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.0454-5648.20250381

基于多目标寻优的低碳混凝土智能设计

元 强，夏 瑞，刘 易，马嘉璐

(中南大学土木工程学院，高速铁路建造技术国家工程研究中心，长沙 410075)

摘 要：本工作基于人工智能(AI)的低碳混凝土性能预测与配合比优化设计方法。建立了低碳混凝土数据集处理模块，采用归一化处理和基于密度的空间聚类算法(DBSCAN)显著提升了数据质量。建立了粒子群优化算法(PSO)优化的极限梯度提升(XGB)模型，实现了低碳混凝土抗压强度和电通量的准确预测。为实现低碳混凝土性能与碳排放的最优平衡，引入了碳强度指标(C_i)和抗氯离子渗透碳效指标(Q_i)并建立了相关预测优化模型，并通过沙普利加性解释方法(SHAP)分析讨论了各组分的影响机制。最后，采用第三代非支配排序遗传算法(NSGA-Ⅲ)进行了碳排放、经济成本、力学性能与耐久性能间的协调寻优，在工程性能与环境影响中寻找最优平衡，确定了针对不同设计需求的最佳配比。研究发现，在满足力学性能要求(抗压强度>50 MPa)和抗氯离子渗透性(电通量<500 C)的前提下，通过优化再生骨料和辅助胶凝材料掺量，可将碳排放控制在 240~260 kg/m^3 范围内。该研究为低碳混凝土材料性能和碳排放之间的平衡设计提供了新思路和方法，推动了 AI 技术在低碳混凝土配合比设计中的应用。

关键词：低碳混凝土；机器学习；多目标优化；力学性能；抗氯离子渗透性
中图分类号：TP181；TU528　　**文献标志码**：A　　**文章编号**：0454–5648(2026)03–0878–16
网络出版时间：2026–02–10



人类活动产生的 CO_2 正持续加剧温室效应，由此引发的极端气候变化等问题严重威胁全球经济社会的可持续发展[1]。混凝土作为用量最大的建筑材料，其主要组分水泥在生产过程中会排放大量 CO_2。据统计，水泥生产过程中产生的 CO_2 约占全球碳排放总量的 8%[2]。随着建筑业的快速发展和环保要求的不断提高，开发及推广满足工程应用要求的低碳混凝土材料对推动建筑行业的可持续发展具有重要意义。

低碳混凝土指的是在满足各项工程性能要求的同时，通过优化胶凝材料体系、提高固体废弃物利用率及利用碳捕捉等低碳技术，实现全生命周期低 CO_2 排放的混凝土材料[3, 4]。应用再生骨料是降低混凝土碳排放的有效途径，但再生骨料表面附着的老砂浆层及其高吸水率会引起界面过渡区的削弱[5, 6]。这构成了混凝土内部的薄弱环节，不仅使混凝土抗压强度下降 15%~30%，其高孔隙特性也为氯离子等有害离子传输提供了通道，进而损害混凝土抗氯离子渗透性等耐久性能[7, 8]。与此同时，粉煤灰、矿渣和硅灰等辅助胶凝材料替代部分水泥也可以降低碳排放，但不合理掺入会导致混凝土的力学性能和耐久性显著劣化[9–11]。虽然已有研究致力于通过优化复合胶凝体系来缓解这些问题[12, 13]，但如何在有效降低碳排放的同时兼顾混凝土的力学性能和耐久性等关键工程性能指标，依然是低碳混凝土配合比设计中亟待解决的核心矛盾。

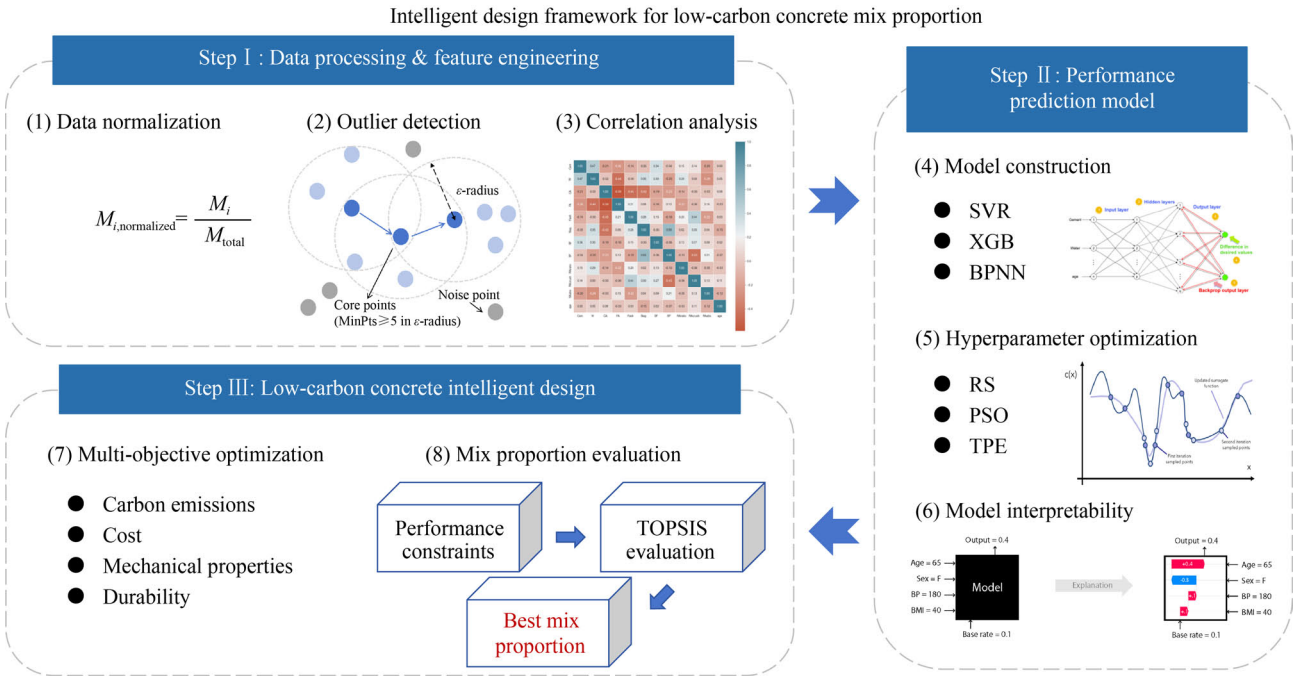
此外，混凝土材料体系多元组分间的复杂交互作用使得配合比设计高度复杂。水胶比、辅助胶凝材料种类与掺量、再生骨料替代率等参数形成了一个高维非线性设计空间。传统试错法在效率、成本与精度方面存在明显不足。为应对这一挑战，部分研究者引入人工神经网络(ANN)等机器学习方法，用于再生骨料混凝土(RAC)的性能预测，有效克服了传统经验公式难以捕捉复杂非线性关系的难题[14]。随后，通过将优化算法与机器学习模型相结合，不仅显著提升了预测精度，还实现了在多种约束条件下对配合比的优化设计[15, 16]。然而，现有研究多聚焦于单一性能指标的预测与优化，缺乏对力

收稿日期：2025–05–14。　修订日期：2025–06–03。
基金项目：国家重点研发计划(2022YFB2602604)；中国中铁股份有限公司科技研究开发计划(2023-重大-08)。
第一作者：元 强(1981—)，男，博士，教授

Received date: 2025–05–14.　**Revised date:** 2025–06–03.
First author: YUAN Qiang (1981–), male, Ph.D., Professor.
E-mail: yuanqiang@csu.edu.cn

学性能、耐久性、碳排放和经济成本等多目标协同优化的系统性研究[17]；另一方面，许多模型未能有效权衡环境效益与混凝土性能之间的关系，导致优化策略缺乏充分的决策依据，限制了人工智能在低碳混凝土设计中的应用。

本工作提出一种基于人工智能的低碳混凝土智能设计优化方法，首先，通过归一化处理、异常值处理等数据预处理手段，提升原始数据集质量。通过对比不同超参数优化方法下的各模型在该数据集中的表现，实现关键性能指标的高精度预测，结合 SHAP 分析揭示配比参数对混凝土性能的具体影响机制。进一步，采用 NSGA-Ⅲ算法实现碳排放、经济成本、强度和抗氯离子渗透性能的多目标协同优化。为量化环境效益与混凝土性能的综合表现，本工作引入 C_i (碳强度指标)和 Q_i (抗氯离子渗透碳效指标) 2 个指标，并建立了基于机器学习的预测优化模型，以实现混凝土的材料性能和低碳表现的综合评价和协同优化。



Note: SVR—support vector regression; XGBoost—eXtreme gradient boosting; BPNN—Backpropagation neural network; RS—Random search; PSO—Particle swarm optimization; TPE—Tree-structured parzen estimator.

图 1　低碳混凝土配合比智能设计框架

Fig. 1　Intelligent design framework for low-carbon concrete mix proportion

1　机器学习与多目标优化算法

1.1　数据集与数据预处理

1.1.1　原始数据集　　本工作根据以下标准从文献中提取相关数据，构建了数据集：水泥强度等级为 P.O 42.5；再生骨料为不含砖块及其他尾矿成分的混凝土拆除废弃物，仅作为粗骨料使用；高效减水剂为聚羧酸高效减水剂。遵循这些标准，收集并建立了包含 1115 个混凝土抗压强度(CS)和 198 个混凝土电通量(Q)样本的数据集，数据集来源见附录 1。本工作选择的输入参数包括水泥(Cement)、水(Water)、天然粗骨料(NCA)、再生粗骨料(RCA)、天然砂(Sand)、粉煤灰(FA)、矿渣(Slag)、硅灰(SF)、减水剂(SP)以及龄期(Age)。根据已有研究发现，再生混凝土骨料的吸水率(RA WA)和压碎指标(RA CI)对模型预测的准确性具有重要影响[18]。因此，这些参数也被纳入输入指标进行分析。表 1 提供了数据集的输入特征和输出目标及数据分布概述。

1.1.2　归一化处理　　不同特征变量间存在的维度差异问题会导致数据可比性降低，进而对预测模型的性能产生负面影响[19, 20]。常用的解决方案是归一化处理，通过线性变换将原始数据映射至[0,1]的标准区间，消除维度不同对预测结果的影响，如式(1)所示。表 2 所示为数据归一化前后混凝土各组分的范围。

$$M_{i,\text{normalized}}=\frac{M_i}{M_{\text{total}}} \tag{1}$$

式中：M_i 为各个组分的质量；M_{total} 为混凝土的总质量。

表 1 原始数据集的分布

Table 1 Distribution of origin dataset

Parameter type	Variable	Unit	Data (CS)				Data (*Q*)			
			Min	Max	Ave	Med	Min	Max	Ave	Med
Input	Cement	kg/m^3	57.6	765.4	325.2	333.5	175.5	485.0	335.4	316.1
	Water	kg/m^3	96.3	281.0	177.1	175.0	96.3	225.0	170.2	170.0
	NCA	kg/m^3	0.0	1366.0	554.4	578.0	0.0	1366.0	558.7	570.0
	RCA	kg/m^3	0.0	1320.0	525.4	506.0	0.0	1170.0	512.8	506.0
	Sand	kg/m^3	488.0	1170.0	730.4	709.0	480.0	1031.0	724.6	696.0
	FA	kg/m^3	0.0	390.0	29.3	0.0	0.0	225.5	34.8	0.0
	Slag	kg/m^3	0.0	214.5	21.0	0.0	0.0	214.5	15.1	0.0
	SF	kg/m^3	0.0	200.0	6.7	0.0	0.0	140.0	11.0	0.0
	SP	kg/m^3	0.0	15.3	2.3	0.0	0.0	11.3	3.3	3.5
	RA CI	%	11.8	29.2	19.5	18.3	12.8	30.2	23.4	29.0
	RA WA	%	1.4	8.8	5.1	5.0	3.0	6.5	4.6	4.8
	Age	d	3.0	91.0	32.8	28.0	28.0	90.0	48.1	28.0
Output	CS	MPa	7.2	89.8	37.6	35.3				
	Q	C					412.2	7 773.0	1 943.5	2 908.0

