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.0454-5648.20250622

基于多目标靶向性能的超高韧性地聚物复合材料智能化设计

郭孟环，谢咏菲，周英武，程铸昕，周俊豪

(深圳大学，广东省滨海土木工程耐久性重点实验室，广东 深圳 518060)

摘　要：为提升超高韧性地聚物复合材料(EGC)配合比设计效率，降低试错成本，本工作构建了基于机器学习的 EGC 性能“预测—优化—反馈”闭环智能设计框架。首先，选取矿粉掺量、粉煤灰掺量、碱激发剂模数等 11 个变量作为输入参数，选定抗压强度、抗拉强度、拉伸应变率为目标性能参数，采用可逆神经网络等 5 类模型进行正向预测，预测精度高达 0.99。其次，引入 SHAP 可解释性机制，量化解析关键配比参数对 EGC 性能的影响机制及贡献度。最后，融合 CatBoost 与 NSGA-III算法实现多目标性能优化与最优平衡解自动搜索，并通过开展试验研究，验证了所建智能设计框架的准确性与可行性。本工作提出的 EGC 智能设计框架解决了材料设计中难以避免的高强与高韧权衡问题，突破了传统 EGC 设计中的“黑匣子操作”与“经验驱动”局限，推动材料设计向智能化、精准化方向发展。

关键词：超高韧性地聚物复合材料；机器学习；遗传算法；性能优化设计
中图分类号：TP181；TU528　　**文献标志码**：A　　**文章编号**：0454–5648(2026)03–0823–19
网络出版时间：2026–02–13

在“双碳”目标驱动与全球可持续发展战略的引领下，建筑材料领域正加速从传统水泥基材料向低碳、环保、高性能材料转型。超高韧性地聚物复合材料(EGC)作为一种新型绿色建筑材料，凭借其优异的力学性能、出色的热稳定性及显著的环境友好性[1, 2]，展现出巨大潜力。EGC 不仅继承了地聚物材料固有的低碳排放、高耐火性及强抗化学腐蚀性等核心优势[3]，更通过引入纤维增强，如 PE 纤维、玄武岩纤维，显著提升了材料的韧性与延展性。其综合性能已接近甚至超越超高性能混凝土(UHPC)，使其在结构加固修复、防火保护以及极端环境基础设施建设等领域具有广阔应用前景[4–6]。然而，EGC 的性能受碱激发剂浓度、液固比、骨料特性、纤维几何参数(长度、掺量)等多重因素协同调控。这些参数间存在复杂的非线性耦合关系，显著增加了材料组成设计与性能优化的难度[7]。传统经验试错法不仅成本高昂、周期冗长，且难以覆盖所有设计参数的可能组合。此外，EGC 的配合比设计往往需要同时满足多项目标性能指标，如高抗压强度与高拉伸应变等，而这些目标性能间常存在固有冲突(如强度与韧性的权衡)，进一步增加了设计难度。

近年来，机器学习(ML)在材料科学中的应用日益深入，尤其在高性能复合材料性能预测与配比优化方面表现出强大的数据建模能力[8–11]。ML 能高效处理 EGC 复杂配比参数与多项性能指标之间的非线性关系，为材料性能的快速预测与精准调控提供有力工具[12, 13]。已有研究证实，支持向量回归(SVR)、随机森林(RF)、梯度提升树(GBRT)及人工神经网络(ANN)等机器学习算法，在预测复杂体系材料的关键性能方面展现出良好的预测精度与泛化能力，为材料智能设计提供了有力支持[14–21]。Li 等[21]采用 ANN 解析纤维类别对超高韧性水泥基复合材料(ECC)导电特性的影响规律；钟卿瑜等[19]利用机器学习模型探讨了碱激发剂浓度、模数、液固比这 3 个变量对地聚物材料抗压强度、流动度和凝结时间的影响机制；Yu 等[18]构建了结合 ML 模型与遗传算法的 ECC 智能配合比设计框架，实现了性能预测与优化；Zhang 等[20]利用 SVR、RF 等模型预测地聚物材料抗压强度；Gad 等[12]基于自动机器学习(PyCaret)构建了 EGC 抗压强度预测模型体系，通过

收稿日期：2025–08–21。　修订日期：2025–10–04。
基金项目：国家自然科学基金(52178236，52325804)。
第一作者：郭孟环(1989—)，女，博士，助理教授。
通信作者：周英武(1978—)，男，博士，教授。

