Document Type: Full length research Paper
Pages: 49-63

Prediction of Elastic Properties in Multi-principal Element Alloys Using Machine Learning

Elham Zare, Fardin Taghizadeh*

Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, Yasuj University, Yasuj, Iran

Received: 12.07.2026 Final revised: 05.08.2026 Accepted: 19.09.2026 Published On-Line: 22.09.2026

Doi: 10.22055/jrmbs.2026.20971

Abstract

The design of multi-principal element alloys (MPEAs), due to their vast compositional space and the complexity arising from chemical disorder, necessitates rapid and cost-effective methods for the preliminary estimation of mechanical properties. In this study, a data-driven machine learning framework was developed to predict the elastic constants (C_{11}, C_{12} and C_{44}) as well as the bulk and shear moduli for alloy systems comprising Cu, Ni, Au, Pd, and Pt. The dataset was extracted from reported binary alloys, and the atomic fractions of the elements along with binding energy were selected as the model input descriptors. Several regression algorithms, including Tree-based models, Support Vector Regression, Regularized Regression models, Artificial Neural Networks, and ensemble models, were evaluated. The results demonstrated that the selected models achieve high predictive accuracy for elastic properties, yielding R^2 values of 0.9989, 0.9832, 0.9754, 0.9642, and 0.9636 for bulk modulus, shear modulus, C_{11}, C_{12} and C_{44}, respectively. Correlation and SHAP analyses revealed that binding energy plays a dominant role in controlling the elastic response, whereas Pt is associated with an increase in bulk stiffness, and Au contributes to a reduction in shear resistance.

Keywords: Multi-principal element alloys (MPEAs), Machine learning, Elastic properties, Binding energy, SHAP analysis.

* Corresponding Author: taghizadeh@yu.ac.ir

This work is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License

مقاله پژوهشی کامل

مجلهٔ پژوهش سیستم‌های بس‌ذره‌ای، دورهٔ۱۵، شمارهٔ۳، پاییز۱٤۰٤ ۵۰

پیش‌بینی خواص کشسانی آلیاژهای چندعنصری اصلی با استفاده از یادگیری ماشین

الهام زارع، فردین تقی‌زاده*

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه یاسوج، یاسوج، ایران

دریافت: ۱٤۰۵/۰٤/۲۱ ویرایش نهائی: ۱٤۰۵/۰۵/۱٤ پذیرش: ۱٤۰۵/۰٦/۲۸ انتشار بر خط: ۱٤۰۵/۰٦/۳۱

Doi: 10.22055/jrmbs.2026.20971

چکیده

طراحی آلیاژهای چندعنصری اصلی به‌دلیل گستردگی فضای ترکیبی و پیچیدگی ناشی از بی‌نظمی شیمیایی، مستلزم روش‌هایی سریع و کم‌هزینه برای برآورد اولیه خواص مکانیکی است. در این پژوهش، یک چارچوب داده‌محور مبتنی بر یادگیری ماشین برای پیش‌بینی ثابت‌های الاستیک C_{11}, C_{12}, C_{44} و مدول‌های مکانیکی مدول حجمی و مدول برشی در سامانه‌های آلیاژی شامل Cu، Ni، Au، Pd و Pt توسعه داده شد. داده‌های مورد استفاده از آلیاژهای دوتایی گزارش‌شده استخراج گردید و کسر اتمی عناصر به‌همراه انرژی چسبندگی به‌عنوان توصیف‌گرهای ورودی مدل‌ها انتخاب شدند. چندین الگوریتم رگرسیونی شامل مدل‌های درختی، رگرسیون بردار پشتیبان، مدل‌های منظم‌سازی‌شده، شبکه عصبی مصنوعی و مدل تجمیعی مورد ارزیابی قرار گرفتند. نتایج نشان داد که مدل‌های منتخب دقت بالایی در پیش‌بینی خواص الاستیک دارند و برای مدول حجمی، مدول برشی، C_{11}، C_{12} و C_{44} به‌ترتیب مقادیر R^2 برابر با ۰٫۹۹۸۹، ۰٫۹۸۳۲، ۰٫۹۷۵٤، ۰٫۹٦٤۲ و ۰٫۹٦۳٦ به‌دست آمد. تحلیل همبستگی و SHAP نشان داد که انرژی چسبندگی نقش غالبی در کنترل پاسخ الاستیک دارد، در حالی‌که Pt با افزایش سختی حجمی و Au با کاهش مقاومت برشی همراه است.

کلیدواژگان: آلیاژهای چندعنصری، یادگیری ماشین، خواص کشسانی، انرژی بستگی، تحلیل SHAP

مقدمه

در دهه‌های اخیر، طراحی آلیاژها از رویکردهای سنتی مبتنی بر یک عنصر اصلی به‌سمت مفاهیم نوین‌تر و پیچیده‌تر حرکت کرده است. در آلیاژهای متداول، معمولاً یک عنصر به‌عنوان عنصر پایه در نظر گرفته می‌شود و سایر عناصر در مقادیر کم برای بهبود خواصی مانند استحکام، سختی، مقاومت به خوردگی یا پایداری حرارتی به‌آن افزوده می‌شوند. با این حال، ظهور آلیاژهای چندعنصری اصلی[1] و آلیاژهای با آنتروپی بالا[2] یک تغییر اساسی در فلسفه طراحی آلیاژها ایجاد کرده است. در این دسته از مواد، چندین عنصر به‌صورت هم‌زمان و در مقادیر نسبتاً زیاد در ترکیب حضور دارند و بنابراین برخلاف آلیاژهای کلاسیک، مفهوم عنصر پایه واحد تا حد زیادی کنار گذاشته می‌شود [۳-۱]. این رویکرد نوین موجب گسترش چشمگیر فضای ترکیبی قابل بررسی در طراحی مواد شده است. حضور هم‌زمان چند عنصر اصلی می‌تواند منجر به‌تشکیل ساختارهای محلول جامد ساده، فازهای بین‌فلزی، ساختارهای چندفازی یا حتی ترکیب‌هایی با رفتارهای کاملاً غیرمنتظره شود. همین ویژگی باعث شده است

* نویسنده مسئول: taghizadeh@yu.ac.ir

[1] Multi-Principal Element Alloys (MPEAs)
[2] High-Entropy Alloys (HEAs)

باز نشر این مقاله با ذکر منبع آزاد است.
این مقاله تحت مجوز کریتیو کامنز تخصیص ٤.۰ بین‌المللی می‌باشد

که MPEAs و HEAs به‌عنوان بستری جذاب برای توسعه مواد پیشرفته با ترکیب مناسبی از خواص مکانیکی، حرارتی، فیزیکی و شیمیایی مورد توجه قرار گیرند [٤،٥]. گزارش‌های متعدد نشان داده‌اند که برخی از این آلیاژها می‌توانند خواصی مانند استحکام بالا، چقرمگی شکست مطلوب، پایداری بالا، مقاومت نسبت به سایش و عملکرد مناسب در دماهای بالا یا پایین را به‌صورت هم‌زمان ارائه دهند [٨-٦].

در میان خواص مختلف آلیاژهای MPEAs، خواص کشسانی از اهمیت ویژه‌ای برخوردارند. ثابت‌های الاستیک، از جمله C_{11}، C_{12} و C_{44} در ساختارهای مکعبی، کمیت‌هایی بنیادی هستند که پاسخ اولیه ماده به‌تغییر شکل الاستیک را توصیف می‌کنند. این ثابت‌ها نه‌تنها برای محاسبه کمیت‌هایی مانند مدول حجمی، مدول برشی، مدول یانگ و نسبت پواسون ضروری هستند، بلکه اطلاعات ارزشمندی درباره پایداری مکانیکی، سختی، ناهمسانگردی الاستیک و رفتار ماده تحت فشار فراهم می‌کنند [٩،١٠]. بنابراین، پیش‌بینی دقیق ثابت‌های کشسانی می‌تواند نقش مهمی در غربالگری اولیه ترکیب‌های آلیاژی و شناسایی سامانه‌های مناسب برای کاربردهای مهندسی داشته باشد.