表 2 数据归一化前后混凝土各组分的范围

Table 2 Ranges of concrete components before and after normalization

Components	Data (CS)		Data (*Q*)	
	Original data/(kg·m^{-3})	After normalization	Original data/(kg·m^{-3})	After normalization
Cement	57.6–765.4	2.4–30.1	175.5–485.0	4.2–20.9
Water	96.3–281.0	4.2–11.5	96.3–225.0	6.9–10.3
NCA	0.0–1366.0	0.0–55.4	0.0–1366.0	0.0–53.5
RCA	0.0–1320.0	0.0–54.1	0.0–1170.0	0.0–49.4
Sand	488.0–1170.0	20.6–59.1	480.0–1031.0	19.6–44.7
FA	0.0–390.0	0.0–16.5	0.0–225.5	0.0–10.3
Slag	0.0–214.5	0.0–9.3	0.0–214.5	0.0–9.3
SF	0.0–200.0	0.0–8.7	0.0–140.0	0.0–6.1
SP	0.0–15.3	0.0–0.6	0.0–11.3	0.0–0.5

1.1.3 异常值处理 原始数据来源的多样性会导致数据质量存在波动。这会严重影响机器学习模型的预测，进而对混凝土配合比设计的准确性与可靠性造成不利影响[21]。为有效识别并处理这些异常值，本工作采用了基于密度的空间聚类算法(DBSCAN)进行筛选(见图 2)。DBSCAN 检查每个点，如果在其邻域半径(ε)内至少包含最小邻域点数(MinPts)，则该点被视为核心点，进而连接成簇；反之，不满足此密度要求的点则可能被识别为异常值。

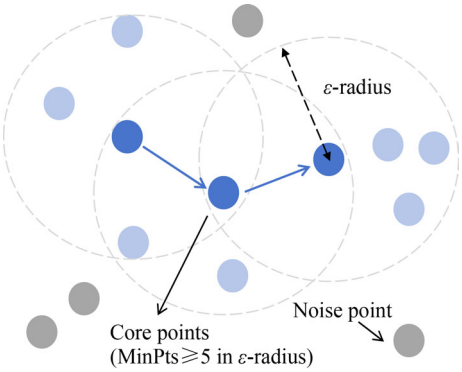


图 2 DBSCAN 原理

Fig. 2 Principle of DBSCAN

1.2 机器学习预测模型

1.2.1 机器学习算法 考虑到数据集的样本量较小且特征维度较高，支持向量回归(SVR)、极限梯度提升(XGB)和反向传播神经网络(BPNN)是当前处理此类高维小样本问题的经典且有效的选择，在低碳混凝土领域得到了广泛的应用[18]。

SVR 是一种通过构建超平面来进行回归预测的算法，其目标是使模型在高维特征空间中找到一个最优超平面，同时允许一定范围内的误差。XGB 是一种基于梯度提升决策树(GBDT)的算法，具备高效

的并行计算能力和出色的泛化性能。通过迭代训练，XGB 在每一轮中都会训练一个新的弱分类器，并通过加权调整逐步修正前一轮的误差。BPNN 是一种多层前馈神经网络，其训练过程基于梯度下降和误差反向传播原理。在每次训练迭代中，BPNN 通过计算输出误差并反向传播，逐步调整网络中的权重，最小化损失函数。

1.2.2　超参数优化　　超参数的选择对模型性能有着重要影响,不当的超参数会导致模型欠拟合或过拟合。数据集按照 7∶3 的比例进行划分，其中 70%用作训练集，30%用作测试集。为了确保模型的泛化能力并获得最优的超参数，在训练集上采用十折交叉验证(见图 3)结合随机搜索(RS)、粒子群优化算法(PSO)和基于树结构的贝叶斯优化算法(TPE) 3 种方法进行超参数优化。

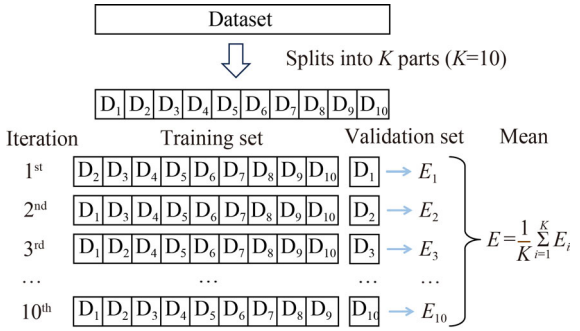


图 3　10 折交叉验证原理

Fig. 3　Principle of 10-fold cross-validation

随机搜索是一种简单高效的超参数优化方法，通过在超参数空间中随机采样来寻找最优组合，相较于网格搜索，它能更广泛地探索参数空间。粒子群优化算法是一种基于群体智能的优化方法，通过迭代调整超参数组合(即“粒子”)的位置，依据个体和群体的历史经验逐步逼近最优解。Optuna 库中的 TPE 算法则是一种基于贝叶斯优化的方法，通过构建超参数的概率模型指导搜索，优先探索表现优异的参数区域，从而提升优化效率。

1.2.3　模型评估　　为全面评估模型的预测性能，通过多种统计指标进行量化分析，包括平均绝对误差(MAE)、均方根误差(RMSE)、决定系数(R^2)和解释方差分数(EV)。其中，MAE 和 RMSE 用于衡量预测值与真实值之间的误差，数值越小代表预测越准确；R^2 反映模型对观测数据的拟合程度，取值越接近 1 表示模型解释能力越强；EV 则评估模型对数据方差的解释程度，值越高说明模型对数据变异性的解释越充分。

$$\mathrm{MAE}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}|y_i-\hat{y}_i| \tag{2}$$

$$\mathrm{RMSE}=\sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i-\hat{y}_i)^2} \tag{3}$$

$$R^2=1-\frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i-\hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^{n}(y_i-\bar{y}_i)^2} \tag{4}$$

$$\mathrm{EV}=1-\frac{\mathrm{Var}(y-\bar{y})}{\mathrm{Var}(y)} \tag{5}$$

式中：y_i 为实际观测值；$\hat{y}_i$ 为模型预测值；$\bar{y}$ 为实际观测值的均值；n 为样本数量；Var 为数据的方差。

1.3　混凝土经济和环境效益评价方法

1.3.1　成本计算　　为简化计算并提高可操作性，采用生命周期评估方法，聚焦原材料生产及运输阶段。混凝土的单方成本(C)可表示为：

$$C=\sum_{i=1}^{n}P_i\cdot M_i+C_\mathrm{t} \tag{6}$$

式中：P_i 和 M_i 分别为第 i 种原材料的单价，元/t 和用量，kg/m^3；C_t 为运输成本，元/m^3。各类原材料的市场价格参考 2024 年 12 月的全国平均价格水平：水泥(P.O 42.5)335 元/t，水 3.32 元/t，天然粗骨料 80 元/t，再生粗骨料 58 元/t，天然砂 89 元/t，粉煤灰 75 元/t，矿渣 205 元/t，硅灰 650 元/t，减水剂 3300 元/t。

运输成本(C_t)计算公式为：

$$C_\mathrm{t}=\sum_{i=1}^{n}M_i\times X_\mathrm{t}\times D_{i\mathrm{t}} \tag{7}$$

式中：X_t 为单位运输成本，取 1.74 元·t^{-1}·km^{-1}；$D_{i\mathrm{t}}$ 为材料 i 运往目的地的距离(见表 3)。

表 3　材料运输距离

Table 3　Material transportation distance

Raw materials	Cement	FA	Slag	SF	Sand	NCA	RCA	SP
Transportation distance/km	32	120	90	150	30	50	100	70

1.3.2　碳排放计算　　通过生命周期评价(LCA)对混凝土各组分材料的碳排放因子进行计算，系统地量化混凝土原材料生产、运输和拌制全过程的碳排放[22–23]，这些碳排放因子的计算基于政府间气候变化专门委员会(IPCC)的方法，本工作主要参考了文献[22]中的数据，混凝土的单方碳排放量(E)计算如下：

$$E=\sum_{i=1}^{n}(F_i\cdot M_i) \tag{8}$$

式中：F_i 为第 i 种原材料的单位体积碳排放量(见表 4)。

表 4 各原材料的单位体积碳排放量

Table 4 Volumetric carbon emission factors of various raw materials

Raw materials	Cement	Sand	Water	SP	NCA	RCA	FA	Slag	SF
F_i/(kg·m^{-3})	735.000	2.510	0.168	1 064.000	0.531	–1.725	21.000	191.000	218.000

1.3.3 碳效指标计算 为量化混凝土材料的环境效益与性能之间的关系，引入了碳强度指标(C_i)和抗氯离子渗透碳效指标(Q_i) 2 个评价指标[24]。碳强度指标 C_i 定义为单位抗压强度对应的碳排放量，其计算公式为：

$$C_i = \frac{E}{f_c} \tag{9}$$

式中：E 为混凝土的单方碳排放量；f_c 为混凝土的抗压强度。C_i 值越低，表明单位碳排放所能贡献的强度越大，即材料实现给定强度水平所需的碳足迹越小。

抗氯离子渗透碳效指标 Q_i 则反映了单位耐久性能所对应的碳排放，由于电通量(Q)值与混凝土抗氯离子渗透能力成反比，为合理压缩指标数值范围，引入 3 次方处理，其计算公式为：

$$Q_i = \sqrt[3]{\frac{E}{1/Q}} = \sqrt[3]{EQ} \tag{10}$$

式中：Q_i 值越低，表明混凝土在提供耐久性方面的碳效率越高，即以较低的环境代价获得较好的耐久性能。

1.4 多目标分析与决策

混凝土配合比设计需要在碳排放、经济成本、抗压强度和抗氯离子渗透性能等多个目标之间进行平衡，因此需要选择合适的多目标优化方法。第三代非支配排序遗传算法(NSGA-Ⅲ)通过非支配排序和参考点选择机制，适合处理多目标(3 目标及以上)问题，能有效探索 Pareto 前沿。在 Pareto 解集的基础上，引入 C_i 和 Q_i 作为决策工具。通过比较 C_i 和 Q_i 值筛选候选方案，依据不同应用场景，优先选择两者均较低的方案，以实现低碳与性能的最佳平衡。

优化问题可表述为：

$$\begin{cases} \min \quad E(x), C(x), Q(x) \\ \max \quad f_c(x) \\ \text{s.t.} \quad \sum x_i = 2400 \ \text{kg/m}^3 \\ \qquad x_i^{\min} \leqslant x_i \leqslant x_i^{\max} \end{cases} \tag{11}$$

式中：x 为决策变量向量，包含水泥、再生骨料、矿物掺合料等配比参数。

2 低碳混凝土预测模型

2.1 数据处理

通过分析 ε-距离图(见图 4)中距离曲线的拐点确定邻域半径 ε 分别为 0.12 和 0.15，并基于经验法则将最小样本数 MinPts 设置为特征维度加 1(即 13)，这些参数的选择既保证了算法对异常值的识别能力，又避免了过度剔除有效数据[25]。

