



Calibration, Optimization, and Evaluation of the Integrated NSGA-II and XGBoost Algorithm for Predicting Corn (*Zea mays* L.) Yield Performance under the Influence of Biofertilizers: A Novel Approach in Low-Input Agriculture

Mohsen Jahan^{1*} and Mehdi Nassiri-Mahallati¹

1- Department of Agrotechnology, Faculty of Agriculture, Ferdowsi University of Mashhad, Mashhad, Iran
(*- Corresponding author's Email: jahan@ferdowsi.um.ac.ir)

Received: 13-07-2025
Revised: 02-01-2026
Accepted: 05-01-2026
Available Online: 21-01-2026

How to cite this article:

Jahan, M., & Nassiri-Mahallati, M. (2026). Calibration, optimization, and evaluation of the integrated NSGA-II and XGBoost algorithm for predicting corn (*Zea mays* L.) yield performance under the influence of biofertilizers: A novel approach in low-input agriculture. *Journal of Agroecology*, 17(4), 537-559. (In Persian with English abstract)
<https://doi.org/10.22067/agry.2026.94366.1245>

Introduction

Accurate prediction of maize (*Zea mays* L.) grain yield is critical for efficient resource management and enhancing productivity in sustainable agriculture, particularly in low-input systems. The integration of biofertilizers, such as plant growth-promoting rhizobacteria (PGPR) and arbuscular mycorrhizal fungi (AMF), offers a promising avenue to improve crop performance while reducing environmental impacts. However, the complexity of ecophysiological data and their interactions necessitates advanced modelling techniques for precise yield prediction. Machine learning (ML) algorithms, combined with optimization methods, provide robust tools to address this challenge (Ingole et al., 2025). This study proposes a novel hybrid approach combining the Non-dominated Sorting Genetic Algorithm II (NSGA-II) for feature selection and the eXtreme Gradient Boosting (XGBoost) algorithm for predictive modelling. By leveraging ecophysiological data, this approach aims to optimize maize yield predictions under biofertilizer applications, supporting precision agriculture and climate adaptation strategies. The objectives were to identify key predictive features, enhance model accuracy, and interpret the contributions of selected variables to yield outcomes.

Materials and Methods

The study utilized data from 96 experimental plots at the Ferdowsi University of Mashhad's research fields, collected over two years. A comprehensive dataset comprising 75 features (32 primary and 43 interaction terms) was compiled, including ecophysiological variables such as chlorophyll content index (SPAD), canopy temperature, maximum photosynthesis rate, specific root length, and soil phosphorus percentage. The methodology consisted of two main phases: feature selection and predictive modeling. First, NSGA-II, a multi-



Authors retain the copyright. This is an open access article distributed under Creative Commons Attribution 4.0 International License (CC BY 4.0)

<https://doi.org/10.22067/agry.2026.94366.1245>

objective optimization algorithm, was employed to select an optimal subset of features by simultaneously maximizing prediction accuracy (coefficient of determination, R^2) and minimizing the number of features. NSGA-II iteratively evaluated feature combinations to identify a Pareto-optimal set, balancing model simplicity and performance. Subsequently, the selected features were used to train an XGBoost model, a gradient-boosting framework known for its robustness in handling complex datasets. The model was validated using 5-fold cross-validation to ensure generalizability. Model interpretability was enhanced through SHapley Additive exPlanations (SHAP) and Local Interpretable Model-agnostic Explanations (LIME) methods. SHAP analysis provided global and local feature importance, while LIME elucidated individual prediction contributions. Counterfactual analysis was also conducted to assess the impact of removing key features on model predictions.

Results and Discussion

NSGA-II successfully identified nine key features critical for yield prediction, including canopy temperature at the dough stage (Canopy Temp_4), chlorophyll content index at the milk stage (SPAD_3), soil respiration rate, and maximum photosynthesis rate. These features were selected for their ability to maximize R^2 while maintaining model parsimony. The trained XGBoost model achieved an R^2 of 0.63 and a root mean square error (RMSE) of 2.171 tons per hectare, indicating moderate predictive accuracy suitable for agricultural applications. SHAP analysis revealed that SPAD_3 (mean SHAP value: 0.2603 t/ha) and Canopy Temp_4 (0.2512 t/ha) were the most influential predictors, positively contributing to yield predictions. Conversely, complex interactions, such as the interaction between leaf area index at the silking stage and the squared mean canopy temperature, had a slight negative effect (-0.0674 t/ha). LIME analysis further highlighted the negative influence of ear length (weight: -0.9252), suggesting its role in reducing predicted yields in specific cases. The Pareto front generated by NSGA-II corroborated the trade-off between feature count and prediction accuracy, while feature importance plots aligned with SHAP and LIME findings. Counterfactual analysis demonstrated that excluding key features significantly altered predictions, underscoring their importance. The integration of NSGA-II and XGBoost proved highly effective in optimizing maize yield predictions under biofertilizer influence, offering a robust framework for low-input agriculture. The selection of nine key features by NSGA-II reduced model complexity while maintaining predictive power, aligning with the principles of precision agriculture. The high influence of SPAD_3 and Canopy Temp_4 underscores the importance of physiological and environmental factors in yield determination, particularly in biofertilizer-enhanced systems. The negative contribution of certain interaction terms and ear length suggests the need for careful consideration of variable interactions in model development. The use of SHAP and LIME enhanced model transparency, providing actionable insights for farmers and researchers. Compared to traditional models, this hybrid approach outperformed baseline methods, achieving a higher R^2 and lower RMSE. The findings support the adoption of advanced ML techniques in sustainable agriculture, enabling precise resource allocation and adaptation to climatic variability. Future research could explore additional biofertilizer types and larger datasets to further refine predictive accuracy and generalizability.

Conclusion

In conclusion, this study successfully developed and validated a hybrid modelling framework integrating NSGA-II for multi-objective feature selection with XGBoost for predictive modelling, enabling accurate maize grain yield prediction under biofertilizer applications in low-input systems. By identifying a parsimonious set of nine key ecophysiological features—most notably chlorophyll content index at the milk stage (SPAD_3) and canopy temperature at the dough stage—the approach achieved a respectable R^2 of 0.63 and RMSE of 2.171 t/ha, demonstrating moderate yet practical predictive power suitable for precision agriculture in variable environments. Interpretability analyses using SHAP and LIME underscored the dominant positive contributions of physiological indicators while highlighting nuanced negative effects from certain interactions and traits such as ear length, providing valuable insights into biofertilizer-mediated yield dynamics. This methodology not only outperformed traditional baselines by balancing model complexity and accuracy but also supports sustainable resource management and climate-resilient strategies in arid and semi-arid regions. Future efforts should expand datasets, incorporate diverse biofertilizer regimes, and test generalizability across broader agroecological zones to further enhance predictive robustness and real-world applicability.

Keywords: Mycorrhizal fungi, Machine learning, Non-dominated sorting genetic algorithm, Rhizobacteria, SHAP analysis

مقاله پژوهشی

جلد ۱۷، شماره ۴، زمستان ۱۴۰۴، ص ۵۳۷-۵۵۹

واسنجی، بهینه‌سازی و ارزیابی الگوریتم تلفیقی NSGA-II و XGBOOST برای پیش‌بینی عملکرد دانه ذرت (*Zea mays* L.) تحت تأثیر کودهای زیستی

محسن جهان^{۱*} و مهدی نصیری محلاتی^۱

تاریخ دریافت: ۱۴۰۴/۰۴/۲۲

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۴/۱۰/۱۵

چکیده

پیش‌بینی دقیق عملکرد دانه ذرت (*Zea mays* L.) برای مدیریت منابع و افزایش بهره‌وری در کشاورزی پایدار ضروری است. در این مطالعه ابتدا، الگوریتم NSGA-II برای انتخاب بهینه ویژگی‌ها به کار گرفته شد و سپس الگوریتم XGBoost با ویژگی‌های انتخاب‌شده برای پیش‌بینی آموزش داده شد. داده‌ها از ۹۶ نمونه از مزرعه تحقیقاتی دانشگاه فردوسی مشهد شامل ۷۵ ویژگی (۳۲ اصلی و ۴۳ تعاملی) طی دو سال آزمایش جمع‌آوری شدند. داده‌های اکوفیزیولوژیکی شامل متغیرهایی نظیر شاخص کلروفیل (SPAD)، دمای تاج‌پوشش، سرعت فتوسنتز بیشینه، طول ویژه ریشه، درصد فسفر خاک و غیره بودند. ابتدا، NSGA-II برای شناسایی مجموعه بهینه ویژگی‌ها به منظور حداکثر کردن دقت پیش‌بینی (R^2) و کمینه کردن تعداد ویژگی‌ها به کار گرفته شد. NSGA-II با بهینه‌سازی همزمان تعداد ویژگی‌ها و دقت، نه ویژگی کلیدی (مانند دمای تاج‌پوشش در مرحله خمیری دانه Canopy Temp_4)، شاخص کلروفیل برگ در مرحله سیری دانه (SPAD_3)، سرعت تنفس خاک و سرعت فتوسنتز بیشینه را انتخاب کرد. مدل XGBoost با اعتبارسنجی (پنج‌تایی) آموزش داده شد و ضریب تبیین (R^2) ۰/۶۳ و جذر میانگین مربعات خطا (RMSE) ۲/۱۷۱ تن در هکتار به دست آمد. برای تفسیر مدل، از روش‌های شیب (SHAP) و لایم (LIME) استفاده شد. نمودارهای شیب (نمودارهای آبشاری و فورس پلات) نشان دادند که SPAD_3 با میانگین شیب ۰/۲۶۰۳ تن در هکتار و Canopy Temp_4 با ۰/۲۵۱۲ تن در هکتار، نقش کلیدی در افزایش پیش‌بینی داشتند، درحالی‌که تعاملات پیچیده مثل اثر متقابل شاخص سطح برگ در مرحله کاکل‌دهی و مجذور میانگین دمای تاج‌پوشش اثر منفی اندکی (-۰/۰۶۷۴) ایجاد کردند. تحلیل لایم نیز تأیید کرد که طول بلال با وزن ۰/۹۲۵۲- تأثیر منفی قابل توجهی دارد. این یافته‌ها با جبهه پاراتو و نمودار اهمیت ویژگی‌ها هم‌راستا بودند. علاوه بر این، تحلیل کانترفکچوال نشان داد که حذف ویژگی‌های کلیدی، تغییرات قابل توجهی در پیش‌بینی ایجاد می‌کند. نتایج این پژوهش نشان‌دهنده کارایی بالای تلفیق NSGA-II و XGBoost در بهینه‌سازی مدل‌های پیش‌بینی کشاورزی است که به‌نوبه خود می‌تواند به مدیریت دقیق زراعی، انتخاب نهاده‌های طبیعی و سازگاری با تغییرات اقلیمی کمک کند.

واژه‌های کلیدی: الگوریتم ژنتیک نامغلوب، باکتری‌های ریزوسفری، تحلیل شیب، قارچ میکوریزا، یادگیری ماشین

مقدمه

آربوسکولار^۲ و ریزوباکتری‌های محرک رشد گیاه^۳ با بهبود جذب عناصر غذایی، راه‌حلی پایدار ارائه می‌دهند، اما روابط اکوفیزیولوژیکی پیچیده آن‌ها نیازمند تحلیل پیشرفته است (Brar et al., 2024). مطالعات قبلی با استفاده از هشت الگوریتم یادگیری ماشین

رشد جمعیت و تغییرات اقلیمی، تولید ذرت (*Zea mays* L.) را با چالش‌هایی مثل تنش‌های محیطی مواجه کرده است (Bracho-Mujica et al., 2024). کودهای زیستی مانند قارچ‌های میکوریز

۱- گروه اگروتکنولوژی، دانشکده کشاورزی، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد، ایران
(Email: jahan@ferdowsi.um.ac.ir)
* - نویسنده مسئول:
<https://doi.org/10.22067/agry.2026.94366.1245>

2- Arbuscular Mycorrhizal Fungi (AMF)
3- Plant Growth Promoting Rhizobacteria (PGPRs)

به کار رفته است. در انتخاب ویژگی، NSGA-II زیرمجموعه‌هایی از ویژگی‌ها را شناسایی می‌کند که عملکرد پیش‌بینی را به حداکثر می‌رسانند و در عین حال تعداد متغیرها را به حداقل می‌رسانند، که این امر خطرات بیش‌برازش را در مجموعه داده‌های با ابعاد بالا کاهش می‌دهد. به عنوان مثال، مطالعاتی از NSGA-II برای بهینه‌سازی مجموعه‌های ویژگی در وظایف طبقه‌بندی در مجموعه داده‌هایی با هزاران ویژگی استفاده کرده‌اند و به دقت بهبودیافته و هزینه محاسباتی کمتری دست یافته‌اند (Mukhopadhyay et al., 2014). در تنظیم ابرپارامترها، NSGA-II پارامترهایی مانند نرخ‌های یادگیری یا عمق درختان را در مدل‌هایی مانند XGBoost بهینه می‌کند و توازن بین دقت و زمان آموزش را حفظ می‌کند. توانایی آن در مدیریت روابط غیرخطی و پیچیده، آن را برای مجموعه داده‌هایی با الگوهای پیچیده، مانند آن‌هایی که در تحقیقات کشاورزی وجود دارد، مناسب می‌سازد.

