

التكهن بتابع العمل لمواد ثنائية الأبعاد باستخدام تعلم آلة قابل للتفسير

أ.د. محمد فاهود*

أ.د. حسن سليمان**

خليل عسّاف***

(تاريخ الإيداع ٢٠٢٥ /٩/١٤ - تاريخ النشر ٢٠٢٥ /١٠/٢٣)

□ ملخّص □

قمنا في هذه الدراسة بتصميم نموذجي تعلم آلة للتكهن بتوابع العمل لمواد ثنائية الأبعاد باستخدام مميزات متعلّقة بالتركيب. إذ استخدمنا خوارزميتي RF و XGBoost ودريناها على حوالي ٤٠٠٠ مادة من قاعدة بيانات المواد ثنائية الأبعاد الحاسوبية C2DB، وحققتنا قيم جيدة جداً عند الاختبار: ($R^2_{RF} = 0.806$, $MAE_{RF} = 0.339$ eV, $RMSE_{RF} = 0.474$ eV) و ($R^2_{XGBoost} = 0.811$, $MAE_{XGBoost} = 0.335$ eV, $RMSE_{XGBoost} = 0.468$ eV) أي يتفوق بسيط لـ XGBoost على RF. لتفسير النماذج، استعملنا تحليلي "أهمية المميزات بالتبديل PFI" و "SHAP". دل الأول على وجود مميزات رئيسية مؤثرة في أداء النموذج (الكهرسلبية الوسطية، رقم العمود في الجدول الدوري، أنصاف الأقطار التساهمية) بينما أوضح الثاني كيف أثرت كل مميزة على القيمة المتوقعة، فقد تبين أنه بازدياد الكهرسلبية الوسطية ومدى العمود تزداد قيمة تابع العمل وهو ما يتفق مع المفاهيم الفيزيائية. قدمت النماذج تكهنات مقبولة الدقة وإرشادات تصميمية قابلة للتفسير الفيزيائي مما يسمح بالاكشاف الموجّه للمواد ثنائية الأبعاد من أجل التطبيقات الإلكترونية.

الكلمات المفتاحية: تابع العمل، المواد ثنائية الأبعاد، تعلم الآلة، C2DB، تحليل SHAP.

* أستاذ في قسم الفيزياء، كلية العلوم في جامعة اللاذقية.

**أستاذ في قسم الفيزياء، كلية العلوم في جامعة طرطوس.

***طالب دكتوراة في قسم الفيزياء، كلية العلوم في جامعة اللاذقية

Predicting Work Functions of 2D Materials with Interpretable Machine Learning

*Prof. Dr. Mohammad Fahoud

**Prof. Dr. Hasan Sliman

***Khalil Assaf

(Received 14/9/2025.Accepted 23/10/2025)

□ABSTRACT □

In this study, we designed two machine learning models to predict the work functions of 2D materials using composition-based features. We used RF and XGBoost algorithms and trained them on ~4000 materials from the Computational 2D Materials Database (C2DB), achieving very good results on the test set: ($R^2_{RF} = 0.806$, $MAE_{RF} = 0.339$ eV, $RMSE_{RF} = 0.474$ eV) and ($R^2_{XGBoost} = 0.811$, $MAE_{XGBoost} = 0.335$ eV, $RMSE_{XGBoost} = 0.468$ eV), with XGBoost slightly outperforming RF. To interpret the results, we used Permutation Feature Importance (PFI) and SHAP analyses. As indicated by PFI, the main features contributing to performance are average electronegativity, column number in the periodic table, and covalent radius. SHAP explains how each feature affects performance; it shows that increases in average electronegativity and column span lead to higher work-function values, which aligns with physical intuition. The models provide acceptable predictions and interpretable design guidance, allowing targeted research on 2D materials for electronic devices.

Keywords: Work function, 2D materials, Machine learning, C2DB, SHAP analysis.

*Full Professor, Department of Physics, Faculty of Science, Latakia University.

**Full Professor, Department of Physics, Faculty of Science, Tartous University.

***Doctoral Student, Department of Physics, Faculty of Science, Latakia University

١. مقدمة:

تملك المواد النانوية ثنائية الأبعاد 2D Materials ذات السماكة الذرية، كالغرافين والمعادن الانتقالية ثنائية الكالكوجين

(TMDCs) Transition Metal Dichalcogenides، خصائص إلكترونية، ضوئية، كيميائية، وميكانيكية مميزة ومهمة من أجل الأجيال الجديدة للنبائط الإلكترونية [1]. ويُعتبر تابع العمل \emptyset ؛ الذي يُعرّف بأنه أقل طاقة لازمة لاقتلاع إلكترون من مستوى فيرمي للمادة إلى الخلاء، قيمة مؤثرة جداً في تطبيقات النباائط الإلكترونية كالترانزستورات، والخلايا الشمسية، وأنظمة تحفيز التفاعلات [2]. يتطلب الحساب الدقيق لهذه القيمة استخدام النظرية التابعية للكثافة Density Functional Theory (DFT) وهي مكلفة بشدة حاسوبياً وزمنياً [3].

يُقدّم تعلم الآلة Machine Learning (ML) أسلوباً بديلاً يعتمد على علم البيانات والإحصاء للتكهن بخصائص المواد بناء على تركيبها وبنيتها. وفي علم المواد، تم استخدام نماذج ML للتكهن بفجوات الطاقة، طاقات التشكل وغيرها من الخصائص، مسرعاً بذلك عملية الحسابات عشرات المرات بدل الاستخدام المباشر لـ DFT [4]. لكن تبقى مشكلة التفسير هي العائق الأكبر، إذ أن نماذج ML المعقدة وبالرغم من كونها تعطي نتائج مقبولة الدقة إلا أنها تقتصر للحدس الفيزيائي [5]، ولذلك اخترنا في ورقتنا هذه التركيز على التكهن الدقيق لقيم تابع العمل للمواد ثنائية الأبعاد باستخدام ما يُعرف بالنماذج التجميعية الشجرية Ensemble tree-based models، والتفسير الفيزيائي للنتائج باستخدام تحليل أهمية المميزات بالتبديل permutation feature importance (PFI).

نبذة عن الأساس الرياضي لـ ML:

يمكن تشبيه نهج تعلم الآلة بمجموعة من الأشخاص الذين يتعلمون من الأمثلة المطروحة لهم. فبدلاً من تلقيهم تعليمات تخص كل خطوة باتجاه مهمة ما، يتم تزويدهم بمجموعة من البيانات Dataset وعليهم استكشاف الأنماط الحاكمة لها بأنفسهم [6]. ومن أجل مسائل الانحدار Regression والتي تتضمن التكهن بقيمة عددية مستمرة (كقيمة تابع العمل لمادة ما)، تقوم نماذج ML بتعلم كيفية الربط بين المميزات المدخلة (كهرسلبية المادة مثلاً) وبين قيم الخرج المستمرة [7].

إن الغاية الأساسية في عملية تدريب نموذج ML هي إيجاد "أفضل" دالة ممكنة لتحقيق هذا الربط، وهذه الدالة لا تقوم فقط بالتكهن الصحيح للبيانات التي تعرضت لها مسبقاً، وإنما يمكن تعميم استخدامها ليشمل بيانات جديدة غير مرئية لها من قبل. يُعبّر عن هذه العملية الرياضية الجوهرية بتابع الهدف Objective Function الذي تهدف الخوارزمية لجعله أصغر ما يمكن:

$$\min_f \sum_{i=1}^n L(y_i, f(x_i)) + \Omega(f) \quad (1)$$

يشير الرمز \min_f إلى هدفنا في تصغير قيمة كامل العبارة الرياضية بالنسبة لـ f التي تعبر هنا عن نموذج ML يُغذى بمدخلات خواص المادة x_i لتعطي ما نريد التكهن به $f(x_i)$ ، وعلينا هنا إيجاد f التي

تجعل القيمة الإجمالية لما داخل المجموع أصغر ما يمكن [8]، وبالتالي يمكن القول إن معنى كلمة "التعلم" المذكورة مسبقاً هو إيجاد النموذج الأمثل.

أما عملية المجموع فإنها تشمل كل قيمة مفردة من البيانات، لذلك إذا كان لدينا n مادة مختلفة في مجموعة البيانات سنقوم بحساب القيمة عند كل منها ومن ثم جمعهم [7, 9].

هي دالة الفقد Loss Function وهي التي تقود عملية التعلم، إذ: y_i هي القيمة الحقيقية للمتغير الهدف من أجل النقطة i . فمثلاً في دراستنا هذه، تُعطينا y_i قيمة تابع العمل المحسوبة بواسطة النظرية التابعة للكثافة DFT للمادة i [10].

$f(x_i)$ تمثل القيمة التي تم توليدها من نموذجنا f عند استقباله قيمة المُدخل x_i للمادة i ، ويُعبّر عن هذه القيمة في الأدبيات أحياناً بالشكل \hat{y}_i [10].

تقوم دالة الفقد بتحديد مقدار خطأ بالتكهن $f(x_i)$ الخاص بنموذجنا مقارنة بالقيمة الصحيحة y_i من أجل كل نقطة، أي كلما كانت القيمة صغيرة كان التكهن أدق. ومن أشهر دوال الفقد في مسائل Regression هي دالة الفقد التربيعية، $(y_i - f(x_i))^2$ ، ووجود التربيع لضمان أن الخطأ موجب دوماً وكبير التأثير بحيث يُلاحظ فوراً [10].