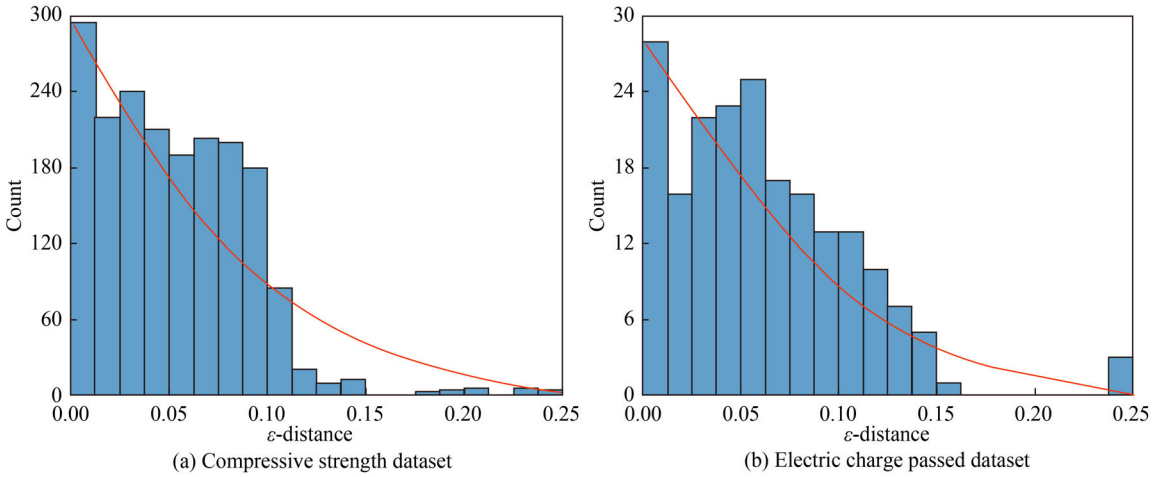


图 4 用于确定 ε 值的 ε-距离图

Fig. 4 ε-distance graph for ε value selection

为了直观地展示异常值处理的效果，通过主成分分析将高维数据映射到二维平面进行可视化，如图 5 所示。由图 5 可见，通过 DBSCAN 算法对数据集进行异常值识别，分别检测出 43 个与抗压强度有关的异常值和 4 个与电通量有关的异常值。这些异常点大多分布在数据集的边缘区域或局部密度较低的区

域，与正常数据群具有明显的空间分离特征，说明 DBSCAN 算法能够有效识别出数据集中的异常样本。剔除这些异常值后的数据集具有更好的聚类特性，为后续机器学习模型的训练提供了更可靠的数据基础。

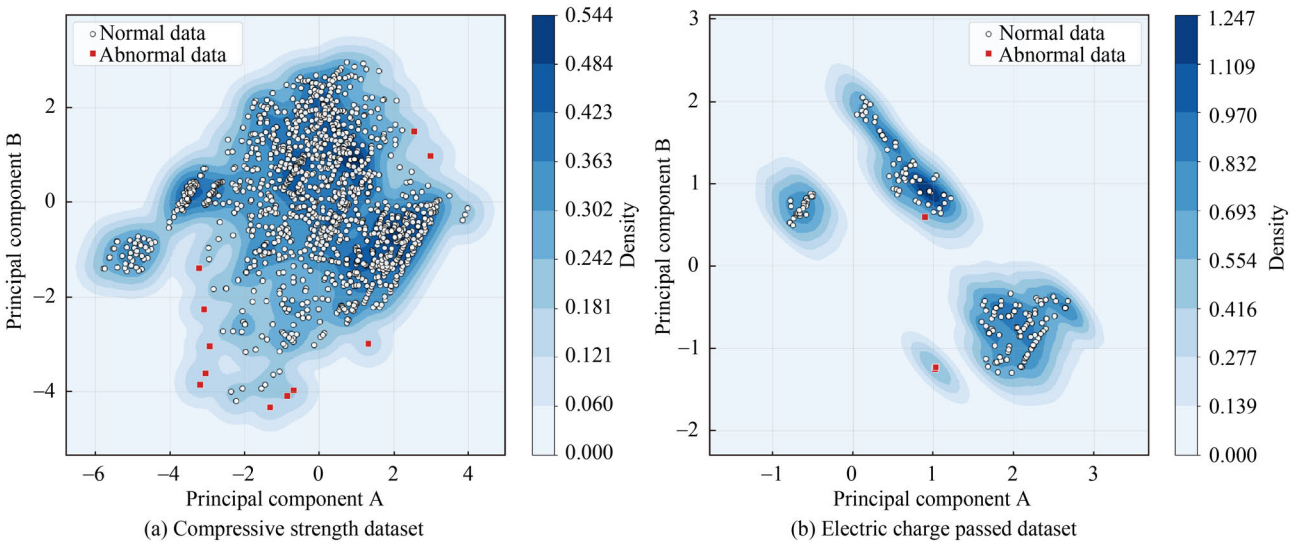


图 5　主成分分析图

Fig. 5　Principal component analysis plot of outlier detection

为评估输入变量间的线性依赖关系并识别潜在的多重共线性问题，本工作进行了相关性分析，结果如图 6 所示。由图 6 可见，当 2 个输入变量之间的相关系数绝对值高于 0.6 时，存在较强的线性相关性，会引发多重共线性问题，从而影响模型的稳定性和可解释性。本工作使用的输入特征之间不存在显著的多重共线性风险。因此，该数据集可以用于后续的机器学习模型构建，无需采取额外的特征选择或降维处理来特别解决多重共线性问题。

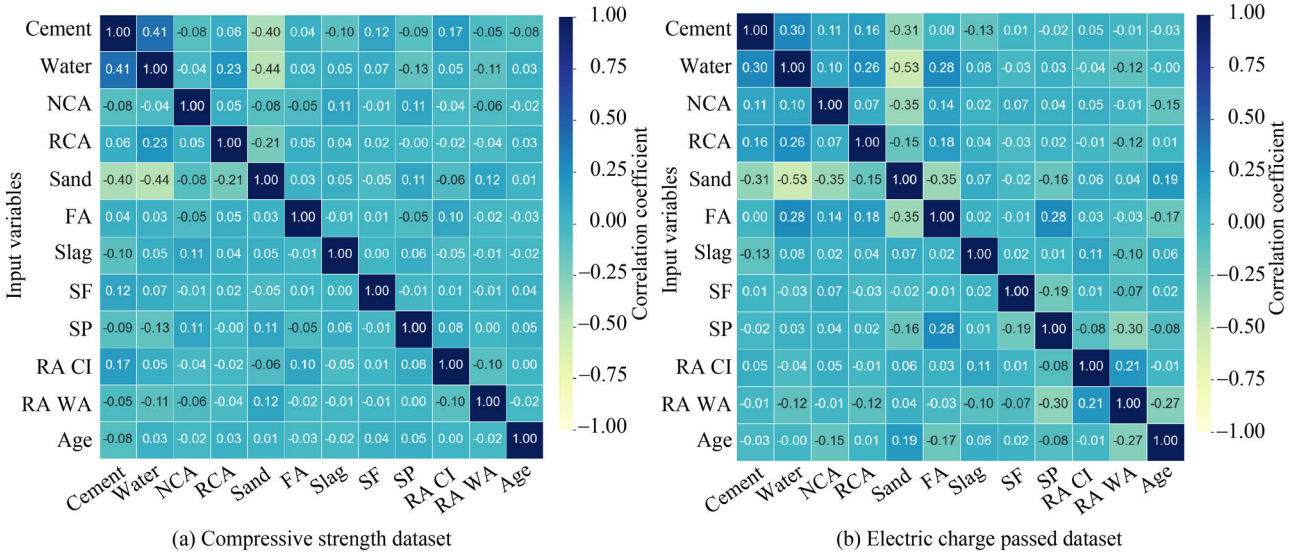


图 6　输入变量的相关性

Fig. 6　Correlation of input variables

2.2　模型选择

表 5 和表 6 分别为采用不同超参数优化方法优化的 3 种机器学习模型在预测混凝土性能(CS、Q)和碳效指标(C_i、Q_i)方面的精度。由表 5 和表 6 可知，XGB 模型在 4 个预测指标上均表现出最优越的性能。无论采用何种优化算法，XGB 模型在训练集和测试集上普遍获得了最高的 R^2、EV 以及最低的 RMSE、MAE。例如，在预测 CS 时，PSO-XGB 在测试集上的 R^2 达到 0.91，显著优于表现最好的 SVR (TPE-SVR R^2=0.80)和 BPNN (RS-BPNN R^2=0.87)。

对于 C_i 和 Q_i，XGB 的优势更为明显，其测试集 R^2 普遍高于 0.90，其中，PSO-XGB 在预测 Q_i 时测试集 R^2 达到了 0.93，显示出极高的预测精度和良好的泛化能力。相比之下，SVR 和 BPNN 模型在各项指标上的表现较为逊色。

对比 3 种超参数优化算法(RS、PSO、TPE)对模型性能的影响，结果表明优化算法的选择对最终预测精度的提升作用相较于基础模型的选择(特别是 XGB)而言不甚显著。虽然在某些情况下，PSO 或 TPE 能够为 SVR 和 BPNN 模型带来轻微的性能改善(例如，PSO-SVR 和 TPE-SVR 在预测 Q 时的测试集 R^2 略高于 RS-SVR)，但对于性能本就出色的 XGB 模型，不同优化算法带来的差异很小。模型对于 C_i 和 Q_i 的预测精度普遍较高，特别是 XGB 模型，其极低的误差值(如 TPE-XGB 预测 Q_i 的测试集 MSE 为 0.55)表明该模型能有效捕捉材料性能与其隐含碳排放之间的复杂关系。总体而言，所有模型在测试集上的表现虽略低于训练集，但未出现严重的过拟合现象，其中，XGB 模型展现了最佳的预测稳定性和泛化性能。

表 5 不同模型对混凝土性能的预测精度评估

Table 5 Performance evaluation of different models in predicting concrete properties

Model	CS metrics				Q metrics			
	RMSE	MAE	R^2	EV	RMSE	MAE	R^2	EV
RS-SVR	4.61 (6.02)	2.81 (4.30)	0.87 (0.78)	0.87 (0.77)	499.16 (654.25)	318.07 (484.80)	0.83 (0.81)	0.83 (0.81)
PSO-SVR	4.00 (5.62)	2.30 (3.98)	0.90 (0.80)	0.90 (0.81)	465.14 (632.48)	274.33 (438.28)	0.85 (0.82)	0.85 (0.82)
TPE-SVR	4.12 (5.66)	2.41 (4.01)	0.89 (0.80)	0.89 (0.80)	454.56 (654.01)	261.00 (454.20)	0.86 (0.81)	0.86 (0.81)
RS-XGB	0.73 (3.76)	0.49 (2.68)	1.00 (0.91)	1.00 (0.91)	51.08 (532.62)	29.12 (366.75)	1.00 (0.87)	1.00 (0.88)
PSO-XGB	0.94 (3.75)	0.69 (2.69)	0.99 (0.91)	0.99 (0.91)	50.10 (495.54)	32.65 (328.66)	1.00 (0.89)	1.00 (0.89)
TPE-XGB	0.71 (3.81)	0.48 (2.67)	1.00 (0.91)	1.00 (0.91)	85.85 (523.92)	61.95 (353.42)	0.99 (0.88)	0.99 (0.88)
RS-BPNN	2.58 (4.60)	1.87 (3.39)	0.96 (0.87)	0.96 (0.87)	200.61 (585.91)	138.17 (418.29)	0.97 (0.82)	0.97 (0.82)
PSO-BPNN	2.21 (4.66)	1.56 (3.31)	0.97 (0.86)	0.97 (0.86)	225.69 (563.37)	164.07 (399.42)	0.97 (0.83)	0.97 (0.83)
TPE-BPNN	2.89 (4.70)	2.14 (3.38)	0.95 (0.86)	0.95 (0.87)	279.90 (600.20)	212.05 (453.00)	0.95 (0.81)	0.95 (0.82)

Format: Training (Testing), *e.g.*, 4.61 (6.02)=Training RMSE 4.61 (Testing RMSE 6.02).

