arXiv:2601.06444v1 [cs.LG] 10 Jan 2026

面向高维计算设计的物理信息树搜索

SuvoBanik[1,2,*], Troy D. Loeffler[1,2], Henry Chan[1], Sukriti Manna[1,2], Orcun Yildiz[3], TomPeterka[3],和 Subramanian Sankaranarayanan[1,2,*1]伊利诺伊大学芝加哥分校机械与工业工程系，美国伊利诺伊州芝加哥 60607[2]阿贡国家实验室纳米尺度材料中心，美国伊利诺伊州勒蒙特 60439[3]阿贡国家实验室数学与计算机科学部，美国伊利诺伊州勒蒙特 60439[*]通讯作者：skrssank@uic.edu，sbanik2@anl.gov；

2026年1月13日

摘要

高维设计空间支撑着科学与工程领域广泛的基于物理的建模和计算设计任务。这些问题通常被表述为崎岖目标景观上的受约束黑箱搜索，其中函数评估成本高昂，且梯度不可用或不可靠。由于设计空间呈指数级扩展、存在多个局部盆地，以及采样过程中缺乏物理指导，传统的全局搜索引擎和优化器在此类场景下往往表现不佳。我们提出了一种物理信息蒙特卡洛树搜索（MCTS）框架，将策略驱动的基于树的强化学习理念扩展至连续、高维的科学优化。该方法将群体级决策树与代理模型引导的方向采样、奖励塑形，以及全局探索与局部利用之间的分层切换相结合。这些要素能够高效遍历非凸、多峰景观，其中具有物理意义的最优解十分稀疏。我们在一组典型测试函数上将该方法与标准全局优化基线进行了比较，结果表明，在收敛性、鲁棒性和泛化性方面，该方法具有更优或相当的性能。除合成测试外，我们还展示了该方法在以下问题中的物理一致性适用性：(i) 从团簇到块体的晶体结构优化；(ii) 基于量子数据集拟合经典原子间势；以及 (iii) 受连续介质力学控制的受约束工程设计问题。在所有案例中，该方法都能在保持物理约束的同时，以高保真度和高评估效率实现收敛。总之，我们的工作确立了物理信息树搜索作为计算设计和高维科学优化的一种可扩展、可解释范式，在科学设计工作流程中架起了离散决策框架与连续黑箱搜索之间的桥梁。

1 引言

计算设计通常涉及连续搜索空间中的高维优化，其中目标函数通过模拟器或数值模型进行评估，并编码了物理成本、性能指标或稳定性标准[1]。此类问题出现在材料设计[2], 逆结构搜索[3], 势函数拟合[4], 拓扑与机械设计[5], 以及多物理场协同优化[6]等场景中——在这些场景里，目标函数实际上是一个必须以有限成本查询的黑箱。这些问题尤其具有挑战性，原因包括：**(i)** 每次评估的计算成本高昂（例如密度泛函理论、有限元法、多物理场求解器）；**(ii)** 缺乏梯度或不具备可微性；以及 **(iii)** 设计景观具有非线性、多峰和高维特征。在许多计算设计工作流程中，目标函数含噪、不可微且查询成本高昂，使经典的基于梯度的方法难以适用。形式上，一般的黑箱设计优化问题可以表述为：在有界设计域 D^n 中寻找参数 x^*，使标量目标函数 f 最小化：

$$x^* = \arg\min_{x \in D^n} f(x) \tag{1}$$

其中，有界域定义为：

$$D^n = \{x \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{l} \leq x \leq \mathbf{u}\} \tag{2}$$

其中，n 表示问题的维度，$[\mathbf{l}, \mathbf{u}]$ 定义了搜索空间中每个变量的下界和上界。传统上，人们开发了大量算法来应对高维黑箱优化问题，这是许多计算设计工作流程中的核心计算瓶颈 [7, 8]。早期方法，例如模拟退火 [9, 10], 、极小值跳跃 [11], 、元动力学 [12],和随机搜索 [13] ，引入了概率式全局探索策略，后来被应用于计算设计任务，如结构预测、缺陷搜索和拓扑优化。模拟退火通过模拟热冷却来逃离局部极小值，而极小值跳跃和元动力学则结合了全局跳跃与局部细化（通常结合基于梯度的局部优化）；对于具有局部盆地的物理学驱动设计空间而言，这一特性颇具吸引力。进化算法（EA），包括遗传算法（GA）[14, 15, 16] 和差分进化（DE）[17], ，通过引入选择、交叉和变异等受生物学启发的机制，使候选解群体在多代中不断演化，从而推进了这一全局优化范式，并能有效搜索崎岖的景观。与这些植根于生物学的方法不同，粒子群优化（PSO）[17, 18, 19] 等群智能算法模拟去中心化智能体的社会行为，每个粒子根据自身经验和群体的集体知识更新位置。这为在大型参数空间中平衡探索与利用提供了一种简单而强大的机制。在自然启发式元启发式算法的基础上，鲸鱼优化算法（WOA）[20],、引力搜索算法（GSA）[21], 和蚁群优化（ACO）[22] 等算法模拟生态与物理现象，从猎物包围到引力吸引，以自适应方式遍历复杂景观。群智能方法引入了多个智能体之间的协调性，以平衡探索与利用；这一原则广泛应用于多参数材料与工程设计问题。与此同时，对于计算成本极高的黑箱函数，贝叶斯优化（BO）[23, 24]越来越受到关注。它通过构建概率代理模型（例如高斯过程），并迭代更新模型以借助采集函数指导采样，从而平衡由不确定性驱动的探索与对预测最优解的利用。对于评估成本极高的计算设计场景（例如量子计算、计算流体力学、有限元法），贝叶斯优化颇具吸引力：它以代理模型和采集规则取代直接探索，从而尽可能减少昂贵的调用次数。

尽管取得了成功，但随着维度增加、物理约束变得更加严格，这类方法在实际计算设计场景中仍面临困难。“维数灾难”会使采样变得稀疏且缺乏信息，尤其是在具有宽平台和近简并态的多模态景观中——这些情况在受物理学支配的设计空间中十分常见。许多经典方法也不具备记忆能力：它们不会保留先前评估的信息，从而导致迭代浪费和过早收敛。这些局限推动了学习增强策略的发展——强化学习[25], 代理模型引导搜索[26], 和分层规划器[27]——此类策略将过去评估的反馈纳入后续采样。对于计算设计，这些方法具有两项关键优势：

它们能够（i）识别空间中在物理上有希望或满足约束条件的区域；（ii）学习如何自适应地遍历景观，而非依赖启发式方法。综合来看，稳健的计算设计优化器需要满足三项要求：

（i）能够随维度扩展的自适应采样；（ii）逃离浅层且缺乏信息区域的机制；以及（iii）学习利用设计景观中具有潜力的解

总体而言，这些方法能够在复杂的科学与工程设计问题中实现可扩展、符合物理规律且评估高效的优化。

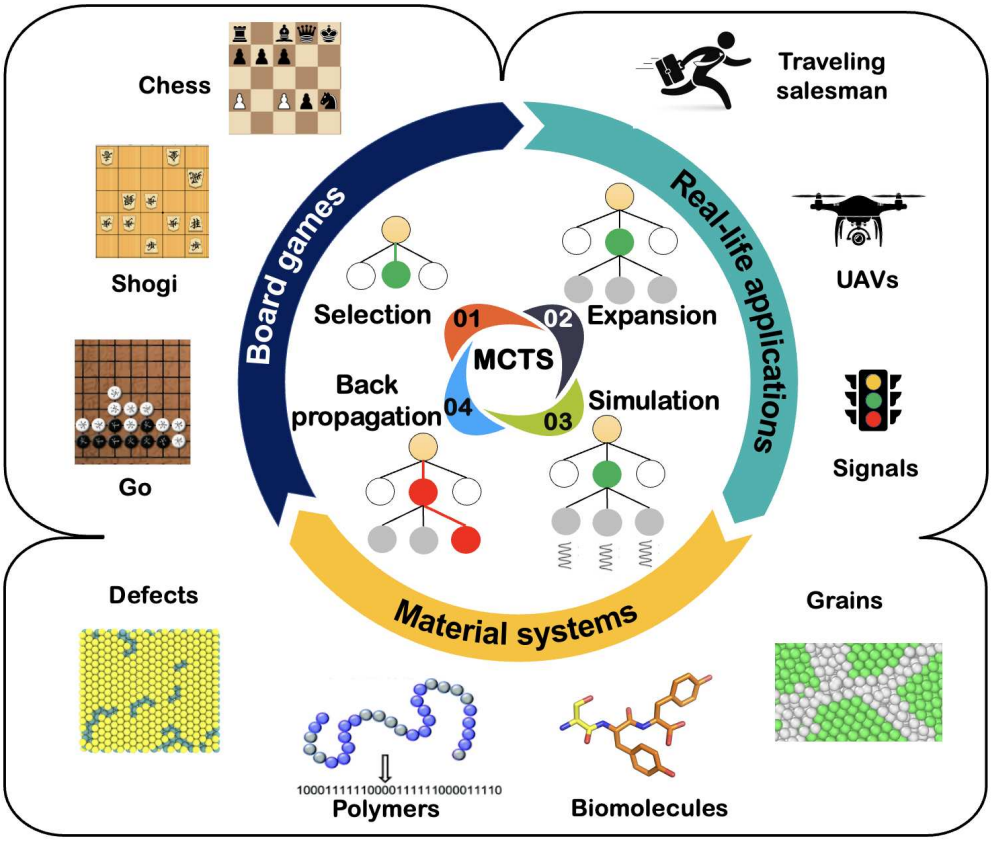


图1：蒙特卡洛树搜索（MCTS）应用广度示意图，涵盖从游戏中的战略决策到现实世界的优化和科学设计任务。现有的大多数应用都运行在离散动作空间中。

在旨在满足上述要求的学习增强策略中，蒙特卡洛树搜索（MCTS）为那些需要在大型搜索空间中进行推理且无法利用梯度的计算设计任务提供了一种颇具吸引力的替代方案。MCTS 最初为国际象棋、将棋和围棋等游戏中的策略决策而开发，[28, 29]，它无需依赖手工设计的启发式方法或目标函数的显式模型，便能系统地平衡探索与利用。MCTS 使用树策略（例如 UCT）逐步构建一棵非对称决策树，优先搜索设计空间中既有潜力又尚未充分探索的区域。推演会评估候选设计并得出终局得分，随后将该得分反向传播，以更新采样策略。与蛮力采样或纯随机启发式方法不同，MCTS 会将计算资源分配到信息量较高的设计空间区域，因此适用于计算设计问题，尤其是每次评估都可能需要耗费大量计算资源进行仿真（例如密度泛函理论、分子动力学、有限元法或多物理场求解器）的情况。除了棋盘游戏，MCTS 也已成功应用于设计与规划领域，例如

旅行商路径规划、无人机导航、自主感知，以及组合分子和聚合物设计等问题（图。1）[30, 31, 32, 33, 34]。在材料与化学发现领域，MCTS 已用于缺陷结构推断[35, 36], 晶界构建[37], 组合设计空间探索、合成规划[34], 药物发现[38], 自主机器人[39], 以及仿真代理模型的超参数设计[40]。然而，这些应用主要集中于离散动作空间。将 MCTS 直接扩展到连续高维计算设计问题——例如晶体结构设计（CSD）、原子间势模型（IAP）拟合、逆向设计或多参数热力学/力学优化——会遇到关键限制。经典 MCTS 缺乏：

（i）适用于平滑或含噪连续目标函数的自适应采样；（ii）设计维度增长时的可扩展性；以及（iii）随时间学习并利用设计景观结构的机制。

在离散领域表现良好的固定采样方案，在连续场景中会变得低效，因为此时动作空间通常无界，且参数之间具有物理意义的关系彼此耦合。此外，标准蒙特卡洛树搜索不会利用搜索过程中积累的统计相关性或搜索景观几何信息，而这对于在有用反馈稀缺且成本高昂的物理约束设计空间中进行搜索至关重要。因此，要将蒙特卡洛树搜索扩展到连续高维优化问题，必须进行大量改进。传统蒙特卡洛树搜索从根节点开始探索，并通过分支机制沿方向扩展，但这种结构往往难以适应高维场景的规模，因此限制了其作为全局优化工具的效率和泛化性。

我们的工作提出了一个通用框架，可将由策略驱动的基于决策树的强化学习算法转化为高效且可扩展的全局优化器。为应对这些挑战，我们提出了几项关键创新。首先，我们引入一种高效的采样方案，并结合基于方向的学习机制，使算法能够更好地在连续高维空间中传播搜索轨迹，从而提升搜索覆盖度并促进其收敛至最优解。其次，尽管蒙特卡洛树搜索通过树策略[41],天然地平衡探索与利用，但在利用局部潜力区域方面缺乏精细控制，尤其是在复杂的多峰景观中。我们通过纳入局部细化策略和自适应奖励塑形，同时保持树一致性，增强了这一能力。此外，我们还针对基于树的方法容易陷入局部区域的问题进行改进：深树可能会对特定子域进行过度探索，从而延缓全局收敛。为缓解这一问题，我们提出决策树的基于种群的扩展，引入全局与局部树种群的概念，使其能够同时探索搜索空间中的不同区域，同时保留高价值区域中的搜索深度和专注度。我们在一系列具有挑战性的高维基准函数上验证了该框架，并展示了其在现实世界科学与工程问题中的适用性。这些问题包括材料科学中的晶体结构设计（CSD）、原子间势模型（IAP）/力场开发，以及压力容器优化和焊接接头设计优化等连续尺度设计任务。在所有测试场景中，我们的方法始终优于当前最先进的元启发式算法和黑箱优化算法，展现出更强的可扩展性、鲁棒性和收敛效率。总体而言，本研究凸显了学习增强框架作为通用优化器的潜力，可用于应对复杂的高维全局优化问题。

2 方法

2.1 蒙特卡洛树搜索

传统的蒙特卡洛树搜索（MCTS）算法通过四个基本阶段运行：选择、扩展、仿真和反向传播，这些阶段循环执行，以计算高效且自适应的方式探索高维、通常为离散的设计空间（图2.a）。这种迭代结构使 MCTS 能够遍历庞大的组合空间，而无需依赖穷举枚举。在选择阶段，算法从根节点开始遍历当前树，直至到达叶节点，方法是