یانگ و همکاران (Yang et al., 2025) گزارش کردند که مدیریت آبیاری که توسط الگوریتم NSGA II بهینه شد، عملکرد گندم زمستانه (*Triticum aestivum* L.) و بهره‌وری آب را به ترتیب از ۹/۳ درصد تا ۱۴/۵ درصد، و از ۱۱/۸ درصد تا ۲۳/۷ درصد افزایش داد. در مطالعات مربوط به بهینه‌سازی کاربری اراضی، NSGA-II با در نظر گرفتن اهداف متضادی مانند کاهش فرسایش خاک و افزایش بازدهی اقتصادی، الگوهای بهینه‌ای را پیشنهاد داده که منجر به بهبود مدیریت منابع شده است (Shayegan et al., 2011). نتایج پژوهشی با عنوان بهینه‌سازی چند هدفه الگوی کشت با تأکید بر منافع اقتصادی و تأمین امنیت زنجیره غذایی نشان داد که برای حصول سود اقتصادی بیشتر با مدیریت مصرف آب تخصیصی بهینه، استفاده از روش‌های بهینه‌سازی چند هدفه (الگوریتم ژنتیک نامغلوب NSGA-II) نسبت به روش‌های تک هدفه عملکرد بهتری دارد. این پژوهش پیشنهاد شد که توجه به رعایت حداقل سطح زیرکشت راهبردی گندم و افزایش کشت‌های دانه روغنی کلزا (*Brassica napus* L. و علوفه‌ای گیاه تریتیکاله (*Triticale* sp.)) مدل پیشنهادی از لحاظ تأمین امنیت زنجیره غذایی و دیدگاه پدافند غیرعامل عملکرد بهینه بوده و تناسب دارد (Amin et al., 2023). نتایج پژوهشی با کاربرد NSGA II بهینه‌سازی تخصیص آب نشان داد که این الگوریتم سبب افزایش بهره‌وری آب کشاورزی به میزان ۶۰ درصد برای مرکبات، ۴۷ درصد برنج (*Oryza sativa* L.)، ۶۰

(ANFIS^۱، Transformer^۲، ANN^۳، SVR^۴، LightGBM^۵، XGBoost^۶، Enhanced DNN^۷، SVM^۸) نشان داده‌اند که مدل‌های شبکه عصبی (R^2 تا ۰/۵۵۵) نسبت به مدل‌های درختی (R^2 تا ۰/۳۸۵) و SVM ($R^2 = ۰/۳۲۵$) عملکرد بهتری دارند. با این حال، انتخاب ویژگی‌های بهینه و کاهش ابعاد داده هنوز چالش برانگیز است. الگوریتم NSGA-II^۹ یک الگوریتم تکاملی چند هدفه بوده که برای بهینه‌سازی مسائلی با چند تابع هدف متضاد طراحی شده است. این الگوریتم در سال ۲۰۰۲ توسط Deb و همکاران معرفی شد و یکی از پرکاربردترین الگوریتم‌ها در بهینه‌سازی چند هدفه محسوب می‌شود. در بسیاری از مسائل واقعی (مثل طراحی مهندسی، مدیریت مزرعه، یا انتخاب ارقام گیاهی)، بیش از یک معیار برای بهینه‌سازی وجود دارد که معمولاً با یکدیگر در تضاد هستند (مثلاً بهینه‌سازی عملکرد در مقابل کمینه‌سازی هزینه). در این موارد، به جای یک پاسخ بهینه، مجموعه‌ای از پاسخ‌های غیرمغلوب^{۱۰} مد نظر است. برخی از مهم‌ترین ویژگی‌های مثبت NSGA-II عبارتند از: به پارامتر وزن دهی برای توابع هدف، نیاز ندارد؛ تنوع جواب‌ها را در امتداد مرز پارتو^{۱۱} حفظ می‌کند؛ نسبت به نسخه‌های قبلی پیچیدگی زمانی بهینه‌تری دارد. الگوریتم NSGA-II با بهینه‌سازی چندمنظوره (کمینه‌سازی تعداد ویژگی‌ها و بهینه‌سازی دقت) و ترکیب آن با XGBoost، رویکردی نوین برای غلبه بر این محدودیت‌ها ارائه می‌دهد. NSGA-II به طور گسترده‌ای در یادگیری ماشین برای وظایفی مانند انتخاب ویژگی، تنظیم ابرپارامترها و بهینه‌سازی مدل‌ها

- 1- ANFIS (Adaptive Neuro-Fuzzy Inference System): سیستم استنتاج عصبی-فازی تطبیقی
- 2- Transformer: Transformer (یا Transformer Model): مدل ترانسفورمر (معماری مبتنی بر توجه در یادگیری عمیق)
- 3- ANN (Artificial Neural Network): شبکه عصبی مصنوعی
- 4- SVR (Support Vector Regression): رگرسیون بردار پشتیبان
- 5- LightGBM (Light Gradient Boosting Machine): ماشین گرادیان بوستینگ سبک
- 6- XGBoost (eXtreme Gradient Boosting): گرادیان بوستینگ افراطی
- 7- Enhanced DNN (Enhanced Deep Neural Network): شبکه عصبی عمیق بهبودیافته / تقویت شده
- 8- SVM (Support Vector Machine): ماشین بردار پشتیبان
- 9- Non-dominated Sorting Genetic Algorithm II
- 10- Pareto-optimal
- 11- Pareto front

قدرتمند در زمینه پیش‌بینی عملکرد محصولات راهبردی چون ذرت، این مطالعه با هدف ترکیب الگوریتم فوق با الگوریتم درختی ایکس جی‌بوست، بهینه‌سازی و انتخاب ویژگی‌های مؤثر بر عملکرد دانه ذرت تحت تأثیر کودهای زیستی انجام گرفت. نتایج این پژوهش می‌تواند مدیریت کارآتر نهاده‌ها و عناصر غذایی در سیستم‌های زراعی کم‌نهاده را فراهم آورده و گذار به‌سوی کشاورزی پایدار را تسهیل نماید.

مواد و روش‌ها

مکان و شرایط آزمایش

آزمایش‌ها در مزرعه تحقیقاتی دانشگاه فردوسی مشهد (۳۶°۱۵' شمالی، ۵۹°۲۸' شرقی و ۹۸۵ متر ارتفاع از سطح دریا) با آب‌وهوای نیمه‌خشک (بارندگی ۲۵۲ میلی‌متر و دمای متوسط ۱۵ درجه سانتی‌گراد) انجام شد. خاک مزرعه لومی با کربن آلی متوسط بود. بذر ذرت دانه‌ای مورد استفاده هیبرید سینگل کراس ۷۰۴ بود و هنگام کاشت با مایه تلقیح دوگانه قارچ میکوریز آرباسکولار و ریزوباکتری‌های محرک رشد گیاه (شامل ازتوباکتر *Azotobacter* sp. و آروسپیریلوم *Azospirillum* sp.) به‌روش استاندارد آغشته و سپس کشت شدند. از بیان جزئیات بیشتر به‌دلیل ضروری نبودن آن‌ها و نیز محدودیت در تعداد صفحه مقاله صرف نظر می‌شود (کسب اطلاعات بیشتر از طریق مکاتبه با نویسنده مسئول مقاله امکان‌پذیر است).

مجموعه داده

داده‌ها شامل ۹۶ نمونه (هر سال ۴۸ نمونه) و ۷۵ ویژگی (۳۲ ویژگی اصلی مثل سرعت فتوسنتز و ۴۳ تعاملی مثل PmaxMean_LeafAreaIndex) بودند که طی دو سال جمع‌آوری شدند. داده‌ها به ۷۰ درصد آموزش، ۱۵ درصد اعتبارسنجی و ۱۵ درصد تست تقسیم و به‌وسیله StandardScaler استاندارد شدند.

مهندسی ویژگی

ویژگی‌های تعاملی براساس دانش اکوفیزیولوژیکی طراحی شدند. مثلاً $\text{Leaf Area Index} \times (\text{Canopy Temp_Mean})^2$ تعامل دما و سطح برگ را نشان می‌دهد.

درصد دانه‌های روغنی، ۵۹ درصد ذرت‌دانه‌ای، ۶۴ درصد گندم، ۷۷ درصد سبزیجات و ۷۶ درصد پنبه برای سناریوی سوم که یک سناریوی بیابانی است، گردید. به‌طور کلی، با بهینه‌سازی تخصیص منابع آبی ضمن صرفه‌جویی چشم‌گیر در آب مصرفی، محصول تولیدی به‌ازای آب مصرفی و همچنین سود اقتصادی نیز بسته به جواب انتخابی می‌تواند افزایش یابد (Sahabifard et al., 2024). در پژوهشی دیگر گزارش شد که بازتخصیص بهینه آب در میان مصرف کنندگان بخش کشاورزی با استفاده از الگوریتم بهینه‌سازی چند هدفه ژنتیک-فازی با هدف افزایش درآمد و عدالت در توزیع، باعث افزایش ۴۰/۷ درصدی درآمد کل شبکه و همچنین افزایش ۵۴/۵ درصدی عدالت توزیع آب شد (Kakavand et al., 2023). نتایج پژوهشی با عنوان تخمین عملکرد گندم آبی با استفاده از روش الگوریتم ترکیبی شبکه‌های عصبی مصنوعی و الگوریتم ژنتیک نشان داد که نیتروژن کل خاک به‌عنوان مؤثرترین ویژگی در کیفیت و کمیت عملکرد گندم براساس ماتریس همبستگی پیرسون ایجادشده بین ویژگی‌ها و عملکرد بود. همچنین کارآیی مدل ژنتیک - عصبی با موفقیت برای تشریح رابطه بین عملکرد گندم و ویژگی‌های زودبافت صورت گرفت، به‌طوری‌که دارای ضریب تبیین بالا (۰/۸۷) و میانگین انحراف مربعات خطا کم (۴۷۳/۵) بود و در نهایت، نتیجه گرفته شد که مدل هیبریدی می‌تواند به‌عنوان یک ابزار قدرتمند در تخمین عملکرد گندم باشد (Barikloo et al., 2018). به‌کارگیری تلفیقی الگوریتم NSGA II و مدل AquaCrop در یک منطقه خشک، به‌منظور بهینه‌سازی راهبردهای آبیاری گندم زمستانه نشان داد که تلفیق این دو مدل، کارآیی بالایی در این منطقه نشان داد و جبهه پارتو ایجادشده در الگوریتم NSGA II امکان بهینه‌سازی مطلوبی را در شبیه‌سازی پوشش تاج‌پوشش ($R^2=0.75$) و زیست‌توده بالای خاک ($R^2=0.94$) فراهم نمود (Lyu et al., 2022).

درحالی‌که به‌کارگیری NSGA-II در کشاورزی امیدبخش بوده است، اما پیچیدگی محاسباتی آن می‌تواند برای مجموعه‌داده‌های بسیار بزرگ یک محدودیت باشد. علاوه بر این، بیشتر مطالعات بر تخصیص کاربری اراضی، بهینه‌سازی راهبردهای آبیاری و الگوی کشت تمرکز دارند و به‌طور عمده بر انتخاب ویژگی تمرکز دارند تا پیش‌بینی مستقیم، که نشان‌دهنده نیاز به رویکردهای ترکیبی است که NSGA-II را با مدل‌های پیشرفته‌ای مانند XGBoost ترکیب کند. با توجه به کمبود دانش موجود در زمینه به‌کارگیری این الگوریتم

اجرای الگوریتم

در این مطالعه، برای بهینه‌سازی انتخاب ویژگی‌ها و پیش‌بینی عملکرد دانه ذرت، از یک رویکرد دو مرحله‌ای استفاده شد:

مرحله اول: NSGA-II - ابتدا، NSGA-II به‌عنوان یک

الگوریتم چند هدفه^۱ به کار گرفته شد تا مجموعه‌ای از ویژگی‌های بهینه را با در نظر گرفتن دو هدف (حداقل‌سازی تعداد ویژگی‌ها و حداکثرسازی ضریب تبیین^۲) شناسایی کند. این الگوریتم با استفاده از یک جمعیت اولیه ۱۰۰ تا ۱۰۰ نسل^۳ اجرا شد تا جبهه پاراتو^۴ را تولید کند. سپس، از میان راه‌حل‌های پاراتو، بهترین مجموعه ویژگی‌ها (براساس بالاترین R^2) انتخاب شد و به‌عنوان ورودی به مدل XGBoost منتقل گردید. این رویکرد ترکیبی، این امکان را فراهم آورد تا هم ابعاد مدل کاهش یابد و هم دقت پیش‌بینی بهبود پیدا کند.

مرحله دوم: XGBoost - بعد از انتخاب ویژگی‌ها، ایکس‌جی‌بوست

وارد عمل می‌شود و با استفاده از ویژگی‌های انتخاب‌شده، مدل را آموزش داده و پیش‌بینی نهایی را انجام می‌دهد. در این مرحله، دیگر NSGA-II نقشی ندارد و فقط نتیجه آن (ویژگی‌ها) به‌منظور پیش‌بینی عملکرد (دانه) به کار می‌رود.

بهینه‌سازی با NSGA-II

مراحل اصلی بهینه‌سازی توسط NSGA-II به قرار زیر است:

- ۱- جمعیت اولیه از جواب‌های تصادفی تولید می‌شود.
 - مرتب‌سازی نامغلوب^۵: جمعیت به چندین سطح پارتو تقسیم می‌شود.
 - جواب‌هایی که توسط هیچ کدام از بقیه جواب‌ها مغلوب نشده‌اند در سطح اول قرار می‌گیرند، و به همین ترتیب سطوح بعدی تشکیل می‌شود.
- ۲- محاسبه فاصله ازدحام^۶:

- برای حفظ تنوع جمعیت، فاصله جواب‌ها در فضای

هدف محاسبه می‌شود.

- الگوریتم، جواب‌هایی را ترجیح می‌دهد که در نواحی کم‌تراکم باشند.

۳- انتخاب والدین:

- از یک مقایسه دوگانه تورنمنتی^۸ استفاده می‌شود، که در آن، انتخاب براساس رتبه پارتو و فاصله ازدحام انجام می‌شود.

۴- اعمال عملگرهای ژنتیکی:

- ترکیب^۹ و جهش^{۱۰} روی والدین انجام می‌شود تا نسل جدیدی ایجاد شود.

۵- ادغام جمعیت‌ها و انتخاب نسل بعد:

- والدین و فرزندان با هم ترکیب می‌شوند و از میان آن‌ها براساس پارتو و تنوع، بهترین‌ها برای نسل بعد انتخاب می‌شوند (Deb et al., 2002).

تنظیمات و روش‌های الگوریتم‌های NSGA-II و XGBoost

۱- الگوریتم NSGA-II

- معماری و هدف: الگوریتم تکاملی برای بهینه‌سازی چندمنظوره که تعداد ویژگی‌ها را کمینه و ضریب تبیین (R^2) را بیشینه می‌کند. تعداد متغیرها برابر با ۷۵ (تعداد ستون‌های X_{scaled}) است.
- تنظیمات اولیه:
 - $pop_size=50$ اندازه جمعیت اولیه.
 - $n_gen=50$ تعداد نسل‌ها برای تکامل.
 - $n_var=X.shape[1]$ تعداد متغیرها (۷۵ فیچر).
 - $n_obj=2$ دو هدف (کمینه‌سازی تعداد ویژگی‌ها و بیشینه‌سازی R^2).
 - $xl=0$ و $xu=1$ محدوده مقادیر باینری برای انتخاب ویژگی‌ها (۰ یا ۱).
 - $seed=42$ برای تکرارپذیری نتایج.
- بهینه‌سازی و هایپرپارامترها:
 - از روش K-Fold Cross-Validation (پنج اسپلیت،

- 1- Multi-objective optimization
- 2- R^2
- 3- $Pop_size=100$
- 4- Generations
- 5- Pareto front
- 6- Non-dominated sorting
- 7- Crowding distance

- 8- Tournament selection
- 9- Crossover
- 10- Mutation

shuffle=

○ random_state=42, True برای ارزیابی دقت هر راه‌حل استفاده شد.