Received date: 2025–08–21.　Revised date: 2025–10–04.
First author: GUO Menghuan (1989–), female, Ph.D., Assistant Professor.
E-mail: menghuan.guo@szu.edu.cn
Correspondent author: ZHOU Yingwu (1978–), male, Ph.D., Professor.
E-mail: ywzhou@szu.edu.cn

132 组实验数据验证，GBRT 和 CatBoost 模型预测精度最优，显著提升了材料设计效率；Yaswanth 等[22]开发了基于 17 个输入参数的 ANN 模型预测 EGC 抗压强度，模型 R^2 高达 0.96。尽管如此，目前基于 ML 的 EGC 研究仍存在 3 大突出问题：一是多目标性能建模能力不足，现有模型多聚焦单一性能指标预测，缺乏对 EGC 复杂性能体系的整体建模；二是缺乏系统性优化策略，当前方法多为静态预测，缺乏“预测—优化—反馈”的动态闭环设计流程；三是模型可解释性匮乏，模型预测结果难以转化为可理解的工程设计规则，制约了模型在指导实际配比设计中的价值。

本工作旨在构建一个基于 EGC 材料性能预测与多目标优化的一体化框架，实现从数据驱动的模型构建到工程导向的全流程闭环优化设计。研究目标包括：1) 构建综合性的 EGC 数据库；2) 通过多种机器学习算法与特征选择算法，开发稳健、准确的多目标性能预测模型；3) 采用先进的多目标进化算法(NSGA-III)，在相互冲突的性能目标，如强度、韧性之间“靶向”寻求最优设计解，该理念的核心在于，将材料设计视为一个具有明确目标的“定向”过程：“多目标协同靶向”指同时瞄准抗压强度、抗拉强度与拉伸应变率这 3 个关键性能指标，利用优化算法在它们相互竞争的复杂关系中寻找最优平衡点，以满足综合性能要求，“单目标精准靶向”指根据具体工程场景(如追求极致变形能力或达到特定强度值)，赋予特定性能指标更高权重，实现对该指标的定向强化设计；4) 引入 SHAP 可解释性机制，量化解析关键配比参数对性能的影响机制与贡献度，辅助材料设计机制解释与过程优化。该智能设计方法有望突破传统 EGC 设计中的“黑匣子操作”与“经验驱动”局限，推动材料设计向智能化、精准化方向发展。

1 数据收集及处理

本工作系统整合了 309 组国内外文献中的 EGC 抗压强度和拉伸性能试验数据[4, 6, 23–62]，为保障数据代表性，设定了配比参数的筛选标准。首先，通过查阅国内外关于机器学习、地聚物材料及水泥基复合材料的相关文献，整合文献中对性能影响较为显著的参数，从而确定配合比设计中的关键参数，主要包括前驱体种类及比例、水胶比、砂胶比、纤维属性、碱激发剂属性等；其次，结合超高韧性地聚物复合材料的相关文献，确定较常用的矿粉、粉煤灰及硅灰的前驱体为本工作研究的前驱体种类，并将其与总胶凝材料的比值为配比参数；纤维属性中选择较常用的 PE、PVA 纤维的掺量、长径比、长度及抗拉强度为配比参数；碱激发剂选用 NaOH 和 Na_2SiO_3 调配而成的碱性 Na 基材料，以其碱当量和碱激发剂模数为配比参数。养护方式均为标准大气压养护，外加剂除减水剂外不含其他试剂。最后，经筛选整合后获得 181 组有效数据。将矿粉掺量(GGBS)、粉煤灰掺量(FA)、硅灰掺量(SF)、砂胶比(S/B)、水胶比(W/B)、碱激发剂模数(AAM)、碱当量(AAD)、纤维掺量(FC)、纤维长度(FL)、纤维长径比(FLD)、纤维抗拉强度(FTS)等 11 个变量作为模型输入参数，28 d 抗压强度(σc)、28 d 拉伸性能[抗拉强度(σ_{tu})、拉伸应变率(ε_{tu})]作为目标性能。鉴于本工作所收集的 EGC 数据来自大量不同文献，各变量的分布范围较广且并不完全符合正态分布，其与性能之间存在复杂的单调非线性关系，因此，选择斯皮尔曼系数方法对数据集进行相关性分析，并绘制成 MIC (Maximal Information Coefficient)热图，结果如图 1 所示。MIC 值越高，说明参数之间的相关性越高。依据相关文献的方法，28 d 抗压强度值与矿粉掺量的相关性强，相关系数为 0.67；纤维抗拉强度、纤维长度、纤维长径比与拉伸性能(σ_{tu}、ε_{tu})均呈现显著相关性，MIC 值均大于 0.50；砂胶比与目标性能的相关性最弱，MIC 值均低于 0.10[18, 63]。在训练之前，首先对数据进行归一化，以加快模型的收敛速度，采用最大–最小归一化方法对数据进行预处理[见式(1)]，并将结果映射到区间[0,1]，结果如表 1 所示。随后，依据机器学习文献中常用的数据划分方式，将数据库按 7∶3 比例随机划分为训练集与测试集，并采用 5 种机器学习算法进行训练与比较。