$\Omega(f)$ هو معامل التنظيم، وهو ضروري للغاية، فبينما تدفع دالة الفقد النموذج لمواءمة البيانات بشكل أدق، يمنع معامل التنظيم النموذج من أن يصبح شديد التعقيد و "حافظاً" للبيانات مما يسبب مشكلة تُعرف بالمواءمة الزائدة [10, 11]. Overfitting

تحدث الـ Overfitting عندما يألف النموذج البيانات بشكل زائد بحيث يصبح مناسباً تماماً لها فقط، ويصبح أداءه سيئاً عند تعرضه لبيانات جديدة. يمكن تشبيه ذلك بتلميذ قام بحفظ كل أجوبة اختبار معين ولكنه لم يفهم المفاهيم القابعة خلف تلك الأجوبة مما يجعل نتائجه سيئة عند تغيير الأسئلة بشكل بسيط [11]. بشكل مختصر، يمكن القول إنه عند محاولة إيجاد أصغر قيمة لتابع الهدف، تكون الخوارزمية مجبرة على خلق توازن دقيق بين المواءمة الجيدة للبيانات (لتقليل قيمة تابع الفقد) والمحافظة على بساطة التركيب (لتقليل قيمة معامل التنظيم). هذا الاتزان هو العامل الأساس لجعل النموذج قابل للتعميم بشكل فعال على مواد جديدة غير مدروسة مسبقاً [11].

أشجار القرار Decision Trees:

تنتمي أشجار القرار (DTs) لنماذج تعلم الآلة البديهية بمعنى أنها تحاول تقليد أسلوب اتخاذ القرار البشري عبر تقنيت المشكلة المطروحة إلى سلسلة من الأسئلة. بالتالي يمكن تشبيهها بمخطط انسيابي يسعى لتضييق الاحتمالات من أجل الوصول إلى نتيجة [12]. في حالتنا هذه يمكن لشجرة القرار التكهن بتابع العمل لمادة معينة عن طريق السؤال "هل الكهرسلبية أكبر من قيمة معينة؟"، فإذا كان الجواب نعم، ستستمر وفق فرع محدد من المخطط؛ أما خلاف ذلك ستسلك فرعاً آخر. تقوم هذه الفروع بتقسيم البيانات إلى مجموعات أصغر حتى تنتهي في عقد "الأوراق" حيث يكون التكهن هو القيمة الوسطية لتابع عمل تلك المجموعة.

تقوم الـ DTs في مسائل الـ Regression بالتقسيم المنظم للفضاء متعدد الأبعاد والمُعَرَّف بمميزات الدخل (كالكهرسلبية وأنصاف الأقطار التساهمية) إلى مناطق متميزة غير متداخلة (R_1, R_2, \dots, R_M) ، توافق كل منطقة عقدة ورقية في الشجرة حيث يحدث التكهن النهائي [13]. ومن أجل أي مادة ممثلة بمتجه مميزات الدخل

\mathbf{x} ، يكون التكهن قيمة ثابتة c_m ، موافقة لمنطقة محددة R_M . عموماً تكون c_m هي متوسط قيم الهدف (توابع العمل مثلاً) لكل بيانات التدريب المنتمية لتلك المنطقة (عقدة الورقة). ويأخذ التمثيل الرياضي لتكهن الـ DT الشكل التالي:

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{m=1}^M c_m \cdot \mathbf{I}(\mathbf{x} \in R_M) \quad (2)$$

تُعبّر $f(\mathbf{x})$ عن قيمة تابع العمل المتوقعة، M هي العدد الكلي للمناطق الطرفية (الورقية) التي شكّلتها الشجرة والتي تحوي كل منها قيمة تكهن نهائية، c_m القيمة الثابتة التي أشرنا إليها في الأعلى، \mathbf{I} هي دالة المؤشر Indicator function التي تعمل كمفتاح رقمي ثنائي يُعطي الرقم ١ في حال كانت المادة \mathbf{x} تنتمي للمنطقة R_M و ٠ في حال لا تنتمي. الخلاصة، من أجل أي مُدخل \mathbf{x} ، توجد دالة مؤشر واحدة فقط قيمتها ١ (لأن \mathbf{x} لا يمكن أن يوجد إلا في منطقة واحدة)، وهذا بدوره "يفعل" c_m المرتبط بهذه المنطقة؛ ما يعني أن الشجرة تعطي تكهن واحد ثابت لكل البيانات التي تنتمي لهذه المنطقة [14,13].

٢. منهجية البحث وأدواته

سنعتمد في هذا البحث على خوارزميتي Random Forest (RF) و XGBoost لإصدار النتائج، وتحليلي SHAP و PFI لتفسير القيم، وفيما يلي استعراض مبسط عن هذه الأدوات:

خوارزمية RF:

تقوم هذه الخوارزمية باستخدام مجموعة من الـ DTs لبناء "غابة" قد تصل إلى مجموعة مئات أو آلاف منهم من أجل جمع تكهنات كل منها على حدة وإيجاد المتوسط الحسابي لها، وتساعد هذه التقنية في تقليل نسبة الخطأ التي تقع بها الأشجار المنفردة. يتم ذلك بحيث تتدرب كل شجرة على مجموعة فرعية من البيانات التي لدينا بحيث تسهم هذه العشوائية بتعزيز التنوع بين الأشجار [13,12]؛ فقد تركز إحداها بشدة على الكهرسلبية وأخرى على أنصاف الأقطار الذرية مثلاً، بالتالي يخفف التنوع من أثر الخطأ المفرد. وبما أن البيانات في علم المواد تكون مشوشة (بسبب أخطاء قياس مخبرية أو تقنيات حاسوبية منخفضة الدقة) ومتداخلة (كالترايط الملحوظ بين قيم الكهرسلبية العالية وطاقة التأين العالية) فإن خوارزمية RF تتفوق بسبب أسلوبها القائم على التنوع، ولذلك يُنصح باستخدامها في مسائل الـ Regression حتى مع كلفتها الحاسوبية العالية مقارنة باستخدام الأشجار المنفردة مثلاً [13,12]. يمكن التعبير عنها رياضياً بالشكل:

$$\hat{Y}_{RF} = \frac{1}{B} \sum_{b=1}^B T_b(\mathbf{X}) \quad (3)$$

\hat{Y}_{RF} هي التكهن النهائي لكامل نموذج RF من أجل مادة مُدخلة \mathbf{X} ، B العدد الكلي لـ DTs في الـ RF، و $T_b(\mathbf{X})$ تشير إلى التكهن التي قامت به شجرة القرار المفردة b من أجل المادة المُدخلة \mathbf{X} .

خوارزمية XGBoost:

هي خوارزمية تجميع لـ DTs المفردة أيضاً كما هو الحال في الخوارزمية السابقة، ولكن خلافاً لـ RF التي تقوم بتجميع الأشجار على التوازي تقوم هذه الخوارزمية ببنائهم بشكل متسلسل [14]. وتكمن الفكرة الأساسية هنا في جعل كل شجرة تصحح الأخطاء الناتجة عن جميع الأشجار السابقة، وتساعد هذه العملية الخوارزمية في الكشف عن أنماط وتفاعلات دقيقة في البيانات [14]. ويأخذ التعبير الرياضي الشكل التالي:

$$\hat{y}^{(t)} = \hat{y}^{(t-1)} + \eta f_t(\mathbf{X}) \quad (4)$$

$\hat{y}^{(t)}$ هو التكهن الإجمالي عند الخطوة t ، $\hat{y}^{(t-1)}$ هو التكهن التراكمي لكل الخطوات السابقة للخطوة الحالية. η هو معدل التعلم وهو قيمة موجبة صغيرة (0,1) مثلاً) تتحكم بمقدار مساهمة شجرة جديدة $f_t(\mathbf{X})$ بالتكهن الإجمالي، وكلما كانت قيمة هذا المعدل أصغر كلما كانت نسبة تصحيح كل شجرة أقل وهو ما يزيد دقة عملية التعلم وإن كانت ستطلب أشجاراً أكثر، بالتالي تمنع النموذج من التصحيح المفرط السريع. وأخيراً $f_t(\mathbf{X})$ تمثل تكهن الشجرة الجديدة التي تُضاف عند الخطوة t وهي، كما أوضحنا، تركز بشكل أساسي على الموضوع الحالي لخطأ النموذج [14].

مؤشرات الأداء:

بعد تدريب نموذج ال ML نحتاج لتقييم أدائه، وفي مسائل ال Regression نستخدم مؤشرات معينة لتحديد دقة وموثوقية التكهّنات. وهنا سنستعرض المؤشرات الثلاث التي استخدمناها هنا:

الخطأ المطلق الوسطي (MAE) Mean Absolute Error

يقيس ال MAE القيمة الوسطية للأخطاء في حزمة تكهّنات دون اعتبار لطبيعة القيمة سالبة أم موجبة [15]، وله العلاقة التالية:

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i| \quad (5)$$

n العدد الكلي للبيانات (المواد) الموجود في المجموعة التي نُجري فيها التكهّنات، y_i القيمة الحقيقية لتابع العمل للمادة i ، \hat{y}_i القيمة المتوقعة لتابع العمل للمادة i . هذا المؤشر بسيط ومباشر فهو يملك نفس واحدة القياس للمتغير الهدف [15].

