先進行數次精確計算，由學習了這些結果的代理模型負責後續運算。

這種方法大幅縮短了現場作業的時間。以往必須不斷變更條件並進行多次試切。如今模型會預先篩除危險條件，僅需對剩下的少數幾種條件進行實際測試。然而，若物理模型有誤，人工智慧也會產生錯誤。因此，結合物理機制與數據資料的方法更為穩妥。

結合物理機制與數據資料的方法稱為物理資訊機器學習（PIML）。該方法將物理定律融入人工智慧之中。即使數據量不足，物理定律也能約束引導出合理解答，成為防止離譜預測的安全機制。這一概念在本書後續章節中亦會反覆提及。在火箭工程這類數據珍貴匱乏的領域中具有極大的實用價值。

7.3.2 鍛造材、積層後原始態與 HIP 處理材的可加工性比較

本小節將比較三種狀態的金屬。即使同為 Inconel 718，其性質也會因製造方式與後處理而有所不同。在此將鍛造材、積層後原始態以及經過熱均壓處理的狀態並列進行檢視。

首先來看鍛造材（wrought）。鍛造材是透過擠壓鍛打金屬製成的材料。其淵源與鐵匠鋪中捶打鐵器的方式相同。組織細緻且均勻，晶粒微小而圓整。因此在三種材料中，其切削力波動屬於較小的一類。刀具磨損也相對較少，使得預測更加容易。

接下來是積層後原始態。這種狀態也稱為積層初始態（as-built）。指的是未經後處理、直接由列印機成形出的原始狀態。內部殘餘應力較大，且聚集著硬脆的 Laves 相。柱狀晶亦粗大且修長。因此切削阻力較鍛造材大幅上升，刀具崩刃破損的風險在三種材料中也屬於較高者。

第三種是經過熱均壓（Hot Isostatic Pressing, HIP）處理的狀態。HIP 是同時施加高溫與高壓的後處理程序。通常在超過攝氏 1000 度的溫度下進行，壓力亦超過 100 百萬帕。在此條件下，金屬內部的孔隙會被壓實閉合。

聯想麵包麵糰就很容易理解。麵糰內部含有微小的氣泡。長時間按壓揉捏後，氣泡便會排出，使麵糰變得緊密扎實。HIP 亦同理。高壓將金屬內部的孔隙壓扁貼合。高壓與高溫促使原子運動，使孔隙內壁相互熔接結合。

HIP 也會改變微觀組織。然而改變的程度取決於溫度與持溫時間。若溫度足夠高，硬脆的 Laves 相互固溶至基體中；若溫度較低或時間較短，則會殘留部分 Laves 相。修長的柱狀晶依條件不同也可能依然殘留。組織一旦變得均勻，異向性差異與切削力波動便會減少。因此，HIP 會配合固溶、时效以及均質化熱處理的條件協同使用。

然而 HIP 亦有其局限性，無法消除所有孔隙。與表面相連的開孔與封閉在內部的閉孔表現各不相同。在積層製造過程中截留的氬氣氣泡，即使透過 HIP 閉合，日後仍會引發問題。因為氬氣是不溶於金屬的氣體。後續再次承受高溫時，原本閉合的氣泡便會膨脹重新裂開。這種現象稱為熱誘發氣孔。因此，從一開始減少氣體截留氣泡至關重要。

HIP 處理後也會衍生出新的問題。當組織軟化時，金屬切屑變得不易斷裂。切屑連綿不斷並纏繞在刀具上。纏屑嚴重時會刮傷加工表面。因此必須選擇有利於順暢斷屑的刀具幾何構型。

人工智慧將這種比較整理成資料。收集各狀態的切削資料並學習其差異。進而判斷新零件接近哪種狀態，並建議應經過何種後處理。近期研究正廣泛探討結合 HIP 與熱處理的最佳化方法。

HIP 是耗費成本與時間的後處理。必須在大型設備中長時間加熱並加壓。因此很難應用於所有零件。必須判斷哪些零件確實需要 HIP。人工智慧也能協助這項判斷，透過檢視缺陷資訊預先評估 HIP 的效果。

公開研究也是良好的指引。美國國家航空暨太空總署透過模擬探討了 HIP 如何減少積層製造 Inconel 718 的缺陷。一項研究將初始氣孔較多的零件進行 HIP 處理後測量其疲勞強度。雖然大部分氣孔都已閉合，但仍殘留氬氣泡。這些結果累積起來，成為後處理設計的基礎。

以鍛造材為基準是有原因的。鍛造材是長期經過驗證的材料。其性質為人熟知且資料豐富。目標是將積層材提升至鍛造材水準。後處理是邁向該目標的途徑。人工智慧則協助更快找到這條途徑。

7.3.3 以少數實驗尋找良好切削條件

本小節探討以少數實驗尋找良好條件的方法。切削條件有多種。速度、進給量、切削深度、冷卻方式全都是變數。若組合所有變數，實驗次數將會暴增。結合田口實驗計畫法與人工神經網路即可解決此問題。

田口實驗計畫法 (Taguchi method) 是以少數實驗比較多種條件的方法。它不測試所有組合，而是只挑選具代表性的組合進行實驗。僅憑精選的幾種組合就能掌握整體趨勢。由於實驗次數減少，也能相應節省時間與成本。

以此方法可大幅減少實驗次數。例如能將數百種組合縮減為十八次實驗。在每次實驗中測量表面粗糙度與刀具磨損，也測量切削所消耗的能量。像這樣從多種組合收集到的數值，便成為人工智慧的學習資料。

人工神經網路 (Artificial Neural Network, ANN) 利用這些資料學習規律。人工神經網路是模仿人類大腦神經連結的計算結構。輸入包含切削條件與熱處理狀態，輸出則得到表面粗糙度與刀具磨損。模型會自行找出輸入與輸出之間的關係並掌握為規則。

完成學習後，便能預測未經實驗的條件。只要輸入新的速度與新的進給量，就能預先得知結果。接著加入尋找最佳條件的搜尋。挑選使表面細緻、刀具磨損小的條件。當兩個目標相互衝突時，則尋找平衡點。

實際案例也在不斷累積。一項研究探討了積層製造 Inconel 718 的微細車削，觀察經熱處理材料的加工性如何變化，並比較了每分鐘 30 公尺至 60 公尺之間的切削速度。收集這些資料便成為模型的學習素材。

這種組合在現場非常實用。首先建立小型實驗表，接著透過感測器與測量收集資料，最後由人工智慧學習條件與品質之間的關係。如此一來便能迅速決定新零件的加工條件。

當目標有多個時，必須尋找平衡點。我們希望表面細緻、刀具磨損少、耗時縮短。但這些目標彼此衝突。快速切削容易使表面粗糙。因此若只顧著改善其中一項，另一項往往會惡化。

此時會採用同時處理多目標的方法。稍微讓步其中一項以換取另一項。收集以此方式獲得的良好組合，並從中挑選適合該零件的組合。人工智慧能快速找出這些組合。

實際目標是降低表面粗糙度。火箭零件必須表面細緻才具備良好的抗疲勞能力。結合精選的切削條件與良好刀具即可接近此目標。細緻的表面能減少裂紋的起始點。因此表面精加工是疲勞壽命保證的第一步。

局限性也十分明確。模型僅在學習範圍內值得信賴。若遇到未參與學習的速度或進給量，預測就會產生波動。資料量少則誤差變大。因此重要零件會透過實際切削試驗來確認條件，藉由表面粗糙度與刀具磨損來驗證預測是否準確。

刀具的選擇也是重要變數。針對超合金會使用塗覆特殊塗層的刀具。塗層有助於耐熱與耐磨。有時也會使用陶瓷材料製成的刀具。人工智慧亦能學習何種刀具適合何種條件，進而兼顧刀具成本與加工品質。

未來的課題是擴展資料庫。若能匯集多個機構的實驗資料，模型将更加穩健。然而各機構的測量方法略有不同，記錄切削條件的方式也各異。因此需要統一資料的規範。一旦具備此類標準，預測的可信度便會提高。

7.4 渦輪泵葉片的極高週疲勞破壞

到目前為止探討了如何妥善切削。從本節開始探討零件能承受多久。我們將檢視為何火箭渦輪泵的旋轉葉片特別危險，以及該零件破裂時會留下何種痕跡。

7.4.1 極低溫與高溫並存的嚴苛環境

本小節探討渦輪泵葉片所處的嚴苛環境。渦輪泵（turbopump）是以高壓輸送燃料與氧化劑的泵浦。在其中快速旋轉的葉片稱為葉輪（impeller）。我們將探討該零件所承受的負載為何如此特殊。

葉輪旋轉極為迅速。每分鐘旋轉3萬次至8萬次。這是比汽車引擎快十倍以上的速度。旋轉期間，離心力將葉片向外拉扯。若旋轉維持穩定，此離心力的大小幾乎不變，屬於穩態負載。

溫度環境也相當嚴苛。葉輪本身與極低溫推進劑接觸。液體氫溫度低於零下250度，液體氧也在零下180度左右。高溫工作氣體並非位於葉輪，而是位於同軸安裝的渦輪端。此熱量透過軸、軸承與密封件逐漸傳遞至泵浦端。因此同一根軸的兩端同時面臨極冷與極熱的環境。

巨大的溫差會產生收縮與膨脹。冷端收縮而熱端膨脹。這種差異會在零件內部產生應力。在此基礎上疊加穩態離心力，再加上反覆出現的振動負載，進一步撼動零件。

反覆負載來自多個來源。每當葉片掠過固定部件旁時就會受到作用力。旋轉軸的微小不平衡與壓力脈動也會增加負載。啟動與關機也會各施加一次巨大負載。葉片通過時的作用力每秒重複數千次。因此循環次數累積得非常迅速。

這種循環次數極高的疲勞稱為極高週疲勞（Very High Cycle Fatigue, VHCF）。一般設計以一千萬次為基準。實際零件承受多少次反覆負載，必須將激振頻率乘以累積運轉時間才能得知。在試片研究中，則會探討至1億次、10億次領域。在此領域中，疲勞規律有所不同，因此需要單獨探討。

一般的疲勞試驗難以涵蓋此領域。若以普通速度進行10億次實驗，耗時過於漫長。因此會使用特殊的高頻試驗機。這種試驗機每秒可使試樣振動約2萬次。即使採用如此高速的振動，完成一次試驗也需要數天時間。

由於試驗耗時漫長，資料彌足珍貴。資料不足時預測容易產生波動。因此需要人工智慧有效利用資料的方法，必須以少量資料做出可靠的預測。如何有效利用資料的問題將在後續章節進一步詳細探討。

材料的選擇也與此環境息息相關。某些金屬在極低溫下容易變脆或碎裂。Inconel 718在極低溫下性質相對穩定，因此廣泛應用於極低溫零件。Haynes系列合金則在更高溫度下表現出優異強度。必須根據零件所處的位置選擇適當材料。

即使在同一個零件內部，不同位置的條件也不盡相同。葉片根部承受較大應力，葉片尖端則承受較大振動。因此必須先找出難以承受應力的薄弱部位。該部位稱為危險截面。疲勞壽命保證即以此危險截面為基準。

尋找危險截面也需要計算。透過電腦求解零件承受的應力。這種計算稱為有限元素分析。將零件劃分為微小單元並逐一求得應力。應力高度集中的部位即為危險截面。人工智慧有時也能快速取代這類計算。

葉輪的振動具有特殊規律。葉片掠過固定部件旁的次數是固定的。該次數與旋轉速度相乘便構成振動週期。在特定轉速下，該振動會與零件的固有振動重疊，進而使振動大幅加劇。這種重疊現象稱為共振。共振會迅速損壞零件，因此設計時會避開危險轉速。

葉輪的疲勞壽命保證是火箭安全的核心。只要一片葉片破裂，整個泵浦就會損毀，進而導致發動機停機或爆炸。因此該零件面臨比任何零件都更嚴格的檢驗，必須同時管理表面品質與內部缺陷。

7.4.2 內部起始的破壞與魚眼狀紋路

本小節探討極高週疲勞如何破壞零件。前面提到此領域的規律有所不同。我們將具體探討其差異何在，並觀察斷裂面殘留的特殊紋路。

一般的疲勞始於表面。表面是容易產生刮痕之處。承受反覆負載時，表面會產生滑移痕跡，裂紋便由該痕跡起始。因此將表面精細加工即可延長壽命。

極高週疲勞則有所不同。裂紋並非始於表面，而是始於內部。當循環次數極高時，即使應力微弱，內部缺陷也無法承受。內部的微小氣孔或堅硬顆粒會成為裂紋源。即便透過HIP也無法消除的微小氫氣泡就是危險的範例。

裂紋源周圍會形成特殊區域。在裂紋源周圍累積數億次的微觀變形。源自內部的裂紋在接觸不到空氣之處擴展。狹窄縫隙的兩側表面相互摩擦，將微結構磨得極為細碎。如此磨碎的微細區域稱為微細顆粒區域（Fine Granular Area, FGA）。該區域在顯微鏡下觀察時比周圍更顯暗沉。這塊暗色區域正位於魚眼特徵的正中央。

形成這塊暗色區域需要漫長時間。整體疲勞壽命的大部分時間都消耗於此階段。直到裂紋擴展至肉眼可見之前，過程非常漫長。即使表面看起來完好無損，內部卻早已產生損傷。

這一點對於決定檢驗時機具有重要意義。由於損傷顯現於外表的時間較晚，因此不能僅憑外觀而掉以輕心。必須定期深入檢驗內部。在可重複使用火箭中，這種週期管理更為重要。在重複使用已使用過的零件之前，必須確認其內部狀態。

裂紋由裂紋源擴展時會留下圓形紋路。這種紋路看起來宛如魚眼，因此稱為魚眼特徵（fish-eye）。魚眼特徵是裂紋起源於內部的證據。透過觀察斷裂面上的這種紋路即可得知成因。

最終裂紋延伸至表面。在該瞬間，零件會突然斷裂。緩慢擴展的裂紋瞬間失穩擴展。這種難以預先察覺的突發性破壞最為危險。

這種破壞模式對檢驗具有深遠意義。僅觀察表面會遺漏危險，必須透視內部。因此會結合使用X射線電腦斷層掃描（X-ray CT）與超音波檢驗。這類檢驗無須破壞零件即可觀察內部，稱為非破壞檢測（non-destructive testing）。

人工智慧與此項檢驗相結合。以透過CT尋得的內部缺陷大小與位置作為輸入，並依此數值預測疲勞壽命，進而排列出危險缺陷的優先順序。近期研究提出了以非破壞方式找出積層製造零件危險缺陷的方法。機器能搶先指出人類容易遺漏的內部缺陷。

要完全消除內部缺陷非常困難。因此採行即使存在缺陷也能確保安全的設計理念，這種構想稱為容缺陷設計。預先設定能承受多大尺寸的缺陷，超出該標準的零件則予以汰除。人工智慧便負責產出制定此項標準的資料。

這種方式也與檢測標準相連。檢測設備無法找出極微小的缺陷。可檢測出的缺陷存在尺寸極限。設計則確保超出此極限的缺陷仍具安全性。如此一來，即使是檢測遺漏的缺陷也不具危險。檢測與設計便透過這樣互補缺口的共同守護安全。

7.5 同步預測波動的疲勞可靠度保證

疲勞壽命無法用單一數值精確界定。即使在相同條件下，各零件的壽命也各不相同。因此預測中必須同時納入波動幅度。本節將說明處理此類波動的人工智慧。內容涵蓋將缺陷轉化為數值的方法、納入波動的模型，以及銜接

至安全標準的方式。

7.5.1 將材料狀態轉化為數值

本小節將探討將材料狀態轉化為數值的方法。人工智慧依賴數值進行學習，因此必須將缺陷與表面特徵轉化為數值。此類數值稱為描述元（descriptor）。在此將逐一檢視對疲勞壽命至關重要的數值。

首先將缺陷的形狀轉化為數值記錄。透過電腦斷層掃描（CT）拍攝零件內部，即可呈現孔隙的三維形狀。接著將此形狀整理為張量。如前所述，張量是容納多個方向數值的容器，其中記錄了孔隙朝哪個方向延伸、扁平程度如何等資訊。

X光CT與醫院的CT原理相同。透過從多個方向照射X光來觀察內部，並彙整相關資訊建立三維圖像。這樣無須切割零件即可觀察內部孔隙，並逐一量測孔隙的尺寸與形狀。以此方式收集的尺寸與形狀資訊，便成為疲勞預測的基礎資料。

缺陷的尺寸同樣十分關鍵。村上面積平方根法（Murakami square root of area parameter model）是量測尺寸的良方。此方法將缺陷視為微小裂紋，將缺陷投影至垂直於受載方向的平面並量測其面積，再以該面積的平方根作為缺陷尺寸。這是因為該平方根數值與促使裂紋張開的作用力大小密切相關。因此，複雜的三維孔隙得以轉化為此單一數值進行處理。此數值愈大，對疲勞的不良影響就愈顯著。

缺陷的位置也必須一併考量。即使尺寸相同，靠近表面的缺陷危險性更高。表面缺陷周圍可提供支撐約束的材料較少，受力更為集中；與空氣接觸的環境效應也會使裂紋擴展稍快。位於深層內部的缺陷因四面皆受材料包覆，危險性相對較低。因此會依據位置給予不同的修正值。

表面粗糙度也同樣轉化為數值。切削加工後的表面存在微小的波谷與波峰。波谷愈深愈尖銳，受力就愈集中。這種集中程度稱為應力集中係數（stress concentration factor）。這就像剪裁紙張時只要劃出微小缺口就容易撕開一樣，因為微小缺口會將分散的作用力匯聚於一點，使該處變得脆弱。

這些數值匯聚後將與疲勞壽命產生關聯。描繪作用力大小與重複次數關係的圖表稱為 S-N 曲線。缺陷與粗糙度資訊會使該曲線上下移動。若缺陷較大且表面粗糙，曲線便會向下移動；曲線向下移動即代表在相同的受力作用下，零件破壞失效的速度更快。

近期的多項研究將這些描述元輸入人工智慧，取得了顯著成果。某項研究利用經 CT 量測的缺陷資訊，成功預測了積層製造金屬的疲勞壽命；將村上法應用於多種積層製造案例的研究亦與日俱增。缺陷的尺寸、位置與形狀對壽命具有重大影響這一點，已獲得反覆證實。

描述元中亦納入材料的硬度。硬度代表材料的堅硬程度。在村上公式中，硬度愈高代表承受缺陷的能力愈強。然而，單憑硬度並無法完全解釋對缺陷的承受能力。極為堅硬的材料反而可能對缺陷更加敏感。因此必須同時考量硬度、缺陷尺寸、位置以及負載比。

負載條件亦化為數值納入。作用力的大小及其方向至關重要；作用力僅來自單一方向或是多向複合亦有所不同。同時也會納入溫度，因為材料在高溫處與低溫處的性質各異。

近期研究利用此類描述元取得了優異成果。某項研究預測了積層製造英高鎳 718（Inconel 718）的高週期疲勞壽命，並將缺陷尺寸與負載大小作為輸入項。針對資料不足的問題，則透過人工智慧進行資料增強予以解決。結果顯示，預測的決定係數提升至 0.975，平均誤差僅為

1.13%。決定係數是顯示預測與實際情況吻合程度的數值，該值愈接近 1，代表預測與實際愈吻合。不過，此數值乃源自單一材料的有限資料，且是以增強後的資料所得之結果，難以直接套用於其他製程與材料。

然而，決定描述元並非易事。需要判斷該納入哪些數值、剔除哪些數值。若遺漏關鍵數值，預測就會失準；若納入無用數值，學習效果便會遭到干擾。因此必須由熟稔材料的專家與人工智慧共同篩選。

7.5.2 輸出答案區間的貝氏神經網路（BNN）

本小節將探討納入波動特性的人工智慧。一般神經網路僅會輸出單一答案。在疲勞預測中，僅憑單一答案並不足夠，因為即使在相同條件下，壽命的分佈範圍也相當寬廣。因此需要能同時輸出答案範圍的模型。

此類模型稱為貝氏神經網路 (Bayesian Neural Network, BNN)。一般神經網路的內部參數固定為單一特定數值；貝氏神經網路則將內部參數視為機率分佈處理，具備數值區間而非單一數值。因此預測輸出亦呈現為區間而非單一結果。

此處經常出現「高斯」(Gaussian)一詞。高斯意指鐘形分佈，呈現中間高、兩側漸低的形狀。聯想考試分數的分佈便容易理解：平均值附近的人數最多，愈往兩端人數愈少。然而，疲勞壽命本身往往並非鐘形分佈，而是呈現對數常態或韋伯 (Weibull) 等其他形狀的分散態樣。因此通常會對壽命取對數後再套用鐘形分佈假設。這種鐘形假設也是為了簡化運算所採取的便利手段。

在此分佈中有兩個數值至關重要。其一是平均值，平均值是具代表性的數值；其二是離散寬度，寬度愈廣代表波動幅度愈大。貝氏神經網路會同時輸出這兩個數值。

以天氣預報來比喻預測為何具有區間：預報會表示明天降雨機率為 70%，而不會斷言為 100%，這是因為未來之事存在變數與波動。貝氏神經網路亦同，它並非給予單一答案，而是同時提供機率區間。

訓練此模型的方法亦相當特殊。由於內部參數為機率分佈，運算極為複雜，精確計算在實務上幾乎不可行。因此採用以近似分佈加以替代的方法。透過轉換為近似分佈來降低運算量，正是其學習訓練的核心。

完成訓練後會進行多次抽樣預測。由於內部參數為機率分佈，每次抽樣都會得出些微不同的答案。彙整這些答案即可求得平均值與區間寬度。若答案彼此相近，區間便較窄；若答案分散，區間便較寬。此區間的大小便展現了該預測的可信程度。

這種方式與人類的判斷極為相似。經驗豐富的工程師亦能區分確信與推測：對熟知的零件能自信斷言，對初次得見的零件則謹慎發言。貝氏神經網路亦透過此方式同時傳達自身的確信程度，因此人類便能參考其確信程度，更安心地採信並運用預測結果。

此方法還有另一項優點：當模型遇到未曾見過的條件時，輸出的區間便會變寬，主動發出「不確定」的訊號。人類察覺此訊號便會提高警覺，對區間較寬的預測進行更多查證後再行採用。模型能主動提示自身極限，對安全性助益極大。

這種方法非常契合疲勞預測的需求。疲勞是一種變異波動極大的現象，相較於單一數值，呈現區間更為誠實可靠。近期多項研究正依循此方向推進，已有研究在預測航太金屬疲勞壽命的同時納入波動幅度，亦有研究透過融入物理定律來提升可靠度。

融入物理定律為何有所助益？疲勞領域擁有長久累積的理論，亦即記錄受力與壽命關係的各式公式。將這些公式與人工智慧相結合，即使資料量較少，預測答案也不致大幅偏離。目前亦已出現同時處理多向負載的研究。這股趨勢使火箭零件的壽命保證更加堅實穩固。

這種方法亦需付出代價：由於需要多次抽樣求解，運算量隨之增加，訓練難度亦高於一般神經網路。儘管如此，對火箭零件而言這項成本完全值得投入，因為掌握波動變異才能確保安全。若僅盲信單一數值而引發事故，損失將遠為慘重。

7.5.3 區分波動並銜接安全標準

本小節將探討區分檢視波動的方法。前面提到預測具有區間寬度，但此區間並非僅由單一因素構成，而是混合了兩種波動不確定性。將兩者區分開來，便能釐清後續應採取的作為。

第一種是認知不確定性 (epistemic uncertainty)。這是源於模型認知不足所產生的波動，在資料匱乏的條件下表現尤為顯著。若處於未曾學習過的情境，模型便會缺乏信心。這類波動可透過補充不足的資料而逐步縮減。

第二種是偶然不確定性 (aleatoric uncertainty)。這是源於材料與負載本身的內在變異所產生。即使在相同條件下的零件，內部缺陷亦各不相同，量測時也會混入雜訊。這類波動根植於現象本身，即便增加資料量也難以縮減。

將兩者區分開來為何至關重要？因為應對對策截然不同。若認知波動較大，就必須進行更多實驗；若偶然波動較大，則應保留更多安全餘裕。若將兩者混為一談，便容易做出錯誤的處置。區分這兩種波動後，下一步該採取何

種作為便一目了然。

接著將預測銜接至安全標準。火箭零件必須通過既定的安全標準。此標準涵蓋兩項關鍵要素：其一是零件存活的百分比，其二則是對該數值的信任程度。舉例而言，可設定 90% 零件存活且具備 95% 信賴度的下限。像這樣同時規定存活率與信賴水準的數值稱為材料容許值（material allowables）。航太材料中使用的 A 基準值（A-basis）與 B 基準值（B-basis）即為此例。僅從平均值中扣除波動量並不足以保證此數值，必須結合試驗資料數量與離散程度透過統計方法求解。

此下限稱為設計容許值。零件的承受能力必須超越此容許值。在此基礎上有時還會額外乘上安全係數。安全係數是為了因應不可預期風險所預留的餘裕。透過設置多層餘裕來防範事故發生；若餘裕過大則會導致零件過重，因此需取得適當平衡。

如此一來便能做出偏向安全的判斷。在模型缺乏信心的條件下，將壽命評估得較低；在具備信心的條件下，則可給予稍多餘裕。這種態度正符合火箭零件的需求，寧可評估得較為保守，也要全力防範事故。

認證程序無法單靠人工智慧完成。疲勞保證需要結合多種工具：人工智慧預測、標準疲勞試驗、非破壞性檢測以及安全係數皆不可或缺。標準試驗方法亦有明確規範，在施力方式與資料分析方式上皆具備國際標準規範。

人工智慧的角色十分明確：迅速找出高風險候選項、指引哪些部位需要進行更多試驗，並協助以較少的實驗獲取豐富資訊。人類則依據這些資訊擬定完善的試驗計畫，從而大幅縮減時間與成本。