با وجود اهمیت خواص کشسانی در طراحی MPEAs، بررسی نظام‌مند آن‌ها به‌دلیل گستردگی فضای ترکیبی و بی‌نظمی شیمیایی ذاتی، دشوار و پرهزینه است. حتی با تعداد محدودی عنصر، تغییر درصد اجزا می‌تواند تعداد زیادی ترکیب ممکن ایجاد کند [١١،١٢]. در این میان، روش‌های مبتنی بر اصول اولیه، به‌ویژه نظریه تابعی چگالی[1]، ابزارهای قدرتمندی برای مطالعه خواص مواد در مقیاس اتمی هستند و در پیش‌بینی انرژی تشکیل، پایداری فازی و خواص مکانیکی موفق بوده‌اند [١٣،١٤]. با این حال، استفاده گسترده ازDFT برای محاسبه ثابت‌های کشسانی در MPEAs به‌دلیل نیاز به‌اعمال کرنش‌های مختلف و تکرار محاسبات برای ترکیب‌ها و پیکربندی‌های متعدد، بسیار زمان‌بر و پرهزینه است [١٥].

به‌همین دلیل، استفاده از روش‌های داده‌محور و یادگیری ماشین به‌یکی از مسیرهای مهم پژوهش‌های اخیر برای کاهش هزینه محاسباتی و تسریع کشف مواد تبدیل شده است. یادگیری ماشین با استخراج الگوهای پنهان میان ترکیب شیمیایی، ساختار اتمی، ویژگی‌های الکترونی و خواص ماده، امکان پیش‌بینی خواص ترکیب‌های جدید را بدون نیاز به‌انجام محاسبات جداگانه DFT برای هر ترکیب فراهم می‌کند [١٨-١٦]. این رویکرد به‌ویژه در طراحی MPEAs، که با فضای جست‌وجوی بسیار بزرگی روبه‌رو است، اهمیت بالایی دارد. در سال‌های اخیر، مدل‌هایی مانند جنگل تصادفی[2]، تقویت گرادیانی[3]، ماشین بردار پشتیبان[4]، شبکه‌های عصبی مصنوعی[5] و روش‌های عمیق[6] در پیش‌بینی خواصی مانند انرژی تشکیل، سختی، مدول‌های الاستیک، دمای ذوب و پایداری فازی موفق بوده‌اند [٢١-١٩]. همچنین، در HEAs و MPEAs، مطالعات اخیر نشان داده‌اند که این مدل‌ها می‌توانند ابزار مؤثری برای غربالگری سریع ترکیب‌ها و شناسایی نواحی امیدبخش در فضای ترکیبی باشند [٢٢،٢٣].

به‌طور خاص، چندین مطالعه جدید به پیش‌بینی خواص کشسانی در HEAs و MPEAs با استفاده از یادگیری ماشین پرداخته‌اند. برای نمونه، برخی پژوهش‌ها تلاش کرده‌اند با ترکیب داده‌های حاصل از DFT و الگوریتم‌های یادگیری ماشین، ثابت‌های الاستیک

[1] Density Functional Theory (DFT)
[2] Random Forest (RF)
[3] Gradient Boosting
[4] Support Vector Regression (SVR)
[5] Artificial Neural Network (ANN)
[6] Deep Learning (DL)

آلیاژهای پیچیده را پیش‌بینی کنند [۲٤،۲۵]. همچنین، در مطالعات جدیدتر، استفاده از توصیف‌گرهای پیشرفته‌تر، مانند ویژگی‌های مبتنی بر محیط اتمی، توزیع چگالی بار و اطلاعات الکترونی، مورد توجه قرار گرفته است [۲٦]. این رویکردها نشان می‌دهند که مدل‌های یادگیری ماشین می‌توانند فراتر از وابستگی ساده به‌ترکیب شیمیایی عمل کرده و اطلاعات عمیق‌تری از ساختار و برهم‌کنش‌های اتمی را در فرایند پیش‌بینی وارد کنند.

با این حال، کمبود داده‌های تجربی و محاسباتی برای MPEAs همچنان یک چالش کلیدی است؛ چراکه تولید داده‌های DFT برای تمامی ترکیب‌ها بسیار پرهزینه است. بنابراین، توسعه چارچوب‌هایی که با استفاده از داده‌های محدودتر (مانند آلیاژهای دوتایی)، خواص سامانه‌های پیچیده را پیش‌بینی کنند، جهت کاهش هزینه‌های محاسباتی و تسریع جست‌وجو در فضای ترکیبی ضروری است [۲۷].

در این پژوهش، به‌منظور غلبه بر محدودیت‌های زمانی و هزینه‌ایِ بالای محاسبات DFT، یک چارچوب داده‌محور مبتنی بر یادگیری ماشین برای پیش‌بینی سریع خواص کشسانی MPEAs توسعه یافته است. در این رویکرد، مدل‌های یادگیری ماشین با بهره‌گیری از توصیف‌گرهای ترکیب شیمیایی و ویژگی‌های الکترونی، آموزش دیده و قادرند بدون نیاز به‌انجام محاسبات سنگین DFT برای تک‌تک ترکیب‌ها، ثابت‌های الاستیک را در فضای گسترده ترکیبی پیش‌بینی کنند. این استراتژی نه تنها امکان غربالگری سریع ترکیب‌های جدید و شناسایی نواحی امیدبخش در فضای ترکیبی را فراهم می‌آورد، بلکه با کاهش نیاز به آزمایش‌های تجربی و محاسبات پرهزینه، مسیر را برای درک عمیق‌ترِ رابطه میان ترکیب–ساختار–خواص هموار می‌کند.

روش تحقیق

داده‌های مورد استفاده در این پژوهش از اطلاعات منتشرشده پیشین درباره آلیاژهای دوفلزی استخراج شده و از مرجع [۲٤] گردآوری شد. این مجموعه‌داده شامل اطلاعات مربوط به‌ترکیب آلیاژی، انرژی بستگی و خواص مکانیکی متناظر بود. به‌منظور تعریف یک فضای توصیف‌گر فشرده اما از نظر فیزیکی معنادار، شش متغیر ورودی شامل کسر اتمی عناصر Cu، Ni، Au، Pd و Pt، به‌همراه انرژی بستگی در نظر گرفته شد. انتخاب این توصیف‌گرها بر این مبنا انجام گرفت که ترکیب شیمیایی و استحکام پیوند اتمی از مهم‌ترین عوامل مؤثر بر رفتار الاستیک و مکانیکی آلیاژها به‌شمار می‌روند و می‌توانند اطلاعات کافی برای مدل‌سازی خواص هدف فراهم آورند. در این مطالعه، پنج خاصیت مکانیکی شامل ثابت‌های الاستیک C_{11}، C_{12} و C_{44} و نیز مدول حجمی و مدول برشی به‌صورت مستقل مورد بررسی قرار گرفتند. هر یک از این کمیت‌ها به‌عنوان یک مسئله رگرسیون نظارت‌شده جداگانه در نظر گرفته شد تا ساختار رابطه میان متغیرهای ورودی و هر خروجی با بیشترین شفافیت ممکن آموخته شود.

پیش‌پردازش و آماده‌سازی داده‌ها

پیش از توسعه مدل‌های پیش‌بینی، داده‌ها تحت یک فرآیند پیش‌پردازش استاندارد قرار گرفتند تا کیفیت آماری مجموعه‌داده بهبود یابد و احتمال بروز سوگیری در آموزش مدل‌ها کاهش پیدا کند. در نخستین گام، نمونه‌های تکراری حذف شدند تا از تأثیرگذاری نامتناسب داده‌های تکرارشده بر فرایند برازش جلوگیری شود. سپس، نمونه‌هایی که فاقد مقادیر معتبر برای متغیر هدف بودند، از تحلیل مربوط به‌همان خروجی کنار گذاشته شدند. برای مقادیر مفقود موجود در متغیرهای ورودی، از میانگین هر ویژگی به‌عنوان

روش جایگزینی استفاده شد. این رویکرد موجب شد که انسجام داده‌ها حفظ شود و در عین حال از حذف غیرضروری نمونه‌هایی که فقط بخشی از اطلاعات ورودی آن‌ها ناقص بود جلوگیری گردد. از آنجا که هر خاصیت مکانیکی به‌صورت مستقل مدل‌سازی شد، مراحل آماده‌سازی داده، آموزش، بهینه‌سازی و ارزیابی نیز برای هر متغیر هدف به‌صورت جداگانه انجام گرفت. این راهبرد از اختلاط رفتار آماری خروجی‌های مختلف جلوگیری می‌کند و امکان مقایسه دقیق‌تر عملکرد مدل‌ها را برای هر خاصیت فراهم می‌سازد.