表 6 不同模型对混凝土碳效指标的预测精度评估

Table 6 Performance evaluation of different models in predicting concrete carbon-efficiency indices

Model	C_i metrics				Q_i metrics			
	RMSE	MAE	R^2	EV	RMSE	MAE	R^2	EV
RS-SVR	0.94 (1.36)	0.43 (0.90)	0.91 (0.82)	0.91 (0.82)	3.16 (5.88)	0.63 (4.19)	0.96 (0.90)	0.96 (0.90)
PSO-SVR	0.98 (1.34)	0.49 (0.90)	0.90 (0.83)	0.90 (0.83)	3.55 (5.69)	1.15 (4.37)	0.95 (0.91)	0.95 (0.91)
TPE-SVR	0.93 (1.36)	0.45 (0.89)	0.91 (0.82)	0.91 (0.82)	3.39 (5.69)	1.17 (4.20)	0.96 (0.91)	0.96 (0.91)
RS-XGB	0.32 (1.10)	0.20 (0.71)	0.99 (0.89)	0.99 (0.89)	1.93 (5.74)	1.25 (4.45)	0.99 (0.90)	0.99 (0.91)
PSO-XGB	0.38 (1.00)	0.24 (0.68)	0.99 (0.91)	0.99 (0.91)	1.41 (4.89)	0.93 (3.75)	0.99 (0.93)	0.99 (0.93)
TPE-XGB	0.38 (1.01)	0.25 (0.67)	0.98 (0.91)	0.98 (0.91)	0.92 (5.74)	0.55 (4.46)	1.00 (0.93)	1.00 (0.91)
RS-BPNN	0.97 (1.25)	0.71 (0.91)	0.90 (0.85)	0.91 (0.86)	5.29 (6.90)	3.85 (5.15)	0.90 (0.86)	0.90 (0.86)
PSO-BPNN	0.76 (1.23)	0.59 (0.89)	0.94 (0.86)	0.96 (0.87)	3.91 (5.35)	2.80 (4.13)	0.94 (0.92)	0.94 (0.92)
TPE-BPNN	0.65 (1.19)	0.47 (0.85)	0.96 (0.86)	0.96 (0.87)	4.98 (6.43)	3.77 (4.90)	0.91 (0.88)	0.91 (0.88)

Format: Training (Test), *e.g.*, 4.61 (6.02)=Training RMSE 4.61/Test RMSE 6.02.

基于前述模型性能比较结果，本工作选用综合表现最优的 PSO-XGB 模型进行后续分析。该模型的超参数优化结果见表 7。同时，图 7 直观展示了 PSO-XGB 模型在各项混凝土性能预测任务中的优异表现。由图 7 可见，该模型不仅在训练集上实现了高精度拟合(所有任务 $R^2 > 0.98$)，在测试集上也展现出强大的泛化能力，对抗压强度、氯离子渗透电通量、碳强度指标以及抗氯离子渗透碳效指标的预测 R^2 分别达到了 0.906、0.891、0.909 和 0.930。这种高精度和高鲁棒性为后续开展基于机器学习的混凝土智能优化设计提供了可靠的模型支撑。

表 7　PSO-XGB 超参数优化结果

Table 7　PSO-XGB Hyperparameter Optimization Results

Metric (PSO-XGB)	*n*_estimators	Learning_rate	Max_depth	Subsample	Colsample_bytree	Gamma	Min_child_weight	Reg_lambda	Reg_alpha
Search scope	(1, 300)	(0.01, 0.3)	(3, 10)	(0.5, 1.0)	(0.5, 1.0)	(0, 10)	(0, 10)	(0, 1)	(0, 1)
Compressive strength	292	0.0846	5	0.7911	0.7841	0.7820	3.2937	0.1972	0.8818
Electric charge passed	159	0.0852	6	0.7512	0.8612	4.4591	2.5298	0.9129	0.2449
Carbon intensity index	210	0.0513	6	0.8841	0.9558	0.0742	1.0106	0.1435	0.5058
Chloride penetration resistance carbon efficiency index	241	0.0807	9	0.6697	0.9122	2.7761	4.2313	0.5102	0.5787

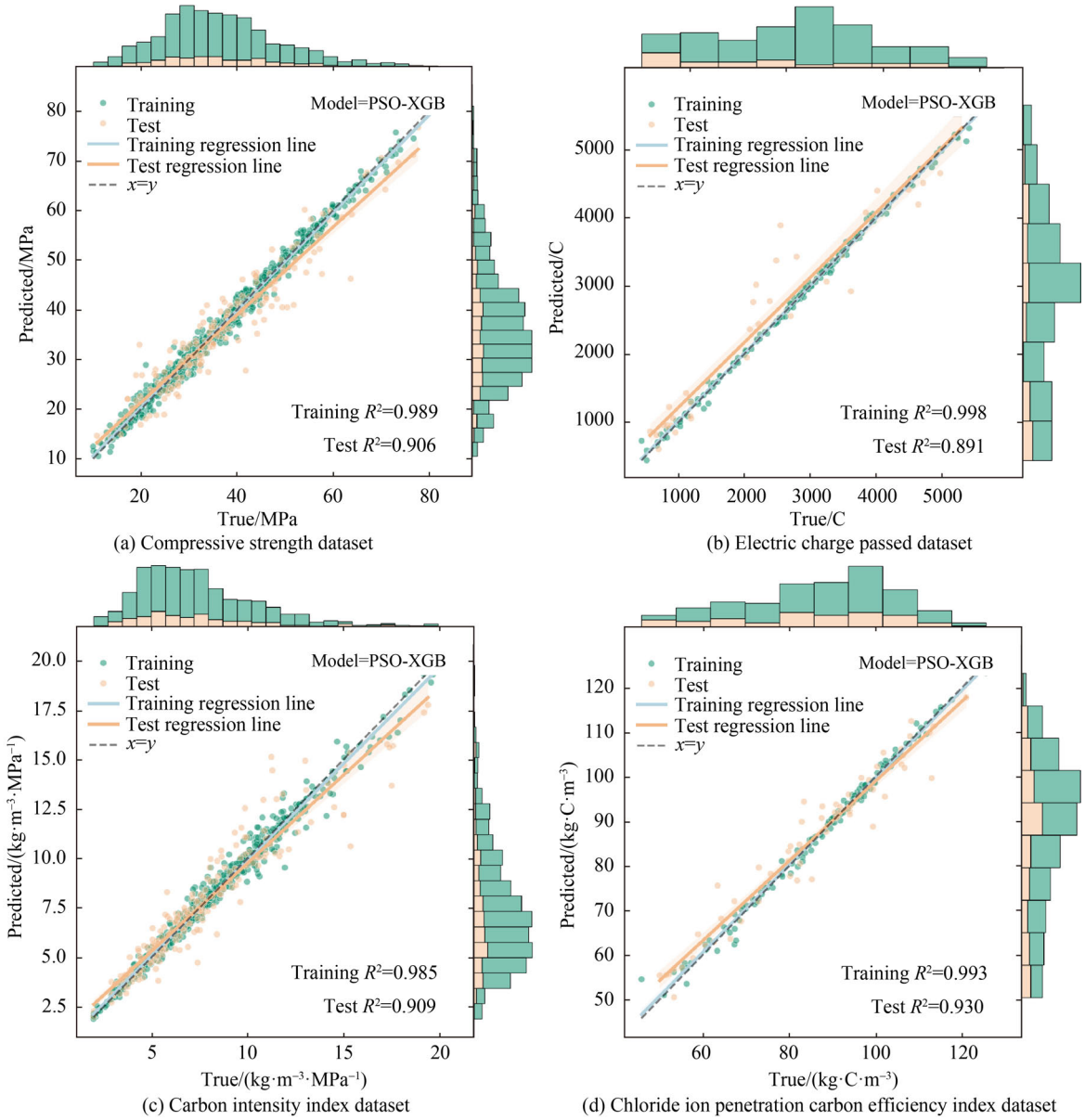


图 7　PSO-XGB 模型在预测混凝土性能指标时的散点图

Fig. 7　Scatter plots of PSO-XGB model predictions for concrete performance metrics

2.3　可解释性分析

为深入探究配比参数对混凝土性能的具体影响机制，本工作采用沙普利加性解释方法(SHAP)对表现最优的 PSO-XGB 模型进行了解释性分析。该方法基于博弈论原理，通过计算各参数对模型预测结果的边际贡献值，来揭示各参数的影响方向和程度。

图 8 为针对 CS 和 C_i 预测模型的 SHAP 分析结果。由图 8a 可见，影响抗压强度预测的关键特征及其贡献度中，水泥用量与水用量被识别为影响 CS

的最主要因素。水泥作为主要胶凝材料，其用量的增加直接提供了更多的水化产物，从而对强度产生显著的正向贡献。相反，水用量的增加，导致硬化浆体孔隙率增大，进而对强度产生负面影响，这一结果与公认的混凝土强度理论高度吻合，验证了所建模型的可靠性。此外，再生骨料的特性指标也显示出对 CS 的显著影响：较高的压碎指标通常对应负 SHAP 值，这反映了骨料强度较低对混凝土整体强度的负面作用；同时，较高的吸水率也倾向于降低 CS，因为高吸水率通常意味着骨料内部孔隙较多，导致界面过渡区(ITZ)性能劣化[26]。

相较之下，图 8b 揭示了影响碳强度指标的关键特征及其贡献度。C_i 作为评价环境影响和力学性能综合表现的指标，其影响因素更为复杂。水泥用量和水用量依然是影响 C_i 的主导因素。然而，与 CS 模型不同，水泥用量在此处呈现极强的正向贡献，表明其对强度的增益效果远不足以抵消其高隐含碳排放对 C_i 产生的负面效应，这直接体现了高性能与低碳之间的核心矛盾。在此背景下，粉煤灰掺量的重要性显著提升，成为降低 C_i 的关键因素之一，其主要机制在于有效替代部分水泥，从而大幅削减混凝土的碳排放量。再生骨料的使用倾向于增加 C_i，这主要是因为较差的骨料质量对强度产生的劣化效应超过了其替代天然骨料带来的碳减排效益。矿渣和硅灰虽然理论上也有助于降低碳排放并改善性能，但在此数据集中可能因其掺量普遍较小，故对 C_i 的整体影响不如水泥和粉煤灰显著。