جذر الخطأ التربيعي الوسطي (RMSE) Root Mean Squared Error

وهو مقياس خطأ شائع كذلك، وله العلاقة التالية:

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (6)$$

نلاحظ أن عناصر العلاقة هي ذاتها التي تحدثنا عنها في المقياس الأول، ولكن تجدر الإشارة هنا إلى أن تربيع الخطأ يرمي لهدفين: أولاً لجعل قيمته موجبة دوماً، وثانياً لكشف الأخطاء الكبيرة بصورة أوضح. أما الجذر التربيعي فهدفه إرجاع القيمة إلى واحدة القياس ذاتها للمتغير الهدف، مما يسهّل تفسيره. ويُعتبر هذا المقياس مفيداً جداً على الخصوص عندما تكون قيم الخطأ الكبيرة غير مرغوبة [15].

للتوضيح، سنفرض أنه لدينا نموذجين (A, B)، A له أخطاء التكهن [0.2, 0.2, 0.2, 0.2] فتكون قيم (RMSE, MAE) له هي (0.2, 0.2) على الترتيب. أما B، ذي أخطاء التكهن [0.1, 0.1, 0.1, 0.7] فتكون قيم (RMSE, MAE) له هي (0.1, 0.36) على الترتيب.

معامل التحديد R^2 Coefficient of Determination

يقيس هذا المؤشر نسبة التغيرات في المتغير غير المستقل (تابع العمل في حالتنا) الذي يمكن شرحه بواسطة المتغيرات المستقلة (مميزات الدخل) في نموذجنا. بتعبير أبسط، يخبرنا بمدى مواءمة تكهّنات نموذجنا للقيم الفعلية مقارنةً مع النموذج شديد البساطة الذي يتنبأ فقط بمتوسط القيم الفعلية [15]، ويُعبّر عنه رياضياً بالشكل:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \quad (7)$$

يعبر البسط في العلاقة عن مجموع مربع البقايا (SSR) sum of squared residuals، وهو مجموع مربع الفروقات بين القيم الصحيحة والقيم التي تتبأ بها نموذجنا، وهو يعرض التغيرات غير المشروح في نموذجنا. \bar{y} هي المتوسط الحسابي لجميع القيم الصحيحة في مجموعة البيانات y_i وهي تمثل قيمة مرجعية لمتوسط قيم كل توابع العمل لدينا. أما المقام فهو يسمى بمجموع المربعات (SST) total sum of squares، وهو مجموع مربع الفروقات بين كل قيمة صحيحة ووسطي جميع القيم الصحيحة، ويعرض التغيرات الإجمالي الموجود المتغير الهدف نفسه [15].

تتنمي قيم R^2 إلى المجال $(-\infty, 1)$ ، و تعني القيمة 1 أن النموذج يشرح كامل التغيرات في المتغير الهدف وهذا يعني أن التكهانات مطابقة تماماً للقيم الصحيحة، القيمة 0 تعني أن النموذج لا يقدم شيئاً مهماً أكثر من مجرد حساب المتوسط الحسابي للقيم الهدف (أي مجرد توقع وسطي)، أما القيم السالبة فتشير إلى كون النموذج سيء جداً أو أن اختياره تم بشكل غير سليم (أي أن المسألة التي استُخدم لأجلها لا توافق بنيته الرياضية).

تحليل التفسير:

في علم المواد، يُعتبر الحصول على تكهانات دقيقة هو نصف المهمة فقط، ولإكمالها يجب فهم سبب إنتاج هذه التكهانات تحديداً. لذلك تُعتبر التقنيات التي تربط الاستنتاجات المبنية على البيانات مع الحدس الفيزيائي في غاية الأهمية لإرشادنا في تصميم مواد جديدة. و سنستعرض فيما يلي تحليلي SHAP و PFI المستخدمان في البحث.

تحليل PFI

هي تقنية مستقلة عن النموذج (أي ممكن استخدامها مع أي نموذج مدرب) وهي تقيم مدى أهمية مميزة دخل ما عبر قياس مدى ازدياد خطأ التكهون للنموذج عند خلط قيم هذه الميزة بشكل عشوائي، حيث يقوم الخلط بشكل أساسي بكسر أي علاقة تعلمها النموذج بين مميزة الدخل والمتغير الهدف. فإذا أدى هذا الخلط إلى زيادة الخطأ بشكل كبير، يعني هذا أن الميزة مؤثرة جداً في أداء النموذج والعكس صحيح [16]. تُعبّر عن ذلك رياضياً بالشكل:

$$Importance_j = Error_{shuffled} - Error_{original} \quad (8)$$

$Importance_j$ هي أهمية الميزة j ، خطأ التكهون ($RMSE$ or MAE) للنموذج بعد الخلط، $Error_{original}$ الخطأ الفعلي للنموذج قبل الخلط [16].

تحليل SHAP

تعود تسمية هذه التقنية إلى العبارة التالية (SHapley Additive exPlanations) أو شروطات شابلي الإضافية) وهي منبثقة من نظرية اللعبة Game Theory الرياضية. تقوم بربط رصيد "مساهمة" (أو كما يُعرف بقيمة SHAP) لكل مميزة من أجل تكهن مفرد محدد. ولفهم العملية سنعتبر المميزات كلاعبين في لعبة، والتكهون هي الحوافز المقدمة لهم. توزع قيم SHAP الحوافز بشكل عادل على المميزات بحسب إسهاماتها الجزئية في جميع التوليفات الممكنة بين المميزات [17].

يختلف هذا بشكل جذري عن PFI لأن SHAP بإمكانه شرح لماذا حظيت مادة ما بتكهن محدد لتابع عملها، عوضاً عن إخبارنا فقط ما هي المميزات المهمة عموماً عبر كامل مجموعة البيانات. رياضياً، تُحسب قيمة SHAP (ϕ_j) لمميزة z من أجل التكهن $f(\mathbf{x})$ بالشكل:

$$\phi_j(f, \mathbf{x}) = \sum_{S \subseteq \{1, \dots, M\} \setminus \{j\}} \frac{|S|! (M - |S| - 1)!}{M!} (f(S \cup \{j\}) - f(S)) \quad (9)$$

هي قيمة SHAP لمميزة z من أجل التكهن الذي أجراه النموذج f من أجل المُدخل \mathbf{x} . وهي تخبرنا كم أثرت هذه الميزة على التكهن وأبعدهته عن الإطار المرجعي التكهني (المتوسط الحسابي للتكهنات). M العدد الكلي للميزات، S المجموعة الجزئية من المميزات التي لا تضم الميزة z التي نقوم الآن بحساب قيمة SHAP لها. ويشير الترميز $S \subseteq \{1, \dots, M\} \setminus \{j\}$ إلى كوننا نأخذ بالاعتبار جميع المجموعات الجزئية من العدد الكلي للمميزات باستثناء z ، $|S|$ عدد المميزات في المجموعة الجزئية S [17].

يمكن إيجاز أهمية SHAP بالنقاط التالية: شرح التكهنات المفردة؛ الأمر الحيوي جداً في تحديد المميزات التي أعطت هذا الخرج، الكشف عن العلاقات غير الخطية بين المميزات والتكهنات، والاتساق بين التأثير والأهمية مما يصون منطقيّة قيمه.

قاعدة بيانات المواد ثنائية الأبعاد الحاسوبية C2DB

قمنا في بحثنا باستجلاب البيانات من قاعدة البيانات C2DB التي أصبحت الآن تحوي خصائص محسوبة بواسطة DFT لأكثر من 16000 مادة ثنائية الأبعاد بدءاً من الغرافين النقي وصولاً إلى الكالكوجينات chalcogenides المعقدة، مقدماً بذلك فضاءً غنياً بالتركيب [18]. وقد اعتمدنا تابع العمل المحسوب بدقة بواسطة الـ DFT كمتغير هدف لنا في هذا البحث. وقد قمنا بهندسة المميزات لتحويل التركيب الخام للمواد الموجودة في الـ C2DB إلى مدخلات ذات معنى لنماذج الـ ML. واستخدمنا أيضاً Matminer، وهي أداة مفتوحة المصدر مصممة للتعامل مع البيانات، وتستطيع توليد مئات المؤشرات المرتبطة بالتركيب [19]، منها: المؤشرات البنوية (كالعدد الذري، الكهرسلبية، وأنصاف الأقطار التساهمية)، المؤشرات الإحصائية (كالمتوسط الحسابي، الانحراف المعياري)، والمؤشرات الإلكترونية (كالنظم الإلكترونية التكافؤية والخصائص المدارية).