最終判定仍由專家與實體實驗做出。人工智慧的預測只是起點而非終點，必須由實際試驗資料作為預測的後盾，並透過品質文件詳實記錄該過程。唯有具備這一切條件，零件方能搭載於火箭之上。

未來仍有待克服的課題。疲勞資料目前依然匱乏，極高週期領域的資料更為稀少，這是因為相關試驗耗時極長。因此，利用少量資料進行學習的方法持續受到研究；亦有將其他材料資料進行遷移運用的方法。隨著這些方法的發展，預測體系將更加穩健。

資料的品質亦至關重要。各份資料量測缺陷的方式各異，進行試驗的具體方式亦互有不同。若記錄不全，模型便會產生錯誤學習。因此必須建立嚴謹記錄資料的文化，唯有具備詳實記錄的優質資料，才能孕育出優秀的模型。

規格與認證也必須一同發展。現行的認證規則是以過去的材料為基準制定的。積層材料的性質有所不同。因此需要新的規則。目前也正在討論如何將人工智慧預測納入認證之中。這項討論一旦有了結論，積層零組件將會獲得更廣泛的應用。

總結

本章探討了兩個重大問題。一個是如何妥善切削難以切削的金屬。另一個是掌握零組件能承受多久。這兩個問題都出現在 3D 列印製造的火箭零組件中。而且這兩個問題，人工智慧都能提供極大的幫助。

這兩個問題實際上是相連為一體的。切削得好，表面才會光滑。光滑的表面耐疲勞。消除內部孔洞，裂紋的種子才會減少。最終，優良的加工會帶來長久的使用壽命。因此，加工與疲勞必須始終一同看待。本章將加工與疲勞這兩個問題放在一起共同探討。

前半部分探討了為何積層高溫合金難以切削。急冷組織的性質因方向而異。內部殘留著應力，且聚集著堅硬的顆粒。這種性質會加速刀具磨損，並在表面留下白層與微裂紋。

我們也看到了克服這項困難的方法。預先計算切削力與振動以挑選安全的條件。透過熱均壓縮小內部孔洞並使組織均勻。利用田口方法與人工神經網路，從少數實驗中找出良好條件。人工智慧在此過程中能迅速縮小候選範圍。

後半部分探討了疲勞問題。火箭渦輪泵葉片處於超高週期疲勞狀態。在這一領域中，裂紋不是從表面開始，而是從內部萌生。斷裂面上會留下稱為魚眼狀的圓形紋路。因此，需要一種不破壞零組件就能探查內部的非破壞性檢測。

疲勞預測必須將波動性一同納入。因為即使在相同條件下，零組件的壽命也各不相同。貝氏神經網路不會給出單一答案，而是給出答案的範圍區間。將這個範圍區間分為兩類，就能看出下一步該做什麼。可以決定是要增加資料，還是要提高安全裕度。

核心在於人工智慧與人類的協作。人工智慧能快速解讀資料並指出風險。它能聰明地精簡實驗計畫。然而，最後的認證仍由實驗與檢測來把關。火箭零組件是由這兩種力量共同守護的。人工智慧與實驗的這種協作，正是支撐安全飛行的基石。

讓我們將本章的內容濃縮成一句話。必須妥善切削、妥善修整、妥善檢測。而且必須將波動性一同納入來預測其結果。人工智慧在所有這些階段中都能提供快速的協助。人類藉由這些協助製造出更安全的零組件。3D列印火箭零組件的未來，最終取決於這種協作。

相關佐證資料

- Ojo, O. O., & Taban, E. (2023). Post-processing treatments-microstructure-performance interrelationship of metal additive manufactured aerospace alloys: A review. *Materials Science and Technology*, 39(1), 1-41. <https://doi.org/10.1080/02670836.2022.2130530>
- Song, Z., Peng, J., Zhu, L., Deng, C., Zhao, Y., Guo, Q., & Zhu, A. (2025). High-Cycle Fatigue Life Prediction of Additive Manufacturing Inconel 718 Alloy via Machine Learning. *Materials*, 18(11), 2604. <https://doi.org/10.3390/ma18112604>
- Yu, C., Huang, Z., Zhang, Z., Shen, J., Wang, J., & Xu, Z. (2021). Influence of post-processing on very high cycle fatigue resistance of Inconel 718 obtained with laser powder bed fusion. *International Journal of Fatigue*, 153, 106510. <https://doi.org/10.1016/j.ijfatigue.2021.106510>
- ASTM International. (2021). ASTM E466-21: Standard Practice for Conducting Force Controlled Constant Amplitude Axial Fatigue Tests of Metallic Materials. ASTM International, West Conshohocken, PA. <https://www.astm.org/e0466-21.html>
- ASTM International. (2015). ASTM E739-10(2015): Standard Practice for Statistical Analysis of Linear or Linearized Stress-Life and Strain-Life Fatigue Data. ASTM International, West Conshohocken, PA. <https://www.astm.org/e0739-10r15.html>
- Yi, M., Tang, W., Zhu, Y., Liang, C., Tang, Z., & Yin, Y. (2023). A holistic review on fatigue properties of additively manufactured metals. *arXiv preprint*. (預印本，尚未經同儕審查) <https://arxiv.org/abs/2311.07046>
- Altomare, S. C., Lombardi, M., Bondioli, F., Fino, P., Biamino, S., & Ugues, D. (2025). Hot isostatic pressing for powder-based additive manufacturing of metals: State-of-the-art review and future perspectives. *Journal of Materials Research and Technology*, 39, 4794-4822. <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2025.10.135>
- Murakami, Y. (2002). *Metal Fatigue: Effects of Small Defects and Nonmetallic Inclusions*. Elsevier Science, Oxford, UK.
- Basquin, O. H. (1910). The exponential law of endurance tests. *Proceedings of the American Society for Testing and Materials*, 10(2), 625-630.
- Coffin, L. F. (1954). A study of the effects of cyclic thermal stresses on a ductile metal. *Transactions of the American Society of Mechanical Engineers*, 76(6), 931-950.
- Manson, S. S. (1953). Behavior of materials under conditions of thermal stress. National Advisory Committee for Aeronautics (NACA) Technical Note, NACA-TN-2933.
- Arola, D., & Ramulu, M. (1999). An examination of the effects of surface texture on the strength, fatigue life, and stress concentration of machined components. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 121(3), 376-381.
- Blavette, D., Cadel, E., Fraczkiewicz, A., & Menand, A. (1999). Three-dimensional atomic-scale imaging of segregation and precipitation in superalloys. *Science*, 286(5448), 2317-2319. <https://doi.org/10.1126/science.286.5448.2317>
- Wang, Q., Yao, G., & Hou, M. (2026). Fatigue life prediction and uncertainty quantification of aerospace metals: A Bayesian physics-informed neural network model. *Reliability Engineering & System Safety*, 266, 111724. <https://doi.org/10.1016/j.ress.2025.111724>
- Zhang, D., Dai, W., & Ding, Y. (2025). Bayesian optimization-based physics-informed neural network for adaptive prediction of multiaxial fatigue life in metallic materials. *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, 49(1), 28-51. <https://doi.org/10.1111/ffe.70101>
- Chang, J., Basvoju, D., Vakanski, A., Charit, I., & Xian, M. (2025). Predictive modeling and uncertainty quantification of fatigue life in metal alloys using machine learning. *arXiv preprint*. (預印本，尚未經同儕審查) <https://arxiv.org/abs/2501.15057>
- Li, L., Chang, J., Vakanski, A., Wang, Y., Yao, T., & Xian, M. (2024). Uncertainty quantification in multivariable regression for material property prediction with Bayesian neural networks. *Scientific Reports*, 14, 10543. <https://doi.org/10.1038/s41598-024-61189-x>
- Vishnu, S., Kuriachen, B., & Mathew, J. (2026). Microturning response of LPBF Inconel 718: Effect of homogenization annealing. *Materials and Manufacturing Processes*, 41(7), 964-973. <https://doi.org/10.1080/10426914.2026.2660062>
- Truong, T. T., Airao, J., Fattahi, S., Azarhoushang, B., Karras, P., & Aghababaei, R. (2025). Image-based machine learning model for tool wear estimation in milling Inconel 718. *Wear*, 571, 205865. <https://doi.org/10.1016/j.wear.2025.205865>

- Abdullah, M., Rao, A. C. U., Ramachandran, T., Biswal, S., Chaudhary, S. P., Singh, R., Mishra, A., & Mann, V. S. (2026). A data-driven approach for high-accuracy tool wear prediction in machining Hastelloy C276. *Scientific Reports*, 16, 19442. <https://doi.org/10.1038/s41598-026-50824-4>
- Medibew, T. M., Zieliński, D., Agebo, S. W., & Deja, M. (2025). Recent research progress in the abrasive machining and finishing of additively manufactured metal parts. *Materials*, 18(6), 1249. <https://doi.org/10.3390/ma18061249>
- Liu, Y., Zhao, L., Huang, S., Meng, X., Zhang, Z., Lu, H., Zhou, S., & Dai, G. (2026). Recent progress in surface post-treatment techniques for additive manufactured alloy metal parts: A comprehensive review. *Additive Manufacturing Frontiers*, 200339. <https://doi.org/10.1016/j.amf.2026.200339>
- Hassan, M., Hussain, M. A., & Jahan, M. P. (2026). Post-processing of additively manufactured metallic parts - A review. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*. <https://doi.org/10.1007/s00170-026-18615-3>
- Sommer, D., Truetsch, B., Esen, C., & Hellmann, R. (2025). Effect of hot isostatic pressing and sequenced heat treatment on the mechanical properties of hybrid additive manufactured Inconel 718 components. *Journal of Manufacturing and Materials Processing*, 9(11), 378. <https://doi.org/10.3390/jmmp9110378>
- Kaletsch, A., Qin, S., Herzog, S., & Broeckmann, C. (2021). Influence of high initial porosity introduced by laser powder bed fusion on the fatigue strength of Inconel 718 after post-processing with hot isostatic pressing. *Additive Manufacturing*, 47, 102331. <https://doi.org/10.1016/j.addma.2021.102331>
- Fody, J. M., & Lang, C. G. (2021). Hot isostatic pressing for reduction of defects in additively manufactured Inconel-718: Preliminary simulation approach and results. NASA Technical Reports Server, Document ID 20210015451. <https://ntrs.nasa.gov/citations/20210015451>
- Baig, S., Jam, A., Beretta, S., Shao, S., & Shamsaei, N. (2025). Non-destructive detection of critical defects in additive manufacturing. *Scientific Reports*, 15, 6740. <https://doi.org/10.1038/s41598-025-91608-6>
- Novelino, A. L. B., de Oliveira, D., Araújo, J. A., & Ziberov, M. (2026). Defects characterization of wall components fabricated via WAAM and fatigue strength estimation: A theoretical prediction approach based on Murakami's square root of area method. *Progress in Engineering Science*, 3(1), 100238. <https://doi.org/10.1016/j.pes.2026.100238>
- He, P., Huang, Y., Wang, W., Guo, Y., Yu, Z., Chen, W., Li, B., & Wang, X. (2025). Deep learning driven prediction method for roughness and hardness of laser in-situ forging additive manufacturing Ti-6Al-4V. *Virtual and Physical Prototyping*, 20(1), e2569541. <https://doi.org/10.1080/17452759.2025.2569541>

第8章 透過物理資訊機器學習 (PIML/PINNs) 與運算子學習 (FNO) 進行氣體反應流動與燃燒化學建模

前言

打開廚房瓦斯爐時，會點燃藍色的火焰。燃料瓦斯與空氣中的氧氣相遇並產生熱量。這個過程稱為燃燒。燃燒存在於我們日常生活的各個角落。汽車引擎和鍋爐也都是靠燃燒運作。

火箭發動機也以相同的原理產生推力。只是規模與條件大不相同。火箭燃燒室內部溫度高得多，壓力也大得多。燃料與氧氣極其迅速地混合並起反應。在那內部，氣體流動、旋轉並發出聲響。

要一口氣計算這所有過程十分困難。化學反應在轉瞬間發生。相反地，環繞整個燃燒室的流動則比反應更慢。快速的變化與緩慢的變化交織在同一個空間中。電腦若要同時捕捉這兩者，計算量就會大幅增加。

以往是將方程式切分成非常細小的部分來求解。這種方法稱為計算流體力學 (CFD)。雖然精確，但計算成本高昂。若要詳細求解大型火箭燃燒室，超級電腦必須持續運轉數日。設計人員長期以來一直渴望有更快速的工具。

人工智慧在這個環節提供了幫助。訓練良好的神經網路能迅速減少計算量。在感測器較少時，還能填補缺失的資訊。然而，在燃燒問題中，若人工智慧隨意給出答案則非常危險。因為在火箭中，哪怕是一個微小的誤差也可能釀成重大事故。

因此，出現了將物理定律直接納入學習過程中的方法。這種方法稱為物理資訊機器學習 (PIML)。神經網路不再只是模仿數據。它還被要求同時遵守質量守恆與能量守恆等定律。其代表性方法就是物理資訊神經網路 (PINN)。

本章將探討這項物理資訊學習的各種方法。首先以口語化的方式解說主導燃燒的方程式。接著探討快速化學反應所帶來的計算難題。隨後檢視名為柯爾莫哥洛夫-阿諾德網路 (KAN) 的新架構。接著介紹將函數轉換為函數的傅立葉神經運算子 (FNO)。最後以重構旋轉爆震發動機內部狀態的案例作結。

在這裡打個比方。可以想像繪製地圖的兩種方法。一種是一步一步走遍整片土地進行測量的方法。雖然精確，但耗時甚久。另一種是僅測量少數幾個地點，再填補其餘部分的方法。雖然快速，但若沒有規則地隨意填補，就會畫出離譜的地圖。物理資訊學習，就是在這種填補過程中加入大自然的規則。

讀完本章後，便能掌握整體的輪廓。可以看出人工智慧如何改變燃燒計算。也能區分哪些事情已經可以做到，哪些事情仍然困難。新工具雖然威力強大，但並非萬能。唯有結合物理與驗證，才真正值得信賴。取得這種平衡，正是貫穿本章的核心思想。

本書審慎處理艱澀的名稱與數值。近期的研究中，有些只是聽起來冠冕堂皇。其中也夾雜著未經證實根據的效能數據。因此，本章僅挑選經過確認的研究進行說明。無法確認的數值不會寫入正文中。處於起步階段的研究，則會明確註明為初期研究。

8.1 計算燃燒工程的典範轉移與人工智慧

本節探討的內容

本節首先探討燃燒計算為何困難。觀察火箭燃燒室內部發生的現象有多麼複雜。並檢視傳統計算方法的局限性。說明人工智慧為何會為了突破該局限而登場。

這裡不使用艱澀的數學公式。而是將概念轉化為日常生活中的場景。只要理解了本節，後續的所有章節都會變得容易理解。因為整章的內容歸根結底都是解決這個問題的各種方法。

火箭燃燒室內部屬於極端環境。溫度可高達數千度。壓力達到大氣壓力的數百倍。燃料與氧化劑在極短時間內劇烈反應。使用甲烷與液態氧的發動機就是代表性的例子。

這種反應遠比表面上看起來複雜得多。甲烷與氧氣相遇轉化為水和二氧化碳的路徑並非只有一條。在此過程中會產生數十種中間產物。這些被稱為自由基的物質具有極高的反應活性。因此，數百個細微反應會相互交織並同時進行。

將自由基比喻為接力賽跑。接力棒迅速地從一隻手傳到另一隻手。沒有任何一位跑者會長時間握著接力棒。自由基也是轉瞬間生成後又轉化為下一種物質。這種緊湊的傳遞主導了燃燒過程。如果忽略了那個速度，就無法正確描繪火焰的面貌。

在此之上還疊加了紊流。紊流是氣體旋轉並劇烈混合的流動。就如同江水撞擊岩石而激起白色碎浪的景象。火箭燃燒室內的氣體也是如此混合。紊流讓燃料與氧氣迅速相遇。然而，正是由於這種不規則的運動，計算變得更加困難。

若要精確求解這種反應，必須將時空切分成非常細小的單元。火焰形成的薄層，其厚度比頭髮還要細。在該薄層內部，溫度與濃度會急劇變化。一旦漏掉這個薄層，計算就會產生偏差。因此，若要捕捉到這個薄層，必須設置非常密集的網格。

透過數字來體會這個多尺度問題。火焰形成的薄層只有數十微米。相反地，整個燃燒室的長度卻有數十公分。尺寸差異達到數千倍。時間尺度上也存在相同的差距。若要一次涵蓋如此廣泛的範圍，網格數量將會呈爆炸性增長。

傳統的計算方法包含直接數值模擬（DNS）與大渦模擬（LES）。直接數值模擬連極微小的渦流都一個不漏地全部求解。大渦模擬則僅求解大型渦流，並對微小渦流進行近似處理。兩者雖然都很精確，但計算量龐大。若要詳細求解大型燃燒室，需要耗費大量時間。

將計算成本高昂換成生活化的語言來說明。這類似於製作一部高畫質電影。若將每個畫面都細緻地繪製出來，需要花費數個月的時間。燃燒計算也是如此。每當改變條件時，就必須從頭重新計算。設計人員希望測試數十種條件。然而，每次更改條件都要等待數日，在現實中難以實現。

在此，人工智慧開闢了一條新途徑。神經網路一旦訓練良好，就能迅速解答類似的問題。它成為代替繁重計算的輕量化代理模型（surrogate model）。代理模型是模仿原始計算的高速近似模型。設計人員可以在短時間內瀏覽多種條件。

將代理模型比喻為地圖應用程式。即使沒有親自走過那條路，它也能告知所需的時間。還能在轉瞬間比較無數條路徑。代理模型也是如此。無須執行完整的實際計算即可估算結果。正因如此，才能在短時間內檢視多種設計方案。

然而，地圖應用程式在陌生路段也可能出錯。代理模型一旦超出學習過的範圍也會產生偏差。因此，不能盲目相信估算出的答案。在重大決策面前，仍需透過精密計算再次確認。代理模型是引導方向的指南針，而非最終判決。這種態度始終貫穿整章內容。

進一步說明超臨界狀態。以水為例便很容易理解。通常水沸騰後會轉化為水蒸氣。液體與氣體的界線十分清晰。然而，當壓力和溫度大幅升高時，該界線就會變得模糊。火箭高壓燃燒室內的燃料正處於這種狀態。要精確計算液體與氣體之間這種模糊的界線相當棘手。

實際案例也隨之出現。DeepFlame 是導入神經網路以快速計算超臨界燃燒的軟體。超臨界是指液體與氣體的界線變得模糊的高壓狀態。研究團隊對該程式碼進行最佳化，大規模求解了甲烷與氧氣的紊流燃燒問題。根據公開資料，計算規模擴大到了數百億個網格單元的水準。這比以往涵蓋的範圍大幅擴展。該成果是在 2025 年高效能運算研討會上發表的初期研究。

在此案例中，人工智慧所承擔的任務十分明確。化學反應計算是耗時最長的部分。神經網路迅速取代了這項計算。與此同時，依然嚴格維持真實流體的物理性質。這是試圖兼得速度與精確度的嘗試。這種發展方向加速了大型火箭燃燒計算的進程。

探討一下大規模計算為何如此重要。真實的火箭發動機擁有數百個噴注器。噴注器是噴射並混合燃料與氧氣的組件。這眾多噴注器的火焰會互相影響。小規模計算難以捕捉這種相互作用。唯有實現大規模計算，才能更貼近真

實的發動機。

人工智慧進入燃燒領域的方式大致有三種。第一種是取代耗時計算的高速代理模型。第二種是從稀疏測量中還原整體場域的重構。第三種則是即時診斷與控制狀態。本章聚焦於前兩種方式，第三種控制則將在後續章節中討論。

舉例說明人工智慧若違背物理規律為何會如此危險。假設某個模型計算出的溫度低於實際溫度。設計人員會據此判定壁面足以承受。然而，若實際溫度更高，壁面就會融化。微小的誤差會釀成重大事故。因此在火箭領域中，嚴守物理規律與安全性直接相關。

當然，局限性也十分明顯。人工智慧在學習過的範圍之外經常出錯。火箭領域不斷出現新的工況條件。若不遵守物理定律，預測就會變得十分危險。因此，整章都在探討將物理與學習結合的方法。2026年也出現了針對航太推進領域之物理資訊學習進行統整的綜述文獻。這一趨勢表明該領域正在快速成長。

8.2 多組分可壓縮反應流動主導方程式與物理資訊學習

本節探討的內容

本節以口語化的方式解說主導燃燒的基本方程式。提到方程式聽起來很艱深。但其含義十分單純。就是任何事物都不會憑空消失或憑空產生的規則。

接著探討將這些規則納入神經網路的方法。檢視物理資訊神經網路如何遵守定律。這兩個概念是本章的骨架。後續出現的所有方法都是從這兩個概念延伸出來的。

8.2.1 反應性納維－斯托克斯主導方程式

納維－斯托克斯方程式是描述流體運動的規則。水流與風吹等現象均藉由此規則求解。在火箭燃燒中，還在此基礎上疊加了化學反應與熱量。因此需要聯立求解的方程式增加到了多個。

無反應的普通流體只需滿足質量、動量與能量這三項平衡即可。然而，像燃燒這樣具有化學反應的流體，還必須額外加上化學物種守恆。因此，這些方程式涵蓋了四項守恆定律。第一項是質量守恆。流入的氣體量與流出的氣體量必須相符。氣體不會自行生成或消失。質量相吻合的這種平衡是所有計算的基礎。

接下來是動量守恆。動量是質量與速度相乘的量。受力時動量會改變。壓力差與黏滯性產生了這種力。這正是火箭內部氣體被高速推擠排出的原因。

以騎腳踏車來聯想動量守恆。踩下踏板時，腳踏車就會向前進。踩踏的力量造成了速度的改變。在火箭內部，壓力差就扮演了那股力量。黏滯性則是相互拉扯並減緩流動的摩擦力。壓力差與黏滯性這兩種力量改變了氣體的速度。

另一項是化學物種守恆。化學物種是指氧氣、甲烷、水等參與反應的物質。當反應發生時，某些物質會減少，某些物質會增加。其增減的數量由反應速率決定。對於起反應的流體，每種物質都要單獨建立這樣的守恆方程式。因此方程式的數量會隨化學物種的數目而增加。最後一項是能量守恆。反應產生的熱量加熱氣體並推動氣流。

能量守恆可以比喻為存錢筒。比對存入的錢與花費的錢，就能得出剩餘的金額。在燃燒過程中，化學反應不會產生新的能量。只是被鎖在燃料內部的化學能轉化為熱能而已。該熱能加熱氣體並對外做功後排出。也有一部分熱量以輻射形式散失。平衡這所有進出能量的規則就是能量守恆。

「可壓縮性」這個詞彙也至關重要。可壓縮性意味著氣體密度會隨著壓力產生大幅變化。火箭燃燒室內部壓力極高且變化劇烈。因此無法將密度固定為常數。密度持續變化這一點，使得計算變得更加困難。

讓我們探討為何這四種平衡如此重要。失去平衡的計算很快就會變成謊言。若質量自行增加，就等於憑空產生了原本不存在的推力。若能量洩漏，溫度預測就會失準。在火箭設計中，這類誤差很快就會演變成事故。因此，人工智慧也必須嚴格遵守這種平衡。

化學反應速率由阿瑞尼斯定律決定。阿瑞尼斯定律是指溫度上升時反應會急遽加快的規則。這就像火柴一旦點燃便會瞬間蔓延開來一樣。這種急遽變化的特性，成了後續將探討的計算問題之根源。火箭設計者必須精確預測這

種反應，才能確保安全。

擴散與熱傳遞也必須一併求解。擴散是物質從濃度高處向濃度低處擴散的現象。這就像廚房裡的香氣飄散到房間裡一樣。熱傳遞是熱量從高溫處轉移至低溫處的現象。在燃燒室中，這兩者與化學反應同時發生。因此方程式相互交織，必須作為一個整體來求解。

8.2.2 基於物理資訊的複合損失函數

物理資訊神經網路（PINN）的核心在於損失函數。損失函數是衡量神經網路誤差程度的尺度。普通神經網路僅衡量與數據之間的差異。物理資訊神經網路則在此基礎上增加了物理誤差。

運作方式如下。神經網路接收位置與時間作為輸入。接著輸出該點的壓力、溫度、速度與濃度。這些數值必須滿足守恆方程式才正確。若這些數值無法滿足方程式，就會受到相應的懲罰。

若要測量這項物理誤差，就需要微分。此時便會使用自動微分（automatic differentiation）。自動微分是沿著神經網路計算過程求解微分的技術。它與利用網格差異進行估算的有限差分不同。因此不存在有限差分中產生的截斷誤差。不過神經網路本身的逼近誤差，以及選取樣本點所帶來的誤差依然存在。自動微分所消除的，是估算微分時產生的誤差。

讓我們探討為何需要微分。守恆方程式處理的是變化的比率。它著眼於壓力變化的快慢、速度如何改變。這種變化的比率就是微分。透過微分求解神經網路輸出值的變化。並確認以此求得的變化率是否滿足方程式。

傳統計算是在網格上逼近微分。透過相鄰網格點的差異來估算變化。這種方法在網格粗糙時誤差會變大。自動微分不使用這種逼近方法。它直接對神經網路的數學表達式進行微分。因此不需要為了微分而特意鋪設密集網格。不過，仍必須挑選用來測量物理誤差的點。這些點被稱為配點（collocation points）。若配點設置得過於稀疏，解就會產生波動。擺脫網格束縛並不意味著在任何地方都能保持精確。

損失函數包含多個項目。與數據的差異是其中一項。質量、動量、能量、化學物種方程式的誤差各自成項。邊界條件與初始狀態也作為項目加入。訓練過程則是權衡這多個項目並同步將其縮小。

這樣做會帶來極大的優勢。即使數據稀少，物理定律也能填補空白。在實驗室中，通常僅使用壁面壓力感測器或光學探針。僅憑這種稀疏的測量無法掌握整體的流場。若將物理定律設定為約束規則，就能填補其間的空隙。

