

自然启发算法库构建设想及其在新材料研发中的意义

都时禹¹, 张一鸣¹, 罗侃^{1,2}, 黄庆¹

(1. 中国科学院 宁波材料技术与工程研究所, 核能材料工程实验室(筹), 宁波 315201; 2. 华东理工大学 化工学院, 上海 200237)

摘要: 材料基因组工程技术是运用人工智能手段实现新材料按需设计的关键技术, 其中尤为重要是创新智能算法的开发和应用。本文在总结、分析已有自然启发算法的基础上, 提出建立自然启发算法库(Nature-inspired Algorithms Library, NIAL)的设想; 明确了从不同学科取得算法启发并高通量产生新算法的基本思路; 详细阐述了构建该算法库的基本流程, 并剖析建立自然启发算法库平台的若干优势和特点。最后, 展望了自然启发算法库在新材料研发中的应用模式, 希望借此提升人工智能在材料基因组工程领域的应用水平。

关键词: 自然启发算法; 材料基因组工程; 人工智能; 综述

中图分类号: TQ174 文献标识码: A

Design of the Nature-inspired Algorithms Library and Its Significance for New Materials Research and Development

DU Shi-Yu¹, ZHANG Yi-Ming¹, LUO Kan^{1,2}, HUANG Qing¹

(1. Engineering Laboratory of Nuclear Energy Materials, Ningbo Institute of Materials Technology and Engineering, Chinese Academy of Sciences, Ningbo 315201, China; 2. School of Chemical Engineering, East China University of Science and Technology, Shanghai 200237, China)

Abstract: The technique for Materials Genetic Initiative (MGI) is the key tool for realizing the demand-oriented design of new materials assisted by the artificial intelligence (AI). Accordingly, the development and application of innovative intelligence algorithms are particularly important. Based on the generalization and analyses of the existing nature-inspired algorithms, this work aims at outlining the suggestion to build the nature-inspired algorithms library (NIAL). The potential route in which inspirations are obtained from varieties of disciplines, was used to produce new algorithms in high-throughput ways is introduced. The general procedure for building algorithm library is elaborated, while its advantages and characteristics are anatomized. Finally, the potential of NIAL in new materials development has been envisioned to enhance the standard for the application of AI including MGI.

Key words: Nature-Inspired Algorithms Library; Materials Genetic Initiative; artificial intelligence; review

进入二十一世纪, 人工智能逐渐深入到人类生活的各个角落。材料作为各行各业的基础和先导, 从研发到实用存在时间跨度大、过程漫长且不确定

因素多的问题。近年来学界发展出材料基因组工程的理念, 旨在将高通量计算、高通量实验与表征、材料数据这三大要素深度融合, 加速发现材料学新

收稿日期: 2018-05-08; 收到修改稿日期: 2018-07-13

基金项目: 国家重点研发计划(2016YFB0700100); 中国科学院前沿科学重点研究计划(QYZDB-SSW-JSC037); 中国科学院王宽诚率先人才计划卢嘉锡国际团队项目(rczx0800); 中国科学院创新交叉团队(关键核能技术交叉团队) National Key Research and Development Program of China (2016YFB0700100); Key Research Program of Frontier Sciences, Chinese Academy of Sciences (QYZDB-SSW-JSC037); K. C. Wong Education Foundation (rczx0800); Key Technology of Nuclear Energy, 2014, CAS Interdisciplinary Innovation Team

作者简介: 都时禹(1978-), 男, 研究员. E-mail: dushiyu@nimte.ac.cn

规律^[1-4],将人工智能扩展到材料科学领域的应用则是一项全新的尝试^[5]。在此框架下,研究人员正在积极推进材料基因组大数据平台建设,希望利用人工智能手段预测未知材料的结构、稳定性和物理性质,从而实现材料的按需设计,使新材料从设计新产品到开发应用的全链条进程至少加快一倍,成本至少降低一半。这是在实验手段逐渐丰富和计算机技术显著提高的条件下,将互联网大数据技术与材料学科融合的“互联网+”思想的一个实例^[6]。目前,材料基因组工程的各项相关技术正在飞速发展,并被迅速推广至材料研发,表现为国内外报道的一系列重要工作。

Ward 等^[7]利用机器学习方法提出了针对不同材料的 145 个描述因子,对无机材料体系的三种性能进行了预测,并探索了新型金属玻璃合金。Mounet 等^[8]基于高通量方法从现有的十多万种三维化合物中筛选出 5619 种具有潜在二维层状结构单元特征的材料,再通过第一性原理计算确定了 1825 种容易剥离的材料,并对其中 258 种二维材料的电子结构、磁性和结构稳定性进行了分析。Xu 等^[9]发展了基于结构识别的高通量第一性原理计算方法,在理论上发现可能稳定并具有半导体特性的单层硼平面,为二维半导体硼平面设计提供了思路,有望推动低维硼材料在半导体纳米器件相关领域的应用。Tan 等^[10]则利用高通量计算方法,使用所谓的集群扩展来“学习”原子间相互作用,快速评估数百万个 MXene 合金结构的结合能,从而预测出所有组成和温度范围内不同 MXene 合金的可能结构和稳定相,对于已知的 MXene 合金,预测结构与实验结果一致。Zhou 等^[11]发展了一种可推广的熔融盐辅助化学气相合成方法,利用高通量制备手段合成了含 12 种过渡金属元素和 3 种第六主族元素的 47 种过渡金属硫属化合物。这些工作都说明了材料基因组工程方法在当前材料研究中的重要性,该方法可以减轻人们对经验的依赖,是预测新材料正确而有效的途径。

材料基因组工程是材料科学与人工智能的结合,其核心理念与传统意义上的人工智能相似,需要在数据库、知识库、算法库各方面不断取得进步,才能真正实现降低研发成本,减少研发时间的目的;其中,新算法的开发、收集与综合应用将起到举足轻重的作用。本文旨在总结目前已有的智能算法,并出于便于大规模产生新型算法的目的,提出建立自然启发算法库(Nature-inspired Algorithms Library, NIAL)的设想,希望提升人工智能在材料基因组工程领域的应用水平。

1 设想概论

如前所述,人工智能的发展得益于计算能力、数据产生能力以及算法更新水平三个方面的不断进步,而这三个方面在发展过程中都会面对不同程度的若干挑战。就算法而言,它是计算机解决问题的流程,往往需要根据不同需求进行设计。在此背景下,人们已经发展了大量的算法,并形成了一系列的算法库,以应对软件人员的需要。例如,在科学数值计算中常用的以应用为导向,并在不断进行版本更新的兼容 BLAS(Basic Linear Algebra Subprograms)程序包^[12]或其并行版本的 LAPACK^[13], Armadillo^[14], Intel MKL^[15], ScaLAPACK^[16]等线性代数库,计算几何算法库 CGAL(Computational Geometry Algorithms Library)^[17], Intel 公司发起的计算机视觉函数库 OpenCV(Open Source Computer Vision)^[18]。目前可供选择的“工具箱”越来越丰富,但由于人们面临的问题越来越复杂,对新算法及相应程序的需求在直线上升,仍需要发展更多的新算法以提升可用算法库的水平。