$$x' = \frac{x - \min(x)}{\max(x) - \min(x)} \tag{1}$$

2 EGC 的性能预测

2.1 预测模型

模型的选择参照相关机器学习文献，其中 SVR、GBRT 是较为常用且简易的模型，适用于数据库较小的研究，SVR、GBRT、XGBoost、ANN、INN 分别代表核方法、集成学习、深度学习、可逆网络等几种不同类型的机器学习方法，覆盖了主流预测模型类型，具有代表性和可对比性。

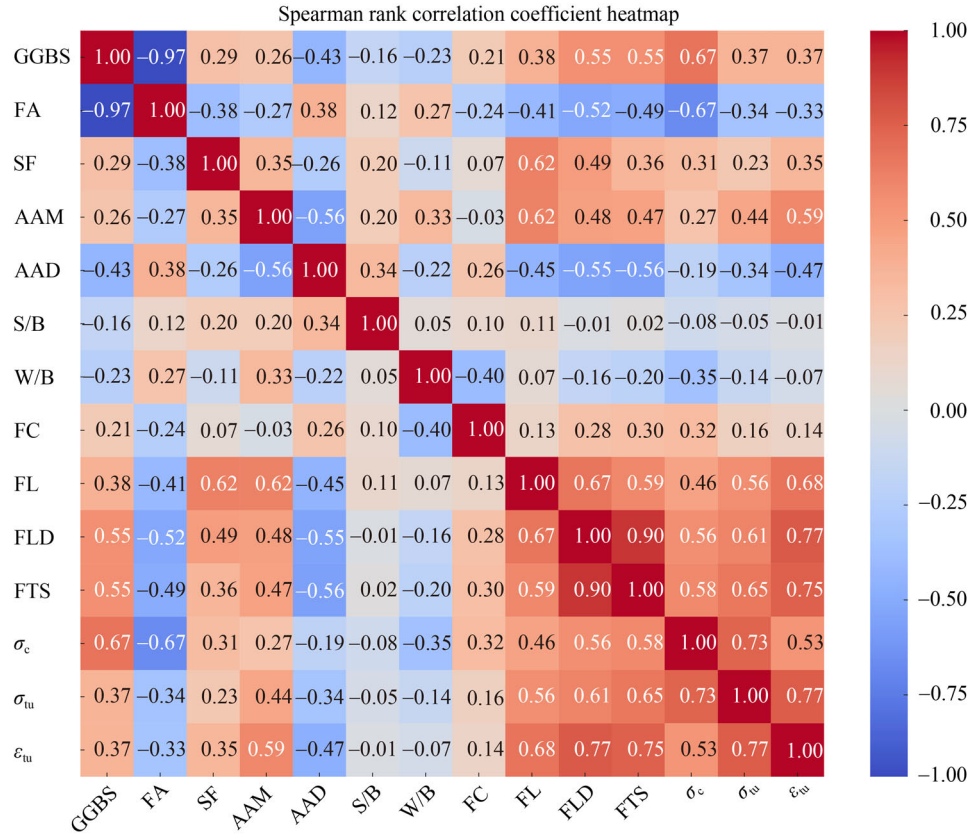


图 1　MIC 热图

Fig. 1　MIC heatmap

表 1　数据分布

Table 1　Data distribution

Parameter category	Parameter type	Unit	Min	Mean	Max	Standard deviation
Variable	GGBS	1	0.00	0.43	1.00	0.29
	FA	1	0.00	0.54	1.00	0.34
	SF	1	0.00	0.01	0.12	0.03
	S/B	1	0.00	0.38	1.60	0.31
	W/B	1	0.22	0.31	0.42	0.05
	AAM	mol	0.86	1.26	2.25	0.33
	AAD	%	4.08	7.00	11.38	1.87
	FC	%	0.00	1.51	3.00	0.83
	FL	mm	0.00	0.00	24.00	6.12
	FLD	mm/μm	0.00	0.41	1.50	0.30
	FTS	MPa	0.00	1894.43	3000.00	1075.20
Properties	σ_{tu}	MPa	0.00	3.51	15.90	3.25
	ε_{tu}	%	0.00	3.46	12.00	3.82
	σ_c	MPa	0.00	61.93	180.70	32.44

Note: GGBS—Ground granulated blast-furnace slag; FA—fly ash; SF—Silica fume; S/B—Sand-to-binder ratio; W/B—Water-to-binder ratio; AAM—Alkali activator modulus; AAD—Alkali activator dosage; FC—Fiber content; FL—Fiber length; FLD—Fiber aspect ratio; FTS—Fiber tensile strength; σ_{tu}—tensile strength; ε_{tu}—tensile strain; σ_c—Compressive strength.

