یک رویکرد مبتنی بر کشف جامعه در شبکه‌های اجتماعی برای بهبود تحلیل معادلات در علم مواد

راهله قوچان نژاد نورنیا[1] مهرداد جلالی[2] محبوبه هوشمند[3]

۱- محقق پسادکتری- گروه انفورماتیک پزشکی، دانشکده پزشکی، دانشگاه علوم پزشکی مشهد، مشهد، ایران
ghouchannezhadr4012@mums.ac.ir

۲- دانشیار- گروه مهندسی کامپیوتر، واحد مشهد، دانشگاه آزاد اسلامی، مشهد، ایران
mehrdad.jalali@iau.ac.ir

۳- استادیار- گروه مهندسی کامپیوتر، واحد مشهد، دانشگاه آزاد اسلامی، مشهد، ایران
Ma.houshmand@iau.ac.ir

چکیده: امروزه آلیاژهای آنتروپی بالا یکی از حوزه‌های محبوب برای محققان می‌باشند که عملکرد آنها با استفاده از یادگیری ماشین بهبود یافته‌اند. آلیاژهای آنتروپی بالا از حداقل پنج عنصر اصلی با اندازه‌های نزدیک به هم تشکیل شده‌اند که ویژگی‌های آنها به اندازه و انواع عناصر بستگی دارد تا خواص فیزیکی و مکانیکی را بهبود دهند. رویکرد یادگیری ماشین در زمینه‌های مختلف کاربردهای فراوانی دارد. تحلیل شبکه‌های اجتماعی یکی از ابزارهای یادگیری ماشین است که از نظریه گراف استفاده می‌کند. هر گراف از تعدادی گره و یال تشکیل شده است که هر گره دارای ویژگی‌های خاص خود است. کارهایی که تاکنون انجام شده است از مجموعه داده آلیاژ آنتروپی بالا شبکه مبتنی بر میزان نزدیکی محتوایی و ساختاری ویژگی‌های هر ترکیب استفاده نکرده‌اند. در این مقاله، روشی نوین ارائه شده است که ابزار شبکه اجتماعی را به مهندسی متالوژی و مواد تعمیم می‌دهد. روش پیشنهادی با استفاده از ابزار شبکه اجتماعی به بررسی خواص آلیاژهای آنتروپی بالا پرداخته است که شباهت آلیاژها محاسبه شده و بر اساس آن شبکه اجتماعی مواد ساخته شده است. با بکار بردن تکنیک الگوریتم لووین، گروه‌هایی از این آلیاژها استخراج شده است که هر گروه به نام خوشه دارای آلیاژهایی با خواص مشابه است. نتایج عملی بدست آمده، خوشه‌های با کیفیت بالایی را نشان می‌دهد که در پیش‌بینی عملکرد ترکیبات و کشف ترکیبات و ویژگی‌های جدید موثر خواهند بود. معیار پیمانگی که بیانگر کیفیت خوشه‌ها است حدود ۰/۷۰ بدست آمده است که در مقایسه با روش‌های موجود دارای کیفیت بالاتر است.

واژه‌های کلیدی: خوشه‌بندی، شبکه اجتماعی، کشف جامعه، یادگیری ماشین، آلیاژهای آنتروپی بالا

نوع مقاله: پژوهشی

DOI: 10.52547/jiaeee.21.1.135

تاریخ ارسال مقاله : ۱۴۰۱/۰۸/۱۸
تاریخ پذیرش مشروط مقاله: ۱۴۰۱/۰۹/۱۳
تاریخ پذیرش مقاله : ۱۴۰۱/۱۱/۰۱
نام نویسنده‌ی مسئول: دکتر مهرداد جلالی
نشانی نویسنده‌ی مسئول: ایران – مشهد – بلوار امامیه - خیابان استاد یوسفی – دانشگاه آزاد اسلامی مشهد – دانشکده‌ی مهندسی– گروه مهندسی کامپیوتر

[Downloaded from jiaeee.com on 2026-11-17]
[DOI: 10.61186/jiaeee.21.1.135]
Journal of Iranian Association of Electrical and Electronics Engineers Vol.21 No.1 Spring2024

۱- مقدمه

امروزه شبکه‌های اجتماعی در بسیاری از ابعاد زندگی روزمره انسان وارد شده‌اند که با استفاده از ابزارهای هوش مصنوعی و یادگیری ماشین تحلیل می‌شوند و اطلاعات مفیدی از این شبکه‌ها استخراج می‌شود. همانطور که تحلیل علوم مختلف با ابزار هوشمند منجر به کشف نتایج شگفت‌انگیزی شده است شبکه‌ها قابلیت نگاشت و استخراج اطلاعات ارزشمند را در حوزه‌های متفاوت دارند. هر شبکه، گراف $G\langle N,E\rangle$ است که N مجموعه‌ای از گره‌ها و E مجموعه‌ای از یال‌ها است و گراف کامل شبکه‌ای است که همه گره‌های آن به هم متصل هستند. هر گره دارای ویژگی‌هایی است که بر اساس آنها با سایر گره‌ها در ارتباط است. نوآوری این مقاله، ساخت یک شبکه تعاملی از ترکیب‌های شیمیایی آلیاژهای آنتروپی بالا است و با استفاده از ابزار تحلیل شبکه‌های اجتماعی، خوشه‌هایی از این شبکه استخراج می‌شود که شامل ترکیب‌های مشابه است.

آلیاژها به طور معمول از عنصر پایه تولید می‌شدند که اغلب یک عنصر و گاهی با دو عنصر اصلی از قبیل آهن یا نیکل در آلیاژها شروع می‌شود [۱]. در ترکیب آلیاژهای آنتروپی بالا، حداقل پنج عنصر اصلی با اندازه‌های نزدیک وجود دارد. با حداکثرسازی آنتروپی این آلیاژها، به آنها لقب آلیاژهای آنتروپی بالا گفته می‌شود. ویژگی‌های آلیاژهای آنتروپی بالا بستگی به اندازه و انواع عناصر آنها دارند تا بتوانند خواص فیزیکی و مکانیکی را گسترش دهند. اخیرا، با مخلوط کردن چند عنصر در یک ترکیب به طراحی آلیاژها پرداخته‌اند [۱] که به این آلیاژهای ترکیبی آلیاژهای آنتروپی بالا گفته می‌شود که توسط کانتور و همکارانش [۲] در سال ۲۰۰۴ معرفی شده است. با توجه به اینکه روش‌های پارامتریک برای قوانین پایداری فازها استفاده می‌شوند که نمودار دو بعدی ایجاد می‌کنند، یادگیری ماشین یکی از موثرترین روش‌ها در علوم متالوژی و مواد است [۳]. تکنیک‌های هوش مصنوعی می‌توانند مدل‌هایی را استخراج کنند که عملکرد آلیاژهای آنتروپی بالا را توسعه دهد. هر ترکیب شیمیایی آلیاژهای آنتروپی بالا[1] به عنوان گره‌ای در شبکه اجتماعی در نظر گرفته شده است که دارای ویژگی‌هایی است که برای ساخت شبکه تعاملی آلیاژی، به صورت ساختاری و محتوایی بررسی شده است.

در این مقاله، شباهت بین هر زوج ویژگی بین دو ترکیب محاسبه شده است و بر اساس آن شبکه تعاملی آلیاژی ساخته شده است. در این شبکه، هر گره نماینده یک ترکیب و هر یال بیانگر ارتباط بین دو ترکیب است. با استفاده از الگوریتم لووین به عنوان یکی از ابزارهای تحلیل شبکه اجتماعی، خوشه‌هایی استخراج شده است که شامل ترکیب‌های مشابه است. به هر خوشه یک جامعه گفته می‌شود که می‌توان عناصر سازنده، تعداد و اندازه عناصر و عملکرد ترکیب‌های مشابه تفسیر کرد. نتایج بدست آمده نشان می‌دهد این روش می‌تواند فاز هر ترکیب را پیش‌بینی کند و عملکرد آلیاژها را توسعه دهد و همچنین در کشف ویژگی‌ها و ترکیب‌های جدید موثر است.

در ادامه، در بخش دوم به مرور ادبیات در این زمینه پرداخته شده است و روش پیشنهادی در بخش سوم توضیح داده شده است. ارزیابی نتایج عملی در بخش چهارم نشان داده شده است. نتیجه‌گیری و کارهای آینده در بخش پنجم بیان شده است.

۲- مرور ادبیات

آلیاژهای آنتروپی بالا دارای ویژگی‌هایی هستند که آنها را منحصر به فرد ساخته است. نوآوری ساخت شبکه اجتماعی HEAها در این مقاله بیان شده است که با ابزار تحلیل شبکه‌های اجتماعی و یادگیری ماشین به استخراج خوشه‌هایی از آلیاژها پرداخته می‌شود.

در [۴] اهاجم و همکارانش، رویکرد LCDA را برای کشف جوامع از شبکه‌های اجتماعی ارائه دادند که گره‌هایی را به عنوان رهبر جامعه در نظر می‌گیرند و دارای دو فاز است که گام اول بازیابی رهبرهای هر خوشه است و گام دوم کشف جوامع با استفاده از شباهت بین گره‌ها است. این رهبران مسئولیت انتشار تاثیر در شبکه را به عهده دارند. آنها با استفاده از شباهت‌های جاکارد، سالتون، HDI و HPI مقایسه‌ای انجام داده‌اند که بیان کنند کدام روش محاسبه شباهت در الگوریتم پیشنهادی آنها بهتر عمل می‌کند و تاثیر ترکیبی روش‌های شباهت را بررسی نکرده‌اند [۴]. برچسبی در جوامع آنها پیش‌بینی نشده است و این جوامع مربوط به شبکه‌های اجتماعی انسانی هستند. همچنین از خواص و مجموعه داده HEAها استفاده نشده است [۴]. در [۵] اوزاکی و همکارانش، با اضافه کردن روش هرس کردن به الگوریتم لووین، زمان محاسبات را با حفظ کیفیت کشف جوامع انجام داده‌اند تا میزان کیفیت خوشه‌ها را در هر مرحله برای تمام گره‌ها حساب نکنند و محاسبه مجدد کیفیت را فقط برای گره‌هایی در نظر بگیرند که در فاز بعدی کشف جوامع تغییر خوشه می‌دهند. الگوریتم لووین بر روی شبکه‌هایی اعمال شده است که شباهت بین گره‌های آنها، بر اساس شباهت کسینوسی محاسبه شده است که شبکه اجتماعی آلیاژ را از لحاظ شباهت ساختاری و محتوایی بررسی نکرده‌اند تا بر اساس آن شبکه‌ای ساخته شود [۵].