انتخاب و طبقه‌بندی الگوریتم‌های یادگیری ماشین

به‌منظور شناسایی مناسب‌ترین چارچوب پیش‌بینی، مجموعه‌ای از الگوریتم‌های رگرسیونی با ماهیت‌های متفاوت مورد استفاده قرار گرفت تا انواع الگوهای خطی، غیرخطی و برهم‌کنشی میان توصیف‌گرهای آلیاژی و خواص مکانیکی پوشش داده شوند. این مدل‌ها شامل درختان تصمیم‌گیری تقویت‌شده با گرادیان ،RF، SVR، رگرسیون لاسو ، رگرسیون ریج و شبکه عصبی مصنوعی ANN بودند. استفاده هم‌زمان از این مدل‌ها این امکان را فراهم ساخت که هم ساختارهای ساده‌تر و نزدیک به رفتار خطی و هم روابط پیچیده‌تر و غیرخطی میان ویژگی‌های شیمیایی و خواص مکانیکی مورد ارزیابی قرار گیرند. مدل‌های درخت‌محور مانند GBDT و RF به‌طور خاص برای شناسایی روابط غیرخطی و تعاملات میان ویژگی‌ها مناسب هستند، در حالی‌که مدل‌های خطی منظم‌سازی‌شده مانند Lasso و Ridge علاوه بر ایفای نقش مقایسه‌ای، از منظر تفسیرپذیری نیز ارزشمندند. از سوی دیگر، SVR به‌عنوان یک روش مبتنی بر کرنل می‌تواند در داده‌های با ابعاد متوسط عملکرد مطلوبی ارائه دهد و ANN نیز به‌دلیل توانایی در تقریب توابع پیچیده، گزینه‌ای مناسب برای استخراج الگوهای غیرخطی عمیق‌تر محسوب می‌شود.

راهبرد نرمال‌سازی و مقیاس‌گذاری

با توجه به تفاوت الگوریتم‌ها از نظر حساسیت به مقیاس داده‌ها، راهبرد پیش‌پردازش برای همه مدل‌ها یکسان در نظر گرفته نشد. برای مدل‌هایی که به مقیاس ویژگی‌ها حساس هستند، از جمله SVR و رگرسیون‌های منظم‌سازی‌شده Lasso و Ridge، ویژگی‌ها پیش از آموزش با استفاده از روش استانداردسازی نرمال‌سازی شدند. این کار موجب شد که فرآیند آموزش برای مدل‌های حساس به مقیاس پایدارتر شده و مقایسه میان ضرایب یا فاصله‌ها در فضای ویژگی‌ها معنادارتر گردد. در مقابل، مدل‌های درخت‌محور مانند GBDT و RF مستقیماً بر روی مقادیر خام ویژگی‌ها آموزش داده شدند، زیرا این دسته از مدل‌ها بر مبنای آستانه‌گذاری و تفکیک ترتیبی متغیرها عمل می‌کنند و وابستگی مستقیمی به مقیاس عددی داده‌ها ندارند. بدین‌ترتیب، برای هر خانواده از مدل‌ها، راهبردی متناسب با ماهیت آماری و محاسباتی آن‌ها اتخاذ شد تا عملکرد پیش‌بینی بهینه گردد.کیفی و کمی در این قسمت ارایه می گردد. در صورت نیاز می‌توان موضوعات را طبقه بندی نموده و از جدول، نمودار یا تصویر استفاده شود که شامل منابع داده‌ها، نحوهٔ محاسبه آنها (در صورت نیاز)، آزمون‌های لازم و نتیجهٔ آن، نتایج برآورد یا اجرای مدل می‌باشد.

بهینه‌سازی ابرپارامترها و اعتبارسنجی مدل

از آنجا که عملکرد نهایی هر الگوریتم به‌شدت به تنظیم مناسب ابرپارامترها وابسته است، فرآیند بهینه‌سازی مدل‌ها به‌صورت نظام‌مند انجام شد. برای

این منظور، بسته به ماهیت و ابعاد فضای جست‌وجوی پارامترها، از جست‌وجوی شبکه‌ای یا جست‌وجوی تصادفی استفاده شد. ارزیابی و انتخاب پیکربندی بهینه بر پایه اعتبارسنجی متقابل پنج‌تایی انجام گرفت و ضریب تعیین R^2 به‌عنوان معیار اصلی انتخاب مدل در نظر گرفته شد. استفاده از اعتبارسنجی متقابل باعث شد که انتخاب مدل وابسته به یک افراز خاص از داده‌ها نباشد و تخمینی پایدارتر از توان تعمیم‌پذیری مدل به داده‌های دیده‌نشده حاصل شود. این رویکرد همچنین احتمال بیش‌برازش را کاهش داد و شرایطی فراهم آورد که مقایسه میان مدل‌های مختلف بر مبنای معیار واحد و در یک چارچوب ارزیابی منصفانه صورت گیرد.

معیارهای ارزیابی عملکرد مدل

برای سنجش جامع عملکرد مدل‌ها، مجموعه‌ای از معیارهای استاندارد رگرسیونی مورد استفاده قرار گرفت تا کیفیت پیش‌بینی از زوایای مختلف ارزیابی شود. این معیارها شامل ضریب تعیین R^2، میانگین قدرمطلق خطا ، میانگین مربع خطا و جذر میانگین مربع خطا بودند. ضریب R^2 نشان می‌دهد که چه سهمی از واریانس داده‌های واقعی توسط مدل توضیح داده می‌شود، در حالی که متوسط بزرگی خطاهای پیش‌بینی را بدون حساسیت بیش‌ازحد به داده‌های پرت بیان می‌کند. از سوی دیگر، MSE و RMSE به دلیل مجذور کردن خطاها، حساسیت بیشتری نسبت به انحرافات بزرگ دارند و از این رو برای شناسایی مدل‌هایی که در برخی نمونه‌ها دچار خطاهای شدید می‌شوند مفید هستند. استفاده هم‌زمان از این معیارها امکان ارزیابی متوازن‌تری از رفتار مدل فراهم می‌سازد و باعث می‌شود قضاوت درباره عملکرد تنها به یک شاخص منفرد محدود نشود [۲۸].

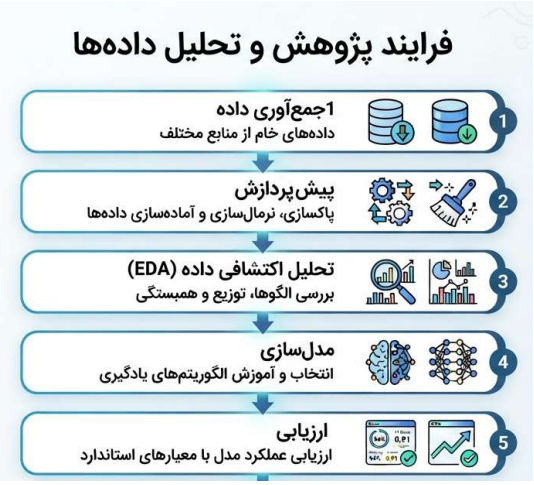
تحلیل تفسیرپذیری و اهمیت ویژگی‌ها

علاوه بر ارزیابی کمی دقت پیش‌بینی، تفسیرپذیری مدل‌ها نیز در این پژوهش مورد توجه قرار گرفت، زیرا در حوزه مواد تنها دستیابی به پیش‌بینی دقیق کافی نیست و درک نقش هر متغیر در شکل‌گیری پاسخ مدل نیز اهمیت بنیادی دارد. به همین منظور، از روش توضیحات جمع‌پذیر شپلی برای تحلیل سهم نسبی ویژگی‌ها در پیش‌بینی خواص مکانیکی استفاده شد. این روش با تخصیص یک مقدار شپلی به هر ویژگی، میزان مشارکت آن ویژگی را در خروجی مدل مشخص می‌کند و از این طریق امکان تحلیل هم در سطح کلی و هم در سطح نمونه‌های منفرد را فراهم می‌سازد. به‌کارگیری SHAP این امکان را ایجاد کرد که مشخص شود کدام‌یک از متغیرهای ترکیبی و ترمودینامیکی، از جمله درصد عناصر و انرژی بستگی، بیشترین اثر را بر خواص مکانیکی پیش‌بینی‌شده دارند. این نوع تحلیل نه‌تنها به افزایش شفافیت مدل‌های یادگیری ماشین کمک می‌کند، بلکه می‌تواند به ارائه تفسیرهای فیزیکی معتبر از روابط ساختار–ویژگی در آلیاژهای دوفلزی نیز منجر شود.

