第 54 卷第 3 期
2026 年 3 月

硅 酸 盐 学 报
JOURNAL OF THE CHINESE CERAMIC SOCIETY

Vol. 54，No. 3
March，2026

http://jccsoc.cbpt.cnki.net

DOI：10.14062/j.issn.0454-5648.20250378

基于混合反向传播神经网络的双输出预测模型构建

王琰帅，万承鹏，董必钦，王鹏辉

(深圳大学土木与交通工程学院，广东省滨海土木工程耐久性重点实验室，深圳市低碳建筑材料与技术重点实验室，广东 深圳 518060)

摘　要：实现碱激发混凝土多种性能的同步准确预测是其广泛应用的重要条件。对此，提出了一种基于混合反向传播神经网络的双输出模型构建方法，以碱激发混凝土的 28 d 抗压强度和坍落度双参数预测为例进行阐述。通过元启发式优化算法(包括蚁群优化算法、遗传算法、灰狼优化算法和鲸鱼优化算法)对神经网络模型的初始权重和阈值进行优化，构建了包含前驱体成分、激发剂成分、骨料、养护条件和外加剂等 11 个输入变量的双输出模型。结果表明：4 种算法优化后的混合神经网络模型在训练过程中均能实现对碱激发混凝土双性能的高精度预测。其中，蚁群优化–神经网络(ACO–BPNN)模型在性能评估时表现出最高预测精度，抗压强度和坍落度的 R^2 分别达到 0.932 和 0.929。特征重要性分析显示，矿渣粉含量和粗骨料与细骨料质量比分别是对抗压强度和坍落度影响最大的因素。基于主成分分析的综合得分计算进一步从数据库中筛选出兼顾高抗压强度和高坍落度的配合比。本工作为双输出模型构建提供了新思路，尤其适用于碱激发混凝土的多性能同步预测场景。

关键词：双输出模型；神经网络；碱激发混凝土；抗压强度；坍落度
中图分类号：TP183；TU528　　**文献标志码**：A　　**文章编号**：0454–5648(2026)03–0894–15
网络出版时间：2026–02–10



混凝土是一种典型的多相复合材料，其性能与原材料品质、配合比设计、养护条件及外加剂种类等因素密切相关。当前混凝土性能数据主要通过实验测试或数值模拟手段获得，然而该方法不仅需耗费大量人力、物力和计算资源，且所得结果存在局限性。特别是在碱激发混凝土(AAC)领域，由于原材料化学成分的多样性和微观作用机制的复杂性，其应用尚缺乏统一标准[1]。机器学习(ML)作为一种数据驱动手段，可通过构建高精度、强鲁棒性的预测模型，从数据维度以较低成本推动该标准的制定。鉴于工程实践中混凝土材料常需耦合 2 种或多种性能指标协同服役，本工作基于完整数据库构建涵盖 AAC 硬化前后性能(坍落度、抗压强度)的集成预测模型开展研究。

ML 是人工智能技术的一个重要分支，其主要通过设置非线性激活函数(如人工神经网络)、构建复杂拓扑结构(如决策树)及采用非线性映射方法(如支持向量机)等[2]手段，有效识别材料性能与组分间的非线性关系。在混凝土材料领域，ML已广泛应用于自收缩[3]、流动度[4, 5]、抗压强度[6–9]及碳排放[10]等性能指标的预测研究。然而，既有研究多聚焦于单一输出变量的模型构建，其所设计的配合比可能无法满足实际工程应用的多性能需求。因此，亟需建立一个高精度、强鲁棒性的多输出预测模型。

反向传播神经网络(BPNN)作为 ML 方法之一，可通过在输出层设置多个神经元实现多目标性能的协同预测。然而，针对 AAC 这种异质材料，BPNN 存在超参数敏感、收敛速度较低、易陷入局部极值等问题，最终导致模型训练失效。为此，学者根据生物群体捕食与遗传行为提出元启发式优化算法，如蚁群优化算法(ACO)[11, 12]、遗传算法(GA)[13, 14]、鲸鱼优化算法(WOA)[15, 16]、灰狼优化算法(GWO)[17, 18]等，凭借其强大的全局优化能力和搜索策略多样性，可发现更优的 BPNN 超参数组合，以优化模型性能。但经上述算法优化的多输出模型预测精度仍需深入研究，需进一步验证模型是否具备足够鲁棒性，以应对数据噪声与异常值的影响。

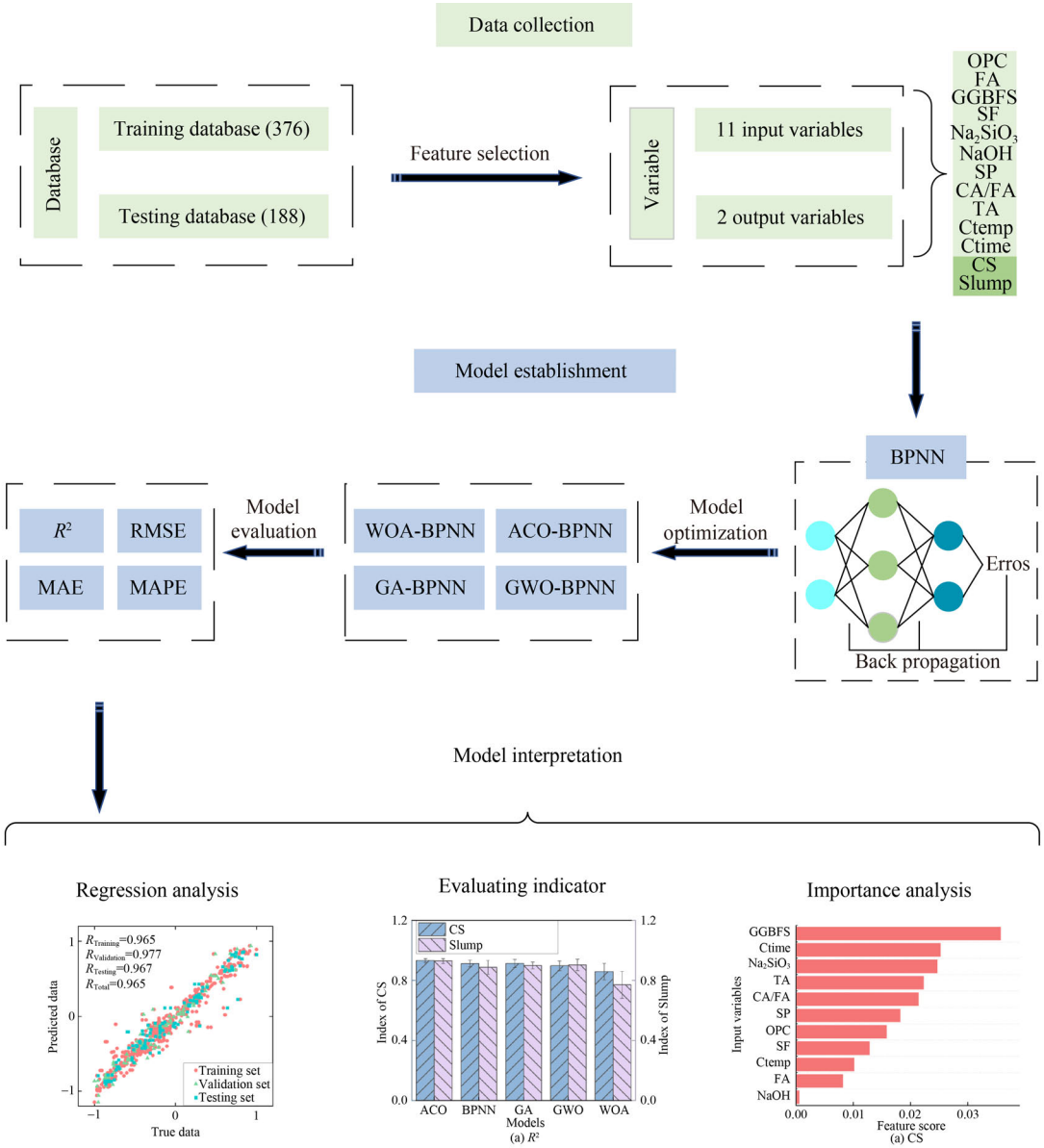
收稿日期：2025–05–12。　修订日期：2025–06–06。
基金项目：国家重点研发计划(2022YFB2602600)；广东省自然科学基金(粤港科技合作资助计划，2023A0505010020)；深圳市科技计划(ZDSYS20220606100406016)。
第一作者：王琰帅(1988—)，男，博士，教授。
通信作者：王鹏辉(1991—)，男，博士，副研究员。

Received data: 2025–05–12.　**Revised data:** 2025–06–06.
First author: WANG Yanshuai (1988–), male, Ph.D., Professor.
E-mail: yswang@szu.edu.cn
Correspondent author: WANG Penghui (1991–), male, Ph.D., Associate Professor.
E-mail: 356984639@qq.com

基于上述背景，本工作以普通硅酸盐水泥(OPC)、粉煤灰(FA)、矿渣粉(GGBFS)、硅粉(SF)、硅酸钠(Na_2SiO_3)、氢氧化钠(NaOH)、减水剂(SP)、粗骨料与细骨料质量比(CA/FA)、总骨料含量(TA)、养护温度(Ctemp)及热养护时间(Ctime)为输入变量，借助 ACO、GA、WOA、GWO 等算法的超参数优化策略，构建了拓扑结构为 11-21-2 的双输出神经网络模型，实现了碱激发混凝土新拌状态性能(坍落度，Slump)与硬化后力学性能(28 d 抗压强度，CS)的协同预测，为材料实验设计与工程应用提供科学化、标准化的理论指导。

1　数据库建立

本工作遵循数据采集、变量遴选、数据预处理、模型理论与架构建立、模型性能评估测试及模型可解释性分析的系统流程(见图 1)。基于所要预测的 28 d 抗压强度和坍落度，从国内外公开发表的 18 篇文献[19–36]中搜集同时包含上述 2 项性能测试的 564 组配合比数据。为了检验模型的泛化能力，将数据划分为模型训练数据库(376 组数据)与完全独立的测试数据库(188 组数据)，分别用于模型训练及其泛化能力检验。



Note: OPC is ordinary Portland cement; FA is fly ash; GGBFS is ground granulated blast furnace slag; SF is superplasticizer; SF is silica fume; CA/FA is coarse aggregate/fine aggregate; TA is total aggregate; Ctemp is curing temperature; Ctime is curing time, which refers to the oven curing time.; CS is 28 d compressive strength; R^2 is the coefficient of determination; MAE is the mean absolute error; MAPE is the mean absolute percentage error; RMSE is the root mean square error.