در [۶] طباطبایی و همکارانش با استفاده از روش‌های انتخاب ویژگی درباره انحراف کاشی تولید شده تصمیم‌گیری می‌کنند. آنها سیستمی طراحی کرده‌اند که انحراف را با رگرسیون منطقی، جنگل تصادفی و ماشین بردار پشتیبان طبقه‌بندی می‌کند. پارامترهای موثر در انحراف را بررسی کرده‌اند و عمل پیش‌بینی را انجام داده‌اند. ویژگی‌های عناصر تشکیل‌دهنده کاشی مورد بررسی قرار نگرفته‌اند و بر اساس آن دسته بندی صورت نگرفته است. علیزاده و همکارانش در [۷] از ترکیب چهار الگوریتم کشف جوامع استفاده کرده‌اند که مبتنی بر مرکزیت بینابینی، روش تجمیعی و بهینه سازی ماژولاریتی است. نتایج ترکیبی این الگوریتم‌ها با توابع توافقی مبتنی بر ماتریس همبستگی برای کشف جوامع دقیق‌تر استفاده شده است. مجموعه داده‌های شبکه اجتماعی واقعی استفاده شده و نتایج ارزیابی شده است

[Downloaded from jiaeee.com on 2026-11-17]

[DOI: 10.61186/jiaeee.21.1.135]

ولی نقشی در ساخت شبکه اجتماعی نداشته است و از ویژگی‌های هر فرد برای ایجاد شبکه استفاده نشده است [۷]. در [۸] شاهرخ‌زاده و رفیعی از روش‌های خوشه‌بندی برای مقابله با مسئله شروع سرد استفاده کرده‌اند. رویکردی برای کاربران تازه وارد ارائه شده است و با اینکه اطلاعاتی از پروفایل آنها در سیستم وجود ندارد با روش‌های یادگیری ماشین خوشه‌بندی می‌شوند تا توصیه‌های متناسب با وی پیشنهاد شود. شبکه‌ای مبتنی بر ویژگی‌ها ایجاد نشده است و از شبکه اجتماعی کاربران استفاده شده است. در [۹] صفدری و همکارانش به شکل‌گیری یک یال پرداخته‌اند که به عضویت در جامعه وابسته است و می‌توانند شبکه را واقعی‌تر نمایش دهند. برای چنین هدفی، مدل مولد احتمالی با متغیرهای پنهان را ارائه کرده‌اند تا بتوانند اطلاعات ساختاری جوامع در شبکه را در زمان ادغام کنند. از رویکرد مارکوف برای ساخت مرحله به مرحله ماتریس شبکه استفاده شده است تا کارایی الگوریتم افزایش یابد. از مجموعه داده‌های شبکه‌های اجتماعی موجود استفاده شده تا عملکرد روش پیشنهادی را تحلیل کنند و روی مجموعه داده آلیاژ آنتروپی بالا بررسی نکرده‌اند تا اثر ویژگی‌ها روی عملکرد الگوریتم را استنتاج کنند.

در [۱۰] لی و همکارانش الگوریتم کشف جوامع مبتنی بر خوشه‌بندی چگالی و انتشار برچسب ارائه کرده‌اند. برای این کار چگالی محلی محاسبه شده است و مرکز جامعه تعیین شده است تا جامعه اولیه مناسبی استخراج شود که کیفیت جوامع را افزایش دهد. روش پیشنهادی روی مجموعه داده‌های شبکه‌های اجتماعی واقعی پیاده‌سازی شده است و شبکه آلیاژهای آنتروپی بالا در نظر گرفته نشده است [۱۰]. الگوریتم فراابتکاری پنگوئن امپراطور و شبکه عصبی در کشف جوامع استفاده شده است، به گونه‌ای که نیاز به اطلاعاتی از عمق مساله ندارد. روش پیشنهادی را بر روی مجموعه داده شبکه اجتماعی واقعی پیاده‌سازی کرده‌اند و شبکه‌ای مبتنی بر ویژگی‌ها ایجاد نکرده‌اند [۱۱]. شبکه‌ای توسعه یافته با ادغام اطلاعات مجموعه داده بایومین و شبکه پروتئینی ایجاد شده است [۱۲]. از ارتباط قوی زیرجوامع استفاده کرده‌اند که با اغلب شبکه توسعه‌یافته همپوشانی دارند. تراکم زیرجوامع شناسایی شده و سه مفهوم اعتبارسنجی ادبیات ژن‌ها و پروتئین‌های هدف‌گیری ویروس، تحلیل عملکرد ژن و پشتیبانی دارو برای بافت‌های شناسایی شده مرتبط با کووید-۱۹ تولید شده‌اند. از شبکه زیستی مرتبط با ژن و ویروس کووید-۱۹ استفاده شده است و اثر ویژگی‌های آلیاژهای آنتروپی بالا در شبکه آنها بررسی نشده است، همچنین از شبکه پروتئینی موجود استفاده شده است [۱۲].

آلیاژهای آنتروپی بالا با ویژگی‌های منحصر به فرد معرفی شده‌اند [۱]. مقادیر این ویژگی‌ها بیان‌کننده خاصیت‌های سایز اتم، آنتالپی، آنتروپی، ترمودینامیک، فشار و غلظت الکترون آلیاژ است [۱]. یه و همکارانش در این کار، به تحلیل آلیاژهای آنتروپی بالا پرداخته‌اند [۱] و از قابلیت‌های یادگیری ماشین روی آلیاژهای آنتروپی بالا بهره نبرده‌اند. هی و یانگ در [۱۳] به بررسی ویژگی اعوجاج شبکه پرداخته‌اند و با تمرکز بر مدل‌سازی و شبیه‌سازی اتمی به تبدیل فاز، دینامیک نابجایی در HEA رسیده‌اند. یادگیری ماشین و شبکه تعاملی در مطالعه آنها انجام نشده است و فقط یکی از ویژگی‌های آلیاژی را بررسی کرده‌اند [۱۳]. دای و همکارانش در [۱۴]، ویژگی‌هایی بر اساس یادگیری ماشین با تحلیل ضریب، افزایش ابعاد و انتخاب ویژگی‌های مهم طراحی کرده‌اند که برای پیش‌بینی فاز HEA استفاده شده است. آنها خصیصه غیرخطی، حذف غیرضروری‌ها و ویژگی‌های ابعاد پایین را تحلیل کردند و پیش‌بینی دقیق‌تری در فاز HEAها انجام داده‌اند [۱۴]. شبکه‌ای از HEAها ایجاد نکرده‌اند و آلیاژهایی با رفتار مشابه را خوشه‌بندی نکرده‌اند. در [۱۵] کافمن و وچیو، مدلی به نام توان-بالا را معرفی کردند که دو ویژگی ترمودینامیک و شیمیایی HEAها را بررسی می‌کند. با استفاده از الگوریتم جنگل تصادفی یادگیری ماشین به پیش‌بینی قابلیت فرم‌دهی پرداخته شده است. سایر خواص ترکیب در نظر گرفته نشده است و از درخت تصمیم برای پیش‌بینی فاز نهایی استفاده شده است. شبکه‌ای از مواد ایجاد نشده و شباهت بین خصوصیات بررسی نشده است. همچنین ژانگ و همکارانش، چارچوبی برای انتخاب توصیف‌کننده و مدل یادگیری ماشین با استفاده از الگوریتم ژنتیک ارائه کردند که اثر مسائل فرم‌دهی دو فاز HEAها را نشان می‌دهد [۱۶]. آنها با مدل دسته‌بندی بهینه برای تشخیص فازها بهره برده‌اند و به دو هدف دسته‌بندی و بهینه‌سازی دست پیدا کردند. شباهت بین ویژگی‌های آلیاژی را محاسبه نکرده‌اند تا از لحاظ ساختاری و محتوایی بررسی شوند [۱۶]. در پیش‌بینی برچسب فاز هر ترکیب آلیاژی از روش‌های انتخاب ویژگی همبستگی و اهمیت ویژگی، کم اهمیت‌ترین ویژگی شناسایی شده است. با انتخاب ویژگی‌های مهم و اعمال روش‌های یادگیری ماشین، با دقت بالاتری فاز ترکیب پیش‌بینی شده است. به مطالعه ارتباط بین ویژگی‌ها پرداخته نشده است و شبکه‌ای مبتنی بر میزان نزدیکی ویژگی‌ها با یکدیگر ایجاد نشده است [۱۷].