ولإيضاح قيمة هذه المؤشرات، لدينا مثلاً: متوسط الكهرسلبية يُحسب بالشكل:

$$Average \text{ Electronegativity} = \frac{\sum_i n_i \chi_i}{\sum_i n_i}$$

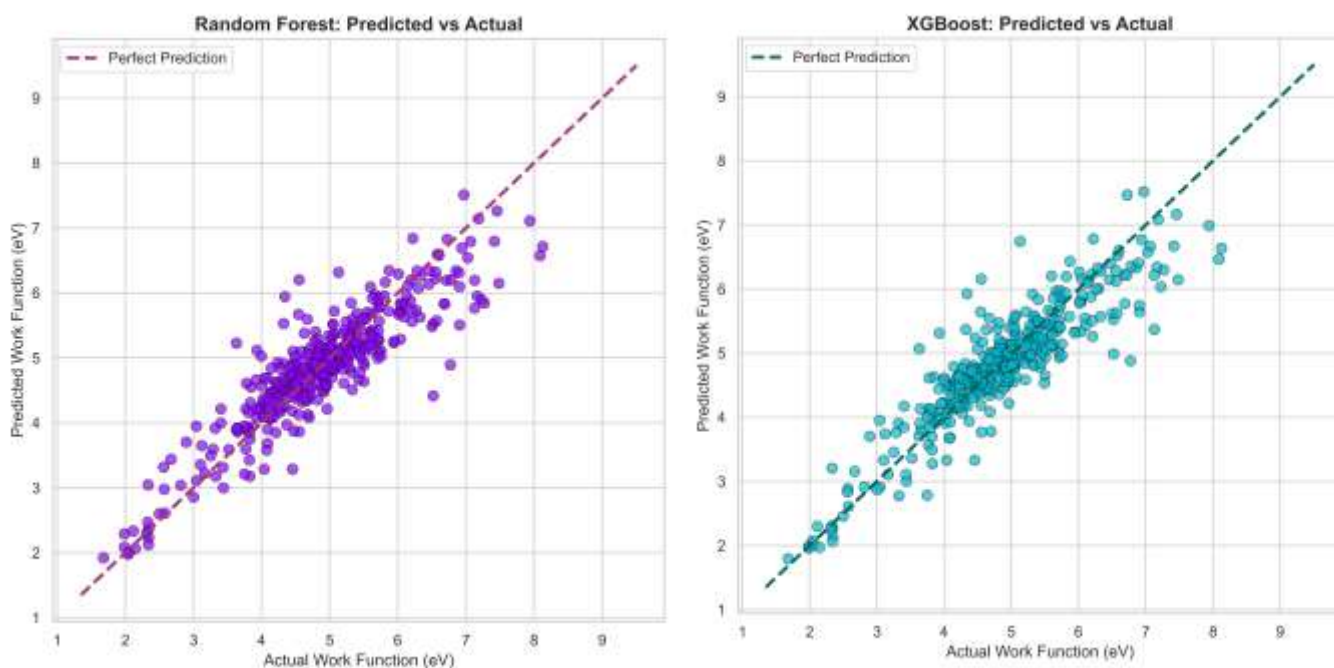
إذ n_i عدد الذرات في العنصر و χ_i هي كهرسليته. وبشكل مشابه يعكس رقم العمود (المجموعة) في الجدول الدوري الطبيعة الكيميائية للعناصر المنتمية له. نلاحظ أن هذه المؤشرات خفيفة الكلفة حاسوبياً وذات معنى فيزيائي، مما يؤكد أن التكهنات قابلة للتفسير ومتفقة مع الحدس الفيزيائي.

٣. النتائج والمناقشة

أصدرت النتائج التي سنُعرض الآن باستخدام كود برمجي بلغة Python يتضمن؛ إضافة إلى ما ذكرناه في الأعلى من أدوات، مكتبة pandas لقراءة ومعالجة البيانات، مكتبة XGBoost و scikit-learn لتدريب وتقييم نماذج ML.

أداء النماذج وتقييمها

تم تقييم كلا النموذجين (RF و XGBoost) على مجموعة بيانات جزئية تضم 10% من القاعدة C2DB. ويعرض كلا المخططين في الشكل (1) القيم الحقيقية لتابع العمل بوحدة (eV) على المحور الأفقي بدلالة القيم المتوقعة لتابع العمل بوحدة (eV) على المحور العمودي، ويمثل الخط القطري المتقطع (المنصف) خط "التكهن المثالي" الذي تتساوى فيه القيمتان الحقيقية والمتوقعة، والهدف من هذه النماذج أن تجعل كل النقاط أقرب ما يمكن إليه.



الشكل (١): القيم المتوقعة بدلالة القيم الحقيقية لـ RF (على اليسار) و XGBoost (على اليمين).

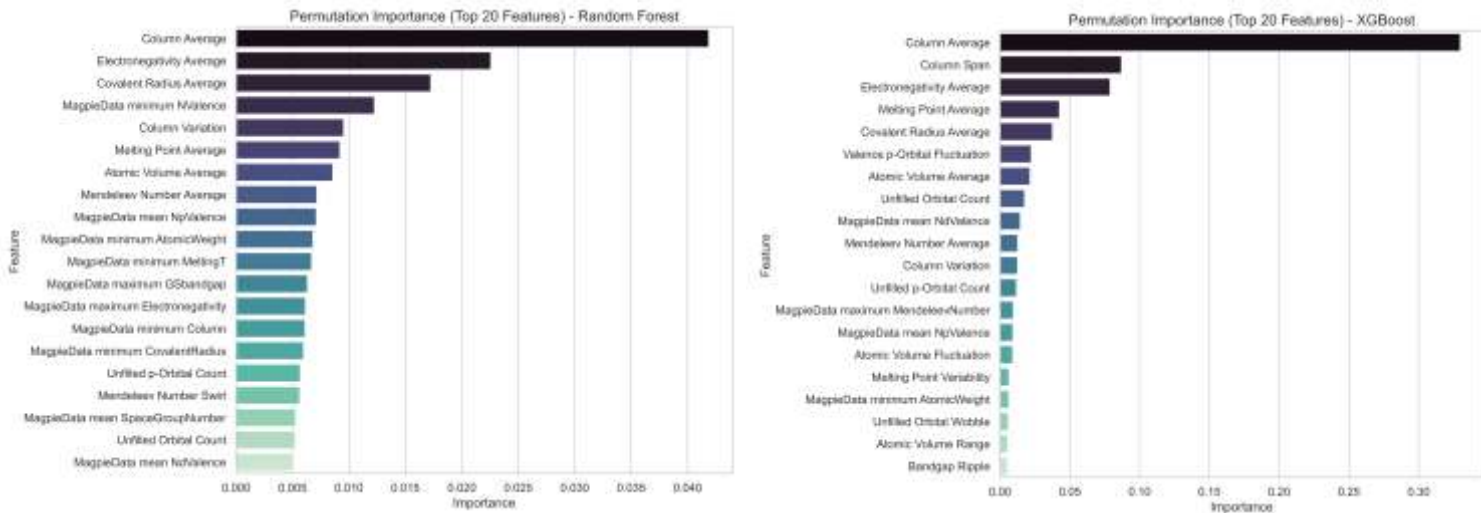
يُظهر المخطط الأيسر أن تكهنات النموذج RF دقيقة إلى حد كبير، إذ تبدو النقاط متجمعة بشكل قريب جداً من الخط المثالي وهذا مؤشر قوي إلى القيمة الكبيرة نسبياً لـ $R^2 = 0.806$ لهذا لنموذج، إذ يؤكد على أن النموذج قادر على التقاط عوامل الاختلاف الكبيرة في قيم توابع العمل المحسوبة في قاعدة البيانات. وبالنسبة إلى بعض النقاط الأبعد نسبياً عن الخط، فهي تمثل أخطاء النموذج. لكن هذه النقاط تتوزع بشكل متساوي تقريباً بين أسفل الخط وأعلى، مما يدل على أن النموذج غير منحاز نحو تكبير أو تقليل قيمة التكهن لتابع العمل. أما المخطط الأيمن الخاص بـ XGBoost فيُظهر تكهناتٍ أكثر دقةً ونقاطاً أكثر قرباً من الخط المثالي من تلك الخاصة بـ RF. يتسق هذا مع القيم الخاصة بهذا النموذج التي توضح تفوقه قليلاً على RF بقيمة أعلى لـ $R^2 = 0.81$ وقيم أخفض لـ RMSE و MAE كما نرى في الجدول (1). أي يمكن القول اختصاراً أن XGBoost كان أكثر فعالية في تعلم العلاقات الكامنة بين البيانات وهذا ما أدى إلى قيم متوقعة أقرب ووسطياً إلى القيم الحقيقية.

الجدول (1): مؤشرات الأداء لـ (RF و XGBoost).