○ هایپرپارامترها (pop_size و n_gen) به صورت دستی تنظیم شدند و با آزمایش‌های اولیه (تغییر pop_size بین ۳۰ تا ۱۰۰ و n_gen بین ۲۰ تا ۱۰۰) بهینه شدند. بهترین ترکیب (۵۰ و ۵۰) تعادل بین زمان محاسبه و دقت را فراهم کرد.

○ انتخاب راه‌حل بهینه براساس حداکثر R^2 میانگین از جبهه پاراتو انجام شد.

• تحلیل حساسیت:

○ حساسیت به pop_size و n_gen بررسی شد. افزایش pop_size فراتر از ۵۰ زمان، محاسبه را به صورت غیرخطی افزایش داد بدون بهبود قابل توجه R^2 (کمتر از یک درصد تغییر). کاهش n_gen به زیر ۳۰ منجر به انتخاب ویژگی‌های غیربهینه (R^2 کاهش پنج درصد) شد.

NSGA-II با pop_size=50 و n_gen=50 اجرا شد تا تعداد ویژگی‌ها را کمینه و R^2 را بیشینه کند. بهترین راه‌حل شامل نه فیچر بود (جدول ۱).

۲- الگوریتم XGBoost

• معماری و هدف: مدل رگرسیون مبتنی بر بوستینگ برای پیش‌بینی عملکرد دانه ذرت با ویژگی‌های انتخاب‌شده توسط XGBOOST.

• تنظیمات اولیه:

○ n_estimators=100-200 تعداد درختان تصمیم.

• بهینه‌سازی و هایپرپارامترها:

○ در این مطالعه، چندین مدل XGBoost با تنظیمات مختلف پارامترها (شامل تعداد برآوردکننده‌ها، نرخ یادگیری، و عمق درخت) از طریق آزمون و خطا و به صورت سیستماتیک آزمایش شدند. ابتدا، به منظور بهینه‌سازی عملکرد مدل، از روش GridSearchCV با اعتبارسنجی متقابل ۵-فولدی استفاده شد تا پارامترهای بهینه (مانند n_estimators, learning_rate و max_depth) تعیین گردند. با این حال، نتایج نشان داد که اعمال این بهینه‌سازی منجر به کاهش ضریب

تعیین (R^2) از مقادیر اولیه (مانند ۰/۶۳۶) به مقادیر پایین‌تر (مانند ۰/۳۴) شد. گزارش شده است که برخی مواقع بهینه‌سازی با گریدرچ سی وی، واریانس یا تغییرپذیری مدل را زیاد کرده و در نتیجه سبب افت ضریب تبیین می‌شود (Probst et al., 2019). بر این اساس، تصمیم گرفته شد که مدل بدون استفاده از بهینه‌سازی پارامترها و با تنظیمات پیش‌فرض یا دستی (مانند learning_rate=0.01 و n_estimators=200) به کار گرفته شود، که عملکرد بهتری در پیش‌بینی متغیر هدف (عملکرد دانه) ارائه داد. برخی دلایل احتمالی برای این پدیده بیان شده‌اند:

○ بیش‌برازش به دلیل پیچیدگی بیش از حد: بهینه‌سازی ممکن است مدل را بیش از حد به داده‌های آموزشی تطبیق دهد، به ویژه با افزایش عمق درخت یا تعداد برآوردکننده‌ها، که تعمیم‌پذیری را کاهش می‌دهد. این پدیده می‌تواند در مجموعه داده‌های کوچک (مانند ۹۶ نمونه در این مطالعه) تشدید شود (Probst et al., 2019).

○ تعادل ناکافی بین سوگیری^۱ (تعصب) و واریانس: تنظیم بیش از حد پارامترها ممکن است واریانس مدل را افزایش دهد، درحالی‌که تنظیمات ساده‌تر تعادل بهتری بین سوگیری و واریانس ایجاد می‌کند (Hastie et al., 2009). یادگیری ماشین، وقتی bias بالا است، مدل کم‌برازش^۲ می‌شود، یعنی هم روی داده‌های آموزش و هم تست عملکرد ضعیفی دارد.

○ محدودیت‌های داده: با توجه به تعداد محدود نمونه‌ها و ویژگی‌ها، الگوریتم بهینه‌سازی ممکن است به دام راه‌حل‌های محلی بیفتد یا نتواند الگوهای عمومی را به خوبی شناسایی کند (Bergstra & Bengio, 2012).

○ عدم تطابق معیار بهینه‌سازی: معیار R^2 ممکن است با هدف واقعی مطالعه (مانند پیش‌بینی دقیق‌تر در شرایط خاص) هم‌راستا نباشد، به ویژه اگر داده‌ها اختلال^۳ زیادی داشته باشند.

○ n_estimators در بازه ۱۰۰ تا ۳۰۰.

○ learning_rate در بازه ۰/۰۰۱ تا ۰/۱.

1- Bias

2- Underfitting

3- Noise

مثال، در این مطالعه با ۹۶ نمونه (شامل ۶۷ نمونه آموزشی، ۱۴ نمونه تست و ۱۴ نمونه اعتبارسنجی)، اعتبارسنجی اطمینان از عملکرد مناسب مدل بر روی ۱۴ نمونه اعتبارسنجی را پیش از قضاوت نهایی با ۱۴ نمونه تست ممکن می‌سازد.

نحوه اجرا: در این پژوهش، اعتبارسنجی با جداسازی بخشی از داده‌ها (۱۵ درصد یا ۱۴ نمونه) و استفاده از آن به‌عنوان مجموعه ارزیابی موقت انجام شد. مراحل اجرایی به‌شرح زیر است:

۱. تقسیم داده‌ها: داده‌ها به سه مجموعه تقسیم شدند: ۷۰ درصد برای آموزش، ۱۵ درصد برای اعتبارسنجی و ۱۵ درصد برای تست.

۲. آموزش مدل: مدل با استفاده از ۶۷ نمونه آموزشی آموزش داده شد.

۳. ارزیابی موقت: عملکرد مدل با محاسبه معیارهایی نظیر ضریب تبیین^۵ و ریشه میانگین مربعات خطا^۶ بر روی ۱۴ نمونه اعتبارسنجی ارزیابی گردید.

۴. تنظیم و تکرار: در صورت عدم دستیابی به نتیجه مطلوب، پارامترهای مدل اصلاح و فرآیند تکرار شد.

۵. ارزیابی نهایی: پس از بهینه‌سازی، مدل با ۱۴ نمونه تست ارزیابی شد.

این رویکرد تضمین می‌کند که مدل به‌صورت مؤثر بهینه‌سازی شده و قابلیت تعمیم‌پذیری بالایی داشته باشد.

○ max_depth در بازه ۳ تا ۶.

○ بهترین ترکیب (۲۰۰، ۰.۰۱، ۴) براساس حداکثر R^2 میانگین انتخاب شد.

○ regularization L2 (lambda=1) برای کاهش بیش‌برازش اعمال شد.

• تحلیل حساسیت:

○ حساسیت به learning_rate بررسی شد: افزایش به R^2 ۰/۱ را به ۰/۵۹۸ کاهش داد (بیش‌برازش چهار درصد). کاهش به ۰/۰۰۱ زمان آموزش را دو برابر کرد بدون بهبود R^2 .

○ تغییر max_depth به ۶ R^2 را به ۰/۶۳ رساند، اما زمان محاسبه ۳۰ درصد افزایش یافت.

ارزیابی^۱ و تعیین اعتبار^۲

اعتبارسنجی: اعتبارسنجی یکی از مراحل اساسی در فرآیند یادگیری ماشینی است که به‌منظور ارزیابی عملکرد مدل پیش از انجام ارزیابی نهایی با مجموعه داده‌های تست به کار گرفته می‌شود. این روش از جنبه‌های متعددی حائز اهمیت است:

• پیشگیری از بیش‌برازش^۳: مدل ممکن است عملکرد مطلوبی بر روی داده‌های آموزشی نشان دهد، اما در پیش‌بینی داده‌های جدید ناکارآمد باشد. اعتبارسنجی به ارزیابی قابلیت تعمیم‌پذیری مدل به داده‌های نادیده‌گرفته‌شده (که در مجموعه‌های آموزشی و تست حضور ندارند) کمک می‌کند.

• بهینه‌سازی پارامترهای فراگیر^۴: با بهره‌گیری از مجموعه داده‌های اعتبارسنجی، پارامترهایی نظیر تعداد برآوردکننده‌ها یا نرخ یادگیری در الگوریتم یکس‌جی‌بوست قابل تنظیم هستند تا بهینه‌ترین عملکرد حاصل شود، بدون وابستگی به داده‌های تست.

• ارزیابی بی‌طرفانه: مجموعه داده‌های تست برای ارزیابی نهایی محفوظ نگه داشته می‌شوند، و اعتبارسنجی امکان بررسی اولیه و مکرر مدل را پیش از مرحله نهایی فراهم می‌کند. به‌عنوان

-
- 2- Evaluation
 - 3- Validation
 - 4- Overfitting
 - 5- Hyperparameters

6- R^2
7- RMSE

جدول ۱- ویژگی‌های منتخب توسط NSGA-II

Table 1- Selected features by NSGA-II

ویژگی Feature	شرح Description
Pmax1	سرعت فتوسنتز بیشینه در مرحله ظهور برگ پرچم Maximum photosynthesis rate at the flag leaf emergence stage
SPAD_3	محتوای کلروفیل برگ در مرحله کاکل‌دهی Leaf chlorophyll content at the silking stage
Canopy Temp_4	دمای تاج‌پوشش در مرحله خمیری دانه Canopy temperature at the dough stage
Canopy Temp_Mean	میانگین دمای تاج‌پوشش (چهار مرحله) Mean canopy temperature (4 stages)
Cob_Length	طول بلال Cob length
%P soil	درصد فسفر خاک (در انتهای فصل رشد) Soil phosphorus percentage (at the end of the growing Season)
(SPAD_Mean) ^2	مجدور میانگین (سه مرحله) محتوای کلروفیل برگ Squared mean leaf chlorophyll content (3 stages)
(Soil Respiration Rate) ^2	مجدور سرعت تنفس خاک Squared soil respiration rate
(Canopy Temp_Mean) ^2×Leaf Area Index	برهم‌کنش مجدور میانگین دمای تاج‌پوشش و شاخص سطح برگ Interaction of squared mean canopy temperature and leaf area index

نرم‌افزارهای مورد استفاده

تحلیل‌ها با استفاده از پایتون نسخه ۳/۹ در محیط Spyder (Scientific PYthon Development EnviRonment) 6.0.4 انجام شد و از کتابخانه‌هایی مانند pymoo برای NSGA-II، shap برای مدل‌سازی، scikit-learn برای پیش‌پردازش، lime و برای تحلیل تفسیری، و Matplotlib و Pandas برای تولید نمودارها بهره گرفته شد. استانداردسازی داده‌ها با استفاده از StandardScaler از کتابخانه scikit-learn انجام شد تا ویژگی‌ها میانگین صفر و انحراف معیار یک داشته باشند، که این موضوع برای آموزش مؤثر شبکه‌های عصبی ضروری است. تفسیر خروجی‌های الگوریتم‌ها و رسم نمودارهای وابستگی جزئی، نمودارهای تصمیم، اهمیت نسبی ویژگی‌ها، و فورس پلات با استفاده از کتابخانه SHAP (Shapley Additive exPlanations) صورت گرفت. برای تحلیل Counterfactual تغییرات ۱۰ درصدی در انحراف معیار ویژگی‌ها بررسی شد. نمودار LIME برای توضیحات محلی تولید گردید.

نتایج و بحث

بهینه‌سازی با الگوریتم NSGA-II

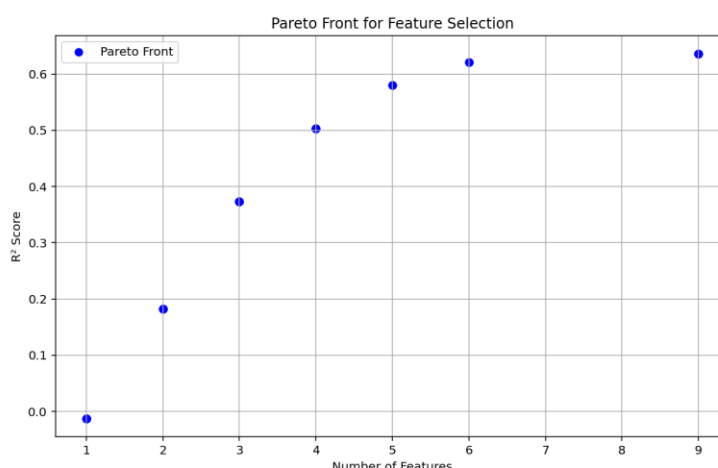
نمودار پارتو^۱ نشان می‌دهد که چگونه تعداد ویژگی‌های انتخاب شده برای مدل‌سازی بر ضریب تبیین (میزان تبیین واریانس) تأثیر می‌گذارد. NSGA-II با کاهش ۷۱ فیچر به ۹ فیچر، جبهه پاراتو را بهینه کرد و ضریب تبیین را به ۰/۶۳۶ رساند که تعادل مناسبی بین تعداد ویژگی‌ها و دقت مدل فراهم نمود (شکل ۱). محور افقی نشان می‌دهد که تعداد ویژگی‌های انتخاب‌شده از ۱ تا ۹ در نوسان است. محور عمودی نشان می‌دهد که با افزایش تعداد ویژگی‌ها، ضریب تبیین (میزان تبیین واریانس) افزایش می‌یابد و به سمت مقدار بهینه نزدیک می‌شود. هر نقطه آبی در نمودار یک ترکیب بهینه از تعداد ویژگی‌ها و ضریب تبیین را نشان می‌دهد. این نقاط تشکیل یک جبهه پاراتو^۲ را می‌دهند که مرز بهینه‌های موجود است. به‌طور کلی، این نمودار به محققان و مدل‌سازان کمک می‌کند تا تعداد بهینه ویژگی‌ها را برای حداکثر ضریب تبیین انتخاب کنند و به یک تعادل بین تعداد

1- Pareto

2- Pareto front

انتخاب نه ویژگی می‌تواند بهترین تعادل باشد، زیرا ضریب تبیین به‌طور قابل توجهی بهبود می‌یابد. البته اگر محدودیت‌هایی مانند زمان آموزش یا پیچیدگی مدل وجود داشته باشد، انتخاب شش ویژگی نیز می‌تواند گزینه مناسبی باشد.