در [۱۸] کی و همکارانش از مهندسی ویژگی استفاده کرده‌اند که به صورت هم‌افزایی با ویژگی‌های نمودار فاز، ویژگی حرارت و قانون هوم روتری[۲] ترکیب شده است تا فازهای متفاوت هر ترکیب را تفسیر و پیش‌بینی کند. آنها از تحلیل اهمیت ویژگی بهره برده‌اند و دقت پیش‌بینی را افزایش داده‌اند. در مطالعه آنها شبکه‌ای بر اساس ویژگی‌های هر ترکیب ساخته نشده است تا بتوان از ابزارهای تحلیل شبکه اجتماعی، جوامع استخراج کرد [۱۸]. فرم‌دهی و پایداری آلیاژهای آنتروپی بالا برای فازهای محلول جامد بررسی شده است و از روش‌های اهمیت ویژگی استفاده شده است. میزان اهمیت ویژگی‌ها را در پیش‌بینی پایداری فاز محلول جامد با استفاده از مدل‌های یادگیری ماشین تعیین کرده‌اند که شبکه‌ی اجتماعی برای آلیاژها ایجاد نکرده‌اند تا جوامعی را از شبکه استخراج کنند [۱۹]. پیش‌بینی ساختار

[Downloaded from jiaeee.com on 2026-11-17]

[DOI: 10.61186/jiaeee.21.1.135]

نقش مهمی در توسعه آلیاژها از نظر ارتباط قوی بین ساختارها و ویژگی‌ها دارد. رویکردی توسط کو و همکارانش ارائه شده است که از ترکیب یادگیرنده‌های k نزدیکترین همسایه و روش های یادگیری متخاصم است [۲۰]. شکل‌گیری فاز ترکیب را پیش‌بینی می‌کنند که از ویژگی‌های هر ترکیب استفاده نشده است و ترکیب‌های مشابه شناسایی نشده است [۲۰]. در [۲۱] کشف جوامع آلیاژی با الگوریتم بهینه‌سازی ازدحام ذرات انجام شده است که کیفیت جوامع در الگوریتم لووین نیز بهبود پیدا کرده است. در این مطالعه فاز ترکیب آلیاژی با دقت قابل ملاحظه‌ای پیش‌بینی شده است [۲۱]. از ارتباطات بین هر دو ترکیب برای یافتن همسایه‌های ترکیب هدف استفاده شده است تا با استفاده از الگوریتم K نزدیکترین همسایه مبتنی بر گراف، فاز هر ترکیب پیش‌بینی شود [۲۲].

با توجه به بهترین دانش ما، تا کنون ویژگی‌های آلیاژهای آنتروپی بالا جهت ایجاد شبکه تعاملی آلیاژی استفاده نشده‌اند. در مطالعات انجام شده میزان شباهت بین ویژگی‌های مجموعه داده برای ساخت شبکه تعاملی مورد بررسی قرار نگرفته‌اند. در این پژوهش اندازه نزدیکی ویژگی‌ها با استفاده از محتوا و ساختار آنها محاسبه شده است و شبکه‌ای مبتنی بر آنها ساخته شده است. با اینکه اغلب پژوهش‌های انجام شده از نتایج خوبی برخوردار هستند ولی از مجموعه داده آلیاژهای آنتروپی بالا استفاده نکرده‌اند. جوامعی که توسط روش‌های بیان شده استخراج شده‌اند بر مبنای عناصر تشکیل دهنده ترکیب آلیاژی نمی‌باشند. دسته‌بندی کارهای گذشته مبتنی بر روش پژوهش، مجموعه داده مورد استفاده و عملکرد آنها در جدول شماره ۱ نشان داده شده است.

جدول (۱): دسته‌بندی کارهای گذشته

رفرنس	سال	مجموعه داده	کشف جوامع	روش شباهت	عملکرد
یه و همکاران [۱]	۲۰۱۶	- High-Entropy alloys dataset	--	--	تحلیل ترکیب آلیاژی
اهاجم و همکاران [۴]	۲۰۱۸	- Zachary's karate club network - American College football - Political blogs	-Leader-community detection algorithm	- جاکارد - سالتون - HDI - HPI	کشف جوامع
اوزاکی و همکاران [۵]	۲۰۱۶	- Amazon(MDS) - California - Youtube - Skitter - Flickr links - US patents - Orkut	- louvain algorithm - Louvain Prune algorithm	--	کشف جوامع
طباطبایی و همکاران [۶]	۱۴۰۱	- مجموعه داده خط تولید کاشی کف	- رگرسیون منطقی - جنگل تصادفی	--	پیش‌بینی انحراف کاشی
علیزاده و همکاران [۷]	۱۳۹۳	- باشگاه کاراته زاکاری - مجموعه داده موسیقی‌دانان جاز - لیگ فوتبال دانشگاه آمریکا - شبکه متابولیک - ایمیل‌های Ernon توسط FERC -NetScience	توابع توافقی مبتنی بر ماتریس همبستگی	--	کشف جوامع
شاهرخ زاده و رفیعی [۸]	۱۴۰۱	- تویتر	- جنگل تصادفی - ارتقای گرادیان	--	- خوشه‌بندی
صفدری و همکاران [۹]	۲۰۲۲	- email Eu core network - statistics citation networks	- Markov approach - Poisson distribution	--	- کشف جوامع - پیش‌بینی ارتباط
لی و همکاران [۱۰]	۲۰۲۲	- PowerGrid dataset - Karate - Dolphins - Polbooks - Football	- stable community detection algorithm - density peak clustering and label propagation (DS-LPA)	Jaccard index - label similarity	کشف جوامع
یوسفی و همکاران [۱۱]	۱۴۰۱	- Zachary's karate club -Bottlenose dolphins - American college football -Books about US politics - Grevy's zebras	- الگوریتم فرابتکاری پنگوئن امپراطور - شبکه عصبی	--	کشف جوامع
گو و همکاران [۱۲]	۲۰۲۲	- SARS-CoV-2-host protein-protein interaction network - human Biomine database	- Peeling algorithm - probabilistic core decomposition - Data analysis pipeline	--	کشف جوامع با ارتباط قوی
کی و همکاران [۱۸]	۲۰۲۲	High- Entropy Alloys	- RFC - SVM - NN - Pearson correlation - Logistic Regression	شباهت ساختاری بین شبکه فاز BCC و شکل گیری Heusler	پیش‌بینی فاز محلول جامد و Intermetallic ترکیب
چانگ و همکاران [۱۹]	۲۰۲۲	- High-Entropy alloys dataset	- Self organizing map - Feature importance method	--	- پیش‌بینی فاز ترکیب - تاثیر ماشین بردار پشتیبان

[Downloaded from jiaeee.com on 2026-11-17]

[DOI: 10.61186/jiaeee.21.1.135]

		- SVM - Gradient boosting decision tree - multi layer perceptron - Logistic regression			پایداری و شکل‌گیری فاز محلول جامد
کو و همکاران [۲۰]	۲۰۲۲	- High-Entropy alloys	- KNN - Ensemble learning	--	پیش‌بینی شکل‌گیری فاز ترکیب
قوچان نژادنور نیا و همکاران [۲۱]	۲۰۲۲	High-Entropy alloys	- PSO	- جاکارد - کسینوسی	-کشف جوامع - پیش‌بینی فاز
قوچان نژادنور نیا و همکاران [۲۲]	۲۰۲۲	High-Entropy alloys	- KNN	--	پیش‌بینی فاز

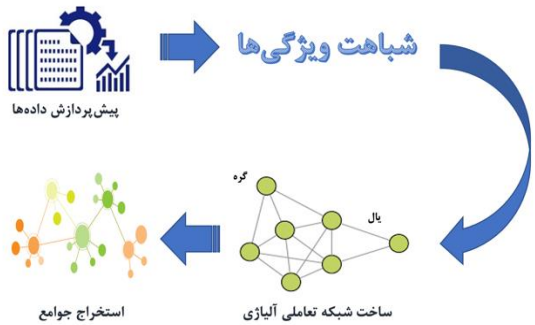
۳- روش پیشنهادی

با بررسی‌های انجام شده، تا کنون تعامل بین ترکیب‌های آلیاژی لحاظ نشده است و ترکیب‌های مشابه مبتنی بر ارتباط بین انها در نظر گرفته نشده است. نوآوری این مقاله ساخت شبکه تعاملی از آلیاژهای آنتروپی بالا است که بر اساس شباهت ساختاری و محتوایی ویژگی‌های انها انجام شده است و همچنین رویکرد نوین دیگر شناسایی جوامعی از ترکیب‌های مشابه در شبکه تعاملی است. عملکرد سیستم پیشنهادی به این صورت است که داده‌ها برای استفاده از الگوریتم‌های یادگیری ماشین بایستی به گونه‌ای تغییر کنند تا قابل استفاده باشند. از انجایی که برای ورودی سیستم پیشنهادی به داده‌های نرمال‌شده نیاز است در ابتدا مقادیر ویژگی‌ها با یکی از روش‌های نرمال‌سازی، پیش‌پردازش می‌شوند تا مقادیر به بازه مناسب الگوریتم یادگیری ماشین تبدیل شوند. روش مورد استفاده نرمال‌سازی min-max که در رابطه (۱) بیان شده است و مقادیر مجموعه داده پیش‌پردازش می‌شوند و به بازه مناسب بین صفر و یک تبدیل می‌کند [۲۱].

$$v' = \frac{v - \min_A}{\max_A - \min_A} \qquad (۱)$$

که در آن $\min_A$ و $\max_A$ حداقل و حداکثر مقادیر یک ویژگی را نشان می‌دهد. v مقدار واقعی و v' مقدار نرمال‌شده است.

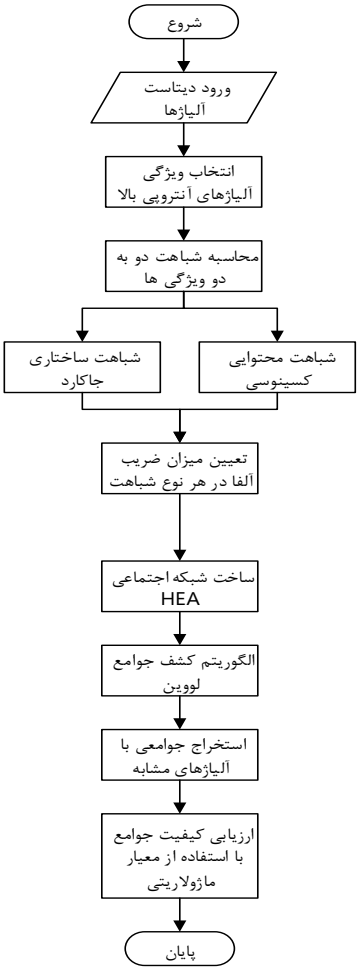
مقادیر نرمال‌شده ویژگی‌های هر ترکیب برای ساخت شبکه تعاملی آلیاژی استفاده شده است. شباهت ویژگی‌های دوبه‌دوی ترکیب‌ها را بر اساس ساختار شبکه با استفاده از رابطه جاکارد ساختاری و شباهت محتوای مقادیر ویژگی‌ها را از رابطه کسینوسی محتوایی مورد بررسی قرار داده‌ایم. سپس با استفاده از میزان نزدیکی ترکیب‌ها به یکدیگر، شبکه تعاملی آلیاژی ساخته می‌شود. با توجه به اینکه خوشه‌بندی یکی از روش‌های یادگیری ماشین است و در تحلیل شبکه‌های اجتماعی نیز کاربرد فراوانی دارد. با استفاده از روش‌های تحلیل شبکه‌های اجتماعی گروهی از مواد را به عنوان یک خوشه در نظر می‌گیرد که به هر خوشه یک «جامعه» گفته می‌شود و ترکیبات مشابه از نظر خواص و عناصر آلیاژها در یک جامعه قرار می‌گیرند. فرآیند این مقاله شامل چهار مرحله است که در شکل ۱ نشان داده شده است: (۱) پیش‌پردازش داده‌ها. (۲) محاسبه شباهت دو به دو ترکیب آلیاژها. (۳) ایجاد گراف شبکه تعاملی آلیاژها. (۴) استخراج جوامعی از آلیاژها که هر جامعه شامل ترکیباتی از آلیاژها هستند که شبیه به هم رفتار می‌کنند.