XGBoost	Random Forest
$R^2 = 0.81$	$R^2 = 0.806$
MAE = 0.334 eV	MAE = 0.338 eV
RMSE = 0.468 eV	RMSE = 0.473 eV

أهمية المميزات وفق تحليل PFI

يُظهر الشكل (2) بمخططيه نتائج تحليل PFI الذي يساعدنا في معرفة ما هي مميزات الدخل (خصائص المواد) الأكثر تأثيراً في المخرجات (التكهات):

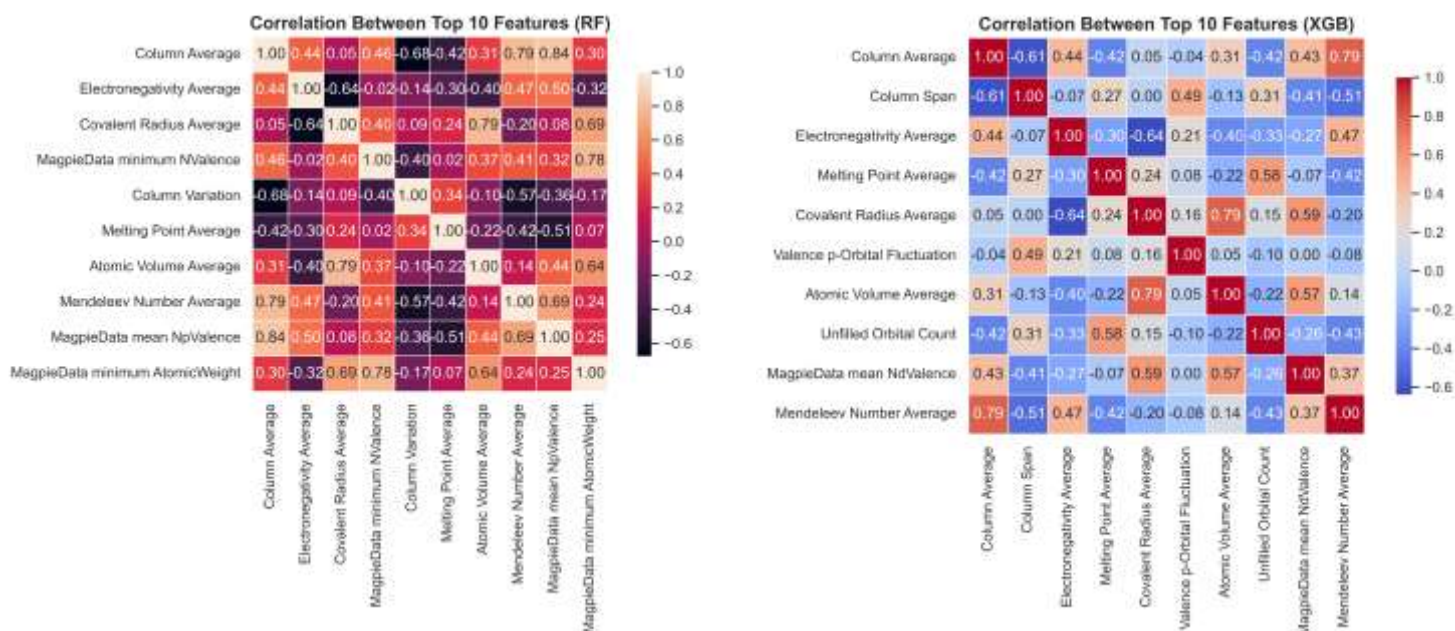


الشكل (2): نتائج تحليل الـ PFI لـ RF (على اليسار) و XGBoost (على اليمين).

يتضح من المخطط الأيسر الخاص بـ RF أن "متوسط العمود" أو Column Average هي الميزة الأكثر تأثيراً وأهميتها تفوق باقي المميزات بهامش واسع. هذه الميزة التي تقيس متوسط رقم العمود في الجدول الدوري لجميع العناصر التي تدخل في تركيب المادة مع الأخذ بالاعتبار نسبة مساهمة كل عنصر في التركيب. فمثلاً، إذا كان لدينا مادة تتركب من عنصرين أحدهما ينتمي للعمود الأول والثاني للعمود السادس عشر وتبلغ ونسبة إسهامهما (50/50)، تكون الـ Column Average هي: $(1 \times 0.5) + (16 \times 0.5) = 8.5$. تُقدم هذه الميزة قياساً عددياً بسيطاً يعكس الطبيعة الكيميائية للمادة. فكما نعلم تكون العناصر الموجودة في الأعمدة الأولى ذات طبيعة معدنية عموماً، أما تلك الموجودة في الأعمدة الأخيرة فهي غير معدنية. بالتالي تمنحنا الـ Column Average مؤشراً لهذه الصفة، فازدياد قيمتها قد يعني وجود نسبة كبيرة من عناصر الجهة اليمنى من الجدول الدوري ذات الكهرسلبية العالية والمعدنية الضعيفة، وهذا يفسر الترابط الكبير للميزة مع تابع العمل. أما باقي المميزات التي تليها مباشرة فهي متوسط الكهرسلبية Electronegativity Average ومتوسط أنصاف الأقطار التساهمية Covalent Radius Average، ولكن على الرغم من كونهما يشغلان المرتبتان الثانية والثالثة إلا أن تأثيرهما وباقي المميزات على قدرة النموذج التكهنية أقل بكثير من أول ميزة.

يتفق المخطط الأيمن الخاص بـ XGBoost بشدة مع الأيسر، فالميزة الأولى هي ذاتها وتتفوق بفارق شاسع عن التي تليها. كما يتفق أيضاً وجود الـ Electronegativity Average ضمن المميزات الثلاثة الأوائل، لكن تختلف الميزة الثانية وهي "مدى العمود" أو Column Span التي تقوم بحساب الفارق بين رقم العمود

الأعلى والأدنى للعناصر التي تتركب منها المادة، مما يشير إلى مدى التنوع في الطبيعة الكيميائية للعناصر. ختاماً، يمكن القول إن هذا الاختلاف البسيط في ترتيب أهمية المميزات هو السبب في الاختلاف الطفيف بأداء كلا النموذجين.



الشكل (٣): خرائط الترابط الحرارية لـ RF (على اليسار) و XGBoost (على اليمين).

الترابط بين المميزات

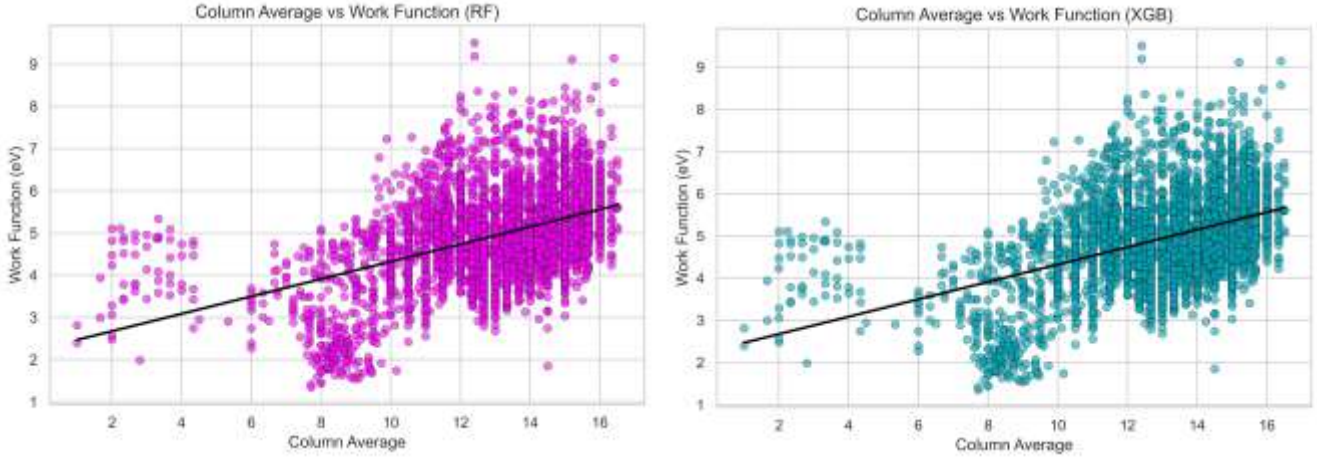
يُظهر الشكل (3) خرائط الترابط الحرارية correlation heatmaps التي تعرض العلاقة بين أعلى عشرة مميزات لكل نموذج. يدل لون كل خلية والقيمة التي بداخلها إلى شدة الترابط بين كل ميزتين والذي يتحدد بمعامل بيرسون الترابطي Pearson correlation coefficient، بقيم تتراوح بين (-1) (ترابط سلبي شديد) و (+1) (ترابط إيجابي شديد). نلاحظ في كلا النموذجين وجود ترابط إيجابي قوي بين خصائص فيزيائية ذات صلة وانسجام مع المفاهيم الفيزيائية الحدسية، كالذي بين أنصاف الأقطار التساهمية ومتوسط الحجم الذري (0.79) في النموذجين. وأيضاً بين خصائص تتعلق بالموضع في الجدول الدوري كمتوسط العمود ومتوسط رقم مندلييف (0.79) أيضاً في النموذجين. إضافة لذلك تظهر قيم سالبة كبيرة كالتالي بين متوسط الكهرسلبية ومتوسط أنصاف الأقطار التساهمية (-0.64) وهو ما يتفق مع العلاقة العكسية المعروفة بين الحجم الذري والكهرسلبية. كما يملك كل من النموذجين بعض الأزواج من المميزات التي تتربط بالكاد أو مستقلة تماماً، كتغاير العمود Column Variation ومتوسط أنصاف الأقطار التساهمية (0.09) في الـ RF، ومدى العمود ومتوسط أنصاف الأقطار التساهمية (0.00) في الـ XGBoost، وهي مفيدة في تقديم معلومات إضافية مستقلة للنموذج. هذا المزيج من الأنماط المشتركة والمتفردة مفيد لنماذج التجميع لكونه يضم إشارات "تكملية" تساعد في فهم لماذا كان أداء النماذج متشابه لكن غير متطابق.