图 1　研究流程图

Fig. 1　Flow chart of the research

1.1 输入变量选取

研究表明，碱激发混凝土的性能主要受前驱体、激发剂、骨料及养护条件的影响[37–39]。因此，从这 4 个部分选取了共 11 个因素作为输入变量。前驱体部分，为了扩大模型的适用范围，选取 4 种常见碱激发材料作为前驱体输入变量，分别是普通硅酸盐水泥、粉煤灰、磨细高炉矿渣及硅粉。激发剂部分，由于当前大量研究主要采用氢氧化钠与硅酸钠复合溶液作为激发剂。因此，选取其作为激发剂输入变量。骨料部分，选择 CA/FA 及 TA 作为输入变量。养护条件部分，已有大量研究探讨不同养护方式(热养护、湿养护、常温养护等)对碱激发材料性能的影响：粉煤灰基碱激发材料需通过热养护方可获得理想性能[40]；Tamilarasan 等[41]发现相较于湿养护与常温养护，热养护可使矿渣基碱激发材料展现出更优异的抗压强度。因此，热养护对于碱激发混凝土的最终性能有着显著影响，应该被纳入考量。然而室温养护作为应用最广泛也最常见的养护方式，其重要性也不可忽视。为了将 2 种养护方式的特点结合起来，本工作选择 Ctemp、Ctime 作为养护条件部分的输入变量。其中，养护温度包含室温养护及烘箱养护的温度范围；养护时间指的是样品在烘箱中养护的时长，对于未用烘箱养护而是直接室温养护 28 d 的数据样本，其烘箱养护时间为 0。此外，考虑到外加剂对 AAC 流动性能的影响，将 SP 纳入输入变量体系。

1.2 数据预处理与分析

本工作数据预处理方法主要包括数据归一化处理(消除数据量纲差异影响)、数据描述性统计分析与皮尔逊相关系数分析。

首先，由于本工作构建的是双输出模型，不同输出变量之间存在数量级差异，因此，无论是输出变量还是输入变量都需要进行归一化处理，以减小维数差异的影响。尤其在本工作中，部分变量的含 0 样本量较多，归一化后可以避免权重过度偏向非 0 样本，更好地保留含 0 样本本身的物理意义(即未添加该组分或未使用烘箱养护)。由于 0 是最小值且样本量较多，若将其映射到[0,1]的左边界，在 BPNN 训练时容易与“少量添加”模糊。因此，本工作归一到[–1,1]区间，0 值映射为–1，更好地保留零值的边界特性。同时，对称区间也使模型训练梯度方向对称，加快收敛速度。归一化公式如下：

$$y=\frac{(y_{\max}-y_{\min})(x-x_{\min})}{x_{\max}-x_{\min}}+y_{\min} \tag{1}$$

式中：y 为归一后取值；x 为归一前取值，归一后的区间为[–1,1]。

其次，本工作选取最小值(Min)、最大值(Max)、均值(Mean)、标准差(SD)、中位数(Median) 5 个统计量进行描述性统计分析，结果如表 1 所示，并结合变量数据分布图(见图 2)揭示数据库内部结构特征[42]。由表 1 可知，部分变量(OPC、GGBFS、SF、SP、Ctime)对应的中位数为 0，说明这些变量对应的数据超过 50%都为 0，这是因为 FA 作为最常见的碱激发材料，也是本工作前驱体的主体组分，而 OPC、GGBFS、SF 则作为 FA 的部分替代组分被引入，探究其对碱激发混凝土性能的影响并增强模型泛化能力，如图 2a、图 2c 和图 2d 所示，分布在 0 点附近的数据频率均大于 0.5。此外，Ctime 在本工作中特指烘箱养护的时间，对于未采用烘箱养护而是室温养护 28 d 的数据，参数值取为 0，而由于大部分实验都是采用室温养护，因此，Ctime 对应的大部分数据为 0。由图 2g 和图 2k 可见，SP、Ctime 对应的数据超过 50%都分布在 0 点附近，故其中位数为 0。

表 1 描述性统计分析

Table 1 Descriptive statistical coefficient

Variable	Unit	Min	Max	Mean	SD	Median
X1-OPC	$kg·m^{-3}$	0.000	93.000	3.240	13.910	0.000
X2-FA	$kg·m^{-3}$	0.000	500.000	340.300	125.300	397.000
X3-GGBFS	$kg·m^{-3}$	0.000	450.000	75.260	124.100	0.000
X4-SF	$kg·m^{-3}$	0.000	80.000	0.916	7.791	0.000
X5-Na_2SiO_3	$kg·m^{-3}$	36.000	374.700	111.400	46.740	107.500
X6-NaOH	$kg·m^{-3}$	11.000	99.550	32.320	18.000	25.590
X7-SP	$kg·m^{-3}$	0.000	47.000	3.659	5.443	0.000
X8-CA/FA		0.000	2.471	1.569	0.639	1.541
X9-TA	$kg·m^{-3}$	1097.000	2055.000	1755.000	206.700	1824.000
X10-Ctemp	℃	20.000	100.000	41.600	22.720	25.000
X11-Ctime	d	0.000	28.000	1.888	5.800	0.000
Y1-CS	MPa	10.240	77.360	38.150	15.950	34.640
Y2-Slump	mm	0.000	270.000	117.500	74.790	109.800

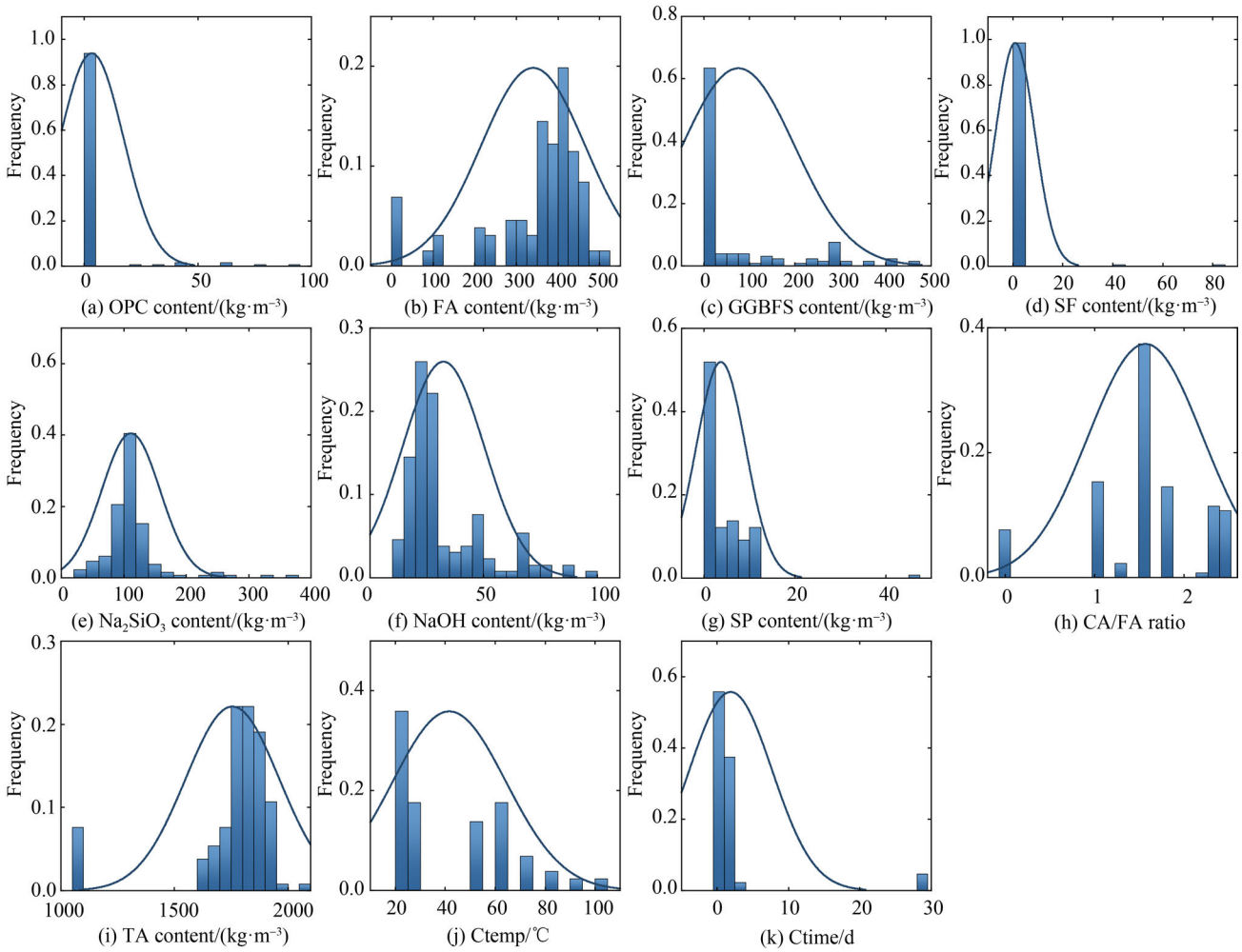


图 2　数据分布图

Fig. 2　Data distribution plot

以往研究表明[43]，输入变量间的相互依赖性可能引发多重共线性问题，导致参数失真，最终影响开发模型的性能。因此，采用皮尔逊相关系数对数据库中所有输入变量与输出变量间的相关性进行分析，所得相关系数如图 3 所示。结果表明，所有变量间相关系数绝对值的最大值为 0.67，低于多重共线性的阈值 0.80[44]，满足研究要求。此外，通过相关系数矩阵还可从线性角度分析原始数据库中变量间的关系。如图 3 所示，GGBFS 与 CS 呈现最高的正相关性，相关系数为 0.44；Na_2SiO_3 次之，相关系数为 0.35，这表明作为前驱体关键组分的 GGBFS 和作为碱激发剂重要成分的 Na_2SiO_3，在线性分析框架下均与 CS 呈高度正相关，不仅与以往研究[21, 23, 45–46]结论一致，又与后续的输入–输出之间的特征重要性分析结果相互印证。

2　模型建立的方法论

本工作研究重点在于实现抗压强度和坍落度的同步预测，即 1 个模型同时预测 2 个独立变量。然而传统的机器学习方法(如支持向量机和决策树等)及其衍生集成模型(如随机森林)主要是为单目标输出设计的，输出变量通常必须是 1 个单一的向量或列，对于多目标同步预测问题相比于神经网络模型有着原生结构决定的劣势。而神经网络模型可以在输出层设置多个神经元，每个神经元对应 1 个输出变量[47]，从而在结构上就可以实现多变量的同步预测。并利用共享层学习的特征捕捉输出变量之间的相关性，从而提高所有任务的泛化能力。研究人员为了预测多个目标变量，通常会选择训练多个独立模型，例如 Gomaa, E[1] 等人基于随机森林建立了 2 个独立模型从而实现多性能的预测输出，但是建立多个独立模型不仅耗费更多的时间与成本，还无法识别到输出变量之间隐含的联系。