شکل (۱): فرآیند مدل پیشنهادی

چالش این مقاله کشف جوامع و ارتباطات بین آلیاژها است. نمودار روش پیشنهادی در شکل ۲ نشان داده شده است که پس از ورود مجموعه داده آلیاژهای آنتروپی بالا به مدل، ویژگی‌های هر ترکیب با روش‌های انتخاب ویژگی انتخاب می‌شوند. پس از محاسبه شباهت ترکیبی ویژگی‌ها، مقدار ضریب آلفا به روش آزمون-خطا تعیین شده است که شبکه را هرس می‌کند تا ارتباطات ضعیف‌تر بین گره‌های شبکه حذف شوند. پس از ساخت شبکه‌ی آلیاژی با ارتباطات قوی بین ترکیب‌ها، الگوریتم کشف جوامع به شبکه اعمال می‌شود و جوامعی از شبکه استخراج می‌شود. با استفاده از معیار ماژولاریتی به ارزیابی جوامع کشف شده می‌پردازد. هر گره در شبکه، یک ترکیب آلیاژی را نشان می‌دهد و یال‌های شبکه، ارتباط بین ترکیب‌ها و میزان قدرت ارتباط را بیان می‌کند.

[Downloaded from jiaeee.com on 2026-11-17]
[DOI: 10.61186/jiaeee.21.1.135]



شکل (۲): نمودار روش پیشنهادی

۳-۱- معیار شباهت کسینوسی محتوایی

شباهت کسینوسی محتوایی بر اساس اندازه زاویه بین دو بردار ویژگی بررسی می‌شود [۲۳]. شباهت کسینوسی محتوایی در رابطه (۲) بیان شده است:

$$Content\,Cos\,ineSimilarity(x,y)=\frac{\sum_i (x_i \times y_i)}{\sqrt{\sum_i x_i^2 \times \sum_i y_i^2}} \qquad (۲)$$

پارامتر x ویژگی ترکیب اول و y ویژگی ترکیب دوم است؛ x_i برای iامین ویژگی ترکیب اول است و y_i نیز iامین ویژگی ترکیب دوم را توصیف می‌کند.

۳-۲- معیار شباهت جاکارد ساختاری

اندازه ضریب شباهت جاکارد ساختاری بین دو مجموعه داده، از تقسیم تعداد خصوصیات مشترک دو مجموعه بر اجتماع ویژگی‌های دو مجموعه بدست می‌آید. از آنجایی که برای محاسبه معیار جاکارد نیاز به ورودی از نوع ساختار گراف شبکه اجتماعی است. ماتریسی که از شباهت کسینوسی بدست آمده است را با آستانه‌های مختلف بررسی می‌کند تا مقدار مناسب را پیدا کند و گراف شبکه‌ی مورد نظر ایجاد شود و با استفاده از گراف، شباهت ساختاری اندازه‌گیری شود. آستانه مناسب برای بدست آوردن گراف از شباهت کسینوسی در این مقاله، مقدار ۰/۹۸ تعیین شده است.

معیار شباهت جاکارد در رابطه (۳) نشان داده شده است [۲۴]:

$$StructuralJaccardSimilarity(v_i,v_j)=\frac{|N_i \cap N_j|}{|N_i \cup N_j|} \qquad (۳)$$

v_i و v_j دو گره هستند که ترکیب‌های HEAها را نشان می‌دهند؛ $|N_i \cap N_j|$ ویژگی‌های مشترک بین دو ترکیب v_i و v_j می‌باشند؛ $|N_i \cup N_j|$ تمام ویژگی‌های ترکیبات v_i و v_j را بیان می‌کند.

پس از محاسبه دو پارامتر شباهت محتوایی و ساختاری، دو ماتریس با مقادیر شباهت بدست می‌آید. برای کشف جوامع نیاز به یک ماتریس به عنوان ورودی است که حاوی شباهت ویژگی‌ها است. با استفاده از رابطه (۴) میزان تاثیر هر یک از شباهت‌های ساختاری و محتوایی تعیین می‌شود. با روش آزمون-خطا آلفای مناسب مشخص می‌شود که خروجی این فاز یک ماتریس شباهت ترکیبی است و باید برای ورود به الگوریتم کشف جوامع لووین استفاده شود. با تعیین تاثیر هر پارامتر شباهت، نتیجه حاصل از شباهت ترکیبی به یک گراف شبکه اجتماعی با ضریب تاثیر آلفا و آستانه تبدیل می‌شود.

$$HybridSimilarity = (\alpha * StructuralJaccardSimilarity) + ((1-\alpha) * Content\,Cos\,ineSimilarity) \qquad (۴)$$

۳-۳- کشف جامعه

۳-۳-۱- الگوریتم لووین

معمولا محتوای ساختارهای اجتماعی به صورت شبکه های پیچیده نشان داده می‌شوند که توپولوژی راس‌های به هم پیوسته از ترکیب سازمان‌یافته و تصادفی بدست می‌آید [۲۵]. الگوریتم لووین روشی متاهیوریستیک است که برای تشخیص گروه‌های داخل گراف معرفی شده است که به هر گروه استخراج شده، یک جامعه گفته می‌شود و این الگوریتم، یک روش خوشه‌بندی پایین به بالا است [۲۶]. در این الگوریتم از پارامتری به نام پیمانگی[۳] برای تعیین میزان کیفیت جوامع استفاده می‌شود که حداکثرسازی آن اهمیت ویژه‌ای دارد. در نهایت جوامعی را انتخاب می‌کند که با راس هدف ادغام می‌شوند و جوامعی با پیمانگی بالا را ایجاد می‌کند [۲۶]. با اینکه محاسبه پیمانگی در گراف‌های خیلی بزرگ دشوار است، یکی از مزایای اصلی روش لووین چالش گراف‌های بزرگ و سرعت اجرای آن است [۲۶] و محدودیت روش‌های دیگر باعث معرفی لووین شده است [۲۷]. الگوریتم لووین به صورت حریصانه برای بیشینه‌سازی پیمانگی عمل می‌کند، که سریعترین و موثرترین الگوریتم برای کشف جامعه است. الگوریتم به دو فاز تقسیم می‌شود که به طور متناوب تکرار می‌شود. فرض کنید که با شبکه‌ی وزن‌داری که دارای N گره باشد، شروع شده است. ابتدا هر گره را در جامعه‌ای جداگانه قرار می‌دهد که با این کار، به تعداد گره‌های شبکه، جامعه موجود است. سپس همسایگان را برای هر گره

[Downloaded from jiaeee.com on 2026-11-17]
[DOI: 10.61186/jiaeee.21.1.135]

بررسی می‌کند و میزان پیمانگی ارزیابی می‌شود که با حذف گره از جامعه‌اش و قرار گرفتن در جامعه همسایه‌اش انجام می‌شود. در نهایت، گره هدف در جامعه‌ای قرار می‌گیرد که بالاترین نرخ پیمانگی (مثبت) را داشته باشد و در غیر اینصورت در جامعه جاری باقی می‌ماند [۲۸]. این فرآیند به طور متناوب برای تمام گره‌های شبکه اجتماعی آلیاژهای آنتروپی بالا تکرار می‌شود تا بهبود جدیدی حاصل نشود و فاز اول فرآیند به پایان برسد. با این حقیقت که برای هرگره چندین مرتبه تکرار می‌شود. گام اول زمانی متوقف می‌شود که ماکزیمم محلی پیمانگی بدست آید و جابجایی ترکیب‌ها، پیمانگی را افزایش ندهد. بررسی ترتیب گره‌ها در خروجی الگوریتم ممکن است روی بار محاسباتی موثر باشد که نیاز به مطالعه بیشتری دارد.

کیفیت کارایی الگوریتم لووین در کشف جوامع با استفاده از نرخ پیمانگی ΔQ بدست می‌آید که با جابجایی گره تک[۴] i به جامعه C توسط رابطه (۵) در زیر محاسبه شده است [۱۷]:

$$\Delta Q=\left[\frac{\Sigma_{in}+k_{i,in}}{2m}-\left(\frac{\Sigma_{tot}+k_i}{2m}\right)^2\right]-\left[\frac{\Sigma_{in}}{2m}-\left(\frac{\Sigma_{tot}}{2m}\right)^2-\left(\frac{k_i}{2m}\right)^2\right] \quad (۵)$$

Σ_{in} مجموع وزن لینک‌های داخل جامعه C است، Σ_{tot} مجموع وزن لینک‌های متصل شده به گره‌های درون جامعه C است، k_i مجموع وزن لینک‌های مرتبط به گره i است، $k_{i,in}$ مجموع وزن لینک‌ها از گره i به گره‌های داخل C است و m مجموع وزن تمام لینک‌های شبکه است. وقتی گره i از جامعه‌اش حذف می‌شود عبارت مشابهی برای ارزیابی تغییرات پیمانگی به کار گرفته می‌شود. تغییرات پیمانگی با حذف گره i از جامعه‌اش و قرار گرفتن در جامعه همسایه‌اش سنجیده می‌شود [۲۸].