العلاقات بين المميزات وتابع العمل

سنناقش هنا العلاقة المباشرة بين أعلى ثلاث مميزات تم اختيارها من قبل النموذجين مع تابع العمل، إذ

تعرض الأشكال

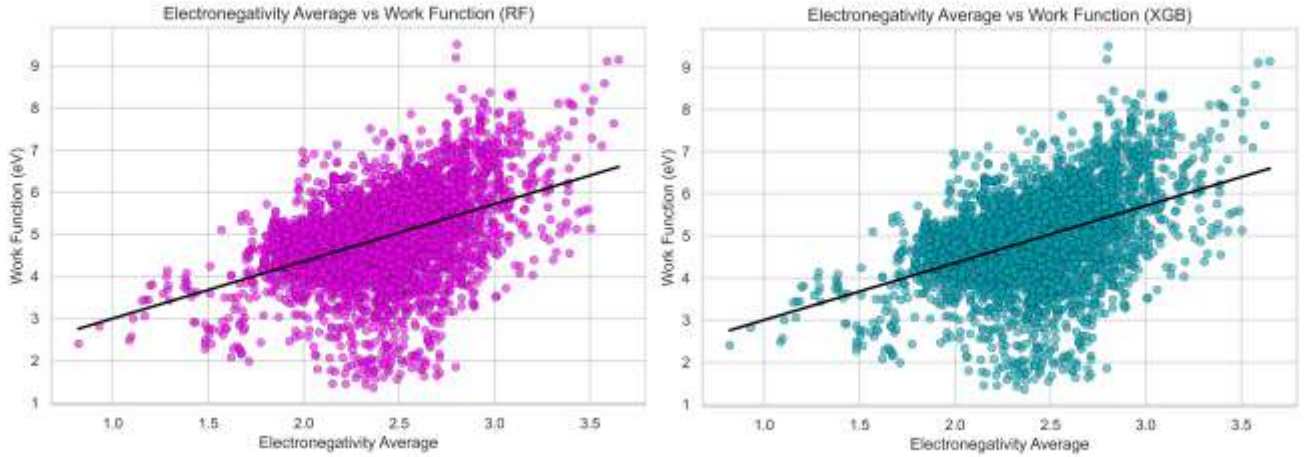
(4, 5, 6, 7) أنماط الارتباط التي تقود تكهنات النماذج، مما يضيف فهماً فيزيائياً أعمق للأسباب القابضة وراء اختيار تلك المميزات تحديداً.



الشكل (٤): العلاقة بين الميزة Column Average وتابع العمل لـ RF (على اليسار) و XGBoost (على اليمين).

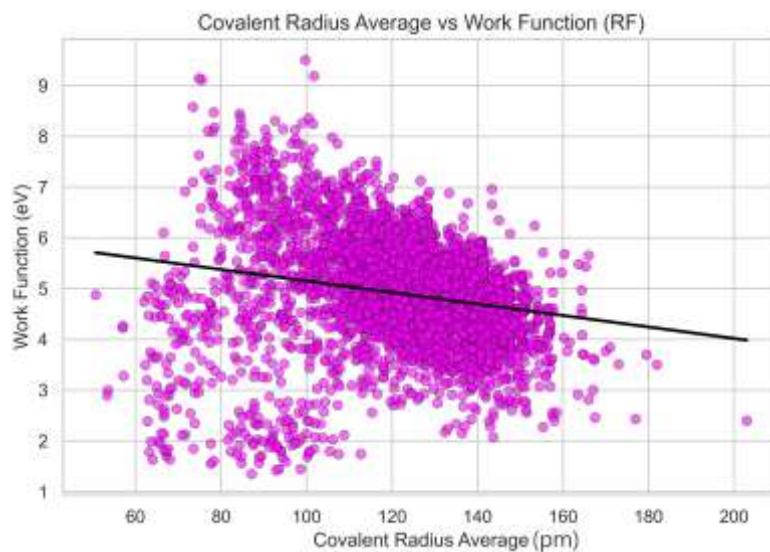
يتبين من الشكل (٤) أن المخططان اللذان يمثلان العلاقة بين تابع العمل والميزة Column Average (التي تحتل المرتبة الأولى بين المميزات) متطابقان، فكلاهما يُظهر ارتباط إيجابي واضح؛ بازدياد متوسط رقم العمود لعناصر المادة يزداد تابع العمل لها. كما تبدو هذه العلاقة خطية بشكل تقريبي، والخط الذي يمثل أفضل مواعمة لهذه البيانات يملك ميلاً موجباً. وبما أن العلاقة تتكرر لكلا النموذجين (كما هو المتوقع) فهذا يعزز من موثوقية ميزة Column Average.

الشكل (٥): العلاقة بين مميزات الكهرسلبية وتابع العمل لـ RF (على اليسار) و XGBoost (على اليمين).



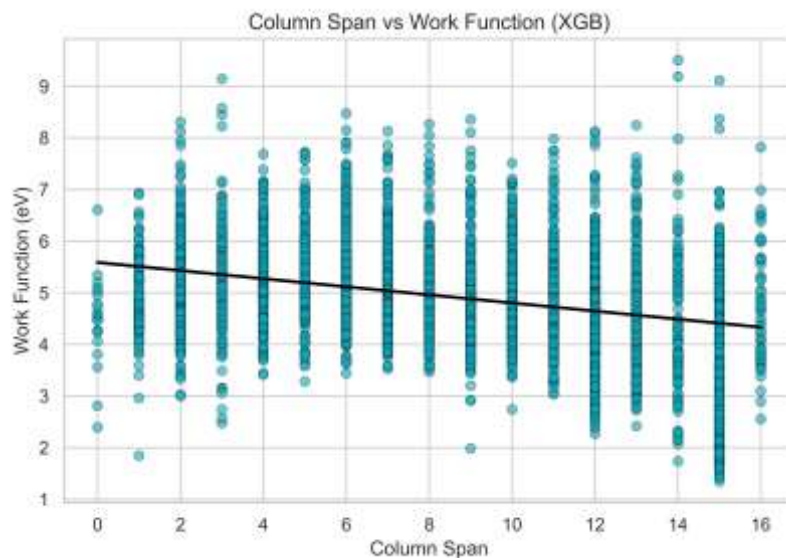
يظهر في الشكل (٥) أيضاً تطابق تقريبي بين النموذجين RF و XGBoost، فذلك لدينا هنا ارتباط إيجابي، إذ إنه بازدياد كهرسلبية المادة يزداد تابع عملها. ويتفق هذا مع المبادئ الفيزيائية؛ فوفقاً للتعريف، الكهرسلبية هي مقياس لمقدرة المادة على جذب الإلكترونات والتمسك بها، وبالتالي قيمتها العالية في مادة ما تعني وجود بذل طاقة أكبر (تابع عمل أكبر) لإزالة الإلكترون منها، وقد تمكنت النماذج من التقاط هذا المبدأ بشكل جيد. لكن على الرغم من الارتباط الواضح إلا أنه ليس بالشدة التي كان عليها في الشكل السابق، إذ يُلاحظ وجود توزع على نطاق أوسع للنقاط على جانبي خط المواعمة. مما يعني، إنه على الرغم من قوة الكهرسلبية كمؤشر

إلا أنها ليست بمستوى الميزة السابقة (Column Average)، وهو ما يتفق مع تحليل الـ PFI الذي صنّف الكهرسلبية دون الـ Column Average في كلا النموذجين.



الشكل (6): العلاقة بين مميزة أنصاف الأقطار التساهمية وتابع العمل لخوارزمية RF.

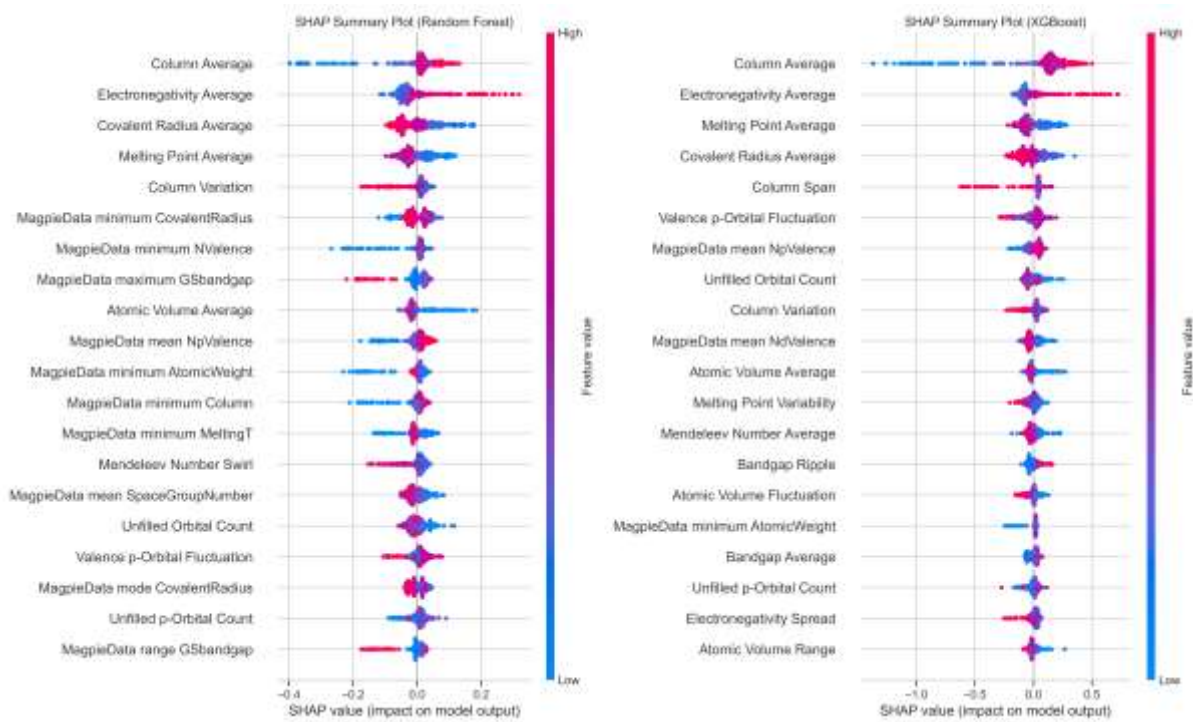
يُظهر الشكل (٦) علاقة الترابط السلبية القوية بين مميزة أنصاف الأقطار التساهمية وتابع العمل، إذ تأخذ النقاط نمطاً مميزاً منحدراً من اليسار إلى اليمين. يتفق هذا مع الفيزياء الذرية، إذ نعلم أن أنصاف الأقطار التساهمية الكبيرة تعني إلكترونات تكافؤية أبعد عن النواة وبالتالي أقل ارتباطاً بها، مما يعني الحاجة إلى طاقة أقل (تابع عمل أقل) لنزعها من الذرة. ونلاحظ أن هذا الارتباط أكثر قوةً في نموذج RF، إذ إن ترتيب هذه الميزة هو الثاني هنا بخلاف ترتيبه في الـ XGBoost.