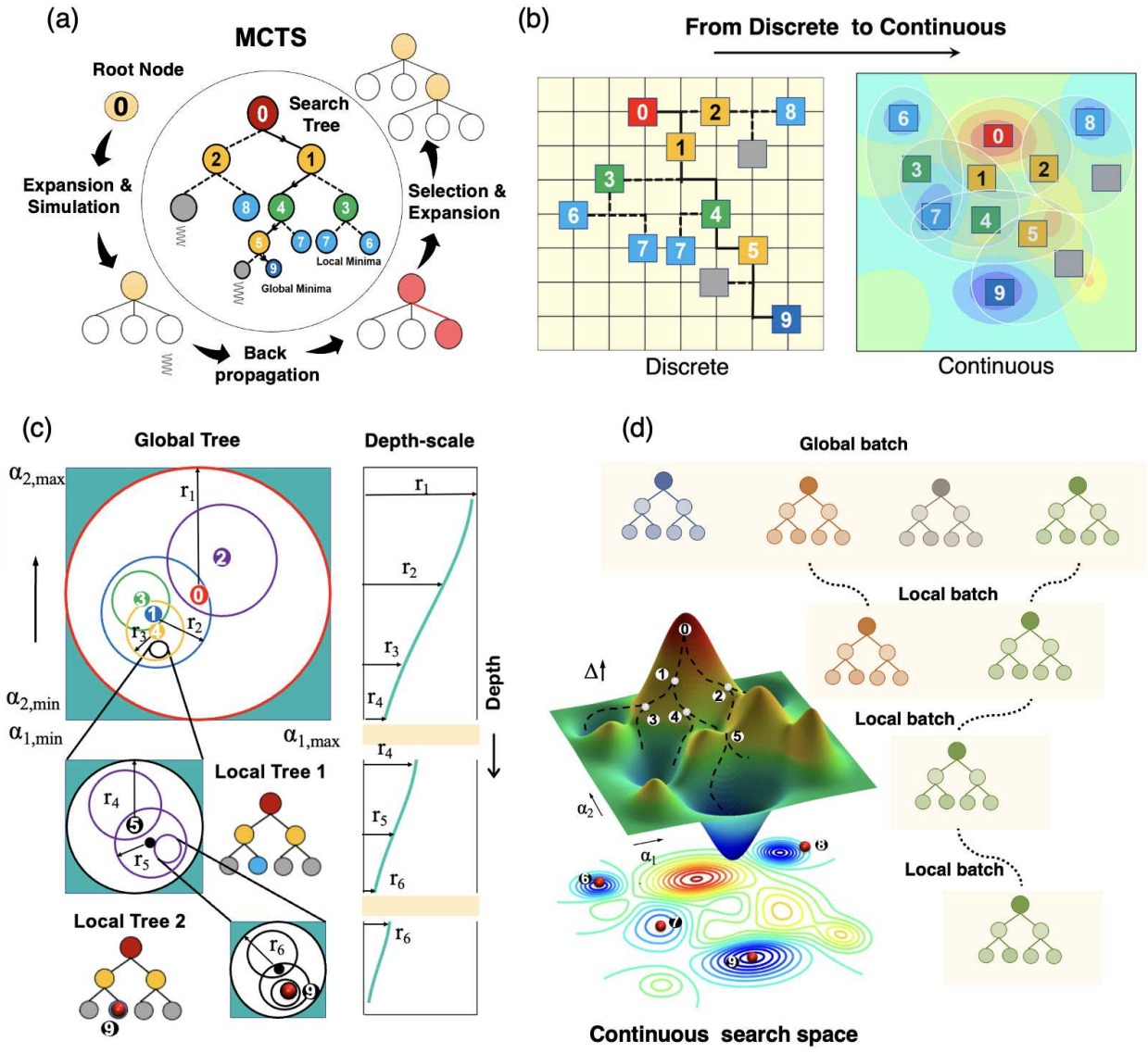


图2：使用基于决策树的蒙特卡洛树搜索进行连续搜索空间的计算设计。(a) 蒙特卡洛树搜索的不同阶段，搜索树从根节点开始逐步生长。(b) 从离散动作空间转变为连续动作空间，此时节点周围有无限多个可能方向。(c) 树中的缩放窗口方案使更深层分支能够聚焦于有希望区域附近的利用。(d) 以二维目标函数示意的典型连续搜索空间。树通常从景观中目标函数值最高的区域开始，并通过局部极小值向外分支。在连续搜索空间中生成一组（批量）树。第一阶段进行全局探索；在后续阶段，从有希望的解生成的树数量更少，以进行局部优化。随着搜索逐渐收敛至全局最优解，树的数量也逐步减少。

选择能够最大化基于上置信界（UCB）的目标策略函数的子节点。该准则平衡利用与探索：利用是选择平均奖励较高的节点，探索则是访问探索较少的节点以降低不确定性。给定节点 i 的 UCB 定义如下 [41]:

$$\mathrm{UCB}(\mathrm{node}_i) = \max(z_1, z_2, z_3, \ldots, z_k) + C\sqrt{\frac{\ln(v_p)}{v_i}} \tag{3}$$

此处， z_i 表示在节点 i处先前仿真所获得的奖励； v_i 和 v_p 分别表示当前节点和其父节点的访问次数； C 是一个可调常数，用于控制探索—利用权衡。在扩展阶段，通过扰动所选父节点所表示的配置来创建一个新的子节点。这些扰动代表设计空间中的离散或量化操作。模拟阶段通过从新配置出发进行一次或多次推演（或对新节点附近参数进行性能评估的集成），评估新添加的节点。这些推演可以使用快速经验模型或更高保真度的计算方法执行，目的是估计与候选解相关的性能指标。最后，在反向传播阶段，将仿真获得的奖励沿树向上传播，逐步更新所有祖先节点的统计信息（例如访问次数和平均奖励）。

2.2 高维连续空间中的节点自适应采样

在每个节点执行的 rollout 用于从父节点采样子节点，是在搜索空间中构建和遍历树的重要组成部分。在传统的蒙特卡洛树搜索中，这些新样本通过预定义的离散动作生成。然而，在连续空间设置中（图。2b），需要进行两项重大调整。首先，动作不再是离散的，而是连续的，因此需要采用变异协议。其次，采样参数应在节点周围充分分散，以便为选择下一个节点提供有意义的方向信息。随着维度增加，一个关键挑战随之出现：由于搜索空间的体积呈指数增长，均匀采样这些 rollout 点变得愈发困难，导致样本趋于局部集中。为解决这一问题，人们提出了各种高维采样方案。其中最常用的包括拉丁超立方体采样和超球体采样。我们使用拉丁超立方体采样在树中生成初始根节点集，以确保起始点具有多样性。为了围绕现有节点进行采样，则采用超球体采样。具体而言，在以当前点 d为中心、半径为 $r_{\max}$ 的$\mathbf{x}_r$维超球面内采样新的候选点，方法如下：

$$\mathbf{x}'_r = \mathbf{x}_r + r \cdot \frac{\mathbf{u}}{\|\mathbf{u}\|}, \quad \text{where} \quad r = r_{\max} \cdot \xi^{1/d}, \quad \xi \sim \mathcal{U}(0,1) \tag{4}$$

其中， $\mathbf{u} \sim \mathcal{N}(0, I)$ 是随机抽取的方向向量，缩放因子 $r = r_{\max} \cdot \xi^{1/d}$ 确保在超球体体积内进行均匀采样。随机变量 ξ 控制样本的径向位置：在 $(0, 1)$ 中均匀抽取 ξ ，并通过 $\xi^{1/d}$ 对其进行映射，即可得到正确的半径分布，从而使各点均匀分布于超球体的体积内（而不是集中在中心附近）。超球体采样的主要局限之一是，尽管它能够在节点中心周围实现各向同性分布，但要覆盖一个节点在不同维度上的体积，所需样本数量会随着维度的增加而迅速增长，导致评估次数和计算成本上升。为克服这一局限，我们采用一种基于方向的采样方案，从节点及其祖先节点中学习有潜力的方向。这种模型引导方法能够预测更有可能产生改进解的方向，从而显著提高高维空间中的采样效率。

2.3 逻辑斯蒂替代模型：方向采样器

在基于树的优化算法中进行典型采样时，给定节点上的每次推演都是独立于先前推演的结果生成的。这种无记忆特性在某些情况下可以带来良好的收敛效果，但也存在一个显著的局限：如果某次推演发现了一个有前景的方向，除非算法明确生成一个新的父节点，否则它不太可能再次沿同一方向采样。然而，

沿着成功方向重复采样，往往能够带来进一步改进并加快收敛。为此，可以让后续采样偏向此前取得更好结果的方向。为了克服连续高维空间中无记忆采样的局限，我们实现了一种逻辑回归代理采样器，根据节点的局部搜索历史为后续推演设置偏置。对于给定的节点参数 x，我们收集试验点及其对应的目标函数结果历史记录，$\mathcal{H}_{\text{node}} = \{(x^{(i)}, E^{(i)})\}$。为每次试验分配一个二元分类标签 $y^{(i)}$：当 $E^{(i)} < E(x)$ 时，$y^{(i)} = 1$（成功），否则为 0。需要考虑的主要方面包括：(i) 新点的采样方向，以及 (ii) 采样点与其前一个点之间的距离（步长）。为了将方向搜索与步长搜索解耦，相对位移 $\Delta x^{(i)} = x^{(i)} - x$ 被分解为两个不同的特征集：

$$u^{(i)} = \text{sign}(\Delta x^{(i)}) \in \{-1, 0, 1\}^d, \quad \text{and} \quad \phi_k\left(r^{(i)}\right) = \exp\left(-\left(r^{(i)} - c_k\right)^2\right). \tag{5}$$

这里，$u^{(i)}$ 表示方向分量，而 $\phi(r)$表示一个特征向量，其中标量欧几里得距离 $r^{(i)} = \|\Delta x^{(i)}\|$ 被投影到以 c_k 为中心、覆盖搜索半径 $R_{\max}$的高斯径向基函数（RBF）基组上。

该算法采用两个耦合的逻辑回归模型来指导采样。通过将成功概率建模为以下形式来进行方向优化：

$$P(y = 1 \mid u) = \sigma\left(w_{\text{dir}}^T u + b\right). \tag{6}$$

随后，利用训练好的模型，通过随机爬山过程主动优化搜索方向 u。算法从学习得到的系数符号出发，迭代地随机翻转 u的维度，并接受能够提高预测成功概率的变更。方向确定后，步长采样由第二个模型决定：

$$P(y = 1 \mid r) = \sigma\left(w_{\text{dist}}^T \phi(r) + b\right). \tag{7}$$

为了严格从该学习分布中进行采样，我们采用逆变换采样。累积分布函数（CDF）通过对未归一化的概率曲线进行数值积分构造：

$$CDF(r) = \int_0^r P(y = 1 \mid \rho)\, d\rho. \tag{8}$$

从 $[0, CDF(R_{\max})]$, 中均匀抽取目标值 τ，并通过求解 $CDF(r) = \tau$来恢复相应的步长 r。为初始化这些模型，任意节点的前 k次评估遵循固定的启发式计划，分别对父节点动量、边界的几何中心和对角极值点进行采样。随后，模型每经过 p 次迭代重新训练一次，以适应局部景观拓扑。

2.4 用于平衡探索与利用的窗口缩放

连续搜索空间中决策树的关键方面之一，是随着树深度增加而管理步长。与离散动作树不同，离散动作树中的固定动作幅度使得任意深度上的每次移动都具有相同的间距；而在连续空间中，这种行为可能会带来问题。具体而言，较深的节点应理想地围绕有希望的区域进行局部细化搜索，而较浅的节点则应允许更广泛的探索。换言之，随着搜索树不断加深，算法应逐步减小探索半径，以便更精确地聚焦于最优解附近。为此，我们实现了一种基于深度的缩放方案，根据节点深度（图 $r_{\max}$）自适应地缩小采样窗口大小（记为2c）。对于归一化参数 s $\mathbf{x} \in [0, 1]^d$，应用于采样半径的缩放因子定义如下：

$$\mathbf{s}(\text{depth}) = \mathbf{b} \cdot \exp(-\mathbf{a} \cdot \text{depth}^2) \tag{9}$$

其中：

- $b \in (0, 0.5]$ 是初始缩放幅度，通常设为 0.5，

- $a > 0$ 控制随深度的衰减速率，
- 深度是树中节点当前所处的深度。

这种缩放方式确保处于较高深度的节点采样更小的区域，从而有效地实现从全局搜索向局部搜索的过渡。不过，需要注意的是，适当的缩放行为可能取决于具体任务。为了使该方法更加稳健，我们通常会并行使用多棵树，并为每棵树初始化不同的缩放参数 a，其通常从范围 $[0.05, 0.1]$ 中选取。 b 表示搜索可以访问的窗口最大半径。这些树被分为全局批次和局部批次，并通过切换协议确定树何时从广泛探索转向精细利用。该切换机制和批处理策略的详细信息将在下一节中讨论。

2.5 树的分层批处理

在连续高维空间中使用蒙特卡洛树搜索时，一个关键挑战在于，搜索从单个点开始，并从根节点向外分支。虽然单棵树能够有效探索其根节点附近的局部区域，并且通常会收敛到一个邻近解，但这种策略在复杂的非凸景观中表现不佳。搜索往往会变得过度局部化，因而可能陷入次优区域。为了逃离这些陷阱，树需要生长出大量分支，才能到达遥远的最优盆地。这会导致极高的计算成本和缓慢的收敛。为了解决这种局部性限制，我们采用了一种受基于种群的方法（如进化算法和元启发式算法）启发的策略。我们引入了一批并行树，称为 全局树批次 （图 2d）。该批次中的每棵树都使用拉丁超立方体采样（LHS） [42], 在搜索空间中的不同点进行初始化，并分配一个在指定范围内随机采样的缩放参数 a 。这种集成能够实现多样化的全局探索。这些全局树的一个关键特征是，探索常数 C 会根据树是否正朝着改进解取得进展，在固定基准值和一个极大值之间交替变化（参见补充图1）。此外，全局树受到最大深度的约束，但其宽度（即分支因子）不受限制。不过，它们的增长是有条件的：只有当一棵树持续产生更优的目标值时，才允许其扩展。全局搜索阶段结束后，我们根据树所达到的最佳目标评分，从中提取有限数量的高性能候选者。这些候选者将作为下一阶段——局部批次的种子。每棵局部树都从其对应的全局祖先继承其缩放因子 $a_{\text{ref},\,i}$ 以及最终窗口大小 $b_{\text{ref},\,i}$（来自公式 9，其中 $b_{\text{ref},\,i} = s_{\text{final},\,i}$）。不同于全局阶段，当前局部批次中的第 i 棵树的局部窗口大小，$b_{\text{ref},\,i}$，会在后续更新的局部批次运行阶段中，根据前一阶段目标函数所观察到的改进进行动态更新：

$$b_{\text{new},i} = b_{\text{prev},i} \left(\frac{f_{\text{prev},i} - f_{\text{curr},i} + \epsilon}{f_{\text{prev},i} - f_{\text{target}} + \epsilon} \right)^{\alpha} \quad \text{if } f_{\text{curr},i} < f_{\text{prev},i} \tag{10}$$

$$b_{\text{new},i} = b_{\text{prev},i} \cdot \delta \quad \text{otherwise} \tag{11}$$

其中：

- $f_{\text{curr}\,i}$：树 i 当前的最佳目标值，
- $f_{\text{prev}\,i}$：同一棵树此前的最佳目标值，
- f_{target}：目标目标值，
- α：控制对改进的敏感度的指数，
- ϵ：用于防止除以零的小常数，
- $\delta \in (0, 1)$：未发生改进时应用的衰减因子。