ویژگی‌ها و دقت مدل برسند. براساس قاعده پارتو، هرچه تعداد ویژگی‌ها بیشتر باشد، ضریب تبیین بهتر می‌شود، اما افزایش ویژگی‌ها بعد از یک نقطه، بازدهی کمتری خواهد داشت. در پژوهش حاضر با انتخاب شش ویژگی، ضریب تبیین حدود ۰/۵۵ است، و با انتخاب نه ویژگی، ضریب تبیین به حدود ۰/۶۳ می‌رسد. بنابراین، در این مورد،



شکل ۱- نمودار جبهه پاراتو نشان‌دهنده تعادل بین تعداد ویژگی‌ها و ضریب تبیین در الگوریتم NSGA-II

Fig. 1- Pareto front diagram showing the trade-off between the number of features and the coefficient of determination in the NSGA-II algorithm

گرفته شده بودند، بهبود نشان داد،^۳ ANFIS ($R^2=0.555$ ، $RMSE=2.834$)، Transformer ($R^2=0.545$ ، $RMSE=2.804$)، ANN ($R^2=0.518$ ، $RMSE=2.917$). این نتایج از طریق تعیین اعتبار روی مجموعه داده‌های مستقل به دست آمده و حاکی از برتری الگوریتم پیشنهادی در پیش‌بینی عملکرد دانه است.

نمودار پراکنش نمونه‌های پیش‌بینی‌شده در مقابل نمونه‌های مشاهده‌شده برای الگوریتم مورد ارزیابی در شکل ۲ نشان داده شده است. ضریب تبیین برابر با ۰/۶۳ و جذر میانگین مربعات خطا برابر با ۲/۱۷ تن در هکتار، که از طریق تعیین اعتبار به دست آمده، حاکی از دقت خوب مدل در پیش‌بینی می‌باشد. مور و همکاران (Moore et al., 2013)، دامنه زیر را برای تفسیر ضریب تبیین (شاخصی از نکویی

ارزیابی و تعیین اعتبار الگوریتم تلفیقی

تعیین اعتبار، بخشی از فرآیند ارزیابی است. ارزیابی کل فرآیند، بررسی عملکرد مدل را شامل می‌شود. این فرآیند شامل استفاده از داده‌های آموزش، اعتبارسنجی، تست^۱ برای اندازه‌گیری نهایی عملکرد (مثل R^2 یا $RMSE$) و همچنین استفاده از داده‌های اعتبارسنجی^۲ برای تنظیم مدل یا انتخاب هایپرپارامترها می‌شود. تعیین اعتبار، یک مرحله خاص در این فرآیند ارزیابی است که روی مجموعه داده‌های جداگانه انجام می‌شود و هدف آن، بررسی مدل پیش از ارزیابی نهایی، تنظیم هایپرپارامترها، یا پیشگیری از بیش‌برازش است. تعیین اعتبار معمولاً قبل از ارزیابی نهایی با داده‌های تست انجام می‌شود.

مدل نهایی، ضریب تبیین برابر با $R^2=0.636$ و جذرمیانگین مربعات خطا برابر با $RMSE=2.171$ تن در هکتار داشت که نسبت به الگوریتم‌های مشابه که در مطالعات قبلی به همین منظور به کار

3- ANFIS ($R^2=0.555$ ، $RMSE=2.804$)، Transformer

($R^2=0.545$ ، $RMSE=2.834$)، ANN

($R^2=0.518$ ، $RMSE=2.917$)

1- Test set

2- Validation set

مختلف (یا نمونه‌های مختلف) مدل، نوسان زیادی دارد، به عبارت دیگر، مدل نسبت به این ویژگی در برخی موارد آن را خیلی مهم و در موارد دیگر کم‌اهمیت ارزیابی کرده، که می‌تواند ناشی از شرایط اقلیمی متغیر، اثرات فصلی، یا تعاملات پیچیده با سایر متغیرها باشد. پهنای زیاد این ویولن‌ها در هر دو ناحیه منفی و مثبت محور افقی نشان می‌دهد که مقدار اهمیت این ویژگی‌ها در بین نمونه‌های مختلف زیاد است، و بسته به ماهیت ویژگی، تفسیر متناسب آن توسط رنگ (قرمز برای تأثیر مثبت و آبی برای تأثیر منفی بر خروجی مدل) صورت می‌گیرد. به‌طور کلی، هرچه در سمت راست خط پایه، پهنای ویولن‌ها بیشتر و رنگ‌ها به قرمز متمایل‌تر باشند، حاکی از تأثیر پدیدار آن ویژگی‌ها در بین نمونه‌های مختلف است. ویژگی‌های با رتبه‌های ۱ تا ۶ (شکل ۳؛ طول بلال، دمای تاج‌پوشش، شاخص کلروفیل برگ، درصد فسفر خاک و سرعت تنفس خاک)، به‌ویژه در مناطق با تغییرات دمایی زیاد، شرایط رشد گیاه را تحت تأثیر قرار می‌دهند و مدل به‌خوبی اهمیت آن‌ها را پیش‌بینی کرده است (Taiz et al., 2018; Slafer et al., 2023). گزارش شده است که در پیش‌بینی عملکرد ذرت با استفاده از الگوریتم‌های یادگیری ماشین شامل جنگل تصادفی، شبکه عصبی مصنوعی، SVR، REPT و M5P Decision Tree، بهترین کارایی و دقت مربوط به جنگل تصادفی بود، به‌ویژه هنگامی که با داده‌های آبیاری، باندهای طیفی و دما به‌عنوان ویژگی‌های مهم به کار گرفته شد (Baio et al., 2023). این نتایج با ویژگی‌های مجموعه داده پژوهش حاضر، مانند Canopy Temp_4 و Leaf Area Index هم‌راستا است.

نمودار تصمیم^۴

شکل ۴، یک نمودار تصمیم مبتنی بر مقادیر شیپ برای الگوریتم تلفیقی ان‌اس‌جی‌ای و ایکس‌جی‌بوست است که برای پیش‌بینی عملکرد دانه ذرت تحت تأثیر کودهای بیولوژیک رسم شده است. مقادیر شیپ، ابزار قدرتمندی برای درک نحوه اثرگذاری هر ویژگی ورودی بر پیش‌بینی مدل هستند.

برازش^۱ پیشنهاد کرده‌اند: $R^2 < 0.25$: بسیار ضعیف؛ $0.25 \leq R^2 < 0.50$: ضعیف؛ $0.50 \leq R^2 < 0.75$: متوسط؛ $R^2 \geq 0.75$: قابل توجه. براساس راهنمای کوهن (Cohen, 1988)، ضرایب تبیین مساوی یا بزرگ‌تر از ۰/۲۶ در محدوده قابل توجه^۲ قرار می‌گیرند. اگرچه ضریب تعیین به‌طور گسترده‌ای به‌عنوان شاخصی از برازش مدل در رگرسیون خطی و چندگانه به کار می‌رود، اما تفسیر آن در زمینه یادگیری ماشین – به‌ویژه با الگوریتم‌های غیرخطی باید با احتیاط صورت گیرد. دلیل این امر آن است که R^2 لزوماً ظرفیت پیش‌بینی یا توان تعمیم مدل‌های پیچیده را به‌طور کامل نشان نمی‌دهد و در برخی موارد ممکن است که خوش‌بینانه یا گمراه‌کننده باشد، به‌ویژه در شرایطی با ابعاد بالا یا بیش‌برازش. بنابراین توصیه می‌شود که علاوه بر R^2 ، از شاخص‌هایی مانند RMSE، MAE یا اعتبارسنجی متقابل برای ارزیابی جامع‌تر عملکرد مدل استفاده گردد (Kuhn & Johnson, 2013). فاشوتو و همکاران (Fashoto et al. 2021) اظهار داشتند که مدل‌های یادگیری ماشین در برآورد عملکرد محصول ذرت نسبت به روش‌های سنتی (رگرسیون چندگانه گام‌به‌گام حذفی پس‌رونده/افزودنی پیش‌رونده) برتری دارند. گزارش شده است که مدل جنگل تصادفی در تخمین فعالیت‌های آنزیمی خارج سلولی خاک در زمین‌های شور ساحلی بازسازی شده کشاورزی عملکرد بهتری نسبت به رگرسیون‌های خطی چندگانه داشته است (Xie et al., 2021).

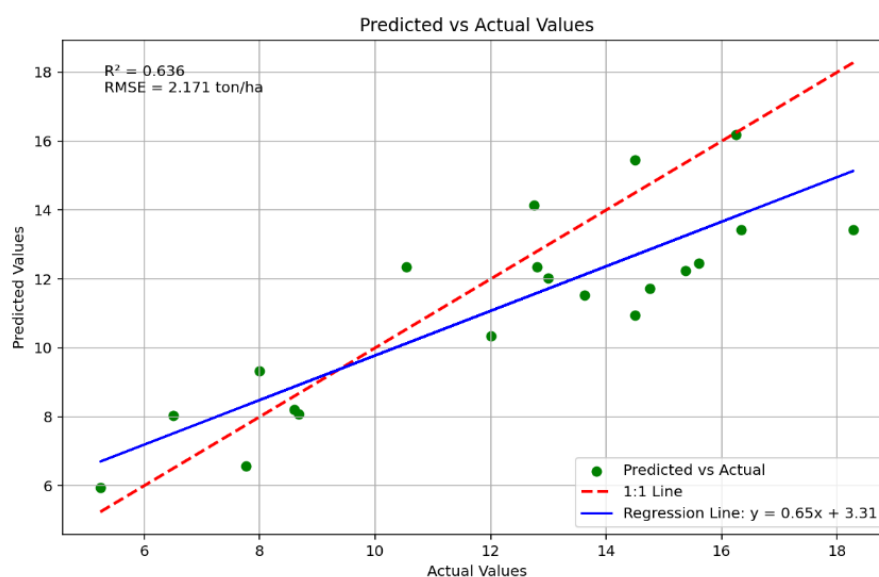
تحلیل شیپ^۳

شکل ۳، توزیع اهمیت استاندارد شده ویژگی‌های اکوفیزیولوژیکی و خاکی مؤثر بر عملکرد دانه ذرت را براساس الگوریتم تلفیقی NSGA II+XGBoost نشان می‌دهد. تحلیل شیپ نشان داد که ویژگی‌هایی مانند طول بلال (Cob_Length) و میانگین دمای تاج‌پوشش (Canopy Temp_Mean) بیشترین تأثیر را بر پیش‌بینی مدل دارند، که با دانش اکوفیزیولوژیکی هم‌راستا است. ویژگی‌ها براساس میانگین اهمیت از بالا به پایین مرتب شده‌اند و هر نمودار ویولن، تراکم و پراکندگی مقادیر اهمیت را برای یک ویژگی خاص به تصویر می‌کشد. در یک متغیر خاص، وقتی که پهنای ویولن در کل محور افقی یکسان باشد، نشان می‌دهد که اهمیت آن متغیر در شرایط

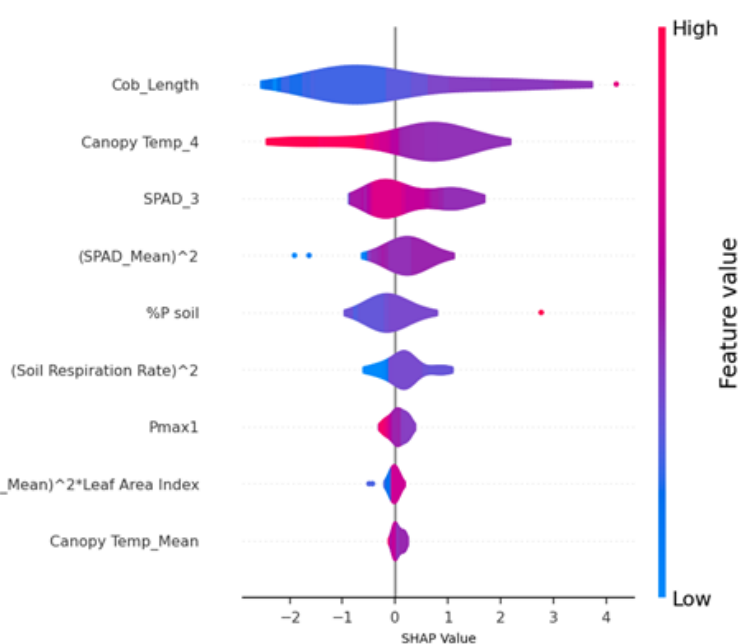
4- Goodness-of-fit

1- Substantial

2- SHapley Additive exPlanations (SHAP)



شکل ۲- نمودار پراکندگی مقادیر پیش‌بینی شده در مقابل مقادیر واقعی عملکرد دانه ذرت توسط الگوریتم ترکیبی XGBoost و NSGA-II
Fig. 2- Scatter plot of predicted vs. actual maize grain yield values using the integrated NSGA-II and XGBoost algorithm



شکل ۳- نمودار ویولونی اهمیت نسبی ویژگی‌های انتخاب‌شده توسط الگوریتم تلفیقی XGBoost و NSGA-II
Fig. 3- Violin plot of the relative importance of selected features by the integrated NSGA-II and XGBoost algorithm

ویژگی را بر پیش‌بینی عملکرد نشان می‌دهد (مثلاً افزایش یا کاهش عملکرد). محور عمودی ویژگی‌های مدل را فهرست کرده است (مانند دمای تاج‌پوشش، شاخص کلروفیل، تعداد بلال، سرعت تنفس خاک و

در این تصویر، تغییرات مقادیر شیپ برای هر ویژگی نسبت به مقادیر آن ویژگی در نمونه‌های مختلف مشاهده می‌شود. در این نمودار، محور افقی نمایانگر مقدار شیپ است، که میزان تأثیر هر

هکتار، به مقدار قبلی افزوده و عملکرد دانه را به حدود ۱۲/۲ تن در هکتار رسانده است. در ادامه، درصد فسفر خاک با افزودن ۰/۷۷۹۴ تن در هکتار به عملکرد دانه، عملکرد را به حدود ۱۳ تن در هکتار رسانده است. پس از آن، مجذور سرعت تنفس خاک، مجذور میانگین شاخص کلروفیل برگ و در نهایت طول بلال، عملکرد دانه را به ۱۶/۱۸ تن در هکتار رساندند. میزان تأثیر هر کدام از ویژگی‌ها علاوه بر عدد جلوی هر ویژگی در نمودار، از طول هر پیکان قرمز نیز قابل مشاهده و ارزیابی است. قرار گرفتن شاخص کلروفیل برگ، سرعت تنفس خاک، درصد فسفر خاک، دمای تاج‌پوشش و سرعت فتوسنتز بیشینه، به عنوان ویژگی‌های پیش‌برنده عملکرد، با نتایج حاصله در تحلیل‌های قبلی (شیپ و یولون، شیپ دسیژن و واترفال پلات) مطابقت دارد. بهینه‌سازی NSGA II در پنج الگوی تنظیمی مختلف نشان داد که این الگوریتم در ترکیب با مدل DSSAT از عملکرد بالایی برای بهینه‌سازی راهبردهای آبیاری و کوددهی ذرت برخوردار بود که به نوبه خود اثربخشی الگوریتم بهبودیافته را تأیید کرد (Du et al., 2024).