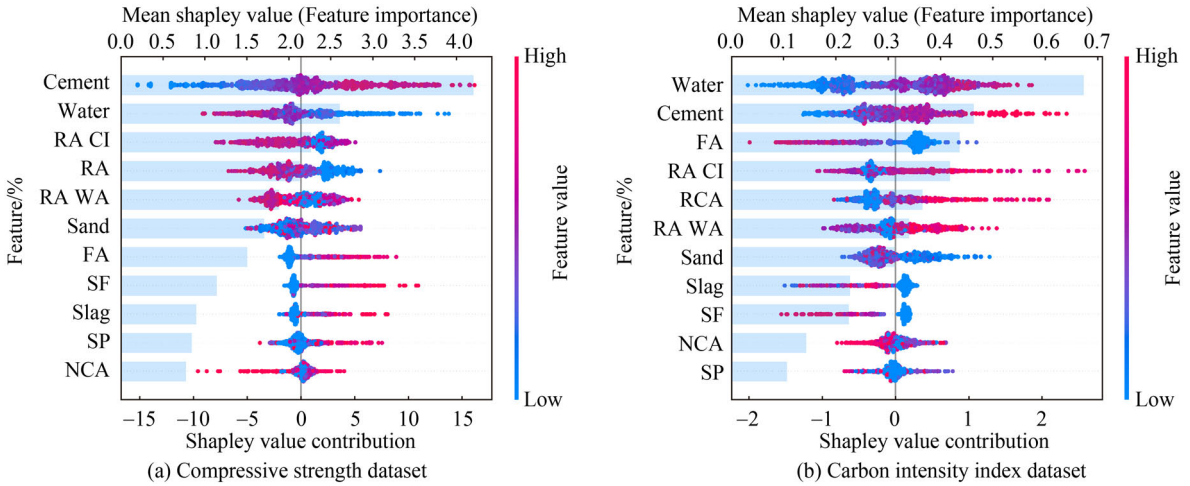


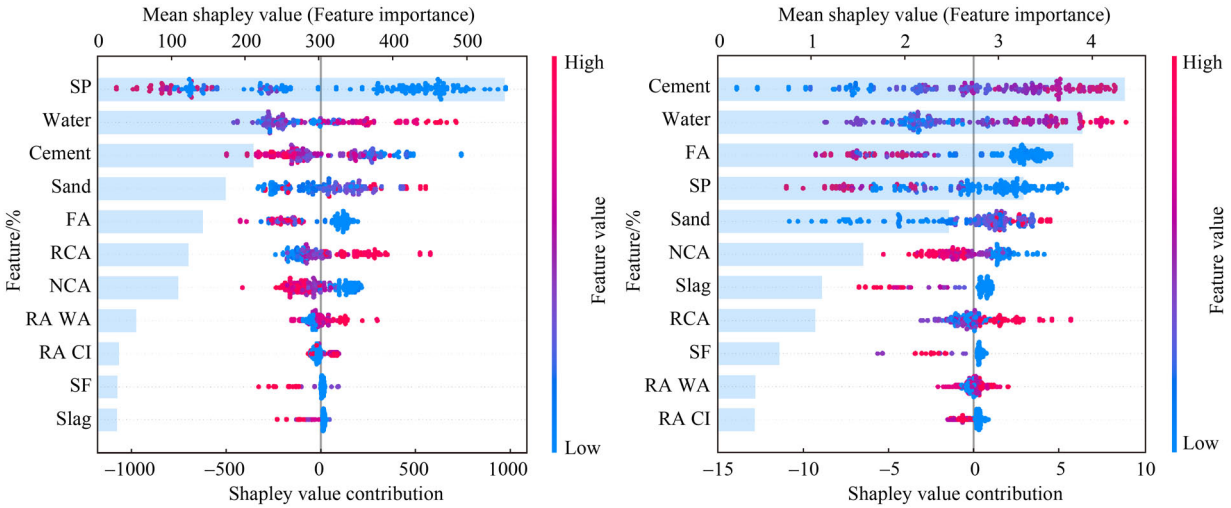
图 8 基于 PSO-XGB 模型的 SHAP 分析

Fig. 8 SHAP analysis based on the PSO-XGB model

同时，本工作利用 SHAP 分析探究了影响混凝土抗氯离子渗透性能(以电通量 Q 衡量，见图 9a)及相应的抗氯离子渗透碳效指标(Q_i，见图 9b)的关键因素。

图9a为影响电通量预测的关键特征及其贡献度，其中，较低的电通量代表更优异的抗氯离子渗透性能。分析显示，减水剂用量是影响预测的最主要因素。较高的减水剂用量普遍对应负的 SHAP 值，表明适量地增加减水剂用量能显著降低电通量。减水剂的使用能在保持流动性的前提下降低水胶比，从而形成更致密的微观结构，阻碍氯离子传输[27]。水用量和水泥用量也是影响电通量的重要因素。较高的用水量显著增加了电通量。水泥用量的增加则有助于降低电通量。矿物掺合料如粉煤灰、矿渣和硅灰的掺入同样显示出降低电通量的效果。再生骨料的特性指标，如吸水率和压碎指标，也对电通量产生影响，质量较差的再生骨料(高 RA WA、高 RA CI)通常会导致电通量升高。

图 9b 则揭示了影响抗氯离子渗透碳效指标的因素。分析结果显示，水泥用量和水用量是对 Q_i 影响最大且为正向贡献的因素。高水泥用量虽然有助于改善性能，但其极高的隐含碳排放使得 Q_i 大幅增加，成为提高碳效率的最大障碍。高水用量则可能同时恶化性能并间接关联更高水泥需求，从而推高 Q_i。与之形成鲜明对比的是，粉煤灰表现出强大的负向贡献，其替代水泥不仅大幅降低了碳排放，同时也能有效提升混凝土的耐久性，因此，极大地提高了抗氯离子渗透的碳效率。减水剂因能显著降低电通量而对 Q_i 产生有益的负向影响，但其自身碳排放高，故影响程度反而不及直接替代水泥的掺合料。再生骨料对耐久性能的劣化效应，超过了其替代天然骨料带来的潜在碳减排优势，从而导致综合碳效率指标 Q_i 升高，这再次突显了性能与环境效益间的内在权衡关系。



(a) Electric charge passed dataset　　(b) Chloride ion penetration carbon efficiency index dataset

图 9　基于 PSO-XGB 模型的 SHAP 分析

Fig. 9　SHAP analysis based on the PSO-XGB model

综合图 8 与图 9 的 SHAP 分析结果，揭示了影响混凝土关键力学性能、耐久性及其对应碳效指标的复杂因素网络和内在权衡关系。水泥用量虽然是提升抗压强度的基石，但同时也是导致 C_i 和 Q_i 恶化的首要因素，清晰地展现了传统高性能化路径与低碳目标之间的核心矛盾。相比之下，矿物掺合料，特别是粉煤灰，在提高环境效益方面发挥着至关重要的作用，其通过替代水泥实现了显著的碳减排，并能有效改善抗氯离子渗透性能。减水剂作为改善耐久性的关键因素，也对提高碳效率做出了贡献。骨料质量对性能的影响十分显著，这印证了在再生混凝土的应用中严格控制骨料质量的重要性。SHAP 分析结果整体与各组分对混凝土性能的影响机理保持一致，再次验证了预测模型的可靠性。

3　低碳混凝土智能设计

3.1　双目标优化分析

为了实现低碳混凝土设计中各关键目标之间的协同优化，本工作进行了双目标的组合优化。通过将 4 个核心目标——抗压强度、电通量、成本和碳排放——进行配对优化，可以清晰地揭示任意 2 个目标之间的制约关系与最优平衡点。在执行这些双目标优化时，采用了 NSGA-III 算法，其优化结果(即不同目标对的帕累托最优前沿)如图 10 所示。此外，为了量化评价每个帕累托最优解在其对应二维目标空间中的综合表现，本工作应用了逼近理想解排序法(TOPSIS)对每个解进行了评分，该值越高表明解越接近理想最优状态。

图 10a 和图 10b 共同揭示了混凝土抗压强度与其经济成本和环境影响之间存在的复杂且非线性的权衡关系。总体而言，提升抗压强度不可避免地导致成本和碳排放的增加。TOPSIS 综合评价进一步量化了这种权衡：在性能与成本的权衡中(图 10a)，最优解集集中在 45~55 MPa 区间，最佳平衡点位于约 48 MPa 处，实现了高强度与低成本的平衡；而在性能与碳排放的权衡中(图 10b)，最佳平衡点则出现在约 34 MPa 处，对应较低的碳排放水平，这表明，在多目标优化中，侧重成本或侧重环境可持续性将引导设计走向不同的强度区间。

图 10c 和图 10d 为混凝土抗氯离子渗透性与成本和碳排放之间的关联。由图 10c 可见，提升抗氯离子渗透性通常会导致成本显著增加。帕累托前沿在低电通量区间(Q<1000 C)呈现近似线性的负相关趋势，即电通量越低成本越高。当电通量较高(>1000 C)时，进一步牺牲抗氯离子渗透性对降低成本的边际效益减小，曲线趋于平缓。TOPSIS 分析表明，在耐久性与经济性的权衡中，最优解位于电通量约 800 C、成本约 280 元/m^3 处，评分接近 0.8，代表实现了较优的平衡。图 10d 则揭示了电通量与碳排放间更为离散和复杂的关系。由图 10d 可见，虽然降低电通量的大趋势可能伴随碳排放增加，但帕累托前沿并非平滑曲线，尤其在 Q>1200 C 区域呈现多个平台，表明通过不同的材料组合策略，可以在相似的碳排放水平下获得不同的抗渗透性能。TOPSIS 的最佳解出现在电通量约 1150 C、碳排放约 175 kg/m^3 处，评分约 0.8。这个点位于较低电通量区域，但并非最低电通量，也非最低碳排放，说明在保证良好抗渗透性的前提下，通过精心的材料组分设计，可以有效控制碳排放，实现耐久性与低碳目标的协同优化。

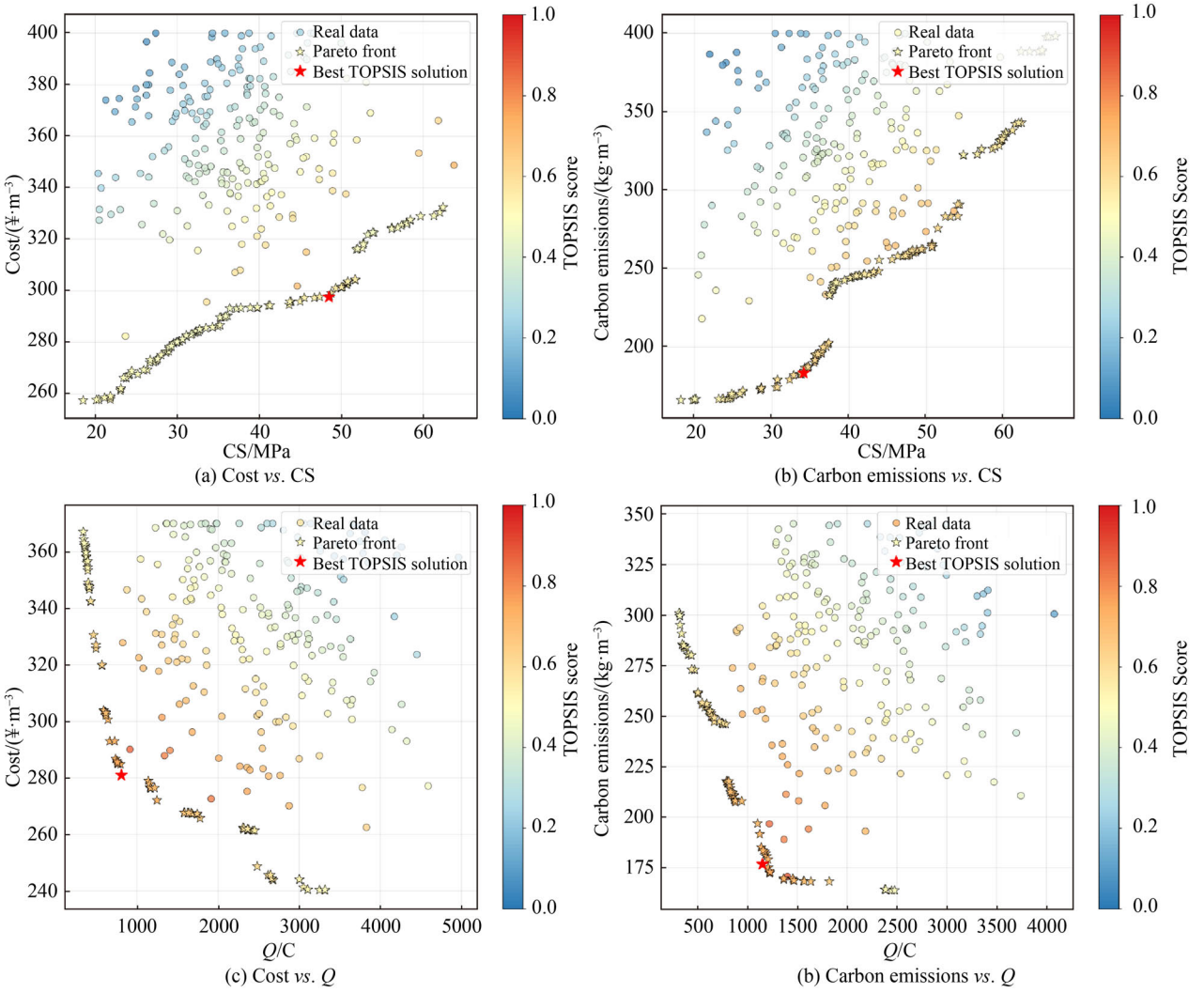


图 10 低碳混凝土目标性能的帕累托前沿及 TOPSIS 评分

Fig. 10 Pareto fronts and TOPSIS scores for target performance of low-carbon concrete