توسعه مدل یادگیری تجمیعی

در کنار مدل‌های منفرد، یک چارچوب یادگیری Stacking نیز به‌منظور بهبود دقت و پایداری پیش‌بینی‌ها توسعه داده شد. در این رویکرد، پیش‌بینی‌های حاصل از چند مدل پایه به‌عنوان ورودی یک فراگیرنده سطح دوم مورد استفاده قرار گرفتند تا اطلاعات مکمل تولیدشده توسط الگوریتم‌های مختلف در یک مدل نهایی ادغام شود. برای فراگیرنده نهایی یا متا–مدل، ازRidge استفاده شد، زیرا این مدل ضمن برخورداری از پایداری عددی مناسب، قابلیت

منظم‌سازی مؤثری نیز دارد و می‌تواند از بیش‌برازش در مرحله ترکیب خروجی مدل‌های پایه جلوگیری کند. هدف از این ساختار تجمیعی آن بود که محدودیت‌های هر مدل منفرد از طریق هم‌افزایی میان چند الگوریتم کاهش یابد و در نهایت پیش‌بینی‌هایی مقاوم‌تر، دقیق‌تر و پایدارتر حاصل شود. در مجموع، این چارچوب روش‌شناختی که نمای شماتیک آن در شکل ۱ ارائه شده است، یک رویه سیستماتیک را از مرحله آماده‌سازی داده‌ها تا تفسیرپذیری مدل فراهم می‌کند که دقت پیش‌بینی خواص مکانیکی آلیاژها را تضمین می‌نماید.

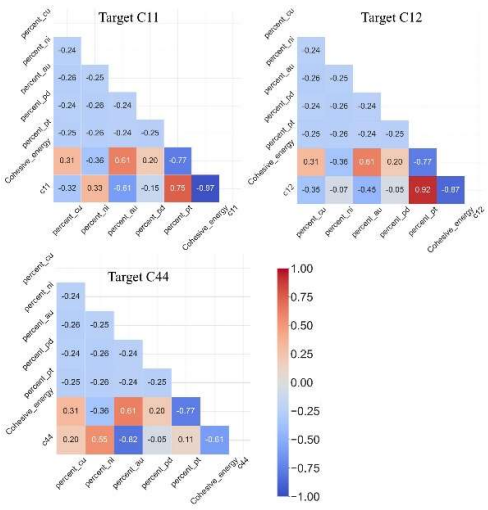


شکل ۱. نمودار شماتیک چارچوب یادگیری ماشین پیشنهادی برای پیش‌بینی خواص الاستیک آلیاژهای چندعنصری

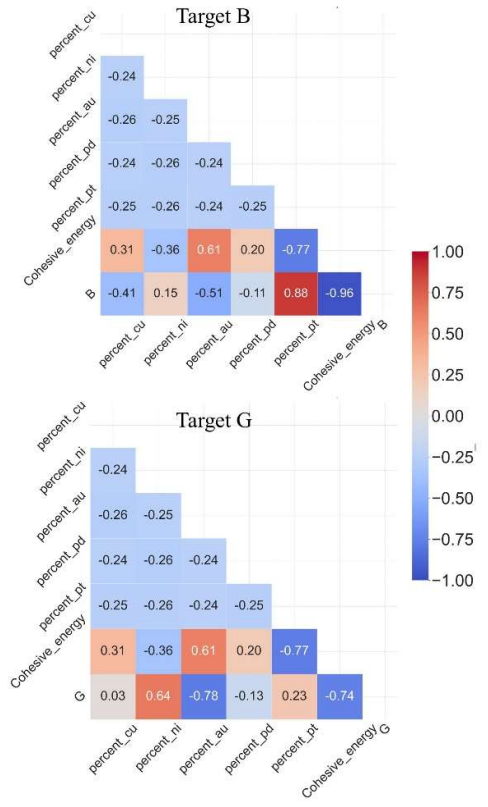
تحلیل همبستگی ویژگی‌ها و متغیرهای هدف

به‌منظور درک اولیه از فضای داده‌ها، شناسایی روابط خطی میان توصیف‌گرهای ورودی (درصدهای عنصری و انرژی بستگی) و متغیرهای هدف ماتریس همبستگی پیرسون به صورت مثلثی محاسبه و ترسیم شد (شکل۲ و۳). هدف از این تحلیل، علاوه بر بررسی وجود هم‌خطی احتمالی میان ویژگی‌های ورودی، دستیابی به یک شهود فیزیکی پیرامون میزان وابستگی خواص مکانیکی آلیاژهای دوفلزی به پارامترهای ترمودینامیکی (انرژی بستگی) و ترکیب شیمیایی است. این گام نقش مهمی در ارزیابی و توجیه ویژگی‌های انتخاب‌شده برای آموزش مدل‌های یادگیری ماشین ایفا می‌کند.

بر اساس نتایج حاصل از تحلیل همبستگی، انرژی بستگی قوی‌ترین همبستگی منفی را با تمامی خواص مکانیکی مورد مطالعه نشان می‌دهد. این وابستگی معکوس به ویژه در مورد ثابت الاستیک C_{11} و مدول حجمی به ترتیب با ضریب پیرسون r=-0/97 و r=-0/96 بسیار شدید است. این همبستگی منفی شدید نشان‌دهنده پیوند عمیق میان پایداری ترمودینامیکی ساختار پیوند و مقاومت آلیاژ در برابر تغییر شکل‌های الاستیک یکنواخت است. در میان متغیرهای ترکیبی، غلظت عنصری Pt همبستگی مثبت بسیار قوی با ثابت الاستیک C_{12} (r= 0/92) و مدول حجمی (r= 0/88) دارد. این امر نشان می‌دهد حضور Pt در ساختار دوفلزی به طور موثری صلبیت حجمی و مقاومت به فشار هیدروستاتیک آلیاژ را تقویت می‌کند. برای خواصی که مستقیماً با مقاومت برشی شبکه مرتبط هستند (یعنی مدول برشی و ثابت الاستیک C_{44})، رفتار متفاوتی در برابر عناصر آلیاژی مشاهده می‌شود. غلظت عنصر Au همبستگی منفی شدیدی با C_{44} (r=-0/82) و مدول برشی (r=-0/78) نشان می‌دهد که حاکی از اثر نرم‌کنندگی Au بر خواص برشی آلیاژ است. در مقابل، Ni همبستگی مثبت و مشخصی با مدول برشی (r=0/64) و C_{44} (r=0/55) دارد که نقش سفت‌کنندگی آن را در برابر تغییر شکل‌های برشی تایید می‌کند. همبستگی بین عناصر مختلف آلیاژی (توصیف‌گرهای ترکیبی) عمدتاً ضعیف تا متوسط و منفی است.



شکل ۲. نقشه‌های حرارتی همبستگی پیرسون میان توصیف‌گرهای منتخب و ضرایب الاستیک.



شکل ۳. نقشه‌های حرارتی همبستگی پیرسون میان توصیف‌گرهای منتخب و مدول حجمی و مدول برشی.