تحلیل اهمیت نسبی ویژگی‌ها^۴

در شکل ۶، اهمیت نسبی^۵ ویژگی تشخیص داده شده توسط الگوریتم در افزایش پیش‌بینی عملکرد دانه ذرت تحت کاربرد کودهای زیستی، به ترتیب نشان داده شده‌اند. همان طور که مشاهده می‌شود، ترتیب ویژگی‌ها با نمودار فورس پلات، همخوانی دارد. گزارش شده است که تلفیق الگوریتم‌های یادگیری ماشین مبتنی بر شبکه‌های عصبی مصنوعی به همراه مهندسی ویژگی‌ها، در پیش‌بینی عملکرد سویا (*Glycine max L.*)، میانگین خطای مطلق را ۱۲ درصد و ضریب تبیین را ۲۵ درصد بهبود بخشید (Ingole et al., 2025).

تحلیل اثرات متقابل ویژگی‌ها

شکل ۷ نشان می‌دهد که چطور تعامل بین ویژگی‌ها روی پیش‌بینی مدل تأثیر می‌گذارد. هر میله نشان‌دهنده اثر کلی یک ویژگی با نشان دادن اثرات متقابل آن با تمام ویژگی‌های برتر بر خروجی مدل با استفاده از قدر مطلق میانگین مقدار شیپ است. این مقدار، ترکیب تأثیرات فردی و تعاملی ویژگی‌ها را نشان می‌دهد. به طور کلی، نمودار اینتراکشن شیپ، بیش ارزشمندی در مورد اهمیت

غیره). هر خط بیانگر یک نمونه (سال-مکان)^۱ در اینجا منظور عملکرد دانه ذرت در یک کرت آزمایشی در یکی از دو سال آزمایش است) می‌باشد. هر کدام از این خط‌های رنگی هنگام عبور از یک ویژگی (مثلاً دمای کمینه روزانه)، به سمت چپ یا راست منحرف می‌شوند: اگر به سمت چپ برود یعنی شیپ منفی بوده و عملکرد کاهش می‌یابد. اگر خط به سمت راست خط پایه منحرف شود یعنی شیپ مثبت بوده و عملکرد افزایش یافته است. در ویژگی‌هایی که قدرت توضیح‌دهندگی بالایی دارند، این انحراف‌ها زیاد و شدید هستند. اگر خطوط در یک ویژگی به صورت قابل توجهی از هم جدا شوند (باز شوند)، یعنی آن ویژگی اثر زیادی در خروجی مدل دارد. اگر خطوط تقریباً صاف یا هم‌راستا باقی بمانند، آن ویژگی اثر چندانی در مدل نداشته است. اثر یک ویژگی همیشه خطی یا یکنواخت نیست؛ یعنی مقدار بیشتر یک ویژگی لزوماً همیشه به معنای بهتر یا بدتر بودن نیست، بلکه ممکن است از یک نقطه به بعد، اثر آن ویژگی کاهش پیدا یافته یا حتی برعکس شود. تحلیل نمودار تصمیم، حاکی از همخوانی کامل آن با نمودار ویولونی می‌باشد و بر اهمیت و تأثیر ویژگی‌های اکوفیزیولوژیکی از جمله دمای تاج‌پوشش، شاخص کلروفیل برگ، سرعت تنفس خاک و سرعت فتوسنتز بیشینه که همگی تحت تأثیر مستقیم یا غیرمستقیم کودهای زیستی به کاررفته در این تحقیق بودند، صحه گذاشت (Brar et al., 2024).

نمودار فورس^۲

فورس پلات، یک نمایش تعاملی یا ساکن است که توسط matplotlib تولید می‌شود و نشان می‌دهد که چطور هر ویژگی برای یک نمونه خاص، پیش‌بینی مدل را از مقدار پایه^۳ به مقدار نهایی می‌برد. تأثیر مثبت (با رنگ قرمز) و منفی (با رنگ آبی) هر ویژگی را برای یک ردیف مشخص از دیتا (مثلاً X_test[0] در مطالعه حاضر) یا میانگین داده‌های نمونه‌های تست نشان می‌دهد. به طور کلی، نمودار فورس یک داستان بصری از تغییرات پیش‌بینی را نشان می‌دهد. در شکل ۵، ابتدا سرعت فتوسنتز بیشینه در مرحله ظهور برگ پرچم، مقدار عملکرد دانه را ۰/۰۱۵ تن در هکتار افزایش داده است. سپس دمای تاج‌پوشش در مرحله پر شدن دانه، به میزان ۰/۲۳۴۷ تن در

1- Year-location
2- Force plot
3- Base value

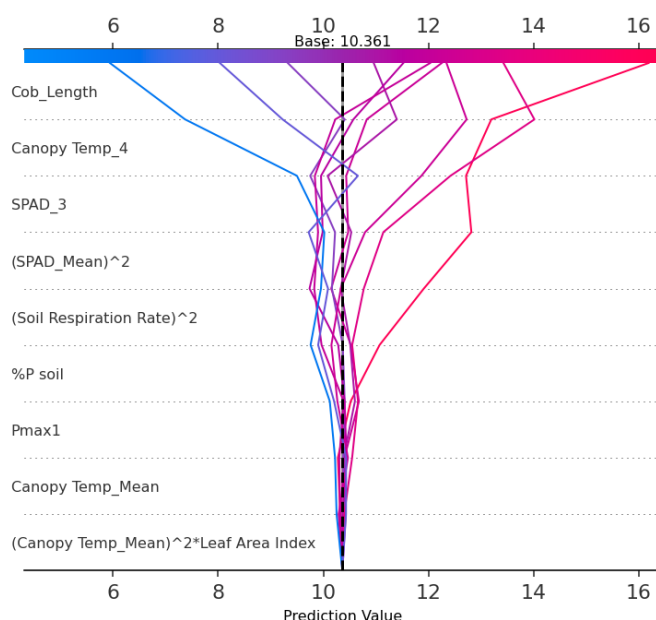
4- Feature importance

اختصاص داده است، بنابراین یکی از متغیرهای مهم مدل محسوب می‌شود.

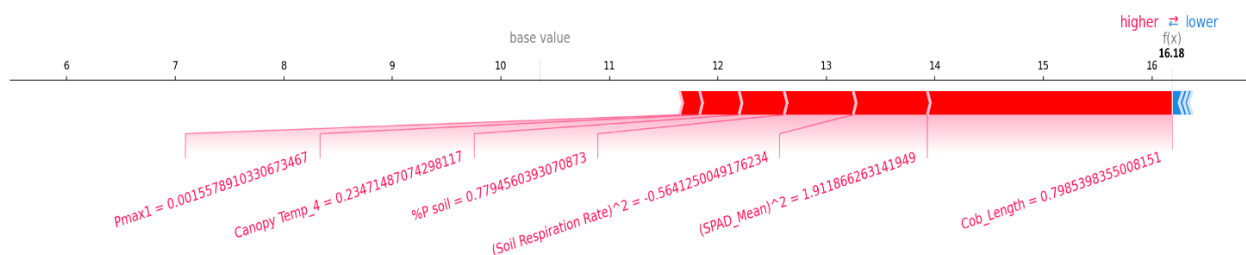
۳. شاخص کلروفیل برگ در مرحله کاکل‌دهی SPAD_3: این ویژگی میانگین مقدار شیب متوسطی دارد، یعنی تأثیری قابل توجه اما نه به اندازه دو ویژگی قبلی بر خروجی مدل دارد.
۴. مجذور شدت تنفس خاک $(\text{Soil Respiration Rate})^2$: این ویژگی میانگین مقدار شیب نسبتاً بالایی دارد، و حاکی از آن است که یک جزء غیرخطی مهم در مدل می‌باشد.

نسبی و تعامل ویژگی‌های مدل ارائه می‌دهد و کمک می‌کند تا محرک‌های اصلی خروجی مدل شناسایی شوند و در صورت لزوم، تلاش‌های بیشتری برای مهندسی ویژگی‌ها انجام گیرد. براساس تحلیل انجام گرفته، نه تعامل برتر به شرح زیر هستند:

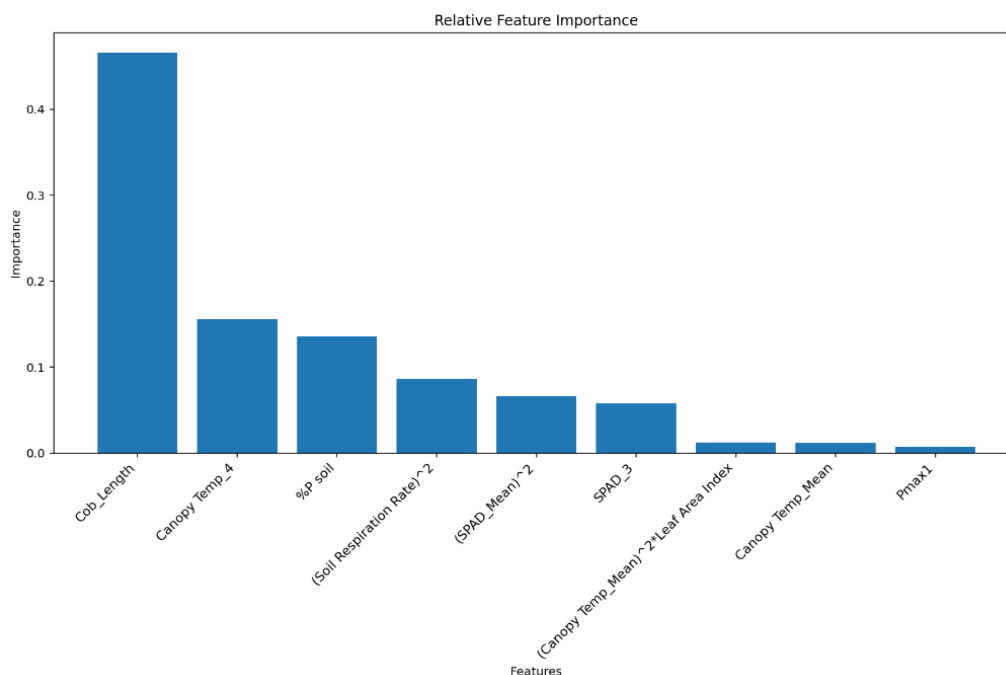
۱. طول بلال (Cob_Length): این ویژگی بالاترین میانگین مقدار شیب را دارد، یعنی مهم‌ترین متغیر توسط مدل تشخیص داده شده است.
۲. دمای تاج‌پوشش در مرحله پر شدن دانه (Canopy Temp_4): این ویژگی نیز میانگین مقدار شیب بالایی را به خود



شکل ۴- نمودار تصمیم برای ۱۰ نمونه و ویژگی‌های انتخاب‌شده توسط الگوریتم ترکیبی XGBoost و NSGA-II
Fig. 4- Decision plot for ten samples and selected features by the integrated NSGA-II and XGBoost algorithm



شکل ۵- فورس پلات برای نشان دادن تأثیر ویژگی‌های انتخاب‌شده توسط الگوریتم تلفیقی XGBoost و NSGA-II
Fig. 5- Force plot showing the impact of selected features by the integrated NSGA-II and XGBoost algorithm



شکل ۶- نمودار اهمیت نسبی ویژگی‌های انتخاب‌شده توسط الگوریتم تلفیقی NSGA-II و XGBoost
Fig. 6- Relative importance plot of selected features by the integrated NSGA-II and XGBoost algorithm

تحلیل اکوفیزیولوژیکی ویژگی‌های برتر حاکی از تأثیر مثبت کاربرد کودهای زیستی در پژوهش حاضر می‌باشد. به عبارت دیگر، می‌توان اثرات مثبت این کودها را به افزایش فسفر قابل دسترس در خاک و بهبود روابط آبی و به دنبال آن افزایش سطح برگ با محتوای کلروفیل بیشتر و تشدید فعالیت سیستم فتوسنتزی گیاه نسبت داد. گزارش‌های متعددی در تأیید چنین اثرات و روابط توسط محققان مختلف ارائه شده است (Salvador et al., 2022; Mitra et al., 2023; Khoso et al., 2024; Bhupenchandra et al., 2024).