新算法的开发可以分为两种方式进行。一种是直接针对不同的问题,构思数学模型并根据相应的数学逻辑或经验寻找新算法解决方案,这种方法对初始设计者的数学和软件基础有一定要求,存在学科壁垒;另一种是根据外部的启发,获得算法的初步设想,再通过缜密的数学计算和证明构建新算法。在第二种方式中,人们获得启发的主要来源是自然界的各种行为和现象,透过现象抽象出背后的数学规律,再归纳为算法,应用到不同领域中。历史上,从现象获得启发从而发展为科学的思想衍生出仿生学这一学科。如今,人们在算法领域也借鉴仿生学思想,发展出了一系列仿生智能算法或者自然启发算法,其中最具代表性的有模仿生物繁衍进化行为的遗传算法^[19-20]和模仿人脑工作的人工神经网络算法^[21-27]。

进一步发展这一思想,可以认为,宇宙运行历史中各类现象的背后都会蕴含着相应的自然启发算法,可以经由不同学科从整个自然界的发展中探寻启发,利用高通量模式批量构建新的自然启发算法,从而建立新型智能算法库——自然启发算法库(NIAL)。众所周知,学科多样化和交叉是现代科学发展的典型特征,因此上述对算法的启发可来源于不同学科(如生物学(微生物学、古生物学)、动物学、植物学、医学(西医、中医)、脑科学、人类社会学、心理学、地质学、宇宙学、工程学、管理学,甚至

文学、艺术)研究中已经发现或正在发现的现象(也包括人们日常生活中遇到的各种现象)。例如植物通过根茎在富含微生物的土壤中吸取营养, 动物的觅食行为, 心理学中的从众效应(Bandwagon Effect)^[28], 宇宙的膨胀^[29]和大爆炸假说^[30], 量子纠缠现象^[31]。将各类现象作为启发, 通过推演其内在规律与关联, 并归纳其隐含的数学结构, 可以源源不断地为自然启发算法库提供新算法。

自然启发算法的研究由来已久, 且已有很多令人振奋的工作, 1948 年香农提出信息熵的概念^[32], 建立了信息科学与物理世界的桥梁, 此后, 很多算法研究都借鉴了经由物理世界规律产生算法的思想。Yang 等^[33]研究小蝙蝠(microbat)的回声定位行为, 模拟调节不同的脉冲发射率和响度发展出蝙蝠算法, 通过神经网络训练, 发现其相比一些传统优化算法有优势^[34], 该算法目前仍在不断发展之中^[35]。模仿固体材料的高温退火方法, 人们发展了退火算法用于寻优问题^[36-38]; 模仿赌博行为, 人们发展了在材料计算多个领域有重要应用的蒙特卡洛模拟方法^[39]和拉斯维加斯算法^[40-42]; 受到树木枝杈特点的启发, 人们开发了利用树状结构辅助人工决策的算法, 如 Quilan 等提出的决策树算法 ID3^[43]和 C4.5^[44], 是目前被广泛采用的数据挖掘算法。2016 年谷歌公司利用蒙特卡洛树搜索^[45-46], 成功开发了著名的 AlphaGo 围棋人工智能机器人^[47], 翌年, 利用升级后的深度神经网络学习, 又发展了 AlphaGo Zero 程序^[48]。刘亚红等^[49]模仿生态系统分级的思想, 发展出生态金字塔粒子群优化算法, 文献[50-53]提出了模拟人群之间授业和学习的优化算法(Teaching-Learning-Based Optimization: TLBO), 并发现该优化算法在实际应用中具有参数少, 收敛能力强等特点。Zhang 等^[54]根据黑洞物理现象提出一种黑洞粒子群算法, 用于改进粒子群算法搜索全局最优的效率; 随后, Hatamlous 等^[55]改进黑洞算法的边界确定和吸收星体问题, 接近人们熟知的天文学黑洞的物理行为, 并尝试将之用于聚类这样的 NP 问题; WARNANA 等^[56]近期采用了该算法计算了地球物理中的自然电位模型参数。Ma 等^[57]模仿植根吸收营养行为, 发现了植根觅食优化算法(Artificial Root Foraging Optimization Algorithm, ARFO); Simon 提出了生物地理学算法(Biogeography-Based Optimization), 模仿了地质生态演变影响生物栖息地这一普遍现象^[58-61]。

尤其值得一提的是, 近年来随着量子计算的蓬勃发展, 在量子力学的启发下, 人们还在传统算法

中引入量子计算的量子相干态、量子比特等元素, 发展出一系列的量子启发算法。量子计算机的概念源于 1960 年代的量子时空理念, 其定义在 1980 年代定型^[62-64]。量子计算机正在随着超导和拓扑绝缘材料的发展从概念慢慢变成现实, 美国的 IBM 公司和谷歌公司, 加拿大的 D-Wave 公司都已发布了用于研究和应用的量子计算机^[65-67]。中国科学技术大学潘建伟团队于 2016 年在十光子纠缠操纵的基础上, 利用高品质光量子构建了世界首台超越早期经典计算机的单光子量子计算机^[68]。2018 年 2 月, Liang 等^[69]报道由激光脉冲激发的里德堡原子气可以诱发光子之间的相互作用, 借此调节并构造光子的二聚体和三聚体束缚态, 可以产生新颖的光量子态和量子纠缠态, 在量子计算机中有良好应用前景。2018 年 3 月, 谷歌公司量子人工智能实验室出品了 72 量子比特位处理器 Bristlecone^[70]。

早在量子计算机成熟之前, 人们已经开发了一系列量子算法^[63, 71-78]。用于整数因子分解的 Shor 算法可将计算复杂度由 $\exp(O(\log N)^{1/3}(\log \log N)^{2/3})$ 降低为 $O((\log N)^3)$ ^[79-82], Grover 等^[83-84]发展了无结构搜索的量子算法, 可将计算复杂度由 $O(N)$ 降为 $O(\sqrt{N})$ 。目前, 人们已经发展了数百种量子算法, 在量子随机游走(Quantum Random Walk)^[85-86]、振幅放大(Amplitude Amplification)^[87-88]、求解线性方程组的量子算法^[89]、绝热优化算法^[90]的应用上取得了进展^[91], 其中量子机器学习和量子数据挖掘算法是量子算法研究的关键领域^[92], 为此, 微软公司在其量子开发套件(Microsoft Quantum Development Kit)中推出了 Q# 语言专门用于量子计算程序开发。量子启发算法是可用于经典计算机的新型智能算法, 以量子进化算法(Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms, QIEAs)中具有代表性的量子遗传算法(Quantum-Inspired Generic Algorithm, QIGA)为例^[93-94], 在遗传算法中引入量子计算中的量子比特进行编码, 采用随机数模拟测量, 利用量子门变换矩阵进行种群更新, 能够在较小种群规模下快速收敛到全局最优; 若将宇宙之间的量子纠缠特性和并行算法引入则可以进一步提高其运算效率^[95-98]。Kak 和 Chrisley 等^[99-108]提出的量子神经网络(Quantum-inspired Neural Networks, QINNs)也获得了广泛关注。此外, 人们还发展了带有量子启发特性的群智能算法, 如量子行为粒子群算法^[109]。这些量子启发算法充分体现了把量子物理概念用于新算法构建的思路, 量子启发下的智能计算已经成为提高人工智能水平的一个重要方向^[110]。一些物理学家^[111-112]甚至提出了宇宙