這種特性在反向求解問題（反問題）中大放異彩。一般計算是輸入原因以獲得結果。反向求解問題則是觀察結果來尋找原因。僅觀察壁面溫度推求內部熱源就是一個例子。物理資訊神經網路在這種反問題上表現出色。這是因為它在同一個損失函數內同時處理測量值與物理規律。

在火箭測試中，這項能力彌足珍貴。要在燃燒室內部安裝大量感測器十分困難。由於高溫且狹窄，感測器難以承受。因此只能在外圍測量少數幾個點。從這少數幾點還原內部狀態是核心課題。物理資訊神經網路在測量值與內部狀態之間架起了橋樑。

在這個損失函數中，隱藏著權衡取舍的難題。如何決定各項的權重是個問題。若賦予某一項過大的權重，其他項就會被忽略。若只追求物理誤差最小化，就會忽略數據。若只追求數據擬合，就會違反物理規律。如何取得這種平衡是研究的一大主題。

讓我們將這種權衡比喻為烹飪調味。鹽放多了會太鹹，糖放多了會太甜。只要任何一種過量，味道就會失衡。損失函數的多個項目亦是如此。若某一項過於強勢，訓練就會偏向一方。因此，讓權重自我調節的方法也是當前的研究方向。

最早廣泛傳播這一概念的研究是 Raissi 等人於 2019 年發表的論文。隨後該方法廣泛傳播至燃燒領域。2025 年還出現了整理燃燒物理資訊學習的綜述文獻。該綜述將類型劃分為化學反應、反應流以及其他燃燒問題。這表明物理資訊學習已成為一股主流趨勢。

我們也必須坦率看待其局限性。物理資訊神經網路擅長尋找針對單一條件的解。然而一旦條件改變，往往需要重新訓練。目前仍難以一次涵蓋廣泛的條件。在強衝擊波或急劇變化的火焰面上，訓練過程也可能會產生波動。彌補這些弱點的研究至今仍在持續進行。

8.3 剛性反應動力學與守恆約束物理學習

8.3.1 化學反應數值剛性與標準訓練的崩潰

剛性發生在某些變化極快而某些變化緩慢的時候。燃燒化學中這種情況非常普遍。像自由基這樣的中間產物在瞬間生成隨即消失。相反地，溫度或主要成分的變化則相對緩慢。

讓我們看看這個時間差異有多大。快速反應是以十億分之一秒為單位進行的。緩慢流動則以千分之一秒為單位運動。兩種尺度的差異超過百萬倍。這種巨大的差距成為動搖計算穩定性的剛性根源。

若以相同的時間步長求解快慢不一的變化，就會產生問題。若將步長對齊快速反應，計算時間將變得漫長無比。若對齊緩慢流動，則會遺漏快速反應導致計算發散。傳統數值分析長期以來也在這一環節苦苦摸索。因此傳統數值分析一直採用特殊的時間積分法來處理此問題。

這種時間差距與攝影非常相似。假設要將蜂鳥拍動翅膀與烏龜漫步同時捕捉在一張照片中。若對齊蜂鳥，就必須無數次按下快門。若對齊烏龜，蜂鳥就會變得模糊不清。難以將兩者同時完整呈現在同一個畫面中。燃燒過程中的快速反應與緩慢流動亦是如此。

標準物理資訊神經網路在此處經常崩潰。該神經網路試圖一次性減少所有誤差。快速反應所產生的巨大誤差主導了訓練過程。這樣一來，就無法正確學習緩慢變數的平衡。這種訓練偏向單一側的現象被稱為梯度病態。

讓我們將這種病態具象化。假設一個大聲喧嘩的聲音獨佔了整個會議。安靜之人的發言就會被淹沒。會議便會一面倒。快速反應的巨大誤差就是那個喧鬧的聲音。因此，緩慢變數的平衡在訓練中就被擠到了次要位置。

這裡還隱藏著另外兩個原因。其一是神經網路較晚學習急劇變化的特性。神經網路會先掌握平緩的流動，而將劇烈的變化推遲到後面。這種特性被稱為譜偏差。點火瞬間的陡峭變化正是這種劇烈的部分。另一個問題是無法遵守時間因果律。在燃燒過程中，前一時刻是後一時刻的原因。然而標準訓練試圖同時擬合所有時間點。這會打亂因果順序。嚴重時甚至會退化為完全沒有反應發生的平庸解。因此，出現了分時段循序學習，或是針對不同化學物種賦予不同權重的方法。

另一個問題是守恆定律的崩潰。在同時權衡多個項目時，平衡可能會被打破。各化學物種濃度的總和必須始終保持恆定。原子數量在反應前後也必須相等。一旦打破這項規則，就會出現負濃度等荒謬的數值。

讓我們探討為何負濃度是個大問題。某種物質的量為負數在現實中是不存在的。水不可能有「負一杯」。若計算輸出這種數值，後續步驟就會崩潰。反應速率計算將會失控或停滯。因此，必須嚴防濃度跌入負值。

探討該問題的早期研究有多項。Ji 等人於 2021 年提出的 Stiff-PINN 就是代表性例子。該研究為了處理剛性化學而引入了特殊處置。多尺度物理資訊神經網路也在相近時期問世。這些研究證實了剛性對訓練而言是多麼巨大的障礙。

這道障礙在火箭領域變得更高是有原因的。甲烷與氧氣的燃燒具有繁多的反應路徑。所涉及的物質多達數十種。隨著物質種類增加，剛性也隨之增強。因此，火箭燃燒處於剛性問題中最為棘手的一端。強烈施加物理約束的方法也因而顯得尤為迫切。

8.3.2 守恆約束與時間積分的結合

解決剛性問題的關鍵在於更牢固地施加物理約束。施加物理約束的方法大致有兩種。其一是違反規則時給予懲罰的軟約束。在損失函數中加入物理誤差項的方法即屬於此類。另一種則是從結構上徹底杜絕違規的硬約束。剛性越嚴重，就越需要將這兩種方法結合使用。

第一個工具是將經驗證的時間積分器與神經網路相連結。龍格-庫塔法是將時間細分以求解微分方程式的標準技術。然而必須謹慎選擇其類型。直接由前推導後續數值的顯式方法在剛性問題面前顯得脆弱。若要穩定求解，就必須將時間步長切分得極其細碎。因此在剛性問題中，會採用隱式系列的穩定積分法。將這種穩定性經過驗證的積分結構嵌入神經網路中。如此一來，深度學習便能繼承數值分析長年累積的穩定性。

第二個工具是強制守恆的投影。並不直接使用神經網路輸出的濃度。首先將數值一律轉換為正數。接著重新調整以使總和保持恆定。最後調整數值以確保原子數量守恆。經過此過程後，完全不會出現違反物理規律的數值。

讓我們將投影比喻為守門人。無論神經網路輸出什麼數值，都在門前進行檢驗。若不符合規則，就修正為鄰近的正確數值。將負數轉為正數。若總和偏差則重新調整。因此向外輸出的數值始終遵守規則。

這種方式與軟約束方式有所不同。軟約束方式在違反規則時僅給予懲罰。懲罰只能引導訓練，卻無法杜絕違規。硬約束方式則從結構上阻斷違規本身。即使訓練不夠成熟，物理規律依然得以維持。因此這是非常適合安全至上的火箭領域之方法。

實際案例有 CRK-PINN。這項研究是以物理資訊神經網路求解燃燒反應速率方程式的案例。作者為張斯宏、張馳、王博森。該論文經過同行評審發表於學術期刊《Combustion and Flame》（燃燒與火焰）。該方法採用將物理定律作為損失函數項目的軟約束。將質量作用定律與阿瑞尼斯定律納入損失中。焓守恆、元素守恆以及濃度總和守恆也以相同方式加以約束。與前述的硬投影不同，它是透過懲罰來引導符合物理規律的方式。

其性能亦已公開。在氫氣與空氣的反應體系中，計算速度大幅提升。該研究涵蓋了十種物質與二十一項反應。相較於標準計算，速度快了大約六倍到十四倍。與實際反應流計算耦合時，速度也快了大約兩倍到五倍。這是既遵守物理定律又獲得計算速度的典範案例。

讓我們探討提速數倍的涵義。化學反應計算在燃燒分析中是耗時極長的一大部分。整個計算時間的大部分份額都消耗於此。若能將這一部分提速十倍，整體時間就會大幅縮減。原本需要數天的計算縮短為一天。修改設計與重新測試的週期也隨之加快。

在此特別釐清，以免混淆軟約束與硬約束。CRK-PINN 是透過損失引導物理規律的軟約束方式。它與強制修正數值的硬投影在性質上有所不同。兩種方式可以結合使用，也可以單獨使用。軟約束具備靈活性，但無法完全杜絕物理違規。硬約束能杜絕違規，但會使結構變得複雜。究竟要在何種程度上採用哪一方，取決於設計時的判斷。

這種方式帶來的啟示簡單而明確。那就是不拋棄經過驗證的數值分析知識。像龍格-庫塔這樣的方法已經歷經數十年的淬鍊。人工智慧建立在這些知識之上來壯大力量。這是一種讓古老的物理知識與新型學習不相互對立、彼此相輔相成的方式。

然而局限性也很明確。這類方法是在所探討的反應系統內得到驗證的。火箭的甲烷與氧氣燃燒更加複雜。物質與反應的數量要多得多。若要轉移到新的反應系統，必須重新訓練並驗證。物理約束施加得越強，計算變得越沉重，這也是一種權衡。

8.4 基於柯爾莫哥洛夫-阿諾德網路的反應流建模

8.4.1 在連接線上置入函數的基礎與自適應活化函數

首先讓我們回想一下普通神經網路的結構。神經網路是由節點以及連接節點的連接線所構成。節點上放置著固定的活化函數。連接線上則只附帶著名為權重的數值。訓練就是調整這些權重數值的過程。

我們先來解釋一下活化函數這個詞。神經網路接收輸入，經過某條曲線後輸出。這條曲線就是活化函數。普通神經網路固定了這條曲線的形狀。透過疊加多條固定的曲線來建立複雜的關係。訓練則是在保持曲線形狀不變的情況下，僅改變疊加的強度。

柯爾莫哥洛夫-阿諾德網路顛覆了這種配置。它將函數置於連接線上，而非節點上。透過訓練來改變該函數本身。它不採用固定的形狀，而是靈活地塑造曲線。這個構想源自很久以前被證明的一項數學定理。

該定理就是柯爾莫哥洛夫-阿諾德表示定理。這個定理指出，複雜的函數可以表示為簡單一維函數的總和。此結構將每條連接線上的函數表示為靈活的曲線。這條曲線可以在局部改變形狀。因此可以專門挑選像火焰這樣變化劇烈的地方進行細緻刻畫。

我們把這個定理比作積木堆疊。再複雜的形狀也是幾種基本積木的組合。將大結構拆分成小碎片後重新連接。複雜的函數也可以拆解為簡單一維碎片的總和。柯爾莫哥洛夫-阿諾德網路將這種拆解作為其架構。古老的數學就這樣成為了新型神經網路的基石。

建構這條曲線的材料是B樣條（B-spline）。B樣條是一種將多段曲線平滑拼接在一起的方法。它與汽車設計師繪製流暢曲線時所使用的工具屬於同一個體系。每個片段只在其所屬區間內產生影響。因此即使修改了一處，其他

地方也不會受到干擾。

這種局部性為學習帶來了優勢。可以只在火焰形成的狹窄區間進行密集劃分。其餘廣闊的區間則保持稀疏。這是一種將資源集中在所需之處的方式。這被稱為網格細化。因此在節省計算資源的同時，仍能獲得所需的精度。

我們很容易體會到這種特性的好處。哪種輸入對哪種輸出產生影響變得更加一目了然。可以僅對需要的區間進行精確表達。用肉眼觀察並深入剖析函數也更加容易。這非常適合像燃燒這樣局部變化劇烈的問題。

讓我們把節點與邊的差異換成生活中的例子。普通神經網路是將多個固定形狀的透鏡重疊的方式。透鏡形狀是固定的，只調節重疊的強度。柯爾莫哥洛夫－阿諾德網路則是直接研磨透鏡本身的形狀。因此能更自由地產生所需的折射。不過相應地，研磨透鏡需要耗費更多工夫。

當然，這種架構並非萬能。它的訓練可能會更加棘手。曲線劃分得越細，需要調節的數值就越多。根據問題的不同，有時普通神經網路表現更好。將新架構視為選項之一才是正確的看法。

8.4.2 火焰面表達能力與參數輕量化

火焰面是反應集中的薄層區域。在這裡，溫度在極短的距離內大幅飆升。常溫氣體瞬間升至數千度。濃度也發生劇烈轉變。要在數值計算中表達出這個狹窄區間內的陡峭變化並非易事。

普通神經網路在面對這種突變時顯得力不從心。利用固定的活化函數很難平滑地描繪出尖銳的界面。若勉強擬合，周圍便會產生如波紋般的誤差。神經網路還具有學習高頻資訊較慢的特性。正因這些特性，火焰面的計算結果往往會變得模糊。

我們把這種波紋比作旗幟的圖畫。假設只用柔軟的畫筆來畫一根直立的桿子。桿子尖銳的邊緣旁會產生波紋圖案。在計算中，尖銳的火焰面旁也會出現虛假的紋路。這種紋路在現實中並不存在，是虛假的。這類虛假紋路以現實中不存在的訊號擾亂了預測。

柯爾莫哥洛夫－阿諾德網路在這一點上可以展現優勢。它能以靈活的曲線更好地描繪陡峭的界面。可以專門挑選形成火焰的狹窄區間進行密集劃分。不需要的地方則保持稀疏以減少浪費。這種調配資源的自適應能力非常契合燃燒計算的需求。

實際的案例就是ChemKANs。作者為克尼格、金、鄧。該研究發表於2025年的學術期刊《物理化學化學物理》（Physical Chemistry Chemical Physics）。它將反應速率與熱力學定律的流動融入柯爾莫哥洛夫－阿諾德網路中。其目標是學習燃燒化學模型並加快計算速度。不過該研究驗證的並非空間中擴散的火焰面，而是學習了物質隨時間反應的化學反應器問題。火箭燃燒室的空間火焰面或衝擊波重構仍是未來的課題。

公開的結果具有實用價值。該模型以極少數量的可調參數運作。即使在混雜雜訊的資料中，也能在不發生過擬合的情況下良好學習。最高能承受百分之十五的雜訊。與標準計算相比，速度大約快了兩倍。同一個研究團隊還發表了隨壓力學習反應速率的後續初步研究。

我們來解釋一下抗雜訊能力強這句話的意義。實際測量中總是會混入雜訊。因為感測器並不完美。對雜訊脆弱的模型連這些雜訊都會死記硬背下來。這就叫做過擬合。抗雜訊能力強的模型則會只挑選真正的規律來學習。

我們把過擬合作應試複習。死記硬背答案的學生一旦遇到題目變更就會答錯。理解原理的學生則能解出新題目。抗雜訊能力強的模型就如同掌握了原理的學生。火箭量測資料中存在大量雜訊。因此這種抗雜訊的特性在火箭量測中彌足珍貴。

該模型的優勢應當在已獲驗證的範圍內加以闡述。已獲確認的有三點：可調參數少、抗雜訊能力強，以及相較於標準計算速度快約兩倍。宣稱性能高於此的數據目前仍需驗證。因此本書僅論述這些已確認的範圍。

柯爾莫哥洛夫－阿諾德網路對火箭而言意味著什麼？火焰面在火箭燃燒室內也呈現為薄層。只有精確描繪這個薄層，才能準確預測熱量與壓力。參數越少，計算就越輕量。輕量模型非常適合用於即時計算。因此該架構作為即時診斷的候選方案而備受關注。

我們來探討一下「參數少」這句話的分量。參數是模型所調節的數值數量。如果這個數量龐大，學習時就需要大量資料。計算負擔沉重，記憶體消耗也極大。若能以較少的參數完成相同的工作，在各方面都大有裨益。甚至可

以在搭載於火箭上的小型電腦中運行。

局限性也必須一併審視。這些案例是在相對簡單的反應系統中得到驗證的。當化學物種增加到數十種時，連接線數量會呈爆炸性增長。如此一來記憶體佔用與訓練時間可能會大幅增加。正因如此，進一步精簡優化架構的研究仍在持續進行。火箭的高壓紊流燃燒要複雜得多。要將這種架構應用於實際發動機設計，還有很長的路要走。需要更多公開代碼、對比實驗與獨立驗證。目前將其視為有前途的候選架構更為恰當。

8.5 將函數轉換為函數的傅立葉神經運算子

8.5.1 運算子學習原理與網格無關性

運算子是從函數映射到函數的規則。這話聽起來有些深奧，我們換個例子來說明。假設輸入燃燒室入口的流量分佈，便能輸出整個燃燒室的溫度分佈。將這個入口圖案轉換為溫度圖案的規則，就是運算子。

我們把函數與函數的映射比作烹飪。假設輸入整份食材清單，就會輸出完成的料理照片。食材稍作改變，料理也會隨之改變。運算子學習學會了這種整體轉換。它掌握的不是單個食材的數值，而是整體關係。因此即使條件發生變化，也能迅速給出答案。

普通神經網路將幾個數字轉換為幾個數字。運算子學習則是將一幅圖像轉換為另一幅圖像。因此它能一次性處理整個流場。率先拓展這一構想的研究是DeepONet。傅立葉神經運算子也是屬於這種運算子學習的方法。

我們來探討一下為什麼這種差異如此巨大。如果每遇到一種條件都要重新計算，速度會很慢。一旦學會了運算子，就能迅速應對各種條件。即使入口條件發生變化，也無需重新訓練。在設計過程中需要無數次更改條件。因此運算子學習作為設計工具而備受矚目。

傅立葉神經運算子的核心在於傅立葉轉換。傅立葉轉換是一種將複雜形狀轉換為多個波動之和的技術。低頻波動包含流動的宏觀結構，高頻波動則包含如細微紋理般的細節。該神經網路主要透過學習低頻成分來快速描繪宏觀流動。

這種方法有其獨特的優勢。神經網路將流動視為波動之和。宏觀流動被歸納為少數幾個低頻成分從而得以快速掌握。這有利於將廣闊區域的關係盡收眼底。然而該方法並非直接求解方程式微分的數值方法。若僅保留低頻並截斷高頻，計算負擔會減輕。但這種截斷反而可能使衝擊波或火焰面等尖銳部分變得模糊。因此在細節至關重要的地方必須謹慎對待。

我們把這種模糊比作照片。失焦的照片邊緣模糊，銳利的線條看起來暈開。截斷的高頻越多，就越容易產生這種暈開現象。火焰銳利的邊界可能會被抹平。因此這類地方需要進行保留高頻的額外處理。

該方法一個引人注目的特性是網格無關性。該模型的定義與計算網格的疏密無關。在利用低解析度資料進行訓練後，可以應用於更密集的網格上。這被稱為零樣本超解析度（zero-shot super-resolution）。這與將低解析度照片還原為高解析度非常相似。不過這只是理論特性以及在特定實驗中展現的結果，在新解析度下的準確度並不會自動得到保證。

普通神經網路無法做到這一點。輸入與輸出的維度從一開始就是固定的。一旦改變網格，就必須重新構建模型。傅立葉神經運算子則不同，它將流動視為函數而非網格。因此即使解析度發生變化，也可以使用同一個模型。

我們把傅立葉轉換比作收音機。收音機按頻率接收不同的廣播節目。低頻與高頻承載著不同的資訊。傅立葉神經運算子也將流動按頻率進行劃分。宏觀流動包含在低頻中，細微紋理則包含在高頻中。該神經網路選取低頻部分，從而迅速掌握宏觀流動。

網格無關性為火箭計算帶來了巨大的優勢。在開發初期，可以使用粗糙的網格快速評估多種方案。選出優秀方案後，再以密集的網格進行精確驗證。此時無需重新訓練模型。由於同一個模型可以直接應用於兩種解析度，時間與成本得以同時降低。

然而並非所有問題都能自動解決。在像衝擊波這樣數值發生突變的地方難度很大。對於薄火焰面和近壁處的紊流也必須格外小心。在這些地方，高頻資訊至關重要。必須經過額外處理與驗證才能確保其可靠性。

8.5.2 用於燃燒流的神經運算子

燃燒是熱、流動與化學相互交織的難題。針對這一問題調整神經運算子的研究正在持續進行。多個團隊正在嘗試不同的方法。在此我們以概念為中心來審視經過驗證的最新案例。

其中一個方向是利用運算子學習剛性化學。擴展傅立葉神經運算子（EFNO）就是一個例子。作者為翁、李、張、陳、周。該研究試圖在未學習過的條件下求解剛性化學問題。在零維氫氣自燃與三維氫氣射流火焰中進行了測試。研究展現了即使在未經訓練的狀態下也能良好泛化的特性。這項擴展運算子研究發表於學術期刊《燃燒與火焰》（Combustion and Flame）。

我們來解釋自燃這個詞。將燃料和氧氣置於高溫下，便會自行起火。這是不需要火柴也能自行燃燒的現象。這個瞬間的化學反應極為迅速且剛性很高。擴展算子試圖學習這個困難的瞬間。這是常被用作剛性化學試金石的問題。

我們來探討擴展算子為何重要。一般神經網路通常只在學習過的條件下表現良好。溫度或壓力只要稍有偏差就會失準。擴展算子試圖降低這道門檻。在測試中，它在一定程度上推廣至未曾學習的條件。這展現了應用於全新火箭條件的可能性。

另一個方向是直接學習整個三維反應紊流。一項研究透過結合 U-Net 架構的傅立葉神經算子來處理此問題。U-Net 是一種能同時兼顧整體輪廓與局部細節的神經網路架構。它良好地重現了可壓縮反應紊流之速度、溫度與密度的頻率特性。該方法比傳統計算更快地預測了流動。這些結果展現了代理模型的潛力。這類研究大多仍處於同儕審查前的初期階段。

我們也來解釋「良好符合頻率特性」的意思。流動中混合了大型渦流與小型渦流。各種尺寸的渦流都蘊含著能量。能否正確描繪出這種能量分布是一項重要標準。如果只掌握了大尺度流動而忽略了小渦流，就只能算成功了一半。優良的算子能廣泛重現大尺度流動與小渦流的這種能量分布。

第三個方向是以算子處理輻射熱傳。高溫火焰也會以光的形式散失熱量。這稱為輻射熱傳。Zhao 等人提出了求解火災輻射熱傳的神經算子。這項研究是以火災而非火箭為對象的初期研究。因此不將其延伸應用於火箭實證，僅作為鄰近案例參考。

我們以營火來感受輻射熱傳。站在營火前，臉上會感到炙熱。在空氣變熱之前，光線便已先傳遞了熱量。火箭燃燒室內的火焰也是這樣透過光散發熱量。這種輻射加熱了壁面，並使火焰冷卻。因此，若要進行準確的預測，必須將這股輻射熱一併納入考量。

將輻射納入計算相當棘手。光線向四面八方射出並互相交織。每個方向的強度都不同。從火災研究中出現了試圖用算子學習這種複雜流動的嘗試。若要轉移至火箭領域，必須重新調整條件並進行驗證。即便如此，這仍是展現未來方向且深具意義的初期案例。

這些案例展現了共同的優勢。學習高精度計算結果後，能建立快速的代理模型。它可以將低解析度的計算結果還原為高解析度形式。在感測器較少的情況下，能作為估算整個場域的輔助工具。亦可用於在短時間內掃描設計空間。

算子學習與物理資訊學習也有交會之處。神經算子雖然快速，但並不總是嚴格遵循物理規律。我們可以在此處將守恆約束設為損失函數。這是試圖兼得算子速度與物理可信度的嘗試。這種結合將在後面的旋轉爆震案例中再次出現。因此，這兩種工具並非相互競爭，而是相輔相成。

在此說明應如何解讀這些案例。本書並未列出特定模型的性能比較表。因為初期研究的數據會隨條件不同而有顯著差異。取而代之的是，透過經過驗證的案例來說明神經算子所扮演的角色。本書更著重於方法的應用，而非單純的數字。

也有大規模計算的案例。DeepFlame 研究團隊導入神經網路，大規模求解了超臨界燃燒。作者為 Guo、Mao、Liu、Tan、Jia、Chen。根據公開資料，他們計算了數百億網格規模的甲烷與氧氣紊流燃燒。這大幅超越了以往的計算能力範圍。這是邁向擁有一百多個噴注器之火箭燃燒的初期研究。

若要應用於實際設計，有許多檢查項目。必須檢視是否遵循質量與能量守恆。必須確認震波位置是否正確。必須檢查化學物種濃度是否落入負值。只有通過這些驗證，它才能真正成為實用的工具。代理模型是輔助精密計算的夥伴，而非替代品。

8.6 旋轉爆震發動機的震波燃燒界面重建

8.6.1 旋轉爆震發動機分析課題

旋轉爆震發動機（RDRE）採用環形燃燒室。爆震波在其內部沿著圓周快速旋轉。爆震是震波與燃燒緊密結合並一同前進的爆炸性燃燒。這種波以數倍於音速的每秒數千公尺速度傳播。

這種方式的優勢在於燃燒本身就能提高壓力。一般發動機是先用壓縮機或泵浦提高壓力後再進行燃燒。爆震則是藉由震波瞬間壓縮氣體並燃燒。因此在燃燒過程中壓力會自行上升。這稱為壓力增益燃燒。然而，將燃料與氧氣注入所需的噴注壓力仍然不可或缺。即便燃燒器內部壓力上升，在噴注、混合與排氣過程中依然會產生損失。因此以整個發動機來計算的效益取決於具體條件。若運用得當，具有提高效率的潛力，因此全球多家機構皆已投入研發。

我們來探討爆震與一般燃燒的差異。一般燃燒是火焰緩慢蔓延擴散。爆震則是由震波引領，如爆炸般傳播。震波在瞬間壓縮空氣並使其升溫。緊隨其後的燃料隨即燃燒。震波與火焰緊密結合的這種結構產生了極高的壓力。