ارزیابی عملکرد مدل‌ها و گزینش مدل‌های بهینه

در مرحله نخست، عملکرد مدل‌های مختلف یادگیری ماشین برای هر یک از خواص هدف با استفاده از شاخص‌های ارزیابی روی مجموعه آزمون شامل R^2، MAE، RMSE، MSE مورد مقایسه قرار گرفت. نتایج حاصل برای همه خواص هدف در جدول های ۱ تا ۵ ارائه شده است. بر این اساس، برای خاصیت مدول حجمی، مدل XGB با بیشترین مقدار (R^2=0/9989) و کمترین خطای (MAE=0/0051, RMSE=0/0079) به‌عنوان بهترین مدل انتخاب شد. برای مدول برشی، مدل Stack بهترین عملکرد را نشان داد (R^2=0/9831, MAE=0/0202, RMSE=0/0285). در مورد ثابت الاستیک C_{11}، مدل LGB با R^2=0/9754، مناسب‌ترین مدل تشخیص داده شد. همچنین برای C_{12}، مدل GBDT با R^2=0/9641 و عملکرد خطای قابل‌قبول بهترین نتیجه را ارائه داد. این نتایج نشان می‌دهد که انتخاب مدل نهایی برای هر خاصیت نه تنها بر پایه بیشینه‌سازی ضریب تعیین، بلکه با درنظرگرفتن پایداری خطاها شده انجام شده است؛ بنابراین، مدل منتخب برای هر هدف نماینده‌ای از بهترین توازن میان دقت، پایداری و تعمیم‌پذیری است. در ادامه، نمودارهای پیش‌بینی در مقابل مقدار واقعی برای همین مدل‌های برتر رسم شدند تا علاوه بر نمایش کمیِ دقت پیش‌بینی، میزان هم‌راستایی نقاط پیش‌بینی‌شده با خط ایده‌آل (y=x) نیز به‌صورت بصری تأیید شود. از این‌رو، این نمودارها مکمل جدول ارزیابی بوده و در کنار آن، اعتبار نهایی مدل‌های منتخب را برای بازتولید رفتار الاستیک آلیاژهای مورد مطالعه نشان می‌دهند.

جدول۱. نتایج ارزیابی آماری و مقایسه عملکرد مدل‌های یادگیری ماشین جهت پیش‌بینی ثابت الاستیک C11

مدل	MSE	RMSE	MAE	R^2
NN	0/0017	0/0419	0/0308	0/9676
Lasso	0/0026	0/0511	0/0401	0/9521
Ridge	0/0026	0/0510	0/0401	0/9521
SVRlin	0/0026	0/0510	0/0388	0/9522
SVRpoly	0/0014	0/0382	0/0267	0/9732
SVRrbf	0/0014	0/0379	0/0267	0/9735
RF	0/0014	0/0378	0/0268	0/9737
GBDT	0/0014	0/0376	0/0268	0/9740
XGB	0/0013	0/0373	0/0263	0/9744
Stack	0/0013	6/0593	4/2515	0/9750

جدول۲. نتایج ارزیابی آماری و مقایسه عملکرد مدل‌های یادگیری ماشین جهت پیش‌بینی ثابت الاستیک C12

مدل	MSE	RMSE	MAE	R^2
NN	0/0025	0/0502	0/0359	0/9296
Ridge	0/0018	0/0430	0/0345	0/9484
SVRlin	0/0018	0/0429	0/0341	0/9485
LGB	0/0013	0/0367	0/0275	0/9623
SVRrbf	0/0013	0/0365	0/0275	0/9628
Lasso	0/0018	0/0429	0/0345	0/9485
GBDT	0/0012	0/0358	0/0270	0/9641
SVRpoly	0/0012	0/0357	0/0267	0/9643
Stack	0/0012	0/0357	0/0267	0/9643
RF	0/0012	0/0357	0/0268	0/9643

جدول۳. نتایج ارزیابی آماری و مقایسه عملکرد مدل‌های یادگیری ماشین جهت پیش‌بینی ثابت الاستیک C44

مدل	MSE	RMSE	MAE	R^2
Lasso	0/0045	0/0677	0/0543	0/8907
Stack	0/0015	0/0391	0/0279	0/9635
GBDT	0/0015	0/0399	0/0280	0/9620
LGB	0/0016	0/0404	0/0286	0/9610
RF	0/0016	0/0405	0/0282	0/9608
XGB	0/00166	0/0407	0/0288	0/9604
SVRpoly	0/0017	0/0415	0/0293	0/9590
SVRrbf	0/0017	0/0423	0/0300	0/9574
NN	0/0023	0/0479	0/0349	0/9453
Ridge	0/0045	0/0677	0/0543	0/8908

جدول٤. نتایج ارزیابی آماری و مقایسه عملکرد مدل‌های یادگیری ماشین جهت پیش‌بینی مدول حجمی

مدل	MSE	RMSE	MAE	R^2
XGB	0/00006	0/0079	0/0051	0/9989
Stack	0/00007	0/0083	0/0054	0/9987
SVRrbf	0/00007	0/0083	0/0055	0/9987
SVRpoly	0/00007	0/0085	0/0056	0/9987
LGB	0/00008	0/0091	0/0057	0/9985
GBDT	0/00009	0/0095	0/0059	0/9984
RF	0/00010	0/0101	0/0058	0/9982
SVRlin	0/00046	0/0216	0/0169	0/9919
Lasso	0/00048	0/0220	0/0177	0/9916
Ridge	0/00048	0/0220	0/0177	0/9916

جدول۵. نتایج ارزیابی آماری و مقایسه عملکرد مدل‌های یادگیری ماشین جهت پیش‌بینی مدول برشی

مدل	MSE	RMSE	MAE	R^2
SVRlin	0/0040	0/0634	0/0478	0/9166
Lasso	0/0037	0/0609	0/0494	0/9229
Ridge	0/0037	0/0609	0/0494	0/9229
NN	0/0012	0/0358	0/0261	0/9733
SVRrbf	0/0012	0/0347	0/0232	0/9749
GBDT	0/0009	0/0300	0/0219	0/9812
LGB	0/0009	0/0303	0/0213	0/9809
RF	0/0009	0/0303	0/0210	0/9809
XGB	0/0008	0/0290	0/0208	0/9825
Stack	0/0008	0/0285	0/0202	0/9831

به‌منظور ارزیابی نهایی، نمودارهای مقادیر پیش‌بینی‌شده در برابر مقادیر واقعی برای پنج متغیر هدف شامل ثابت‌های الاستیک (C_{11}، C_{12}، C_{44}) و مدول‌های الاستیک حجمی و برشی ترسیم شد (شکل ٤). در این بخش، تمرکز صرفاً بر مدل‌های منتخبِ هر خاصیت است که در ارزیابی مرحله قبل (جدول‌های ۱ تا ۵) بهترین توازن میان دقت و پایداری خطا را نشان داده‌اند؛ نتایج مربوط به سایر مدل‌ها به‌صورت تفصیلی در فایل اطلاعات تکمیلی ارائه شده است.

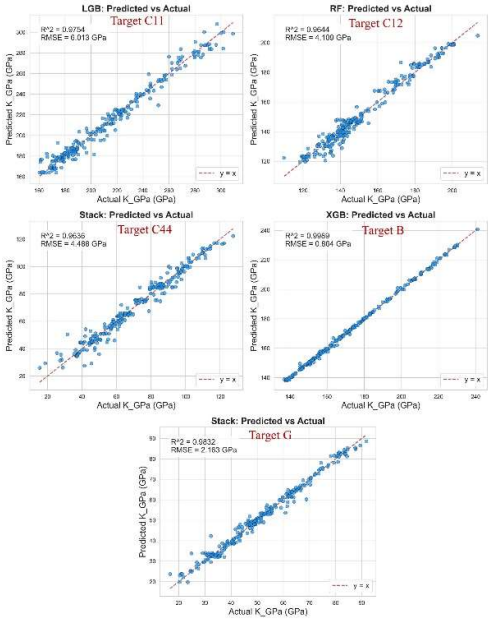
یافته‌های حاصل از مدل‌سازی نشان می‌دهند که پاسخ‌های مرتبط با کرنش‌های نرمال و تغییر حجم، با بالاترین دقت ممکن توسط الگوریتم‌های تقویت‌گر درخت تصمیم پیش‌بینی شده‌اند: مدل XGBoost به دقت خیره‌کننده R^2=0/9989 و خطای ناچیز RMSE=0/864 GPa دست یافته است. از منظر فیزیک حالت جامد، مدول حجمی بازتابی مستقیم از مشتق دوم منحنی انرژی بستگی نسبت به تغییر حجم سلول واحد است. از آنجا که انرژی بستگی به عنوان یک توصیف‌گر ترمودینامیکی کلیدی در ورودی‌های مدل حضور دارد، الگوریتم XGBoost توانسته است نگاشت غیرخطی میان چگالی پیوندها، درصد عناصر و مقاومت به تغییر شکل هیدروستاتیک را بدون سوگیری سیستماتیک در سراسر دامنه فشار ۱٤۰ تا ۲٤۰ گیگاپاسکال فرمول‌بندی کند. ثابت الاستیک C_{11} که نشان‌دهنده مقاومت شبکه کریستالی در برابر کرنش‌های