الشكل (7): العلاقة بين مميزة الـ Column Span وتابع العمل لخوارزمية الـ XGBoost.

يُظهر الشكل (٧) علاقة معقدة غير خطية بين تابع العمل ومميزة مدى العمود، إذ يوجد توافق بسيط بين القيم العالية للميزة والأدنى لتابع العمل. والخط المستمر ذي الميل السالب على الرسم يعكس العلاقة العكسية الإجمالية. غير أن البيانات تتجمع في عناقيد متميزة، والمواد ذات القيم المنخفضة للميزة متعلقة بمجال واسع من القيم الأعلى لتابع العمل، بينما المواد ذات القيم العالية للميزة تتعلق إجمالاً بقيم أقل لتابع العمل. هذه الرؤية لسلوك المواد تشير إلى قدرة النموذج على التعرف على الأنماط الدقيقة غير الخطية مما يزيد من قوته التكهنية.

تحليل SHAP



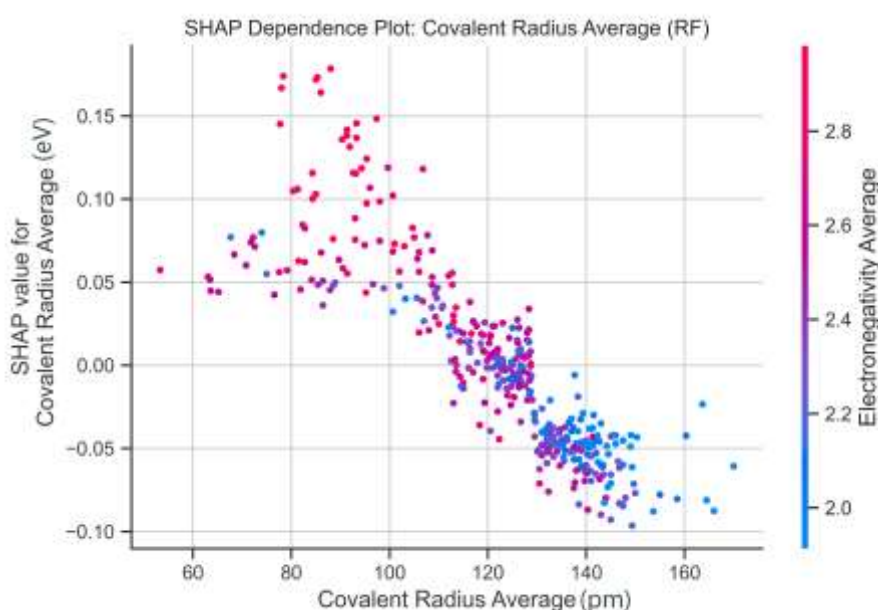
الشكل (8): ملخص تحليل SHAP لـ RF (على اليسار) و XGBoost (على اليمين).

يُظهر الشكل (٨) ملخص تحليل SHAP لكلا النموذجين. لفهم الشكل العام للمخطط، نلاحظ أنه لدينا على المحور العمودي (من اليسار) مميزات الدخل المصنفة من الأعلى إلى الأسفل حسب الأهمية. أما على المحور الأفقي (وهو الأهم) فلدينا التأثير على تكهن النموذج، إذ تعني قيمة SHAP الموجبة أن الميزة دفعت بقيمة تابع العمل للأعلى، والقيمة السالبة خفّضته. وكل نقطة من النقاط تمثل مادة ثنائية الأبعاد من المجموعة الجزئية لبيانات الاختبار، ويدل اللون الأحمر على أن قيمة الميزة من أجل هذه المادة عالية، والأزرق على أنها منخفضة.

نلاحظ في القسم الخاص بـ RF أن المميزات "متوسط العمود"، "متوسط الكهرسلبية"، و"متوسط أنصاف الأقطار التساهمية تحتل المراتب الثلاثة الأولى، بانتشار واسع لقيم SHAP عبر عينات الاختبار. يتضح لنا أن القيم العالية لـ "متوسط العمود" (التي تشير إلى العناصر الواقعة على الجانب الأيمن من الجدول الدوري) تدفع بقيم تابع العمل المتوقعة للأعلى، أي أن السمات التي تمتلكها المجموعات (p & d) في الجدول الدوري ترفع

من الطاقة اللازمة لانتزاع الإلكترون. وكذلك الأمر بالنسبة للكهرسلبية، فهي تسبب ارتفاعاً في قيمة التكهّن، الأمر الذي يتماشى مع الواقع الفيزيائي. بالمقابل، تُنتج أنصاف الأقطار التساهمية الكبيرة قيم سالبة لـ SHAP، الأمر الذي يتوافق مع حقيقة أن الذرات ذوات أنصاف الأقطار الكبيرة ضعيفة التشبث بالكتروناتها الخارجية وبالتالي تملك توابع عمل أقل.

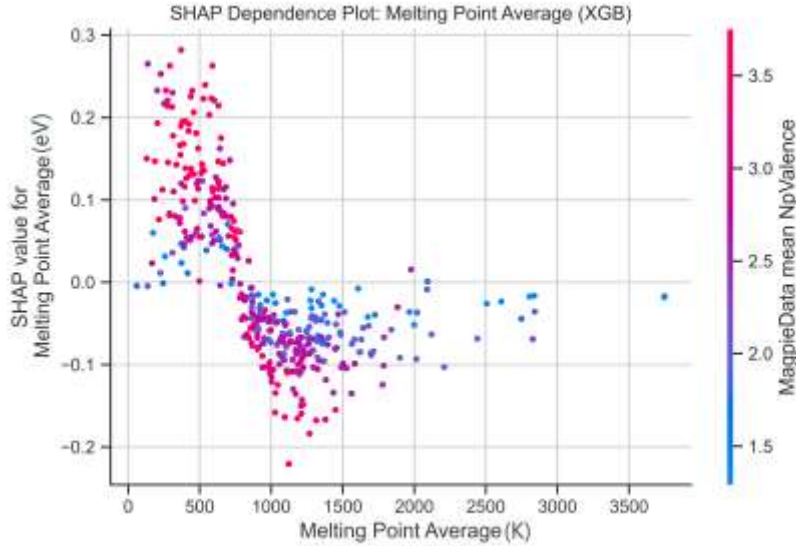
وبالانتقال إلى XGBoost، نلاحظ أن المميزات "متوسط العمود"، "متوسط الكهرسلبية" يشغلان أيضاً المركزين الأوائل وبنفس التأثير السابق، إلا أن المركز الثالث هنا هو نقطة الانصهار. تظهر النقاط الزرقاء هنا على الجانب الموجب لقيم SHAP مشيرة إلى وجود بعض المواد ذوات نقاط انصهار منخفضة وتوابع عمل عالية، بالتالي قد توجد لدينا بعض المواد في مجموعة البيانات التي تملك سمات كيميائية خاصة لسطوحها تمكنها من ربط الإلكترونات بقوة، مما يعني الحاجة لتابع عمل أكبر لانتزاعها.



الشكل (9): قيم SHAP لخوارزمية RF من أجل مميزة أنصاف الأقطار التساهمية المرتبطة بمميزة الكهرسلبية.