就是一台量子计算机的猜想,这给构建自然启发算法库的设想提供了更多有趣的思考^[113]。

总而言之,通过不同学科的启迪,人们已经获得了大量的自然启发算法,文献[114-118]发表了一系列专著,对不同自然启发算法的流程、数学结构进行了总结。如果继续将不同学科中的各种现象进行归纳,则可能在其中获得新启发,产生新算法。若能进一步收集整理组合已有算法和高通量方式所产生的新算法,则建成大型开放且可实时扩充的算法库——NIAL是完全可行的,如图1所示。可以预见,从获得启发到编制有应用价值的新算法并收录入算法库,到最终对用户开放,还需要一系列复杂的系统性工作,包括对大量算法的集成处理,运用数学工具分析算法的收敛性、时间和空间复杂度等本征特性,判断算法的适用性。以下将简述自然启发算法库的实现流程和主要特点。

2 实现的方法和步骤

按照设想,在建立自然启发算法库的具体工作中,除开发算法库架构以及用户交互界面系统等必要应用软件外,还需要包含七个主要内容,如图2所示。

第一,整理文献已报道的自然启发算法,将标准程序(如 C++、Fortran、Java 代码)和数学分析结果写入算法库。编写与其他通用算法库之间的接口程序,实现算法库的开放性,编制面向用户的安装、

输入、输出和算法搜索、存储、分析、推荐的工具软件系统。第一步并不产生完全原始创新的新算法,却包括了对已有算法的归纳、分析及各种功能,对用户极其重要,是 NIAL 启动重要的一步;

第二,在不同学科专家提出的特征自然现象的启发下,大批量的产生新型算法的启发设想,准备写入算法库;

第三,对获得的启发算法进行查重类比,分析其内在逻辑关系,根据相应数学结构判定是否为新算法(排除冗余算法),若是则进行第四步,否则回归至第二步;

第四,将其基本代码(或程序流程)存储入算法库,解析其严格的数学形式,分析收敛性及相应条件,进行必要的数学证明,计算出算法的时间复杂度和空间复杂度;

第五,进一步分析新算法,通过若干典型实例实验,找到其适用的数学问题(排序、递归、最优解等)或工程问题(面部识别、股票行为预测等),将其主要思想和优势存储入算法库,并给予在不同问题下的预估评价;

第六,启用多算法杂化、并行化、设计相应量子启发算法,或者利用超启发式算法(Hyper-Heuristic Algorithm)^[119]进行应用和融合等方式对新算法进行升级改进,分析改进算法变体的合理性和数学结构(如第四、五步);一个典型的例子是,人们在人工神经网络算法中利用遗传算法优化权重,可以提高人工神经网络的预测能力^[120];

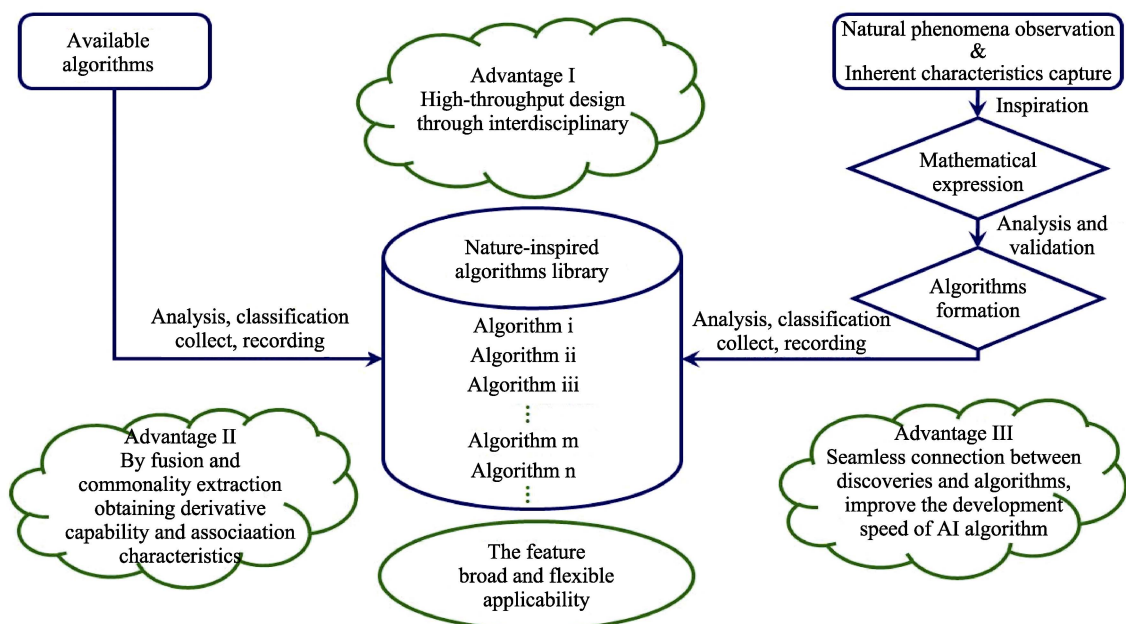


图1 算法构建流程

Fig. 1 Process for algorithms construction

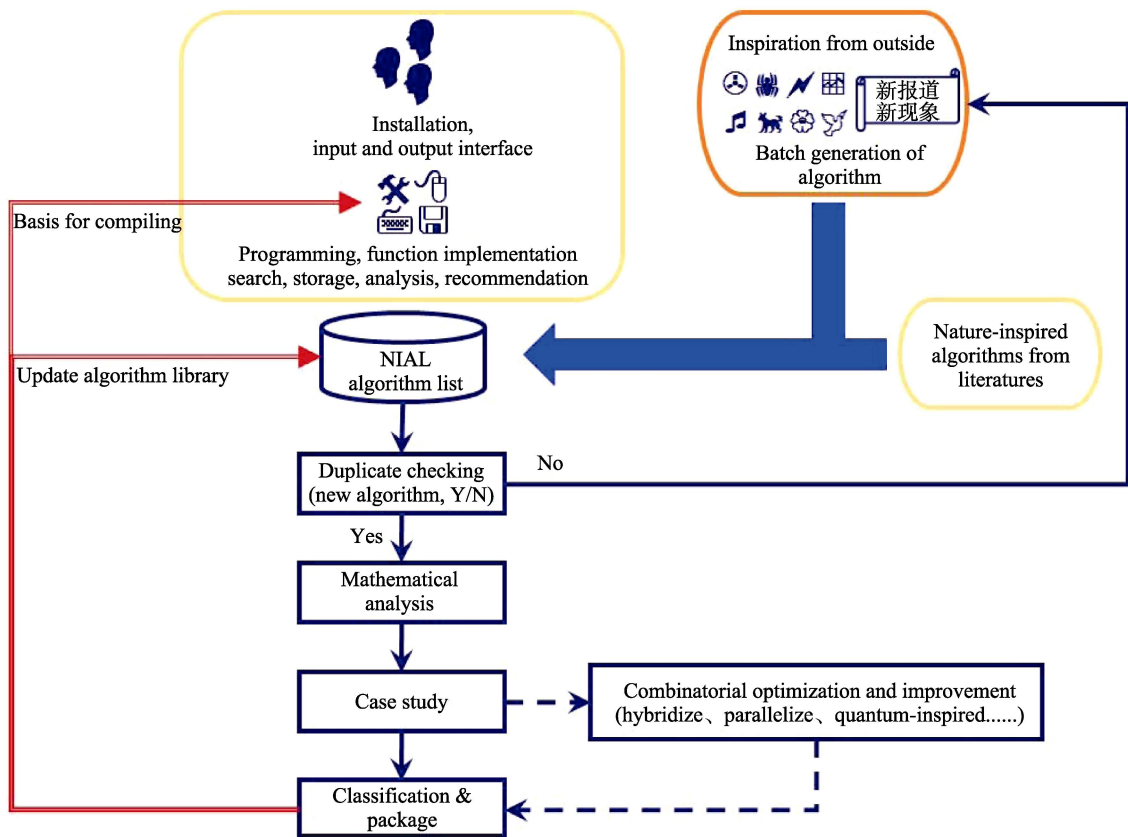


图 2 自然启发算法库平台开发流程

Fig. 2 Development process for the nature-inspired algorithms library platform

第七, 将新算法进行归类, 更新算法库的树状结构或者网状结构, 改进后的算法变体可置于结构末端, 便于使用者搜索查询选择。尤其是针对人工智能这一目标, 可以根据统计学习, 关联分析, 聚类等不同算法功能进行归类^[121]。

