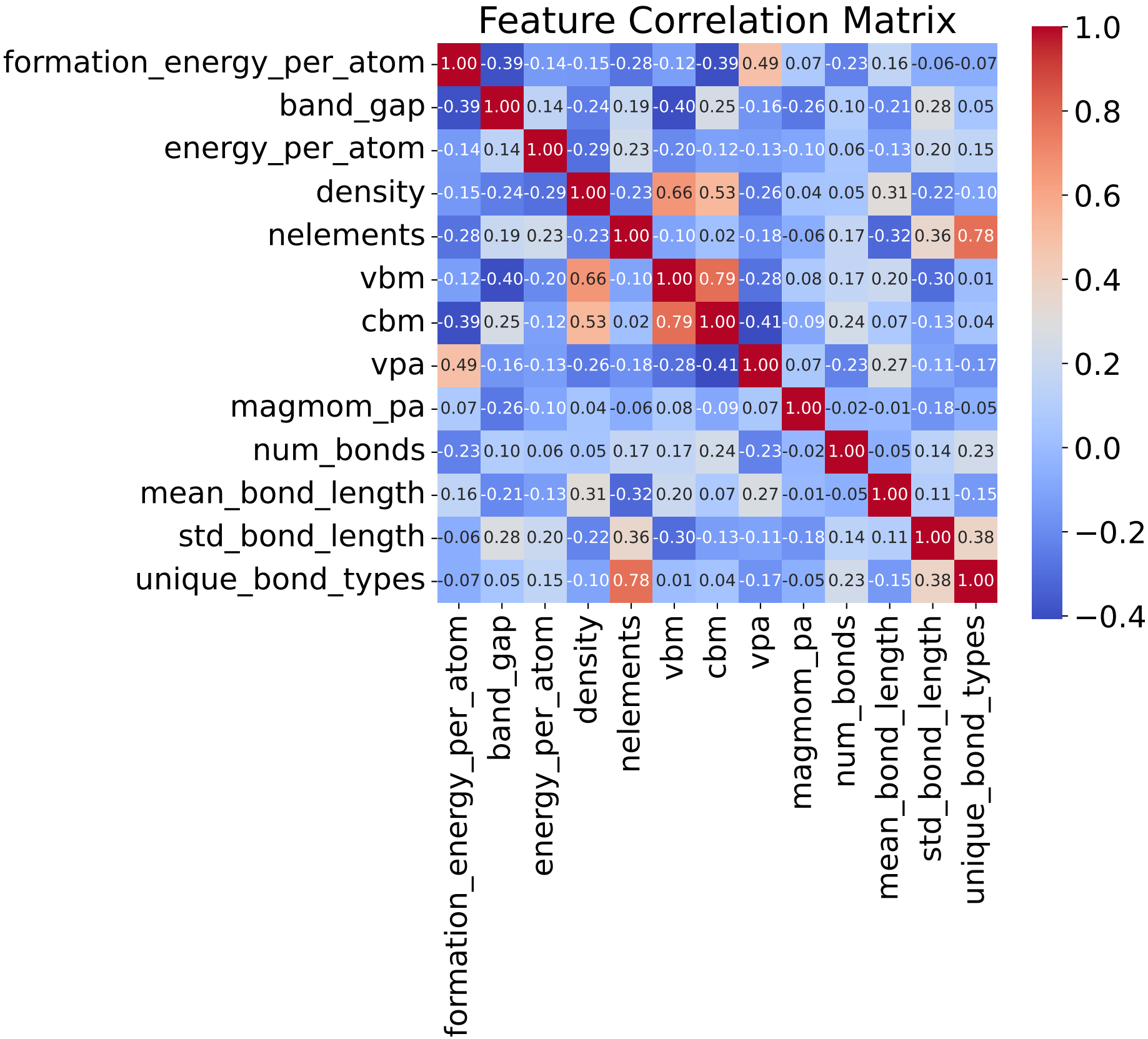
Feature Correlation Matrix
formation_energy_per_atom 1.00 -0.39 -0.14 -0.15 -0.28 -0.12 -0.39 0.49 0.07 -0.23 0.16 -0.06 -0.07
band_gap -0.39 1.00 0.14 -0.24 0.19 -0.40 0.25 -0.16 -0.26 0.10 -0.21 0.28 0.05
energy_per_atom -0.14 0.14 1.00 -0.29 0.23 -0.20 -0.12 -0.13 -0.10 0.06 -0.13 0.20 0.15
density -0.15 -0.24 -0.29 1.00 -0.23 0.66 0.53 -0.26 0.04 0.05 0.31 -0.22 -0.10
nelements -0.28 0.19 0.23 -0.23 1.00 -0.10 0.02 -0.18 -0.06 0.17 -0.32 0.36 0.78
vbm -0.12 -0.40 -0.20 0.66 -0.10 1.00 0.79 -0.28 0.08 0.17 0.20 -0.30 0.01
cbm -0.39 0.25 -0.12 0.53 0.02 0.79 1.00 -0.41 -0.09 0.24 0.07 -0.13 0.04
vpa 0.49 -0.16 -0.13 -0.26 -0.18 -0.28 -0.41 1.00 0.07 -0.23 0.27 -0.11 -0.17
magmom_pa 0.07 -0.26 -0.10 0.04 -0.06 0.08 -0.09 0.07 1.00 -0.02 -0.01 -0.18 -0.05
num_bonds -0.23 0.10 0.06 0.05 0.17 0.17 0.24 -0.23 -0.02 1.00 -0.05 0.14 0.23
mean_bond_length 0.16 -0.21 -0.13 0.31 -0.32 0.20 0.07 0.27 -0.01 -0.05 1.00 0.11 -0.15
std_bond_length -0.06 0.28 0.20 -0.22 0.36 -0.30 -0.13 -0.11 -0.18 0.14 0.11 1.00 0.38
unique_bond_types -0.07 0.05 0.15 -0.10 0.78 0.01 0.04 -0.17 -0.05 0.23 -0.15 0.38 1.00
formation_energy_per_atom
band_gap
energy_per_atom
density
nelements
vbm
cbm
vpa
magmom_pa
num_bonds
mean_bond_length
std_bond_length
unique_bond_types
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
−0.2
−0.4