这种自适应窗口确保随着局部批次的推进，每棵局部树的可访问窗口逐渐缩小（图2d），从而实现精细化利用。与全局阶段不同，局部树的深度不受限制，只要它们持续改进目标函数，就可以不断加深。

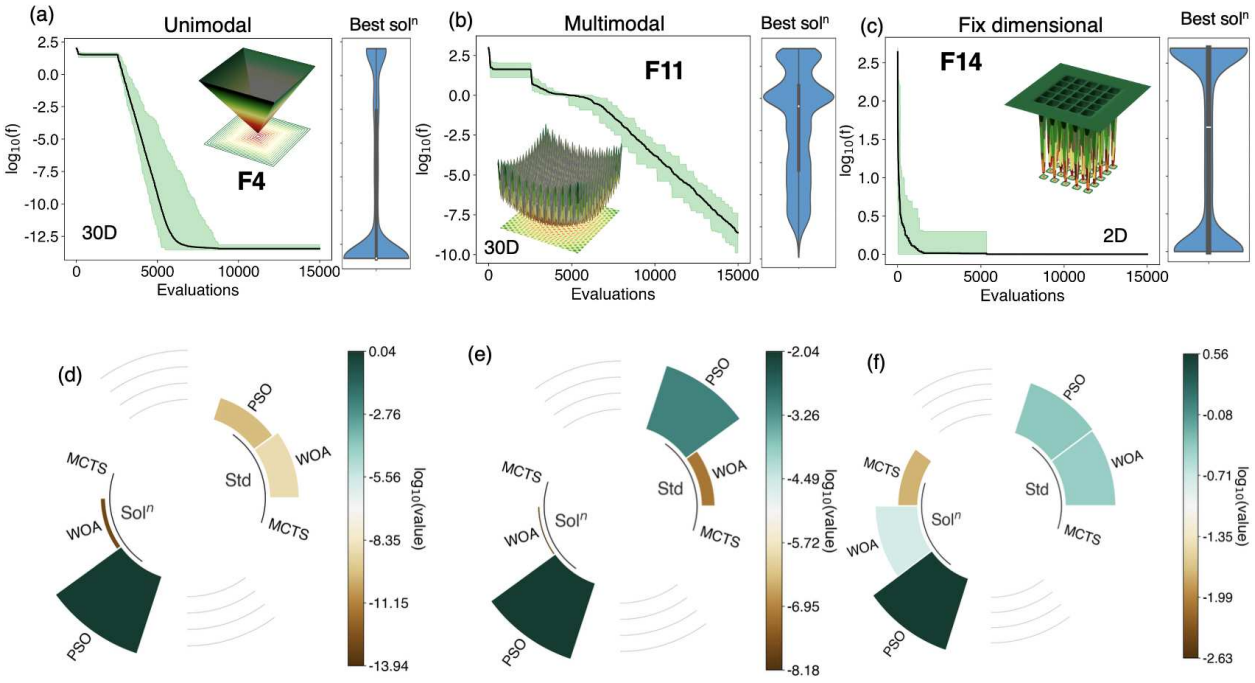


图3：我们基于蒙特卡洛树搜索的优化算法在测试函数上的性能基准测试。(a–c) 30 次独立运行的收敛曲线（目标函数 f 的对数随评估次数的变化），以及搜索过程中获得最佳解时的采样分布。三个基准函数分别为：单峰（F4）、多峰（F11）和固定维度（F14）。(d–f) 对于 (a–c) 中所示的函数，对比 c-MCTS、WOA 和 PSO 在 30 次独立试验中获得的最佳解及其标准差。

为强调利用，我们将探索常数设为可忽略的值，从而有效地将每棵局部树转变为无梯度的局部优化器，专注于优化有希望的区域（参见补充图1d–k）。局部批次优化阶段会重复多轮。每轮结束后，有条件地剪除未能取得进展的树，仅保留持续产生更优解的树。在每个阶段，对于给定的局部树，使用上一阶段的最佳候选作为新的根节点，以确保连续性并保留高质量解。重要的是，剪枝后，批次中始终至少保留一棵表现最佳的树，并将其继承至下一轮，从而在整个搜索过程中维持持续的利用路径。

3 结果

3.1 高维测试函数上的性能基准测试

基准（测试）函数[43, 44, 45] 是人工构造的数学景观，广泛用于评估优化算法。它们涵盖不同的景观类型，例如单峰、多峰和固定维度多峰。这些函数旨在对优化算法进行压力测试，考察其收敛速度、精度、鲁棒性、可扩展性，以及易受局部极小值和噪声影响的程度。单峰函数（如球函数、Rosenbrock函数、阶梯函数、Schwefel 1.2函数）只有一个全局最优解，可用于测试算法收敛的速度和可靠性。多峰函数（如Rastrigin函数、Ackley函数、Griewank函数）包含许多间隔规则或不规则的局部极小值，对探索与利用之间的权衡提出挑战，且难度会随维度增加而上升。固定维度基准函数（例如Shekel狐狸洞函数、

表1：对单峰（UM）（F1– F7）、多峰（F8–F13）和固定维度（F14–F23）类别中的基准函数所得优化结果进行比较。每个函数的最低平均值（ave）以粗体显示。

F	MCTS				WOA		PSO		随机	
	逻辑斯蒂		超球面							
	ave	std	ave	std	ave	std	ave	std	ave	std
单峰（UM）										
F1	**0.00000E+00**	0.00000E+00	1.71678E–22	7.07787E–22	1.41E–30	4.91E–30	0.000136	0.000202	4.26E+04	3.08E+03
F2	3.35265E–05	2.04925E–05	1.73077E+00	8.99247E+00	1.06E–21	2.39E–21	0.042144	0.045421	1.28E+06	2.37E+06
F3	1.69045E–08	1.44483E–08	1.91803E+00	1.36430E+00	5.39E–07	2.93E–06	70.12562	22.11924	4.91E+04	5.85E+03
F4	3.64745E–14	1.14179E–14	3.03847E+00	2.48030E+00	0.072581	0.39747	1.086481	0.317039	7.17E+01	2.60E+00
F5	2.73319E+01	1.06457E–01	1.19554E+02	2.96610E+02	27.86558	0.763626	96.71832	60.11559	1.03E+08	1.59E+07
F6	5.89632E–07	1.00714E–06	3.68666E–01	1.01298E+00	3.116266	0.532429	0.000102	8.28E–05	4.16E+04	3.70E+03
F7	5.43754E–04	4.35580E–04	9.51802E–02	3.43504E–02	0.001425	0.001149	0.122854	0.044957	4.60E+01	7.16E+00
多峰（MM）										
F8	**–7.98161E+03**	8.17351E+02	–7.62086E+03	5.08047E+02	–5080.76	695.7968	–4841.29	1152.814	–4.16E+03	2.46E+02
F9	1.42618E+00	7.68023E+00	1.36873E+02	4.22360E+01	**0**	0	46.70423	11.62938	3.42E+02	1.27E+01
F10	1.42109E–15	2.69007E–15	1.27711E+00	6.91224E–01	7.4043	9.897572	0.276015	0.50901	1.98E+01	1.64E–01
F11	6.63646E–09	9.64278E–09	8.04556E–03	8.61277E–03	0.000289	0.001586	0.009215	0.007724	3.84E+02	3.12E+01
F12	1.04244E–05	9.37367E–06	1.20933E+00	1.62317E+00	0.339676	0.214864	0.006917	0.026301	1.67E+08	4.17E+07
F13	6.34632E–03	8.94680E–03	4.09345E–03	5.30989E–03	1.889015	0.266088	0.006675	0.008907	4.06E+08	8.20E+07
固定维度（FD）/ 复合										
F14	9.98004E-01	6.00428E-11	1.031138E+00	1.784333E-01	2.111973	2.498594	3.627168	2.560828	1.0972	0.2789
F15	4.17900E–04	2.80031E–04	1.00653E–03	3.03070E–04	0.000572	0.000324	0.000577	0.000222	0.00242	0.00100
F16	**–1.03163E+00**	2.220446E-16	**–1.03163E+00**	2.22045E-16	–1.03163	4.2E–07	–1.03163	6.25E–16	–1.02502	0.00598
F17	3.97887E–01	0.000000E+00	3.97887E–01	0.000000E+00	0.397914	2.7E–05	0.397887	0	0.40191	0.00444
F18	**3.00000E+00**	1.52550E-15	**3.00000E+00**	1.20533E-15	**3**	4.22E–15	**3**	1.33E–15	3.09997	0.08394
F19	**–3.86278E+00**	1.42302E–13	**–3.86278E+00**	1.33227E–15	–3.85616	0.002706	–3.86278	2.58E–15	–3.85545	0.00531
F20	**–3.32237E+00**	9.93810E–12	**–3.32237E+00**	9.24445E–16	–2.98105	0.376653	–3.26634	0.060516	–3.06146	0.08211
F21	**–1.01532E+01**	4.12262E–08	–8.96974E+00	2.14523E+00	–7.04918	3.629551	–6.8651	3.019644	–3.54978	0.98577
F22	**–1.04029E+01**	4.66669E–07	**–1.04029E+01**	4.72028E–11	–8.18178	3.829202	–8.45653	3.087094	–3.53778	0.99651
F23	**–1.05364E+01**	1.14046E–08	**–1.05364E+01**	2.76303E–10	–9.34238	2.414737	–9.95291	1.782786	–3.17910	0.83388

六峰驼背函数、Goldstein–Price函数、Hartmann三维/六维函数、Shekel 5/7/10）在低维空间（2–6维）中运行，但具有密集且“险恶”的景观，其欺骗性特征可用于测试细粒度搜索行为。基准函数提供了标准化的评估框架，可用于：(i) 在相同条件下比较不同方法；(ii) 揭示算法在不同景观类型上的优势与局限；(iii) 确保可复现性和泛化性；(iv) 描绘算法行为特征（例如收敛曲线、独立运行间的误差方差）。我们基于总计23个基准函数（表1）评估了所提出的基于蒙特卡洛树搜索决策树的算法性能，涵盖单峰（UM）、多峰（MM）和固定维度（FD）类型。F_1–F_7 属于单峰、可扩展类别（例如球函数、Rosenbrock函数），在30维搜索空间中具有单个全局最优解，非常适合评估收敛速度和利用能力。F_8–F_{13} 是高维（30维）多峰函数，具有许多局部极小值（例如Rastrigin函数、Ackley函数、Griewank函数），对全局探索能力和鲁棒性提出挑战。F_{14}–F_{23}是固定维度多峰函数（通常为2–6维）。每个函数的数学公式见补充表1。图3 展示了所提算法与标准元启发式算法——鲸鱼优化算法（WOA）和粒子群优化（PSO）——在三个代表性函数上的性能分析；分析基于30次独立试验：F_4 （单峰）、F_{11} （多峰）和F_{14} （固定维度）。对于F_4 和F_{11}，，我们的算法达到 10^{-14} 和 10^{-9} 量级的数值精度；对于F_{14}，，则始终达到

精确全局最优解（~ 0.998），且在接近收敛时的波动均可忽略不计。此外，考察获得最佳解的那次独立运行的采样分布（图3a-c）可以清楚地看出，对于单峰函数，搜索初期会将部分采样用于缩小搜索范围，而大部分采样迭代则用于实现高数值精度——这反映为底部区域中高度密集的分布。

相比之下，对于多峰函数，尽管初始采样与单峰情况相当，但探索过程始终保持更加均匀的分布，仅在接近收敛时才减少。然而，对于固定维度函数，其响应具有二元性质。算法初始阶段会花费若干迭代探索可能的解；一旦在空间中找到可能有希望的区域，便会转向这些有希望的区域，如函数形态所示，并花费迭代进行微调。如图3d–f所示，我们的算法不仅获得了更优的解，与WOA和PSO相比还表现出更低的方差。所有函数的其他比较结果见表1。对于$F_{1,}$，Logistic MCTS达到了绝对零值（0.0），超越了数值精度限制，并且优于超球面基线（10^{-22}）。对于$F_{2,}$，WOA在数值精度方面表现更优。对于$F_{3,}$，MCTS优于WOA（1.69×10^{-8} 对 5.39×10^{-7}），展现出更强的微调能力。对于F_5和$F_{7,}$，MCTS取得了最佳性能。在F_8–$F_{23,}$中，MCTS在几乎所有情况下表现最佳。Schwefel函数（F_8）上的结果尤为关键：稳健的MCTS搜索达到了 -7981的平均值，显著低于基线超球面方法及其他元启发式算法所得到的 -7620，凸显了该算法逃离深层欺骗性盆地的能力。例外是F_9（Rastrigin函数），其中WOA取得了完美的0，而MCTS达到1.42；这可能是因为Rastrigin函数规则的网格状结构更有利于WOA特定的搜索机制。值得注意的是，对于固定维度函数（F_{14}–F_{23}），MCTS在所有试验中都以数值精度达到精确解。这种性能差异还为我们的两种采样核提供了关键的定性比较：各向同性超球面采样与方向性Logistic替代模型。各向同性采样可作为噪声景观中的稳健后备方案，而方向性Logistic替代模型即使在缺少解析梯度的情况下，也能有效捕捉局部拓扑。如F_1上的完美收敛和$F_{8,}$上更优的盆地跳跃所表明的那样，Logistic模型在采用稳健的重新训练后，消除了探索成本与方向精度之间的权衡，在23个基准测试中的21个上达到或优于各向同性方法。这些基准测试趋势中的性能也反映了第2节中引入的算法组件。每个节点使用的方向性Logistic替代模型（第2.3节）通过将采样偏向历史上曾改善目标函数的方向，减少了无效rollout的数量。这一点可以从全局最优解附近的样本集中分布中看出（补充图1.d-k）。依赖深度的窗口缩放（第2.4节）解释了该算法为何能够在早期阶段保持广泛的全局探索，随后切换至高精度利用，这一点在F_4和F_{14}（图3a-c）中尤为明显。最后，全局–局部树群（第2.5节）在很大程度上解释了独立运行间的低方差：不同的树探索不同的盆地，而剪枝/切换协议则优先保留发现高价值区域的树。总体而言，这些组件帮助该框架在平滑单峰景观上保持竞争力，并在崎岖的多峰和固定维度基准测试中展现出更明显的优势。

虽然基准测试函数旨在模拟现实世界优化问题，但往往无法充分呈现实用场景中遇到的目标景观的复杂性。在纳米尺度材料建模等领域——例如晶体结构预测或原子力场模型的开发——目标函数通常是非凸、非光滑的能量景观，会随维度显著变化，并且还受到凝聚态物质底层物理学的约束。这些现实世界问题还涉及对称性约束、化学有效性和热力学可行性等额外复杂因素，因此优化任务远比理想化基准函数所反映的情况更具挑战性。在接下来的章节中，我们将展示如何将我们的优化算法应用于这类受约束的物理问题。我们采用标准化指标，评估算法定位全局最优解的准确性，以及遵循问题领域内在物理约束的能力。