3.2 4 目标协同优化

继双目标优化分析后，本工作对全部 4 个目标——抗压强度、电通量、成本和碳排放——进行了同步优化。在 NSGA-Ⅲ算法中，设定种群规模为 100，最大进化代数为 1000 代。同时，采用了自适应变异策略，变异概率从初始值 0.1 线性递减至 0.05，以期平衡算法的全局探索与局部精细搜索能力。为评价 4 个目标 NSGA-III 优化过程的收敛性和解集质量，采用了超体积(HV)指标。超体积指标能够综合衡量解集向真实帕累托前沿的接近程度以及在目标空间中的分布广度。

图 11 绘制了优化过程中超体积指标随迭代次数的变化曲线。由图 11 可见，超体积在优化初期快速增长，随后增速放缓，并在大约迭代 600 代后趋于稳定，这种增长后趋于饱和的模式是算法收敛的典型表现，表明 NSGA-III 已充分探索解空间并难以找到更优解。最终稳定的超体积说明优化过程收敛良好，所得 140 个非支配解接近真实的帕累托前沿。

图 12 为 4 个目标优化的帕累托前沿解集的平行坐标图。由图 12 可见，每条平行的纵向坐标轴分别代表一个优化目标，各目标值经过归一化处理以便

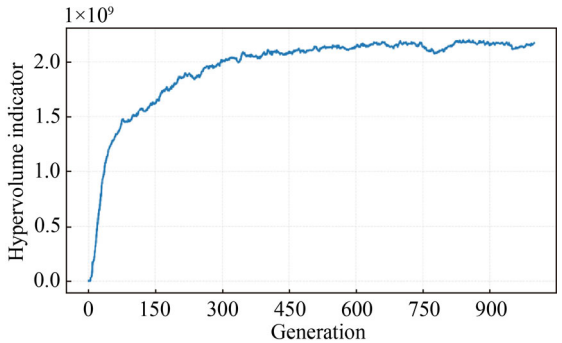
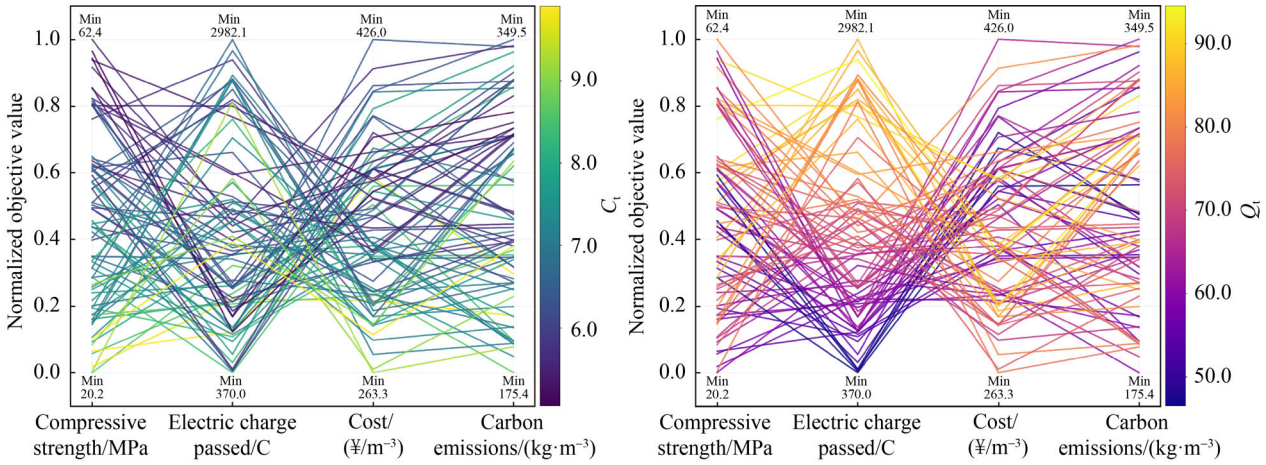


图 11 4 目标优化超体积指标的收敛曲线

Fig. 11 Convergence curve of the hypervolume indicator for the four-objective optimization

统一比较；每条穿过这些轴的折线则代表一个帕累托最优解，其与各纵轴的交点即为该解在对应目标上的性能表现，清晰呈现了各目标间的相互依赖关系。虽可实现更高的抗压强度通常伴随着耐久性的提升，然而，性能的高追求往往需要付出巨大的环境与经济成本。将抗压强度从 20~30 MPa 范围提升至 50 MPa 以上通常需要承担碳排放近乎翻倍以及成本增加 30%~50%的风险。反之，优先考虑环境和经济目标则导致了性能上的妥协。具有低碳排放和低成本的配合比方案，其抗压强度通常会在 30 MPa 以下。此外，在图中折线的斜率变化区域中，小幅优化一个目标都会导致在其他目标中做出较大的妥协，这种变化也常常伴随着碳效指标值相应的改变，在图 12 中表现为出现了颜色的明显过渡。因此，在实际应用中，碳效指标提供了一个有效的定量工具，帮助根据实际工程需求进行决策，评估不同配合比方案在性能与环境影响上的综合表现，从而做出最优选择。



(a) Carbon intensity index dataset　　(b) Chloride ion penetration carbon efficiency index dataset

图 12　4 目标优化帕累托最优解集的平行坐标图

Fig. 12　Parallel coordinate plots for the Pareto optimal solutions of the four-objective optimization

3.3　低碳混凝土配合比设计决策

基于 4 目标优化获得的帕累托最优解集，本工作采用 C_i 和 Q_i 2 个碳效指标进行决策，各选取了 3 个最优解作为智能设计决策方案(表 8)。碳效指标 C_i 和 Q_i 分别从力学性能、耐久性与碳排放耦合的角度，为低碳混凝土设计提供了明确的量化依据和决策指导，有效解决了环境效益与混凝土性能之间权衡的决策难题。

碳强度指标最优方案(C_{i1}~C_{i3})呈现显著的特征。方案采用 300 kg/m^3 以上的高水泥用量，并控制水胶比在 0.3 左右，配合优化的矿物掺合料组合，使抗压强度达到了 50 MPa 以上。这 3 个方案均不使用再生骨料，这一选择与 SHAP 分析结果相符，证明再生骨料对混凝土性能的影响很复杂。虽然再生骨料有助于减少碳排放，但它对抗压强度的负面影响更为显著，在工程中需要谨慎使用。

抗氯离子渗透碳效指标最优方案(Q_{i1}~Q_{i3})则呈现出不同的策略，这些方案主要通过添加矿渣同时实现了优异的抗氯离子渗透性(Q<500 C)和低碳表现。矿渣在提高抗氯离子渗透性方面发挥了重要作用，这一点在 C_{i3} 中也有所体现。方案增加了减水剂的使用量，这与 SHAP 分析中发现的减水剂对混凝土耐久性有显著正面贡献的结论相符合。此外，Q_{i2} 方案中使用了再生骨料，在其他组分几乎不变的

表 8　低碳混凝土智能设计决策方案

Table 8　Intelligent design decision schemes for low-carbon concrete

Design strategy	Cement/ (kg·m^{-3})	Water/ (kg·m^{-3})	NCA/ (kg·m^{-3})	RCA/ (kg·m^{-3})	Sand/ (kg·m^{-3})	FA/ (kg·m^{-3})	Slag/ (kg·m^{-3})	SF/ (kg·m^{-3})	SP/ (kg·m^{-3})	CS/ MPa	Q/C	Carbon/ (kg·m^{-3})	C_i	Q_i
C_{i1}	310.41	140.45	1114.17	0.00	684.15	105.91	0.00	34.42	7.70	57.71	1143.08	248.40	4.30	65.73
C_{i2}	313.14	140.33	1114.11	0.00	683.98	105.95	0.00	34.46	0.00	54.07	1417.83	242.23	4.48	70.03
C_{i3}	315.95	150.02	1107.90	0.00	684.15	106.12	39.14	34.46	7.85	56.52	847.28	260.12	4.60	60.40
Q_{i1}	298.67	162.85	1061.10	0.00	712.35	100.96	59.72	31.68	8.33	52.69	386.10	251.20	4.77	45.95
Q_{i2}	285.24	162.84	1026.81	124.36	712.35	72.79	59.82	31.68	8.28	36.04	468.89	240.46	6.67	48.31
Q_{i3}	285.24	162.85	1012.36	0.00	712.35	72.77	59.82	31.68	8.33	47.02	468.89	240.72	5.12	48.33

情况下，其抗压强度远低于其他方案。与此同时，无论在 C_i 和 Q_i 方案中，粉煤灰和硅灰的用量均较高，体现了辅助胶凝材料在降低碳排放、提高混凝土性能方面具有重要作用。

4 结论

本工作提出了一种基于人工智能的低碳混凝土智能设计方法，通过机器学习、多目标优化等技术手段有效协调了碳排放、经济成本、力学性能与耐久性能之间的复杂关系，解决了传统设计方法中工程性能与环境影响难以平衡的矛盾。主要研究成果如下：

1) 针对数据库中存在的特征变量维度不一致和异常值的问题，采用归一化处理和 DBSCAN 算法进行数据预处理，显著提升了数据质量。通过机器学习模型对比分析，确定 PSO-XGB 模型在预测抗压强度和电通量方面表现最优，测试集 R^2 分别达到 0.91 和 0.89。

2) 为平衡混凝土性能与碳排放之间的关系，引入了碳强度指标(C_i)和抗氯离子渗透碳效指标(Q_i)2 个评价指标。通过 SHAP 分析揭示了各变量的影响机制，发现再生骨料对抗压强度的负面影响显著超过其碳减排效益，而辅助胶凝材料则能有效改善碳效指标。

3) 采用 NSGA-III 算法对 4 个目标(抗压强度、电通量、成本和碳排放)进行了优化。优化结果表明，混凝土成本和碳排放与性能之间存在明显的权衡关系。此外，碳强度指标优化方案与抗氯离子渗透碳效指标优化方案在配比策略上存在明显差异，反映了不同应用场景下优化思路的多样性。

4) 基于碳效指标分析表明，在满足高性能要求(抗压强度>50 MPa、电通量<500 C)的条件下，可将混凝土碳排放控制在 240~260 kg/m^3 范围内，实现环境效益与工程性能的协同优化。该研究为低碳混凝土设计提供了系统性的决策支持，通过 AI 技术实现了材料性能与环境影响的协同优化，为建筑行业可持续发展提供了新的技术路径。

参考文献:

[1] YUE X L, GAO Q X. Contributions of natural systems and human activity to greenhouse gas emissions[J]. Adv Clim Change Res, 2018, 9(4): 243–252.