فاز دوم الگوریتم شامل ایجاد شبکه‌ی جدیدی از گره‌ها است که در مرحله اول جامعه خود را پیدا کرده‌اند. زمانی که فاز دوم انجام می‌شود، می‌توان فاز اول الگوریتم را مجددا به شبکه وزن‌دار ایجاد شده اعمال کرد تا تکرار شود. ترکیب این دو فاز «دوره» تعریف شده است. تعداد متا-جوامع در هر دوره کاهش می‌یابد و بیشترین بار محاسباتی در دوره اول است. این دوره‌ها تا زمانی که دیگر تغییری ایجاد نشود و بیشترین پیمانگی بدست آید، ادامه می‌یابند. این الگوریتم بیانگر شبکه‌های پیچیده است و به صورت سلسله مراتبی عمل می‌کند که جوامع نهایی در طی فرآیندی تکراری ادغام ایجاد می‌شوند. ارتفاع سلسله مراتب با توجه به تعداد دوره‌ها تعیین می‌شود و معمولا تعداد کمی است. این الگوریتم مزیت‌هایی دارد، از قبیل بصری بودن مراحل که به راحتی اجرا می‌شوند و خروجی آن بدون نظارت است. الگوریتم سریع عمل می‌کند و بهره پیمانگی را به سادگی توسط رابطه (۵) محاسبه می‌کند و پس از چندین دوره تعداد جوامع را با روش ادغام کاهش می‌دهد که بیشترین زمان اجرایی آن مربوط به اولین تکرار در فاز اول است [۲۸].

۴- نتایج آزمایش‌ها

در این پژوهش، از زبان برنامه‌نویسی متلب (MATLAB Ver. R2019b) و نرم افزار Gephi نسخه 0.9 به منظور پیاده‌سازی روش پیشنهادی استفاده شده است. همچنین سخت افزار مورد استفاده، پردازنده Intel Core i7 1.73 GHz، حافظه نهان Cache L3-6 MB و حافظه 4 GB RAM است. پارامترهایی که در این پژوهش نیاز به تنظیم دارند با روش آزمون و خطا بدست آمده است تا کیفیت جوامع استخراجی بهینه شود. این پارامترها در جدول ۲ نشان داده شده است.

جدول (۲): پارامترهای قابل تنظیم پژوهش

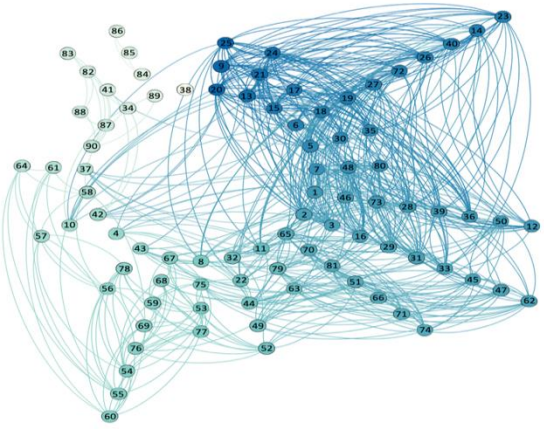
نام پارامتر	توضیح پارامتر
آلفا	میزان تاثیر معیار شباهت ساختاری و محتوایی را تعیین می‌کند.
آستانه	تعیین حد مناسب برای حذف ارتباطات ضعیف

با مجموعه داده‌ای که در این مطالعه استفاده شده است، از ۹۰ ترکیب آلیاژی تشکیل شده که برای دستیابی به مجموعه داده و ویژگی‌های آن، به رفرنس [۱] مراجعه شود. هر یک از آنها دارای شش ویژگی و یک کلاس برچسب به نام فاز است [۱]. ویژگی‌های منتخب این مطالعه شامل δ، $\Delta H_{mix}(kJ/mol)$، $S_c(k_B peratom)$، φ، ε_{RMS}، VEC است. خاصیت δ اختلاف سایز اتمی HEAها است [۱]. ویژگی $\Delta H_{mix}(kJ/mol)$ آنتالپی مخلوط محلول جامد است و از مجموع انرژی داخلی سیستم بدست می‌آید که تغییرات آنتالپی، میزان تبادل حرارت در تبدیل واکنش‌دهنده‌ها به خروجی در فعالیت شیمیایی است [۲۹]. ویژگی $S_c(k_B peratom)$ به عنوان انتروپی پیکربندی مخلوط برای محلول ایده‌آل در نظر گرفته شده است که تخمین مناسبی برای آنتروپی مخلوط آلیاژ در دمای بالا را فراهم می‌کند [۱]. خاصیت φ پارامتر ترمودینامیکی بدون بعد برای طراحی HEA است [۳۰]. ویژگی ε_{RMS} فشار باقیمانده ریشه مربع میانگین است که با چگالی ذخیره انرژی فشار الاستیک اندازه‌گیری می‌شود [۲۳]. VEC پارامتر مهمی در ظرفیت غلظت الکترون آلیاژ است که عدم اثر سایز اتمی قوی می‌تواند در تبلور فاز محلول جامد تاثیر بگذارد [۱]. با توجه به نوآوری این مقاله، آزمایش‌های متعددی در این قسمت برای بررسی اثربخشی روش ارائه شده انجام شده است. برای کشف جوامع از شباهت بین ویژگی‌ها استفاده شده است و شبکه تعاملی HEA به صورتی ایجاد می‌شود که وزن لینک‌های بین ترکیب‌ها، تعیین کننده میزان شباهت آنها است. این شبکه اجتماعی بدون در نظر گرفتن میزان ضریب تاثیر شباهت محتوا و ساختار آلیاژها تشکیل شده و همه ترکیب‌ها به هم

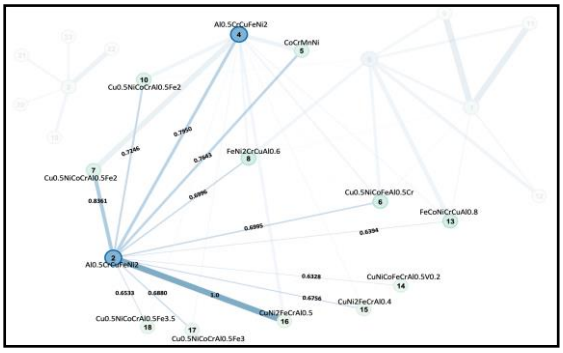
[Downloaded from jiaeee.com on 2026-11-17]
[DOI: 10.61186/jiaeee.21.1.135]

متصل شده‌اند و گراف کاملی را تشکیل داده‌اند که در شکل ۳ نشان داده شده است. شبکه تعاملی HEA دارای ۹۰ گره از تمام ترکیب‌های HEA است که با ۴۰۵۰ یال به یکدیگر متصل شده‌اند. همانطور که در شکل ۳ دیده می‌شود، هر گره با شماره‌ای مشخص شده است که نماینده یک ترکیب آلیاژی است و در جدول شماره ۵ بیان شده است. شکل ۳ با استفاده از نرم‌افزار Gephi رسم شده است که با قالب Radial Axis layout ایجاد شده است. همانطور که در شکل ۳ مشخص است هر چه رنگ گره و یال‌های متصل به آن با آبی پررنگ‌تری نشان داده شوند به این معنی است که دارای گره‌های متصل بیشتری است و هر چه کم‌رنگ‌تر باشند، تعداد گره‌های متصل به آن کمتر است. مقدار آلفای ۰/۹ و آستانه ۰/۶ به شبکه اعمال شده است که آستانه باعث می‌شود گره‌هایی که ارتباط ضعیف‌تری دارند، حذف شوند و ارتباطات قوی‌تر در شبکه باقی بمانند. شبکه اجتماعی با در نظر گرفتن آلفا و آستانه دارای ۹۰ گره با ۶۷۷ یال ارتباطی بین گره‌ها است که شکل ۴ بخشی از شبکه با ارتباطات قوی را به عنوان مثال نمایش می‌دهد. شکل ۴ یک گره را به صورت نمونه با گره‌هایی که ارتباط دارد نشان می‌دهد، یالی که با خط ضخیم‌تر و پررنگ‌تر نمایش داده شده است دارای شباهت بیشتر است که مقدار شباهت روی یال مربوطه نوشته شده است. هر گره در جامعه با شماره‌ای مشخص شده است که بیانگر یک ترکیب آلیاژی است که کنار آن نوشته شده است.

شکل ۵ شبکه‌ای را نشان می‌دهد که مقدار آلفا و آستانه به شبکه اعمال شده است و ارتباطات ضعیف آن حذف شده است. با اعمال الگوریتم لووین [۱۸]، جوامع استخراج شده در شکل ۶ نشان داده شده است که شماره‌های هر نود بیانگر شماره هر ترکیب آلیاژی است. میزان کیفیت جوامع با بهره‌گیری از معیار پیمانگی ارزیابی شده است که حدود ۰/۷ بدست آمده است. حال با تحلیل هر جامعه، بیان می‌شود که همسایگی ترکیب‌هایی که در یک جامعه قرار گرفته‌اند دارای فاز ترکیبی یکسانی هستند و عناصری مشابه در هر ترکیب وجود دارد.