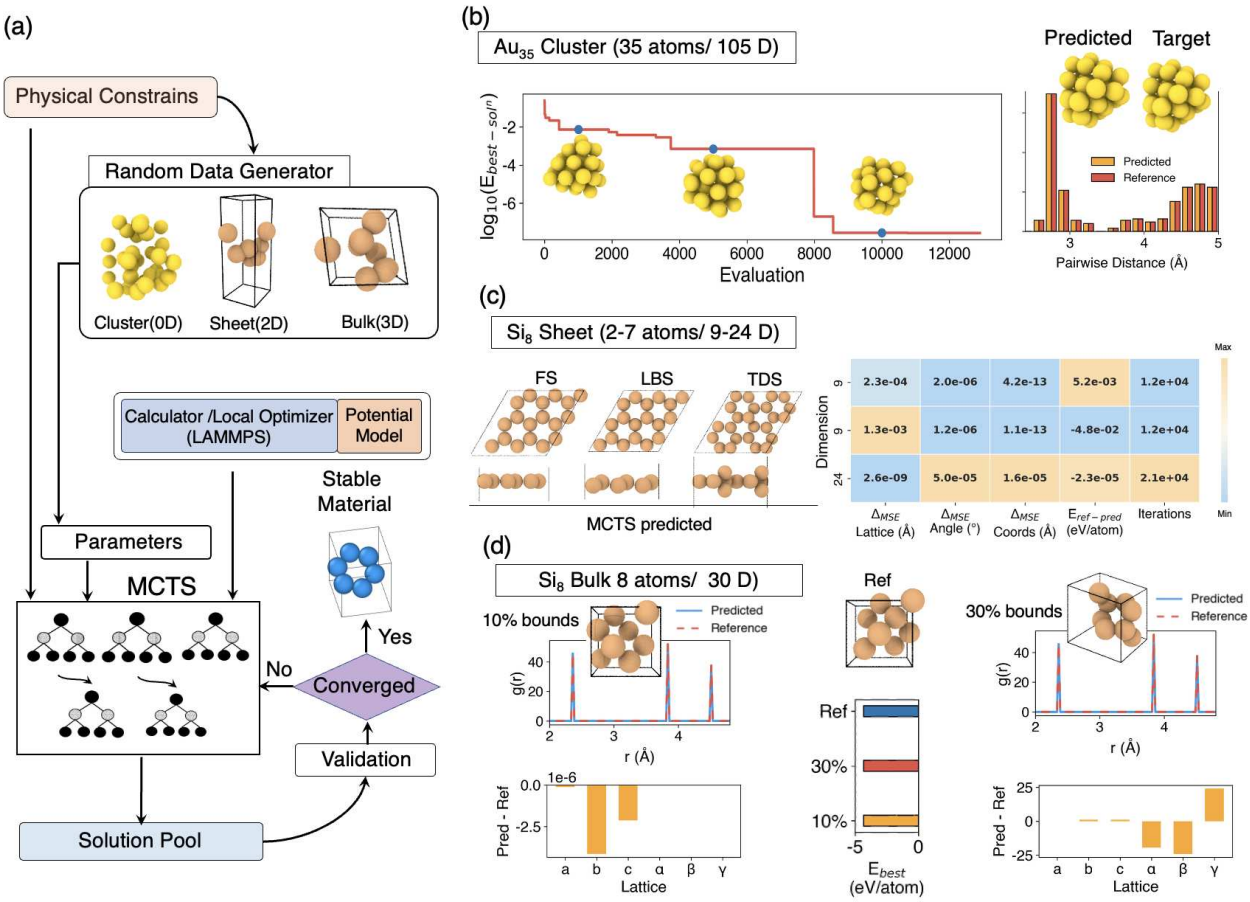


图4：我们的MCTS优化算法在多尺度晶体结构优化中的应用。(a) 在晶体结构预测框架中使用该算法的主要工作流程，包括物理约束处理模块、用于生成物理有效构型并在结构与参数表示之间进行转换的生成器、优化算法，以及性质评估器或计算器。(b) 应用于预测由35个原子组成的金（Au）纳米团簇（零维材料）的全局最小值（105维空间），以能量稳定性为依据进行探索，并通过原子间两两距离直方图，将最终构型与参考构型进行比较。(c) 应用于片状二维材料：以结构为导向，搜索硅（硅烯）的一种亚稳多晶型，目标是找到具有特定结构属性的构型。图中展示了MCTS预测的晶胞，以及不同多晶型的预测准确率。(d) 评估采用基于能量目标的搜索，将周期性块体（三维材料）硅（立方金刚石）的基态结构从非晶高能构型优化得到的性能。图中展示了不同边界范围（搜索空间范围为10%和30%）下最终获得的构型、参考构型及其基于径向分布函数（RDF）的结构比较。

3.2 多尺度晶体结构设计

材料的物理性质本质上与其结构基元中的原子排列，以及局域有序与长程相互作用之间的相互作用密切相关。在原子尺度上，这些相互作用表现为复杂的能量景观，其中存在无数局部极小值，代表材料的稳定相和亚稳相。许多此类状态都具有独特的化学、热学、光学、力学和电子性质，并展现出良好的应用潜力。为了获得具有特定组成且属于特定相的材料，必须考虑结构多样性。结构多样性塑造能量景观，影响稳定性和对称性，从而引导新材料的搜索。结构多样性通过创造不同的能量盆地，使稳定和亚稳构型得以存在[46, 47]。从算法角度来看，探索能量景观的算法会将其视为一组需要调整和探索的定量参数[48, 49]。这些探索必须在适当的化学约束条件指导下进行。然而，典型材料的景观会随着原子数量的增加而呈指数级增长。例如，一个包含 N 个原子的系统，仅笛卡尔坐标就至少有 $3N$ 个维度，而组成和晶格矢量还可能带来额外参数。随着原子数量或自由度增加，维度升高会导致搜索空间呈指数级增长，从而难以识别低能构型。一个主要瓶颈是计算材料稳定性或物理性质所需的计算开销，这些评估要借助计算器或评估模型。精度更高的模型能够提供更准确的结果，但计算成本也更高。因此，探索算法必须具备高评估效率，并能够以尽可能少的迭代次数达到目标。优化这一物理系统的另一个挑战是简并性。例如，要遍历搜索空间，必须对晶体的参数、坐标或晶格参数做出一些改变[48, 50, 51]。然而，由于对称性约束，微小改变往往会产生属于同一能量盆地的构型。这会导致局部能量盆地被过度采样，浪费优化器大量宝贵的迭代次数。因此，变异（即引入的改变）必须足够大，使搜索具有探索性，但又不能过大，以免变成随机搜索。我们通过窗口缩放方案和第2.3节中介绍的方向性Logistic代理模型来实现探索与受控变异之间的平衡。对于此应用，我们采用公式4所示的超球体采样，将 $r = 1$视为在超球面表面进行采样的对象，然后利用学习到的方向权重，使提议偏向有希望的区域。根据具体应用，可将晶格参数或坐标分别作为可随机选择的操作进行扰动，从而在搜索树中采样新的节点。

图 4a 展示了利用我们的搜索算法在纳米尺度上优化材料体系的基本工作流程。该工作流程由四个不同的组成部分构成。其中一个至关重要的部分是物理约束模块，它负责处理体系所需的组成、晶格参数、原子间距约束和物理对称性。该模块还定义搜索空间，包括晶格参数范围、原子数和组成参数，从而确定边界。第二个模块是随机数据生成器，它在给定边界内生成满足物理约束的随机原子构型，并将构型转换为可变参数。第三个模块是蒙特卡洛树搜索（MCTS），根据前文讨论的方法对新候选构型进行优化或采样。第四个模块是计算器（目标计算）模块，也称为评估器模块。通常，原子尺度优化[52] 采用原子间势模型（IAPs）[53, 54],或使用密度泛函理论（DFT）进行量子计算[55] 。该模块主要用于计算材料的稳定性，评估其能量或作为优化目标的性质。这些模块还可充当局部优化器，在采样过程中十分有用，因为采样时通常希望获得稳定的候选构型。局部优化器有助于使畸变的样本趋向局部能量盆地，从而获得相对稳定的候选构型。搜索结束后，我们会分析所有候选构型及其稳定性和结构特征，以确定工作流程是否收敛。所研究问题中使用的相应搜索空间约束见补充表2。

我们使用该算法展示了结构优化领域中的三个不同问题。首先，我们研究金（Au）纳米团簇全局最小值的搜索。纳米团簇作为零维材料系统，在多个领域都有应用[56]。金纳米团簇因其广泛的应用潜力而备受关注[57]。从计算角度来看，这类团簇的全局极小值

已针对不同尺寸进行了广泛探索[58], 因此，该系统是结构优化问题的理想基准测试。在本研究中，我们采用 Sutton–Chen[59] 原子间势，找回一个 35 原子金纳米团簇已知的全局最小值。对于纳米团簇系统，维度仅来自原子坐标，因此形成一个规模相当大的 105 维优化问题。如图 4b 所示，搜索在不到 12,000 次评估后收敛——考虑到其高维度，这是一个不错的结果（>100D）。作为比较，Doye 和 Wales [58] 使用盆地跳跃（蒙特卡洛最小化）方案，对最多含 $N = 80$ 个原子的 Sutton–Chen 金属团簇进行了全局优化。对于每种团簇尺寸，他们进行了五次独立运行，每次包含 5000 个蒙特卡洛步，即每个系统进行了 25,000 次局部最小化，每一步都在变换后的景观上进行完整的局部几何优化。图中还展示了搜索过程中原子构型的演变。我们使用 LAMMPS[52] 分子动力学软件包，在每个节点对采样构型进行局部优化，引导其趋向最近的局部能量盆地。原子间势采用 Sutton–Chen 势，并使用 LAMMPS 计算器。最终得到的构型在原子间成对距离方面与已知的全局最小值完全一致，证实了我们的搜索能够准确找回基态结构。

硅在现代电子学中发挥着至关重要的作用，因此赢得了“硅时代”这一称号。在硅的各种新兴形态中，硅烯[60]——一种在结构上类似于石墨烯的二维（2D）同素异形体——因其在柔性电子学和量子计算等下一代技术中的潜在应用而备受关注。作为一种多晶型材料，硅烯具有多种结构相[61, 62] ，这对传统结构优化方法提出了挑战。已知的硅烯多晶型包括平面硅烯（FS）、低翘曲硅烯（LBS）、三角哑铃硅烯（TDS）、蜂窝哑铃硅烯（HDS）和大型蜂窝哑铃硅烯（LHDS）。这些结构不仅在几何形态上各不相同，在能量稳定性、原子排列和晶格参数方面也有显著差异。这些构型的亚稳态特性使得通过直接的基于能量的搜索难以找到它们，因为它们处于能量景观中的次优能谷，典型的全局优化器很可能会忽略或完全跳过这些能谷。平面硅烯（FS）：2 个原子，9 维空间（6 个笛卡尔坐标 + 3 晶格参数，a、b、γ）；低翘曲硅烯（LBS）：2 个原子，9 维空间；三角哑铃硅烯（TDS）：7 个原子，24 维空间。目标是从随机初始化的原子排列出发，恢复每个目标晶胞构型，并使用以下目标函数衡量结构相似性：

$$\text{Score} = \frac{1}{D}\left\|\mathbf{l}^{\text{pred}} - \mathbf{l}^{\text{ref}}\right\|_1 + \frac{1}{D}\left\|\mathbf{r}^{\text{pred}} - \mathbf{r}^{\text{ref}}\right\|_1,$$

其中

$$\begin{aligned}
&\mathbf{l}^{\text{pred}},\ \mathbf{l}^{\text{ref}} \in \mathbb{R}^{n_{\text{lattice}}} && \text{(predicted and reference lattice vectors, e.g., } a, b, c, \alpha, \beta, \gamma\text{)}\\
&\mathbf{r}^{\text{pred}},\ \mathbf{r}^{\text{ref}} \in \mathbb{R}^{3N} && \text{(flattened atomic coordinates, centered.)}\\
&D = n_{\text{lattice}} + 3N && \text{(total dimensionality of the parameter vector)},\quad n_{\text{lattice}} \in [0, 6]
\end{aligned}$$

需要指出的是，此处我们并未将稳定性（能量）用作衡量指标，因为基于稳定性的搜索会将搜索推向最稳定的多晶型。我们真正感兴趣的是寻找局部亚稳态构型。图 4c 展示了我们的工作流程为三种具有代表性的多晶型预测出的最终多晶型。由于搜索由上述评分驱动，我们使用 LAMMPS + MEAM[63] 势模型独立计算其能量。根据最佳评分随迭代次数的演化趋势（见补充图 2a-c），在大多数情况下，后续能量演化之间存在中等到较高程度的协调性。对于 FS，在评分收敛至最优值之前很久便已得到能量鞍点，这表明存在简并——能量相同的解可能对应内部构型不同的结构。FS 的能量稳定性也低于 LBS，尽管两者具有相似的晶胞，且采用了相同的搜索空间。因此，纯粹由能量驱动的搜索很可能最终得到 LBS。从其目标函数演化中也能观察到这一趋势，因为评分和能量往往会同时收敛。TDS 也呈现出与 FS 类似的趋势。总体而言，如图 4c 所示，我们搜索得到的预测结构与目标参考构型十分相似。晶格参数误差平均约为 10^{-4} ，而晶格角和原子坐标的误差约为 10^{-5}。我们确实观察到，维度增加时，误差幅度略有上升。