تک‌محوری طولی در امتداد محورهای اصلی است، توسط الگوریتم LightGBM با دقت R^2=0/9754 و خطای RMSE=6/013 GPa مدل‌سازی شده است. پایداری نقاط پیش‌بینی‌شده در سطوح بالا فراتر از ۳۰۰ گیگاپاسکال نشان می‌دهد که مدل تحت تأثیر اثرات نوسانی ناشی از تغییر ترکیب آلیاژ قرار نگرفته و به خوبی سهم عناصر با شعاع اتمی و صلبیت متفاوت را در هدایت تنش‌های طولی یاد گرفته است.

برخلاف مقاومت حجمی، پارامترهای برشی به دلیل وابستگی شدید به جهت‌گیری پیوندها و پایداری ساختاری آلیاژ، رفتار به مراتب غیرخطی‌تر و پیچیده‌تری از خود نشان می‌دهند. مدول برشی و ثابت الاستیک برشی C_{44} که مستقیماً با مقاومت در برابر کرنش‌های برشی خالص سر و کار دارند، توسط مدل Stacking متشکل از مدل‌های پایه با متالرنر منظم‌سازی شده‌ی Ridge پیش‌بینی شده‌اند که به ترتیب به مقادیر برتر R^2=0/9832, RMSE=2/163 GPa برای ثابت الاستیکی C_{44} و برای مدول برشی به مقادیر R^2=0/9636, RMSE=4/488 GPa دست یافته است. فیزیک کرنش برشی در محلول‌های جامد نامنظم دوفلزی به شدت تحت تأثیر پدیده ناهماهنگی اندازه اتمی و میدان‌های تنش محلی است. مدل Stacking با ترکیب بهینه فضای فرضیات الگوریتم‌های مختلف تبیین فضاهای موضعی توسط درخت‌ها و فضاهای سراسری توسط مدل‌های خطی، توانسته است نویزهای آماری ناشی از این نوسانات محلی را فیلتر کرده و واریانس پیش‌بینی را به حداقل برساند.

ثابت C_{12} که نشان‌دهنده کرنش جانبی ناشی از تنش طولی است، توسط الگوریتم RF با دقت R^2=0/9644 و خطای RMSE=0/109 GPa پیش‌بینی شده‌است. ساختار موازی و نمونه‌برداری تصادفی ویژگی‌ها در الگوریتم RF مانع از تسلط یک توصیف‌گر خاص (مانند غلظت بالای یک عنصر) شده و به مدل اجازه داده است تا سهم جفت‌شدگی‌های اتمی ناهمگن را به درستی مدل‌سازی کند.

یکی از چالش‌های اساسی در کاربرد یادگیری ماشین برای خواص مکانیکی، افت دقت مدل در نواحی مرزی (ترکیبات بسیار سخت یا بسیار نرم) است. در شکل ٤، پراکندگی کاملاً متقارن و یکنواخت نقاط داده در اطراف خط نیمساز (y=x) نشان‌دهنده برقراری فرض همگنی واریانس خطاها است. هیچ‌گونه الگوی شیپور مانند (که نشانه تغییر واریانس خطا با بزرگ شدن مقدار هدف باشد) مشاهده نمی‌شود. این توزیع یکنواخت و تصادفی خطاها که جزئیات دقیق‌تر آن با مستندات آماری در فایل اطلاعات تکمیلی قرار داده شده است، اثبات می‌کند که مدل‌های بهینه‌شده فاقد بیش‌برازش موضعی بوده و از قابلیت تعمیم‌پذیری فوق‌العاده‌ای برای اکتشاف و طراحی فرمولاسیون‌های جدید در سیستم‌های آلیاژی دوفلزی برخوردارند.

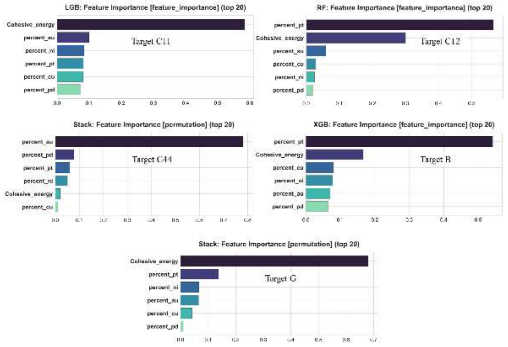


شکل٤. نمودارهای پراکندگی مقدار پیش‌بینی‌شده در مقابل مقدار واقعی برای ویژگی‌های هدف

تحلیل اهمیت ویژگی‌ها

برای تفسیر مدل‌های یادگیری ماشین از منظر فیزیک ماده، اهمیت ویژگی‌ها تنها به‌عنوان یک رتبه‌بندی آماری در نظر گرفته نشد، بلکه به‌عنوان بازتابی از نقش توصیف‌گرها در کنترل پاسخ الاستیک سیستم تفسیر گردید. تحلیل اهمیت ویژگی‌ها برای مدول حجمی نشان می‌دهد که انرژی بستگی و درصد Pt نقش غالب را دارند. غلبه انرژی بستگی در مدل‌های درختی تأیید می‌کند که مدل، پایداری ترمودینامیکی پیوندها را به‌عنوان عامل اصلی سختی در برابر فشرده‌سازی شناسایی کرده است. حضور Pt در رتبه‌های بالا نیز بازتابی از تأثیر این عنصر بر چگالی الکترونی و تقویت پیوندهای فلزی در آلیاژ است.

در پیش‌بینی ثابت الاستیک C_{11}، علاوه بر انرژی بستگی، متغیرهای ترکیبی به‌ویژه درصد عناصر با شعاع اتمی متفاوت اهمیت بالایی یافته‌اند. از آنجا که C_{11} مقاومت در برابر کرنش‌های طولی در امتداد محورهای اصلی را نشان می‌دهد، حساسیت مدل به ترکیب شیمیایی مانند Pt و Au بیانگر تأثیر صلبیت پیوندهای اتمی در امتداد اضلاع سلول واحد است. مدل‌ها به‌خوبی یاد گرفته‌اند که چگونه تغییر در غلظت عناصر، باعث تغییر در صلبیت پیوندهای طولی و در نتیجه تغییر در پاسخ شبکه به تنش‌های تک‌محوری می‌شود. در رابطه با مدول برشی، Stacking توزیع متعادل‌تری از اهمیت را میان عناصر مختلف نشان می‌دهند. برخلاف مدول حجمی، مدول برشی به جهت‌گیری پیوندها و پایداری ساختاری در برابر تغییر شکل جانبی وابسته است. بالا آمدن رتبه عناصری مانند Au و Ni در این بخش نشان‌دهنده نقش ناهمگنی میدان کرنش موضعی در مقاومت برشی است. مدل با شناسایی این الگوها، توانسته است پیچیدگی‌های مربوط به لغزش صفحات اتمی را در قالب ترکیب شیمیایی فرمول‌بندی کند. به همین ترتیب در تحلیل C_{44}، ویژگی‌های مرتبط با پایداری مکانیکی و تقارن شبکه اهمیت ویژه‌ای دارند. اهمیت ویژگی‌ها در مدل‌های برتر نشان می‌دهد که این ثابت برشی، بیش از سایرین تحت تأثیر اثرات اندازه اتمی قرار دارد. حضور پررنگ توصیف‌گرهای ترکیبی در صدر جدول اهمیت، بیانگر این است که مدل C_{44} را به‌عنوان تابعی از اعوجاج‌های موضعی شبکه در اثر حضور عناصر با شعاع‌های متفاوت مانند Cu و Pd در نظر می‌گیرد که مستقیماً بر پایداری برشی آلیاژ اثر می‌گذارند. در نهایت، برای C_{12} که نشان‌دهنده کرنش جانبی ناشی از تنش طولی است، اهمیت ویژگی‌ها به سمت ترکیب عناصر واسطه متمایل شده است. مدل‌های یادگیری ماشین نشان دادند که این خاصیت به جفت‌شدگی‌های اتمی ناهمگن بسیار حساس است. رتبه‌بندی ویژگی‌ها در این بخش ثابت می‌کند که مدل توانسته است رابطه غیرخطی میان غلظت عناصر و چگونگی انتقال تنش از یک راستا به راستای عمود بر آن را از دل داده‌ها استخراج کند. در مجموع، تکرار الگوهای مشابه در اهمیت ویژگی‌ها میان ۵ متغیر هدف، نشان‌دهنده ثبات فیزیکی مدل‌های توسعه‌یافته است؛ به این معنا که مدل‌ها صرفاً به دنبال برازش ریاضی نبوده‌اند، بلکه پارامترهایی را به‌عنوان پیش‌بین انتخاب کرده‌اند که در فیزیک متالورژی نیز به‌عنوان عوامل کنترل‌کننده رفتار الاستیک شناخته می‌شوند.