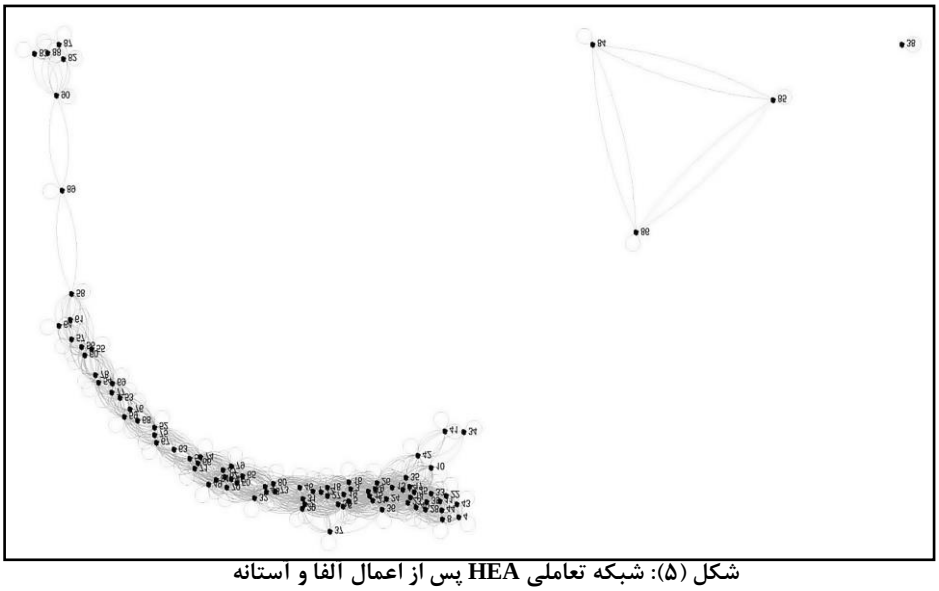
شکل (۳): شبکه تعاملی HEA با Radial Axis layout



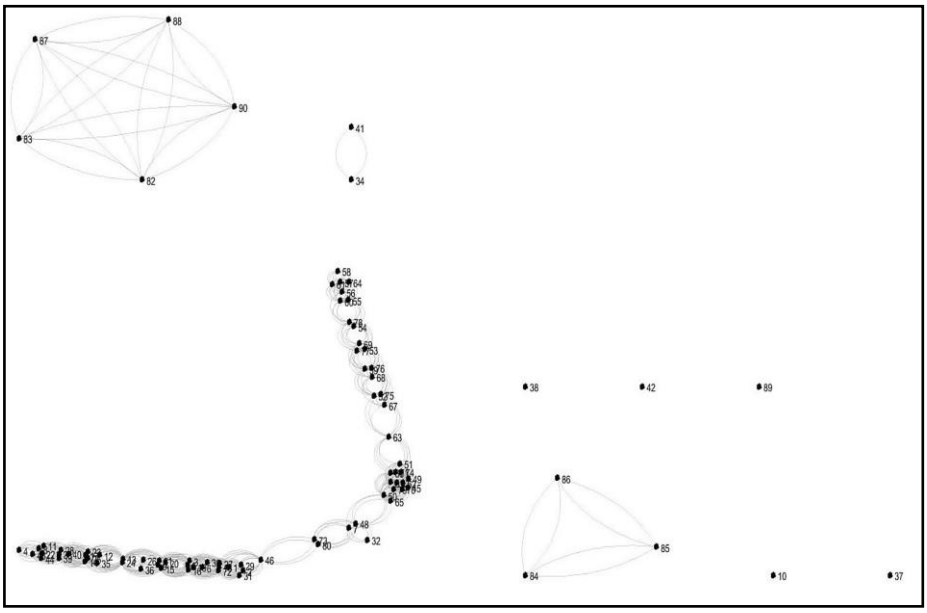
شکل (۴): بخشی از شبکه تعاملی HEA به عنوان مثال

معیار پیمانگی الگوریتم لووین [۲۸] برای ارزیابی کیفیت جوامع در این مقاله استفاده شده است که به عنوان یکی از اصلی‌ترین معیارهای ارزیابی کیفیت روش‌های کشف جوامع است [۲۵]. اگر تعداد یال‌های درون جامعه بهتر از حالت گراف تصادفی نباشد، پیمانگی برابر صفر است. حداکثر مقدار پیمانگی زمانی بدست می‌آید که تمام رئوس درون هر جامعه به هم متصل باشند و یالی جامعه‌های خارجی را به هم متصل نکند [۲۵]. یکی از ویژگی های اساسی پیمانگی امکان مقایسه جوامع متفاوت با تعداد جامعه‌های مختلف است. از آنجایی که لزوما الگوریتم‌های مختلف تعداد جوامع یکسانی را تولید نمی‌کنند، بسیاری از معیارهای موجود جوابگوی مقایسه‌ی روش‌های مختلف نیستند و امکان استفاده از آن‌ها برای ارزیابی این روش‌ها وجود ندارد. بنابراین وقتی که از روش الگوریتم لووین سلسله مراتبی پایین به بالا استفاده شود می‌توان روند تغییرات پیمانگی را هنگام تقسیم یا ترکیب جامعه‌ها بررسی کرد و جوامعی که این کمیت را به حداکثر ممکن می‌رساند به عنوان بهترین حالت نهایی در نظر گرفته می‌شوند. پیمانگی هر خوشه یک مقدار اسکالر بین -۱ و ۱ است که تراکم لینک‌های داخل جوامع را در مقایسه با لینک‌های خارج جوامع اندازه‌گیری می‌کند [۱۷،۱۶]. مطالعاتی که انجام شده است مقدار پیمانگی بین ۰/۳ و ۰/۷ ساختار جوامع قدرتمندی را نشان می‌دهد که هر چه این معیار به مقدار ۱ نزدیک شود ارزش بیشتری از جوامع را بیان می‌کند [۱۶،۱۷]. میزان کیفیت الگوریتم روش پیشنهادی این مطالعه که به صورت بهبودیافته عمل می‌کنند حدود ۰/۷ است.

[Downloaded from jiaeee.com on 2026-11-17]
[DOI: 10.61186/jiaeee.21.1.135]



شکل (۵): شبکه تعاملی HEA پس از اعمال الفا و استانه



شکل (۶): جوامع استخراج شده با استفاده از الگوریتم لووین

جدول ۳ محتوای جوامع استخراج شده و شماره جامعه مربوطه را با استفاده از روش پیشنهادی نشان می‌دهد.

جدول (۳): ترکیب‌های موجود در هر جامعه

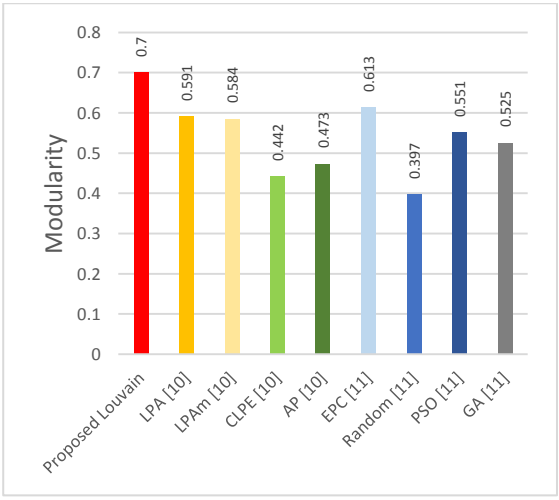
شماره جامعه	ترکیب‌های موجود در هر جامعه
۱	۱،۲،۳،۵،۶،۹،۱۵،۱۶،۱۸،۱۹،۲۰،۲۱،۲۶،۲۷،۲۹،۳۰،۳۱،۳۶،۴۶،۷۲
۲	۴،۸،۱۱،۱۲،۱۳،۱۴،۱۷،۲۲،۲۳،۲۴،۲۵،۲۸،۳۳،۳۵،۳۹،۴۰،۴۳،۴۴
۳	۷،۳۲،۴۸،۷۹،۸۰
۴	۱۰
۵	۳۴،۴۱
۶	۳۷
۷	۳۸
۸	۴۲
۹	۴۵،۴۷،۴۹،۵۰،۵۱،۶۲،۶۳،۶۵،۶۶،۷۰،۷۱،۷۴،۷۹،۸۱
۱۰	۵۲،۵۳،۵۴،۵۵،۵۶،۵۷،۵۸،۵۹،۶۰،۶۱،۶۴،۶۷،۶۸،۶۹،۷۵،۷۶،۷۷،۷۸
۱۱	۸۲،۸۳،۸۷،۸۸،۹۰
۱۲	۸۴،۸۵،۸۶
۱۳	۸۹

به عنوان مثال جامعه شماره ۳ نشان می‌دهد که ترکیبات شماره ۷، ۳۲، ۴۸، ۷۹ و ۸۰ در این جامعه قرار دارند و نام آنها CoCrFeNiPd،

[Downloaded from jiaeee.com on 2026-11-17]

[DOI: 10.61186/jiaeee.21.1.135]

$NiCoFeCrAl_{0.375}$، AlCrCuFeMnNi، FeCoNiCrCuAl و $MnCrFe_{1.5}Ni_{0.5}Al_{0.3}$ است. عناصر مشترکی از قبیل Al، Mn، Co، Cr و Ni در این آلیاژها وجود دارند و برچسب فاز آنها به صورت مشابه در دو نوع است و از نظر تعداد عناصر تشکیل‌دهنده آنها پنج یا شش عنصر است. همچنین جامعه شماره ۱۲ شامل ترکیبات ۸۴، ۸۵ و ۸۶ است که ترکیب شیمیایی آنها SrCaYbMgZn، $SrCaYbMgZn_{0.5}Cu_{0.5}$ و $SrCaYbLi_{0.55}Mg_{0.45}Zn$ است. عناصری مانند Zn، Mg، Yb، Ca و Sr در هر سه ترکیب وجود دارد که حتی ترتیب حضور آنها در ترکیب یکسان است و هر سه دارای فاز برابر هستند و تعداد عناصر تشکیل‌دهنده آنها نیز پنج یا شش است. با توجه به شباهت‌هایی که ترکیب‌های یک جامعه دارند می‌توان به این نتیجه رسید که این خوشه‌ها از کیفیت و دقت بالایی برخوردار هستند و میزان کیفیت ان با معیار پیمانگی نشان داده شده است. همانطور که در شکل ۷ نشان داده شده است کیفیت جوامع با استفاده از روش پیشنهادی لووین با سایر روش‌های موجود مقایسه شده است. روش پیشنهادی لووین بالاترین کیفیت کشف جوامع را دارد.