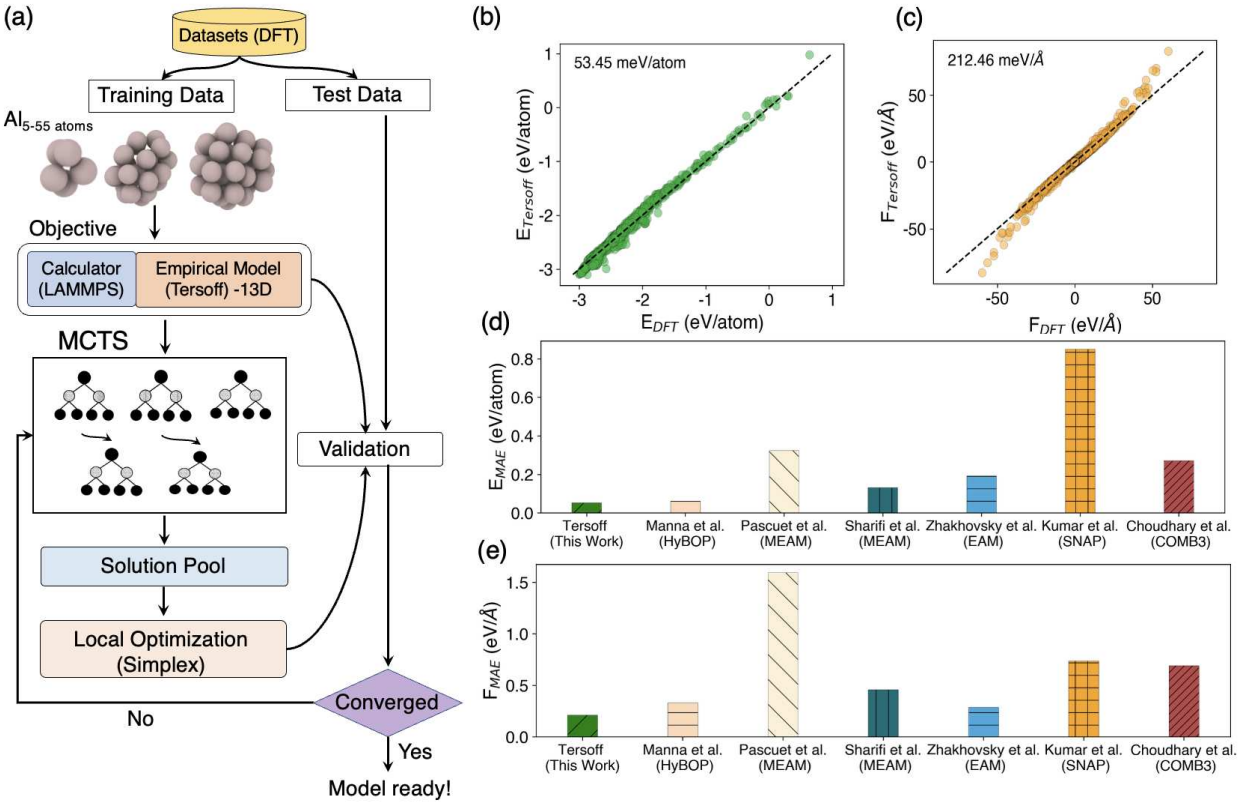


图 5：MCTS算法在势能模型优化中的应用。(a) 展示基于MCTS的优化框架如何用于开发势能模型的工作流程。该流程包括四个主要组成部分：(i) 使用密度泛函理论或其他高保真方法生成参考数据集；(ii) 将预测的模型参数映射为材料物理性质的计算器；(iii) MCTS优化引擎；以及 (iv) 用于微调模型参数的局部优化器。(b,c) 奇偶图对比了铝（Al）纳米团簇的预测能量和力与密度泛函理论参考数据，并展示了测试数据集上的相应预测误差。(d,e) 从能量和力预测误差方面，将所开发模型与文献中的标准铝势函数进行性能基准测试。

误差幅度随着维度从 9 维增加到 24 维而增大。9 维情况下所需的迭代次数约为 $\sim$ 12,000，而 24 维情况下约为$\sim$ 21,000。尽管所有搜索都收敛到了精确解，但需要指出的是，本例中我们没有进行任何局部优化。这纯粹是一次参数搜索，目标是获得所需参数。

接下来，我们考察如何求得块体硅的全局最小值；如图所示，其构型为立方金刚石构型。4d。在这种情况下，与纳米团簇系统类似，我们使用 LAMMPS 进行局部优化， + StillingerWeber[64] 势模型，以弛豫在新节点处采样得到的构型。此处维度为 30，其中包括 24 个笛卡尔坐标和六个晶格参数（a、b、c、 α, β, γ）。块体系统搜索的一个关键方面是搜索空间的边界，具体而言是晶格矢量范围。扩大边界范围有助于搜索找到堆垛和能量相近、但晶格参数各异的构型。我们采用两个边界范围，分别为参考参数（补充表 2）上下 $\pm$10% 和 $\pm$30%，以开展搜索。如图4d 所示，在 10% 的边界范围下，蒙特卡洛树搜索在径向分布函数和晶格矢量方面均找到了晶胞的精确解。在 30% 的边界范围下，它找到了立方金刚石堆垛，但晶格不同。

3.3 Comp高维势能模型的计算设计

在上一节中，晶体结构搜索作为一项典型的正向计算设计任务——即筛选结构候选，并在物理约束条件下评估其稳定性。设计流程中更深一层还存在第二项同样核心的挑战：设计代理物理模型本身（即原子间势（IAP）模型）。实际上，晶体搜索、相稳定性筛选和自主发现都依赖于原子间势；这种势必须以最低成本模拟高保真能量学。经验势恰好承担了这一设计功能：它们是紧凑的解析函数，用于近似量子能量学和力，使设计循环能够在实际规模下运行，而无需每次迭代都调用密度泛函理论[64, 63, 54, 65]。然而，构建此类势本身就是一个高维逆向设计优化问题：必须在崎岖的参数空间中搜索，找到预测结果能够重现目标参考能量景观的参数化方案。对于纳米团簇而言，这一问题尤其复杂，因为其底层能量景观具有高度多峰特征，其中分布着近简并异构体，且异构体之间由较浅的势垒隔开。

在现有的模型系列中，Tersoff 键级势是一种广泛使用的设计架构，这得益于其融入物理学的结构：它将局部配位和角度几何嵌入动态键级项中，使其能够以紧凑的解析形式表征多种化学体系（C、Si、SiO_x、ZrO_2）[66, 54]。它的局域性和简洁性使其计算效率足够高，可以纳入设计循环，同时保有足够的物理保真度。受 Manna 等人[54], 的基准测试研究启发，我们将铝纳米团簇 Tersoff 型模型的参数化作为计算设计框架的第二个应用案例——目的不是设计结构，而是设计势能模型本身，使其能够复现同一数据集中的密度泛函理论计算的能量和力。由此，我们证明了该方法并不局限于结构设计，同样适用于设计代理模型，从而实现可扩展的仿真驱动发现。

因此，第二个应用案例评估的并非结构发现本身，而是一项核心元设计任务——学习势能模型，而该模型将进一步支配后续的计算设计工作流程。图中展示了利用我们的搜索算法，基于 Tersoff 形式开发原型势模型的基本工作流程。 5a。该工作流程主要包括四个部分：第一部分是通过密度泛函理论或高保真技术生成的数据集；第二部分是利用预测得到的模型参数来映射物理材料性质的计算器；第三部分是优化算法本身；第四部分是用于微调模型的局部优化器。训练数据集和测试数据均为单质铝纳米团簇，尺寸分布范围为 5–55 个原子。有关数据集的更多详情，请参阅 Manna 等人的研究。[54]。我们使用 LAMMPS ASE 接口作为评估器，在优化过程中计算能量和力。目标函数基本上是拟合过程中使用的能量和力均方误差的加权线性组合。根据多次搜索的结果，我们依据测试集上的性能选出最佳解集，并进一步使用单纯形[67] 算法对其进行微调。最终模型的性能如图所示。5(b–c)。该模型的能量误差为 53.45 meV/原子，相应的力误差为 212.46 meV/$^{\circ}$A，优于专为纳米团簇开发的先进 HYBOP（Tersoff + 修正）模型。此外，我们还将本模型的性能与文献中已有的标准模型进行了比较 [引文], 例如 MEAM[68, 69], EAM[70], SNAP[71], 和 COMB[72]。如图所示。5(d,e)，与其他模型相比，所开发的模型表现出色。大多数传统模型要么无法捕捉预测能量和力与密度泛函理论结果之间的紧密相关性，要么在高能区表现出较大的系统误差，其预测值与密度泛函理论对角线明显偏离（补充图 3）。这表明，我们的算法能够在高维景观中找到一种解决方案，从而捕捉该材料的物理性质。搜索维度为 13，所得最佳参数集见补充表 3。

3.4 优化问题的连续尺度建模

连续尺度工程设计问题是典型的约束优化任务，其可行性和性能同时受到物理学规律与制造限制的约束。为展示我们的方法在这一领域的应用，我们将其用于两个标准基准测试设计问题——焊接梁和压力容器；两者均受严格的机械和几何约束条件支配。与此前的应用一样，样本

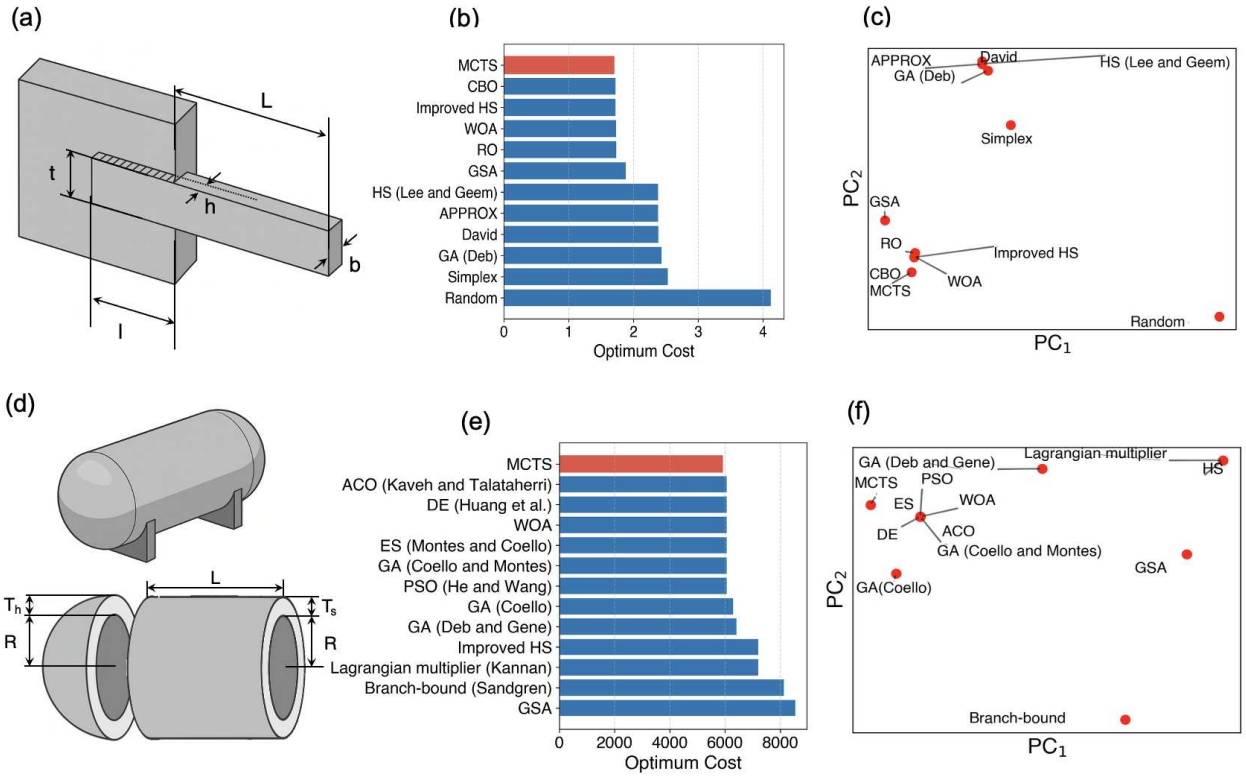


图 6：蒙特卡洛树搜索算法在连续尺度设计优化问题中的应用。(a) 焊接接头的设计优化，示意图展示了待优化的关键几何参数。(b) 蒙特卡洛树搜索算法与文献报道的 11 种优化器的性能比较。(c) 针对焊接接头问题，不同优化器所得最优解的降维主成分分析（PCA）表示。(d) 压力容器示意图，展示了优化中使用的 11 个几何设计参数。(e) 蒙特卡洛树搜索算法与其他优化器在压力容器设计问题上的性能基准测试。(f) 不同优化器针对压力容器设计所得优化参数集的降维 PCA 图。

违反约束条件的样本会受到惩罚，从而引导搜索远离设计空间中的不可行区域。下文将介绍这些问题的公式及相应的优化结果。

焊接梁设计优化

焊接梁问题是受约束工程设计中的典型基准测试：目标是在满足剪切应力（τ）、弯曲应力（σ）、临界屈曲载荷（P_c）和端部挠度（δ）等机械约束的条件下，使总制造成本最小化。该设计由四个连续几何变量参数化——焊缝厚度 h、焊缝长度 l、杆高 t和杆厚度 b （图6a）——这些变量直接决定成本和结构性能。为简化记法，令 $x_1 = h$， $x_2 = l$， $x_3 = t$，以及$x_4 = b$。控制方程和允许边界见补充材料第1节。我们在这个四维设计空间中评估所提方法，并将其与文献报道的标准优化器进行比较[20], ，通过30次独立试验评估可复现性。如图6b所示，该算法始终收敛到几乎相同的最优解，早期迭代（$\sim$ 前6000个阶梯函数）仅有适度波动；利用阶段结束后，所有运行都收敛到同一解。详细的收敛轨迹见补充图4a。我们的方法找到的最佳设计（得分 $=$ 1.697958）优于所有竞争方法（图6b）。对所得参数集进行降维比较（图6c）表明，只有表现最好的两种方法（MCTS和约束贝叶斯优化）到达设计空间中的相似区域，而其他方法则收敛到明显分离的团簇——这揭示了存在多个可行极小值，也凸显了受约束计算设计问题的难度

问题。

压力容器设计

所考虑的第二个受约束设计问题是圆柱形压力容器[20]，，其目标是在满足壳体厚度、封头厚度、允许容积和最大容器长度等几何与物理约束的前提下，最大限度地降低总制造成本，包括材料、成形和焊接成本。该设计由四个连续参数定义：壳体厚度 T_s、封头厚度 T_h、内半径R，以及不含封头的圆柱段长度 L（图6d）。这些参数直接决定了可制造性和结构可行性。为简化表示，我们令 $x_1 = T_s$， $x_2 = T_h$，$x_3 = R$，以及$x_4 = L$。约束条件的详细定义见补充材料第2节。

该问题同样是四维的，我们将所提方法与此前应用于此设计任务的标准算法进行基准测试[20]。如图6e所示，我们报告了13次独立运行中获得的最佳解。我们的方法在各次试验中得到的解再次表现出高度一致性——MCTS在多次独立运行中反复获得非常相近的最佳成本（图6e）；详细的收敛轨迹见补充图4b。有趣的是，对所得参数进行降维投影后发现，MCTS收敛到的设计空间区域不同于竞争算法所探索的区域，这表明该方法能够发现可行但此前未曾探索过的最优解。

总体而言，焊接梁和压力容器研究表明，所提出的方法能够推广到原子尺度领域之外，并且对于受约束的连续尺度设计问题同样有效。该方法不仅能够识别出可行且高质量的最优解，还能探索传统优化器无法触及的其他设计区域，凸显了其在复杂约束下进行计算设计的适用性。

表2：蒙特卡洛树搜索针对焊接梁和压力容器设计问题获得的最佳参数及相应得分。

问题	变量	符号	最佳值	最佳得分
焊接梁	焊缝厚度	h	0.204508	1.697958
	焊接接头长度	l	3.273933	
	杆高	t	9.046498	
	杆厚度	b	0.205730	
压力容器	壳体厚度	T_s	0.779536	5898.135917
	封头厚度	T_h	0.385230	
	内半径	R	40.332212	
	圆筒长度	L	199.959890	

4 讨论

我们在多个基准测试和三种具有代表性但彼此不同的设计场景中取得的结果表明，所提出的物理信息树搜索框架可以作为计算设计的通用优化层。与依赖固定采样启发式方法的经典元启发式算法，以及不会主动决定搜索方向、以预测为导向的机器学习模型不同，本文提出的方法会通过策略驱动的计算资源重新分配，将计算资源投向在统计和物理层面上具有信息价值的景观区域。这一能力在原子结构搜索、势能模型的逆向设计，以及受约束的连续尺度工程问题中均被证明至关重要。这些问题的尺度各异，却有三个共同特征：评估代价高、景观非光滑且多峰，以及缺乏可靠的梯度。