[2] SVERDRUP H U, OLAFSDOTTIR A H. Dynamical modelling of the global cement production and supply system, assessing climate impacts of different future scenarios[J]. Water Air Soil Pollut, 2023, 234(3): 191.

[3] ZHOU X F, ZHANG S H, YU C L, et al. Formulating low-carbon Portland cement-carbonated BOFS blends based on thermodynamic modeling and validation[J]. Constr Build Mater, 2025, 471: 140769.

[4] 蒋正武, 高文斌, 杨巧, 等. 低碳混凝土的技术理念与途径思考[J]. 建筑材料学报, 2023, 26(11): 1143–1150.
JIANG Zhengwu, GAO Wenbin, YANG Qiao, et al. J Build Mater, 2023, 26(11): 1143–1150.

[5] WANG Y Y, ZHANG H, GENG Y, et al. Prediction of the elastic modulus and the splitting tensile strength of concrete incorporating both fine and coarse recycled aggregate[J]. Constr Build Mater, 2019, 215: 332–346.

[6] ZHANG S H, YUAN Q, LI Q Y, et al. Microstructural characteristics of bonding interfacial transition zone of concrete and magnesium ammonium phosphate cement[J]. J Build Eng, 2023, 76: 107208.

[7] SUN D D, SHI H S, WU K, et al. Influence of aggregate surface treatment on corrosion resistance of cement composite under chloride attack[J]. Constr Build Mater, 2020, 248: 118636.

[8] JALILIFAR H, SAJEDI F. Micro-structural analysis of recycled concretes made with recycled coarse concrete aggregates[J]. Constr Build Mater, 2021, 267: 121041.

[9] SUNAYANA S, BARAI S V. Partially fly ash incorporated recycled coarse aggregate based concrete: Microstructure perspectives and critical analysis[J]. Constr Build Mater, 2021, 278: 122322.

[10] KOU S C, POON C S, AGRELA F. Comparisons of natural and recycled aggregate concretes prepared with the addition of different mineral admixtures[J]. Cem Concr Compos, 2011, 33(8): 788–795.

[11] SHAIKH F U A. Mechanical properties of recycled aggregate concrete containing ternary blended cementitious materials[J]. Int J Sustain Built Environ, 2017, 6(2): 536–543.

[12] 荆彪. 基于低水泥用量的低碳混凝土配比研究[D]. 西安: 西安理工大学, 2024.
JING Biao. Research on low carbon concrete ratio based on low cement dosage[D]. Xi'an: Xi'an University of Technology, 2024.

[13] 郭奕群, 张同生, 李嘉豪, 等. 基于抗氯离子渗透性的复合胶凝材料组成设计与性能[J]. 硅酸盐学报, 2023, 51(5): 1181–1190.
GUO Yiqun, ZHANG Tongsheng, LI Jiahao, et al. J Chin Ceram Soc, 2023, 51(5): 1181–1190.

[14] KHADEMI F, JAMAL S M, DESHPANDE N, et al. Predicting strength of recycled aggregate concrete using Artificial Neural Network, Adaptive Neuro-Fuzzy Inference System and Multiple Linear Regression[J]. Int J Sustain Built Environ, 2016, 5(2): 355–369.

[15] WANG S Q, XIA P, GONG F Y, et al. Multi objective optimization of recycled aggregate concrete based on explainable machine learning[J]. J Clean Prod, 2024, 445: 141045.

[16] LIU K H, ZHENG J K, PACHECO-TORGAL F, et al. Innovative modeling framework of chloride resistance of recycled aggregate concrete using ensemble-machine-learning methods[J]. Constr Build Mater, 2022, 337: 127613.

[17] 张文生, 曹傅荔, 郅晓, 等. 机器学习方法用于水泥基材料的研究进展[J]. 硅酸盐学报, 2024, 52(11): 3617–3630.
ZHANG Wensheng, CAO Fuli, ZHI Xiao, et al. J Chin Ceram Soc, 2024, 52(11): 3617–3630.

[18] ZHAO Z F, LIU Y J, LU Y Y, et al. Prediction of properties of recycled aggregate concrete using machine learning models: A critical review[J]. J Build Eng, 2024, 90: 109516.

[19] YAO G, SUN W T, YANG Y, et al. Multi-volume variable scale bitmap data object classification algorithm architectural concrete color difference detection[J]. J Intell Constr, 2023, 1(2): 1–17.

[20] DONG W, HUANG Y M, LEHANE B, et al. XGBoost algorithm-based prediction of concrete electrical resistivity for structural health monitoring[J]. Autom Constr, 2020, 114: 103155.
[21] 刘悦, 马舒畅, 杨正伟, 等. 面向材料领域机器学习的数据质量治理[J]. 硅酸盐学报, 2023, 51(2): 427–437.
LIU Yue, MA Shuchang, YANG Zhengwei, et al. J Chin Ceram Soc, 2023, 51(2): 427–437.
[22] LIU Y, ZHANG J L, ZHANG S H, et al. Machine learning-guided optimization of coarse aggregate mix proportion based on CO_2 intensity index[J]. J CO2 Util, 2024, 85: 102862.
[23] YUAN Q, ZHANG J L, ZHANG S H, et al. An eco-friendly solution for construction and demolition waste: Recycled coarse aggregate with CO_2 utilization[J]. Sci Total Environ, 2024, 950: 175163.
[24] DAMINELI B L, KEMEID F M, AGUIAR P S, et al. Measuring the eco-efficiency of cement use[J]. Cem Concr Compos, 2010, 32(8): 555–562.
[25] SANDER J, ESTER M, KRIEGEL H P, et al. Density-based clustering in spatial databases: The algorithm GDBSCAN and its applications[J]. Data Min Knowl Discov, 1998, 2(2): 169–194.
[26] ZHANG H R, JI T, ZENG X P, et al. Mechanical behavior of ultra-high performance concrete (UHPC) using recycled fine aggregate cured under different conditions and the mechanism based on integrated microstructural parameters[J]. Constr Build Mater, 2018, 192: 489–507.
[27] 缪昌文, 刘加平, 刘建忠. 外加剂对混凝土耐久性的影响[J]. 东南大学学报(自然科学版), 2006, 36(增刊 2): 253–258.
MIAO Changwen, LIU Jiaping, LIU Jianzhong. J Southeast Univ Nat Sci Ed, 2006, 36(Suppl 2): 253–258.
[28] HAWILEH R A, MHANNA H H, ABDALLA J A, et al. Properties of concrete replaced with different percentages of recycled aggregates[J]. Mater Today Proc, 2023, 85(1): 15–22.
[29] KOU S C, POON C S, CHAN D. Influence of fly ash as a cement addition on the hardened properties of recycled aggregate concrete[J]. Mater Struct, 2008, 41(7): 1191–1201.
[30] KOU S C, POON C S. Long-term mechanical and durability properties of recycled aggregate concrete prepared with the incorporation of fly ash[J]. Cem Concr Compos, 2013, 37: 12–19.
[31] 韦胜怀. 矿物掺合料对再生混凝土抗氯盐侵蚀及抗冻性能影响的研究[D]. 徐州: 中国矿业大学, 2020.
WEI Shenghuai. Research on influence of mineral admixture on chloride corrosion resistance and frost resistance of recycled concrete[D]. Xuzhou: China University of Mining and Technology, 2020.
[32] MOSTOFINEJAD D, HOSSEINI S M, NOSOUHIAN F, et al. Durability of concrete containing recycled concrete coarse and fine aggregates and milled waste glass in magnesium sulfate environment[J]. J Build Eng, 2020, 29: 101182.
[33] 戴明辉. 再生混凝土抗氯离子渗透性试验研究[D]. 福州: 福州大学, 2013.
DAI Minghui. Experimental research on the penetration resistance of chloride ions of recycled aggregate concrete [D]. Fuzhou: Fuzhou University, 2013.
[34] BABALOLA O E, AWOYERA P O, TRAN M T, et al. Mechanical and durability properties of recycled aggregate concrete with ternary binder system and optimized mix proportion[J]. J Mater Res Technol, 2020, 9(3): 6521–6532.
[35] LI C Z. Mechanical and transport properties of recycled aggregate concrete modified with limestone powder[J]. Compos Part B Eng, 2020, 197: 108189.
[36] XIE F, LI J P, ZHAO G W, et al. Experimental study on performance of cast-in-situ recycled aggregate concrete under different sulfate attack exposures[J]. Constr Build Mater, 2020, 253: 119144.
[37] 李贺, 刘天舒, 丁向群, 等. 废弃纤维再生混凝土抗硫酸盐侵蚀性能的研究[J]. 混凝土, 2019(10): 18–21.
LI He, LIU Tianshu, DING Xiangqun, et al. Concrete, 2019(10): 18–21.
[38] ZHANG H R, JI T, LIU H. Performance evolution of recycled aggregate concrete (RAC) exposed to external sulfate attacks under full-soaking and dry-wet cycling conditions[J]. Constr Build Mater, 2020, 248: 118675.
[39] HABIBI A, RAMEZANIANPOUR A M, MAHDIKHANI M, et al. RSM-based evaluation of mechanical and durability properties of recycled aggregate concrete containing GGBFS and silica fume[J]. Constr Build Mater, 2021, 270: 121431.
[40] THOMAS J, THAICKAVIL N N, WILSON P M. Strength and durability of concrete containing recycled concrete aggregates[J]. J Build Eng, 2018, 19: 349–365.
[41] WANG J B, CHE Z H, ZHANG K F, et al. Performance of recycled aggregate concrete with supplementary cementitious materials (fly ash, GBFS, silica fume, and metakaolin): Mechanical properties, pore structure, and water absorption[J]. Constr Build Mater, 2023, 368: 130455.
[42] 袁继峰, 冷捷, 段文峰, 等. 硅灰对再生混凝土性能影响的试验研究[J]. 吉林建筑大学学报, 2017, 34(1): 31–35.
YUAN Jifeng, LENG Jie, DUAN Wenfeng, et al. J Jilin Jianzhu Univ, 2017, 34(1): 31–35.
[43] Limbachiya M, Meddah S, Ouchagour Y. Performance of portland/silica fume cement concrete produced with recycled concrete aggregate[J]. ACI Mater J, 2012, 109(1) : 91–100.
[44] MAJHI R K, NAYAK A N, MUKHARJEE B B. Development of sustainable concrete using recycled coarse aggregate and ground granulated blast furnace slag[J]. Constr Build Mater, 2018, 159: 417–430.
[45] LIMBACHIYA M, MEDDAH M S, OUCHAGOUR Y. Use of recycled concrete aggregate in fly-ash concrete[J]. Constr Build Mater, 2012, 27(1): 439–449.
[46] ARAFA M, TAYEH B A, ALQEDRA M, et al. Investigating the Effect of Sulfate Attack on Compressive Strength of Recycled Aggregate Concrete[J]. Int J Sustain Constr, 2017, 8(2): 66–77.
[47] MEDDAH M S, AL-HARTHY A, A ISMAIL M. Recycled concrete aggregates and their influences on performances of low and normal strength concretes[J]. Buildings, 2020, 10(9): 167.
[48] VAN TRAN M, CHAU V N. Mass concrete placement of the offshore wind turbine foundation: A statistical approach to optimize the use of fly ash and silica fume[J]. Int J Concr Struct Mater, 2021, 15(1): 50.
[49] SHMLLS M, ABED M A, HORVATH T, et al. Sustainability framework of recycled aggregate concrete produced with supplementary cementitious materials[J]. Ain Shams Eng J, 2023, 14(8): 102036.
[50] ÇAKıR Ö. Experimental analysis of properties of recycled coarse aggregate (RCA) concrete with mineral additives[J]. Constr Build Mater, 2014, 68: 17–25.
[51] 黄爽. 粉煤灰对再生混凝土力学性能及损伤机制的影响研究[D]. 郑州: 华北水利水电大学, 2020.
HUANG Shuang. Effect of fly ash on mechanical properties and damage mechanism of recycled concrete[D]. Zhengzhou: North China University of Water Resources and Electric Power, 2020.
[52] SOMNA R, JATURAPITAKKUL C, CHALEE W, et al. Effect of the water to binder ratio and ground fly ash on properties of recycled aggregate concrete[J]. J Mater Civ Eng, 2012, 24(1): 16–22.