問題在於其內部極為複雜。前導震波與放熱反應區緊密相連。斜震波、接觸面與未燃混合層交織在一起。這些結構以百萬分之一秒為單位相互作用。因此在流體力學中名列極度困難的問題之一。

我們將這種相互作用比喻為道路上的交通事故。多輛車在狹窄的十字路口同時糾纏在一起。一處的變化瞬間蔓延至整體。在爆震內部，震波與火焰也是如此交織。微小的擾動便會改變整個波形。因此很難預測並控制這款發動機的內部狀態。

量測方面更是令人棘手。在地面測試中所能觀測到的資訊非常有限。燃燒室外壁的壓力訊號幾乎就是全部。有時也會使用超高速相機拍攝火焰的光芒。這種光稱為自發光。這是特定分子在反應時自行發出的光。然而透過這類量測，無法直接得知內部三維狀態。

我們也來了解為何要研發旋轉爆震發動機。一般火箭發動機是在恆定壓力下燃燒燃料。爆震燃燒則是在燃燒過程中自行提高壓力。這有可能以相同的燃料獲得更大的推力。發動機也有機會做得更短、更輕。因此這種方式被視為次世代推進技術的有力候選者。

我們用相機來比喻這款發動機的困難度。假設要為高速旋轉的陀螺拍照。若快門太慢，陀螺就會變得模糊不清。爆震波的速度遠比陀螺快得多。無論多快的相機都只能捕捉到外觀。若想窺探其內部，必須透過計算來填補空白的部分。

我們從數字來感受爆震波的速度。這種波以每秒數千公尺的速度傳播。這是比子彈還要快的速度。繞行環形燃燒室一圈所需時間甚至不到一毫秒。在如此短暫的時間內，壓力與溫度劇烈起伏。其變化之快，人眼根本無法跟上。

因此，重建模型顯得極為迫切。我們需要能從稀疏量測中還原整體流動場的工具。必須在短時間內估算壓力、溫度、速度以及化學物種的分布。這正是物理資訊學習與算子學習交會之處。本章所學到的方法將在此處攜手合作。

8.6.2 融合數據與物理的重建與數位孿生

重建的第一個工具是超解析度技術。它能將稀疏或粗糙的量測還原為精細的場域。Yao 與 Zhang 於 2026 年的研究嘗試透過循環一致對抗神經網路來實現此目標。對抗神經網路是生成方與判別方相互競爭並學習的架構。這與偽造者和鑑定師互相切磋訓練的景象十分相似。該方法使用氫氣與空氣的發動機計算數據進行學習。展示了將粗糙流動場還原為八倍精細場域的成果。這項結果已發表於學術期刊。

我們以圖像來看看為何需要超解析度。放大舊照片時，會出現階梯狀的粗糙邊緣。超解析度技術能將這張粗糙的照片平滑地還原。在燃燒計算中也會產生粗網格的結果。若將這種粗糙場域還原為精細場域，資訊量便會增加。

這是一條透過粗糙計算節省運算成本，同時找回細節的途徑。

下一個工具是多傳真度融合。它結合了低成本的低精度計算與高成本的高精度計算。其構想是即使只用少量的高精度數據，也能獲得準確的估算。一項名為 Cheap2Rich 的研究將此方法應用於旋轉爆震發動機。作者為 Bao、Zajac、Powers、Raman、Kurtz。這項多傳真度研究仍是處於同儕審查前的初期研究。

我們將多傳真度的優點比喻為過日子持家。如果只用昂貴的食材，家計就會很吃緊。用平價食材打底，只在關鍵之處使用優質食材。計算也是如此。以低精度計算奠定大致框架。僅在重要之處以高精度計算進行微調。這便是以較低成本獲得高準確度的方法。

這種融合也引入了資料同化的概念。資料同化是持續校準計算與實際量測的方法。就像氣象預報接收觀測資料以修正預測一樣。在旋轉爆震發動機中也會傳入感測器訊號。利用這些訊號持續修正計算。如此一來，模型的預測便能更貼近實際發動機的狀態。

另一個工具是反映觀測數據的生成模型。生成模型是能自行產生逼真場景的神經網路。若將稀疏觀測作為條件輸入，它就能描繪出整體場域。即使觀測位置改變，也有無需重新學習即可直接使用的空間。Wang 等人針對旋轉爆震燃燒器重建提出了這種嘗試。因此在感測器較少、觀測不足的情況下相當實用。

最後一個工具是神經算子與物理神經網路的結合。神經算子能快速估算整個場域。物理神經網路則約束其遵循守恆定律。結合這兩種方法，便能成為兼具速度與符合物理規律的估算器。一旦感測器訊號輸入，即可在短時間內還原內部狀態。

這些重建結果延伸至數位孿生。數位孿生是電腦模型即時跟隨實體裝置狀態的技術。從重建的流動場中可以計算壁面熱負荷與燃燒效率。能提前察覺噴注器因熱侵蝕而受損的風險。亦能連結至在短時間內抑制燃燒不穩定性的控制系統。

我們將燃燒不穩定性比喻為盪鞦韆。若配合節奏推鞦韆，鞦韆就會越盪越高。燃燒室內的壓力震盪若與火焰節奏吻合，震盪也會加劇。這種震盪一旦變大，發動機可能會損壞。因此必須迅速察覺震盪並打破其節奏。即時重建與控制正是負責察覺並抑制這種震盪的工作。

不過在此也有許多需要謹慎之處。這些重建研究大多處於初期階段。標榜大幅提速或高準確度的數字往往受限於特定條件。因此本書並未在正文中引用這類數字。這部分僅以設計概念與經過驗證的案例進行說明。

我們來探討數位孿生為何實用。在測試過程中無法直接看到實際發動機的內部。數位孿生透過感測器訊號推估內部狀態。它能比人類更快察覺危險前兆。可以在問題擴大之前發出警訊。在可重複使用火箭中，這種預警功能彌足珍貴。

自更新也潛藏著隱患。若模型依據自身的預測來修正自己，誤差可能會不斷累積。甚至可能將自身推向錯誤的方向。2026 年的一項研究指出了這個問題。該研究提出了以物理規律穩定化的自更新數位孿生。這項研究是以一般熱傳問題而非火箭來展示概念。這種方式是由物理規律來牢牢控制更新的方向。

我們來看看為何需要限制器。人工智慧有時會產生離譜的數值。若將該數值直接輸入控制系統將會非常危險。限制器能防止數值超出安全範圍。它是守護人類所設定之物理極限的防護欄。在自主控制中，這道防護欄絕對不可或缺。

若要應用於實際發動機控制，還需要更多準備。必須累積足夠的高速測試數據。必須伴隨獨立的驗證。亦須配備保障安全的限制器。這種趨勢顯示該技術仍在走向成熟的過程中。儘管如此，方向依然明確。結合數據與物理規律的重建方法正逐漸確立其地位。

小結

本章探討了將人工智慧導入燃燒計算的幾條途徑。出發點是一個問題。火箭燃燒交織著快速的化學反應與緩慢的流動，計算量龐大。傳統計算雖然精確但速度緩慢。人工智慧雖然快速，但若違背物理定律則相當危險。

其解答便是物理資訊機器學習。神經網路不只模仿數據，還一同遵循質量與能量守恆等定律。物理資訊神經網路是其代表性方法。即使數據稀少，物理也能填補空白。在求解反問題時，這種力量展現得尤為顯著。

在此先整理一下人工智慧與物理之間的關係。人工智慧擅長從數據中尋找規律。物理則蘊含著長期驗證的定律。僅靠兩者之一皆有所不足。若僅使用數據，便會違背物理定律。若僅使用物理，計算量又過於龐大。因此，將兩者結合運用正是本章整體的精髓所在。

在剛性問題中，必須更嚴格地施加物理約束。很多時候單靠罰分項並不足夠。將時間積分器引入神經網路以獲取穩定性。透過強制守恆的投影來防止出現不合理的數值。CRK-PINN 是將物理作為損失施加軟約束的範例。

讓我們再次回顧多組分反應流動的方程式。質量、動量、化學物種與能量這四項平衡是其骨架。這種平衡是一切都不會無端產生或消失的規則。物理資訊學習將這項規則納入損失函數中。利用自動微分精確測量方程式殘差。得益於此，即使在稀疏數據下也能還原整體全貌。

柯爾莫哥洛夫-阿諾德網路提出了一種嶄新的結構。在連接線上配置靈活的函數。能更出色地刻畫陡峭的火焰面。ChemKANs 在燃燒化學中展現了這種潛力。即使數值較少，也能產出抗噪性強的結果。

傅立葉神經運算子將函數轉換為函數。在低解析度下學習，並能應用於高解析度。成為快速的代理模型與還原工具。擴展運算子與 U-Net 結合的研究在反應流動中展現了成果。處理輻射熱傳遞的運算子研究也在相鄰領域中湧現。不過對於衝擊波與薄火焰面仍需謹慎對待。

旋轉爆震發動機是這些方法匯聚的舞台。其目標是從稀疏的測量中還原內部狀態。超解析度與多保真度、運算子與物理神經網路的結合皆被應用。其成果延伸至數位孿生與即時控制。目前仍處於初期階段，需要更多的驗證。

讓我們用一句話來概括本章的方法。這些全都是將物理與數據結合運用的途徑。物理給予信任，數據賦予速度。單靠任何一方都很難處理火箭燃燒。兩股力量交會之處便有解答。本書以經過驗證的案例指出了那個交會點。

在此也整理一下本章所引用案例的性質。Raissi 的物理資訊神經網路與 Li 的傅立葉神經運算子是廣受引用的基礎研究。CRK-PINN 與 ChemKANs 是經過同儕審查的期刊論文。DeepFlame、擴展運算子與多保真度還原是最新研究。其中相當多數仍處於初期階段的預印本。初期研究意味著未來仍有變動的空間。

貫穿本章的態度也值得深思。本書以證據為先來挑選案例。僅有響亮名稱的模型則降格為概念處理。未經證實的性能數值並未寫入正文。初期研究則明確註明為初期研究。這是為了協助讀者區分事實與期望。

未來的課題同樣明確。需要能在廣泛條件下一次性良好適配的模式。必須能夠穩定地處理衝擊波與薄火焰面。以實際發動機數據進行驗證的案例需要更多累積。保障安全的限制器也必須同步發展。隨著這些課題逐一破解，工具將更貼近工程現場。

本章帶來的啟示十分明確。人工智慧大幅改變了燃燒計算的速度。但唯有物理與驗證並行時才值得信賴。相較於華麗的模型名稱，經過確認的根據更為重要。在這份平衡之上，下一代推進技術正一步步成長。當人工智慧與物理攜手並進時，那步伐將更加堅實。

相關佐證資料

- Raissi, M., Perdikaris, P., & Karniadakis, G. E. (2019). Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, 378, 686-707. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045>
- Karniadakis, G. E., Kevrekidis, I. G., Lu, L., Perdikaris, P., Wang, S., & Yang, L. (2021). Physics-informed machine learning. *Nature Reviews Physics*, 3, 422-440. <https://doi.org/10.1038/s42254-021-00314-5>
- Li, Z., Kovachki, N., Azizzadenesheli, K., Liu, B., Bhattacharya, K., Stuart, A., & Anandkumar, A. (2021). Fourier Neural Operator for Parametric Partial Differential Equations. *International Conference on Learning Representations*. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2010.08895>
- Kovachki, N., Li, Z., Liu, B., Azizzadenesheli, K., Bhattacharya, K., Stuart, A., & Anandkumar, A. (2023). Neural Operator: Learning Maps Between Function Spaces With Applications to PDEs. *Journal of Machine Learning Research*, 24, 1-97. <https://www.jmlr.org/papers/v24/21-1524.html>
- Lu, L., Jin, P., Pang, G., Zhang, Z., & Karniadakis, G. E. (2021). Learning nonlinear operators via DeepONet based on the universal approximation theorem of operators. *Nature Machine Intelligence*, 3, 218-229. <https://doi.org/10.1038/s42256-021-00302-5>
- Lu, L., Meng, X., Mao, Z., & Karniadakis, G. E. (2021). DeepXDE: A deep learning library for solving differential equations. *SIAM Review*, 63(1), 208-228. <https://doi.org/10.1137/19M1274067>

- Liu, Z., Wang, Y., Vaidya, S., Ruehle, F., Halverson, J., Soljagic, M., Hou, T. Y., & Tegmark, M. (2025). KAN: Kolmogorov-Arnold Networks. International Conference on Learning Representations. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2404.19756>
- Ji, W., Qiu, W., Shi, Z., Pan, S., & Deng, S. (2021). Stiff-PINN: Physics-Informed Neural Network for Stiff Chemical Kinetics. *The Journal of Physical Chemistry A*, 125(36), 8098-8106. <https://doi.org/10.1021/acs.jpca.1c05102>
- Zhang, S., Zhang, C., & Wang, B. (2024). CRK-PINN: A physics-informed neural network for solving combustion reaction kinetics ordinary differential equations. *Combustion and Flame*, 269, 113647. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2024.113647>
- Koenig, B. C., Kim, S., & Deng, S. (2025). ChemKANs for combustion chemistry modeling and acceleration. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 27(33), 17313-17330. <https://doi.org/10.1039/D5CP02009C>
- Koenig, B. C., & Deng, S. (2025). Kolmogorov-Arnold Chemical Reaction Neural Networks for learning pressure-dependent kinetic rate laws. arXiv preprint(預印本, 尚未經同儕審查). arXiv:2511.07686. <https://arxiv.org/abs/2511.07686>
- Weng, Y., Li, H., Zhang, H., Chen, Z. X., & Zhou, D. (2025). Extended Fourier Neural Operators to learn stiff chemical kinetics under unseen conditions. *Combustion and Flame*, 272, 113847. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2024.113847>
- Wu, J., Wang, X., Zhang, G., Liu, J., Li, X., Zhang, Y., Zhang, H., Lyu, J., Wang, B., & Wu, Y. (2025). Physics-informed machine learning for combustion: A review. arXiv preprint(預印本, 尚未經同儕審查). arXiv:2509.03347. <https://arxiv.org/abs/2509.03347>
- Zhang, Z., Li, Z., Wang, Y., Yang, H., Peng, W., Teng, J., & Wang, J. (2026). Prediction of three-dimensional chemically reacting compressible turbulence based on implicit U-Net enhanced Fourier neural operator. *Acta Mechanica Sinica*, 42(7), 725274. <https://doi.org/10.1007/s10409-025-25274-x>
- Guo, Z., Mao, R., Liu, L., Tan, G., Jia, W., & Chen, Z. X. (2025). Deep Learning-Enabled Supercritical Flame Simulation at Detailed Chemistry and Real-Fluid Accuracy Towards Trillion-Cell Scale. Proceedings of the International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC25). arXiv:2508.18969. <https://doi.org/10.1145/3712285.3759850>
- DeepModeling. (2026). DeepFlame development repository. <https://github.com/deepmodeling/deepflame-dev>
- Jiao, A., Jiang, W., Lu, X., Wang, Y., & Lu, L. (2026). Nested Fourier-enhanced neural operator for efficient modeling of radiation transfer in fires. arXiv preprint(預印本, 尚未經同儕審查). arXiv:2604.13919. <https://arxiv.org/abs/2604.13919>
- Bao, Y., Zajac, J., Powers, M., Raman, V., & Kutz, J. N. (2026). Cheap2Rich: A Multi-Fidelity Framework for Data Assimilation and System Identification of Multiscale Physics -- Rotating Detonation Engines. arXiv preprint(預印本, 尚未經同儕審查). arXiv:2601.20295. <https://arxiv.org/abs/2601.20295>
- Yao, S., & Zhang, W. (2026). Super-resolution reconstruction of high-fidelity rotating detonation flow fields based on cycle-consistent generative adversarial networks. *Physics of Fluids*, 38(4), 041704. <https://doi.org/10.1063/5.0333031>
- Wang, X., Li, Z., Zhang, Y., Wen, H., & Wang, B. (2025). Observation-guided generative flow field reconstruction of rotating detonation combustor. *Physics of Fluids*, 37(11), 116110. <https://doi.org/10.1063/5.0300394>
- Karkadakattil, A. (2026). A Physics-Stabilized Self-Updating Digital Twin Framework Using Physics-Informed Neural Networks for Thermal Field Prediction. *Applied Computer Systems*, 31(1), 30-40. <https://doi.org/10.2478/acss-2026-0003>
- Shateri, A., Yang, Z., Yan, Y., Paul, M. C., & Xie, J. (2026). AI-Powered Surrogate Modelling for Multiscale Combustion: A Critical Review and Opportunities. arXiv preprint(預印本, 尚未經同儕審查). arXiv:2604.25617. <https://arxiv.org/abs/2604.25617>
- Mousavi, M., Caldwell, C., Baltes, J., Aljaseem, M., & Lee, B. J. (2025). Physics-Informed Neural Networks in Clean Combustion: A Pathway to Sustainable Aerospace Propulsion. arXiv preprint(預印本, 尚未經同儕審查). arXiv:2509.08094. <https://arxiv.org/abs/2509.08094>
- Poinsot, T., & Veynante, D. (2012). Theoretical and Numerical Combustion (3rd ed.). R.T. Edwards, Inc., Philadelphia, PA.

第9章

再生冷卻流道、氣膜冷卻孔及誘導輪的拓撲逆向設計最佳化

引言

夏天用手直接拿熱鍋會被燙傷。所以我們會用木頭或塑膠來製作鍋把，防止熱傳到手上。火箭發動機也面臨同樣的困擾。在發動機內部，燃料燃燒時會產生極為高溫的氣體。這種氣體高溫到足以熔化金屬。然而，容納這些高溫氣體的壁面卻是由金屬製成的。如何保護這層壁面，是火箭發動機設計的一大難題。

火箭以巧妙的方式解決了這個問題。它不會直接燃燒即將進入發動機的燃料，而是先讓燃料流經高溫壁面內部開設的細微流道。燃料在通過壁面時會吸收壁面的熱量，使壁面冷卻，同時燃料被加熱。被加熱的燃料隨後進入燃燒室燃燒。這是一種既能保護壁面又能預熱燃料的方法。這被稱為再生冷卻（regenerative cooling）。由於加熱後的燃料沒有被丟棄而是再次利用，因此冠上了「再生」之名。

再生冷卻是一項歷史悠久的方法，從早期火箭就開始採用。然而，過去很難自由設計冷卻流道，因為透過切削金屬進行加工的方式限制了流道的形狀。近年來，有兩項技術解開了這個束縛：一是金屬 3D 列印，另一項是能快速尋找優良設計的人工智慧。兩者的結合使冷卻設計邁入了嶄新局面。

本章將探討火箭發動機的熱管理結構。我們將檢視壁面內部的冷卻流道，以及在壁面覆蓋薄冷卻膜的膜冷卻孔，並一併探討用於推升燃料的泵前導葉片——誘導輪（inducer）。這三種結構都涉及熱量與流動的平衡問題。若想更強力地冷卻壁面，阻礙流動的阻力就會變大；若想減少阻力，冷卻效果就會減弱。單憑人力很難找到這個平衡點。

這正是人工智慧發揮作用的地方。本章所探討的人工智慧並非用來繪圖或寫作的人工智慧，而是能在複雜設計空間中快速找出良好解答的工具。某些人工智慧可以代勞緩慢的流動計算；某些人工智慧能自主挑選下一步要進行何種實驗；某些人工智慧則能將複雜的冷卻流道形狀精簡為一組精簡的數字。本章將逐一以深入淺出的方式說明這些工具。

我們有必要探討一下本章內容為何如此重要。在火箭發動機中，最常發生故障的地方就是熱管理系統與泵。一旦壁面熔化或泵發生振動晃動，發動機就會停止運轉。因此在研製新發動機時，這些部分需要耗費大量的時間與資金。即便設計速度只加快一點點、安全性只提高一點點，也能帶來莫大的助益。人工智慧正是在這一點上助了一臂之力，它能比人類更快地瀏覽廣泛的設計空間，並挑選出優良的候選方案。

有一點需要先行說明。火箭發動機冷卻設計是一個對安全餘裕要求極高的領域。壁面一旦熔化，發動機就會整體損毀。因此，我們不會盲目直接採用人工智慧給出的答案。人工智慧是用來快速尋找優秀候選方案的工具，最終判斷始終需透過高精度計算與實際燃燒測試來驗證。閱讀本章的案例時，也應秉持這一原則。

9.1 火箭保護高溫燃燒室壁面的方法

本節將探討火箭發動機如何保護其高溫壁面。首先探討火箭燃燒室為何如此高溫，接著說明何謂再生冷卻以及過去為何難以製造，最後檢視金屬 3D 列印如何改變這項設計。本節是後續所有內容的基礎。

在火箭發動機的主燃燒室內，燃料與氧氣相遇並燃燒。此時產生的氣體溫度輕易超過 3,000 度。鋼的熔點約為 1,500 度，燃燒氣體的溫度遠高於鋼的熔點。此外，燃燒室內部的壓力也極高，高性能發動機的內部壓力甚至可達大氣壓力的百倍以上。高溫高壓的氣體從內部推擠並加熱著薄薄的金屬壁面。

高壓也是一項沉重的負擔。燃燒室內部的高壓會將薄壁向外推擠，就像用力吹氣球時氣球皮會緊繃一樣。再加上內側高溫、外側低溫的巨大溫差，高溫側試圖膨脹，而低溫側則維持原狀，這種拉扯會在壁面留下巨大的應力。壓力與熱量可謂共同折磨著壁面。因此，壁面必須既薄、冷卻效果好又堅固。

傾瀉至壁面的熱量最高之處位於噴嘴喉部。噴嘴是向後噴出氣體以產生推力的喇叭狀零件。在該喇叭形狀中變窄收縮的部分被稱為噴嘴喉部（throat）。在此處，氣體加速至音速。雖然氣體本身的溫度在經過噴嘴時反而略有下降，但在噴嘴喉部傳入壁面的熱量卻達到最高峰。這是因為高速氣體強烈掠過狹窄壁面所致。單位面積傳入壁

面的熱量稱為熱通量（heat flux）。噴嘴喉部的熱通量極大，相當於數十個大火力暖爐的熱量集中在僅有手掌大小的狹小面積上。

我們可以想像一下熱通量究竟有多大。家用瓦斯爐一個爐口所產生的熱量分散在手掌大小的面積上；而在噴嘴喉部，同樣大小的面積卻集中了數十個爐口的熱量。這些熱量傾瀉在單層薄金屬壁面上，壁面內外兩側的溫差可達數百度。這巨大的溫差會導致金屬彎曲並引發裂紋。若無法有效冷卻壁面，壁面在幾秒內就會崩潰損壞。

如果壁面直接承受這些熱量，壁面就會熔化或變弱。因此需要採用再生冷卻。我們在壁面內部開設多條細微流道，先讓燃料流經這些流道。燃料在通過流道時會吸收壁面的熱量，使壁面冷卻，燃料被加熱。被加熱的燃料隨後進入燃燒室燃燒。這種方式在保護壁面的同時也預熱了燃料，因此不會浪費熱量。有時還會輔以膜冷卻。膜冷卻是沿著壁面覆蓋一層薄薄的冷卻流體膜的方法。兩種方法結合使用，可以更安全地保護壁面。

問題在於如何製造這些冷卻流道。過去是透過切削金屬塊來形成流道。切削加工的方式不得不使流道形狀保持簡單，通常是並排開出筆直的方形凹槽。這類流道很難因應不同位置大幅改變寬度或方向，難以對熱量高度集中的噴嘴喉部單獨進行更強力的冷卻。若強行縮小流道，燃料將難以通過，導致壓力損失增加。若壓力損失過大，將燃料推入的泵就必須耗費更多力量。

金屬 3D 列印正在打破這一局限。金屬 3D 列印是一種鋪上薄金屬粉末並以雷射熔融接合的方式，透過逐層堆疊來製造零件。這種方式能夠製造出傳統切削無法實現的複雜內部流道。甚至可以設計出如樹枝般分岔後再匯合的流道，或是沿著壁面曲面彎曲的流道。在熱量集中的地方可以密集排列流道，在其他地方則可以稀疏配置。設計的自由度大幅拓寬。

以實例來說明 3D 列印對冷卻流道帶來了多大的改變。過去的方法是在內壁開槽並在外壁覆蓋外罩來形成流道，必須製造多個零件後將其接合在一起。接縫過多可能會導致該處結構變弱。而 3D 列印則能將帶有流道的壁面一體成型列印出來。接縫減少使壁面更為堅固，製造步驟也隨之減少，從而節省了時間與材料。因此，對設計進行多次修改與測試變得更加容易。

冷卻流道所用的材料也同步獲得發展。美國國家航空暨太空總署（NASA）開發了一種名為 GRCop-42 的銅合金。銅是導熱性能極佳的金屬，GRCop-42

則是在銅中添加少量鉻與鈮的合金，既具備優良導熱性，又能在高溫下保持良好耐受力。這種合金可以透過 3D 列印將帶有流道的燃燒室一體成型列印出來。美國國家航空暨太空總署針對以此合金製成的燃燒室進行了實際燃燒測試，其研發與測試結果已整理於公開報告中。美國國家航空暨太空總署在次世代推進技術計畫中推動了該材料與製造技術的發展，成為材料、製造與設計協同推進的典範案例。

若同時輔以膜冷卻，可以更安全地保護壁面。在壁面上鑽出多個小孔，讓低溫流體從小孔少量流出。流出的流體沿著壁面形成一層薄膜，阻隔在高溫氣體與壁面之間。如果說再生冷卻是從內部冷卻壁面，那麼膜冷卻則是在壁面表面覆蓋一層保護膜。兩種方法相輔相成，在熱量高度集中的噴嘴喉部附近，有時會將這兩種方法重疊使用。