反向传播神经网络(BPNN)是神经网络的一个分支[48]。其初始权重与阈值的随机性会导致误差函

数形成含多个局部极小值的高维曲面，致使模型陷入局部极值[49]。为此，引入蚁群优化算法(ACO)、遗传算法(GA)、鲸鱼优化算法(WOA)及灰狼优化算法(GWO)对 BPNN 模型进行优化。

图 4 为采用的双输出参数 BPNN 模型架构。由图 4 可见，通过多层神经元的非线性变换与权重优化，可实现对碱激发混凝土双性能指标的同步高精度预测。

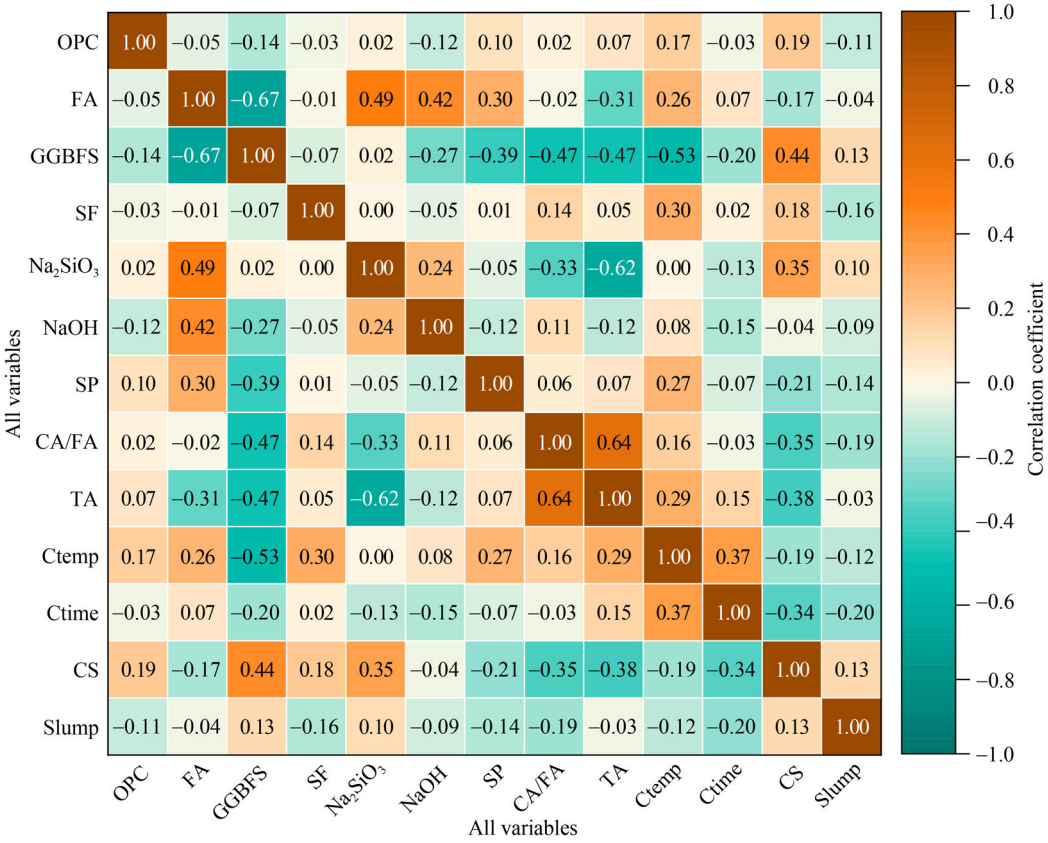


图 3 相关系数矩阵图

Fig. 3 Correlation heatmap

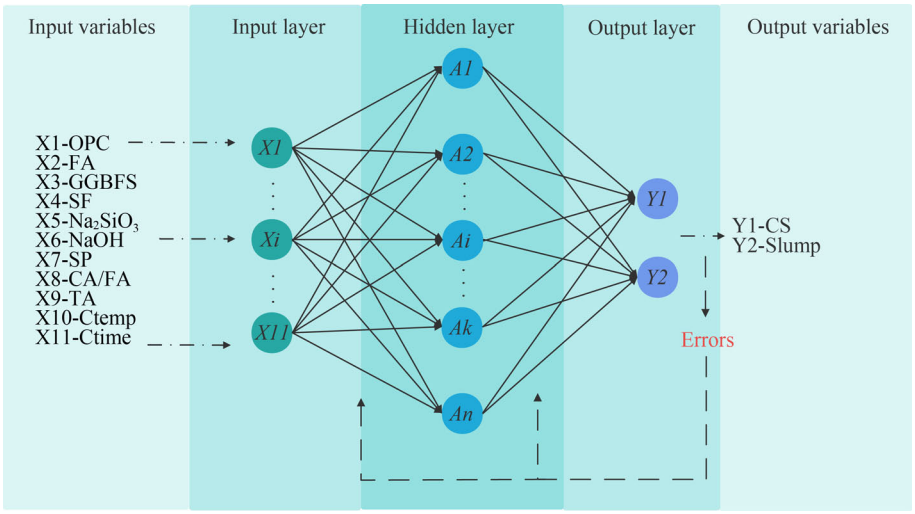


图 4 神经网络结构图

Fig. 4 Neural network architecture diagram

2.1 贝叶斯超参数优化

本工作主要采用贝叶斯优化，基于 ACO、GA、WOA、GWO 算法的不同参数设置进行多次独立运行，通过对比分析各算法不同参数设置的训练效果，确定各算法最终的参数设置。

2.2 蚁群优化算法

蚁群优化算法(ACO)受启发于蚂蚁群体觅食行为中寻找最短路径(即最优解)的生物学机制[50]。该

算法通过信息素的累计为 BPNN 寻找最优权重与阈值组合提供了正向反馈，加速了模型训练过程且提高了收敛效率。此外，信息素会随迭代次数消散的机制使得蚁群不会过早陷入某一路径，有限避免了 BPNN 容易陷入局部极值的问题，提高了泛化能力。基于贝叶斯优化的参数设置：蚂蚁数量：5 为信息素挥发系数为 0.7、蚂蚁移动次数为 100、转移概率常数为 0.3。

2.3　遗传算法

遗传算法(GA)是一种受自然选择与遗传机制启发的全局优化算法。其主要凭借目标适应度函数筛选 BPNN 的高适应度(即低误差)的初始权重组合，降低权重选择的随机性。通过交叉与突变强制搜索新的区域，从而避免 BPNN 陷入局部收敛，提高全局收敛概率。基于贝叶斯优化的参数设置：交叉概率为 0.2、变异概率为 0.5、种群大小为 5。

2.4　鲸鱼优化算法

鲸鱼优化算法(WOA)的灵感源自鲸鱼独特的泡网捕食方法。该算法将 BPNN 的权重和阈值组合转化为动态的“鲸鱼位置”，通过螺旋移动逼近 BPNN 的最佳权重组合，从而增强局部开发能力；通过随机搜索策略跳出当前搜索区域，避免过早收敛。基于贝叶斯优化的参数设置：种群数量为 5、螺旋形状常数为 1、概率阈值为 0.5。

2.5　灰狼优化算法

灰狼优化算法(GWO)主要通过模拟狼群协作搜寻最优解的过程实现全局优化。通过 α、β、δ (适应度前 3 个体)的位置引导种群(即 BPNN 的权重组合)向全局优化区域移动，这种引导式寻优也增加了搜索的多样性，提高了找到最优 BPNN 权重阈值组合的概率。基于贝叶斯优化的参数设置：种群规模为 5、搜索空间边界为[–1,1]。

2.6　评估指标的选取

本工作构建了 2 个独立数据库：模型训练数据库(376 组数据)与模型测试数据库(独立的 188 组数据)。将训练数据库按 70% (训练集)、15% (验证集)、15% (测试集)的比例划分训练模型，并采取 10 次不同的数据划分方式(最终结果取平均值)以确保模型能够充分学习全部数据特征。同时，采用均方根误差(RMSE)、平均绝对误差(MAE)、平均绝对摩尔分数比误差(MAPE)及决定系数(R^2) 4 项常规评估指标对模型的预测精度进行量化评价，其计算公式如下：

$$R^2=1-\frac{\sum_{i=1}^{n}(y_{ri}-\bar{y}_{\mathrm{p}})^2}{\sum_{i=1}^{n}(y_{ri}-\bar{y}_{\mathrm{r}})^2} \tag{2}$$

$$\mathrm{RMSE}=\sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_{ri}-\bar{y}_{\mathrm{p}})^2} \tag{3}$$

$$\mathrm{MAPE}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left|\left(\frac{y_{ri}-\bar{y}_{\mathrm{p}}}{y_{ri}}\right)\right|\times 100\% \tag{4}$$

$$\mathrm{MAE}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left|(y_{ri}-\bar{y}_{\mathrm{p}})\right| \tag{5}$$

式中：y_{ri} 为实际值；$\bar{y}_{\mathrm{r}}$ 和 $\bar{y}_{\mathrm{p}}$ 分别为实际值和预测值的平均值；n 为样本数。

3　结果与讨论

3.1　模型训练

BPNN 及 4 种混合 BPNN 模型的训练结果如图 5~图 9 所示。由图 5~图 9 [包括所有的(a)分图和(b)分图]可见，在抗压强度预测中 ACO-BPNN 模型具备最高的 R 值：0.965；在坍落度预测中 GA-BPNN 模型具备最高的 R 值：0.969。然而，最优模型需基