在基准函数上观察到的性能提升并非仅仅是数值上的改进，也对设计工作流程具有重要影响：该方法在多次运行中表现出较低的方差，在存在约束条件时能够保持可行性，并且在维度增加时仍保持稳健。在原子尺度的场景中——搜索空间庞大且简并现象普遍存在——基于学习得到的统计量自适应地细化采样窗口和偏置方向，使其能够以远少于基线方法的评估次数实现收敛。在逆向势函数拟合中——这一问题很少被视为设计任务——该方法成功

探索了高维参数景观，生成了性能优于现有替代方法的代理模型。在连续体设计中——这一领域由约束驱动的解空间主导——该方法持续发现可行最优解，包括竞争算法尚未探索的区域，彰显了其在约束筛选条件下实现全局覆盖的能力。

置于用于科学发现的人工智能这一更广阔的背景下，我们的工作体现了从预测转向决策的趋势。深度学习和基础模型的最新进展提升了表征材料、编码先验知识以及对已知物理规律进行插值的能力，但科学设计的核心瓶颈仍在于：如何在严格的成本和可行性预算下，选择下一步要评估的对象。标准的强化学习和蒙特卡洛树搜索框架历来在离散环境中表现出色，却无法直接扩展到连续、高维且受物理约束的设计空间。本框架通过将方向学习、深度感知利用和种群级分支整合到同一策略中，弥合了这一差距，同时兼顾搜索几何与领域约束。从这个意义上说，它并非事后优化器，而是嵌入计算科学设计循环中的决策层。

展望未来，此类基于树的强化范式或可成为连接仿真引擎、代理模型与自主实验的关键纽带，使人工智能不仅能够从科学数据中学习，还能以有针对性且数据高效的方式，围绕科学目标采取行动。

4.1 局限性与展望

尽管该框架具有普适性且性能出色，但仍存在若干局限，也指明了具体的扩展方向。首先，该方法严格运行于黑箱机制中，目前尚未利用可用的多保真结构或部分可微性。其次，在一个问题中获得的知识无法在相关任务间摊销；不同运行之间的树不共享已学习的结构，因此无法在不同设计族之间进行迁移学习。第三，目前通过惩罚项而非约束感知生成模型或符号可行性先验来施加可行性约束。值得探索的扩展包括：(i) 基础模型引导的搜索，由预训练物理编码器约束探索过程；(ii) 多智能体和共享记忆树集成，在不同任务间积累结构先验；(iii) 与仿真和实验进行闭环集成，由同一策略统筹数据采集与细化。

4.2 展望

我们的工作展示了学习引导的树搜索如何将优化从下游数值例程提升为计算设计的核心组织机制。通过将主动决策融入仿真、物理约束处理和代理模型评估的循环中，该方法体现了向人工智能原生设计框架的转变——这类系统不仅对科学空间建模，还能有策略地探索这些空间。随着计算物理、机器学习与自主实验的融合，此类以决策为中心的优化层有望成为科学发现的基础设施。

5 致谢

本研究部分基于美国能源部科学办公室基础能源科学办公室的 DOE 科学用户设施数据、人工智能与机器学习计划资助开展，资助编号 34532（数字孪生）。本研究部分工作在纳米尺度材料中心完成。该中心是美国能源部科学办公室用户设施，由美国能源部科学办公室基础能源科学办公室根据合同编号 DE-AC02-06CH11357 提供支持。本研究使用了国家能源研究科学计算中心；该中心是美国能源部科学办公室用户设施，由美国能源部科学办公室根据合同编号 DE-AC02-05CH11231 提供支持。Banik 博士还感谢先进网络基础设施协调生态系统[73]：服务与支持（ACCESS）计划，该计划由美国国家科学基金会的资助项目 #2138259、#2138286、#2138307、#2137603 和 #2138296 提供支持。

6 作者贡献

S.B. 和 S.K.R.S.S. 提出了本项目构想。T.D.L. 和 S.K.R.S.S. 将蒙特卡洛树搜索算法改造用于连续搜索。S.B. 完成了所有计算、验证和分析。S.B. 和 S.K.R.S.S. 撰写了稿件。T.D.L. 开发了逻辑斯蒂替代模型。S.B. 将算法改造用于基于种群的搜索，并采用局部和全局方案。S.B. 开发了晶体结构预测框架和连续介质建模框架。S.B. 在 H.C. 和 S.M. 的意见基础上，开发了势模型开发工作流程。O.Y. 对代码仓库和 GitHub 演示提供了反馈。所有作者均讨论了结果，并对稿件提出了宝贵反馈。S.K.R.S.S. 负责监督整个项目。作者还感谢 Anirban Chandra博士提供了有益的讨论。

7 数据和代码可用性

物理信息驱动的蒙特卡洛树搜索框架的 Python 实现`PyPhysTree`整合了全局与局部树批处理、自适应超球面采样和逻辑斯蒂替代模型，现已发布于https://github.com/sbanik2/PyPhysTree。该代码仓库包含工作流程、数据集和基准测试脚本，适用于单峰、多峰和复合优化函数；还提供了晶体结构预测、原子间势评估和连续介质设计问题的示例演示。该代码仓库支持完整复现此方法，但本研究中用于生成大部分生产结果的原始蒙特卡洛树搜索引擎与逻辑斯蒂搜索的具体稳健实现，可在合理请求后向作者索取。原始晶体结构预测具体使用了 CASTING 框架 https://doi.org/10.1038/s41524-023-01128-y。

参考文献

[1] Gr´egoire Allaire。《数值分析与优化：数学建模与数值模拟导论》。牛津大学出版社，2007。[2] Alex Zunger。寻找具有目标功能的材料的逆向设计。《自然评论：化学》，2(4):0121，2018。[3] Artem R Oganov、Andriy O Lyakhov 和 Mario Valle。进化晶体结构预测如何运作——以及原因。《化学研究述评》，44(3):227–237，2011。[4] Jackelyn A Martinez、Dundar E Yilmaz、Tao Liang、Susan B Sinnott 和 Simon R Phillpot。经验势拟合：挑战与方法。《固态与材料科学最新观点》，17(6):263–270，2013。[5] Ji-Hong Zhu、Wei-Hong Zhang 和 Liang Xia。飞机及航空航天结构设计中的拓扑优化。《工程计算方法档案》，23(4):595–622，2016。[6] Oliver Hennigh、Susheela Narasimhan、Mohammad Amin Nabian、Akshay Subramaniam、Kaustubh Tangsali、Zhiwei Fang、Max Rietmann、Wonmin Byeon 和 Sanjay Choudhry。NVIDIA SimNet：一个人工智能加速的多物理场仿真框架。载于《国际计算科学会议》，第447–461页。Springer，2021。[7] Kei Terayama、Masato Sumita、Ryo Tamura 和 Koji Tsuda。面向自动化发现的黑箱优化。《化学研究述评》，54(6):1334–1346，2021。[8] Donald R Jones、Matthias Schonlau 和 William J Welch。昂贵黑箱函数的高效全局优化。《全球优化杂志》，13(4):455–492，1998。[9] Jean Pannetier、J Bassas-Alsina、Juan Rodriguez-Carvajal 和 Vincent Caignaert。通过模拟退火和晶体化学规则预测晶体结构。《Nature》，346(6282):343–345，1990。[10] Emile HL Aarts 等。模拟退火：理论与应用。Reidel，1987。[11] Stefan Goedecker。极小值跳跃：一种高效搜索复杂分子系统势能面全局最小值的方法。《化学物理学杂志》，120(21):9911–9917，2004。[12] Roman Marto˘n´ak、Alessandro Laio、Marco Bernasconi、Chiara Ceriani、Paolo Raiteri、Federico Zipoli 和 Michele Parrinello。利用元动力学模拟结构相变。Zeitschrift f¨ur Kristallographie-Crystalline Materials，220(5-6):489–498，2005。[13] Chris J Pickard 和 RJ Needs。第一性原理随机结构搜索。Journal of Physics: Condensed Matter，23(5):053201，2011。[14] Darrell Whitley。遗传算法教程。《统计与计算》，4(2):65–85，1994。[15] Artem R Oganov、Yanming Ma、Andriy O Lyakhov、Mario Valle 和 Carlo Gatti。将进化晶体结构预测作为发现矿物和材料的方法。《矿物学与地球化学评论》，71(1):271–298，2010。[16] Annu Lambora、Kunal Gupta 和 Kriti Chopra。遗传算法：文献综述。载于《国际机器学习、大数据、云计算与并行计算会议（COMITCon）》，第380–384页。电气电子工程师学会，2019。[17] Stephen Chen、James Montgomery 和 Antonio Boluf´e-R¨ohler。衡量维数灾难及其对粒子群优化和差分进化的影响。《应用智能》，42(3):514–526，2015。[18] James Kennedy 和 Russell C Eberhart。粒子群算法的离散二进制版本。载于《1997年IEEE系统、人类与控制论国际会议：计算控制论与仿真》，第5卷，第4104–4108页。IEEE，1997。

[19] Yanchao Wang、Jian Lv、Li Zhu 和 Yanming Ma。通过粒子群优化进行晶体结构预测。《Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics》，82(9):094116，2010年。[20] Seyedali Mirjalili 和 Andrew Lewis。鲸鱼优化算法。《Advances in engineering software》，95:51–67，2016年。[21] Esmat Rashedi、Hossein Nezamabadi-Pour 和 Saeid Saryazdi。GSA：引力搜索算法。《Information sciences》，179(13):2232–2248，2009年。[22] Marco Dorigo 和 Krzysztof Socha。蚁群优化简介。载于《Handbook of approximation algorithms and metaheuristics》，第395–408页。Chapman and Hall/CRC，2018年。[23] Peter I Frazier。贝叶斯优化教程。arXiv预印本 arXiv:1807.02811，2018年。[24] Tomoki Yamashita、Nobuya Sato、Hiori Kino、Takashi Miyake、Koji Tsuda 和 Tamio Oguchi。贝叶斯优化加速晶体结构预测。《Physical Review Materials》，2(1):013803，2018年。[25] Leslie Pack Kaelbling、Michael L Littman 和 Andrew W Moore。强化学习：综述。《Journal of artificial intelligence research》，4:237–285，1996年。[26] Guodong Chen、Kai Zhang、Xiaoming Xue、Liming Zhang、Chuanjin Yao、Jian Wang 和 Jun Yao。径向基函数代理模型辅助的高维昂贵优化问题进化算法。《Applied Soft Computing》，116:108353，2022年。[27] Henry Chan、Mathew J Cherukara、Badri Narayanan、Troy D Loeffler、Chris Benmore、Stephen K Gray 和 Subramanian KRS Sankaranarayanan。用于水的机器学习粗粒化模型。《Nature communications》，10(1):379，2019年。[28] David Silver、Aja Huang、Chris J Maddison、Arthur Guez、Laurent Sifre、George Van Den Driessche、Julian Schrittwieser、Ioannis Antonoglou、Veda Panneershelvam、Marc Lanctot 等。利用深度神经网络和树搜索掌握围棋。《Nature》，529(7587):484–489，2016年。[29] David Silver、Thomas Hubert、Julian Schrittwieser、Ioannis Antonoglou、Matthew Lai、Arthur Guez、Marc Lanctot、Laurent Sifre、Dharshan Kumaran、Thore Graepel 等。通过自我对弈掌握国际象棋、将棋和围棋的通用强化学习算法。《Science》，362(6419):1140–1144，2018年。[30] Cameron B Browne、Edward Powley、Daniel Whitehouse、Simon M Lucas、Peter I Cowling、Philipp Rohlfshagen、Stephen Tavener、Diego Perez、Spyridon Samothrakis 和 Simon Colton。蒙特卡洛树搜索方法综述。《IEEE Transactions on Computational Intelligence and AI in games》，4(1):1–43，2012年。[31] Zhihao Xing 和 Shikui Tu。图神经网络辅助的旅行商问题蒙特卡洛树搜索方法。《Ieee Access》，8:108418–108428，2020年。[32] Steven J Rasmussen 和 Tal Shima。用于将协同无人机分配至多项任务的树搜索算法。《International Journal of Robust and Nonlinear Control: IFAC-Affiliated Journal》，18(2):135–153，2008年。[33] Tarak K Patra、Troy D Loeffler 和 Subramanian KRS Sankaranarayanan。利用蒙特卡洛树搜索加速共聚物逆向设计。《Nanoscale》，12(46):23653–23662，2020年。[34] Xiaoxue Wang、Yujie Qian、Hanyu Gao、Connor W Coley、Yiming Mo、Regina Barzilay 和 Klavs F Jensen。利用蒙特卡洛树搜索和强化学习实现绿色合成路径的高效发现。《Chemical Science》，11(40):10959–10972，2020年。[35] Suvo Banik、Troy David Loeffler、Rohit Batra、Harpal Singh、Mathew J Cherukara 和 Subrama- nian KRS Sankaranarayanan。延迟奖励学习——二维材料缺陷逆向设计案例研究。《ACS applied materials & interfaces》，13(30):36455–36464，2021年。