冷卻流道的形狀極大程度地決定了熱管理性能。流道越窄越密集，與壁面的接觸面積就越大；接觸面積越大，帶走的熱量就越多。然而，若流道過於狹窄，燃料將難以通過，推入燃料需要耗費更多力量。這種力量的損失稱為壓力損失。壓力損失越大，泵就必須以更高功率運轉。良好的冷卻流道既能有效冷卻壁面，又能保持較低的壓力損失。這兩者處於互相牽制的取舍關係。

新方法並非一帆風順。2025 年發表的一項研究分析了 3D 列印 GRCop-42 燃燒室的失效案例。在 2021 年 2 月的一次燃燒測試中，燃燒室在 9 秒內便發生損壞。探究原因發現，問題出在列印過程中作業曾暫停過的位置。該處產生的微孔遠多於平時，微孔過多會使該部位強度減弱。這個案例展現了新製造方式對品質管理是多麼敏感。在獲得設計自由度的同時，必須更嚴謹地監控製造過程。

拓寬的設計自由度也帶來了新的困擾。當流道形狀幾乎可以進行無限變化時，要挑選哪種形狀最好反而變得更加困難。單憑人工繪製幾種形狀並進行計算的方式，無法涵蓋廣泛的設計空間。光是精確計算單一流道內部的流動與熱量，電腦就需要耗費漫長的時間。人工智慧正是應用於快速且聰明地探索這個廣闊空間的工作中。從下一節開始，我們將逐一探討這些方法。

9.2 預測冷卻流道內燃料突變的代理模型

本節將探討冷卻流道內的燃料為何難以預測。用作冷卻劑的甲烷或煤油在高壓與高溫下性質會發生劇烈變化。計算這種多變流動的精確數值模擬非常緩慢，因此我們採用人工智慧代理模型來替代計算。在此將說明該代理模型的原理與局限性。

火箭的冷卻劑常採用甲烷（methane）或 RP-1。RP-1 是經過火箭級精煉的煤油，可說是我們日常所用煤油的近親。這些燃料在冷卻流道內部承受著極高的壓力。當壓力超過某個特定數值時，液體與氣體的界線便會變得模糊。以水為例，這就像鍋裡的水沸騰產生氣泡的界線完全消失的狀態。這種狀態被稱為超臨界（supercritical）狀態。處於超臨界狀態的燃料兼具液體與氣體的特性，呈現出介於兩者之間的性質。

「超臨界」這個詞聽起來可能有些深奧。我們用淺顯的方式來說明：在鍋裡燒開水時，水會化為氣泡沸騰，液體與氣體涇渭分明。然而，若將壓力提升至極高，這種沸騰現象就會消失。液體會平緩連續地過渡為類似氣體的性質，產生氣泡的明確界面不復存在。這種界面消失的狀態就是超臨界狀態。冷卻流道內的燃料承受著高壓，因此是以這種狀態流動的。

超臨界狀態下的性質會隨溫度急遽變化。當通過某個溫度區間時，密度會驟降；在同一個區間內，比熱卻會突然飆升。比熱是使溫度上升 1 度所需的熱量。密度與比熱如此劇烈波動的點稱為擬臨界線（pseudo-critical line）。在此附近，燃料的性質會急遽變化，宛如沸騰一般。雖然並非真正沸騰，但因與沸騰極為相似，故稱為擬沸騰（pseudo-boiling）。

比熱飆升對冷卻也有正面效益。比熱大意味著燃料能容納更多熱量，相同量的燃料可以帶走更多的熱。然而，當密度驟降時，燃料體積膨脹且流速加快。加快的流動在壁面附近劇烈擾動時，熱傳遞的方式便會被打亂。優點與缺點在同一個點同時顯現，因此要預測該區間的冷卻性能相當棘手。

類沸騰會為冷卻帶來問題。燃料必須順利帶走壁面的熱量，壁面才能降溫。但在類臨界線附近，帶走熱量的能力有時會突然下降。靠近壁面被加热的燃料層就像一層薄被般阻擋熱量傳遞。這種現象稱為熱傳遞劣化（heat transfer deterioration）。一旦發生熱傳遞劣化，該處的壁面溫度就會驟升。2020年的一項研究指出，加熱火箭燃料時，類沸騰與熱傳遞劣化會一同出現。2024年的研究則以微觀的兩種狀態流動模型，深入探討了這種劣化發生的原因。這種熱傳遞劣化也與後文將提及的結焦問題息息相關。因為壁面一旦驟然變熱，該處的燃料就會更快裂解。

有一種能精確計算這種流動的方法，那就是計算流體力學（computational fluid dynamics, CFD）。它將流動細分為微小的網格，並根據物理定律求解每個單元的速度、壓力和溫度。其基礎定律為三大守恆定律。第一是質量守恆，流入的流體與流出的流體量必須相等。第二是動量守恆，推動或拉動流體的力量必須與速度變化相符。最後是能量守恆，進入的熱量與輸出的熱量必須與溫度變化一致。在所有網格中聯立求解這三大定律的方法就是CFD。CFD雖然精準但計算緩慢。光是精確求解一小段冷卻通道，電腦就可能耗費近一小時。在冷卻通道設計中，必須變換數千種通道形狀與流量來進行驗證。若每次都計算一小時，設計將永遠無法完成。

因此，我們會使用代理模型（surrogate model）。代理模型是取代緩慢計算的快速近似模型。首先，利用CFD預先計算多種情況以收集數據。再用這些數據訓練人工神經網路。神經網路接收通道形狀、流量、壓力、入口溫度作為輸入，隨後立即輸出壁面溫度、熱通量與壓力損失。德國航空太空中心（DLR）的研究團隊便建立了這種神經網路代理模型。他們實際使用的是堆疊數個隱藏層的普通神經網路。原本用CFD需要耗時一小時的計算，該模型在不到一秒內便告完成。起初他們只處理直通道，後來則擴展到彎曲通道。

建立代理模型的步驟如下。首先設定設計變數的範圍，包括通道寬度、通道高度、流量和入口溫度的範圍。在該範圍內選取多種情況並以CFD進行計算。將計算結果整理為輸入與輸出的配對數據。這些配對數據便成為神經網路的教科書。神經網路透過觀察這些配對，學習從輸入導向輸出的規律。訓練完成後，面對新的輸入也能迅速給出答案。這與人類透過解多道例題來熟悉題型的過程十分相似。

進一步提高代理模型精確度的方法還有很多。這些方法並非前述DLR研究原原本本採用的，而是為了讓代理模型更穩健而廣泛使用的技巧。其一是一併納入物理知識。若神經網路僅憑數據學習，可能會給出違反物理定律的答案。因此，將質量、動量與能量守恆定律嵌入訓練規則中。若神經網路違反這些定律，便會受到懲罰。如此構建

的神經網路稱為物理資訊神經網路（physics-informed neural network, PINN）。此外，有時還會加入名為殘差連接（residual connection）的結構。殘差連接是跨越前一層資訊並直接傳遞給後一層的通道。這種結構有助於深層神經網路穩定訓練。將此類技巧應用於冷卻通道代理模型，正是本書所倡導的方向。

超臨界流體的物性值也必須準確輸入。美國國家標準暨技術研究院（NIST）整理並公開了多種流體在不同溫度與壓力下的密度、比熱等數值。像甲烷這種成分單一的純流體，可以直接銜接使用這些標準值。這樣才能掌握類臨界線附近的驟變。然而，煤油RP-1的情況則有所不同。RP-1是由多種碳氫化合物組成的混合物，每次精煉時成分都會有些許差異。因此無法直接使用純流體物性表，必須另外建立匹配其物性的替代混合物模型。物性值若不準確，代理模型也會輸出荒謬的壁面溫度。由於超臨界流體的物性十分敏感，這類基礎數據至關重要。

也有研究致力於妥善挑選冷卻劑本身。2026年的一項研究設計了模擬火箭用煤油的替代燃料。該研究利用基因演算法找到了在超臨界狀態下能精準吻合物性的配方組合。基因演算法是一種挑選優良組合進行雜交以改進解法的方法。用於冷卻計算的燃料模型越精確，預測就越準確。人工智慧在篩選燃料組合方面也提供了助力。

處理代理模型時有一點需要特別留意。切勿過度依賴標籤般的模型名稱或未經證實的性能數據。因此，本書不使用特定的模型名稱，而是以CFD代理模型這一通用概念來進行說明。只要原理相同，無論名稱為何，所學到的核心本質都是一樣的。

這種代理模型也已應用於實際發動機中。德國航空太空中心便利用此方法檢視了自主研發發動機的冷卻通道性能。他們改善了壁面溫度的預測並將其反映在設計中。隨著計算速度的提升，得以在短時間內比較多種通道設計。從而不受緩慢的精確計算所束縛，廣泛探索了各種設計空間。

代理模型具有明確的局限性。代理模型只有在訓練涵蓋的範圍內才值得信賴。面對訓練時未曾見過的陌生通道形狀或未知的運行條件，可能會出現嚴重誤差。由於超臨界流體的物性極為敏感，這種風險更加顯著。因此，絕不能單憑代理模型就決定最終設計。代理模型的作用是快速篩選出優秀的候選方案。隨後僅挑選這些候選方案，透過高精度CFD與實際燃燒試驗再次驗證。代理模型並非直接給出最終答案的工具，而是快速篩選候選者的工具。

9.3 以少量計算尋找膜冷卻孔的主動學習

我們先來看看為何需要膜冷卻。再生冷卻是從壁面內側進行冷卻。然而，在熱量過度集中的地方，僅靠壁面內側冷卻可能力有未逮。這是因為壁面表面本身直接接觸高溫氣體而被加熱。因此，在表面額外覆蓋一層薄薄的保護膜。這就是膜冷卻。再生冷卻與膜冷卻從內外兩側共同守護壁面。

膜冷卻（film cooling）是在高溫壁面正前方形成一層低溫流體薄膜的方法。在壁面上鑽出數個小孔。經由這些小孔傾斜噴出低溫流體。噴出的流體沿著壁面薄薄展開，如被子般覆蓋壁面。這層薄膜隔開了高溫氣體與壁面。壁面因未直接接觸高溫氣體而減少受熱。這與在汽車擋風玻璃上由下往上吹送除霜風的景象相似。

膜冷卻的性能由幾項數值決定。其一是注入流體的強度，稱為吹除比（blowing ratio），即以低溫流體的流動強度除以高溫氣體流動強度所得之值。孔的傾斜角度、孔間距以及孔的形狀也會決定其性能。這些數值只要稍有變化，薄膜的性能就會大幅改變。薄膜能否緊貼壁面，抑或脫離飄起，全都取決於這些數值。

吹除比過大也會產生問題。若過於強烈地噴射流體，薄膜就會脫離壁面飄起。噴出的射流無法覆蓋壁面而向上揚起。如此一來壁面便會再度接觸高溫氣體。若吹除比過小，薄膜太薄會迅速消散。因此強度也有最適當的數值。必須同時調配好角度、間距與強度，才能形成優良的薄膜。

薄膜脫落的原因之一是渦流。當流體從小孔噴出時，會產生一對左右旋轉的渦流。這些渦流會將高溫氣體捲向壁面。進而使費心形成的冷卻薄膜被掀起脫落。壁面再次暴露在高溫氣體中。若能妥善設計小孔，就能削弱這種渦流。因此近年來常使用孔口如扇子般展開的扇形孔。噴出的流體向兩側寬廣展開，均勻覆蓋壁面。

扇形孔比圓形孔能將冷卻薄膜鋪展得更寬。圓形孔以單一道射流噴出流體。這道射流容易脫離壁面。扇形孔則將孔口向兩側展開，使流體寬幅噴出。寬廣擴散的流體更容易附著於壁面。附著面積增大，就能均勻覆蓋壁面。因此燃氣渦輪機與航空發動機普遍採用扇形孔。孔口要展開多少、以何種角度鑽孔，決定了其冷卻性能。

要找到理想的孔形，就必須計算流動。若要細緻觀察渦流，需要高精度解析。這種解析稱為大渦模擬（large eddy simulation, LES）。LES是直接計算流動中大渦流的方法。雖然精準，但計算成本極高。光是求解一種條件就需要漫長的時間。若要變換孔的角度、間距與強度來計算數百種組合，難度極高。在計算資源有限的情況下，無法隨意盲目計算所有條件。

此時，高斯過程（Gaussian process）便能提供協助。高斯過程是一種利用少量數據進行預測的方法。其特點在於不僅給出預測值，還會一併輸出預測的不確定性程度。在數據豐富的區域能給予高信心的預測；在缺乏數據的區域則標示為不確定。這就像繪製地圖時，走過的路畫得詳細，沒走過的路則畫得模糊。該方法利用名為馬特恩（Matern）的平滑規則來連結各點數值。

我們再來看看高斯過程連結數值的方式。相近的條件之間，其性能應該也相仿。若孔的角度僅微幅調整，冷卻性能也只會微小有變化。將這種概念化為數學形式的便是核函數。核函數是衡量兩種條件相近程度的尺度。條件相近則視為數值相近，條件相距甚遠則視為數值可能大不相同。以此尺度平滑地連結已計算過的各條件，進而推估出尚未計算條件的數值。

主動學習（active learning）則在此基礎上加入了明智的選擇。它能自主挑選下一次要利用LES計算哪一個條件。在挑選時會同時考量兩個面向：一是看似性能優良的區域，另一是不確定性較高的區域。深掘看似性能優良的區域，能更接近最佳的解答；探索不確定性高的區域，則能讓地圖模糊之處變得清晰。平衡這兩者的規則稱為獲取函數（acquisition function）。常用的規則是衡量相較於現狀預期能提升多少改善幅度的指標。

這種方法的優勢在於能明智地決定計算順序。它不會漫無目的地隨意計算任何條件，而是優先挑選最具學習價值的條件進行計算。因此，僅需少量的LES計算便能找到優異的孔形。在節省昂貴計算成本的同時，迅速縮小設計範圍。這種方式最先在燃氣渦輪機葉片的冷卻孔設計中確立了地位。至今獲得驗證的研究主要以燃氣渦輪機為對象。透過兼顧多重目標的貝氏最佳化，同時提升了冷卻性能與均勻度。一項研究指出，在相同的壓力損失條件下，其冷卻性能相較於以往設計得到了進一步提升。

人工智慧也直接應用於流動計算本身。2024年左右的研究構建了預測膜冷卻效率的神經網路。某些研究甚至在壁面曲率與孔角度改變的情況下，也能成功預測冷卻效率。此類預測模型能以遠快於高精度計算的速度，給出與之相近的數值。這有助於在設計初期快速比對多種孔形。也有研究將兩者結合，由高斯過程挑選下一步計算條件，再由神經網路快速估算該計算數值。

火箭燃燒室的膜冷卻亦借鑒了相同的方法。然而，火箭的工況更為嚴苛。氣體溫度更高且流速更快。因此，不能將航空發動機中獲得的最佳孔參數直接套用於火箭上。孔徑大小、流體速度、壁面曲率、燃料種類一旦改變，結果就會隨之變化。雖然優良的設計方法可以遷移借鑒，但具體的最佳數值每次都必須重新尋找。人工智慧正是讓這種重新尋找的過程變得更為迅速的工具。最終構型仍須在火箭工況下再次進行驗證。

9.4 以人工智慧設計冷卻通道形狀

冷卻通道設計是固體與流體相互交織的問題。高溫氣體的熱量首先進入金屬壁面。該熱量經由金屬內部傳遞至冷卻通道一側。在通道中流動的燃料則帶走這些熱量。在金屬內部流動的熱傳導與流體帶走熱量的對流在同一個位置交會。將兩者共同求解的計算稱為共軛熱傳（conjugate heat transfer, CHT）。火箭冷卻通道中固體與流體緊密交織，因此這項計算至關重要。

聯想冬天的窗戶便容易理解。室內溫暖而室外寒冷。玻璃窗內外兩側的溫度不同。熱量穿過玻璃內部流動，玻璃外側的冷空氣則帶走熱量。玻璃內部的熱傳導與外側空氣的對流在窗戶表面交會。火箭壁面也是如此。熱量從高溫氣體側進入，燃料則在冷卻通道側帶走熱量。兩種流動在壁面交會並達成平衡。

共軛熱傳的核心是邊界上的約定。試想金屬與燃料相接的接觸面。金屬傳遞至該界面的熱量，與燃料在該界面接收的熱量必須相等。因為熱量既不會憑空消失，也不會憑空產生。必須在遵守這項約定的前提下計算壁面溫度。這項計算能告訴我們壁面最高溫度出現在何處，以及該如何冷卻該處。

共軛熱傳計算的計算量龐大。因為必須同時求解固體內部的熱傳導與流體內部的對流。再加上流體屬於紊流。紊流是大大小小渦流交織混雜的流動。對這種流動求解得越精細，耗費的計算時間就越長。即便只精確求解單一冷

卻通道，電腦也需要耗費很長時間。若有數千個候選設計，就必須重複計算數千次。因此需要縮減計算量的技巧。

接下來輪到設計通道形狀。此處採用拓撲最佳化（topology optimization）。拓撲最佳化是尋找在給定空間中應填入材料還是保留為中空空間的方法。在冷卻通道中，這變成了決定何處保留為金屬、何處保留為燃料流動中空通道的問題。人類不必事先決定通道形狀。只要設定好目標，最佳化程序便會自行勾勒出通道形狀。目標是降低壁面的最高溫度，同時避免壓力損失過度增大。利用拓撲最佳化設計冷卻通道的研究早已問世。其中最具代表性的是同時考量流動與熱量、逐步調整材料配置的密度法。

這個問題需要處理的變數過多。將空間細分出的網格單元多達數十萬個。每個單元都必須決定是金屬還是中空空間。可能的情況多到難以計數。若直接在如此龐大的空間中搜尋，將耗費無窮無盡的時間。因此需要簡化問題的技巧。此時卷積自動編碼器（convolutional autoencoder, CAE）便登場了。

自動編碼器是將複雜資料縮小壓縮後再還原的神經網路。前半部將通道形狀壓縮為小組數字集合。這組數字集合稱為潛在向量（latent vector）。後半部則從該潛在向量重新還原通道形狀。若訓練良好，僅憑少數數字就能涵蓋通道的核心形狀。這與將相片壓縮成小檔案後再重新開啟十分相似。卷積是將影像相鄰部分一同檢視的計算方式，非常適合處理如通道形狀般分佈於空間中的資料。

將利用自動編碼器縮減設計空間的這種方法直接應用於火箭冷卻通道的驗證案例目前仍屬罕見。本書提出了這個發展方向。拓撲最佳化本身是經過驗證的方法，本書主張在此基礎上結合自動編碼器以加快搜尋速度。

這種壓縮讓設計變得簡單。最佳化器不必直接處理數十萬個單元，而是只需反覆調整小小的潛在向量。只要稍微改變潛在向量，後半部就能產生合宜的通道形狀。這相當於將廣大的設計空間縮減為小空間後再行搜尋。最佳化器在這個小空間中尋找優良的潛在向量，由該向量所構成的通道便成為良好的冷卻通道。

使用潛在向量還有另一個好處。所產生的通道形狀通常相當合宜。這是因為自動編碼器是透過觀察實際通道資料學習而來的。它會在經由學習掌握的形狀框架內建立新形狀。因此較少出現物理上不合理且怪異的形狀。這能減少在廣大空間中盲目搜尋所造成的徒勞無功。僅在狹窄而充實的空間中尋找解答，使搜尋更為迅速。然而，僅憑與訓練資料相似，並不能保證就是良好的通道。通道是否從頭到尾順暢連通、壁面是否過薄、流動阻力與結構強度是否合格，都需要另外確認。這些條件必須作為規則另外設定在最佳化程序中。

同時也必須加入具可製造性形狀的條件。3D列印是透過逐層向上堆疊製造的。缺乏底部支撐而向側面過度傾斜的部分，在製造過程中會發生下垂。因此需設定限制條件，使通道壁面的傾斜角度不超過一定限制。只要遵守這項限制，就能形成無需支撐結構也能自行立穩的通道。若將這些條件一併納入最佳化程序中，產出的設計便能立即進行列印。這能防止計算中看似優良的設計在現實中卻無法製造的情況發生。

亦有研究以人工智慧取代共軛熱傳計算。2024年的一項研究建立了層層堆疊編碼器與解碼器的神經網路。該神經網路輸入零件形狀後即可直接描繪出溫度分佈。這以快速預測取代了每次執行精密共軛熱傳計算的過程。2025年的另一項研究則分別使用不同的神經網路處理固體與流體。研究訓練兩個神經網路在邊界處相互對齊數值。如此一來便能更精準地捕捉壁面與燃料接觸面處急遽的溫度變化。這些研究探討了一般共軛熱傳問題。若在火箭冷卻通道的拓撲最佳化中採用這種快速預測模型，將能加速設計搜尋。這兩者的結合是未來值得深入完善的方向。

拓撲最佳化所勾勒出的通道，是人類難以徒手繪製的形狀。分支時而分流時而匯合，沿著壁面曲面彎曲。有時甚至像魚骨般密集排列著傾斜的鱗片。這種形狀能均勻分散熱量並引導流體順暢流動。即便在人眼看來未必美觀，在計算上卻可能是絕佳的形狀。人工智慧能為我們找出這種出乎意料的形狀。

此方法已有產業應用案例。某家公司將這種拓撲最佳化技術應用於火箭冷卻通道，並發表成果表示大幅降低了壁面的最高溫度。近期亦出現了將規則曲面應用於冷卻通道的研究。這種曲面稱為三重週期最小曲面（triply periodic minimal surface, TPMS）。TPMS是如肥皂泡薄膜般平滑彎曲的曲面在空間中呈現規則重複的結構。該結構將廣大的表面積折疊收納於狹小空間中。表面積越大，熱交換量就越多。2025年的一項研究構建了沿著壁面曲面包覆的TPMS通道，並報告指出冷卻性能與壁面周圍的溫度均勻度皆獲得提升。2026年亦有研究藉由填充晶格結構的冷卻通道來提升熱傳遞。此類曲面通道與晶格通道必須依賴3D列印才能製造。不過，企業案例的驗證方式與學術論文不同。本書僅將其作為展現產業趨勢的參考案例。最終性能唯有在具備獨立測試數據時，方可作為

設計依據。

9.5 減少積碳結焦的多目標最佳化

煤油系燃料RP-1用作冷卻劑時存在一項弱點。當流經高溫壁面附近時，燃料會因熱而裂解。這稱為熱裂解。裂解碎片中的碳會黏附在壁面上。這就像在平底鍋中長時間加熱油會燒焦黏鍋一樣。這種附著在壁面上的碳沉積層稱為結焦（coking）。結焦會在冷卻通道內側逐漸累積。

燃料因熱而裂解的現象稱為熱裂解。這是大分子受熱後分解為小碎片的過程。溫度越高，裂解速度越快。裂解碎片中富含碳的部分會相互凝聚。凝聚的碳黏附在壁面上形成沉積硬殼。因此壁面溫度越高，越容易產生結焦。結焦與壁面溫度、燃料種類以及流經時間息息相關。

結焦容易發生在噴嘴喉部。噴嘴喉部是熱通量最高之處。壁面溫度相應極高，燃料分解也格外劇烈。結焦會引發兩個問題。其一是碳沉積層的導熱性能不佳。沉積層阻隔在壁面與燃料之間，導致壁面變得更熱。其二是沉積層會使通道變窄。通道變窄後燃料難以通過，導致壓力損失增大。這兩個問題重疊會使壁面面臨危險。在可重複使用發動機中，結焦會隨著試驗次數增加而不斷累積，成為更嚴重的問題。

溫度與結焦的關係存在規律。溫度只要稍微上升，化學反應就會大幅加速。壁面溫度升高時，燃料分解會明顯加快，結焦累積的速度也相應加快。因此，只要稍微降低壁面溫度，就能大幅減少結焦。良好的冷卻能使壁面降溫，壁面降溫就能減少結焦。冷卻與抑制結焦便如此緊密相連。

前一節的熱傳惡化與此結焦現象相互關聯。當超臨界燃料穿越擬臨界線時，靠近壁面處的熱傳遞會驟然惡化。隨即該處的壁面溫度便大幅飆升。壁面變熱會使燃料更快裂解，結焦也隨之迅速累積。累積的結焦進一步阻礙熱量傳遞，使壁面更加炙熱。這種回饋循環若持續下去，壁面可能會突然損毀崩塌。熱傳惡化與結焦可說是互為因果、相互加劇。

若要減少結焦，就必須降低壁面溫度。壁面溫度較低時，燃料裂解較少。此外，還必須同時考量壁面附近的流動。若燃料迅速掠過壁面，沉積層附著的機會就會減少。壁面附近流體掠過壁面的力量稱為壁面剪應力。這種力量必須達到一定強度，沉積物才不易沉積附著。抑制結焦的設計本質上是同時調控壁面溫度與壁面剪應力的問題。

問題在於目標有多個且彼此相互衝突。既有降低壁面溫度的目標，又有減少壓力損失的目標，還有抑制結焦的目標。這些目標無法同時兼得改善。若縮小通道以加快流速，壁面得以冷卻，但壓力損失會增大。若擴大通道以減緩流速，壓力損失得以減少，但冷卻效果會減弱。顧此失彼，有所得必有所失。這種多個目標相互衝突的問題稱為多目標最佳化。

這種權衡取舍在日常生活中屢見不鮮。試想挑選背包時的情景。很難同時擁有一款既輕便、結實又便宜的背包。若輕便則往往容易損壞，若結實則往往沉重或昂貴。因此我們會依據用途挑選合適的平衡點。冷卻通道設計亦是如此。無法將冷卻效果、壓力損失與抑制結焦三者皆做到極致。獲得一方，就必須對另一方做出適度讓步。

多目標最佳化的解答並非只有一個，而是會得出一組在彼此權衡取舍下的多個優良解答集合。這個集合稱為柏拉圖前緣（Pareto front）。柏拉圖前緣上的各個解答皆有不同的平衡點。有的解答優先考量冷卻，有的解答則優先考量壓力損失。設計者檢視這組解答集合後，從中挑選適合發動機的平衡點。這不是由人類事先指定單一解答，而是將眾多優秀候選方案攤開供挑選的方式。