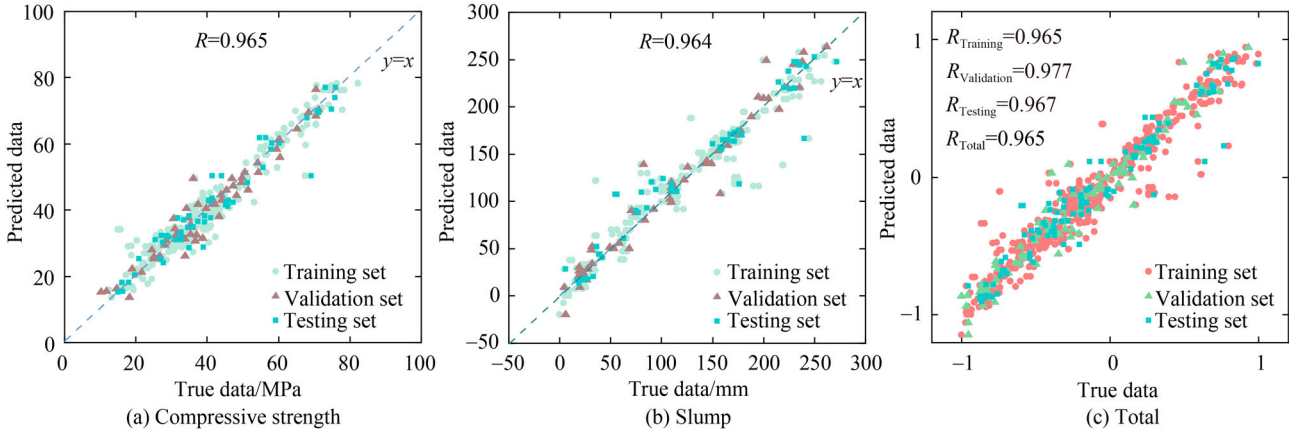


图 5　基于 ACO-BPNN 的训练结果

Fig. 5　Training results based on ACO-BPNN

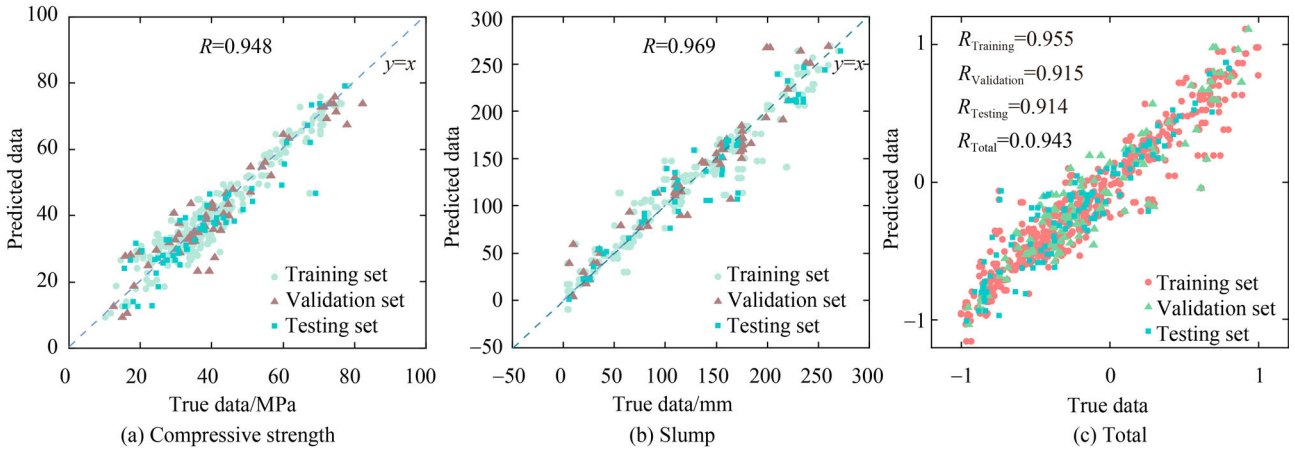


图 6 基于 GA-BPNN 的训练结果

Fig. 6 Training results based on GA-BPNN

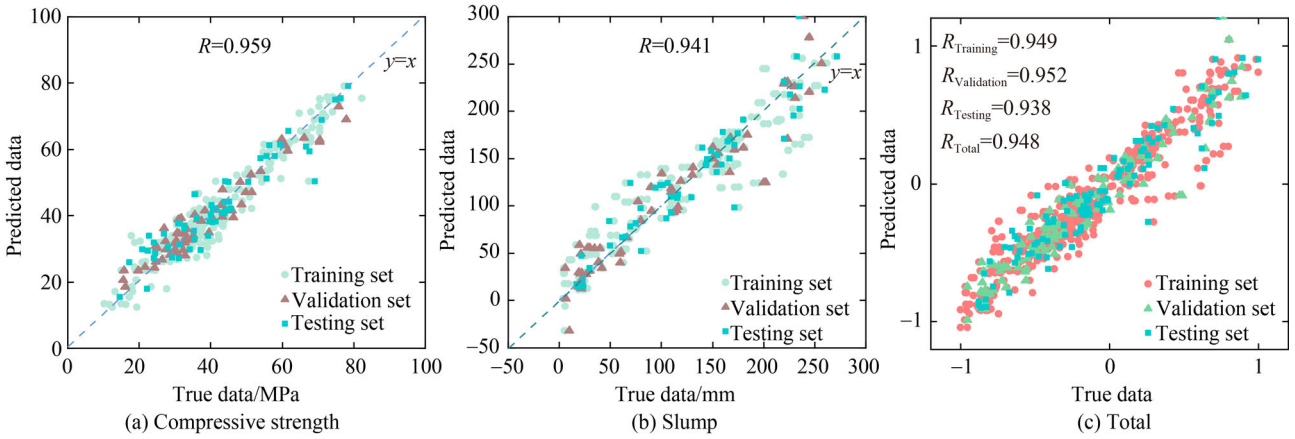


图 7 基于 WOA-BPNN 的训练结果

Fig. 7 Training results based on WOA-BPNN

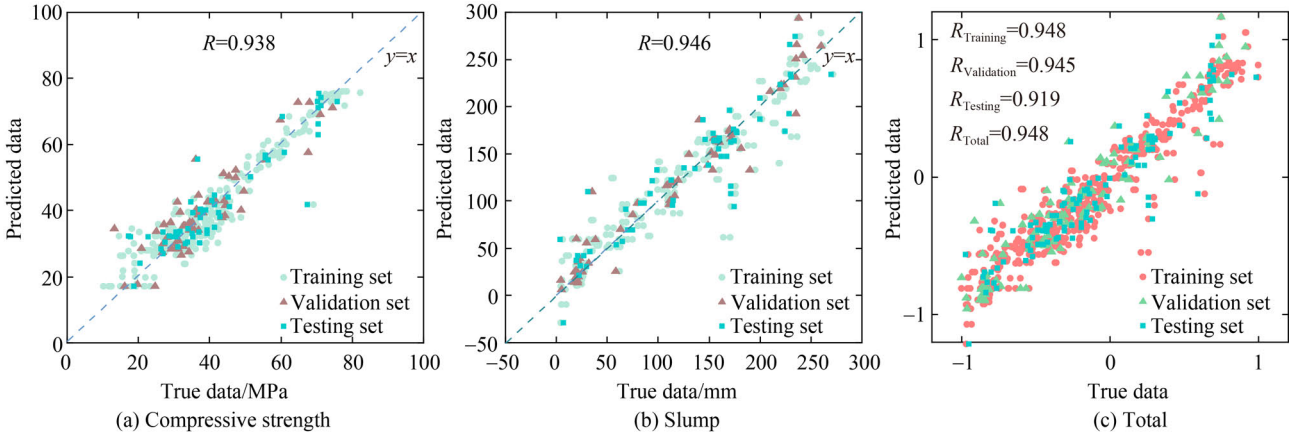


图 8 基于 GWO-BPNN 的训练结果

Fig. 8 Training results based on GWO-BPNN

于双性能协同预测效果确定，因此，通过整合双性能预测结果评估模型的整体预测能力，结果如图 5c~图 9c 所示，R 值排序为：ACO-BPNN(0.965)>WOA-BPNN(0.948)>GWO-BPNN(0.943)=GA-BPNN (0.943)>BPNN(0.925)。显然，优化后模型的 R 值均显著高于未优化的 BPNN 模型，验证了元启发式优化算法提升双输出 BPNN 模型预测精度的可行性。其中，ACO-BPNN 模型表现出最优的预测性能，其余 3 种优化模型的 R 值差异较小且性能接近。

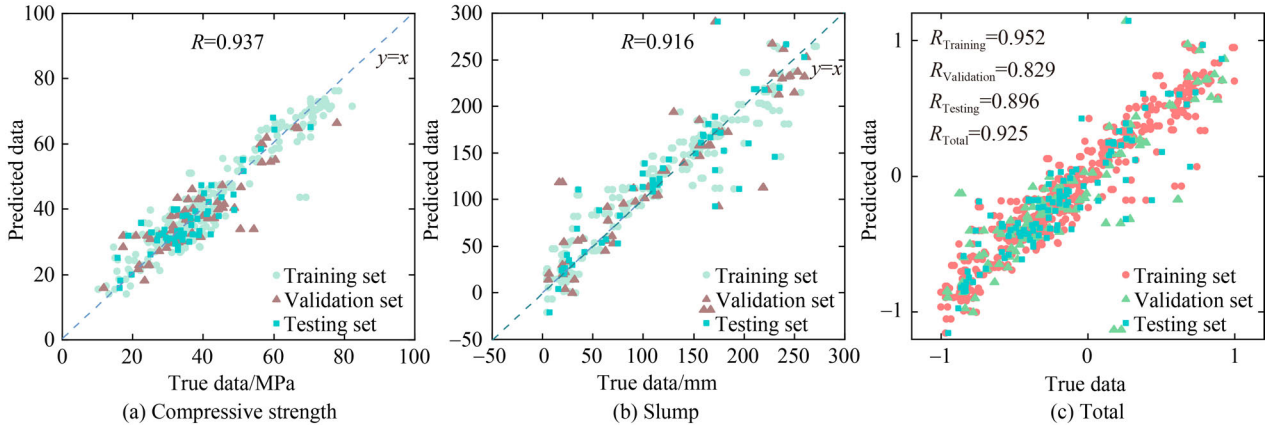


图 9　基于传统 BPNN 的训练结果

Fig. 9　Training results based on BPNN

此外，还采用 4 种常见评价指标(如 2.6 节所述)对模型训练过程进行综合评估，结果如图 10 所示。图 10a~图 10d 为 R^2、MAE、MAPE、RMSE 4 项指标的评估结果，图 10a~图 10d 中多边形的 5 个顶点对应 5 种模型——R^2 值越大或 MAE、RMSE、MAPE 值越小，表明模型性能越好。结果显示，ACO-BPNN 在所有指标中均占据最优位置。

在图 10a 中，除 ACO-BPNN 外，WOA-BPNN、GWO-BPNN、GA-BPNN 和 BPNN 模型训练集的 R^2 值均明显高于其验证集和测试集(测试集 R^2 均小于 0.9)，这与模型过拟合导致的训练–测试性能差异扩大相关。而 ACO-BPNN 模型在训练集、验证集与测试集的 R^2 值均超过 0.9，展现出稳健的预测能力，这是因为蚁群优化算法独特的双反馈机制(即正反馈+负反馈)能更好地弥补 BPNN 容易陷入局部极值的劣势[51]。正如 2.2 节所介绍的，蚁群能通过信息素的累积来强化找到更优路径(正反馈)，但即使某个路径当前信息素很高，随着迭代次数的增加，如果没有蚂蚁继续走或者信息素挥发率较高，该路径的信息素会下降，从而为探索其他路径(应是全局最优解)提供机会(负反馈)。