شکل (۷): مقایسه کیفیت جوامع استخراج شده روش پیشنهادی با سایر روش‌ها

۵- نتیجه‌گیری

در این مقاله روش جدیدی برای کشف جوامع بر اساس ML ارائه شده است که برای تشخیص ترکیب‌هایی استفاده می‌شود که مشابه یکدیگر رفتار می‌کنند. در ابتدا ویژگی‌های هر ترکیب تحلیل شدند و شباهت آلیاژها به صورت ساختاری و محتوایی بر اساس خصوصیات آنها محاسبه شد. سپس آلیاژهای آنتروپی بالا در شبکه اجتماعی نگاشت می‌شوند و شبکه تعاملی آلیاژهای آنتروپی بالا ایجاد می‌شود. کیفیت جوامع استخراج شده با معیار پیمانگی بررسی شده است که نشان می‌دهد روش ارائه شده دارای کیفیت بالایی در استخراج جوامع است. این ارزیابی بیان می‌کند خوشه‌هایی که کشف شده‌اند دارای اتصال درونی قدرتمندی بین ترکیبات هستند. ترکیبات مشابه دارای عناصر مشابه، مقادیر ویژگی‌های نزدیک به هم و فازهای یکسان هستند که به کشف عملکردهای جدید ترکیب‌ها منجر می‌شود. با اینکه این روش مقدار کیفیت قابل ملاحظه‌ای را بدست آورده هنوز قابلیت گسترش دارد. برای تعیین قابلیت‌های بهتر آلیاژها، روش‌های دیگری را در مطالعات آینده می‌توان بررسی کرد. همچنین این روش در مجموعه داده‌های بزرگتر قابلیت مقیاس‌پذیری دارد که کیفیت روش را حفظ کند. روش‌های دیگر ML هنوز توانایی‌های زیادی برای بهبود نتایج دارند که سرعت تحقیقات در حوزه مواد را افزایش می‌دهند. در واقع این تنها روش برای تشخیص جوامع نخواهد بود بلکه ممکن است در حوزه‌های دیگر مواد هم کاربردهای فراوانی داشته باشد تا بتوان از قابلیت‌های بیشتر خواص آنها در زمینه‌های صنعت و پیشبرد علم استفاده کرد.

سپاسگزاری

نویسندگان/ پدیدآورندگان از حمایت مالی پارک فناوری اطلاعات و ارتباطات از این پایان‌نامه/ رساله در قالب کد اعتباری ۰۰۰۳۷۹-۰۲-۹۹-۱۲ قدردانی می‌نمایند.

ضمایم

شماره ترکیب‌های HEA در جدول ۴ نشان داده شده است [۱].

جدول (۴): شماره ترکیب‌های HEA به همراه ویژگی‌های آن

شماره ترکیب	HEA Alloy Composition	δ %	$\Delta H_{mix}(kJ/mol)$	$S_c(k_B\ per\ atom)$	φ	ε_{RMS}	VEC
1	Al0.5CoCrCuFeNiTi0.2	4.93	-4.15	1.86	17.41	0.0487	8.12
2	Al0.3CoCrFeNi	3.76	-7.27	1.54	19.99	0.037	7.88

[Downloaded from jiaeee.com on 2026-11-17]
[DOI: 10.61186/jiaeee.21.1.135]

3	Al0.5CrCuFeNi2	4.2	-2.51	1.52	20.44	0.0414	8.45
4	CoCrFeNi	0.3	-3.75	1.39	3583.31	0.0039	8.25
5	CoFeMnNi	3.55	-4	1.39	24.51	0.0353	8.5
6	CoCrMnNi	3.45	-5.5	1.39	23.99	0.0343	8
7	CoCrFeNiPd	4.46	-7.04	1.61	15.95	0.0446	8.8
8	CoCrCu0.5FeNi	0.84	0.49	1.58	627.5	0.0083	8.56
9	CuNiCoFeCrAl0.5V0.2	4.15	-2.5	1.86	26.49	0.0409	8.16
10	CuNiFeCrMo	3.58	4.64	1.61	28.97	0.0356	8.2
11	CuNiCoFe	1.14	5	1.39	223.55	0.0114	9.5
12	CuNiCoFeMn	3.18	1.76	1.61	41.04	0.0316	9
13	CuNi2FeMn2Cr	3.57	-0.49	1.55	33.58	0.0356	8.43
14	CuNi2FeCrAl0.2	2.94	0.12	1.44	44.59	0.0289	8.77
15	CuNi2FeCrAl0.4	3.86	-1.7	1.5	24.87	0.0381	8.56
16	CuNi2FeCrAl0.5	4.2	-2.51	1.52	20.44	0.0414	8.45
17	Cu0.75NiCoFeCrAl0.25	3.25	-0.71	1.72	42.39	0.032	8.4
18	Cu0.5NiCoFeAl0.5Cr	4.37	-4.6	1.75	20.16	0.0431	8
19	Cu0.5NiCoCrAl0.5Fe2	4.08	-3.53	1.68	23.06	0.0403	8
20	Cu0.5NiCoCrAl0.5Fe3	3.84	-2.84	1.57	24.99	0.0379	8
21	Cu0.5NiCoCrAl0.5Fe3.5	3.74	-2.58	1.52	25.76	0.0368	8
22	FeCoNiCrCu	1.03	3.2	1.61	369.34	0.0103	8.8
23	FeNi2CrCuAl0.2	2.94	0.12	1.44	44.59	0.0289	8.77
24	FeCrMnNiCo	3.27	-4.16	1.61	34.71	0.0325	8
25	FeCoNiCrCuAl0.3	3.42	0.16	1.79	44.96	0.0337	8.47
26	FeCoNiCrCuAl0.5	4.17	-1.52	1.77	25.77	0.0411	8.27
27	FeNi2CrCuAl0.6	4.49	-3.27	1.53	17.39	0.0443	8.36
28	NiCoFeCrMo0.3	2.38	-4.15	1.54	62.1	0.0235	8.09
29	NiCoFeCrMo0.1Al0.3	3.9	-7.26	1.62	20.05	0.0385	7.84
30	NiCoFeCrAl0.25	3.48	-6.75	1.53	23.78	0.0342	7.94
31	NiCoFeCrAl0.3	3.76	-7.27	1.54	19.99	0.037	7.88
32	NiCoFeCrAl0.375	4.12	-7.99	1.56	16.16	0.0406	7.8
33	VcuFeCoNi	2.2	-2.24	1.61	84.95	0.022	8.6
34	TaNbHfZrTi	4.99	2.72	1.61	16.9	0.0499	4.4
35	TaNbVTi	3.93	-0.25	1.39	26.07	0.0397	4.75
36	TaNbVTiAl0.25	3.83	-4.82	1.53	25.84	0.0387	4.65
37	TaNbVTiAl0.5	3.74	-8.4	1.58	24.28	0.0377	4.56
38	TaNbVTiAl1.0	3.57	-13.44	1.61	20.38	0.036	4.4
39	WnbMoTa	2.31	-6.5	1.39	60.87	0.0231	5.5
40	WnbMoTaV	3.15	-4.64	1.61	41.18	0.0315	5.4
41	Al20Li20Mg10Sc20Ti30	5.16	-0.4	1.56	16.17	0.0515	2.8
42	GdTbDyTmLu	5.07	0	1.61	18.76	0.0515	3
43	HoDyYGdTb	0.81	0	1.61	701.52	0.0081	3
44	YgdTbDyLu	1.37	0	1.61	245.87	0.0137	3
45	AlCo3CrCu0.5FeNi	4.88	-7.25	1.62	12.52	0.0482	7.93
46	Al0.8CrCuFeMnNi	5.15	-3.97	1.79	15.73	0.0512	7.66
47	AlCo2CrCu0.5FeNi	5.17	-7.67	1.71	11.83	0.0511	7.77

[Downloaded from jiaeee.com on 2026-11-17]

[DOI: 10.61186/jiaeee.21.1.135]