يبين الشكل (٩) كيفية تأثير متوسط أنصاف الأقطار التساهمية الوسطية للذرات المؤلفة للمواد في قيمة التكهّن بتابع العمل من أجل النموذج RF. تتراوح القيم الوسطية لهذه الميزة على المحور الأفقي في المجال (50 → 170 pm)، بينما تتراوح قيم SHAP على المحور الشاقولي (eV) (-0.10 → +0.18)، دالةً على قيمة واتجاه مشاركة الميزة في التكهّن. أما التدرج اللوني (أزرق = منخفض، أحمر = مرتفع) والمرتبط بمميزة الكهرسلبية (كما نرى على يمين الرسم) فهو عائد إلى اختيار تحليل SHAP لهذه الميزة على أنها الشريك الأقوى لأنصاف الأقطار التساهمية. وكما هو واضح من ألوان النقاط ومواضعها على الرسم، تملك المواد ذوات أنصاف الأقطار الصغيرة (80→95 pm) والكهرسلبية العالية التأثير الموجب الأكبر (المُمثل بالنقاط الحمراء في أعلى منتصف الشكل) بقيم تتجاوز (0.15 eV) على المحور الشاقولي الأيسر، بينما ذوات أنصاف الأقطار العالية والكهرسلبية المنخفضة تنتج إسهامات سلبية تقارب الـ (-0.1 eV) حسب مساقط النقاط الزرقاء (المتواجدة في أسفل يمين الشكل) على المحور الشاقولي الأيسر، وهو ما يتفق مع الحدس الفيزيائي حول كون الذرات الصغيرة، عالية الكهرسلبية، تميل لامتلاك تابع عمل أكبر.

يبين الشكل (١٠) كيفية تأثير مميزة متوسط نقطة الانصهار، التي تتراوح في المجال (0–3600 K)، على المتغير الهدف من أجل النموذج XGBoost. نلاحظ أن قيم SHAP تتراوح في المجال (-0.25 → +0.25 eV) وأن هذا التحليل اختار مميزة MagpieData mean NpValence، التي تُعنى بمتوسط أعداد الإلكترونات التكافؤية في الطبقة P للمواد، كأقوى شريك لمميزة متوسط نقطة الانصهار.



الشكل (١٠): قيم SHAP لخوارزمية XGBoost من أجل مميزة نقطة الانصهار المرتبطة بميزة عدد الإلكترونات التكافؤية في الطبقة P للمواد.

نلاحظ من الشكل أن معظم المواد نوات درجات حرارة الانصهار المنخفضة تساهم إيجاباً في رفع قيمة التكهن لتابع العمل حتى القيمة (+0.29 eV)، بينما اللواتي يقعون في المستوى المتوسط (500–1200 K) فيساهمون بخفضه حتى القيمة (-0.2 eV)؛ أما فوق الـ (1500 K) فتصبح أغلب قيم تأثيرها في المجال (0 eV → -0.1). كما يُلاحظ أيضاً أن المواد التي تملك عدد كبير من الإلكترونات التكافؤية في الطبقة P تعزز من المساهمة الإيجابية لميزة درجات الانصهار المنخفضة، أما تلك التي تملك عدد قليلاً فتقاوم التأثير السلبي في المجال المتوسط.

٤. الخلاصة

قمنا في هذه الدراسة بإيضاح فعالية نماذج تعلم الآلة RF و XGBoost في التكهن بقيمة تابع العمل لمواد ثنائية الأبعاد بالاعتماد على مميزات متعلقة بالتركيب ومستخلصة من قاعدة البيانات C2DB. حققت نماذجنا دقة جيدة جداً بالتكهن إذ أعطت القيم التالية: $R^2_{RF} = 0.806$ و $R^2_{XGBoost} = 0.81$ ، مما يشهد بإمكانيتها للعمل كبديل خفيف الكلفة حاسوبياً لحسابات DFT، أو كوسيط مُرشد لها وللتجارب المخبرية المباشرة. وقد تمكنا من خلال تقنيات التفسير (SHAP و PFI) من تحديد مميزات هامة ومؤثرة بشدة في التكهّنات، وتتماشى مع المبادئ الفيزيائية والكيميائية الأساسية. بالتالي يمكن القول إن الأهمية الأساسية لهذا العمل تكمن في استعمال نماذج التجمع الشجرية وأدوات التفسير المتقدمة لتشكيل إطار عمل يحاول سد الثغرة بين التكهّنات القائمة على البيانات والتنفيذ الفعلي الهادف إلى التحكم بخصائص المواد. يمكّننا هذا النهج من الاكتشاف الموجّه للمواد ثنائية

الأبعاد من أجل التطبيقات الإلكترونية والضوئية، كالترانزستورات والخلايا الشمسية، التي يلعب تابع العمل دوراً محورياً فيها.

تجدر الإشارة إلى وجود محدودية في هذه الدراسة، تكمن في الاعتماد على المؤشرات المتعلقة بتركيب المواد فقط، مما يعني أنه لم يتم تغطية كل الدقائق الممكنة المتعلقة بخصائص المواد الأساسية والتي قد يسمح استخدامها بالتحسين الإضافي لدقة النتائج. كما توجد محدودية تتعلق بعدد المواد الموجودة في القاعدة المستخدمة (C2DB)، مما قد يحد من إمكانية تعميم النماذج على نطاقات أوسع من المواد، وتعتبر هذه الحدود نقاط انطلاق ممتازة لأبحاث مستقبلية تسعى لاستخدام مؤشرات إضافية مختلفة، مصادر أكثر اتساعاً للبيانات، واختبار نماذج ML شجرية هجينة أو أكثر دقة كالتعلم العميق Deep Learning.

٥. المراجع

[1] Akinwande, D., Brennan, C.J., Bunch, J.S., Egberts, P., Felts, J.R., Gao, H., Huang, R., Kim, J.S., Li, T., Li, Y. and Liechti, K.M., 2017. *A review on mechanics and mechanical properties of 2D materials—Graphene and beyond*. Extreme Mechanics Letters, 13, pp.42-77.

[٢] Wang, Y., Li, J., Li, Y. and Yang, B., 2021. *Biomimetic bioinks of nanofibrillar polymeric hydrogels for 3D bioprinting*. Nano Today, 39, p.101180.

[٣] Hafner, J., 2008. *Ab-initio simulations of materials using VASP: Density-functional theory and beyond*. Journal of computational chemistry, 29(13), pp.2044-2078.

[٤] Butler, K.T., Davies, D.W., Cartwright, H., Isayev, O. and Walsh, A., 2018. *Machine learning for molecular and materials science*. Nature, 559(7715), pp.547-555.

[٥] Molnar, C., Casalicchio, G. and Bischl, B., 2020, September. Interpretable machine learning—a brief history, state-of-the-art and challenges. In *Joint European conference on machine learning and knowledge discovery in databases* (pp. 417-431). Cham: Springer International Publishing.

[٦] Hastie, T., Tibshirani, R. and Friedman, J., 2008. Unsupervised learning. In *The elements of statistical learning: Data mining, inference, and prediction* (pp. 485-585). New York, NY: Springer New York.

[٧] Shalev-Shwartz, S. and Ben-David, S., 2014. *Understanding machine learning: From theory to algorithms*. Cambridge university press.

[٨] Liu, J., Xu, L., Shen, S. and Ling, Q., 2019. *An accelerated variance reducing stochastic method with Douglas-Rachford splitting*. Machine Learning, 108(5), pp.859-878.

[٩] Goodfellow, I., Bengio, Y., Courville, A. and Bengio, Y., 2016. *Deep learning* (Vol. 1, No. 2). Cambridge: MIT press.

[١٠] Hastie, T., 2009. *The elements of statistical learning: data mining, inference, and prediction*.

[١١] Janiesch, C., Zschech, P. and Heinrich, K., 2021. *Machine learning and deep learning*. Electronic markets, 31(3), pp.685-695.

- [١٢] Mienye, I.D. and Jere, N., 2024. *A survey of decision trees: Concepts, algorithms, and applications*. IEEE access, 12, pp.86716-86727.
- [١٣] Stulp, F. and Sigaud, O., 2015. *Many regression algorithms, one unified model: A review*. Neural Networks, 69, pp.60-79.
- [١٤] Matloff, N., 2017. *Statistical regression and classification: from linear models to machine learning*. Chapman and Hall/CRC.
- [١٥] Zhang, Y., Xu, W., Liu, G., Zhang, Z., Zhu, J. and Li, M., 2021. *Bandgap prediction of two-dimensional materials using machine learning*. PLoS One, 16(8), p.e0255637.
- [١٦] Molnar, C., König, G., Bischl, B. and Casalicchio, G., 2024. *Model-agnostic feature importance and effects with dependent features: a conditional subgroup approach*. Data Mining and Knowledge Discovery, 38(5), pp.2903-2941.
- [١٧] Lundberg, S.M. and Lee, S.I., 2017. *A unified approach to interpreting model predictions*. Advances in neural information processing systems, 30.
- [١٨] Gjerding, M.N., Taghizadeh, A., Rasmussen, A., Ali, S., Bertoldo, F., Deilmann, T., Knøsgaard, N.R., Kruse, M., Larsen, A.H., Manti, S. and Pedersen, T.G., 2021. *Recent progress of the computational 2D materials database (C2DB)*. 2D Materials, 8(4), p.044002.
- [١٩] Ward, L., Dunn, A., Faghaninia, A., Zimmermann, N.E., Bajaj, S., Wang, Q., Montoya, J., Chen, J., Bystrom, K., Dylla, M. and Chard, K., 2018. *Matminer: An open source toolkit for materials data mining*. Computational Materials Science, 152, pp.60-69.