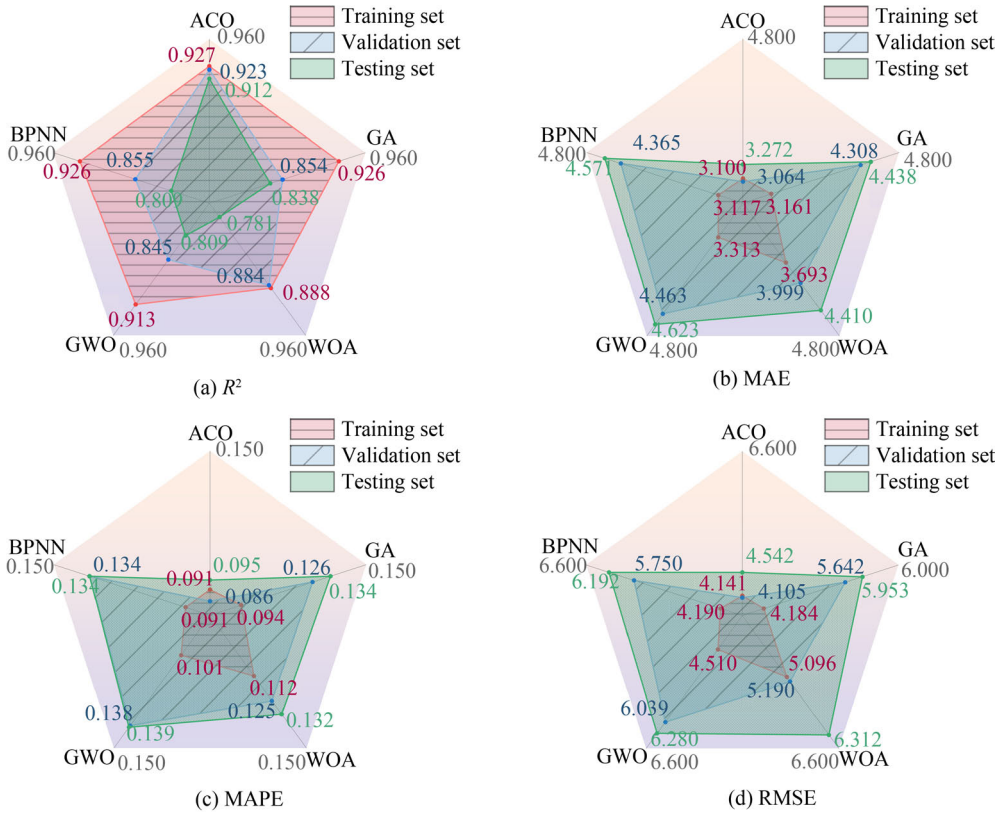


图 10　训练过程的性能评估

Fig. 10　Performance evaluation of the training process

3.2 模型泛化能力检验

泛化能力是评估 ML 模型实用性的核心指标，因为数据驱动模型在数据库范围内的预测能力已被充分验证，但其在数据库外的表现仍存疑[44]。为进一步探究训练后模型的稳定性与鲁棒性并测试其泛化能力，本工作采用包含 188 组数据的独立数据库进行双性能预测检验，结果如图 11 所示。与 3.1 节相似，相较于其他 4 种模型，ACO-BPNN 模型在抗压强度与坍落度预测中均表现出最高的 R^2 值及最低的 MAE、MAPE 与 RMSE 值。图 11 中误差棒结果表明，ACO-BPNN 模型的误差范围最小，验证了其优异的鲁棒性与稳定性。

此外，WOA-BPNN、GWO-BPNN 与 GA-BPNN 模型的预测能力显著低于未优化的 BPNN 模型，这与训练过程中(图 5~图 9)的表现相反。这是因为这 3 种优化模型因训练过程中采用 10 次不同数据划分策略，导致数据特征被过度提取，从而造成模型在训练时过拟合。从 4 个优化模型训练过程中的损失变化(见图 12)可以发现，ACO-BPNN 模型的初始损失相较于其余 3 个优化模型较高，并且随着训练次数的增加，其训练、验证、测试集损失都保持高度一致。然而，GA-BPNN、GWO-BPNN、WOA-BPNN 模型虽然初始损失较低，但随着训练次数的增加，验证、测试集损失明显高于训练集，证实了模型过拟合现象。这 3 个模型初始损失较低的原因是在初始训练时，根据目标适应度函数对解空间进行了初步筛选，这种初步的筛选会影响算法的全局探索能力(例如在初期学习不全面时将真正最优解筛选出去)，从而影响模型的预测和泛化能力。而 ACO-BPNN 模型从最初较高的损失随着训练次数增加逐渐减小，证实了该算法探索的全面性，更好地弥补了 BPNN 模型容易陷入局部极值的问题。此外，发现 GA-BPNN 模型在训练 12 次后出现验证集损失上升的现象，这是因为模型训练后期基因的多次交叉与变异放大了数据噪音的影响。

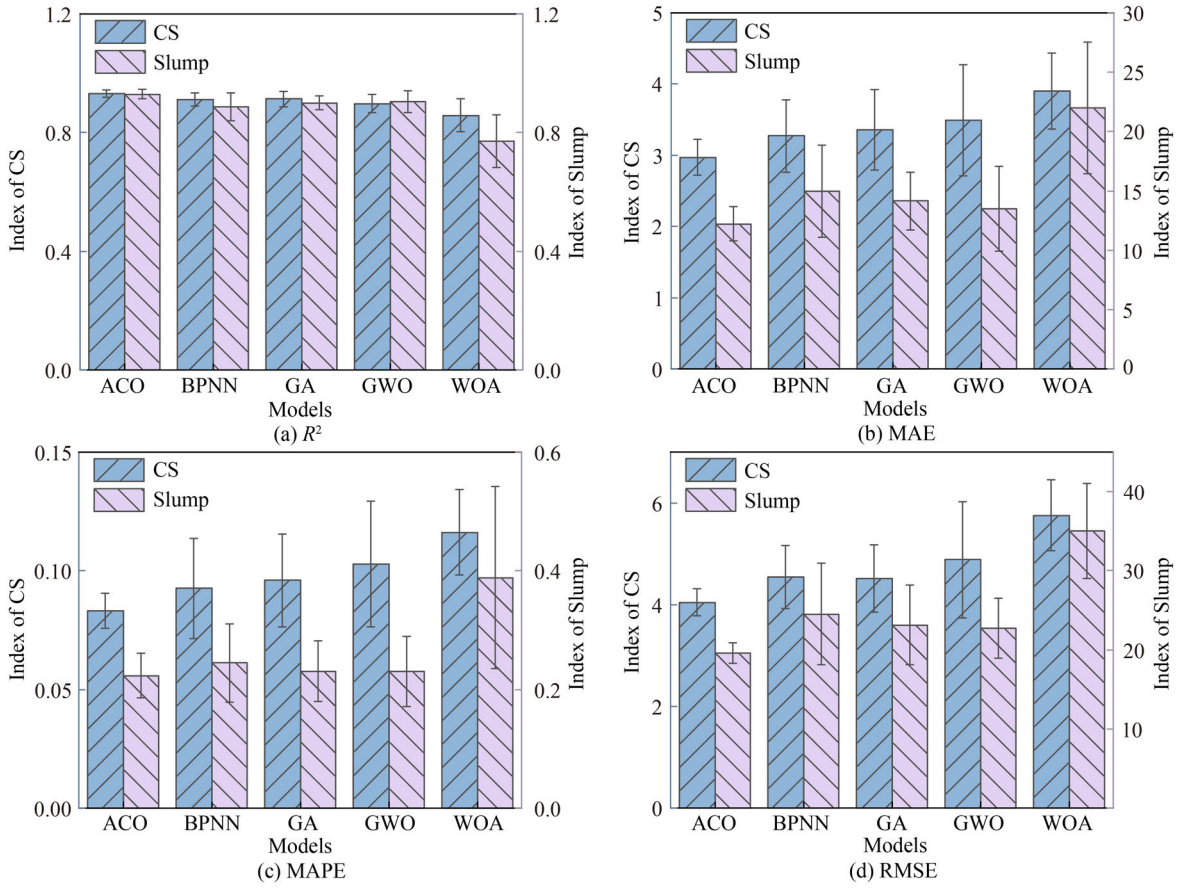


图 11 模型泛化能力评估

Fig. 11 Assessment of model generalization

为了进一步检验模型的泛化能力，对含零样本较多变量 OPC 进行了敏感性分析，验证数据稀疏性是否对模型的预测性能及泛化能力有较大影响。基于训练数据库中的 376 组数据，以未优化的 BPNN 模型检验去除 OPC 前后的模型训练效果(R)；基于测试数据库中的 188 组数据，以 4 种优化模型中精度最高的 ACO-BPNN 检验去除 OPC 前后的模型泛化能力(R^2)。结果如表 2 所示。由表 2 可知，数据

稀疏性对 ACO-BPNN 模型泛化能力影响并不大，无论是抗压强度还是坍落度检验，变量 OPC 去除前后 R^2 误差不超过 0.1。从训练效果分析结果看，数据稀疏性对模型训练过程中训练集、验证集结果有一定影响，但将 3 个数据集汇总可以发现去除变量 OPC 前后的 R 误差也不超过 0.1。

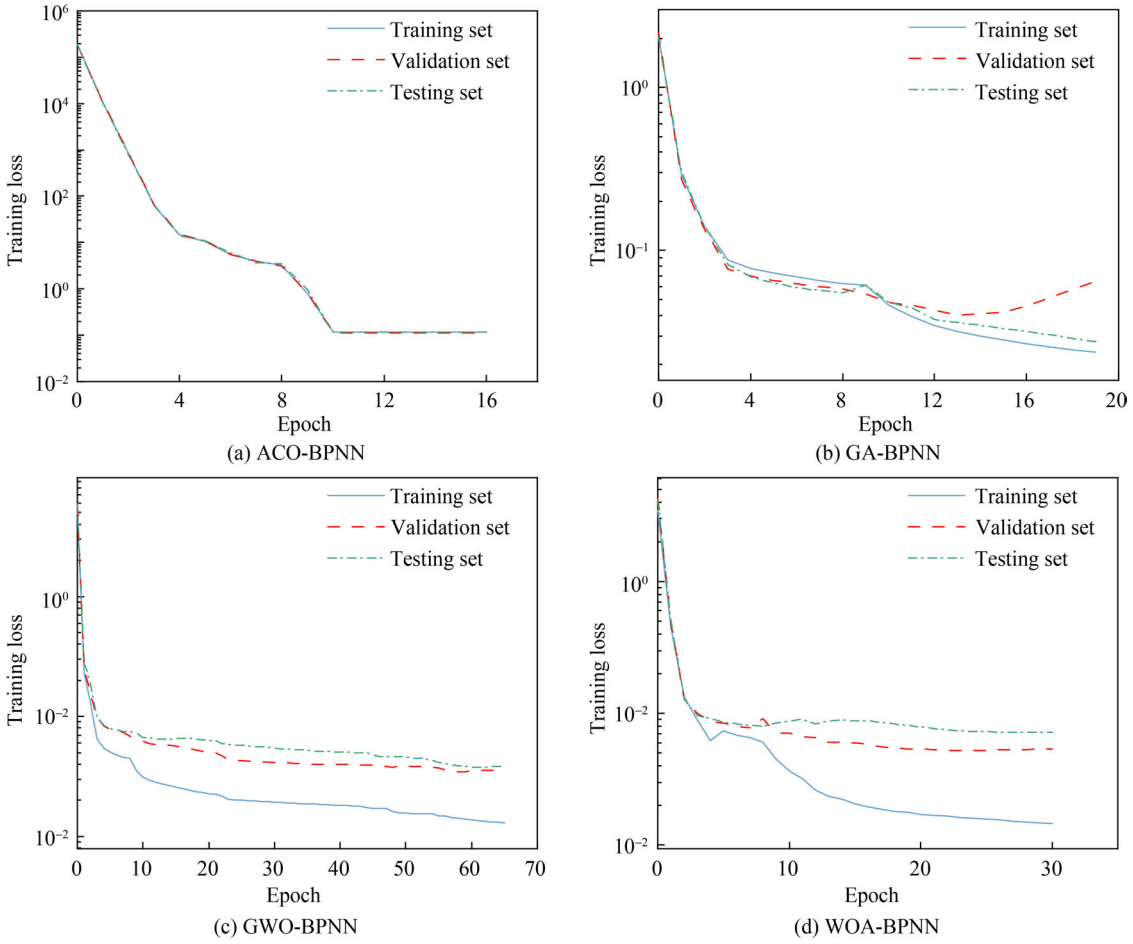


图 12　4 种优化后模型的损失函数变化

Fig. 12　Loss function changes for the four optimized models

表 2　去除变量 OPC 前后模型训练效果及泛化能力对比

Table 2　Comparison of model performance and generalization assessment before and after removing the OPC variable