以上步骤中, 第二、三步为产生原始创新算法的步骤, 第四至七步为分析步骤, 其中第六步可以在算法库建设过程中逐步完善, 并非必须。各种分析结果存储后, 可为算法分析软件编制提供依据, 用于第一步。另外, NIAL 是一个完全开放并不断成长的系统, 当自然启发算法库形成一定规模以后, 为了便于建设或推广, 在实际操作中, 可以利用数据云平台网络共享技术实现多方联合交互的同时缓解硬件需求压力^[122-123]。人们还可以通过不同方式将 NIAL 的部分子集(即以算法的不同应用领域适用性分类)集中封装, 针对材料学中的常用问题, 发展材料学研究的自然启发算法程序集。这种方式的目的性较强, 推荐算法库的推广者和用户方采用。另一种思路是, 根据启发的来源学科进行分类^[124], 可以衍生出仿生物学算法、仿人类行为学算法、仿心理学算法、仿化学算法等, 即以算法的不同来源分类分库。这样分库的好处在于便于各学科的研究人

员集中利用其知识背景, 快速产生大量的新算法初步设想, 推荐算法库的建设升级方采用。

不难想象, 这样一个算法库的开发, 所需工作异常复杂, 需要多学科大量的科研工作人员共同参与才能有序推进。为了更好的认识自然启发算法库, 下面介绍该算法库的一系列优势和特点。

3 设想的优势和特点

我们认为, 建立自然启发算法库平台有如下优势和特点(图 1)。

其一, 人们可以大批量产生原始创新的算法, 只需要算法设计者把握不同学科中的各种特征行为进行模仿即可, 很容易通过学科交叉交流实现, 未来也有望由计算机自主机器学习取代。这种以其他学科主导启动新算法设计的方式, 完全摆脱了计算机从业人员对其他领域学科认知不足的限制, 甚至有发展出全民参与人工智能开发的可能性。另外, 传统仿生算法的研究方式, 一般是以解决具体工程问题(如求最优解问题)为目的, 尝试性地探寻与该问题相关的算法, 而本文中自然启发算法库的设想是先产生新算法, 并探讨其成为算法的可能性和适

用范围,再用于工程问题,新算法的研究在具体工程问题提出之前完成,再辅以算法分析数据和推荐工具软件的协助,有望缩短面对工程问题时研发选择算法的时间。即自然启发算法库产生的新算法无论从广度上还是应用速度上都有明显的优势。

其二,建设算法库过程中的一些独特步骤使得该方法产生的新算法有特殊的自我衍生能力和关联特性。通过量子启发算法和自然启发算法的融合,可以为量子计算应用做好铺垫。此外,因为不同的事物 A 和 B 之间可以通过共享某一种在算法库中的自然启发算法而建立链接(而非仅仅依赖于数据结构和数学结构),因此根据自然启发算法库可以建立特征性的相似关联系统,大幅度丰富不同事物之间的关系网络,有望助力智能联想的开发。

其三,随着科学的进步,新的自然现象在不断被发现和更新,但由于学科壁垒的存在,智能算法工作者难以掌握最新的科技进展,必然导致最新发现的物理行为与其相应的算法生成之间的时间差(算法发现远远落后于物理现象的发现)。而根据自然启发算法库设想,人们可以在第一时间把最新的科学发现用于算法生成(算法转化的需求可直接由新现象的发现者本人在第一时间提出)或修正,新算法与新发现之间几乎可以无缝连接,有望极大提升人工智能算法的开发效率。

值得说明的是,除了前人介绍的在多向搜索、演化算符、随机性、跳出局部最优、适应条件等方面的一些共性特征^[114],自然启发算法库收录的算法还可能存在一个有趣的特点:在数学上越不完整,越依赖于经验学科所产生的算法可能反而越有应用前景。这是因为,若某一行为背后的物理机制已经十分清楚,其数学结构已经明朗,由于新算法本质是新的逻辑结构,明晰的数学结构反而会限制其启发出的新算法的创新性。可以看到,人们已经发展出的自然启发算法多根据一些难以用具体数学计算描述的物理行为获得,如各类群智能算法、进化算法^[125-126],其背后的种群猎食、生物遗传等生物行为都难以用精准的数学语言描述。然而,这也并非绝对;针对黑洞这一天文现象,物理学家早已在广义相对论框架下建立了黑洞数学模型^[127-129],霍金提出的黑洞蒸发理论^[130]也是数学论证,却并不影响人们继续模仿黑洞现象,提出解决寻优问题的黑洞算法^[54-55];前文提及的量子算法也属于此类。总之,针对不同问题,既可以直接采用相应现象的物理学逻辑和数据结构,也可以用唯象方式进行。若采用唯象的方式,人们需“忘记”该行为的数学规律,从现象本身出发诱导出新算法。

理解了自然启发算法库设想下算法构建的基本手段,回到材料科学,不难看出其在现有材料基因组工程上应用的广阔前景。近年来,新材料产业的开发如火如荼,对二维纳米材料、拓扑材料、超材料的研究蓬勃展开,新形势下的材料基因组工程技术的发展有必要起到引领新材料设计思想和方法的作用。新型高性能材料的设计终究是一个在多重约束条件下的多目标优化问题^[131],需要计算机系统能够拥有自我学习及推断的能力(包括归纳、发现、关联、抽象能力等)及与此相关的算法技术(包括寻优、聚类、策略分析、回归分析、关联分析等^[132-133]),在建模过程中,需要通过选择基于物理机制驱动的硬计算、现有非精确知识驱动的模糊逻辑方法,以及基于数据驱动的软计算对材料的性质与行为进行预测。图 3 展示了材料建模的几种方式。无论采用何种建模模式,材料工作者均需要根据当前材料科学问题进行归纳得出相应的算法需求,再根据自然启发算法库提供的算例、算法分类、特征信息(由算法库步骤中第四步到第七步提供),利用关键字搜索等方式,或由算法库提供的人机互动式分析工具软件进行筛选定位,获取推荐算法及相应代码和使用说明。

当选择基于物理建模的硬计算方法时,对于连续或一致的多尺度计算方法,可以在计算方法中采用自然启发算法库中的新算法或把已有的在不同尺度算法(如纳观和微观尺度的密度泛函理论或分子动力学方法,介观尺度的相场理论或位错动力学方法,宏观尺度的有限元方法等)与新算法结合运用,在密度泛函发展、结构设计和优化、矩阵运算、数学变换、经验力场构建、各类方程求解中采用自然启发算法库中的各类优化算法。基于非精确知识驱动的模糊逻辑方法主要通过构建模糊推断系统,利用已知但并不一定精确的材料学知识,预测新材料的可能研发方向,进而用于指导新型组分、结构与制备工艺的开发^[134]。模糊推断系统由模糊化器,模糊推断引擎,以及去模糊化器三部分组成,将先前的已知知识先进行模糊化处理,进而利用模糊推断算法为不同新材料的选择与设计的可能方案赋予不同的概率,最后通过去模糊化器提出可能的新材料设计方案^[135-139]。可以在模糊化器和模糊推断引擎两个方面分别尝试利用自然启发算法库中的不同算法,并根据已确定的材料方案进行评估,探索出材料预测能力强的模糊处理方法中应采用的自然启发算法。