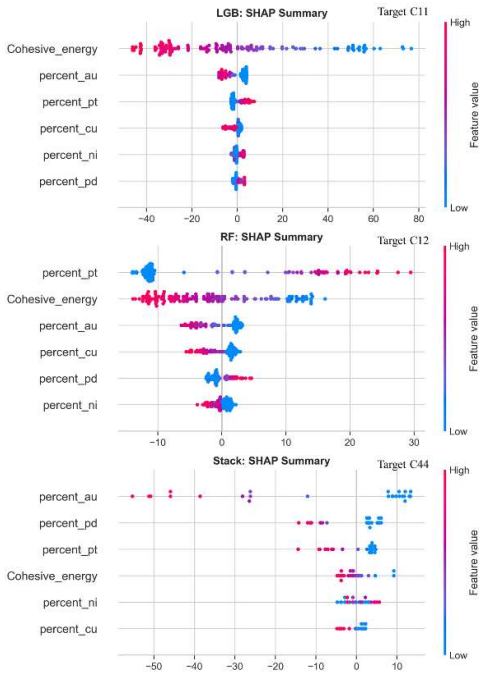


شکل۵. رتبه‌بندی اهمیت ۲۰ ویژگی برتر در مدل‌های منتخب برای پیش‌بینی خواص الاستیک.

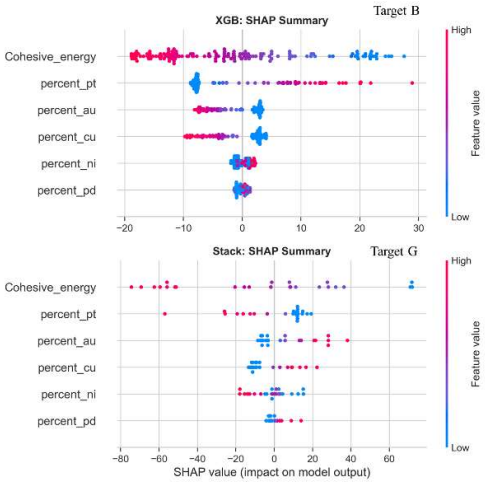
تفسیرپذیری مدل‌های یادگیری ماشین با استفاده از تحلیل SHAP

به‌منظور آشکارسازی مکانیزم‌های فیزیکی پنهان و کمی‌سازی میزان مشارکت هر یک از توصیف‌گرها در پیش‌بینی خواص الاستیک، تحلیل مقادیر SHAP انجام گرفت. نمودارهای SHAP برای ثابت‌های الاستیک و مدول‌های الاستیک به ترتیب در شکل ٦ و ۷ ارائه شده است. همان‌طور که در شکل ٦ و ۷ مشاهده می‌شود، انرژی بستگی به طور مداوم به عنوان غالب‌ترین ویژگی کنترل‌کننده پاسخ الاستیک آلیاژهای چندعنصری ظاهر شده است. مقادیر بالای انرژی بستگی (که با نقاط صورتی مشخص شده‌اند) ارتباط مستقیمی با مقادیر مثبت SHAP دارند؛ این امر نشان‌دهنده سهم بسزا و مستقیم این پارامتر در افزایش ثابت C_{11}، مدول حجمی و مدول برشی است. از منظر متالورژی فیزیکی، این نقش غالب کاملاً با اصول فیزیک حالت جامد همخوانی دارد، چرا که انرژی بستگی به عنوان یک توصیف‌گر بنیادی ترمودینامیکی، بازتاب‌دهنده استحکام پیوندهای اتمی و پایداری کلی شبکه در برابر تغییر شکل‌های مکانیکی است.

فراتر از توصیف‌گر ترمودینامیکی، ترکیبات عناصر آلیاژی تأثیرات متمایز و از نظر شیمیایی شهودی بر رفتار الاستیک سیستم نشان می‌دهند. نمودارهای خلاصه SHAP یک اثر سخت‌کنندگی واضح را برای غلظت Pt نشان می‌دهند. به طور مشخص، در مورد ثابت الاستیک جفت‌شدگی C_{12} و مدول حجمی ، حضور Pt با درصد بالا منجر به ثبت مقادیر مثبت SHAP می‌شود. این امر پیشنهاد می‌کند که افزودن Pt صلبیت شبکه را ارتقا داده و مقاومت در برابر تغییرات حجمی تحت تنش‌های هیدروستاتیک را افزایش می‌دهد و به عنوان یک عامل تقویت‌کننده ساختاری در ماتریس آلیاژ عمل می‌کند. در نقطه مقابل، حضور Au به عنوان یک عامل نرم‌کننده برجسته عمل می‌کند. این تأثیر منفی به ویژه در مورد ثابت الاستیک مرتبط با برش، یعنی C_{44}، بسیار محسوس است؛ جایی که درصدهای بالای Au با مقادیر به شدت منفی SHAP (تا حدود ۵۰-) همبستگی دارند. روند نرم‌کنندگی مشابهی نیز در مدول برشی مشاهده می‌شود. این رفتار نشان می‌دهد که عنصر Au مقاومت شبکه کریستالی را در برابر تغییر شکل‌های برشی تضعیف می‌کند که احتمالاً ناشی از ساختار الکترونی آن و تمایل به تغییر محیط پیوندهای موضعی اتمی است که مسیرهای لغزش برشی را تسهیل می‌نماید. سایر عناصر آلیاژی، مقادیر SHAP برای سایر فلزات واسطه (Cu، Ni و Pd) به طور متمرکز پیرامون خط مبنای صفر توزیع شده‌اند. این نحوه توزیع نشان می‌دهد که اگرچه این عناصر کرنش‌های موضعی شبکه و چگالی الکترونی را تعدیل می‌کنند، اما تأثیر انفرادی آن‌ها بر ثابت‌های الاستیک کلی در مقایسه با چارچوب ترمودینامیکی حاکم بر مبنای انرژی بستگی و اثرات قوی عناصر Pt و Au، در درجه دوم اهمیت قرار دارد. به طور کلی، همسویی کامل میان اهمیت ویژگی‌های استخراج‌شده از تحلیل SHAP و اصول اثبات‌شده متالورژی فیزیکی تأیید می‌کند که مدل‌های یادگیری ماشین آموزش‌دیده، فراتر از برازش‌های آماری محض، موفق به یادگیری همبستگی‌های فیزیکی واقعی حاکم بر سیستم شده‌اند. این تفسیرپذیری فیزیکی، اعتبار چارچوب مدل‌سازی توسعه‌یافته را برای طراحی شتاب‌یافته و غربالگری آلیاژهای چندعنصری جدید با خواص الاستیک هدفمند اثبات می‌کند.