Variables	Training assessment (R)				Generalization assessment (R^2)	
	Train	Validate	Test	Total	CS	Slump
OPC	0.952	0.829	0.896	0.925	0.932	0.929
No OPC	0.917	0.875	0.897	0.917	0.941	0.931

Note: Training assessment refers to unoptimized BPNN; Generalization assessment refers to ACO-BPNN.

3.3　主成分分析

ML 模型由于其数据与算法的“黑盒”特性[52]及模型内部逻辑的不可解释性而不被人们所信服。对于神经网络模型，其海量神经元、复杂层级结构及独特的连接方式使得人类难以直观理解其内部运行机制，尤其本工作采用双输出变量构建模型，进一步增加了模型的复杂度。为此，通过主成分分析(PCA)，基于自变量与响应变量间的相关性计算各输入变量对 2 个输出变量的重要性权重，与现有研究对比验证。最后，将 2 个输出变量(抗压强度和坍落度)作为 PCA 自变量，依据数据库特征筛选出兼顾抗压强度与坍落度综合影响的最优配合比方案。

3.3.1　特征重要性分析　　本工作通过 PCA 对 11 个输入变量进行处理，得到 11 个独立的主成分，结果如图 13 所示。特征值的大小反映了各主成分对数据变异性的解释能力。方差贡献率主要用于确定最终选取的主成分数量，本工作以累积方差贡献率达到 85%为阈值。分析表明，各主成分的方差贡献率均低于 25%，证明所选的输入变量具有相对独立性。每个主成分均包含 1 组特征权重，用于描述各输入特征对该主成分的贡献度，最后综合各主成分在数据库中的重要性与不同主成分的特征权重，可计算出各输入变量对于输出变量的特征重要性排序，结

果如图 14 所示。由图 14a 可见，特征得分最高的是 GGBFS，说明在本工作中其对碱激发混凝土抗压强度的影响最为显著，与一些已有研究结果一致[8, 53–54]，这是因为 GGBFS 相较于其他前驱体组分具有更高的钙含量和非晶相含量，促进了 C-A-S-H 凝胶的生成[55]。例如王新频等[56]通过扫描电子显微镜及核磁共振技术发现碱激发矿渣材料的产物主要是 C-A-S-H 凝胶。Puertas[57]等通过实验发现碱激发矿渣净浆中生成的 C-A-S-H 凝胶具有非常密集的结构，从而具备优异的机械性能。其次是 Ctime，这是因为短期的热养护虽然能显著提升早期强度[41, 58–59]，但是当养护时间超过 3 d 时，基质微观结构因过度反应而发生劣化，反而抑制强度发展[41]。因此，热养护时间不同会导致材料性能显著变化。此外，发现 Na_2SiO_3 对抗压强度的影响位于第 3，但同样作为激发剂组成部分的 NaOH 影响相对较小，这是因为激发剂溶液中的 Na_2O 含量由 Na_2SiO_3 和 NaOH 共同决定，但 Na_2SiO_3 还决定了反应所必须的 SiO_2 含量，而其是构建凝胶网络结构的关键骨架元素[60]，从而影响碱激发混凝土的强度。特征得分的高低并非决定混凝土性能的绝对依据，材料性能本质上是多参数协同作用的结果。例如，并非所有情况下高 GGBFS 掺量均能获得更高抗压强度。Zhang 等[61]通过实验发现，当矿渣掺量过高时，需相应增加激发剂中 Na_2O 含量以实现有效活化，才能保证强度提升。坍落度分析结果如图 14b 所示。发现 CA/FA 对坍落度影响最显著，这是因为该参数的变化代表了胶凝材料对骨料的包裹效应变化，从而影响混凝土坍落度。此外，一些硅质骨料可能与激发剂发生反应进而影响混凝土的坍落度。Ctime 对坍落度影响得分位列第二，表明高温养护环境对混凝土坍落度同样具有显著影响。正如 Aliabdo 等[19]所指出，地聚合物中水分可改善其流动性，因此在高温养护过程中水分蒸发会显著影响其坍落度。Gomaa 等[62]的实验表明，热养护虽能提升碱激发材料抗压强度，但会导致坍落度降低，其原因在于粉煤灰的溶解与反应产物的沉淀加速了聚合物网络的形成与固相之间的连接，最终表现为坍落度下降。SP 对坍落度的影响排到第三位。而已有研究也证明减水剂在碱激发体系中的影响不如硅酸盐水泥体系那么显著[45]。

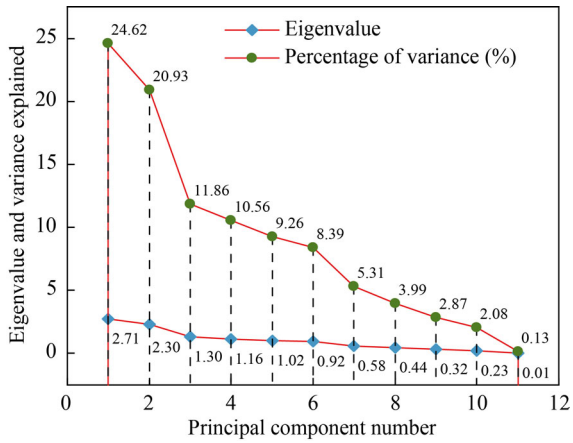


图 13 特征值碎石图

Fig. 13 Scree plot

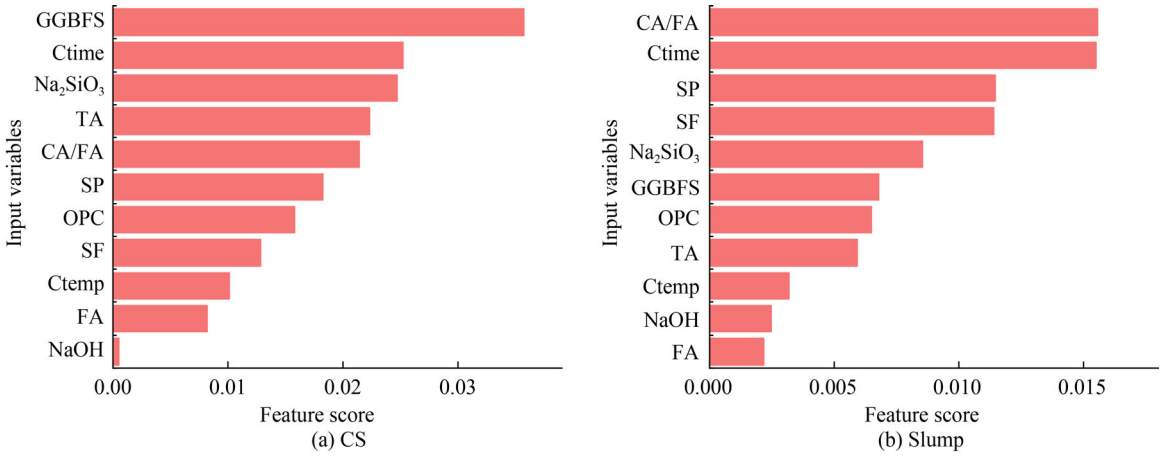


图 14 特征重要性排序

Fig. 14 Feature importance ranking

3.3.2 综合得分计算 本工作主要以抗压强度和坍落度作为变量进行 2 次主成分分析，基于主成分综合得分计算验证隐含的“所有指标方向相同且样本值越大得分越高”的假设，在数据中找到能在保持高坍落度的情况下还能保持高抗压强度的相对高性能配比。因为高抗压强度往往对应优异的力学性能，高坍落度对应良好的工作性能。然而坍落度单独考虑时并不一定越高越好，这是因为高坍落度表明强

度下降。但在本工作中，坍落度与抗压强度一起作为配比筛选标准，则刚好契合了“所有指标方向相同且样本值越大得分越高”的假设。综合得分计算过程如下：首先，将抗压强度和坍落度的原始数据进行标准化并代入主成分方程，将计算所得的对应权重作为各配合比在各主成分上的得分；随后，将不同主成分对应的权重得分与其累积贡献率(如表 3 所示)进行加权求和，最终获得综合得分[63–64]。计算得到各配合比的综合性能得分如图 15 所示，其中蓝色文字为综合得分最高(即抗压强度与坍落度相对较高)的配合比，其对应的抗压强度为 47 MPa，坍落度为 195 mm。需说明的是，图 15 中呈现的正负值仅表征配合比在综合指标空间中的相对位置，而非性能优劣的绝对评估。

表 3　不同主成分的特征值和贡献率

Table 3　Cumulative contribution rate of two output variables as the principal component

Principal component number	Eigenvalue	Percentage of variance/%	Cumulative/%
1	1.131 92	56.595 84	56.595 84
2	0.868 08	43.404 16	100.00 000