نمودار آبشاری^۱ یا اثرات تجمعی^۲ ویژگی‌ها

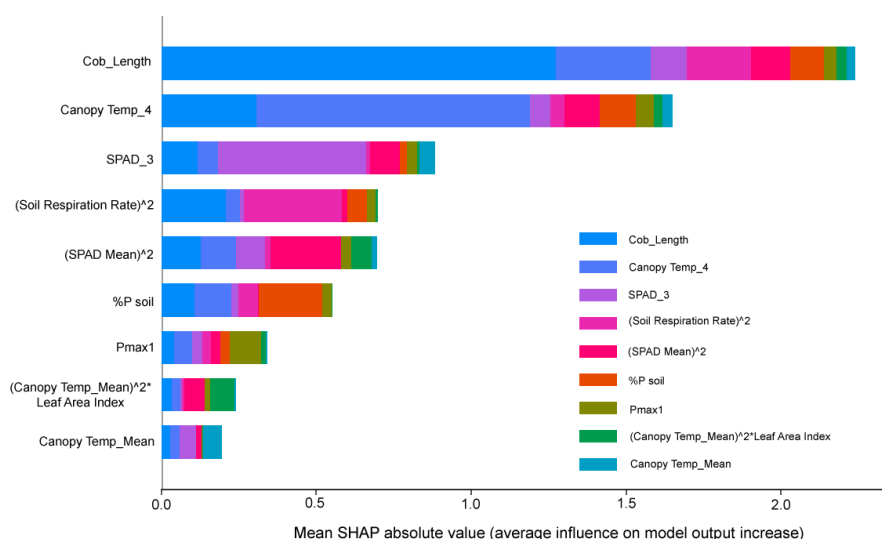
شیپ واتر فال پلات، تغییرات تجمعی یا انباشتی تأثیر هر ویژگی بر روی پیش‌بینی مدل برای یک نمونه خاص (در مطالعه حاضر) یا میانگین نمونه‌ها در داده‌های تست را نشان می‌دهد. هر فلش یا میله نشان‌دهنده اثر یک ویژگی (یا برهم‌کنش) روی پیش‌بینی است و محور عمودی نشان می‌دهد که چطور این تأثیرات با هم جمع می‌شوند تا به خروجی نهایی (عملکرد دانه) برسند. فلش قرمز معمولاً

۵. مجذور میانگین شاخص کلروفیل برگ $(SPAD_Mean)^2$: این ویژگی میانگین مقدار شیپ متوسطی دارد، یعنی یک رابطه غیرخطی مهم را در داده‌ها منعکس می‌کند.
۶. درصد فسفر خاک (%P soil): این ویژگی میانگین مقدار شیپ نسبتاً بالایی دارد، پس پیش‌بینی‌کننده مهمی در مدل محسوب می‌شود.
۷. سرعت فتوسنتز بیشینه در مرحله ظهور برگ پرچم Pmax1: این ویژگی میانگین مقدار شیپ متوسطی دارد، به عبارت دیگر، به خروجی مدل کمک می‌کند، اما این نقش در حد متوسط است.
۸. اثر متقابل مجذور میانگین دمای تاج‌پوشش و شاخص سطح برگ $(Canopy_Temp_Mean)^2 \times Leaf_Area_Index$: این جزء تعاملی میانگین مقدار شیپ متوسطی دارد، و نشان می‌دهد که رابطه غیرخطی مهمی بین دمای تاج‌پوشش و شاخص سطح برگ وجود دارد.
۹. میانگین دمای تاج‌پوشش $(Canopy_Temp_Mean)$: این ویژگی میانگین مقدار شیپ نسبتاً پایینی دارد، و نسبت به دیگر ویژگی‌ها اهمیت کمتری در خروجی مدل دارد.

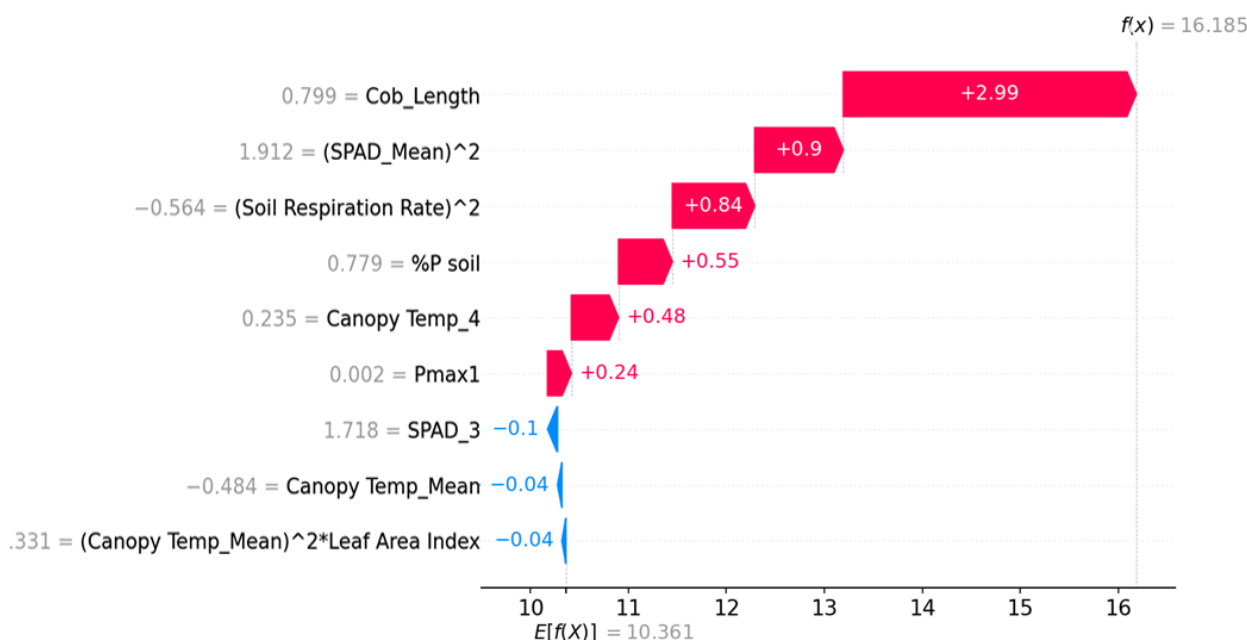
1- Waterfall plot
2- Cumulative

کمک کرده است. مقدار کنار اسم ویژگی (محور عمودی) که با رنگ خاکستری نمایش داده شده، مقدار اثر خالص ویژگی بر افزایش یا کاهش عملکرد دانه را نشان می‌دهد (شکل ۸).

نشان‌دهنده تأثیری است که پیش‌بینی را به سمت افزایش (مثبت) می‌برد. فلش آبی نشان‌دهنده تأثیری است که پیش‌بینی را به سمت کاهش (منفی) می‌برد. مقدار داخل فلش نشان‌دهنده مقدار شیپ برای آن ویژگی یا تعامل است، که نشان می‌دهد چقدر به تغییر پیش‌بینی



شکل ۷- نمودار شیپ اثر متقابل ویژگی‌های انتخاب‌شده توسط الگوریتم تلفیقی NSGA-II و XGBoost
Fig. 7- SHAP interaction plot of selected features by the integrated NSGA-II and XGBoost algorithm



شکل ۸- نمودار آبشاری دویعدی ویژگی‌های انتخاب‌شده توسط الگوریتم تلفیقی NSGA-II و XGBoost
Fig. 8- Two-dimensional Waterfall Plot of selected features by the integrated NSGA-II and XGBoost algorithm

باعث افزایش عملکرد دانه شدند. "مجذور سرعت تنفس خاک" منفی شده (۰/۸-) که نشان می‌دهد تعامل یا اثر این ویژگی در این نقطه

"طول بلال" و "مجذور میانگین شاخص کلروفیل" اثر مثبتی دارند (فلش قرمز با مقادیر مثبت) که نشان می‌دهد این ویژگی‌ها

پیچیده کمک می‌کند. این نمایش برای تحلیل نمونه‌های خاص، مثل ردیف اول X_test ، اطلاعات مکمل را نسبت به واتر فال دوبعدی فراهم می‌سازد.

تحلیل سناریوی معکوس^۱ یا وضعیت فرضی

شکل ۱۰ (نمودار کانتر فکچوال) نشان‌دهنده تأثیرات انباشتی

ویژگی‌ها بر پیش‌بینی عملکرد دانه برای یک نمونه خاص است. مقادیر شیب با واحد در هکتار نشان می‌دهند که هر ویژگی، با فرض تغییر به اندازه حدود ۱۰ درصد انحراف معیار خود، چقدر به افزایش یا کاهش پیش‌بینی کمک کرده است. نتایج به شرح زیر تفسیر می‌شوند:

- $(-0.457) \text{ (Canopy Temp_Mean)}^2$: این ویژگی با بیشترین اثر منفی، نشان‌دهنده تأثیر قابل توجه کاهش‌دهنده است. مجذور میانگین دمای تاج‌پوشش، با تغییر ۱۰ درصد انحراف معیار، به دلیل دمای بالای تاج‌پوشش، تنش حرارتی ایجاد کرده و عملکرد دانه را به میزان ۰/۴۵۷ تن در هکتار کاهش داده است. این اثر منفی می‌تواند به رابطه غیرخطی دما با عملکرد اشاره داشته باشد، جایی که دماهای خیلی بالا اثر معکوس دارند.
- $0.424 \text{ FvFm Ratio_2}$: این ویژگی با بیشترین اثر مثبت، نقش کلیدی در افزایش پیش‌بینی دارد. نسبت Fv/Fm (کارایی فتوشیمیایی)، با تغییر ۱۰ درصد انحراف معیار، به عنوان شاخصی از سلامت فتوسنتز، با ارزش ۰/۴۲۴ تن در هکتار به بهبود عملکرد دانه کمک کرده است. این نتیجه با دانش اکوفیزیولوژیک هم‌راستاست، زیرا Fv/Fm بالاتر معمولاً با نمود^۲ بهتر گیاه همراه است.
- $0.128 \text{ Dry Matter Yield}$: این ویژگی اثر مثبتی دارد و با تغییر ۱۰ درصد انحراف معیار، به میزان ۰/۱۲۸ تن در هکتار به افزایش پیش‌بینی عملکرد دانه کمک کرده است. عملکرد ماده خشک به عنوان یک شاخص رشد، عامل اصلی در حمایت از تولید دانه به عنوان عملکرد نهایی گیاه است.
- -0.067 Pmax1 : سرعت فتوسنتز بیشینه در مرحله ظهور برگ پرچم ($Pmax1$)، با تغییر ۱۰ درصد انحراف معیار، اثر منفی کوچکی با ۰/۰۶۷ واحد دارد. این می‌تواند به این معنی

خاص، ۰/۸ واحد به سمت کاهش پیش‌بینی (عملکرد دانه) کمک کرده است. در کنار اسم این ویژگی، مقدار ۰/۵۶۴- با رنگ خاکستری نشان‌دهنده اثر خالص این ویژگی بر کاهش عملکرد دانه است (**شکل ۸**). در تفسیر این نتیجه که اندکی غیرمعمول به نظر می‌رسد باید به نکاتی چند توجه داشت: آ- تأثیر متغیر: واتر فال پلات، تأثیر هر فیچر را برای یک نمونه خاص (مثلاً ردیف اول داده‌های تست) نشان می‌دهد. اگر ارزش "مجذور سرعت تنفس خاک" در این نمونه خاص بالا باشد، ممکن است اثر منفی شدیدی داشته باشد، حتی اگر در بقیه دیتاست اثر آن متعادل یا مثبت باشد. فلش قرمز فقط نشان‌دهنده جهت کلی اثر است (مثبت یا منفی)، نه اینکه همیشه مثبت باشد. ب- تعاملات پیچیده: در مدل‌های پیچیده (مثل ایکس‌جی‌بوست)، اثر یک ویژگی به تنهایی معیار نیست، بلکه به تعامل آن با ویژگی‌های دیگر بستگی دارد، مثلاً "مجذور سرعت تنفس خاک" ممکن است در ترکیب با "طول بلال" یا "مجذور میانگین شاخص کلروفیل" یک اثر منفی ایجاد کرده باشد، که در این نمونه خاص غالب شده باشد. پ- انباشت تأثیرات: واتر فال پلات، تأثیرات را به صورت انباشتی نشان می‌دهد. اگر ویژگی‌های قبلی (مثل "طول بلال") پیش‌بینی را زیاد بالا برده باشند، اثر منفی "مجذور سرعت تنفس خاک" می‌تواند یک تعدیل‌کننده باشد تا پیش‌بینی به واقعیت نزدیک‌تر شود. رنگ خاکستری (۰/۵۶۴-) نشان می‌دهد که این ویژگی به طور کلی کاهش‌دهنده است، ولی مقدار ۰/۸- در این نمونه خاص نشان می‌دهد که اثر آن اینجا شدیدتر است. گزارش شده است که تنفس خاک تحت تأثیر کاربرد نهاده‌های شیمیایی تشدید می‌شود و همین نکته مقایسه و تحلیل نهایی آن را با سیستم‌های زراعی کم‌نهاده با مشکل مواجه می‌سازد. زیرا در سیستم‌های کم‌نهاده، محتوای بالای ماده آلی خاک سبب گسترش جمعیت ریزجانداران خاک می‌شود که به نوبه خود، تشدید تنفس خاک را به دنبال دارد. تفکیک تنفس ناشی از جمعیت ریزجانداران خاک (مثبت) از تنفس تشدیدشده ریشه به سبب کاربرد نهاده‌های شیمیایی (منفی)، همچنان به عنوان یک موضوع چالش برانگیز باقی مانده است.

شکل ۹، تغییرات سه‌بعدی تأثیر تجمعی ویژگی‌ها را بر پیش‌بینی

عملکرد دانه نشان می‌دهد و زاویه دید متفاوتی نسبت به شکل دوبعدی ارائه می‌کند. محور سوم، ارتباط بین ویژگی‌ها و شدت اثر آن‌ها را به صورت بصری برجسته ساخته و به درک بهتر تعاملات

1- Counterfactual analysis

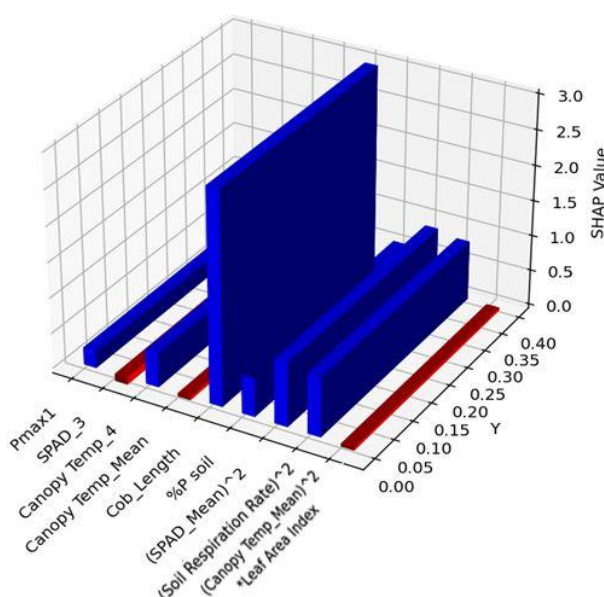
2- Performance

این موضوع می‌تواند به شرایط خاک (مثلاً کمبود آب در خاک‌های کم‌عمق، بافت خاک، ساختمان ضعیف خاک و غیره) اشاره کند که سیستم ریشه وسیع‌تر در این نمونه خاص مفید نبوده‌اند.