基于数据挖掘的软计算方法则主要用于实验设计^[140]和物理规律分析方面,其特点在于可以整合

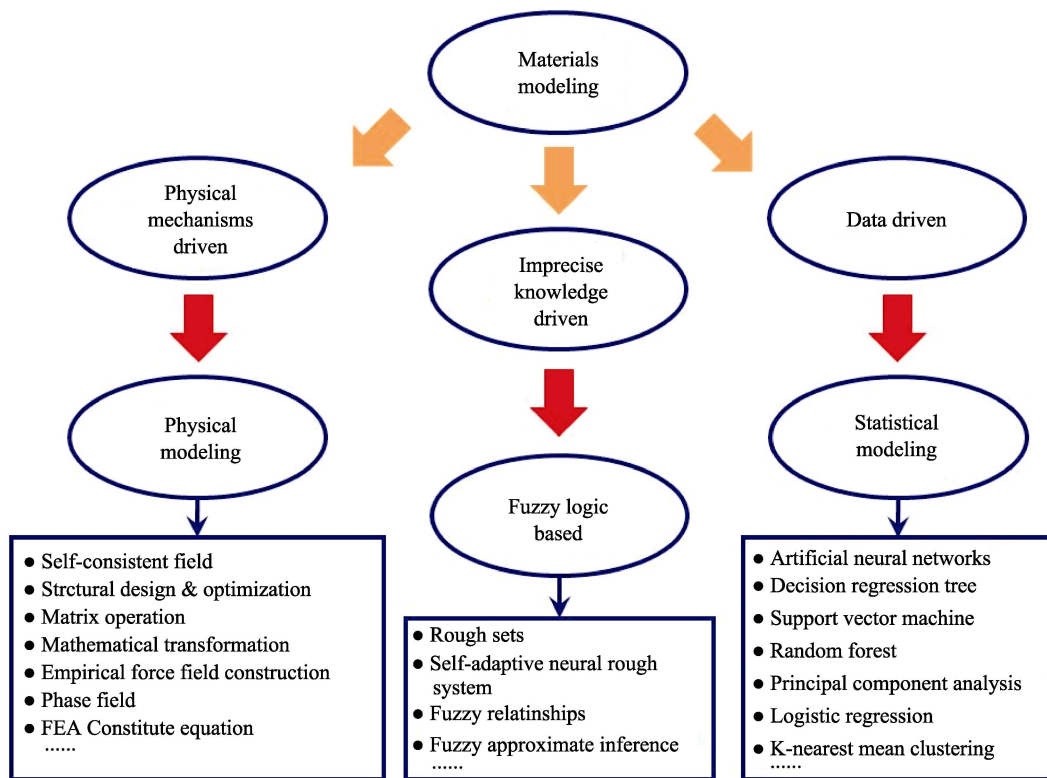


图 3 材料建模的不同方法与算法

Fig. 3 Methods and algorithms for material modeling

和处理分析大量实验和硬计算数据, 因此往往是高通量研究后的必要步骤。现实材料设计中的优化存在的难题包括: 1)需要满足多个优化目标; 2)各目标之间存在彼此相斥与对抗的特性^[141-142]; 3)优化目标与控制参数之间无显性数学关系, 无法获得解析解; 4)优化目标与控制参数之间的数学关系并非连续可导, 存在大量间断点。这些问题导致传统的优化手段及数值计算方法难以在短时间内获得多目标优化的关键手段之一^[143]。实际工作中, 需要首先针对不同数据量、数据分布的非线性程度选择人工神经网络、支持向量机, 决策树等对应数据挖掘方法^[144], 凝练相应的数学本质和计算需求, 从自然启发算法库中的优化算法进行选择, 比较新算法和传统算法在解决相应问题方面的效率, 分析在跳出局部最优和收敛性等问题上两者的差异, 判断新算法, 提升数据挖掘效率的适用范围, 并反馈给自然启发算法库。随着数据积累, 这种反馈将为提高新材料研发效率提供新的支撑条件, 同时也推动了自然启发算法库本身的不断扩充和完善。

4 结束语

基于人工智能方法在材料基因组工程领域的发

展现状, 本文提出了建立“自然启发算法库”这一融合已有自然启发算法并大量产生新算法的设想。其主要内容为, 从自然界中的各个现象中获得启发, 模仿物理世界中的种种行为, 以高通量的方式产生新的自然启发算法, 和已有算法组合形成算法库。利用该算法库, 既可以发展材料基因组工程技术, 开发和优化新型材料, 又可以为发展人工智能、物联网技术提供新手段。文中给出了这一设想的基本步骤和特点, 并对其在材料科学中的应用进行了展望。最后需要指出的是, 该设想尚处于概念时期, 实施前仍需要大量的工作对其进行修正和细化; 但可以确信, 本文能够成为人们利用“自然启发算法库”开发新算法, 并推广其应用的一个开端。

参考文献:

- [1] XIANG X D, SUN X, BRICEÑO G, *et al.* A combinatorial approach to materials discovery. *Science*, 1995, **268**(5218): 1738.
- [2] ZHU J, HUANG H Y, XIE J X. Recent progress and new ideas for accelerating research in rare earth steel. *Journal of Iron and Steel Research*, 2017, **29**(7): 513-529.
- [3] RAMAKRISHNA S, ZHANG T, LU W, *et al.* Materials informatics. *Journal of Intelligent Manufacturing*, **2018**(5): 1-20.
- [4] LIU Z, LI Y, SHI D, *et al.* The development of cladding materials for the accident tolerant fuel system from the Materials Genome Initiative. *Scripta Materialia*, 2018, **143**: 129-136.
- [5] LIN HAI Z J L Y. The development of material genome technol-