شکل ۶. نمودارهای SHAP مدل‌های یادگیری ماشین برای ثابت‌های الاستیک



شکل ۷. نمودارهای SHAP مدل های یادگیری ماشین برای مدول های ماکروسکوپی

بحث و نتیجه‌گیری

در این پژوهش، یک چارچوب داده‌محور مبتنی بر الگوریتم‌های یادگیری ماشین جهت پیش‌بینی سریع و دقیق خواص کشسانی MPEAs توسعه یافت تا ضمن کاهش وابستگی به محاسبات پرهزینه‌ی DFT، ابزاری کارآمد برای غربالگری پرسرعت ترکیب‌های آلیاژی جدید فراهم آید. ارزیابی مدل‌های مختلف یادگیری نظارت‌شده نشان داد که الگوریتم‌های مبتنی بر درخت‌های تصمیم تقویت‌شده، به‌ویژه LightGBM و XGBoost ، در کنار رویکرد Stacking، عملکرد فوق‌العاده‌ای در پیش‌بینی دقیق ضرایب کشسانی انفرادی (C_{11}، C_{12} و C_{44}) و مدول‌های ماکروسکوپیک (مدول حجمی و مدول برشی) دارند و پایداری بالایی را در مواجهه با داده‌های جدید نشان می‌دهند. در همین راستا، تحلیل اهمیت ویژگی‌ها ثابت کرد که ترکیب شیمیایی (کسر اتمی عناصر) و ویژگی‌های پیوندی (به‌ویژه انرژی پیوند)، نقشی تعیین‌کننده در رفتار کشسانی آلیاژها ایفا می‌کنند؛ به‌طوری‌که سهم بالای این پارامترها در پیش‌بینی ضرایب کشسانی، همخوانی فیزیکی کاملی با مفاهیم صلبیت شبکه و مقاومت در برابر تغییر شکل هیدرواستاتیک دارد. این رویکرد محاسباتی، امکان بررسی هزاران ترکیب کاندید را در کسری از ثانیه میسر کرده است.

مرجع‌ها

[1] J. W. Yeh, S. K. Chen, S. J. Lin, J. Y. Gan, T. S. Chin, T. T. Shun, C. H. Tsau, S. Y. Chang, Nanostructured HEAs with multiple principal elements: Novel alloy design concepts, Adv. Eng. Mater., 6 (2004) 299–303. https://doi.org/10.1002/adem.200300567

[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 (2004) 213–218. https://doi.org/10.1016/j.msea.2003.10.257

[3] D. B. Miracle, O. N. Senkov, Review of high entropy alloys and related concepts, Acta Mater., 122 (2017) 448–511. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2016.08.081

[4] E. P. George, D. Raabe, R. O. Ritchie, High-entropy alloys, Nat. Rev. Mater., 4 (2019) 515–534. https://doi.org/10.1038/s41578-019-0121-4

[5] Y. Zhang, T. T. Zuo, Z. Tang, M. C. Gao, K. A. Dahmen, P. K. Liaw, Z. P. Lu, Microstructures and properties of high-entropy alloys, Prog. Mater. Sci., 61 (2014) 1–93. https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2013.10.001

[6] B. Gludovatz, A. Hohenwarter, D. Catoor, E. H. Chang, E. P. George, R. O. Ritchie, Fracture-resistant high-entropy alloy for cryogenic applications, Science, 345 (2014) 1153–1158. https://doi.org/10.1126/science.1254581

[7] Z. Li, K. G. Pradeep, Y. Deng, D. Raabe, C. C. Tasan, Metastable high-entropy dual-phase alloys, Nature, 534 (2016) 227–230. https://doi.org/10.1038/nature17981

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

[9] F. Mouhat, F. X. Coudert, Necessary and sufficient elastic stability conditions in various crystal systems, Phys. Rev. B, 90 (2014) 224104. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.90.224104

[10] G. Liu, S. Yang, Y. Zhong, High-entropy materials design by integrating the first-principles calculations and machine learning: A case study in the Al-Co-Cr-Fe-Ni system, High Entrop. Alloys Mater., 2 (2024) 307–320. https://doi.org/10.1007/s44210-024-00041-3

[11] N. Tabassum, Y. S. Sistla, R. G. Burela, M. K. Surappa, Machine learning-guided prediction of elastic properties of high-entropy alloys, J. Mater. Sci., 59 (2024) 3349–3369. https://doi.org/10.1007/s10853-024-09432-8

[12] Y. Ikeda, B. Grabowski, F. Körmann, Ab initio phase stabilities and mechanical properties of multicomponent alloys, Mater. Charact., 147 (2019) 464–511. https://doi.org/10.1016/j.matchar.2018.06.019

[13] P. Hohenberg, W. Kohn, Inhomogeneous electron gas, Phys. Rev., 136 (1964) 864–871. https://doi.org/10.1103/PhysRev.136.B864

[14] W. Kohn, L. J. Sham, Self-consistent equations including exchange and correlation effects, Phys. Rev., 140 (1965) 1133–1138. https://doi.org/10.1103/PhysRev.140.A1133

[15] S. Curtarolo, G. L. W. Hart, M. B. Nardelli, N. Mingo, S. Sanvito, O. Levy, High-throughput computational materials design, Nat. Mater., 12 (2013) 191–201. https://doi.org/10.1038/nmat3568

[16] K. T. Butler, D. W. Davies, H. Cartwright, O. Isayev, A. Walsh, Machine learning for molecular and materials science, Nature, 559 (2018) 547–555. https://doi.org/10.1038/s41586-018-0337-2

[17] R. Ramprasad, R. Batra, G. Pilania, A. Mannodi-Kanakkithodi, C. Kim, Machine learning in materials informatics, npj Comput. Mater., 3 (2017) 54. https://doi.org/10.1038/s41524-017-0056-5

[18] J. Schmidt, M. R. G. Marques, S. Botti, M. A. L. Marques, Machine learning in solid-state materials science, npj Comput. Mater., 5 (2019) 83. https://doi.org/10.1038/s41524-019-0221-0

[19] L. Ward, A. Agrawal, A. Choudhary, C. Wolverton, Machine learning framework for inorganic materials, npj Comput. Mater., 2 (2016) 16028. https://doi.org/10.1038/npjcompumats.2016.28

[20] J. J. de Pablo, N. E. Jackson, M. A. Webb, L. Q. Chen, J. E. Moore, D. Nealey, R. Ramprasad et al., New frontiers for the materials genome initiative, npj Comput. Mater., 5 (2019) 41. https://doi.org/10.1038/s41524-019-0173-4

[21] A. Agrawal, A. Choudhary, Materials informatics and big data, APL Mater., 4 (2016) 053208. https://doi.org/10.1063/1.4946894

[22] C. Wen, Y. Zhang, C. Wang, D. Xue, Y. Bai, S. Antonov, L. Dai, T. Lookman, Y. Su, Machine learning assisted design of high entropy alloys, Acta Mater., 170 (2019) 109–117. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2019.03.010

[23] H. Chang, Y. Tao, P. K. Liaw, J. Ren, Phase prediction and intrinsic residual strain in HEAs, J. Alloys Compd., 921 (2022) 166149. https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2022.166149

[24] N. Linton, D. S. Aidhy, ML framework for elastic constants of multi-principal element

alloys, APL Mach. Learn., 1 (2023) 016109. https://doi.org/10.1063/5.0129928

[25] U. Bhandari, H. Ghadimi, C. Zhang, S. Yang, S. Guo, Predicting elastic constants of refractory CCAs, Materials, 15 (2022) 4997. https://doi.org/10.3390/ma15144997

[26] H. Mirzaee, R. Soltanmohammadi, N. Linton, J. Fischer, S. Kamrava, P. Tahmasebi et al., Elastic constants of FCC HEAs using CNN and DFT, APL Mach. Learn., 2 (2024) 046104. https://doi.org/10.1063/5.0229105

[27] J. Zhang, C. Cai, G. Kim, Y. Wang, W. Chen, Composition design of high-entropy alloys with deep sets learning, npj Comput. Mater., 8 (2022) 100. https://doi.org/10.1038/s41524-022-00779-7

[28] G. Hayashi, K. Suzuki, T. Terai, Prediction model of elastic constants of BCC high-entropy alloys based on first-principles calculations and machine learning techniques, STAM Methods, 2 (2022) 381–391. https://doi.org/10.1080/27660400.2022.2125853