باشد که در این شرایط خاص (مثلاً نور شدید یا دمای بالا)، فتوسنتز بیش‌ازحد ممکن است به گیاه تنش وارد کرده و عملکرد را کمی کاهش داده باشد.

- Specific Root Length (-0.030): طول ویژه ریشه، با تغییر ۱۰ درصد انحراف معیار، اثر منفی ۰/۰۳۰- تن در هکتار دارد.

SHAP Waterfall Surface Plot



شکل ۹- نمودار آبشاری سه بُعدی ویژگی‌های انتخاب‌شده توسط الگوریتم تلفیقی NSGA-II و XGBoost

Fig. 9- Three-dimensional waterfall plot of selected features by the integrated NSGA-II and XGBoost algorithm

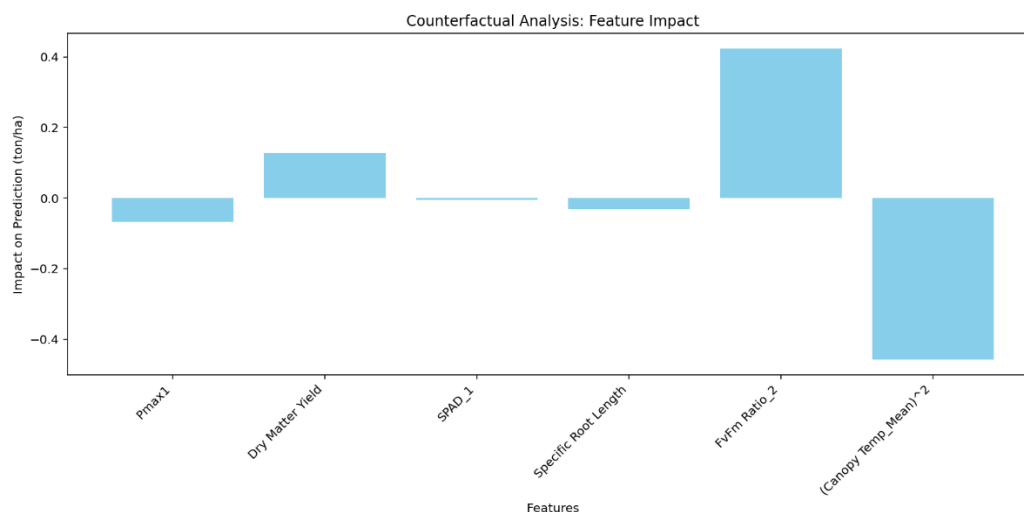
در نظر گرفته، و اثرات منفی ممکن است که به‌دلیل خروج از محدوده بهینه ویژگی‌ها باشد.

- نمونه خاص: این نتایج برای یک نمونه خاص و با فرض تغییر ۱۰ درصد انحراف معیار هر ویژگی صدق می‌کند و ممکن است با میانگین کل دیتاست متفاوت باشد.

به‌طورکلی، این نمودار نشان می‌دهد که ویژگی‌های مرتبط با دمای تاج‌پوشش و نسبت فلورسانس کلروفیل برگ، بیشترین تأثیر را بر پیش‌بینی مدل دارند. این اطلاعات می‌تواند به بهبود مدیریت زراعی به‌منظور دستیابی به عملکرد بیشتر از طریق شناسایی متغیرهای کلیدی و بهبود مدل کمک کند.

- SPAD_1 (-0.005): این ویژگی، با تغییر ۱۰ درصد انحراف معیار، اثر منفی بسیار کم (۰/۰۰۵-) دارد و نشان می‌دهد که شاخص کلروفیل SPAD_1 در این نمونه خاص تأثیر قابل توجهی بر عملکرد دانه نداشته است.
- تحلیل عمیق‌تر سناریوی فرضی حاکی از اهمیت موارد زیر است: تعادل اثرات: مجموع اثرات مثبت (۰/۱۲۸+۰/۴۲۴) و منفی (۰/۵۵۲-۰/۵۵۹-۰/۴۵۷-۰/۰۶۷-۰/۰۳۰-۰/۰۰۵) نشان می‌دهد که مدل با تعدیل این ویژگی‌ها، پیش‌بینی را به یک مقدار متعادل رسانده است. مقدار پایه که در نمودار مشخص است، نقطه شروع پیش‌بینی است که با این تأثیرات تنظیم می‌شود.

- رابطه غیرخطی: حضور مجذورهای مثل Canopy Temp_Mean^2 نشان می‌دهد که مدل روابط غیرخطی را



شکل ۱۰- نمودار کانتر فکچوآل ویژگی‌های انتخاب‌شده توسط الگوریتم تلفیقی NSGA-II و XGBoost
Fig. 10- Counterfactual plot of selected features by the integrated NSGA-II and XGBoost algorithm

پیش‌بینی دارد. به عبارت دیگر، افزایش طول بلال می‌تواند منجر به افزایش پیش‌بینی شود.

۲. $(SPAD_Mean)^2$: این ویژگی نیز تأثیر مثبت و قوی بر پیش‌بینی دارد. یعنی افزایش مجذور میانگین شاخص کلروفیل برگ می‌تواند پیش‌بینی را بهبود ببخشد.

۳. Canopy Temp_4: این ویژگی، تأثیر منفی متوسطی بر پیش‌بینی دارد. به این معنی که افزایش دمای تاج‌پوشش در زمان پر شدن دانه می‌تواند منجر به کاهش پیش‌بینی شود.

۴. SPAD_3: این ویژگی، تأثیر مثبت قوی بر پیش‌بینی دارد. یعنی افزایش شاخص کلروفیل برگ در زمان شیر دانه می‌تواند پیش‌بینی را بهبود ببخشد.

۵. $(Soil\ Respiration\ Rate)^2$: این ویژگی، تأثیر منفی متوسطی بر پیش‌بینی دارد. به این معنی که افزایش مجذور سرعت تنفس خاک می‌تواند منجر به کاهش پیش‌بینی شود.

۶. %P soil: این ویژگی، تأثیر منفی متوسطی بر پیش‌بینی دارد. یعنی افزایش درصد فسفر خاک می‌تواند پیش‌بینی را کاهش دهد.

۷. Pmax1: این ویژگی، تأثیر منفی ضعیفی بر پیش‌بینی دارد.

۸. Canopy Temp_Mean: این ویژگی، تأثیر منفی متوسطی بر پیش‌بینی دارد. به این معنی که افزایش میانگین دمای تاج‌پوشش می‌تواند منجر به کاهش پیش‌بینی شود.

برای بهبود پیش‌بینی عملکرد دانه سویا در جنوب فرانسه، مدل جایگزینی مبتنی بر شبیه‌سازی‌های^۱ STICS، تکنیک‌های انتخاب ویژگی (فیلتر، رپر، تعبیه‌شده)^۲ و الگوریتم‌های رگرسیون (LR، SVR، RF، BPNN، LASSO و M5) توسعه یافت. مدل STICS با وجود دقت در پیش‌بینی زیست‌توده، در عملکرد دانه ضعیف عمل کرد. روش رپر با مدل‌های^۳ SVR $R^2=0.71$ ، ۶ متغیر و LR $R^2=0.69$ ، ۱۴ متغیر بهترین نتایج را داشت و پیش‌بینی‌ها را نسبت به STICS ($R^2=0.04$) به‌طور قابل توجهی بهبود بخشید (Corrales et al., 2022).

تحلیل LIME^۳

شکل ۱۱ نشان می‌دهد که هر یک از ویژگی‌ها به‌طور میانگین چه میزان بر پیش‌بینی نهایی مدل برای یک نمونه تست تأثیر گذاشته‌اند. ویژگی‌ها براساس مقدار وزن^۴ از بیشترین تأثیر منفی به مثبت مرتب شده‌اند، که از خروجی لایم برای داده‌های تست به دست آمده است.

۱. Cob_Length: این ویژگی، بیشترین تأثیر مثبت را بر

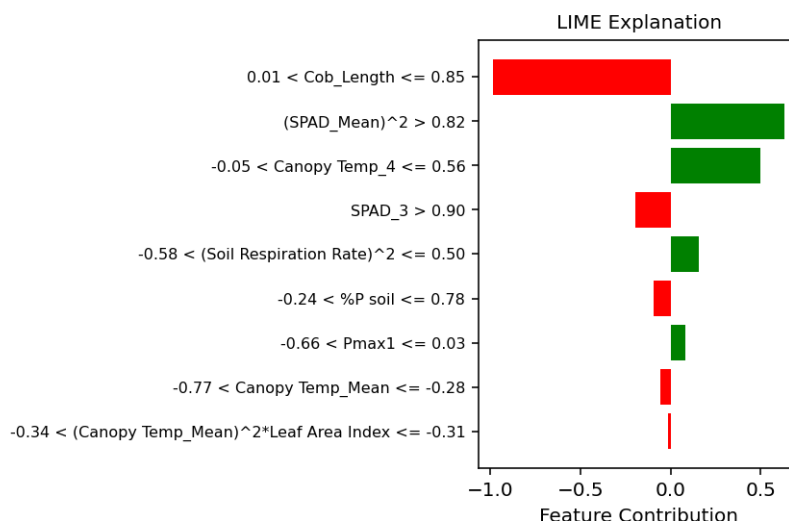
- 1- Multidisciplinary Simulator for Standard Crops
- 2- Filter, wrapper and embedded
- 3- Local Interpretable Model-agnostic Explanations
- 4- Weight

۹. $(\text{Canopy Temp_Mean})^2 \times \text{Leaf Area Index}$: این

ویژگی تعاملی، تأثیر منفی متوسطی بر پیش‌بینی دارد.

در مجموع، این نمودار لایم نشان می‌دهد که ویژگی‌های مرتبط

با طول بلال، شاخص کلروفیل برگ و دمای تاج‌پوشش، بیشترین تأثیر را بر پیش‌بینی مدل دارند. این اطلاعات می‌تواند به شناسایی متغیرهای کلیدی و بهبود عملکرد گیاه زراعی کمک کند.



شکل ۱۱- ویژگی‌های منتخب استاندارد شده رانشگر تشخیص داده شده توسط الگوریتم تلفیقی NSGA-II و XGBoost در پیش‌بینی عملکرد دانه ذرت تحت تأثیر کودهای زیستی

Fig. 11- Standardized driver features identified by the integrated NSGA-II and XGBoost algorithm for predicting maize grain yield under biofertilizer influence

تحلیل وابستگی جزئی^۱

شکل ۱۲ که از کاربردی ترین خروجی‌های شیپ محسوب

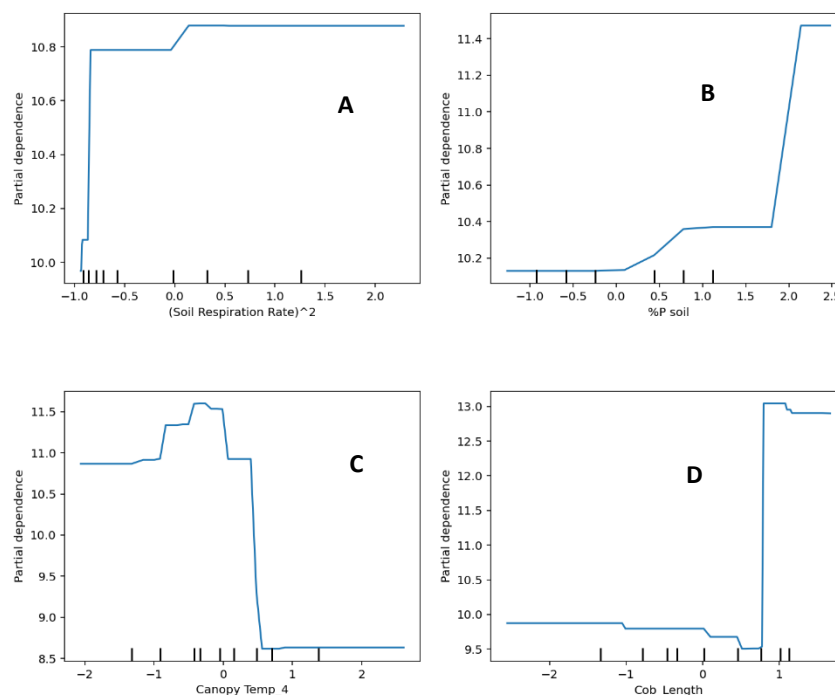
می‌شود، نمودار وابستگی جزئی یا پی دی پی (پارشیال دپندنس پلات) نام دارد که اثر مستقیم و جداگانه هر ویژگی بر عملکرد گندم را نمایش می‌دهد، درحالی‌که سایر ویژگی‌ها ثابت نگه داشته شده‌اند. در ساختار این نمودار، روی محور افقی، مقدار ویژگی (مثلاً مجذور میزان تنفس خاک، درصد فسفر خاک، دمای تاج‌پوشش در مرحله پر شدن دانه و طول بلال)، روی محور عمودی، مقدار پیش‌بینی شده عملکرد دانه (توسط مدل) قرار می‌گیرند. خطوط نمودار، منحنی پاسخ مدل نسبت به تغییرات هر ویژگی را نشان می‌دهد. در شکل ۱۲، با افزایش مجذور میزان تنفس خاک از ۱- تا حدود ۰/۳۵، عملکرد دانه حدود ۸۵۰ کیلوگرم در هکتار افزایش می‌یابد و به حدود ۱۱ تن در هکتار می‌رسد، و پس از آن ثابت ماند و به حالت تقریباً اشباع درآمد (یعنی افزایش بیشتر این ویژگی هیچ تأثیری بر عملکرد ندارد).