- ogy in the field of new energy materials. *Energy Storage Science and Technology*, 2017, **6(5)**: 990.
- [6] WHITE A A. Big data are shaping the future of materials science. *Mrs Bulletin*, 2013, **38(8)**: 594–595.
- [7] WARD L, AGRAWAL A, CHOUDHARY A, *et al.* A general-purpose machine learning framework for predicting properties of inorganic materials. *npj Computational Materials*, 2016, **2**: 16028–1–7.
- [8] MOUNET N, GIBERTINI M, SCHWALLER P, *et al.* Two-dimensional materials from high-throughput computational exfoliation of experimentally known compounds. *Nature Nanotechnology*, 2018, **13(3)**: 246–252.
- [9] XU S, LI X, ZHAO Y, *et al.* Two-dimensional semiconducting boron monolayers. *Journal of the American Chemical Society*, 2017, **139(48)**: 17233–17236.
- [10] TAN T L, JIN H M, SULLIVAN M B, *et al.* High-throughput survey of ordering configurations in MXene alloys across compositions and temperatures. *ACS Nano*, 2017, **11(5)**: 4407–4418.
- [11] ZHOU J, LIN J, HUANG X, *et al.* A library of atomically thin metal chalcogenides. *Nature*, 2018, **556(7701)**: 355.
- [12] LAWSON C L, HANSON R J, KINCAID D R, *et al.* Basic linear algebra subprograms for Fortran usage. *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)*, 1979, **5(3)**: 308–323.
- [13] ANDERSON E, BAI Z, BISCHOF C, *et al.* LAPACK Users' Guide. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA. Society for Industrial and Applied Mathematics, 1999.
- [14] SANDERSON C, CURTIN R. Armadillo: a template-based C++ library for linear algebra. *Journal of Open Source Software*, 2016.
- [15] INTEL. Intel® Math Kernel Library Developer Reference, 2017.
- [16] DEMMEL J W, HEATH M T, VAN DER VORST H A. Parallel numerical linear algebra. *Acta Numerica*, 1993, **2**: 111–197.
- [17] KETTNER L, N A HER S, GOODMAN J E, *et al.* Two Computational Geometry Libraries: LEDA and CGAL. *Handbook of Discrete and Computational Geometry*, Chapman & Hall/CRC, 2004: 1435–1463.
- [18] PULLI K, BAKSHEEV A, KORNYAKOV K, *et al.* Real time computer vision with OpenCV. *Queue*, 2012, **10(4)**: 40.
- [19] CHAKRABORTI N. Genetic algorithms in materials design and processing. *International Materials Reviews*, 2004, **49(3/4)**: 246–260.
- [20] PASZKOWICZ W. Genetic algorithms, a nature-inspired tool: survey of applications in materials science and related fields. *Materials and Manufacturing Processes*, 2009, **24(2)**: 174–197.
- [21] HKDH B. Neural networks in materials science. *ISIJ international*, 1999, **39(10)**: 966–979.
- [22] BHADESHIA H. Neural networks and information in materials science. *Statistical Analysis and Data Mining: The ASA Data Science Journal*, 2009, **1(5)**: 296–305.
- [23] BHADESHIA H, DIMITRIU R C, FORSIK S, *et al.* Performance of neural networks in materials science. *Materials Science and Technology*. 2009, **25(4)**: 504–510.
- [24] ZHANG Y M, YANG S, EVANS J. Revisiting Hume-Rothery's rules with artificial neural networks. *Acta Materialia*, 2008, **56(5)**: 1094–1105.
- [25] ZHANG Y M, EVANS J, YANG S F. Detection of material property errors in handbooks and databases using artificial neural networks with hidden correlations. *Philosophical Magazine*, 2010, **90(33)**: 4453–4474.
- [26] ZHANG Y, EVANS J R, YANG S. Corrected values for boiling points and enthalpies of vaporization of elements in handbooks. *Journal of Chemical and Engineering Data*, 2011, **56(2)**: 328–337.
- [27] ZHANG Y M, UBIC R, XUE D F, *et al.* Predicting the structural stability and formability of ABO₃-type perovskite compounds using artificial neural networks. *Materials Focus*, 2012, **1(1)**: 57–64.
- [28] NADEAU R, CLOUTIER E, GUAY J. New evidence about the existence of a bandwagon effect in the opinion formation process. *International Political Science Review*, 1993, **14(2)**: 203–213.
- [29] EARMAN J, MOSTERIN J. A critical look at inflationary cosmology. *Philosophy of Science*, 1999, **66(1)**: 1–49.
- [30] TRIMBLE V. Existence and nature of dark matter in the universe. *Annual Review of Astronomy & Astrophysics*, 1987, **25(1)**: 425–472.
- [31] EINSTEIN A, PODOLSKY B, ROSEN N. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? *Phys. Rev.*, 1935, **47**: 777–780.
- [32] SHANNON C E. A mathematical theory of communication. *The Bell System Technical Journal*, 1948, **27(3)**: 379–423.
- [33] YANG X. A New Metaheuristic Bat-inspired Algorithm. *Nature Inspired Cooperative Strategies for Optimization (NICSO 2010)*, Springer, 2010: 65–74.
- [34] KHAN K, SAHAI A. A comparison of BA, GA, PSO, BP and LM for training feed forward neural networks in e-learning context. *International Journal of Intelligent Systems and Applications*, 2012, **4(7)**: 23.
- [35] BEKDA C S G, NIGDELI S M, YANG X. A novel bat algorithm based optimum tuning of mass dampers for improving the seismic safety of structures. *Engineering Structures*, 2018, **159**: 89–98.
- [36] KHACHATURYAN A, SEMENOVSKAYA S, VAINSTEIN B. Statistical-thermodynamic approach to determination of structure amplitude phases. *Sov. Phys. Crystallography*, 1979, **24(5)**: 519–524.
- [37] KHACHATURYAN A, SEMENOVSKAYA S, VAINSHTEIN B. The thermodynamic approach to the structure analysis of crystals. *Acta Crystallographica Section A: Crystal Physics, Diffraction, Theoretical and General Crystallography*, 1981, **37(5)**: 742–754.
- [38] KIRKPATRICK S, GELATT C D, VECCHI M P. Optimization by simulated annealing. *Science*, 1983, **220(4598)**: 671–680.
- [39] ANDERSON H L, METROPOLIS. Monte Carlo and the Maniac. *Los Alamos Science*, 1986, **14(14)**: 96–108.
- [40] BABAI L A S O. Monte-Carlo Algorithms in Graph Isomorphism Testing. Université de Montréal Technical Report, DMS, 1979.
- [41] LEVIN L A. The tale of one-way functions. *Problems of Information Transmission*, 2003, **39(1)**: 92–103.
- [42] GRUNDY D. Concepts and Calculation in Cryptography. Cite-seer, 2008.
- [43] QUINLAN J R. Induction of decision trees. *Machine Learning*, 1986, **1(1)**: 81–106.
- [44] QUINLAN J R. C4.5: Programs for Machine Learning. Elsevier, 2014.
- [45] COULOM R E M. Efficient Selectivity and Backup Operators in Monte-Carlo Tree Search. Springer, 2006: 72–83.
- [46] KOCSIS L, SZEPESV A RI C. Bandit Based Monte-Carlo Planning. Springer, 2006: 282–293.
- [47] SILVER D, HUANG A, MADDISON C J, *et al.* Mastering the game of Go with deep neural networks and tree search. *Nature*, 2016, **529(7587)**: 484–489.
- [48] SILVER D, SCHRITTWIESER J, SIMONYAN K, *et al.* Mastering the game of go without human knowledge. *Nature*, 2017, **550(7676)**: 354.
- [49] LIU Y H, ZHANG W, FAN L. Ecological Pyramid Particle Swarm Optimization. *Computer Science*, 2017, **44(10)**: 237–244.
- [50] RAO R V, SAVSANI V J, VAKHARIA D P. Teaching-learning-based optimization: a novel method for constrained mechanical design optimization problems. *Computer-Aided Design*,