[53] MUDULI R, MUKHARJEE B B. Performance assessment of concrete incorporating recycled coarse aggregates and metakaolin: A systematic approach[J]. Constr Build Mater, 2020, 233: 117223.

[54] LASERNA S, MONTERO J. Influence of natural aggregates typology on recycled concrete strength properties[J]. Constr Build Mater, 2016, 115: 78–86.

[55] BOUDALI S, KERDAL D E, AYED K, et al. Performance of self-compacting concrete incorporating recycled concrete fines and aggregate exposed to sulphate attack[J]. Constr Build Mater, 2016, 124: 705–713.

[56] 李翔. 低碳双掺钢渣混凝土的试验研究[D]. 西安: 西安建筑科技大学, 2013.
LI Xiang. Experimental research of low-carbon concrete by double mixing steel slag[D]. Xi'an: Xi'an University of Architecture and Technology, 2013.

[57] 班顺莉. 矿物掺合料对再生混凝土界面过渡区微结构影响研究[D]. 青岛: 青岛理工大学, 2022.
BAN Shunli. The influence of admixtures on microstructure and performance of recycled concrete interface transtion zone[D]. Qingdao: Qingdao University of Technology, 2022.

[58] 刘钰婷. 再生混凝土抗压性能细观模拟研究及影响因素分析[D]. 西安: 西安理工大学, 2023.
LIU Yuting. Detailed simulation study of compressive properties of recycled concrete and analysis of influencing factors[D]. Xi'an: Xi'an University of Technology, 2023.

[59] SHANKAR BISWAL U, DINAKAR P. Evaluating corrosion resistance of recycled aggregate concrete integrating ground granulated blast furnace slag[J]. Constr Build Mater, 2023, 370: 130676.

[60] 李艺. 矿物掺合料再生混凝土抗压强度及非破损检测试验[D]. 延吉: 延边大学, 2012.
LI Yi. Test study on the damage detection mineral admixtures recycled concrete compressive strength[D]. Yanji: Yanbian University, 2012.

[61] 钟荣富. 人工砂再生混凝土抗压强度及碳化性能试验研究[D]. 南宁: 广西大学, 2014.
ZHONG Rongfu. Experimental study on compression strength and carbonation property of recycled concrete with artificial sand[D]. Nanning: Guangxi University, 2014.

[62] 高成辉. 掺外加剂再生混凝土抗渗特性研究[D]. 南昌: 南昌航空大学, 2018.
GAO Chenghui. Study on impermeability of recycled concrete with admixture[D]. Nanchang: Nanchang Hangkong University, 2018.

[63] 孙天棋. 粉煤灰–硅灰对再生混凝土物理力学性能影响研究[D]. 沈阳: 沈阳建筑大学, 2021.
SUN Tianqi. Study on the effect of fly ash and silica fume on the physical and mechanical properties of recycled concrete[D]. Shenyang: Shenyang Jianzhu University, 2021.

[64] 刘述. 全再生骨料混凝土的制备与性能研究[D]. 济南: 山东建筑大学, 2022.
LIU Shu. Study on preparation and properties of fully recycled aggregate concrete[D]. Jinan: Shandong Jianzhu University, 2022.

[65] 蒋瑞智. 矿物掺合料对再生混凝土力学性能及耐久性能影响研究[D]. 重庆: 重庆交通大学, 2023.
JIANG Ruizhi. Study on the effect of mineral admixtures on the mechanical properties and durability of recycled concrete[D]. Chongqing: Chongqing Jiaotong University, 2023.

[66] 林佳礼. 考虑材料内部结构的约束低碳混凝土本构模型研究[D]. 广州: 广州大学, 2024.
LIN Jiali. Research on novel packing-coupled stress-strain model for confined low carbon footprint concrete[D]. Guangzhou: Guangzhou University, 2024.

[67] BULATOVIĆ V, MELEŠEV M, RADEKA M, et al. Evaluation of sulfate resistance of concrete with recycled and natural aggregates[J]. Constr Build Mater, 2017, 152: 614–631.

[68] TAM V W, BUTERA A, LE K N. Mechanical properties of CO_2 concrete utilising practical carbonation variables[J]. J Clean Prod, 2021, 294: 126307.

[69] KHODAIR Y, BOMMAREDDY B. Self-consolidating concrete using recycled concrete aggregate and high volume of fly ash, and slag[J]. Constr Build Mater, 2017, 153: 307–316.

[70] DHANDAPANI Y, SAKTHIVEL T, SANTHANAM M, et al. Mechanical properties and durability performance of concretes with Limestone Calcined Clay Cement (LC^3)[J]. Cem Concr Res, 2018, 107: 136–151.

[71] HAKEEM I Y, ALHARTHAI M, AMIN M, et al. Properties of sustainable high-strength concrete containing large quantities of industrial wastes, nanosilica and recycled aggregates[J]. J Mater Res Technol, 2023, 24: 7444–7461.

[72] GUO Z G, JIANG T, ZHANG J, et al. Mechanical and durability properties of sustainable self-compacting concrete with recycled concrete aggregate and fly ash, slag and silica fume[J]. Constr Build Mater, 2020, 231: 117115.

[73] DUAN Z H, POON C S. Properties of recycled aggregate concrete made with recycled aggregates with different amounts of old adhered mortars[J]. Mater Des, 2014, 58: 19–29.

[74] ÇAKıR Ö, DILBAS H. Durability properties of treated recycled aggregate concrete: Effect of optimized ball mill method[J]. Constr Build Mater, 2021, 268: 121776.

[75] BAO J W, LI S G, ZHANG P, et al. Influence of the incorporation of recycled coarse aggregate on water absorption and chloride penetration into concrete[J]. Constr Build Mater, 2020, 239: 117845.

Intelligent Design of Low-Carbon Concrete Based on Multi-Objective Optimization

YUAN Qiang, *XIA Rui*, *LIU Yi*, *MA Jialu*
(School of Civil Engineering, Central South University, National Engineering Research Center for High-Speed Railway Construction, Changsha 410075, China)

Extended Abstract

Introduction With increasing global emphasis on sustainable development, the CO_2 emissions from concrete as the most widely

used building material have attracted much attention. Statistics show that cement production accounts for approximately 8% of global CO_2 emissions. Low-carbon concrete minimizes lifecycle CO_2 emissions through optimized cementitious materials, use of solid waste, and low-carbon technique (*e.g.*, carbon capture), while still meeting engineering performance standards. However, incorporating recycled aggregates or mineral admixtures, although reducing CO_2 emissions, often leads to a deterioration in mechanical properties and durability of concrete. Therefore, how to effectively balance reduced CO_2 emissions while maintaining the engineering performance of concrete remains a challenge in low-carbon concrete mix designs.

The complex interactions among multiple components of concrete materials make mix proportion design highly complex. Conventional trial-and-error methods show obvious deficiencies in efficiency, cost and precision. Previous research established some performance prediction models based on machine learning methods, which often focused on single performance indicators. There is little systematic research on multi-objective collaborative optimization of mechanical properties. This failure to adequately balance environmental benefits with performance hinders the effective use of AI in designing low-carbon concrete. The result demonstrates that optimizing the proportions of recycled aggregates and supplementary cementitious materials can effectively limit carbon emissions to the range of 240–260 kg CO_2/m^3 when the mechanical property requirements (*i.e.*, compressive strength >50 MPa) and chloride ion permeability resistance (*i.e.*, electric flux <500 C) are satisfied. This study was to offer an approach for achieving a balanced design between material performance and CO_2 emissions in low-carbon concrete, and to promote the application of Artificial Intelligence (AI) technology in its mix proportion design.

Methods This study introduced an AI-based intelligent design optimization method for low-carbon concrete. The process started with data preprocessing, including normalization and outlier treatment, to enhance dataset quality. Subsequently, various models, optimized *via* different hyperparameter tuning methods, were benchmarked for high-precision prediction of key performance indicators. The SHapley Additive Explanations (SHAP) analysis was employed to elucidate the impact of mix proportion parameters on concrete performance. The The Non-dominated Sorting Genetic Algorithm III (NSGA-III) algorithm was then utilized for multi-objective optimization of CO_2 emissions, cost, strength, and chloride ion penetration resistance. Two indices, C_i (Carbon intensity index) and Q_i (Chloride ion penetration carbon efficiency index), were introduced to quantify the balance between environmental impact and concrete performance. These indices were subsequently employed to evaluate the solutions from the multi-objective optimization, guiding the decision-making process towards a comprehensive and synergistic optimization of material properties and low-carbon characteristics.

Results and discussion During data preprocessing, normalization addresses dimensional inconsistencies among feature variables, enhancing their comparability. Furthermore, the Density-Based Spatial Clustering of Applications with Noise (DBSCAN) algorithm effectively identifies specific outliers (*i.e.*, 43 related to compressive strength and 4 concerning electric charge passed), leading to a marked improvement in overall data quality. Comparison of machine learning models shows that eXtreme Gradient Boosting (XGB) model exhibits a superior performance in all prediction tasks, with Particle Swarm Optimization (PSO) achieving R^2 of 0.91 for compressive strength and 0.89 for electric charge passed on test sets. Interpretability through SHAP analysis reveals that cement content and water content are the main factors affecting compressive strength, while superplasticizer dosage is a key factor affecting electric charge passed. For carbon efficiency indices, fly ash replacement of cement is an important approach to reduce C_i and Q_i, while the negative impact of recycled aggregates on performance often exceeds their carbon reduction benefits. Multi-objective optimization results indicate significant trade-offs among compressive strength, durability, CO_2 emissions, and cost. Decision schemes based on carbon efficiency indices further confirm that CO_2 emissions can be effectively reduced, while ensuring concrete performance *via* scientifically proportioning supplementary cementitious materials, and optimizing water-binder ratio and superplasticizer content.

Conclusions This study highlighted a significant potential of an AI-driven approach for designing low-carbon concrete, effectively balancing engineering performance with environmental impact. This study could provide valuable insights into achieving tailored concrete properties *via* utilizing predictive modeling, parameter influence analysis with SHAP, and NSGA-III for multi-objective optimization. The proposed intelligent design method incorporating carbon efficiency indices could offer a practical strategy for developing low-carbon concrete, promoting sustainable practices in the construction industry.

Keywords low-carbon concrete; machine learning; multi-objective optimization; mechanical properties; chloride ion penetration resistance