48	AlCrCuFeMnNi	5.39	-5.11	1.79	13.54	0.0536	7.5
49	Al0.5CoCrFeNi	4.6	-9.09	1.58	12.23	0.0454	7.67
50	Al0.5CoCrCuFeNiTi0.4	5.49	-6.42	1.9	13.02	0.0543	7.98
51	Al0.5CrFeNiCoCuTi0.6	5.92	-8.4	1.92	10.36	0.0586	7.85
52	Al0.5CrFeNiCoCuTi0.8	6.26	-10.11	1.92	8.54	0.0621	7.73
53	Al0.5CoCrCuFeNiTi1.0	6.53	-11.6	1.93	7.23	0.0649	7.62
54	Al0.5CoCrCuFeNiTi1.2	6.76	-12.89	1.92	6.26	0.0671	7.51
55	Al0.5CoCrCuFeNiTi1.4	6.94	-14.02	1.91	5.47	0.069	7.41
56	Al0.5CoCrCuFeNiTi1.6	7.09	-15.01	1.9	4.85	0.0706	7.31
57	Al0.5CoCrCuFeNiTi1.8	7.21	-15.86	1.89	4.34	0.0719	7.22
58	Al0.5CoCrCuFeNiTi2.0	7.31	-16.6	1.88	3.91	0.0729	7.13
59	CoCrFeNiTi0.5	5.33	-11.56	1.58	7.91	0.0525	7.78
60	CoCrFeNiAlNb0.25	6.1	-14.66	1.72	5.26	0.0605	7.1
61	CoCrFeNiAlNb0.75	6.5	-18.03	1.79	3.95	0.0648	6.91
62	CoCrCuFeNiTi0.8	5.7	-6.75	1.79	11.12	0.0563	8.14
63	CoCrCuFeNiTi	6.12	-8.44	1.79	8.92	0.0605	8
64	CuAlNiCoCrFeSi	6.13	-18.86	1.95	4.15	0.061	7.29
65	CuNi2FeCrAl0.9	5.15	-5.22	1.56	12.08	0.0509	8.08
66	CuNi2FeCrAl1.2	5.6	-6.78	1.57	9.25	0.0556	7.83
67	CuNi2FeCrAl1.5	5.93	-8.05	1.57	7.47	0.0589	7.62
68	Cu0.5Ti0.5CrFeCoNiAl0.5	5.97	-10.84	1.89	8.79	0.0591	7.64
69	CuCoNiCrAlFeTiV	6.34	-13.94	2.08	7.73	0.0631	7
70	FeNi2CrCuAl	5.32	-5.78	1.56	10.94	0.0526	8
71	FeNi2CrCuAl1.2	5.6	-6.78	1.57	9.25	0.0555	7.84
72	FeCoNiCrCuAl0.8	4.92	-3.61	1.79	17.15	0.0487	8
73	FeCoNiCrCuAl	5.28	-4.78	1.79	14.12	0.0523	7.83
74	FeCoNiCrCuAl1.5	5.89	-7.05	1.78	9.9	0.0585	7.46
75	FeCoNiCrCuAl2.0	6.26	-8.65	1.75	7.62	0.0623	7.14
76	FeCoNiCrCuAl2.3	6.4	-9.38	1.73	6.7	0.0638	6.97
77	FeCoNiCrCuAl2.8	6.57	-10.28	1.68	5.53	0.0656	6.71
78	FeCoNiCrCuAl3.0	6.61	-10.56	1.67	5.17	0.0661	6.63
79	FeCoNiCuAl	5.61	-5.28	1.61	10.44	0.0556	8.2
80	MnCrFe1.5Ni0.5Al0.3	4.7	-5.51	1.48	13.89	0.047	7.19
81	MnCrFe1.5Ni0.5Al0.5	5.16	-7.26	1.52	10.62	0.051	7
82	ErTbDyNiAl	13.74	-37.6	1.61	-2.24	0.1429	4.4
83	PdPtCuNiP	9.29	-23.68	1.61	-1.26	0.0952	9.2
84	SrCaYbMgZn	15.25	-13.12	1.61	-0.017	0.1565	4.2
85	SrCaYbMgZn0.5Cu0.5	16.37	-10.6	1.75	0.61	0.1699	4.1
86	SrCaYbLi0.55Mg0.45Zn	15.71	-12.15	1.75	0.2	0.1612	4.09
87	TiZrCuNiBe	12.53	-30.24	1.61	-0.9	0.1268	6.2
88	ZrHfTiCuNi	10.34	-27.36	1.61	-0.27	0.1049	6.6
89	ZrHfTiCuFe	10.43	-15.84	1.61	1.73	0.1059	6.2
90	ZrHfTiCuCo	10.24	-23.52	1.61	0.42	0.1039	6.4

[Downloaded from jiaeee.com on 2026-11-17]

[DOI: 10.61186/jiaeee.21.1.135]

مراجع

[1] Ye, Y. F., Wang, Q., Lu, J., Liu, C. T., & Yang, Y., High-entropy alloy: challenges and prospects. Materials Today, Vol. 19, No. 6, pp. 349-362, 2016.

[2] B. Cantor, I.T.H. Chang, P. Knight, A.J.B. Vincent., Microstructural development in equiatomic multicomponent alloys, Mater. Sci. Eng. A 375–377, pp. 213–218, 2004.

[3] K.T. Butler, D.W. Davies, H. Cartwright, O. Isayev, A. Walsh., Machine learning for molecular and materials science, Nature, Vol. 559, pp. 547–555, 2018.

[4] Ahajjam, S., El Haddad, M., & Badir, H., A new scalable leader-community detection approach for community detection in social networks, Social Networks, Vol. 54, pp. 41-49, 2018.

[5] Ozaki, N., Tezuka, H., & Inaba, M., A simple acceleration method for the Louvain algorithm. International Journal of Computer and Electrical Engineering, Vol. 8, No. 3, pp. 207, 2016.

[۶] طباطبایی، یزدیان دهکردی، جهانگرد رفسنجانی، "به‌کارگیری رویکردهای یادگیری ماشین جهت پیش‌بینی انحراف ابعاد کاشی‌های سرامیکی"، نشریه مهندسی برق و الکترونیک ایران، جلد ۱۹، شماره ۲، صفحات ۱۹۹-۲۰۶، ۱۴۰۱.

[۷] علیزاده، حسین‌زاده، ناظمی، "تشخیص اجتماعات ترکیبی در شبکه‌های اجتماعی"، مجله مهندسی برق و الکترونیک ایران، جلد ۱۱، شماره ۲، صفحات ۴۹-۶۰. انتشارات مهندسی برق و الکترونیک ایران، ۱۳۹۳.

[۸] شاهرخ‌زاده، رفیعی، "بهبود کارایی سیستم‌های توصیه‌گر در مواجه با مساله شروع سرد با استفاده از تحلیل رفتار کاربران در شبکه‌های اجتماعی"، نشریه مهندسی برق و الکترونیک ایران، جلد ۲۰، شماره ۱، ۱۴۰۱.

[9] Safdari, H., Contisciani, M., & De Bacco, C., Reciprocity, community detection, and link prediction in dynamic networks, Journal of Physics: Complexity, Vol. 3, No. 1, pp. 015010, 2022.

[10] Li, C., Chen, H., Li, T., & Yang, X., A stable community detection approach for complex network based on density peak clustering and label propagation, Applied Intelligence, Vol. 52, No. 2, pp. 1188-1208, 2022.

[۱۱] یوسفی، میرحسینی، شعبانی، "تشخیص اجتماعات در شبکه‌های اجتماعی با استفاده از الگوریتم پنگوئن امپراطور"، پنجمین همایش ملی فناوری‌های نوین در مهندسی برق، کامپیوتر و مکانیک ایران، ۱۴۰۱.

[12] Guo, Y. Esfahani, F., Shao, X., Srinivasan, V., Thomo, A., Xing, L., & Zhang, X., Integrative COVID-19 biological network inference with probabilistic core decomposition, Briefings in bioinformatics, Vol. 23, No. 1, pp. bbab455, 2022.

[13] He, Q., & Yang, Y., On lattice distortion in high entropy alloys, Frontiers in Materials, Vol. 5, No. 42, 2018.

[14] Dai, D., Xu, T., Wei, X., Ding, G., Xu, Y., Zhang, J., & Zhang, H., Using machine learning and feature engineering to characterize limited material datasets of high-entropy alloys, Computational Materials Science, Vol. 175, 2020.

[15] Kaufmann, K., & Vecchio, K. S., Searching for high entropy alloys: A machine learning approach. Acta Materialia, Vol. 198, pp. 178-222, 2020.

[16] Zhang, Y., Wen, C., Wang, C., Antonov, S., Xue, D., Bai, Y., & Su, Y., Phase prediction in high entropy alloys with a rational selection of materials descriptors and machine learning models. Acta Materialia, Vol. 185, pp. 528-539, 2020.

[17] Risal, S., Zhu, W., Guillen, P., & Sun, L., Improving phase prediction accuracy for high entropy alloys with machine learning, Computational Materials Science, Vol. 192, pp. 110389, 2021.

[18] Qi, J., Hoyos, D. I., & Poon, S. J., Machine Learning-Based Classification, Interpretation, and Prediction of High-Entropy-Alloy Intermetallic Phases, arXiv preprint arXiv:2208.02141, 2022.

[19] Chang, H., Tao, Y., Liaw, P. K., & Ren, J., Phase prediction and effect of intrinsic residual strain on phase stability in high-entropy alloys with machine learning, Journal of Alloys and Compounds, Vol. 921, pp. 166149, 2022.

[20] Qu, N., Liu, Y., Zhang, Y., Yang, D., Han, T., Liao, M., ... & Zhang, L., Machine learning guided phase formation prediction of high entropy alloys, Materials Today Communications, Vol. 32, pp. 104146, 2022.

[21] Ghouchan Nezhad Noor Nia, R., Jalali, M., Mail, M., Ivanisenko, Y., & Kübel, C., Machine Learning Approach to Community Detection in a High-Entropy Alloy Interaction Network, ACS omega, Vol. 7, No. 15, pp. 12978-12992, 2022.

[22] Ghouchan Nezhad Noor Nia, R., Jalali, M., & Houshmand, M., A Graph-Based k-Nearest Neighbor (KNN) Approach for Predicting Phases in High-Entropy Alloys, Applied Sciences, Vol. 12, No. 16, pp. 8021, 2022.

[23] Han, J., Kamber, M., & Pei, J., Getting to Know Your Data, Data Mining, pp. 39–82, 2012.

[24] Niwattanakul, S., Singthongchai, J., Naenudorn, E., & Wanapu, S., Using of Jaccard coefficient for keywords similarity, In Proceedings of the international multiconference of engineers and computer scientists, Vol. 1, No. 6, pp. 380-384, 2013.

[25] Newman, M. E. (2004). Fast algorithm for detecting community structure in networks, Physical review E, Vol. 69, No. 6, 2004.

[26] Girvan, M., & Newman, M. E., Community structure in social and biological networks. Proceedings of the national academy of sciences, Vol. 99, No. 12, pp. 7821-7826, 2002.

[27] Newman, M. E., Modularity and community structure in networks, Proceedings of the national academy of sciences, Vol. 103, No. 23, pp.8577-8582, 2006.

[28] Blondel, V. D., Guillaume, J. L., Lambiotte, R., & Lefebvre, E., Fast unfolding of communities in large networks, Journal of statistical mechanics: theory and experiment, Vol. 2008, No. 10, pp. 10008, 2008.

[29] Zhang, Y., Zhou, Y. J., Lin, J. P., Chen, G. L., & Liaw, P. K., Solid- solution phase formation rules for multi-component alloys, Advanced Engineering Materials, Vol. 10, No. 6, pp. 534-538, 2008.

[Downloaded from jiaeee.com on 2026-11-17]

[DOI: 10.61186/jiaeee.21.1.135]

[30] Ye, Y. F., Wang, Q., Lu, J., Liu, C. T., & Yang, Y., Design of high entropy alloys: A single-parameter thermodynamic rule, Scripta Materialia, Vol. 104, pp. 53-55, 2015.

[1] High-Entropy Alloys (HEA)
[2] Hume-Rothery rule
[3] Modularity
[4] Isolated

[Downloaded from jiaeee.com on 2026-11-17]

[DOI: 10.61186/jiaeee.21.1.135]