- 2011, **43(3)**: 303–315.
- [51] RAO R V, SAVSANI V J, VAKHARIA D P. Teaching-learning-based optimization: an optimization method for continuous non-linear large scale problems. *Information Sciences*, 2012, **183(1)**: 1–15.
- [52] TUO S, YONG L, DENG F. Survey of teaching-learning-based optimization algorithms. *Application Research of Computers*, 2013, **30(7)**: 1933–1938.
- [53] BI X, WANG J. Teaching-learning-based optimization algorithm with hybrid learning strategy. *Journal of Zhejiang University (Engineering Science)*, 2017, **51(5)**: 1024–1031.
- [54] ZHANG J, LIU K, TAN Y, *et al.* Random Black Hole Particle Swarm Optimization and Its Application. *IEEE*, 2008: 359–365.
- [55] HATAMLOU A. Black hole: a new heuristic optimization approach for data clustering. *Information Sciences*, 2013, **222**: 175–184.
- [56] WARNANA D D, OTHERS. Black hole algorithm for determining model parameter in self-potential data. *Journal of Applied Geophysics*, 2018, **148**: 189–200.
- [57] MA L, ZHU Y, LIU Y, *et al.* A novel bionic algorithm inspired by plant root foraging behaviors. *Applied Soft Computing*, 2015, **37**: 95–113.
- [58] DAN S. Biogeography-based optimization. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*. 2008, **12(6)**: 702–713.
- [59] WESCHE T, GOERTLER C, HUBERT W. Modified habitat suitability index model for brown trout in Southeastern Wyoming. *North American Journal of Fisheries Management*, 1987, **7(2)**: 232–237.
- [60] WANG C, WANG N, DUAN X, *et al.* Survey of Biogeography-based Optimization. *Computer Science*, 2010, **37(7)**: 34–38.
- [61] MA H, SIMON D, SIARRY P, *et al.* Biogeography-based optimization: a 10-year review. *IEEE Transactions on Emerging Topics in Computational Intelligence*, 2017, **1(5)**: 391–407.
- [62] BENIOFF P. The computer as a physical system: a microscopic quantum mechanical Hamiltonian model of computers as represented by Turing machines. *Journal of Statistical Physics*, 1980, **22(5)**: 563–591.
- [63] FEYNMAN R P. Simulating physics with computers. *International Journal of Theoretical Physics*, 1982, **21(6/7)**: 467–488.
- [64] DEUTSCH D. Quantum theory, the Church-Turing principle and the universal quantum computer. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 1985, **400(1818)**: 97–117.
- [65] JOHNSON M W, AMIN M H, GILDERT S, *et al.* Quantum annealing with manufactured spins. *Nature*, 2011, **473(7346)**: 194.
- [66] VENTURELLI D, MANDRA S, KNYSH S, *et al.* Quantum optimization of fully connected spin glasses. *Physical Review X*, 2015, **5(3)**: 31040.
- [67] BUNYK P I, HOSKINSON E M, JOHNSON M W, *et al.* Architectural considerations in the design of a superconducting quantum annealing processor. *IEEE Transactions on Applied Superconductivity*, 2014, **24(4)**: 1–10.
- [68] WANG H, HE Y, LI Y H, *et al.* High-efficiency multiphoton boson sampling. *Nature Photonics*, 2017, **11(6)**: 361–365.
- [69] LIANG Q Y, VENKATRAMANI A V, CANTU S H, *et al.* Observation of three-photon bound states in a quantum nonlinear medium. *Science*, 2018, **359(6377)**: 783.
- [70] GOOGLE R. A Preview of Bristlecone, Google's New Quantum Processor.
- [71] BECKMAN D, CHARI A N, DEVABHAKTUNI S, *et al.* Efficient networks for quantum factoring. *Physical Review A*, 1996, **54(2)**: 1034–1063.
- [72] GROVER L K. A Fast Quantum Mechanical Algorithm for Database Search. *STOC'96 Proceedings of the twenty-annual ACM Symposium on Theory of Computing*, 1996: 212–219.
- [73] GROVER L K. From Schrödinger's equation to the quantum search algorithm. *Pramana*, 2001, **56(2/3)**: 333–348.
- [74] GROVER L K. Quantum computing. *Sciences*, 1999, **39(4)**: 24–30.
- [75] AKL M N S G. *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge University Press, 2000: 558–559.
- [76] SIMON D R. On the Power of Quantum Computation. *Society for Industrial and Applied Mathematics*, 1997: 1759–1768.
- [77] PASCAL KOIRAN V N, PORTIER N. A quantum lower bound for the query complexity of Simon's problem. *Lecture Notes in Computer Science*, 2005, **3580(1)**: 1287–1298.
- [78] JOZSA R. Quantum factoring, discrete logarithms, and the hidden subgroup problem. *Computing in Science & Engineering*, 2000, **3(2)**: 34–43.
- [79] SHOR P W. Polynomial-Time Algorithms for Prime Factorization and Discrete Logarithms on a Quantum Computer. 1999: 303–332.
- [80] BUHLER J P, JR H W L, POMERANCE C. Factoring integers with the number field sieve. *OAI*, 1993, **5(3)**: 231–253.
- [81] LENSTRA A K, JR H W L. *The Development of the Number Field Sieve*. Springer-Verlag, 1993: 564–572.
- [82] MONTANARO A. Quantum algorithms: an overview. *npj Quantum Information*, 2016, **2**: 15023–1–17.
- [83] GROVER L K. Quantum mechanics helps in searching for a needle in a haystack. *Phys. Rev. Lett.*, 1997, **79(2)**: 325–328.
- [84] BOYER M, BRASSARD G, H YER P, *et al.* Tight Bounds on Quantum Searching. *Wiley - VCH Verlag GmbH & Co. KGaA*, 1998: 493–505.
- [85] AMBAINIS A, CHILDS A M, REICHARDT B W, *et al.* Any AND-OR Formula of Size N can be Evaluated in time $N^{1/2+o(1)}$ on a Quantum Computer. 2007: 363–372.
- [86] SUN X, YAO A C, ZHANG S. Graph Properties and Circular Functions: How Low Can Quantum Query Complexity Go? 2004: 286–293.
- [87] BRASSARD G, HØYER P, MOSCA M, *et al.* Quantum amplitude amplification and estimation. *Quantum Computation & Information*. 2002, **5494**: 53–74.
- [88] SCHÖNING U. A Probabilistic Algorithm for k-SAT and Constraint Satisfaction Problems. 1999: 410.
- [89] HARROW A W, HASSIDIM A, LLOYD S. Quantum algorithm for linear systems of equations. *Physical Review Letters*, 2009, **103(15)**: 150502.
- [90] FARHI E, GOLDSTONE J, GUTMANN S, *et al.* Quantum Computation by Adiabatic Evolution. *Quantum Physics*, arxiv: quant-ph/0001106.
- [91] SUN X. A survey on quantum computing. *Scientia Sinica Informationis*, 2016, **46(8)**: 982.
- [92] WITTEK P. *Quantum Machine Learning: What Quantum Computing Means to Data Mining*. Academic Press, 2014.
- [93] NARAYANAN A, MOORE M. Quantum-inspired Genetic Algorithms. 1996: 61–66.
- [94] HAN K H, KIM J H. Quantum-inspired evolutionary algorithm for a class of combinatorial optimization. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 2002, **6(6)**: 580–593.
- [95] YANG J, ZHUANG Z, SHI L. Multi-universe parallel quantum genetic algorithm. *Acta Electronica Sinica*, 2004, **32(6)**: 923–928.
- [96] CHEN H, ZHANG J, ZHANG C. Chaos Updating Rotated Gates Quantum-inspired Genetic Algorithm. 2004: 1108–1112.
- [97] WANG L, TANG F, WU H. Hybrid genetic algorithm based on quantum computing for numerical optimization and parameter estimation. *Applied Mathematics and Computation*, 2005, **171(2)**:

- 1141–1156.
- [98] WANG L. Advances in quantum-inspired evolutionary algorithms. *Control and Decision*, 2008, **23(12)**: 1321–1326.
- [99] PYLLKKÄNEN P, PYLLKKÖ P. New Directions in Cognitive Science. Creating Consilience: Integrating the Sciences & the Humanities. 1995.
- [100] KAK S. On Quantum Neural Computing. Elsevier Science Inc., 1995: 143–160.
- [101] KAK S C. The Three Languages Of The Brain: Quantum, Reorganizational, and Associative. 1996: 185–219.
- [102] GAUTAM A, KAK S. Symbols, meaning, and origins of mind. *Biosemiotics*, 2013, **6(3)**: 301–310.
- [103] DA SILVA A J E, LUDERMIR T B, DE OLIVEIRA W R. Quantum perceptron over a field and neural network architecture selection in a quantum computer. *Neural Networks*, 2016, **76**: 55–64.
- [104] PANELLA M, MARTINELLI G. Neural networks with quantum architecture and quantum learning. *International Journal of Circuit Theory & Applications*, 2011, **39(1)**: 61–77.
- [105] SCHULD M, SINAYSKIY I, PETRUCCIONE F. The quest for a Quantum Neural Network. *Quantum Information Processing*, 2014, **13(11)**: 2567–2586.
- [106] PATEL O, TIWARI A, PATEL V, *et al.* Quantum Based Neural Network Classifier and Its Application for Firewall to Detect Malicious Web Request. 2015: 67–74.
- [107] LI J. Quantum-inspired neural networks with application. *Open Journal of Applied Sciences*, 2015, **5(6)**: 233–239.
- [108] ALTAISKY M V, KAPUTKINA N E, KRYLOV V A. Quantum neural networks: current status and prospects for development. *Physics of Particles & Nuclei*. 2014, **45(6)**: 1013–1032.
- [109] FANG W, SUN J, XIE Z, *et al.* Convergence analysis of quantum-behaved particle swarm optimization algorithm and study on its control parameter. *Acta Physica Sinica*, 2009, **6(59)**: 3686–3694.
- [110] MANJU A, NIGAM M J. Applications of quantum inspired computational intelligence: a survey. *Artificial Intelligence Review*, 2014, **42(1)**: 79–156.
- [111] HOOFT G T. The cellular automaton interpretation of quantum mechanics. *Physics Today*, 2017, **70(7)**: 60.
- [112] LLOYD S. A theory of quantum gravity based on quantum computation. *Quantum Physics*, 2018.
- [113] YING M. Recent progress in the research of quantum programming. *Communications of the CCF*, 2017, **13(1)**: 21–27.
- [114] PATNAIK S, YANG X, NAKAMATSU K. Nature-Inspired Computing and Optimization: Theory and Applications. Springer, 2017.
- [115] YANG X. Nature-inspired Computation in Engineering. Springer, 2016.
- [116] CHIONG R. Nature-inspired Algorithms for Optimisation. Springer, 2009.
- [117] DU K, SWAMY M. Search and Optimization by Metaheuristics: Techniques and Algorithms Inspired by Nature. Birkhäuser, 2016.
- [118] YANG X. Nature-inspired Metaheuristic Algorithms. Luniver Press, 2010.
- [119] BURKE E, KENDALL G, NEWALL J, *et al.* Hyper-heuristics: An Emerging Direction in Modern Search Technology. Handbook of Metaheuristics, Springer, 2003: 457–474.
- [120] DELORME A. Genetic Algorithm for Optimization of Mechanical Properties. Technical report, University of Cambridge, 2003.
- [121] HAN J, PEI J, KAMBER M. Data Mining: Concepts and Techniques. Elsevier, 2011.
- [122] FOSTER I, ZHAO Y, RAICU I, *et al.* Cloud Computing and Grid Computing 360-degree Compared. IEEE, 2008: 1–10.
- [123] ZHANG Q, CHENG L, BOUTABA R. Cloud computing: state-of-the-art and research challenges. *Journal of Internet Services and Applications*, 2010, **1(1)**: 7–18.
- [124] FISTER JR I, YANG X, FISTER I, *et al.* A brief review of nature-inspired algorithms for optimization. *Elektrotehniški Vestnik*, 2013, **80(3)**: 116–122.
- [125] YANG X. Recent Advances in Swarm Intelligence and Evolutionary Computation. Springer, 2015.
- [126] YANG X, KARAMANOGLU M. Swarm Intelligence and Bio-inspired Computation: An Overview. Swarm Intelligence and Bio-Inspired Computation, Elsevier, 2013: 3–23.
- [127] REISSNER H. Über die eigengravitation des elektrischen Feldes nach der Einsteinschen theorie. *Annalen der Physik*, 1916, **355(9)**: 106–120.
- [128] SCHWARZSCHILD K. Über das Gravitationsfeld einer Kugel aus inkompressibler Flüssigkeit nach der Einsteinschen theorie. 1916.
- [129] DROSTE J. On the field of a single centre in Einstein's theory of gravitation. *Koninklijke Nederlandse Akademie van Wetenschappen Proceedings Series B Physical Sciences*, 1915, **17**: 998–1011.
- [130] HAWKING S W. Black hole explosions? *Nature*, 1974, **248(5443)**: 30–31.
- [131] DATTA S. Materials Design Using Computational Intelligence Techniques. Crc Press, 2015.
- [132] APOSTOLAKIS J. An introduction to data mining. *Structure & Bonding*, 2009, **134(472)**: 1–35.
- [133] PANGNING T, STEINBACH M, KUMAR V. Introduction to data mining. *Data Analysis in the Cloud*, 2014, **22(6)**: 1–25.
- [134] DATTA S, CHATTOPADHYAY P P. Soft computing techniques in advancement of structural metals. *International Materials Reviews*, 2013, **58(8)**: 475–504.
- [135] DATTA S, BANERJEE M K. Fuzzy modeling of strength-composition-process parameter relationships of HSLA steels. *Materials and Manufacturing Processes*, 2005, **20(5)**: 761–776.
- [136] DATTA S, MAHFOUF M, ZHANG Q, *et al.* Imprecise knowledge based design and development of titanium alloys for prosthetic applications. *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, 2016, **53**: 350–365.
- [137] DEY S, DEY P, DATTA S, *et al.* Rough set approach to predict the strength and ductility of TRIP steel. *Materials and Manufacturing Processes*, 2009, **24(2)**: 150–154.
- [138] SINGH J, GILL S S. Fuzzy modeling and simulation of ultrasonic drilling of porcelain ceramic with hollow stainless steel tools. *Materials and Manufacturing Processes*, 2009, **24(4)**: 468–475.
- [139] DEY S, DATTA S, CHATTOPADHYAY P P, *et al.* Modeling the properties of TRIP steel using AFIS: a distributed approach. *Computational Materials Science*, 2008, **43(3)**: 501–511.
- [140] DEGHANNASIRI R, XUE D, BALACHANDRAN P V, *et al.* Optimal experimental design for materials discovery. *Computational Materials Science*, 2017, **129**: 311–322.
- [141] GONG M, LI H, LUO E, *et al.* A multiobjective cooperative co-evolutionary algorithm for hyperspectral sparse unmixing. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 2017, **21(2)**: 234–248.
- [142] GONG M, WANG Z, ZHU Z, *et al.* A similarity-based multiobjective evolutionary algorithm for deployment optimization of near space communication system. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 2017, **21(6)**: 878–897.
- [143] YANG X S. Nature-Inspired Optimization Algorithms. Elsevier Science Publishers B. V., 2014: 1292.
- [144] WITTEN I H, FRANK E, HALL M A, *et al.* Data Mining: Practical Machine Learning Tools and Techniques. Morgan Kaufmann, 2016.