افزایش درصد فسفر خاک (شکل ۱۲ب) از حدود ۰/۱۱ تا ۲، مقدار عملکرد دانه را از ۱۰/۲ تن در هکتار به ۱۱/۴ تن در هکتار افزایش داد که حاکی از نقش پررنگ این ویژگی بر عملکرد دانه است. افزایش دمای تاج‌پوشش در مرحله پر شدن دانه (شکل ۱۲ج) از ۲- تا حدود ۰/۵ سبب نوسان عملکرد دانه در دامنه ۱۰/۹ تا ۱۱/۵ تن در هکتار شد. بیشتر شدن دمای تاج‌پوشش از حدود ۰/۵ منجر به سقوط ناگهانی عملکرد به حدود ۸/۶ تن در هکتار شد و تا رسیدن دمای تاج‌پوشش به ۲/۵ در همین محدوده باقی ماند. افزایش دما به‌ویژه در مراحل پایانی دوره رشد گیاه سبب وارد آمدن تنش به گیاه شده و همزمان تنفس را تشدید می‌کند و از این طریق، عملکرد نهایی گیاه را تحت تأثیر منفی قرار می‌دهد. افزایش تعداد بلال (شکل ۱۲د) از ۲- به حدود ۱ سبب افزایش سه تنی در عملکرد دانه شد و در مقادیر بیشتر از یک تقریباً ثابت ماند. ارقام ذرت دانه‌ای برای تولید یک یا دو بلال اصلاح شده‌اند، بنابراین این نتایج با مبانی اصلاح نباتات و اکوفیزیولوژی همخوانی دارد.

این نمودارها به کارشناسان زراعت کمک می‌کنند تا درک بهتری

مدل، بهینه‌سازی کشت، انتخاب نهاده‌ها و مدیریت مزرعه در سال‌های آینده بهره ببرند.

از چگونگی تأثیر هر ویژگی بر روی متغیر هدف حاصل کنند و دلیل تصمیم‌گیری مدل‌ها را بهتر درک نمایند و از آن برای بهبود پیش‌بینی



شکل ۱۲- نمودار شیب وابستگی جزئی (پی دی پی) برای (A) مجذور سرعت تنفس خاک، (B) درصد فسفر خاک، (C) دمای تاج‌پوشش در مرحله خمیری دانه، (D) طول بلال، در الگوریتم تلفیقی NSGA-II و XGBoost در پیش‌بینی عملکرد دانه ذرت تحت تأثیر کودهای زیستی

Fig. 12- SHAP partial dependence plots for (a) squared soil respiration rate, (b) soil phosphorus percentage, (c) canopy temperature at dough stage, (d) ear length, using the integrated NSGA-II and XGBoost algorithm for predicting maize grain yield under biofertilizer influence

نتیجه‌گیری

یادگیری ماشین در بهینه‌سازی (مدل‌های) پیش‌بینی کشاورزی است که به‌نوبه خود می‌تواند به مدیریت کارآمد و دقیق زراعی، به‌ویژه در شرایط تغییر اقلیم و بحران‌های خشکسالی زمانه حاضر کمک کند. به‌طور کلی، با در نظر داشتن اثرات کودهای زیستی بر ویژگی‌های گیاهی و خاکی و در ادامه، مدیریت مسیرهای اکوفیزیولوژیک مرتبط با این ویژگی‌ها شامل دمای تاج‌پوشش، طول ویژه ریشه، محتوای کلروفیل برگ، محتوای فسفر خاک، سرعت تنفس خاک، شاخص سطح برگ و سرعت فتوسنتز، می‌توان نسبت به دستیابی به عملکرد بهینه با مصرف حداقل نهاده‌ها (زیستی) اقدام نمود.

تلفیق NSGA-II برای انتخاب هدفمند نه ویژگی کلیدی و XGBoost برای پیش‌بینی، با کاهش ابعاد داده و بیش‌برازش، به ضریب تبیین ۰/۶۳۶ دست یافت، که از مدل‌های بررسی‌شده قبلی مانند ANFIS ($R^2=0.555$) و ANN ($R^2=0.518$) بهتر بود. انتخاب هدفمند ویژگی‌ها، بیش‌برازش را کاهش داد و منجر به برجسته شدن نقش ویژگی‌های برهم‌کنشی از جمله مجذور دمای تاج‌پوشش در مرحله کاکل‌دهی در شاخص سطح برگ شد. نتایج این پژوهش نشان‌دهنده کارایی بالای این رهیافت در تلفیق دو الگوریتم

References

1. Amin, S., Hesam, M., Jabbari, A., & Abdolhosseini, M. (2023). Multi-objective optimization of cropping patterns with emphasis on economic benefits and ensuring food supply chain security (A case study: Gonbad-e Kavus - Golestan Dam). *Journal of Water and Soil Conservation*, 30(2), 119-139.

- <https://doi.org/10.22069/jwsc.2023.21203.3637>
2. Baio, F.H.R., Santana, D.C., Teodoro, L.P.R., Oliveira, I.C.D., Gava, R., de Oliveira, J.L.G., Silva Junior, C.A.D., Teodoro, P.E., & Shiratsuchi, L.S. (2023). Maize yield prediction with machine learning, spectral variables and irrigation management. *Remote Sensing*, 15(1), 79. <https://doi.org/10.3390/rs15010079>
3. Barikloo, A., alamdari, P., Moravej, K., & Servati, M. (2017). Prediction of irrigated wheat yield by using hybrid algorithm methods of artificial neural networks and genetic algorithm. *Journal of Water and Soil*, 31(3), 715-726. <https://doi.org/10.22067/jsw.v31i3.56158>
4. Bergstra, J., & Bengio, Y. (2012). Random search for hyper-parameter optimization. *Journal of Machine Learning Research*, 13(10), 281-305.
5. Bhupenchandra, I., Chongtham, S. K., Devi, A. G., Dutta, P., Sahoo, M. R., Mohanty, S., Kumar, S., Choudhary, A. K., Devi, E. L., Sinyorita, S., Devi, S. H., Mahanta, M., Kumari, A., Devi, H. L., Josmee, R. K., Pusparani, A., Pathaw, N., Gupta, S., Meena, M., ... Swapnil, P. (2024). Unlocking the potential of arbuscular mycorrhizal fungi: Exploring role in plant growth promotion, nutrient uptake mechanisms, biotic stress alleviation, and sustaining agricultural production systems. *Journal of Plant Growth Regulators*. 44, 6802–6840. <https://doi.org/10.1007/s00344-024-11467-9>
6. Bracho-Mujica, G., Rötter, R. P., Haakana, M., Palosuo, T., Fronzek, S., Asseng, S., Yi, C., Ewert, F., Gaiser, T., Kassie, B., Paff, K., Rezaei, E. E., Rodríguez, A., Ruiz-Ramos, M., Srivastava, A. K., Stratonovitch, P., Tao, F., & Semenov, M. A. (2024). Effects of changes in climatic means, variability, and agro-technologies on future wheat and maize yields at 10 sites across the globe. *Agricultural and Forest Meteorology*, 346, 109887. <https://doi.org/10.1016/j.agrformet.2024.109887>
7. Brar, B., Bala, K., Saharan, B. S., Sadh, P. K., & Duhan, J. S. (2024). Bio-boosting agriculture: Harnessing the potential of fungi-bacteria-plant synergies for crop improvement. *Discover Plants*, 1, 21 <https://doi.org/10.1007/s44372-024-00023-0>
8. Cheng, E., Zhang, B., Peng, D., Zhong, L., Yu, L., Liu, Y., Xiao, C., Li, C., Li, X., Chen, Y., Ye, H., Wang, H., Yu, R., Hu, J., & Yang, S. (2022). Wheat yield estimation using remote sensing data based on machine learning approaches. *Frontiers in Plant Science*, 13, 2022. <https://doi.org/10.3389/fpls.2022.1090970>
9. Cohen, J. (1988). *Statistical Power Analysis for the Behavioral Sciences*, 2nd Ed. New York: Routledge.
10. Corrales, C., Schoving, C., Raynal, H., et al. (2022). Rogate model based on feature selection techniques and regression learners to improve soybean yield prediction in southern France. *Computers and Electronics in Agriculture*, 192, 106578. <https://doi.org/10.1016/j.compag.2021.106578>
11. Deb, K., Pratap, A., Agarwal, S., & Meyarivan, T. (2002). A Fast and elitist multiobjective genetic algorithm: NSGA-II. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 6(2), 182-197. <https://doi.org/10.1109/4235.996017>
12. Du, J., Liu, R., Cheng, D., Wang, X., Zhang, T., & Yu, F. (2024). Enhancing NSGA-II algorithm through hybrid strategy for optimizing maize water and fertilizer irrigation simulation. *Symmetry*, 16(8), 1062. <https://doi.org/10.3390/sym16081062>
13. Fashoto, S., Mbunge, E., Opeyemi, O.G., & Van Den Burg, J. (2021). Implementation of machine learning for predicting maize crop yields using multiple linear regression and backward elimination. *Malaysian Journal of Computing*, 6, 679-697.
14. Hastie, T., Tibshirani, R., & Friedman, J. (2009). *The Elements of Statistical Learning*. Springer.
15. Kakavand, S., Mazandarani Zadeh, H., & Ramezani Etedali, H. (2023). Optimal redistribution of water among agricultural sector operators using a fuzzy multi-objective optimization model. *Irrigation Sciences and Engineering*, 46(1), 77-93. <https://doi.org/10.22055/jise.2021.37122.1966>
16. Khoso, M.A., Wagan, S., Alam, I., Hussain, A., Ali, Q., Saha, S., Poudel, T.R., Manghwar, H., & Liu, F. (2024). Impact of plant growth-promoting rhizobacteria (PGPR) on plant nutrition and root characteristics: Current perspective. *Plant Stress*, 11, 100341. <https://doi.org/10.1016/j.stress.2023.100341>.
17. Kuhn, M., & Johnson, K. (2013). *Applied Predictive Modeling*. Springer Science & Business Media. 600 p. <https://doi.org/10.1007/978-1-4614-6849-3>
18. Ingole, V. S., Kshirsagar, U. A., Singh, V., Yadav, M. V., Krishna, B., & Kumar, R. (2025). A hybrid model for soybean yield prediction integrating convolutional neural networks, recurrent neural networks, and graph convolutional networks. *Computation*, 13(1), 4. <https://doi.org/10.3390/computation13010004>
19. Lyu, J., Jiang, Y., Xu, C., Liu, Y., Su, Z., Liu, J., & He, J. (2022). Multi-objective winter wheat irrigation

- strategies optimization based on coupling AquaCrop-OSPy and NSGA-III: A case study in Yangling, China. *Science of the Total Environment*, 843, 157104. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2022.157104>
20. Mitra, D., Panneerselvam, P., Senapati, A., Chidambaranathan, P., Nayak, A.K., & Mohapatra, P.K.D. (2023). Arbuscular mycorrhizal fungi response on soil phosphorus utilization and enzymes activities in aerobic rice under phosphorus-deficient conditions. *Life (Basel)*, 13(5), 1118. <https://doi.org/10.3390/life13051118>
21. Moore, D.S., Notz, W.I., & Flinger, M.A. (2013). The Basic Practice of Statistics (6th Ed.). New York, NY: W. H. Freeman and Company. p. 138.
22. Mukhopadhyay, A., Maulik, U., Bandyopadhyay, S., & Coello, C.A.C. (2014). A survey of multi-objective evolutionary algorithms for data mining. *Applied Soft Computing*, 23, 184-199. <https://doi.org/10.1109/TEVC.2013.2290086>
23. Probst, P., Boulesteix, A.L., & Bischl, B. (2019). Tunability: Importance of hyperparameters of machine learning algorithms. *Journal of Machine Learning Research*, 20(53), 1-32.
24. Sahabifard, F. Z., Shahnazari, A., & Sadeghi, S. (2024). Increasing the productivity of agricultural water under the optimization scenario of water resource allocation using the algorithm (NSGA-II). *Journal of Water and Irrigation Management*, 14(2), 405-419. DOI: <https://doi.org/10.22059/jwim.2024.369097.1122>
25. Salvador, G.L.O., Araju, F.F., Pereira, A.P.A., Bonofacio, A., & Araujo, A.S.F. (2022). Rhizobacteria and arbuscular mycorrhizal fungus presented distinct and specific effects on soybean growth when inoculated with organic compost. *Rhizosphere*, 22, 100513. <https://doi.org/10.1016/j.rhisph.2022.100513>
26. Shayegan, M., Alimohammadi, A., & Mansourian, A. (2011). Multi objective optimization of land use assignment using NSGA II. *Remote Sensing and GIS in IRAN*, 4(2), 1-18. Available Online at: https://scj.sbu.ac.ir/article_94927.html
27. Slafer, G. A., Foulkes, M. J., Reynolds, M. P., Murchie, E. H., Carmo-Silva, E., Flavell, R., Gwyn, J., Sawkins, M., & Griffiths, S. (2023). A 'wiring diagram' for sink strength traits impacting wheat yield potential. *Journal of Experimental Botany*, 74(1), 40-71. <https://doi.org/10.1093/jxb/erac410>
28. Tarbiat Modares University. (2016). Optimization of Water Resource Allocation for Agricultural Use Using Fuzzy Data Envelopment Analysis (FDEA) and NSGA-II Genetic Algorithm (Case Study: Varamin Plain). Available Online at: <https://civilica.com/doc/1283657/>
29. Taiz, L., E. Zeiger, I. M. Moller, et al. (2018). Fundamentals of Plant Physiology. New York, USA: Oxford University. Press. ISBN 978160535790
30. Xie, X., Wu, T., Zhu, M., Jiang, G., Xu, Y., Wang, X., & Pu, L. (2021). Comparison of random forest and multiple linear regression models for estimation of soil extracellular enzyme activities in agricultural reclaimed coastal saline land. *Ecological Indicators*, 120, 106925. <https://doi.org/10.1016/j.ecolind.2020.106925>
31. Yang, C., Liu, C., & Ma, X (2025). Multi-objective irrigation strategies and production prediction for winter wheat in China in future dry years using CERES-wheat model and non-dominated sorting genetic algorithm II . *Computers and Electronics in Agriculture*, 230, 109888. <https://doi.org/10.1016/j.compag.2024.109888>
32. Yang, C., Liu, C., Q.Z., Wang, S., Xing, X., & Ma, X. (2025). Multi-objective irrigation strategies and production prediction for winter wheat in China in future dry years using CERES-wheat model and non-dominated sorting genetic algorithm II. *Computers and Electronics in Agriculture*, 230, 109888. <https://doi.org/10.1016/j.compag.2024.109888>