此處採用了貝氏最佳化（Bayesian optimization）。這是將前一節的高斯程序與主動學習拓展至多個目標的方法。首先以少量的計算繪製各目標的大致輪廓圖，接著參考該圖挑選下一步應計算何種條件。優先計算對拓展柏拉圖前緣大有助益的條件。在盡量減少昂貴燃燒解析計算的同時，找出優良的平衡點。若將結焦亦納入目標，便能得出同時權衡壁面溫度、剪應力與壓力損失的設計。不過，在火箭冷卻通道中將結焦列為目標進行最佳化的驗證案例目前仍難以尋得。由於熱裂解與沉積的物理機制已為人熟知，因此本書提出了將該物理機制納入目標進行設計的方向。

結焦在可重複使用發動機中是一項更重大的課題。但這並不代表一次性發動機就能免於結焦問題。即使在單次燃燒過程中，沉積物若使通道變窄或使熱傳遞惡化，管壁也可能破損。無論是否重複使用，在任務時間內沉積物累積的速度有多快都至關重要。對於多次重複使用的發動機而言，更會疊加累積性的問題。隨著燃燒試驗不斷重複

，沉積物會逐漸累積。累積的沉積物會使冷卻效果變得越來越差。因此，可重複使用發動機必須從一開始就設計成能抑制結焦。人工智慧最佳化有助於完成能預見這種長時間變化的設計。

此方法有時也會與火箭試驗數據相結合。德國航空太空中心的蘭波爾茨豪森試驗場，是實際點火燃燒火箭發動機以獲取數據的地方。有了這類試驗數據，最佳化的基礎模型就會更加精確。數據能補足單憑計算所遺漏的實際結焦行為。這是在試驗與計算之間往復切換以完善設計的流程。

高縱橫比通道有時也用於抑制結焦。縱橫比是通道高度除以寬度的值。狹窄而深的通道具有較高的縱橫比。這類通道與壁面接觸的面積較大，能有效地帶走熱量。壁面進一步降溫後，燃料的分解就會減少。有時也會採用如螺旋般盤旋的通道。使流體旋轉流動，能更強烈地掠過壁面附近。不過這類通道可能會增加壓力損失，因此必須一併權衡。

本節也有需要注意之處。結焦減少的數值只有在有實際試驗支持時才值得採信。因此本書不著重於具體數值，而是聚焦於方法的原理。在實際發動機中，燃料成分、表面粗糙度、壁面的催化作用與運轉時間都會影響結焦。由於變數眾多，預測相當困難。未經試驗證實的結焦預測值應保守看待。人工智慧應用於縮小優良候選方案的範圍，而最終確認則必須透過實際燃燒試驗。

9.6 設計泵浦前葉片誘導輪的物理增強機器學習

火箭發動機必須將燃料與氧氣強力推入燃燒室。負責這項工作的就是渦輪泵（turbopump）。渦輪泵是一種轉速極快的泵浦。然而，如果入口壓力過低，泵浦的主葉片就無法正常運作。因此會在主葉片前方設置一個輔助葉片。這個輔助葉片就是誘導輪。誘導輪會先平順地吸入液體並稍微提升壓力。多虧於此，後方的主葉片才能穩定旋轉。它是宛如泵浦守門員般的組件。

先來看看為什麼需要渦輪泵。燃燒室內部的壓力非常高。要將燃料推進其中，就需要更高的壓力。低壓燃料無法進入高壓的燃燒室。這就如同水無法自行從低處流向高處一樣。因此要用泵浦大幅拉高燃料的壓力。火箭的渦輪泵透過極高速的旋轉來達成這項任務。大型發動機的渦輪泵每分鐘可旋轉數萬次。

在處理液態氫時，誘導輪更加棘手。液態氫（liquid hydrogen）是溫度約在零下253度左右的極度低溫液體。它的密度小且輕。當誘導輪快速旋轉時，葉片前端會出現壓力驟降的區域。液體只要壓力降得夠低就會沸騰。即使不熱，只要壓力夠低就會產生氣泡。這與在高山上的水在較低溫度下也能沸騰是相同的道理。這種在流動液體中產生氣泡的現象稱為氣穴現象（cavitation）。

氣穴現象會困擾誘導輪。產生的氣泡流向壓力較高的區域時，會在瞬間破裂塌陷。氣泡破滅時會產生極強的壓力波。這種波動會一點一點侵蝕葉片表面。時間一長，葉片就會出現坑洞。氣穴現象也會降低泵浦效能。當氣泡過多時，泵浦所推升的壓力會突然崩潰。一旦越過這個崩潰點，整台發動機都會陷入危險。因此誘導輪必須設計成能延後發生氣穴現象。

有一項能帶來助益的特性。極低溫液體具有熱力學抑制效應。氣泡要生成，必須從周遭液體奪取汽化潛熱。如此一來，氣泡周圍的溫度就會些微下降。溫度下降後，該處的沸騰壓力也會跟著降低。因此氣泡會變得更難繼續長大。這等於是氣泡自行抑制了自身的成長。液態氫的這種抑制效應非常顯著，使氣穴現象得以稍微延緩。誘導輪設計必須將這個效應納入計算。在物理增強學習的物理規則中也必須加入此效應。否則會誤將氣穴性能評估得比實際更差。

誘導輪設計是決定葉片形狀的工作。葉片角度、彎曲程度以及前掠程度決定了其性能。目標有三個：必須妥善提升壓力、效率要高、必須延後發生氣穴現象。這些目標彼此之間也會相互衝突。若為了大幅提升壓力而立起葉片，就容易產生氣穴現象；若為了避開氣穴現象而放平葉片，壓力提升幅度就會變小。這與前幾節所提的權衡平衡問題如出一轍。

誘導輪提升壓力的能力存在著極限。假設逐步降低入口壓力並運轉泵浦，在某個臨界點之前泵浦尚能良好承受。然而一旦入口壓力跌破某個數值，氣穴現象就會加劇。在那一瞬間，泵浦所提升的壓力會突然崩潰。這個崩潰點被稱為揚程中斷點。揚程是泵浦推升流體力量的大小。在實際泵浦中，會區分氣泡最初生成的點與揚程完全崩潰的點。在這兩者之間，有時會以揚程下降3%的點作為基準。這個數值被稱為NPSH3。初始氣穴、NPSH3與完全

揚程崩潰是彼此不同的階段點。優秀的誘導輪能將這個中斷點延緩至更低的入口壓力。這意味著即使在極低壓力下也能穩定旋轉。這項特性也與火箭重量息息相關。如果誘導輪能承受低壓，燃料儲箱的壓力就可以保持在較低水準。儲箱壓力低，儲箱壁就能做得更薄。儲箱變輕，整枚火箭也就隨之減輕。這等於是一片小葉片的設計甚至能改變火箭的整體重量。

此處運用了物理增強機器學習（physics-enhanced machine learning）。僅從純數據中學習的機器學習可能會違背物理定律。因此，訓練過程中一併納入了流體的守恆定律與氣穴物理學。流場則使用傅立葉神經運算子（Fourier neural operator, FNO）進行快速估算。這種運算子是能夠一次快速預測流動整體全貌的神經網路。如果說一般神經網路是預測單點的數值，那麼這種運算子就是完整預測整個流場。由於它將流動分解為不同尺度的波動來處理，因此能同時捕捉大尺度主流與細微波動。這使得它非常適合用於快速估算流場等在空間中廣泛分布的數值。工程師可以在變更葉片形狀的同時，迅速檢視流動與氣穴風險。這比每次都執行精密計算要快得多。傅立葉神經運算子本身是在許多流動問題中獲得驗證的方法。將其應用於液態氫誘導輪的反向設計，正是本書所提倡的方向。

在誘導輪設計中，人工智慧所檢視的資訊相當多樣。它會觀察葉片前端的壓力分布，檢視何處的壓力會大幅降低，以及該處的氣穴現象會擴展到何種程度。同時也會觀察葉片後方的壓力恢復情況。人工智慧整合這些資訊以找出優良的葉片形狀。前掠型葉片形狀有助於延緩氣穴現象的發生。人工智慧能生成多種此類形狀並進行快速對比。

人工智慧也用於診斷氣穴現象。2025年的一項研究使用高速攝影機拍攝誘導輪的氣穴現象，並利用神經網路分析該影像。研究同時採用了分析空間特徵的神經網路與分析時間變化的神經網路。如此一來便能察覺氣穴現象變得不穩定的瞬間。人工智慧能捕捉肉眼難以看清的快速變化。這項研究屬於辨識氣穴的診斷面向。這與代為計算流動的代理模型，或尋找葉片形狀的反向設計在用途上有所不同。不應將這三者混為一談，而必須分開看待。

誘導輪設計不能只停留在流動計算上。葉片旋轉速度極快，因而承受著巨大的力量。氣穴氣泡破裂時產生的震波也會衝擊葉片。因此必須一併檢視葉片能否承受這些作用力。如果說冷卻通道設計是熱與流動的平衡，那麼誘導輪設計就是流動、受力與氣穴之間的平衡。人工智慧正用於同時權衡這些多重目標。

此處的局限性同樣十分明顯。極低溫氫試驗既困難且昂貴。能夠處理零下250度以下液體的試驗設施本身就不多。因此誘導輪設計的驗證數據並不充裕。氣穴減少的數值只有在有實際泵浦試驗支持時才值得信賴。因此本書不採用未經證實的數據，而是聚焦於物理增強模型參考了哪些資訊來輔助設計。即使人工智慧篩選出優良的葉片候選方案，最終判斷仍必須透過實際泵浦試驗來進行。

總結

本章探討了利用人工智慧設計火箭發動機熱管理結構的方法。所探討的結構有三種：壁面內部的冷卻通道、在壁面形成冷卻膜的膜冷卻孔，以及推升燃料的泵浦前葉片誘導輪。這三種結構都面臨著相同性質的問題，亦即熱與流動的平衡問題。若極力追求其中一方，就會犧牲另一方。人工智慧的介入正是為了快速找到這個平衡點。

背後有兩大重要變革。其一是金屬3D列印。以往無法透過切削加工製造的複雜內部通道，如今已能製作出來，大幅拓展了設計自由度。其二是高導熱銅合金GRCop-42等新材料。自由的設計與優良的材料相遇，使新型冷卻結構的實現成為可能。然而，新製造方式對品質管制非常敏感，必須嚴密把關製造過程。

人工智慧以多種方式發揮了作用。代理模型取代耗時的流體計算，快速估算了超臨界燃料的行為。高斯過程主動學習節省了昂貴的計算成本，尋得優良的膜冷卻孔。卷積自動編碼器將複雜的通道形狀縮減為緊湊的數值空間，簡化了拓撲設計。多目標貝氏最佳化找到了相互衝突目標之間的平衡點以抑制結焦。物理增強機器學習與傅立葉神經運算子則輔助了調控誘導輪氣穴現象的設計。

本章的方法彼此環環相扣。代理模型快速估算流動；主動學習以此估算為基礎選定下一步計算；自動編碼器縮減設計空間使搜尋更為容易；貝氏最佳化尋找多個目標的平衡點；物理增強學習則確保遵循物理定律。這並非僅使用單一工具，而是將多種工具串聯運用。依據問題挑選合適工具進行組合，正是設計者的職責所在。

貫穿其中的是一項核心原則：人工智慧並非代為決定答案的工具，而是從廣大的設計空間中快速縮小優良候選方案範圍的工具。代理模型僅在已學習的範圍內值得信賴。企業案例中的性能數據與學術驗證不同。未經確認來源的數值絕不採用。火箭發動機冷卻屬於壁面一旦熔化發動機就會損毀的領域。因此最終的判斷始終要依賴高精度計算與實際燃燒試驗。

本章介紹的方法都有一個共同點，那就是皆為節省昂貴計算成本的巧思。精密計算雖然準確卻很緩慢。若每次都執行那樣緩慢的計算，設計將永無止境。因此由人工智慧接替進行快速估算。代理模型代勞計算，主動學習挑選計算順序，自動編碼器則縮減問題規模。利用省下的時間得以檢視更多候選方案。檢視得越廣泛，接近良好解答的機率就越高。

未來的方向也建立在此原則之上。融入更深物理知識的機器學習正在成長。連結設計與診斷的流程也在不斷擴大。人工智慧提出設計候選方案，試驗驗證該候選方案，該試驗數據又再次培育人工智慧。這個循環正一步步推動火箭發動機熱管理設計向前邁進。若將本章濃縮成一句話便是：在更廣闊的設計自由之上，人工智慧協助快速解決熱與流動的艱難平衡問題。而且其解答始終透過試驗來確認。工具雖然變快了，但驗證的原則依舊不變。下一章將探討在實際運轉如此打造的發動機時，人工智慧如何對發動機進行診斷與控制。

相關佐證資料

- Pizzarelli, M. (2017). Regenerative cooling of liquid rocket engine thrust chambers: Modeling and simulation. *Journal of Propulsion and Power*, 33(4), 802-821. <https://doi.org/10.2514/1.B36261>
- Waxenegger-Wilfing, G., Dresia, K., Deeken, J., & Oschwald, M. (2020). Heat transfer prediction for methane in regenerative cooling channels with neural networks. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 34(2), 347-357. <https://doi.org/10.2514/1.T5865>
- Dresia, K., Waxenegger-Wilfing, G., Riccius, J., Deeken, J., & Oschwald, M. (2023). Improved wall temperature prediction for the LUMEN rocket combustion chamber with neural networks. *Aerospace*, 10(5), 450. <https://doi.org/10.3390/aerospace10050450>
- Waxenegger-Wilfing, G., Dresia, K., Deeken, J., & Oschwald, M. (2021). Machine learning methods for the design and operation of liquid rocket engines: Research activities at the DLR Institute of Space Propulsion. *arXiv*. <https://arxiv.org/abs/2102.07109>
- Gradl, P. R., Protz, C. S., Cooper, K., Ellis, D., & Evans, L. J. (2019). GRCop-42 development and hot-fire testing using additive manufacturing powder bed fusion for channel-cooled combustion chambers. *AIAA Propulsion and Energy 2019 Forum*. <https://doi.org/10.2514/6.2019-4228>
- NASA NTRS. (2019). GRCop-42 development and hot-fire testing using additive manufacturing powder bed fusion for channel-cooled combustion chambers. Document ID 20190030433. <https://ntrs.nasa.gov/citations/20190030433>
- Gradl, P., Mireles, O. R., Katsarelis, C., Smith, T. M., Sowards, J., Park, A., et al. (2023). Advancement of extreme environment additively manufactured alloys for next generation space propulsion applications. *Acta Astronautica*, 211, 483-497. <https://doi.org/10.1016/j.actaastro.2023.06.035>
- NASA. (2023). GRCop-42 additive manufacturing for high heat flux thrust chamber liners. NASA Technical Reports Server. <https://ntrs.nasa.gov/citations/20230007103>
- NASA. (2023). Rapid Analysis and Manufacturing Propulsion Technology (RAMPT) project. NASA. <https://www.nasa.gov/rapid-analysis-and-manufacturing-propulsion-technology/>
- Demeneghi, G., Williams, B. B., Katsarelis, C., Tilson, W., & Gradl, P. (2025). Additively manufactured GRCop-42 copper-alloy combustion chamber failure analysis: The role of build interruptions. *Engineering Failure Analysis*, 174, 109509. <https://doi.org/10.1016/j.engfailanal.2025.109509>
- Ferster, K. K., et al. (2025). An open tool for the design of cooling channels within regeneratively cooled liquid rocket engines. *AIAA SciTech 2025 Forum*. <https://doi.org/10.2514/6.2025-2127>
- NIST. (2026). Thermophysical properties of fluid systems. NIST Chemistry WebBook. <https://webbook.nist.gov/chemistry/fluid/>
- Banuti, D. T. (2020). Pseudo-boiling and heat transfer deterioration while heating supercritical liquid rocket engine propellants. *Journal of Supercritical Fluids*, 165, 104895. <https://doi.org/10.1016/j.supflu.2020.104895>
- Zhu, B., Zhang, Q., Ma, L., & Shi, H. (2025). Analysis of heat transfer deterioration mechanism of supercritical fluid based on VOF two-phase method and pseudo-boiling theory. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 240, 126643. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2024.126643>
- Xiao, R., Zhang, P., Chen, L., & Hou, Y. (2023). Machine learning based prediction of heat transfer deterioration of supercritical fluid in upward vertical tubes. *Applied Thermal Engineering*, 228, 120477. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2023.120477>
- Gong, K., Zhang, Y., Cao, Y., Feng, Y., & Qin, J. (2024). Deep learning approach for predicting the flow field and heat transfer of supercritical hydrocarbon fuels. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 219, 124869. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2023.124869>
- Ko, S., Gil, Y., & Park, S. (2026). Development of RP-3 surrogate fuels via multi-objective genetic algorithm for regenerative cooling CFD with supercritical property fidelity. *Aerospace*, 13(4), 307. <https://doi.org/10.3390/aerospace13040307>

- Zhang, H., Gou, J., Yin, P., Su, X., & Yuan, X. (2023). Film-cooling hole optimization and experimental validation considering the lateral pressure gradient. *Frontiers in Mechanical Engineering*, 8, 973293. <https://doi.org/10.3389/fmech.2022.973293>
- Wang, Y., Wang, Z., Qian, S., Qiu, X., Shen, W., Zhang, X., Lyu, B., & Cui, J. (2024). Data-driven framework for prediction and optimization of gas turbine blade film cooling. *Physics of Fluids*, 36(3), 035160. <https://doi.org/10.1063/5.0186087>
- Yao, G., Li, D., Zhu, J., Tao, Z., & Qiu, L. (2024). Hybrid AI framework for the predictions of film cooling effectiveness distribution with various surface curvatures and compound angles. *Applied Thermal Engineering*, 257, 124147. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2024.124147>
- Navah, F., Lamarche-Gagnon, M.-E., & Ilincă, F. (2023). Thermofluid topology optimization for cooling channel design. *arXiv:2302.04745*. <https://arxiv.org/abs/2302.04745>
- Gao, C., Xu, W., Zhu, X., Cui, J., Luo, T., Wang, D., Sun, L., Ling, W., Li, X., & Zhou, W. (2025). Enhanced regenerative cooling performance with conformal TPMS channels. *Energy*, 322, 135530. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2025.135530>
- Fu, R., Miao, X., Gao, L., Duan, L., Xu, Y., Guo, M., Luo, P., & Hu, J. (2026). Numerical study of flow and heat-transfer enhancement in lattice-core regenerative cooling channels for liquid rocket engines. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 175, 111069. <https://doi.org/10.1016/j.icheatmasstransfer.2026.111069>
- Ebbs-Picken, T., Romero, D. A., Da Silva, C. M., & Amon, C. H. (2024). Deep encoder-decoder hierarchical convolutional neural networks for conjugate heat transfer surrogate modeling. *Applied Energy*, 372, 123723. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2024.123723>
- Lee, J., Shin, S., Choi, H., Lee, A., Park, B., & Lee, S. (2025). Extended multiphysics-informed neural network for conjugate heat transfer problems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 246, 127098. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2025.127098>
- Lee, S., Yoon, Y., & Song, S. J. (2025). Deep learning-based identification of turbopump inducer cavitation instability using high-speed camera images. *AIAA SciTech 2025 Forum*. <https://doi.org/10.2514/6.2025-0760>
- Li, Z., Kovachki, N., Azizzadenesheli, K., Liu, B., Bhattacharya, K., Stuart, A., & Anandkumar, A. (2021). Fourier neural operator for parametric partial differential equations. *International Conference on Learning Representations*. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2010.08895>
- Raissi, M., Perdikaris, P., & Karniadakis, G. E. (2019). Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, 378, 686-707. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045>
- DLR Institute of Space Propulsion. (2026). Test facilities at Lampoldshausen and rocket propulsion research. DLR. <https://www.dlr.de/en/ra>

第10章 液體火箭發動機（LRE）的即時故障診斷、數位孿生及基於強化學習的推進即時自適應控制

前言

汽車開久了，駕駛人只要聽聲音就能掌握車況。發動機傳出異常聲響時，就會開去保養廠；儀表板上的警示燈亮起時，就會減速。人就是這樣綜合多種訊號來做出判斷。火箭發動機也是如此，只不過火箭發動機比汽車要快得多、熱得多，也危險得多。

液體火箭發動機燃燒液體燃料與液體氧化劑以產生強大推力。這種發動機在極短時間內承受巨大的熱量與壓力，只要一個零件稍微出現偏差，整個系統就可能崩潰。因此，在發動機運轉期間持續監控其狀態至關重要。在發動機全程運轉中持續觀察狀態的工作，稱為即時狀態監控。

本章探討人工智慧如何監控與調節火箭發動機。人工智慧的英文為 Artificial Intelligence，簡稱為 AI。主要探討四大主題：第一是從感測器訊號中迅速發現異常的診斷；第二是用電腦模擬發動機內部不可見狀態的數位孿生（Digital Twin）；第三是即使發動機老化或存在製造誤差也能量測其不確定性的方法；最後則是協同調控多個閥門的智慧控制。

當這些技術整合在一起時，發動機就能自我維護健康。這種趨勢在可重複使用火箭時代不可或缺。當同一台發動機重複使用多次時，每次使用的狀態都會有些許不同，單靠人工每次手動調整極為困難。人工智慧正是能夠迅速掌握並應對這些變化的工具。接下來將逐一解析這些技術的運作原理。

在閱讀本章之前，先建立一個基本觀念：人工智慧並非魔法，而是藉由觀察資料來尋找規則的工具。若資料品質不佳，結果也不會好。因此，本章在介紹各項技術實用價值的同時，也會指出其局限性。文中不引用未經證實的性能數值，而是致力於深入淺出地解釋原理，目標是讓讀者理解技術的核心架構。

10.1 LRE 即時狀態監控的挑戰課題

本節探討重點

本節說明即時監控火箭發動機為何如此困難。首先描繪液體火箭發動機所處的極端嚴苛環境，接著探討現有監控方法的局限性，最後闡述為何需要人工智慧監控。

在此先說明一個術語。本章頻繁出現的 LRE 是液體火箭發動機（Liquid Rocket Engine）的簡稱。後文將稱為液體火箭發動機或發動機。這種發動機廣泛用於將重型載荷送入太空。

液體火箭發動機是由多個零件協同運作的複雜機械。燃燒室是燃燒燃料與氧化劑的腔體；噴注器是將燃料與氧化劑霧化並混合的零件；渦輪泵是以高壓泵送推進劑的泵浦；閥門負責控制推進劑的通斷與流動；冷卻通道則導出熱量以防室壁融化。這些組件必須如渾然一體般運作，發動機才能正常運轉。

問題在於這個環境極為嚴苛。燃燒室內的壓力高達數十個大氣壓，火焰溫度超過攝氏三千度，渦輪泵每分鐘旋轉數萬轉。這些數值與廚房的壓力鍋或汽車發動機完全不在同一個量級。哪怕是微小的震動也會擴大為巨大的力量，因此發動機運轉時始終伴隨著損壞的風險。

這種嚴苛的環境對感測器而言同樣殘酷。感測器是讀取狀態的眼睛，但若感測器靠近高溫區域便容易損壞，強烈振動也可能導致線路斷裂。這相當於在視線模糊的情況下觀察發動機。因此，很難僅憑單一感測器的數值就做出判斷，必須綜合多個感測器並進行篩選過濾。即使某個感測器異常，也要透過其他感測器進行交叉確認。

訊號的量也極為龐大。一個高頻取樣的感測器每秒可產生數萬個數值，而發動機上裝有數十至數百個這樣的感測器，每秒就會湧入數百萬個數據點。如此龐大的數據量，單憑人眼根本無法瀏覽。更何況判斷必須在毫秒內完成。毫秒是千分之一秒，相當於在眨眼之間就要做出數百次判斷。這種速度與資料量，若沒有機器的協助便無法處理。

以發動機異常如何迅速演變成事故為例：燃燒室內的壓力開始出現規則的大幅震盪，這種震盪在短短數毫秒內就可能放大數倍。加劇的震盪不斷衝擊噴注器與室壁，重複的衝擊會導致金屬產生裂紋，高溫氣體便會從裂縫中洩漏。這整個過程都在轉瞬之間發生，因此必須盡可能及早捕捉到異常的最初徵兆。

地面測試與實際飛行的條件截然不同，這也是一大難題。在地面測試中，發動機會被牢牢固定，可以安裝大量感測器，一旦出現問題也能立即關機。然而在飛行過程中情況完全不同：受限於重量無法安裝過多感測器，現場也沒有人員可以就近監控。因此，飛行中的發動機必須僅靠少數感測器自行判斷，而人工智慧正是輔助這種判斷的關鍵。

火箭發動機診斷與其他機械診斷的目標相同，但條件要嚴苛得多。其反應時間極短、可用資料極少且危險性極高，因此很難直接套用其他領域的方法，必須針對火箭特性重新調整。本章所介紹的技術皆是歷經反覆調校的成果，且這項工作至今仍在持續進行。

地面測試同樣充滿危險。將發動機固定於地面並進行點火的測試稱為熱試車（hot-fire）測試。在此測試中，發動機會產生與實際飛行相當的推力。而在太空中情況更為棘手：火箭若要重新著陸，就必須在空中關閉發動機後再次啟動。此時推進劑會在儲箱內劇烈晃盪，這種晃盪現象稱為晃動（sloshing）。閥門開啟的時間也可能出現微小偏差。這種劇烈的瞬態波動往往轉瞬即逝，極易被忽略。

只要想像火箭重新著陸的場景便不難理解。發射時發動機輸出最大推力；著陸時則必須大幅調低推力以平穩降落。在此過程中，發動機的推力會在大幅度範圍內劇烈調節，推進劑儲箱內的液體也隨之晃盪，閥門頻繁快速啟閉，溫度與壓力急劇變化。在這種短暫而險峻的瞬間極易發生異常，因此必須嚴密監控、不可遺漏。