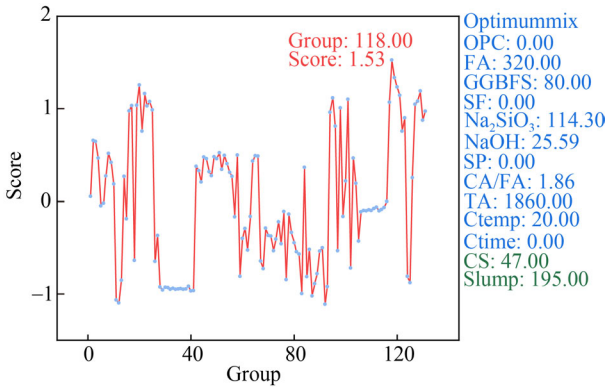


图 15　基于主成分分析的多变量综合得分计算

Fig. 15　Multivariate integration score based on PCA

3.4　模型局限性

尽管本工作采用一个全新数据库对模型进行了泛化能力检验，但该泛化能力指的是对数据库范围之外且输入特征范围之内的数据预测的准确性。而在实际应用时，输入的特征可能会包含模型训练时未出现的信息。例如，不同批次的粉煤灰其化学成分存在差异，尽管本工作基于已发表文献收集的数据已涵盖大多数类别的粉煤灰，但在实际应用中不可避免输入的粉煤灰与训练数据库中的粉煤灰在种类及化学成分上存在差异，会与模型学到的旧规则产生一定的偏差甚至不适用于旧规则，导致模型泛化能力不足。因此，完善数据库的训练样本量，提高输入特征的丰富度对提升最终模型的泛化能力尤为重要。

4　结论

1) 基于混合–神经网络理论建立了能同时预测 28 d 抗压强度与坍落度的模型，通过 10 种不同的数据划分方式训练模型，最终以平均值代表模型预测性能，确保了模型的稳定性与鲁棒性，最后基于一个全新数据库对模型进行泛化能力测试。

2) 对比了优化前后的 5 种预测模型，发现经蚁群算法优化的 ACO-BPNN 模型在双性能预测中均展现出最优综合性能：其预测精度最高(基于 4 项评价指标)，且稳定性最强(基于误差棒分析)。具体指标结果：R^2=0.932、MAE=2.972、RMSE=4.043、MAPE=0.083 (抗压强度预测)；R^2=0.929、MAE=12.212、RMSE=19.580、MAPE=0.223(坍落度预测)。

3) 由于 WOA-BPNN、GA-BPNN 和 GWO-BPNN 3 个模型在训练过程中为了提高预测精度过度提取了数据特征，导致其均出现过拟合现象。

4) 基于主成分分析的特征重要性排序结果：输入变量对抗压强度的影响大小排序为：矿渣粉、热养护时间、硅酸钠、总骨料含量、粗骨料与细骨料质量比、减水剂、硅酸盐水泥、硅粉、养护温度、粉煤灰、氢氧化钠；对坍落度的影响大小排序为：粗骨料与细骨料质量比、热养护时间、减水剂、硅粉、硅酸钠、矿渣粉、硅酸盐水泥、总骨料含量、养护温度、氢氧化钠、粉煤灰。

参考文献:

[1] LI Z Z, YOON J, ZHANG R, et al. Machine learning in concrete science: Applications, challenges, and best practices[J]. NPJ Comput Mater, 2022, 8: 127.

[2] 刘晓, 王思迈, 卢磊, 等. 机器学习预测混凝土材料耐久性的研究进展[J]. 硅酸盐学报, 2023, 51(8): 2062–2073.
LIU Xiao, WANG Simai, LU Lei, et al. J Chin Ceram Soc, 2023, 51(8): 2062–2073.

[3] SHEN J L, LI Y, LIN H, et al. Development of autogenous shrinkage prediction model of alkali-activated slag-fly ash geopolymer based on machine learning[J]. J Build Eng, 2023, 71: 106538.

[4] AMIN M N, AL-NAGHI A A A, NASSAR R U D, et al. Investigating the rheological characteristics of alkali-activated concrete using contemporary artificial intelligence approaches[J]. Rev Adv Mater Sci, 2024, 63: 20240006.

[5] KONG Y K, KURUMISAWA K. Application of machine learning in predicting workability for alkali-activated materials[J]. Case Stud Constr Mater, 2023, 18: e02173.

[6] BHAT R, HAN T H, AKSHAY PONDURU S, et al. Predicting compressive strength of alkali-activated systems based on the network topology and phase assemblages using tree-structure computing

algorithms[J]. Constr Build Mater, 2022, 336: 127557.

[7] JAFARI A, TOUFIGH V. Developing a comprehensive prediction model for the compressive strength of slag-based alkali-activated concrete[J]. J Sustain Cem Based Mater, 2024, 13(2): 256–273.

[8] LI Y, SHEN J L, LIN H, et al. Optimization design for alkali-activated slag-fly ash geopolymer concrete based on artificial intelligence considering compressive strength, cost, and carbon emission[J]. J Build Eng, 2023, 75: 106929.

[9] MAHAMAT A A, BOUKAR M M, IBRAHIM N M, et al. Machine learning approaches for prediction of the compressive strength of alkali activated termite mound soil[J]. Appl Sci, 2021, 11(11): 4754.

[10] AYDıN Y, CAKIROGLU C, BEKDAŞ G, et al. Neural network predictive models for alkali-activated concrete carbon emission using metaheuristic optimization algorithms[J]. Sustainability, 2024, 16(1): 142.

[11] JIANG H, LIU T, HE P H, et al. Quantitative analysis of fatty acid value during rice storage based on olfactory visualization sensor technology[J]. Sens Actuat B Chem, 2020, 309: 127816.

[12] ZHANG L W, SUN Z, ZHANG C, et al. Numerical investigation of the dynamic responses of long-span bridges with consideration of the random traffic flow based on the intelligent ACO-BPNN model[J]. IEEE Access, 2018, 6: 28520–28529.

[13] CHEN G Y, FU K Y, LIANG Z W, et al. The genetic algorithm based back propagation neural network for MMP prediction in CO_2-EOR process[J]. Fuel, 2014, 126: 202–212.

[14] HU Y S, LI J G, HONG M N, et al. Short term electric load forecasting model and its verification for process industrial enterprises based on hybrid GA-PSO-BPNN algorithm: A case study of papermaking process[J]. Energy, 2019, 170: 1215–1227.

[15] LIU Y P, YANG Z, HUANG L, et al. Anti-interference detection of mixed NO_X *via* In_2O_3-based sensor array combining with neural network model at room temperature[J]. J Hazard Mater, 2024, 463: 132857.

[16] XU W D, HE Y C, LI J H, et al. Non-destructive determination of beef freshness based on colorimetric sensor array and multivariate analysis[J]. Sens Actuat B Chem, 2022, 369: 132282.

[17] JIANG F, FEI L Y, JIANG H, et al. Constitutive model research on the hot deformation behavior of Ti_6Al_4V alloy under wide temperatures[J]. J Mater Res Technol, 2023, 23: 1062–1074.

[18] ZHOU Z J, DU Y B, HE G H, et al. Optimization and characterization of laser cladding of 15-5PH coating on 20Cr13 stainless steel[J]. J Mater Eng Perform, 2023, 32(3): 962–977.

[19] ALIABDO A A, ABD ELMOATY A E M, SALEM H A. Effect of cement addition, solution resting time and curing characteristics on fly ash based geopolymer concrete performance[J]. Constr Build Mater, 2016, 123: 581–593.

[20] ALIABDO A A, ABD ELMOATY A E M, SALEM H A. Effect of water addition, plasticizer and alkaline solution constitution on fly ash based geopolymer concrete performance[J]. Constr Build Mater, 2016, 121: 694–703.

[21] BONDAR D, NANUKUTTAN S, PROVIS J L, et al. Efficient mix design of alkali activated slag concretes based on packing fraction of ingredients and paste thickness[J]. J Clean Prod, 2019, 218: 438–449.

[22] CHITHAMBARAM S J, KUMAR S, PRASAD M M, et al. Effect of parameters on the compressive strength of fly ash based geopolymer concrete[J]. Struct Concr, 2018, 19(4): 1202–1209.

[23] DEB P S, NATH P, SARKER P K. The effects of ground granulated blast-furnace slag blending with fly ash and activator content on the workability and strength properties of geopolymer concrete cured at ambient temperature[J]. Mater Des 1980 2015, 2014, 62: 32–39.

[24] HADI M N S, ZHANG H Q, PARKINSON S. Optimum mix design of geopolymer pastes and concretes cured in ambient condition based on compressive strength, setting time and workability[J]. J Build Eng, 2019, 23: 301–313.

[25] OMAR O M, ELHAMEED G D A, MOHAMADIEN A. Effect of Crashed Stone on Properties of Fly Ash Based-Geopolymer Concrete with Local Alkaline Activator in Egypt [J]. J Civil Environ Eng, 2015, 106: 1357–1366.

[26] LEE N K, LEE H K. Setting and mechanical properties of alkali-activated fly ash/slag concrete manufactured at room temperature[J]. Constr Build Mater, 2013, 47: 1201–1209.

[27] NATH P, SARKER P K. Effect of GGBFS on setting, workability and early strength properties of fly ash geopolymer concrete cured in ambient condition[J]. Constr Build Mater, 2014, 66: 163–171.

[28] NATH P, SARKER P K. Use of OPC to improve setting and early strength properties of low calcium fly ash geopolymer concrete cured at room temperature[J]. Cem Concr Compos, 2015, 55: 205–214.

[29] OKOYE F N, DURGAPRASAD J, SINGH N B. Effect of silica fume on the mechanical properties of fly ash based-geopolymer concrete[J]. Ceram Int, 2016, 42(2): 3000–3006.

[30] OLIVIA M, NIKRAZ H. Strength and water penetrability of fly ash geopolymer concrete[J]. ARPN J Eng Appl Sci, 2011, 6(7): 70–78.

[31] OLIVIA M, NIKRAZ H, SARKER P K. Improvements in the strenght and water penetrability of low calcium fly as based geopolymer concrete[C] //The ACF 3rd International Conference, Ho Chi Minh, Vietnam, 2008: 384–391.

[32] PHOO-NGERNKHAM T, PHIANGPHIMAI C, DAMRONGWIRIYANUPAP N, et al. A mix design procedure for alkali-activated high-calcium fly ash concrete cured at ambient temperature[J]. Adv Mater Sci Eng, 2018, 2018(1): 2460403.

[33] RAFEET A, VINAI R, SOUTSOS M, et al. Guidelines for mix proportioning of fly ash/GGBS based alkali activated concretes[J]. Constr Build Mater, 2017, 147: 130–142.

[34] RASHAD A M. Properties of alkali-activated fly ash concrete blended with slag[J]. Iran J Mater Sci Eng, 2013, 10(1): 57–64.

[35] REDDY M S, DINAKAR P, RAO B H. Mix design development of fly ash and ground granulated blast furnace slag based geopolymer concrete[J]. J Build Eng, 2018, 20: 712–722.

[36] XIA D T, CHEN R L, CHENG J J, et al. Desert sand-high calcium fly ash-based alkali-activated mortar: Flowability, mechanical properties, and microscopic analysis[J]. Constr Build Mater, 2023, 398: 131729.

[37] CHI M. Effects of modulus ratio and dosage of alkali-activated solution on the properties and micro-structural characteristics of alkali-activated fly ash mortars[J]. Constr Build Mater, 2015, 99: 128–136.