[36] Troy D Loeffler、Suvo Banik、Tarak K Patra、Michael Sternberg 和 Subramanian KRS Sankara- narayanan。在离散动作空间中应用于缺陷逆向设计的强化学习。《Journal of Physics Communications》，5(3):031001，2021年。[37] Matthew Guziewski、Arash D Banadaki、Srikanth Patala 和 Shawn P Coleman。蒙特卡洛技术在硅和碳化硅晶界结构优化中的应用。《Computational Materials Science》，182:109771，2020年。[38] Srilok Srinivasan、Rohit Batra、Henry Chan、Ganesh Kamath、Mathew J Cherukara 和 Subrama- nian KRS Sankaranarayanan。以新冠肺炎为目标的人工智能引导的从头分子设计。《ACS Omega》，6(19):12557–12566，2021年。[39] Jens Kober、J Andrew Bagnell 和 Jan Peters。机器人学中的强化学习：综述。《The International Journal of Robotics Research》，32(11):1238–1274，2013年。[40] Herilalaina Rakotoarison、Marc Schoenauer 和 Mich`ele Sebag。利用蒙特卡洛树搜索实现自动化机器学习。arXiv预印本 arXiv:1906.00170，2019年。[41] Levente Kocsis 和 Csaba Szepesv´ari。基于多臂老虎机的蒙特卡洛规划。载于第15届欧洲机器学习会议，第282–293页。Springer，2006年。[42] Budiman Minasny 和 Alex B McBratney。在存在辅助信息的情况下用于采样的条件拉丁超立方方法。《Computers & Geosciences》，32(9):1378–1388，2006年。[43] Jason G Digalakis 和 Konstantinos G Margaritis。关于遗传算法的基准测试函数。《International Journal of Computer Mathematics》，77(4):481–506，2001年。[44] Ke Tang、Xiaodong Li、Ponnuthurai Nagaratnam Suganthan、Zhenyu Yang 和 Thomas Weise。CEC’2010特别会议及大规模全局优化竞赛的基准测试函数。《Nature Inspired Computation and Applications Laboratory》，中国科学技术大学，中国，24:1–18，2007年。[45] Marcin Molga 和 Czes law Smutnicki。满足优化需求的测试函数。《Test functions for optimization needs》，101(48):32，2005年。[46] Karthik Balasubramanian、Sukriti Manna、Suvo Banik、Srilok Srinivasan、Rohit Batra 和 Subra- manian Sankaranarayanan。机器学习驱动的超硬与极超硬碳多形体发现。《Computational Materials Science》，246:113506，2025年。[47] Karthik Balasubramanian、Suvo Banik、Sukriti Manna、Srilok Srinivasan 和 Subramanian KRS Sankaranarayanan。学习稳定相与亚稳相相图，以加速硼的亚稳相发现。《APL Machine Learning》，2(1)，2024年。[48] Suvo Banik、Troy Loefller、Sukriti Manna、Henry Chan、Srilok Srinivasan、Pierre Darancet、Alexander Hexemer 和 Subramanian KRS Sankaranarayanan。用于逆向设计（铸造）框架的连续动作空间树搜索，以实现材料发现。《npj Computational Materials》，9(1):177，2023年。[49] Artem R Oganov、Chris J Pickard、Qiang Zhu 和 Richard J Needs。结构预测推动材料发现。《Nature Reviews Materials》，4(5):331–348，2019年。[50] Sule Atahan-Evrenk 和 Alan Aspuru-Guzik。晶体结构的预测与计算。《Topics in Current Chemistry》，345，2014年。[51] Artem R Oganov。晶体结构预测的现代方法。John Wiley & Sons，2011年。[52] Aidan P Thompson、H Metin Aktulga、Richard Berger、Dan S Bolintineanu、W Michael Brown、Paul S Crozier、Pieter J In’t Veld、Axel Kohlmeyer、Stan G Moore、Trung Dac Nguyen 等。LAMMPS——用于原子、介观和连续尺度基于粒子的材料建模的灵活仿真工具。《Computer Physics Communications》，271:108171，2022年。

[53] Suvo Banik、Partha Sarathi Dutta、Sukriti Manna 和 Subramanian KRS Sankaranarayanan。开发用于研究镍纳米团簇结构和热力学的机器学习势。《物理化学杂志 A》，128(47):10259–10271，2024。[54] Sukriti Manna、Troy D Loeffler、Rohit Batra、Suvo Banik、Henry Chan、Bilvin Varughese、Kiran Sasikumar、Michael Sternberg、Tom Peterka、Mathew J Cherukara 等。通过连续动作空间学习开发高维势能模型。Nature communications，13(1):368，2022。[55] J¨urgen Hafner。使用 VASP 对材料进行第一性原理模拟：密度泛函理论及其拓展。《计算化学杂志》，29(13):2044–2078，2008。[56] Indranath Chakraborty 和 Thalappil Pradeep。原子级精确的贵金属团簇：原子与纳米颗粒之间的新兴纽带。《化学评论》，117(12):8208–8271，2017。[57] Rochelle Arvizo、Resham Bhattacharya 和 Priyabrata Mukherjee。金纳米颗粒：纳米医学领域的机遇与挑战。《药物递送专家观点》，7(6):753–763，2010。[58] Jonathan PK Doye 和 David J Wales。采用 Sutton–Chen 势描述的过渡金属团簇的全局极小值。《新化学杂志》，22(7):733–744，1998。[59] BD Todd 和 RM Lynden-Bell。采用 Sutton–Chen 势建模的金属表面和体相性质。《表面科学》，281(1-2):191–206，1993。[60] Carlo Grazianetti、Eugenio Cinquanta 和 Alessandro Molle。二维硅：硅烯的兴起。《二维材料》，3(1):012001，2016。[61] Thomas Leoni、Conor Hogan、Kai Zhang、Michel Daher Mansour、Romain Bernard、Romain Parret、Andrea Resta、Stefano Colonna、Yves Borensztein、Fabio Ronci 等。证明哑铃型硅烯的存在：一种稳定的硅二维同素异形体。《物理化学杂志 C》，125(32):17906–17917，2021。[62] Marcin Ma´zdziarz。硅烯原子间势的可转移性。《贝尔施泰因纳米技术杂志》，14(1):574–585，2023。[63] Yaojun A Du、Thomas J Lenosky、Richard G Hennig、Stefan Goedecker 和 John W Wilkins。使用优化的经典势研究硅四间隙原子的能量景观。《固体物理学现状（b）》，248(9):2050–2055，2011。[64] Frank H Stillinger 和 Thomas A Weber。硅凝聚相中局域有序的计算机模拟。《物理评论 B》，31(8):5262，1985。[65] Leonid Pereyaslavets、Ganesh Kamath、Oleg Butin、Alexey Illarionov、Michael Olevanov、Igor Kurnikov、Serzhan Sakipov、Igor Leontyev、Ekaterina Voronina、Tyler Gannon 等。基于第一性原理准确确定中性有机化合物的溶剂化自由能。Nature communications，13(1):414，2022。[66] Jerry Tersoff。用于共价体系结构和能量研究的新经验方法。《物理评论 B》，37(12):6991，1988。[67] George B Dantzig。线性规划及其扩展。2016。[68] MI Pascuet 和 Julian Roberto Fern´andez。用于研究铝铀合金中金属间化合物的 MEAM 型原子相互作用。《核材料杂志》，467:229–239，2015。[69] Hamid Sharifi 和 Collin D Wick。开发适用于铜、钛、镍、铬、钴、铝、铁和锰复杂浓缩合金的原子间势。Computational Materials Science，248:113595，2025。[70] VV Zhakhovskii、NA Inogamov、Yu V Petrov、SI Ashitkov 和 K Nishihara。使用不同原子间势对飞秒烧蚀和层裂进行分子动力学模拟。《应用表面科学》，255(24):9592–9596，2009。

[71] Sandeep Kumar、Hossein Tahmasbi、Kushal Ramakrishna、Mani Lokamani、Svetoslav Nikolov、Julien Tranchida、Mitchell A Wood 和 Attila Cangi。从环境条件到温暖致密物质的铝可迁移原子间势。Physical Review Research，5(3):033162，2023。[72] Kamal Choudhary、Tao Liang、Aleksandr Chernatynskiy、Zizhe Lu、Anuj Goyal、Simon R Phillpot 和 Susan B Sinnott。用于铝的电荷优化多体势。Journal of Physics: Condensed Matter，27(1):015003，2014。[73] Timothy J Boerner、Stephen Deems、Thomas R Furlani、Shelley L Knuth 和 John Towns。ACCESS：推动创新：美国国家科学基金会先进网络基础设施协调生态系统：服务与支持。载于《Practice and experience in advanced research computing 2023: Computing for the common good》，第173–176页。2023。

补充信息：面向高维计算设计的物理信息树搜索

SuvoBanik[1,2,*], Troy D. Loeffler[1,2], Henry Chan[1], Sukriti Manna[1,2], Orcun Yildiz[3], TomPeterka[3],和 Subramanian Sankaranarayanan[1,2,*1]伊利诺伊大学芝加哥分校机械与工业工程系，美国伊利诺伊州芝加哥市，邮编 60607[2]阿贡国家实验室纳米尺度材料中心，美国伊利诺伊州勒蒙特市，邮编 60439[3]阿贡国家实验室数学与计算机科学部，美国伊利诺伊州勒蒙特市，邮编 60439[*]通讯作者：skrssank@uic.edu, sbanik2@anl.gov;

2026年1月13日

表1：基准函数描述。

函数	**V_no**	范围	$f_{\min}$
$F_1(x) = \sum_{i=1}^{n} x_i^2$	30	$[-100, 100]$	0
$F_2(x) = \sum_{i=1}^{n} \lvert x_i \rvert + \prod_{i=1}^{n} \lvert x_i \rvert$	30	$[-10, 10]$	0
$F_3(x) = \sum_{i=1}^{n} \left(\sum_{j=1}^{i} x_j \right)^2$	30	$[-100, 100]$	0
$F_4(x)$ =最大值$_i\{\lvert x_i \rvert\}$	30	$[-100, 100]$	0
$F_5(x) = \sum_{i=1}^{n-1} \left[100(x_{i+1} - x_i^2)^2 + (x_i - 1)^2 \right]$	30	$[-30, 30]$	0
$F_6(x) = \sum_{i=1}^{n} (\lfloor x_i + 0.5 \rfloor)^2$	30	$[-100, 100]$	0
$F_7(x) = \sum_{i=1}^{n} ix_i^4 +$ 随机$[0, 1)$	30	$[-1.28, 1.28]$	0
$F_8(x) = \sum_{i=1}^{n} -x_i$正弦$(\sqrt{\lvert x_i \rvert})$	30	$[-500, 500]$	-418.9829×30
$F_9(x) = \sum_{i=1}^{n} \left[x_i^2 - 10\cos(2\pi x_i) + 10 \right]$	30	$[-5.12, 5.12]$	0
$F_{10}(x) = -20$ 指数 $\left(-0.2 \sqrt{\frac{1}{n} \sum x_i^2} \right)$ − 指数 $\left(\frac{1}{n} \sum$ 余弦$(2\pi x_i) \right) + 20 + e$	30	$[-32, 32]$	0
$F_{11}(x) = \frac{1}{4000} \sum x_i^2 - \prod$ 余弦 $\left(\frac{x_i}{\sqrt{i}} \right) + 1$	30	$[-600, 600]$	0
$F_{12}(x) = \frac{\pi}{n} \left[10$ 正弦$^2(\pi y_1) + \sum_{i=1}^{n-1} (y_i - 1)^2 (1 + 10$正弦$^2(\pi y_{i+1})) + (y_n - 1)^2 \right] +$ $\sum u(x_i, 10, 100, 4)$ $y_i = 1 + \frac{x_i + 1}{4}$, $u(x, a, k, m) = \begin{cases} k(x-a)^m & x > a \\ 0 & \lvert x \rvert \le a \\ k(-x-a)^m & x < -a \end{cases}$	30	$[-50, 50]$	0

表1：基准函数描述（续）。

函数	**V_no**	范围	$f_{\min}$
$F_{13}(x) = 0.1\left\{\text{硅}^2(3\pi x_1) + \sum_{i=1}^{n-1}(x_i-1)^2(1+\text{硅}^2(3\pi x_{i+1}))\right.$ $\left.+(x_n-1)^2(1+\sin^2(2\pi x_n))\right\} + \sum u(x_i,5,100,4)$	30	$[-50,50]$	0
$F_{14}(x) = \left(\frac{1}{500} + \sum_{j=1}^{25}\sum_{i=1}^{2}\frac{1}{(x_i-a_{ij})^6}\right)^{-1}$	2	$[-65,65]$	1
$F_{15}(x) = \sum_{i=1}^{11}\left[a_i - \frac{x_1(b_i^2+b_i x_2)}{b_i^2+b_i x_3+x_4}\right]^2$	4	$[-5,5]$	0.00030
$F_{16}(x) = 4x_1^2 - 2.1x_1^4 + \frac{1}{3}x_1^6 + x_1x_2 - 4x_2^2 + 4x_2^4$	2	$[-5,5]$	-1.0316
$F_{17}(x) = \left(x_1 - \frac{5.1}{4\pi^2}x_1^2 + \frac{5}{\pi}x_1 - 6\right)^2 + \left(1-\frac{1}{8\pi}\right)\text{余弦}(x_1) + 10$	2	$[-5,5]$	0.398
$F_{18}(x) = \left[1+(x_1+x_2+1)^2(19-14x_1+3x_1^2-14x_2+6x_1x_2+3x_2^2)\right]$ $\times\left[30+(2x_1-3x_2)^2(18-32x_1+12x_1^2+48x_2-36x_1x_2+27x_2^2)\right]$	2	$[-2,2]$	3
$F_{19}(x) = -\sum_{i=1}^{4} c_i \text{指数}\left(-\sum_{j=1}^{3} a_{ij}(x_j-p_{ij})^2\right)$	3	$[1,3]$	-3.86
$F_{20}(x) = -\sum_{i=1}^{4} c_i \text{指数}\left(-\sum_{j=1}^{6} a_{ij}(x_j-p_{ij})^2\right)$	6	$[0,1]$	-3.32
$F_{21}(x) = \sum_{i=1}^{5}\left[(X-a_i)(X-a_i)^T + c_i\right]^{-1}$	4	$[0,10]$	-10.1532
$F_{22}(x) = \sum_{i=1}^{7}\left[(X-a_i)(X-a_i)^T + c_i\right]^{-1}$	4	$[0,10]$	-10.4028
$F_{23}(x) = \sum_{i=1}^{10}\left[(X-a_i)(X-a_i)^T + c_i\right]^{-1}$	4	$[0,10]$	-10.5363

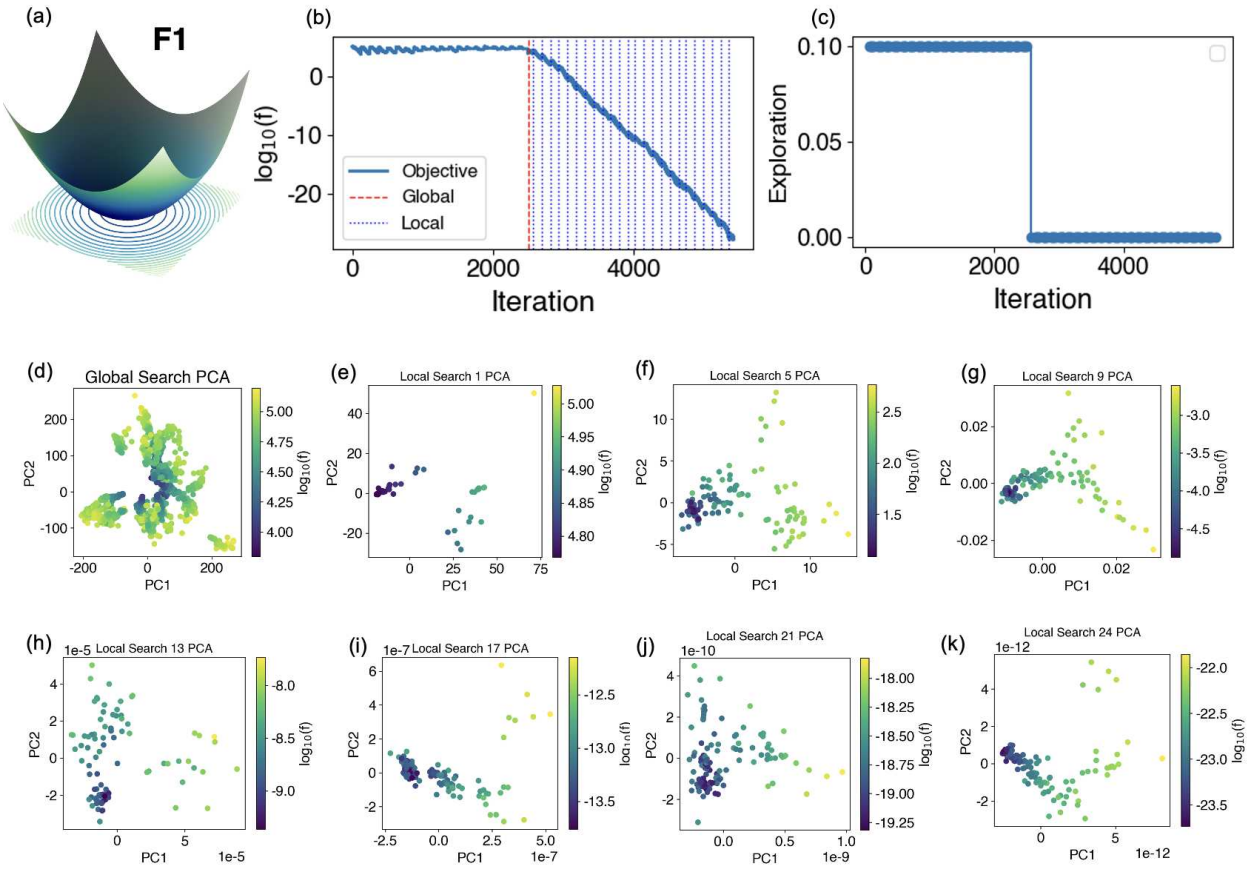


图1：使用树的分层批处理探索 F1 球函数（30维）的搜索空间。(a) 三维空间中的代表性球函数。(b) 随着搜索推进并收敛至解，全局树和局部树中最佳目标值的序贯演化。(c) 搜索过程中探索常数的自适应调整；一旦搜索进入局部阶段，便将探索常数降至可忽略的值，以促进利用。(d–k) 随着搜索在全局树和局部树的不同阶段推进，对采样参数绘制的降维主成分分析图。每个点代表一个参数向量，并按其目标值进行颜色编码。