在空中重新啟動發動機的二次點火同樣極具挑戰。在軌道上，地球引力依然強大，但由於火箭與推進劑一同處於自由落體狀態，因此幾乎感受不到重量，這種狀態稱為微重力。在微重力環境下，儲箱內的液體無法維持在固定位置，因此必須透過微小加速度或表面張力將推進劑聚集到一側。若未經此過程便啟動發動機，流動將不均勻，壓力和流量會瞬間突變。在這種暫態過程中，診斷容易受到干擾，可能將正常現象誤判為異常。因此，診斷系統必須學習適應並承受此類暫態狀態。

以往發動機監控多採用閾值方式，即當某個數值超過預設界線時便立即關閉發動機。這條界線被稱為紅線（redline）。例如當壓力超過設定值時發動機就會停機。這種方式直觀易懂且反應迅速，長期以來被視為可靠的方法。

紅線方式類似家中的無熔絲開關。用電過載時開關就會跳脫，是一種一旦超過極限就強制切斷的方式。這種方式非常適合用來防止重大事故，因其判斷機制簡單，反應迅速且確實。火箭發動機也將這種安全切斷機制列為基本防線，一旦數值超過危險線便立即關閉發動機。

然而，紅線方式容易忽略微弱的異常訊號。感測器訊號中總是混雜著雜訊，若雜訊過大，即使系統正常也會發出警報，這稱為誤警（誤報）。若誤報過於頻繁，人員便會對警報失去信任。相反地，噴注器的微小震盪或密封件的輕微磨損往往隱藏在閾值範圍內，這類微弱訊號在擴大之前難以察覺，而一旦擴大後往往為時已晚。

人工智慧診斷正是為了解決這個盲點。人類只能同時注視一兩個儀表，人工智慧卻能同時檢視數百個感測器訊號，綜合分析多個訊號的波形特徵與相互關係。因此，在數值越過紅線之前，就能及早捕捉到異常徵兆。2026年發表於航太學術期刊的一篇綜述論文梳理了這一發展趨勢。該論文指出，在液體火箭發動機診斷中，基於資料驅動的方法大幅增加，同時也指出了實際故障資料匱乏的難題。

總結而言，火箭發動機監控面臨三大障礙：訊號變化迅速且雜訊繁多；微弱異常顯露較晚；且必須在誤報與漏報之間取得平衡。人工智慧正是試圖同時跨越這三道障礙的嘗試。從下一節開始，將具體探討其詳細方法。

人工智慧監控並非要取代紅線方式，兩者是協同並用的。紅線是防止重大事故的最後一道防線，人工智慧則在其前方預先識別微弱徵兆，形成層層疊加的安全網。外層網遺漏的由內層網攔截。火箭的安全正是透過多重防線的重疊守護，絕不單獨依賴任何單一方法。

10.2 整合多感測器以及早發現異常

本節探討重點

本節探討從發動機感測器訊號中迅速找出異常的人工智慧架構。首先解釋遙測（telemetry）與超高頻訊號的概念，接著介紹同時兼顧時間序列演變與通道關聯性的神經網路。這種神經網路稱為時間卷積注意力網路（TCAN）。該架構並非僅為火箭專門驗證的模型，而是廣泛應用於多個領域的方法。最後，本節亦將探討此類診斷技術目前尚未克服的局限性。

首先解析術語。遙測（telemetry）是指將遠端設備的狀態以訊號形式傳送並接收的過程。發動機上安裝了量測壓力、振動、溫度與流量的感測器，這些感測數值會即時傳入電腦中。超高頻意指以極其密集的時間間隔讀取這些訊號，某些感測器每秒可讀取數萬至數十萬次。唯有如此高密度的取樣，才能捕捉到快速的震盪。

量測壓力的感測器常採用壓電元件。壓電元件是在受壓時會產生微弱電壓的材料，當壓力迅速變化時，電訊號也會隨之快速改變。因此，這種感測器能精準捕捉快速的壓力震盪。加速度計則用來量測零件的振動幅度。兩者配合使用即可同時監控壓力與振動，相當於從多個視角全方位掌握發動機的狀態。

取樣緩慢的監控容易遺漏高速發生的異常。假設用老舊相機拍攝蜂鳥振翅，若快門太慢，翅膀影像就會模糊成一片；唯有高速快門才能定格翅膀的瞬間。感測器也是同理，若取樣間隔過於稀疏，快速的震盪特徵就會消失。因此，若要觀察危險的高頻震盪，就必須進行密集取樣。

探討為何需要如此高速的監控：火箭發動機的異常往往在轉瞬之間急劇擴大。在噴注器附近有一種壓力呈現規則性震盪的現象，稱為低頻燃燒不穩定（chugging，又稱低頻震盪）。這是發動機以低頻率劇烈喘震的現象，嚴重時會使閥門與管路劇烈晃動而損壞。這種震盪會在一瞬間增長，人工觀察並反應顯得過於緩慢，因此必須由機器代替進行毫秒級別的判斷。

某個零件的異常有時會先在其他零件的訊號中反映出來。例如渦輪泵軸先發生振動，該振動在稍後引發燃燒室壓力的變化。人類很難一眼看出這種時間延遲與連帶關係。神經網路由於能夠整合觀察多個感測器，因此能夠學習這種時間延遲與跨通道之間的關聯性。

此處介紹的架構融合了兩種方法：其一是時間卷積（Temporal Convolution），這是從訊號的時間演變中擷取波形特徵的方法，透過由短至長的滑動視窗逐步擴展以觀察長期趨勢；其二是注意力機制（attention），用於決定在多重訊號中應將重點聚焦於何處，給予當前關鍵通道更高的權重。將這兩種方法結合，即可同時兼顧微短震盪與通道間的關聯性。這種結合架構稱為時間卷積注意力網路（TCAN）。

進一步解析時間卷積觀察長時序流動的方法。卷積是用小視窗掃描訊號的方法。視窗若窄，就只能看到短暫的瞬間。火箭異常有時會在長時間內顯現。因此必須觀察寬廣的時間範圍。此時使用的方法是拉開視窗的間隔。這稱為擴張卷積。每隔一個值取樣觀察，藉此掃描寬廣的時間範圍。這如同一次跨兩階樓梯，能以相同的步數走得更高的道理。如此一來，便能以較少的計算量觀察長時序流動。

以注意力機制分配專注度的方法為例。想像在吵雜的教室中挑選並聆聽朋友聲音的情景。耳朵會在眾多聲音中專注於重要的聲音。注意力機制也扮演相同角色。它會為當前明顯呈現異常的通道賦予權重。情況改變時，權重也會隨之改變。因此能在多個感測器中即時挑選並觀察重要訊號。時間卷積觀察時間流動，而注意力機制挑選通道。

這種結合方式在近期的研究中被廣泛使用。2025年的一項研究提出了加入注意力機制的時間卷積神經網路。該研究說明此方法能同時掌握短期依賴性與長期依賴性。同年另一項研究結合了時間卷積與圖注意力機制。將多個感測器視為圖形，共同學習其關聯性。這些研究雖非火箭專用，但非常適合用於同時尋找多個感測器異常的問題。火箭發動機診斷也是必須同時尋找多個感測器異常的同類問題。已獲驗證的是此架構在一般時間序列資料中能妥善找出異常。然而，目前尚無實證顯示其能直接適用於火箭感測器與故障類型。本書提出將此架構移植應用於火箭診斷的方向。

火箭領域的其他研究也展現出類似方向。同時讀取多個感測器訊號的深度學習診斷正日益增加。2022年的一項研究採用了具可解釋性的長短期記憶網路。該神經網路利用多個感測器資料對發動機異常進行分類。2024年的一項研究探討了基於性質學習的缺陷檢測。這些趨勢皆是結合多種訊號以迅速尋找異常的嘗試。

這類診斷在哪裡進行運算也至關重要。若將訊號傳送至遠端電腦進行判斷，將耗費時間。若要在毫秒內得出答案，就必須在發動機旁進行運算。這種直接在設備旁運算的方式稱為邊緣運算。將神經網路置入微型專用晶片中運

行。一接收到訊號便在現場立即判斷。如此才能在毫秒內察覺危險。因此，診斷神經網路必須小巧且快速。大型神經網路即便準確，若速度緩慢則實用價值便會降低。

診斷模型大致經歷三個步驟。首先將感測器訊號進行均勻整平處理。這稱為標準化。因為各感測器的數值大小與單位皆有所不同。接著擷取短時間視窗輸入至模型中。最後將狀態劃分為多種類型。分辨是正常、感測器異常、泵浦異常，還是燃燒震盪。診斷模型以極快的速度不間斷地重複這三個步驟。

此診斷欲捕捉的異常有多種類型。例如噴射器附近以低頻震動發生的低頻震盪（chugging）。還有以更高頻率震動的高頻震盪。也有渦輪泵密封件磨損導致洩漏的問題。還有軸承磨損導致振動加劇的問題。每種異常都會留下不同的訊號形態。診斷模型學習這些形態的差異。透過觀察出現何種形態來判別異常的種類。

在此有一點需要注意。部分探討此架構的文章會列出準確度或延遲時間等數值。然而那些數值並未在已公開的論文中得到證實。若將未經證實的數值當作事實撰寫，會誤導讀者。因此本書不使用此類數值。取而代之的是，僅將此架構作為早期缺陷診斷的原理進行說明。核心在於同時觀察多個感測器以提早捕捉異常。

在實際發動機中處理診斷結果時，會對故障的危險度進行分級。對於壓力大幅超過危險線的致命訊號，僅憑單一訊號便會立即關閉發動機。若對此類訊號強制進行多重確認，將導致停機延誤而擴大事故。相反地，對於微弱的跡象，則會在多個訊號皆指向相同異常時才採取措施。這是為了避免單一模型的錯誤判斷破壞正常的試驗。因此診斷輸出會與安全邏輯結合使用。必須同時具備人工監督與基於規則的安全機制。

要信任診斷模型，就必須了解其做出該判斷的原因。神經網路如同難以窺探內部的黑盒子。它給出答案卻不說明理由。在火箭這般危險的領域中，理由至關重要。因此，展示是哪個感測器主導了判斷的研究正日益增加。這稱為具可解釋性的診斷。人員藉由檢視該理由來決定是否信任診斷結果。唯有能知曉理由，人工智慧才能被用於安全決策判斷。

另一個困難之處在於資料稀少。火箭發動機的真实故障資料極為罕見。因為故障往往意味著代價高昂的事故。因此正常資料豐富，而故障資料幾乎不存在。人工智慧在資料匱乏時難以良好學習。為了解決這個問題，研究人員使用了多種方法。其一是利用物理模型模擬故障情況以產生合成資料。另一種是在試驗用模型中故意注入預設的故障。這種故意注入故障的程序稱為缺陷注入。產生合成資料與缺陷注入在含義上有所不同。資料不足仍是該領域的一大課題。

也有將在某台發動機上學到的知識遷移至其他發動機的方法。這稱為遷移學習。這與會騎腳踏車就能更快學會騎機車類似。將已習得的知識轉移至新情境中使用。如此一來，即使新發動機的資料較少也能快速學習。2026年航空太空期刊的綜述論文也指出了此項困難。即實際故障資料稀少且故障種類繁多。該論文以這三個實務問題為核心梳理了診斷研究。

診斷的目標不僅在於防止事故發生。也用於進行適當的維護保養。若無異常，便無需刻意更換零件。若出現異常跡象，則提前檢修。這種依據狀態進行維護的方式稱為狀態型維修。可重複使用發動機藉由此方式節省成本。診斷是兼顧安全與成本的工具。

10.3 描繪肉眼不可見之燃燒室內部的數位孿生

本節探討燃燒室內部的危險震盪。這種震盪稱為燃燒不穩定性。首先說明聲音與火焰如何相互增強力量。接著探討利用電腦重建肉眼不可見之壓力場流動的方法。此方法採用遵循物理方程式的神經網路。最後指出該方法的實用價值與局限性。

先從術語解釋起。燃燒不穩定性是指燃燒室內部壓力劇烈震盪的現象。當火焰與聲波相互配合時，這種震盪便會加劇。微小的壓力震盪會擾動火焰的熱釋放。受擾動的火焰又會進一步擴大壓力震盪。此反饋機制反覆進行時，震盪便會如滾雪球般增長。嚴重時會導致燃燒室壁與噴射器損毀。在火箭歷史上，此現象是一項由來已久的棘手問題。

這種震盪自火箭研發初期便是重大問題。連將人類送上月球的大型發動機也曾為此問題大傷腦筋。燃燒室內部壓力劇烈共振震盪，摧毀了發動機。研究人員歷經多次修改噴射器形狀才解決了這個問題。由此可見燃燒震盪極難處理。時至今日，每當研發新發動機時，仍會確認此問題。

震盪有多種模態。我們將燃燒室想像成一個圓筒。聲波可以在圓筒的長度方向共鳴震盪。也可以沿著圓周旋轉震盪。還可以橫跨直徑震盪。每種模態的振動頻率皆不相同。若能掌握何種模態正在增長，應對便會變得更容易。因此，掌握震盪的模態與強度至關重要。

有一個古老的原理解釋了這種反饋機制。在壓力升高的瞬間若釋放出更多熱量，震盪就會加劇。這個原理稱為瑞利（Rayleigh）準則。想像推鞦韆的場景便很容易理解。當鞦韆向前盪時順勢推一把，就會越盪越高。若在相反瞬間推，鞦韆就會停下來。火焰與聲波也以相同的道理相互增強或平息。何時傳遞力量決定了穩定與不穩定。

這種反饋機制也與音叉和麥克風的關係相似。在禮堂裡若將麥克風靠近揚聲器，便會發出尖銳的聲音。這是因為揚聲器的聲音進入麥克風後被再次放大。這種反饋機制讓聲音如滾雪球般增強。在燃燒室中，火焰如同揚聲器，而聲音如同麥克風。兩者相位一致時，聲響便會失控般急劇增強。因此需要切斷此反饋機制的設計。

問題在於難以直接觀察燃燒室內部。內部溫度極高且壓力極大。無法隨意在任何位置裝設感測器。僅能在壁面的少數幾處安裝壓力感測器。然而危險的震盪發生在整個燃燒室內。僅憑壁面的少數幾個點很難掌握全貌。因此需要一種以少量觀測來描繪出整體樣貌的方法。

數位孿生在此應運而生。數位孿生是精準同步模擬實體設備的電腦模型。當實際發動機運轉時，模型也同步運行。藉由接收感測器數值，持續將模型與實體校準。如此一來，即使是未裝設感測器的位置，也能推估其狀態。因其如同雙胞胎般與實體並行運作，故得此名。

數位孿生與汽車導航有相似之處。導航接收實際道路狀況來重新規劃路線。數位孿生同樣接收實際發動機的訊號來重新描繪狀態。不同之處在於速度與精準度。火箭孿生必須每毫秒校準一次狀態。如此才能跟上快速的震盪。為了達到這種速度，必須使模型輕量化。

僅憑壁面的數個感測器推知內部情況，是一個反向求解的問題。通常是已知原因求解結果。在這裡我們僅知道作為結果的壁面壓力。透過該結果反推作為原因的內部壓力場。像這樣由結果尋找原因的問題稱為反問題。反問題可能存在多個解答，因而相當棘手。物理方程式能在這多個解答中僅保留符合物理定律的解答。

充實此數位孿生核心的方法是基於物理的神經網路。此神經網路稱為物理資訊神經網路（Physics-Informed Neural Network, PINN）。後續簡稱為物理神經網路。一般的神經網路僅依據資料進行學習。物理神經網路則在依據資料學習的同時，也學習遵守物理方程式。在學習時若違反方程式便會給予懲罰項。因此即便資料稀少，也能給出符合物理規律的解答。

進一步檢視物理神經網路的學習方式。一般的神經網路僅減少與標準答案之間的差異。物理神經網路則同時減少兩項誤差。其一是與感測器數值之間的差異。另一項是違反物理方程式的程度。它學習同時降低這兩項懲罰。如此一來，在沒有感測器的位置，其解答依然遵循物理規律。這相當於由物理規則填補了資料的空白處。這與著色畫中底稿輪廓線引導上色十分相似。

這種方法可以成為低成本的監控工具。要精確計算燃燒室內部狀態，需要大型電腦長時間運行。在試驗過程中並沒有充裕的時間。物理神經網路一旦完成訓練，便能迅速給出答案。因此在進行試驗的同時也能描繪內部狀態。藉由這種快速成像來觀察危險震盪的徵兆。這相當於在不中斷試驗的情況下窺探內部情況。

描述燃燒室聲波模態的方程式是亥姆霍茲（Helmholtz）方程式。該方程式揭示了聲音在封閉空間內以何種形態共鳴。這與管樂器內部特定音調容易共鳴的道理相似。物理神經網路在遵循該方程式與邊界條件的同時進行學習。它接收壁面少數感測器的數值作為輸入。進而重建整個燃燒室的壓力場流動。如圖像般呈現震盪在何處強烈產生。

燃燒室內的聲波會因邊界處的反應方式而有所不同。噴射器面與噴嘴喉部會反射一部分聲波並吸收一部分聲波。這種反射與吸收的程度稱為聲學邊界條件。物理神經網路在學習時亦同時遵循此邊界條件。如此才能描繪出真實燃燒室的聲音，而非空無一物之房間的聲音。前面所見的瑞利準則與此邊界條件共同決定了火箭燃燒的不穩定性。

這個方向在近期的研究中十分活躍。物理神經網路在以少量觀測復原聲壓場方面具有優勢。這是因為壓力只能在少數幾處測量，而速度則幾乎無法測量。2024年的一項研究利用物理神經網路學習燃燒器的熱聲交互作用。熱聲是指熱與聲音相互交織的現象。該研究從數據中找出壓力衰減、熱釋放耦合等數值。2026年的一項研究則利用分

區求解的物理神經網路估算燃燒室壁面的吸聲特性。這些研究探討了通用燃燒器的熱聲學習與邊界特性估算。在實際的液體火箭燃燒室中，目前尚無利用少量感測器即時復原整個壓力場的實證。本書將這種即時復原提出作為未來的發展方向。

物理神經網路也用於航太推進的清潔燃燒研究。2026年的一篇論文將這一趨勢視為實現永續推進的途徑。它將物理方程式與數據連結，更精確地描繪燃燒過程。此類研究不僅限於火箭，還延伸至航空發動機。遵循物理規律的神經網路這一構想正擴展至多個領域。

數位孿生已率先應用於航空發動機維護。某大型航空發動機透過數位孿生預先捕捉了多項異常。據悉，它預測了渦輪葉片的磨損與燃燒問題。這一案例展現了監控模型確實具有實用價值。火箭發動機的環境比航空發動機更為嚴苛，數據也更少。因此，將此方向轉移至火箭發動機需要更多的驗證。

物理神經網路也有缺點。將方程式納入學習後，訓練會變得棘手。必須妥善協調物理懲罰項與數據懲罰項的權重。若權重失衡，解答就會偏向一側。處理的燃燒過程越複雜，這種調整就越困難。因此，物理神經網路並非萬能。必須根據問題選擇合適的方程式與架構。在進行這種選擇時，依然需要人類的知識。

從更廣泛的角度來看，基於物理的機器學習在整個燃燒研究領域中快速發展。2025年發表的一篇綜述論文整理了這一趨勢。該論文將其分為燃燒化學、反應流動以及其他多個問題進行說明。該論文認為，只要將物理知識融入學習中，即使數據較少，求得的解答也符合物理規律。2026年的另一篇綜述論文則聚焦於航太推進中的紊流燃燒。它說明了如何將物理的嚴謹性與數據的力量結合在一起。

這種方法的優點在於同時結合數據與物理。當感測器較少時，僅憑數據很難填補空白。物理方程式能夠縮小這些空白。因此，僅憑幾個廉價的感測器也能描繪出整體狀態。能夠快速運行以供監控使用，也是其極具實用價值的特點。

局限性同樣顯而易見。火焰反應與紊流極其複雜。亥姆霍茲方程式是將聲音簡化看待的簡化模型。它無法涵蓋實際燃燒的所有細節。因此，這種數位孿生主要用於快速監控。精確的判斷必須輔以高保真度分析與實際測試。特定頻率或壓力振幅等具體數值並未在已公開的論文中得到證實。因此本書不採用此類數值。取而代之的是，僅說明該方法如何運作以及其應用價值的原理。

數位孿生若要良好運作，就必須不斷與實際情況校準。若模型與實際情況逐漸偏離，描繪出的圖像就會失真。因此，需要不斷利用感測器數值對模型進行修正。若修正不及時，孿生體就會脫離實際。若修正過於頻繁，又會受到雜訊干擾而產生波動。在這兩者之間取得平衡是技術的關鍵所在。優秀的孿生體既不會脫離實際，也不會被雜訊所左右。

抑制燃燒震盪的方法不只有監控。也可以在壁面加入吸音結構。這種結構稱為吸音裝置。也可以透過改變噴注器排列來切斷回授。人工智慧監控是輔助此類設計的工具。它能預先告知在何種條件下震盪會加劇。唯有設計與監控相結合，才能有效控制震盪。

10.4 測量發動機老化與個體差異的方法

本節探討發動機老化或個體間差異的問題。首先說明可重複使用發動機為何會逐漸發生變化。接著介紹測量這種變化之不確定性的方法。該方法是一種在給出答案的同時也能給出答案範圍的神經網路。最後指出為何這種不確定性對安全至關重要。在此需要預先說明的是，此處所舉的研究屬於一般機械的壽命預測。這些研究並未以火箭發動機的數據進行驗證，應用於火箭屬於未來的可能性。

可重複使用發動機是指將同一台發動機使用多次。這相當於從用過即丟的紙杯方式，轉變為多次重複使用陶瓷杯的方式。這種方式大幅降低了太空運輸的成本。然而，每使用一次，零件就會逐漸磨損。噴注器表面會磨損。渦輪葉片會遭受侵蝕。冷卻通道會因熱疲勞而產生形變。像這樣隨著時間推移而性能發生變化的現象稱為經年老化。

另一個變數是製造公差。即使按照同一張圖紙製造，實際尺寸也會略有不同。每個零件都存在微小的誤差。由於這些誤差，每台發動機的響應都會有所不同。當老化與製造公差疊加時，發動機就會產生個別特性。即使發出相同的閥門指令，每台發動機的反應也略有不同，因此控制器必須掌握這種差異。

這種變化會直接影響發動機的性能。磨損與侵蝕會使推力逐漸下降。推力下降後，火箭的軌跡就會改變。燃燒的充分程度也會發生變化。表徵這種充分程度的數值就是特徵排氣速度。若該數值下降，使用相同推進劑所產生的力量就會減少。因此，預先測量老化與公差至關重要。

在此對特徵排氣速度一詞稍作解釋。該數值是表示燃燒室燃燒充分程度的指標。它由燃燒室壓力、噴嘴喉部面積以及推進劑流量決定。這與噴嘴實際噴出的排氣速度或噴嘴效率是不同的數值。它是僅衡量燃燒良好程度的標準。若該數值較高，代表燃燒充分；若較低，代表推進劑燃燒得不夠充分。當噴注器磨損時，混合效果變差，該數值便會下降。因此，透過該數值的變化可以推測發動機的健康狀態。

這種變化可以比作穿久了的運動鞋。新運動鞋的鞋底很結實。穿久了鞋底會磨損變滑。用同樣的力量奔跑，前進的距離也會變短。發動機也是如此，使用越久性能就越會逐漸下降。問題在於每台發動機的性能下降情況各不相同。有的發動機磨損較快，有的發動機磨損較慢。因此，必須單獨檢視每台發動機的狀態。

掌握老化情況是安全重複使用的關鍵。若不了解狀態，就會犯下兩種錯誤：可能過早報廢尚可使用的發動機，造成浪費；反之，也可能過度使用已經耗損嚴重的發動機，導致事故發生。若能準確掌握狀態，就能在充分使用發動機的同時不逾越危險界線，從而同時避免這兩種錯誤。

此處採用了變分貝氏神經網路。英文為 Variational Bayesian Neural Network。以下統稱為貝氏神經網路。普通的神經網路只會給出單一答案。例如明確回答推力下降了3%。而貝氏神經網路則會同時給出答案的範圍。它會以推力下降有很大機率介於2%至4%之間的形式，同時告知答案與確信程度。

我們以簡單的方式描繪貝氏神經網路給出區間範圍的方式。假設不是只問一個人，而是詢問多個人。若眾人的答案相近，確信程度就高；若答案各不相同，確信程度就低。貝氏神經網路將這種多種意見整合在單一模型中。因此，它會同時給出答案的中間值與離散的寬度範圍。若範圍較窄，代表模型信心較高；若範圍較寬，代表模型尚不十分確定。

不確定性有兩種類型。一種源於數據本身的波動。這是如感測器雜訊般無法消除的波動。另一種則源於模型學習不足。在未曾遇過的情況下，這種不確定性會增加。初次遇到新型態的老化時，此不確定性就會變大。將這兩種類型分開來看，應對就會變得更加容易。這樣便能判斷是該收集更多數據，還是進行更多測試。

貝氏神經網路比普通神經網路更難學習。因為它需要學習的不是單一答案，而是答案的分佈。若要精確求得這個分佈，計算量非常龐大。因此研究人員採用了近似方法。將分佈轉換為易於處理的形式來學習。這種方法稱為變分推論。名稱中的「變分」即源於這種近似。由於採用了近似，因此必須以實際數據確認結果。

老化預測並非僅限於火箭的問題。飛機發動機、風力發電機、工廠機械也面臨相同的課題。因為這些都是長期使用的機械。因此，該領域的研究互相交流借鑒。將在其他機械上驗證成功的方法轉移至火箭；而火箭的嚴苛條件有時也會孕育出新方法。透過各領域之間相互交流方法，技術發展就會更加迅速。

這種確信的程度稱為不確定性。掌握不確定性對安全至關重要。模型充滿信心地給出答案時與不甚了解時，必須採取不同的應對方式。當模型表示不確定時，人員會更加謹慎，保留更大的安全裕度，並透過追加測試進行確認。這與天氣預報告知降雨機率的道理相同。若機率是一半一半，就會帶上雨傘並觀察情況。