[38] SHEKHOVTSOVA J, ZHERNOVSKY I, KOVTUN M, et al. Estimation of fly ash reactivity for use in alkali-activated cements–A step towards sustainable building material and waste utilization[J]. J Clean Prod, 2018, 178: 22–33.

[39] SUN B B, YE G, DE SCHUTTER G. A review: Reaction mechanism and strength of slag and fly ash-based alkali-activated materials[J]. Constr Build Mater, 2022, 326: 126843.

[40] RAFEET A, VINAI R, SOUTSOS M, et al. Effects of slag substitution on physical and mechanical properties of fly ash-based alkali activated

binders (AABs)[J]. Cem Concr Res, 2019, 122: 118–135.
[41] TAMILARASAN A, SUGANYA O M. Effect of varying molarity and curing conditions on the mechanical and microstructural characteristics of alkali activated GGBS binder[J]. Mater Res Express, 2023, 10(9): 095305.
[42] ZOU B P, WANG Y B, NASIR AMIN M, et al. Artificial intelligence-based optimized models for predicting the slump and compressive strength of sustainable alkali-derived concrete[J]. Constr Build Mater, 2023, 409: 134092.
[43] YANG L F, SU H Z, WEN Z P. Improved PLS and PSO methods-based back analysis for elastic modulus of dam[J]. Adv Eng Softw, 2019, 131: 205–216.
[44] YANG L F, LAI B L, XU R, et al. Prediction of alkali-silica reaction expansion of concrete using artificial neural networks[J]. Cem Concr Compos, 2023, 140: 105073.
[45] ALREFAEI Y, WANG Y S, DAI J G. Effect of mixing method on the performance of alkali-activated fly ash/slag pastes along with polycarboxylate admixture[J]. Cem Concr Compos, 2021, 117: 103917.
[46] FU Q, BU M X, ZHANG Z R, et al. Hydration characteristics and microstructure of alkali-activated slag concrete: A review[J]. Engineering, 2023, 20: 162–179.
[47] MEI X C, LI C Q, SHENG Q, et al. Development of a hybrid artificial intelligence model to predict the uniaxial compressive strength of a new aseismic layer made of rubber-sand concrete[J]. Mech Adv Mater Struct, 2023, 30(11): 2185–2202.
[48] XU W D, HE Y C, LI J H, et al. Portable beef-freshness detection platform based on colorimetric sensor array technology and bionic algorithms for total volatile basic nitrogen (TVB-N) determination[J]. Food Control, 2023, 150: 109741.
[49] ZHANG J F, HUANG Y M, WANG Y H, et al. Multi-objective optimization of concrete mixture proportions using machine learning and metaheuristic algorithms[J]. Constr Build Mater, 2020, 253: 119208.
[50] CHANDRA MOHAN B, BASKARAN R. A survey: Ant Colony Optimization based recent research and implementation on several engineering domain[J]. Expert Syst Appl, 2012, 39(4): 4618–4627.
[51] YE K, ZHANG C S, NING J X, et al. Ant-colony algorithm with a strengthened negative-feedback mechanism for constraint-satisfaction problems[J]. Inf Sci, 2017, 406: 29–41.
[52] LINARDATOS P, PAPASTEFANOPOULOS V, KOTSIANTIS S. Explainable AI: A review of machine learning interpretability methods[J]. Entropy, 2020, 23(1): 18.
[53] SUN B B, DING L C, YE G, et al. Mechanical properties prediction of blast furnace slag and fly ash-based alkali-activated concrete by machine learning methods[J]. Constr Build Mater, 2023, 409: 133933.
[54] SUN Y B, CHENG H, ZHANG S Z, et al. Prediction & optimization of alkali-activated concrete based on the random forest machine learning algorithm[J]. Constr Build Mater, 2023, 385: 131519.
[55] DING Y, DAI J G, SHI C J. Mechanical properties of alkali-activated concrete: A state-of-the-art review[J]. Constr Build Mater, 2016, 127: 68–79.
[56] 王新频. 碱激发矿渣水泥水化 C-A-S-H 凝胶微观结构的研究[J]. 硅酸盐通报, 2019, 38(4): 1062–1067.
WANG Xinpin. Bull Chin Ceram Soc, 2019, 38(4): 1062–1067.
[57] PUERTAS F, PALACIOS M, MANZANO H, et al. A model for the C-A-S-H gel formed in alkali-activated slag cements[J]. J Eur Ceram Soc, 2011, 31(12): 2043–2056.
[58] KONG L J, FAN Z R, MA W C, et al. Effect of curing conditions on the strength development of alkali-activated mortar[J]. Crystals, 2021, 11(12): 1455.
[59] NIŞ A, ALTıNDAL İ. Compressive strength performance of alkali activated concretes under different curing conditions[J]. Period Polytech Civil Eng, 2021: 556–565.
[60] WANG S D, SCRIVENER K L, PRATT P L. Factors affecting the strength of alkali-activated slag[J]. Cem Concr Res, 1994, 24(6): 1033–1043.
[61] ZHANG L V, MARANI A, NEHDI M L. Chemistry-informed machine learning prediction of compressive strength for alkali-activated materials[J]. Constr Build Mater, 2022, 316: 126103.
[62] GOMAA E, HAN T H, ELGAWADY M, et al. Machine learning to predict properties of fresh and hardened alkali-activated concrete[J]. Cem Concr Compos, 2021, 115: 103863.
[63] GARCÍA-SÁNCHEZ C, CALABRIA M, GRUNDEN N, et al. Neuropsychological deficits in patients with cognitive complaints after COVID-19[J]. Brain Behav, 2022, 12(3): e2508.
[64] GOWDA H, IVANISEVIC J, JOHNSON C H, et al. Interactive XCMS online: Simplifying advanced metabolomic data processing and subsequent statistical analyses[J]. Anal Chem, 2014, 86(14): 6931–6939.

A Dual-Output Predictive Model Based on Hybrid-Neural Networks for Concretes

WANG Yanshuai, *WAN Chengpeng*, *DONG Biqin*, *WANG Penghui*
(College of Civil and Transportation Engineering, Guangdong Provincial Key Laboratory of Durability for Marine Civil Engineering, Shenzhen Key Laboratory for Low-carbon Construction Material and Technology, Shenzhen University, Shenzhen 518060, Guangdong, China)

Extended Abstract

Introduction Concrete as a typical multiphase composite material exhibits properties closely related to raw material quality, mix proportion design, curing conditions, and types of admixtures. Especially in the field of alkali-activated concrete (AAC), a predominant use of industrial solid wastes as raw materials introduces inherent complexities, including intricate microscopic reaction mechanisms, highly unpredictable performance characteristics, leading to the absence of a widely accepted reliable design standards. However, conventional approaches such as experimental characterization and numerical simulations demand substantial financial and labor resources and yield outcomes constrained due to material variability and methodological assumptions. Machine learning (ML)

as a data-driven approach has a potential to promote the implementation of the standard from another perspective (*i.e.* data aspect) with less cost waste *via* establishing a predictive model especially a multi-output predictive models with high accuracy and robustness. Therefore, this study was to use machine learning in property prediction of alkali-activated concrete (AAC) *via* establishing a robust dual-output hybrid BPNN framework, resolving challenges in multi-objective optimization and overfitting through metaheuristic algorithms, and providing mechanistic insights by a feature importance analysis.

Methods This study established two independent databases for model training and generalization capability evaluation. Initially, the datasets were preprocessed and analyzed through data normalization, Pearson correlation coefficient calculation, and descriptive statistical analysis. Subsequently, four metaheuristic algorithms, *i.e*., Ant Colony Optimization (ACO), Genetic Algorithm (GA), Whale Optimization Algorithm (WOA), and Grey Wolf Optimizer (GWO), were employed to optimize the hyperparameters of the Backpropagation Neural Network (BPNN), with a predictive accuracy enhanced *via* ten-fold cross-validation. The predictive performance of five models (original BPNN and optimized variants) was systematically compared based on four evaluation metrics, *i.e*., coefficient of determination (R^2), mean absolute error (MAE), mean absolute percentage error (MAPE), and root mean square error (RMSE). The generalization capability was further validated using a novel independent database, ultimately identifying the optimal model capable of high-precision simultaneous prediction of compressive strength and slump. Finally, the principal component analysis (PCA) was utilized to rank the influence of input variables on the output properties, enabling the selection of optimal mix proportions from the database through comprehensive performance evaluation of dual-output variables.

Results and discussion The Pearson correlation coefficient analysis indicates the rationality of input variable selection *via* confirming the absence of significant multicollinearity, thereby mitigating its adverse effect on the model predictions. During model training, the metaheuristic optimization algorithms significantly enhances the predictive performance of the Backpropagation Neural Network (BPNN), demonstrating that a hyperparameter optimization effectively improves the model capability. However, the generalization capability evaluation using a novel independent database reveals that three optimized models exhibit an inferior performance, compared to the unoptimized BPNN, contradicting their training-phase results. This discrepancy indicates overfitting in these three models during training, potentially attributable to excessive feature extraction induced by ten-fold cross-validation. In contrast, the Ant Colony Optimization-enhanced BPNN (ACO-BPNN) consistently demonstrates superior predictive accuracy and stability across both training and generalization assessments.

Furthermore, the principal component analysis (PCA)-based feature importance ranking identifies ground granulated blast furnace slag (GGBFS) as the most influential factor for 28-d compressive strength, while the coarse aggregate/fine aggregate ratio (CA/FA) exerts the dominant control over slump variability.

Conclusions A hybrid-BPNN model capable of predicting both compressive strength and slump was trained and modeled in an entirely new database with appreciable accuracy levels. Five predictive models before and after optimization were established and compared. The ACO-BPNN had the optimum predictive accuracy (based on four evaluation indicators), and the strongest stability and robustness (based on the error bars) in testing process for both two properties. For the assessment of compressive strength prediction in testing process, the evaluation indicators could involve R^2=0.932, MAE=2.972, RMSE=4.043, and MAPE=0.083. For slump degree prediction, the evaluation indicators could involve R^2=0.929, MAE=12.212, RMSE=19.570, and MAPE=0.223. The WOA-BPNN, GA-BPNN, and GWO-BPNN algorithms exhibited pronounced overfitting tendencies when applied to multi-output variable modeling. This phenomenon could stem from excessive feature space optimization caused by high-frequency data reuse inherent in the ten-fold cross-validation framework. The principal component analysis (PCA) indicated that the relative importance of eleven input variables for compressive strength could be arranged in a descending order as follows: GGBFS; curing time, Na_2SiO_3, total aggregates, CA/FA, superplasticizer, OPC, SF, curing temperature, FA, and NaOH; and those for slump could be arranged in a descending order as follows: CA/FA, curing time, superplasticizer, SF, Na_2SiO_3, GGBFS, OPC, total aggregates, curing temperature, NaOH, and FA.

Keywords dual-output model; neural networks; alkali-activated concrete; compressive strength; slump