表2：结构优化问题的约束条件

系统	组成	$n_{\mathbf{atom}}$	晶格矢量（ Å）	晶格角（°）
金纳米团簇	金（1）	[35, 35]	[20, 20]	[90, 90]
硅烯（FS）	硅（1）	[2, 2]	[2.67, 4.96]	[84, 156]
硅烯 (LBS)	硅 (1)	[2, 2]	[2.67, 4.96]	[84, 156]
硅烯 (TDS)	硅 (1)	[7, 7]	[4.5, 8.4]	[84, 156]
块体硅（10% 边界）	硅 (1)	[8, 8]	[4.9, 5.9]	[81, 99]
块体硅（30% 边界）	硅 (1)	[8, 8]	[3.7, 7.0]	[63, 117]

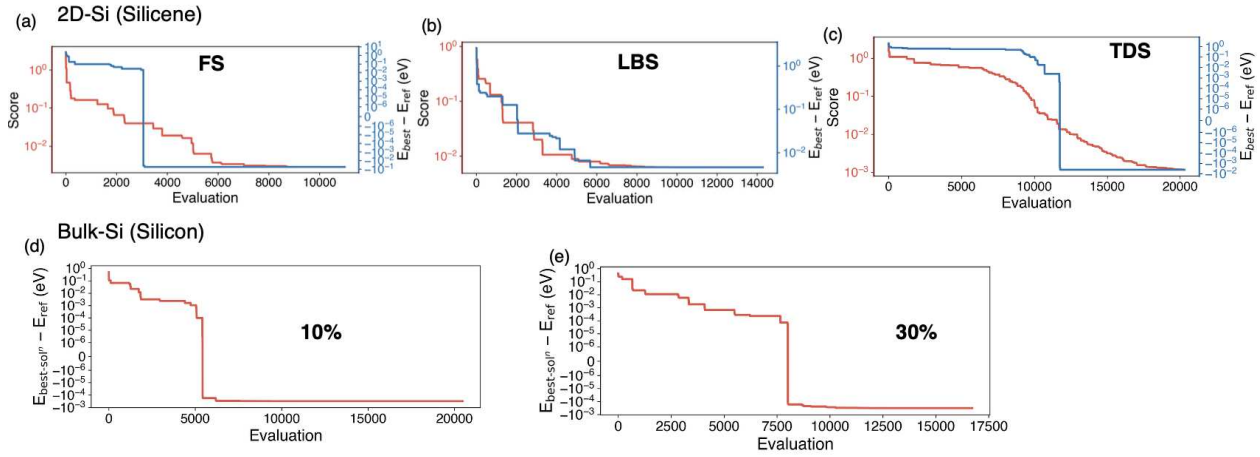


图2：晶体结构优化问题中，分数/目标函数随评估次数的变化。(a–c) 硅烯多晶型的最佳目标分数及其与参考多晶型的能量差（稳定性值单独计算）的变化，依次对应平坦硅烯（FS）、低翘曲硅烯（LBS）和三角哑铃硅烯（TDS）。(d,e) 随搜索推进，目标函数（内聚能）及其与参考多晶型（立方金刚石）的差值在两种不同边界条件（10% 和 30%）下的变化。

表3：铝纳米团簇的 Tersoff 势参数。

参数	数值	状态
i(元素 1)	Al	固定
j (元素 2)	Al	固定
k (元素 3)	Al	固定
m	1	固定
γ	0.08558915042412107	优化后
λ_3	1.388924075919019	优化后
c	102609.51092476014	优化后
d	505.9045930232983	优化后
h	-1.597491319465445	优化后
n	1.0675452081168926	优化后
β	2.6268160450036113	优化后
λ_2	0.946808360148141	优化后
B	32.614504273907656	优化后
R	8.701216493495025	优化后
D	0.6982431003188023	优化后
λ_1	2.631369725037805	优化后
A	785.7021664508125	已优化

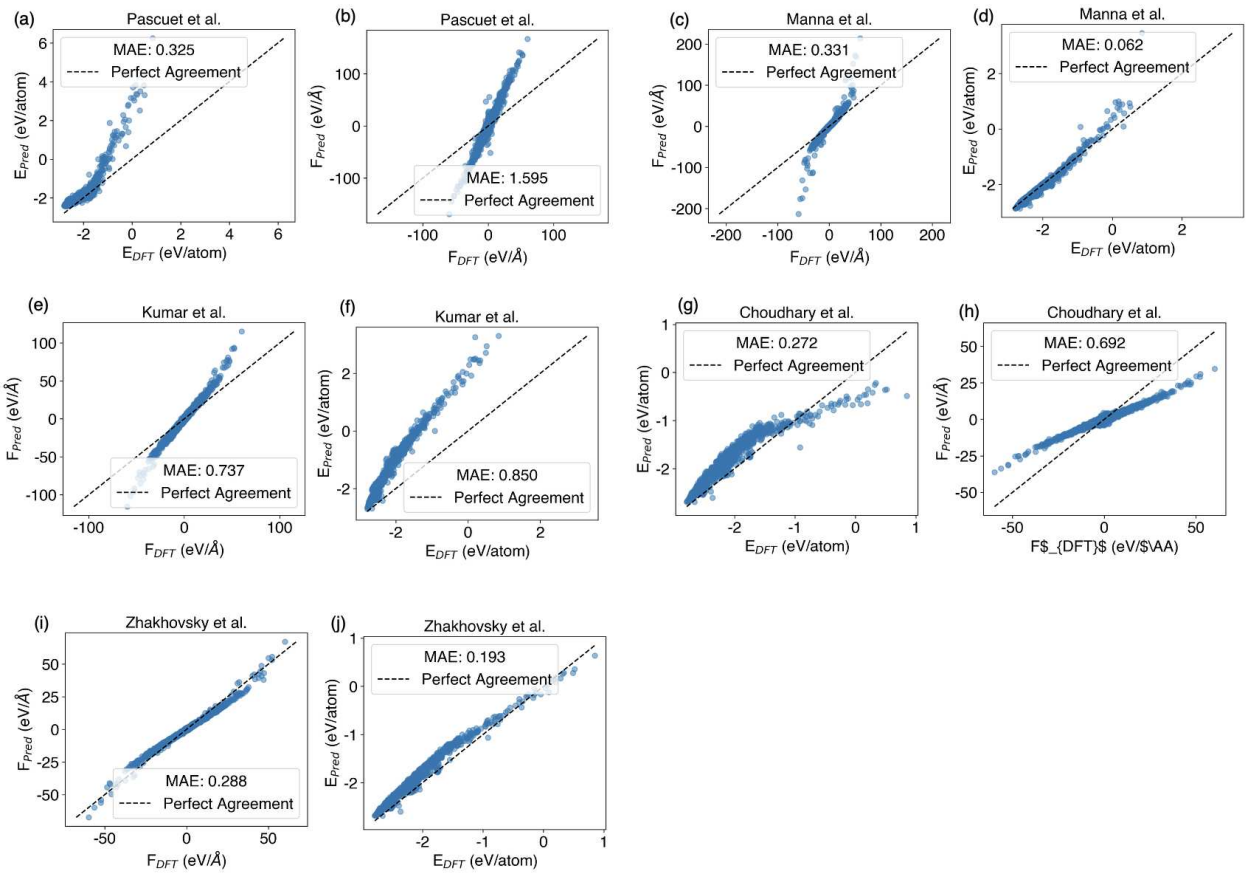


图3：文献中用于预测铝纳米团簇系统能量和力的势模型性能。(a–j) 主稿件中用于性能评估和比较的不同模型的能量与力奇偶图及其平均绝对误差值。

1 焊接梁设计优化

- $x_1 = h$：焊缝厚度（英寸），
- $x_2 = l$：焊接接头长度（英寸），
- $x_3 = t$：杆件高度（英寸），
- $x_4 = b$：杆件厚度（英寸）。

目标函数：

$$\text{Minimize:} \quad f(x) = 1.10471 x_1^2 x_2 + 0.04811 x_3 x_4 (14 + x_2)$$

约束条件：

$$g_1(x) = x_1 - x_4 \leq 0 \text{ (焊缝厚度不大于杆件厚度)} g_2(x) = \tau(x) - 13600 \leq 0 \text{ (剪切应力限值)} g_3(x) = \sigma(x) - 30000 \leq 0 \text{ (弯曲应力限值)} g_4(x) = 0.125 - x_1 \leq 0 \text{ } (g_5)\ x(=\delta)\ x(-0.25 \leq 0)\ g_6\text{(端部挠度限值)} x(=P - P_c)\ x(\leq 0)\text{ (屈曲载荷约束)}$$

中间表达式：

$$
\begin{aligned}
\tau &= \sqrt{(\tau')^2 + 2\tau'\tau''\frac{l}{2R} + (\tau'')^2} \\
\tau' &= \frac{6000}{\sqrt{2}x_1x_2} \\
\tau'' &= \frac{6000(14+\frac{x_2}{2})\sqrt{0.25(x_2^2+(x_1+x_3)^2)}}{2J} \\
J &= 2\sqrt{2}x_1x_2\left(\frac{x_2^2}{12}+\left(\frac{x_1+x_3}{2}\right)^2\right) \\
\sigma &= \frac{504000}{x_3^2x_4} \\
\delta &= \frac{65\cdot 6000\cdot 14^3}{30\cdot Ex_3^4x_4} \\
P_c &= \frac{4.013E\sqrt{\frac{x_3^2x_4^6}{36}}}{L^2}\left(1-\frac{x_3}{2L}\sqrt{\frac{E}{4G}}\right)
\end{aligned}
$$

材料常数：

$$
\begin{aligned}
E &= 30\times 10^6 \text{ psi} \\
G &= 12\times 10^6 \text{ psi} \\
P &= 6000 \text{ lbf} \\
L &= 14 \text{ in}
\end{aligned}
$$

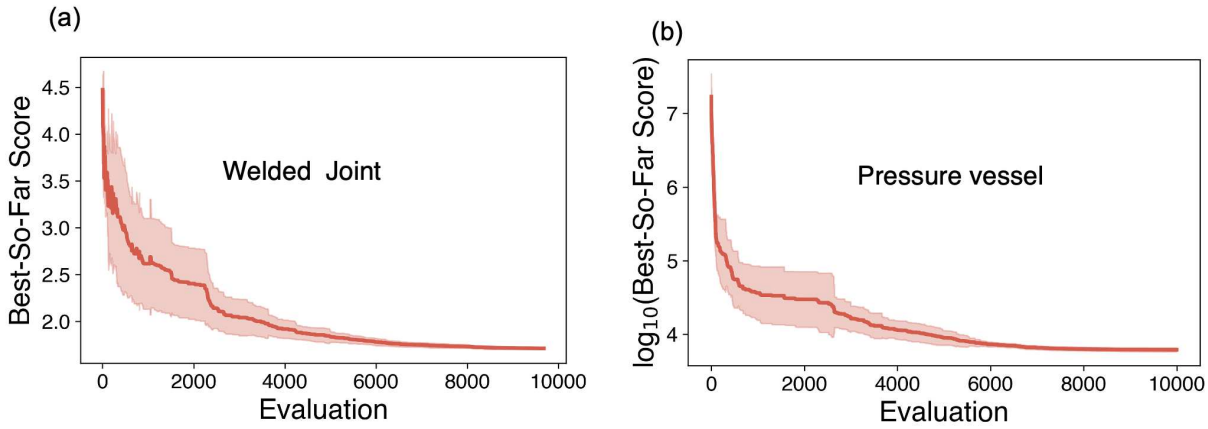


图4：所提算法在设计优化问题中的收敛轨迹。(a) 展示了焊接接头优化问题的性能和目标函数演化，(b) 展示了压力容器设计问题的性能。

设计变量边界：

$$
\begin{aligned}
0.1 \le x_1, x_4 \le 2.0 \\
0.1 \le x_2, x_3 \le 10.0
\end{aligned}
$$

目标是找到设计向量 $x = [x_1, x_2, x_3, x_4]$，使其在满足所有机械约束和几何约束的同时，将制造成本降至最低。

2 压力容器设计优化

- $x_1 = T_s$：壳体厚度（英寸），
- $x_2 = T_h$：封头厚度（英寸），
- $x_3 = R$：内半径（英寸），
- $x_4 = L$：圆柱段长度（英寸）。

目标函数：

$$\text{Minimize: } f(x) = 0.6224x_1x_3x_4 + 1.7781x_2x_3^2 + 3.1661x_1^2x_4 + 19.84x_1^2x_3$$

满足约束条件：

$$\begin{aligned}
g_1(x) &= -x_1 + 0.0193x_3 \leq 0 && \text{(Shell thickness constraint)} \\
g_2(x) &= -x_2 + 0.00954x_3 \leq 0 && \text{(Head thickness constraint)} \\
g_3(x) &= -\pi x_3^2 x_4 - \frac{4}{3}\pi x_3^3 + 1{,}296{,}000 \leq 0 && \text{(Volume constraint)} \\
g_4(x) &= x_4 - 240 \leq 0 && \text{(Length constraint)}
\end{aligned}$$

设计变量边界：

$$\begin{aligned}
0 \leq x_1, x_2 \leq 99 \\
10 \leq x_3, x_4 \leq 200
\end{aligned}$$

目标是找到设计向量 $x = [x_1, x_2, x_3, x_4]$，使压力容器的总成本最小，同时满足所有几何约束和体积约束。