這個方向在許多領域迅速發展。預測零件剩餘壽命的研究便具代表性。剩餘壽命稱為剩餘有效壽命。2024年的一項研究利用貝氏神經網路預測該壽命。給出的不是單一答案，而是機率分佈。2025年的一項研究則利用貝氏循環神經網路同時處理多種不確定性。這些研究並非火箭專用，但處理逐漸老化之機械狀態的問題是相同的。相同的概念亦可用於火箭發動機的老化預測。

該方法廣泛測試的對象包括航空發動機數據。研究人員利用公開的發動機老化數據競逐各類方法。利用相同的數據比較多種方法的預測結果。如此便能辨別哪種方法更優越。雖然火箭數據較少，但可透過此類公開數據建立基礎骨架。之後再將建立好的方法轉移至火箭數據進行驗證。

控制器接收該不確定性資訊並進行判斷。若不確定性較大，則採取保守運轉方式。將推力設定得略低一些，或保留更多裕度。若不確定性較小，則能進一步發揮性能。這樣一來，便能根據發動機的狀態進行運轉。這比以單一固定規則應對所有發動機的方式更為安全。

不確定性資訊也用於維護決策。若模型能充滿信心地預測老化，就容易制定維護計畫。若模型表示不確定，則拆開零件親自檢查。這樣可以減少盲目的維護。由於了解狀態後才進行維護，因此能節省零件消耗，同時也不會遺漏危險零件。掌握不確定性，能夠兼顧節約與安全。

局限性依然存在。人工智慧給出機率，並不代表該機率就自然正確。若模型學習有誤，就會給出錯誤的確信度。因此，必須利用實際測試數據進行校準與驗證。這是為了確認模型給出的不確定性是否與實際誤差相符。未經此類確認的機率難以令人信賴。在火箭這種高風險領域，此類驗證必須更加嚴格。具體的信賴區間等數值並未在已公開的論文中得到證實。因此本書不採用此類數值。取而代之的是，僅說明衡量不確定性之思維的核心骨架。

10.5 多閥門協同調節的強化學習控制（LUMEN, DLR P8.3）

本節探討協同調節發動機多個閥門的智慧控制。首先說明何謂強化學習。接著探討火箭發動機控制為何如此困難。隨後介紹德國的實際實驗案例。最後指出將該技術應用於飛行前尚存的課題。

強化學習是一種透過試錯來學習的方法。這與嬰兒學習走路的過程相似。可以理解為跌倒時受到懲罰，走得好時獲得獎勵。對良好行為給予獎勵，對不良行為給予懲罰。透過多次嘗試，尋找獲得最多獎勵的方法。在此基礎上結合神經網路的方法稱為深度強化學習（Deep Reinforcement Learning, DRL）。以下統稱為深度強化學習。

強化學習中存在兩種心態的碰撞。一種是想要使用已知好方法的心態，另一種則是想要嘗試新方法的心態。如果總是只用已知的方法，就找不到更好的途徑；如果總是只嘗試新事物，就會面臨危險且容易迷失。因此，兩者之間需要取得平衡。這種平衡可以看作是探索新事物與利用已知事物之間的拉鋸戰。在學習初期會進行多方嘗試，越到後期則越常使用已掌握的方法。

在火箭領域，無法使用實體發動機進行這種試錯。因為不能靠損毀發動機來學習。因此要先透過電腦中的模型來學習。這個模型稱為模擬器。在模擬器中，跌倒數千次也沒關係。可以盡情嘗試以找出良好的控制方法。這就像玩好幾局遊戲來摸索訣竅一樣。

讓我們來看看火箭發動機控制為何困難。發動機內部的各項數值彼此交織關聯。開啟氧化劑閥門時，壓力會上升。壓力上升時，渦輪泵的轉速會發生變化。燃料與氧化劑的比例也會隨之變動。這個比例稱為混合比。只要觸動一個數值，其他數值就會連連跟著變動。因此無法單獨調節單一閥門。需要能夠同時處理多個數值的控制方法。

在著陸的火箭中，這種控制更加棘手。火箭要重新降落，必須大幅降低推力。有時甚至會調低到最大推力的三分之一以下。像這樣在大範圍內調節推力的操作稱為深度節流（deep throttling）。意思是深度調節。此時混合比也必須維持在適當水準。若混合比失衡，燃燒品質會惡化且零組件會受損。必須同時、迅速且安全地調諧多個數值。

德國航空太空中心使用實體發動機研究這個問題。德國航空太空中心簡稱為DLR。DLR製造了名為LUMEN的實驗用發動機。LUMEN是使用液氧與甲烷的泵壓式發動機。推力為25千牛頓級。相當於小型火箭發動機的規模。該發動機於2024年3月在P8.3試驗台首次運轉。P8.3是位於DLR蘭波茨豪森的試驗設施。LUMEN是測試可重複使用發動機技術的平台。同時研究狀態監測與智慧控制。

LUMEN採用特定的循環方式。這種方式稱為膨脹放氣循環。這是利用冷卻通道中被加熱的部分燃料來驅動渦輪的方式。這種方式結構相對簡單且安全。因此非常適合用來測試各種技術。LUMEN是產業界與研究機構共同使用的開放式試驗台。可以將新的控制方法應用於實體發動機上進行測試。

P8.3試驗台自2021年起開始運轉。該試驗台是在原有設施基礎上擴建而成。過去只能測試燃燒室。P8.3則可測試整台發動機乃至渦輪泵。因此可以在實際條件下驗證控制方法。LUMEN與P8.3成為人工智慧控制研究的基石。

DLR為這台發動機導入了人工智慧控制。DLR官方資料說明，他們利用神經網路對冷卻通道的熱傳導進行建模。並指出透過人工智慧控制來調諧推力並監測燃燒不穩定性。2025年發表的凱·德雷西亞博士學位論文詳細探討了這項研究。該論文利用深度強化學習來控制火箭發動機。並將其結果與傳統的模式預測控制進行比較。報告指出，在同時控制多個數值的情況下，獲得了約1.3%的平均誤差。這個數值是德雷西亞論文提出的結果。這是來自模擬與試驗台研究的數值，並非在飛行中對完整發動機全運轉領域進行實證的數值。

DLR在先前的研究中將神經網路控制應用於實際測試。2023年在LUMEN的渦輪泵試驗中驗證了神經網路控制。同時也進行了利用神經網路對冷卻通道熱傳導建模的研究。2024年發表了LUMEN的零組件試驗結果與進展情況。這些研究不斷累積，進而推動實體發動機控制的發展。這不是一次性的成功，而是歷經多年的積累。

我們進一步探討控制器處理狀態與動作的架構。控制器在每個時刻讀取狀態並產生動作。該動作造就了下一個狀態。在下一個狀態中再次產生動作。這個過程持續不斷地進行。像這樣狀態與動作相繼銜接的問題稱為循序決策問題。強化學習非常適合處理這種循序決策。它學習的不是單次判斷，而是一連串連續判斷的流程。

讓我們來看看強化學習控制器如何進行判斷的原理。控制器首先讀取發動機的狀態。包括燃燒室壓力、閥門位置、泵轉速、溫度等數值。這些數值被稱為狀態。控制器根據狀態決定閥門要移動多少幅度。這個動作被稱為行動。動作的結果若良好則獲得獎勵，若不良則受到懲罰。若接近目標推力就給予獎勵。若混合比失衡或震動加劇就給予懲罰。包含這些獎懲規則的規範稱為獎勵函數。控制器會朝著獲得更多獎勵的方向來優化閥門操作。

妥善設計獎勵函數決定了控制的成敗。獎懲規則必須忠實反映目標。若只對推力給予獎勵，控制器可能會忽視震動。因此將推力、混合比與震動一同納入獎懲標準。閥門動作過於急促也會受到懲罰。因為急遽操作會對零組件造成過大負擔。必須妥善協調多個目標的權重。這種權重調配正是控制設計的核心工作。

在工業現場，可重複使用發動機的自動運轉也是熱門話題。某家美國企業的最新發動機即以反覆重複使用為目標。據悉該發動機減少了零組件數量並改為更易於製造的設計。據稱透過取消隔熱罩降低了重量與複雜度。這些變化體現了頻繁使用發動機並進行快速維護的趨勢。不過這屬於企業的開發案例。並非經過學術驗證的性能數值。本書僅將此類案例作為趨勢參考。

這種方式的優勢在於能夠整體處理相互交織的問題。人工很難為每個閥門手動編寫規則。由於各數值相互牽連，規則會變得十分複雜。強化學習能從數據中自行學習這些錯綜複雜的關係。同時考量多個數值以尋找平衡點。然而，學習完成的控制器並不會自動適應從未經歷過的老化現象。應對發動機變化的途徑有多種。有先讀取狀態並反映至控制中的方法。有即使發生變化也能保持穩定的強健控制。也有利用新數據讓控制器重新學習的方法。在運轉過程中學習的線上適應，會帶來未經檢驗的控制變化這一新風險。因此要採用哪種途徑，必須考量安全性後再做決定。

強化學習控制可以與傳統方法相互對照。長期使用的方法中有模型預測控制。該方法利用發動機的數學模型進行預測並決定閥門操作。若有精確的模型就能良好運作。但若發動機老化或模型出現偏差，性能便會下降。強化學習直接從數據中學習，因此能靈活應對這類變化。兩種方法各有優缺點。因此研究人員會將兩者進行比較並融合使用。

讓我們來看看為何維持適當的混合比至關重要。燃料與氧化劑的比例即為混合比。火焰溫度通常在燃料與氧化劑達到最適比例附近時最高。一旦偏離此比例，無論是燃料過剩還是氧化劑過剩，溫度都會下降。火箭往往會特意在燃料稍多的狀態下運轉。這是為了降低接觸壁面的火焰溫度以保護燃燒室壁。但若加入過多燃料，推力就會減小。煤油系燃料此時會產生積碳。使用氫氣的發動機則幾乎沒有積碳。像這樣，最適的混合比因推進劑組合而異。因此在改變推力的過程中也必須維持混合比。這正是需要同時調諧多個數值的控制之原因。

在此我們謹慎處理數值。諸如快速深度節流時間、混合比誤差範圍、震動降低率等具體性能數值，尚未在公開發表的論文中得到確認。若使用未經確認的性能數值，會誇大事實。因此本書不採用該類數值。已確認的數值為多變數控制的平均誤差約1.3%。僅以此數值作為依據。

我們來探討這個平均誤差1.3%所代表的涵義。該數值是同時調諧多個變數的結果。等於不是只顧及單一目標，而是同時達成了多個目標。依靠人工手動編寫的規則很難掌握這種平衡。人工智慧透過學習錯綜複雜的關係找到了平衡點。不過該數值是在特定研究的受限條件下得出的結果。並非可以直接套用於所有發動機的數值。條件若改變，必須重新進行驗證。

要將這項技術直接應用於飛行發動機，仍有一段路要走。強化學習控制器首先在模擬環境中學習。在電腦中就算出錯也沒有危險。接著連線硬體進行測試。這種測試稱為硬體在環測試。將實體零組件與神經網路一同運行。隨後透過地面燃燒試驗確認安全性。必須通過所有這些階段，才能進一步探討實際飛行。因為火箭認證非常嚴格。

這裡的一大難題在於模擬器與實體之間的差異。電腦模型與實體發動機並不完全相同。在模型中學習得很好的控制策略，在實際應用中可能會出現偏差。這種差異被稱為模擬與現實的差距。為了縮小這個差距，必須建立更精確的模型。必須利用實際測試數據持續修正模型。像LUMEN這樣的試驗台正是用於這種修正調校。唯有具備實際數據，才能信賴人工智慧。

另一個原則是設置多重安全防護機制。強化學習控制器可能會發出異常指令。為了防範這種情況，同時設置了基於規則的安全防護裝置。一旦控制器的指令越過危險紅線，安全裝置就會加以阻截。人工智慧提升性能，規則則守住底線。唯有具備這雙重防護，才能將人工智慧應用於實體發動機。

閥門也存在物理極限。閥門無法以超過既定速度的速率開啟或關閉。這個最大速度稱為閥門作動速度極限。若人工智慧發出超出此極限的急劇指令，管路就會受到衝擊。液體突然停止並衝擊管壁的水錘現象就是典型的例子。因此控制器的指令被限制在閥門所能承受的速度範圍之內。此外，還設置了在人工智慧發生異常時能立即切換至傳統控制器的安全切換裝置。傳統控制器利用經過長期驗證的規則來守護發動機的安全。

強化學習控制的價值在重複使用中格外顯著。一台發動機若多次使用，每次的狀態都會有所不同。固定的控制規則無法跟上這種變化。強化學習控制器讀取狀態並相應調節閥門。老舊發動機按老舊狀態處理，新發動機按全新狀態對待。這種靈活性降低了可重複使用火箭的成本。因此全球許多機構正全力投入這項研究。

不過人工智慧控制目前仍處於地面試驗階段。尚未廣泛應用於實際飛行發動機上。飛行認證需要長期的測試與紀錄。必須證明新的控制方法在任何情況下都是安全的。這項驗證需要大量的數據與時間。因此人工智慧控制目前正在實驗室與試驗台中茁壯成長。隨著成果不斷累積，未來終將走向實際飛行。

10.6 結論與未來展望

本節探討前述四項技術如何整合為一體。接著整理為何在可重複使用火箭時代需要這種整合架構。最後點出人工智慧發動機管理所需的安全原則。

液體火箭發動機的智慧化運轉串聯了四項技術。感測器診斷同時觀察多種訊號，及早讀取微弱徵兆以發現早期異常。數位孿生利用遵循物理方程式的神經網路，重建內部不可見的壓力流動。貝氏模型量測老化與偏差的不確定性，在給出答案的同時也提供答案的區間範圍。強化學習控制器同時調節多個閥門，尋找錯綜複雜數值之間的平衡點。

這四項技術相互傳遞數據。當診斷發現異常時，控制器便進行應對。當數位孿生提供內部狀態時，診斷會變得更加精準。當貝氏模型告知不確定性時，控制器會採取更謹慎的操作。如此一來，四項技術形成了一個閉環運轉。這是一種發動機自主察看狀態並自主調節的架構。這種架構被稱為自主健康管理。

這四項技術彌補了彼此的弱點。單憑診斷很難查明異常的確切原因。數位孿生展現內部狀況後，原因便一目了然。單憑控制器無法得知發動機的老化程度。貝氏模型提示不確定性後，控制便更具安全性。一項技術的空缺由另一項技術填補。因此不是將它們各自分立，而是整合為一體。唯有結合在一起時，自主管理才算真正完成。

這一趨勢尚未成為成熟的產品。大部分仍處於研究與測試階段。許多成果也是未經同儕審查的早期研究。因此，斷言其成效為時尚早。本書明確指出了這一點。目前處於理解技術架構與方向的階段。要廣泛應用於實際飛行發動機，仍需要更多時間。

在可重複使用火箭時代，這一趨勢必不可少。若一台發動機使用多次，每次的狀態都會有所不同。單靠固定的規則很難應對所有的變化。由人工每次手動調整，數值變化太快且相互牽連。人工智慧是快速讀取並應對這種變化的工具。若要降低太空運輸成本，就必須具備這種自主管理。

然而，人工智慧控制必須具備限制機制。其一是可解釋性。人類必須能夠理解模型為何做出如此判斷。其二是獨立驗證。必須透過其他方法再次確認模型的判斷。剩下的一項則是失敗時切換至安全狀態。即使模型出現動搖，發動機也必須能夠安全停機。若無這三項機制，就很難將發動機託付給人工智慧。

人工智慧不是代替人類去信任發動機的工具。人工智慧是為了更詳細觀察發動機的工具。人類借用人工智慧的眼睛來更深入理解發動機。最終的判斷與責任依然在於人類。在這一原則之上，人工智慧讓火箭變得更安全、更經濟。

總結

再次回顧本章的核心。液體火箭發動機是極其快速、高溫且危險的機器。為了安全使用該發動機，需要即時監控與控制。傳統的閾值方式容易遺漏微弱的異常。人工智慧透過綜合觀察多個感測器來填補這一空缺。這是在數值跨越危險線之前，讀取微弱徵兆的作法。

早期診斷同時考量時間序列與通道關係。結合時間卷積與注意力機制的架構是典型代表。該架構能提早從多個感測器中發現異常。判斷必須在發動機旁的小型晶片上於毫秒內完成。不過，火箭專用的性能數據目前仍難以確認。因此本書僅以原理進行說明。診斷應與人類監督以及基於規則的安全機制搭配使用。

數位孿生描繪了看不見的燃燒室內部。它採用遵循物理方程式的物理神經網路。僅靠壁面上的幾個感測器即可還原整個壓力流動。這在監控燃燒不穩定性方面非常有用。只不過它無法完全涵蓋複雜的火焰。將其用於快速監控，並輔以精密解析來補充。數位孿生必須透過實際訊號不斷校正，才能發揮應有的作用。

貝氏神經網路衡量老化與偏差的不確定性。它在給出答案的同時給出答案的區間範圍。範圍狹窄代表有把握，範圍寬廣則代表不太確定。該資訊可用於控制器判斷是否謹慎行事。也可用於決定何時進行維護。只不過模型的機率必須透過實際數據進行驗證。

強化學習控制器可協同調節多個閥門。德國 DLR 在 LUMEN 發動機與 P8.3

測試台上對此進行研究。公開資料報告了多變數控制的平均誤差約為

1.3%。部分詳細性能數據因缺乏充分驗證而未予採用。該技術若要應用於飛行，仍需經過多個階段的驗證。

再次重申貫穿本章的一項原則。人工智慧是提升性能的工具。然而安全是由規則與人類來守護。必須兼具這兩層保障，才能將人工智慧應用於實際發動機。不輕信未經驗證的數據。將初期研究與經過驗證的成果區分開來閱讀。這種態度才是處理火箭這類危險技術的正道。

當這四項技術結合為一體時，發動機便能自行照看其健康狀態。四項技術互相交換數據，形成閉環運作。這種自主管理是可重複使用火箭時代的基石。因為一台發動機若使用多次，每次狀態都會不同。然而為了安全，必須同時具備可解釋性、獨立驗證與安全轉換機制。

本章介紹的技術回答了不同的問題。診斷詢問的是「現在哪裡出了問題」。數位孿生詢問的是「看不見的內部狀況如何」。貝氏模型詢問的是「對此判斷能相信多少」。控制器詢問的則是「那麼該採取什麼行動」。當這四個問題聚集在一起時，發動機的狀態與應對便串連成一體。優良的人工智慧發動機管理同時涵蓋了這四個問題。

最後說明看待本章資料的態度。本章所列舉的最新研究中，有相當多仍處於初期階段。許多論文是未經同儕審查的預先研究。企業的發動機案例僅展現了產業趨勢。其分量與經由學術驗證的成果截然不同。因此本章著重於已確認的數值與原理。未能確認的數據則予以剔除。希望讀者能正確理解技術的發展方向。人工智慧是在使火箭變得更安全、更經濟的漫長征程中的工具。

相關佐證資料

- Yang, S., Wu, J., Xie, C., Zhong, Z., Cheng, Y., Wang, B., Liu, Y., & Lu, J. (2026). Data-Driven Intelligent Fault Diagnosis: A Review from the Perspectives of Three Practical Issues in Liquid Rocket Engines. *International Journal of Aeronautical and Space Sciences*, 27(4), 3438-3463. <https://doi.org/10.1007/s42405-026-01131-9>
- Wang, T., Ding, L., & Yu, H. (2022). Research and Development of Fault Diagnosis Methods for Liquid Rocket Engines. *Aerospace*, 9(9), 481. <https://doi.org/10.3390/aerospace9090481>
- Deng, L., Cheng, Y., & Shi, Y. (2022). Fault Detection and Diagnosis for Liquid Rocket Engines Based on Long Short-Term Memory and Generative Adversarial Networks. *Aerospace*, 9(8), 399. <https://doi.org/10.3390/aerospace9080399>
- Urgolo, A., Pill, I., Waxenegger-Wilfing, G., & Freiberger, M. (2024). Property Learning-Based Fault Detection for Liquid Propellant Rocket Engine Control Systems. *OASlcs*, 125, 15:1-15:20. <https://doi.org/10.4230/OASlcs.DX.2024.15>
- Waxenegger-Wilfing, G., Dresia, K., Deeken, J., & Oschwald, M. (2021). Machine Learning Methods for the Design and Operation of Liquid Rocket Engines: Research Activities at the DLR Institute of Space Propulsion. *arXiv*. <https://arxiv.org/abs/2102.07109>
- NASA. (2009). Distributed Health Monitoring System for Reusable Liquid Rocket Engines. NASA Technical Reports Server. <https://ntrs.nasa.gov/api/citations/20090040299/downloads/20090040299.pdf>
- Wang, C., Liu, Q., Qu, L., Chang, W., Wang, T., Duan, P., & Cao, Y. (2025). Self-attention-enhanced Temporal Convolutional Networks for Anomaly Detection in Time Series. *Proceedings of the 2025 4th International Conference on Cryptography, Network Security*

- and Communication Technology. <https://doi.org/10.1145/3723890.3723911>
- Wang, D., Zhang, H., & Yu, Z. (2026). MST-MFGAT: An adaptive temporal convolution with feature graph attention network for time series anomaly detection. *Neurocomputing*, 664, 132134. <https://doi.org/10.1016/j.neucom.2025.132134>
- Harje, D. T., & Reardon, F. H. (1972). Liquid Propellant Rocket Combustion Instability. NASA SP-194. <https://ntrs.nasa.gov/citations/19720026079>
- Culick, F. E. C. (2006). Unsteady Combustion in Liquid Rocket Engines: Dynamics, Instabilities, and Control. NATO RTO-EN-AVT-143.
- Raissi, M., Perdikaris, P., & Karniadakis, G. E. (2019). Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, 378, 686-707. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045>
- Mariappan, S., Nath, K., & Karniadakis, G. E. (2024). Learning thermoacoustic interactions in combustors using a physics-informed neural network. *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, 138, 109388. <https://doi.org/10.1016/j.engappai.2024.109388>
- Li, A., Du, J., & Liu, Y. (2026). Domain-decomposition physics-informed neural network approach for the acoustic boundary impedance estimation of a combustion chamber model. *Journal of Vibration and Control*. <https://doi.org/10.1177/10775463261433496>
- Wu, J., Wang, X., Zhang, G., Liu, J., Li, X., Zhang, Y., Zhang, H., Lyu, J., Wang, B., & Wu, Y. (2025). Physics-informed machine learning for combustion: A review. *arXiv*. <https://arxiv.org/abs/2509.03347>
- Mousavi, M., Caldwell, C., Baltes, J., Aljaseem, M., & Lee, B. J. (2025). Physics-Informed Neural Networks in Clean Combustion: A Pathway to Sustainable Aerospace Propulsion. *arXiv:2509.08094*. <https://arxiv.org/abs/2509.08094>
- Selvam D., C., Devarajan, Y., Raja, T., Tiwari, A., Sunil Kumar, M., Sharma, K., Agrawal, A. P., Khandual, A., & Mehar, K. (2026). Physics-Informed machine learning for turbulent combustion in aerospace propulsion: bridging physical rigour and data intelligence. *Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics*, 20, 2678066. <https://doi.org/10.1080/19942060.2026.2678066>
- Ochella, S., Dinmohammadi, F., & Shafiee, M. (2024). Bayesian neural networks for uncertainty quantification in remaining useful life prediction of systems with sensor monitoring. *Journal of Mechanical Engineering Science*. <https://doi.org/10.1177/16878132241239802>
- Chen, C., Wang, C., Guo, J., Cui, P., Zheng, J., & Liu, Z. (2025). Remaining useful life prediction considering multiple uncertainty information via Bayesian BiGRU-based method. *Reliability Engineering & System Safety*, 264, 111431. <https://doi.org/10.1016/j.ress.2025.111431>
- Dresia, K. (2025). Rocket Engine Control with Deep Reinforcement Learning. DLR-Forschungsbericht DLR-FB-2025-16. <https://doi.org/10.57676/bwbm-p528>
- Dresia, K., Adler, A., Saraf, A., Hahn, R., Kurudzija, E., Traudt, T., Deeken, J., & Waxenegger-Wilfing, G. (2023). Rocket Engine Control with Neural Networks: Experimental Results of the LUMEN Turbopump Test Campaign. *AIAA SciTech 2023 Forum*, AIAA 2023-0137. <https://doi.org/10.2514/6.2023-0137>
- Börner, M., Traudt, T., Dresia, K., Armbruster, W., Suslov, D., Groll, C., Hahn, R. D., Saraf, A. M., Deeken, J., Hardi, J., Oswald, M., & Schlechtriem, S. (2024). Component Test Results and Project Progress of the DLR Liquid Upper Stage Demonstrator Engine (LUMEN). *AIAA SciTech 2024 Forum*, AIAA 2024-1398. <https://doi.org/10.2514/6.2024-1398>
- DLR. (2026). LUMEN: AI-assisted reusable rocket engines. German Aerospace Center. <https://www.dlr.de/en/research-and-transfer/featured-topics/reusable-space-transportation/lumen>
- DLR. (2026). LUMEN, Liquid Upper Stage Demonstrator Engine. German Aerospace Center. <https://www.dlr.de/en/research-and-transfer/research-infrastructure/large-scale-research-facilities/lumen-en>
- DLR Institute of Space Propulsion. (2026). Test cell P8.3. German Aerospace Center. <https://www.dlr.de/en/ra/research-transfer/research-and-test-infrastructure/test-benches-for-space-propulsion/research-and-technology-test-bench-p8-1/test-cell-p8.3>

支持金景珍律師的AI書庫

如果這本書對您有幫助，歡迎透過 PayPal 小額支持。您的支持會用於資料整理、翻譯、公開發布與AI教育內容製作。



paypal.me/kimkjkj