2.1.1　SVR　支持向量回归(SVR)通过构建最优回归函数解决多目标预测问题，其核心是在所有符合回归精度要求的直线或曲面中寻找最优超平面，通过核函数处理非线性关系，并平衡模型预测误差及复杂度，尤其适用于复杂且多变的预测问题。

2.1.2　GBRT　梯度提升回归树(GBRT)是一种集成学习算法，通过迭代训练决策树并优化残差，逐步提升模型性能。其特点是采用梯度下降算法最小化损失函数，具有较强的特征组合能力。

2.1.3　XGBoost　XGBoost 是基于梯度提升树的改进版本，在 GBRT 的基础上进行了多项优化，其优势在于处理大规模数据时能保持预测稳定性，并能有效防止过拟合。

2.1.4　ANN　人工神经网络(ANN)模拟了人类大脑的神经元结构，通过输入层、隐藏层和输出层进行信息传递。其中，隐藏层通过非线性变换实现数据的特征提取，自动发现数据内在规律，并将其转化为更易理解的数学表达形式。通过多层次的加权求和，神经网络能有效捕捉数据中的复杂非线性关系。

2.1.5　INN　可逆神经网络(INN)是一类具有特殊结构的神经网络模型，其设计理念基于流模型，

流模型是一种通过可逆变换管道，将复杂数据逐步重塑为简单噪声，并能逆向还原的生成式人工智能方法，核心特征在于实现数据空间与潜在空间的双向可逆映射。相较于传统 ANN，INN 通过可逆函数构建网络层，不仅保留了数据的非线性表征能力，更确保了信息在正向传播与逆向重构过程中的完整性。这种特性使其有效规避了高维数据处理中的维度灾难问题。

INN 的核心优势在于其可逆的结构，它由多个可逆层构成，每一层的变换均由可逆函数实现，这些变换确保了每一步计算均可精准逆推，通过这一结构，INN 不仅能够有效地进行样本生成和重建，还能在预测任务中展现出优异的稳定性和高效性，特别是在生成建模、数据变换的应用中，INN 的优势更加明显。

2.2 预测性能评估

模型的预测性能除与数据集相关外，超参数的选择对于模型的性能具有至关重要的影响。超参数作为模型训练前需要预设的关键参数，其优化过程对提升模型预测精度、增强泛化能力以及防止过拟合具有决定性作用。本工作结合网格搜索和经验准则法，针对提到的 5 种模型的超参数进行了系统优化。

2.2.1 模型精度优化 SVR 的性能主要受惩罚参数 C、核函数类型(Kernel type)和 Epsilon 参数的影响。其中，惩罚参数 C 调控模型对训练误差的容忍度：增大 C 值会迫使模型更严格地拟合训练数据，增强模型复杂度，但更易导致过拟合；减小 C 值则会放宽误差约束，降低模型复杂度，但会忽略关键特征，导致欠拟合，其最优选择需在模型复杂性与泛化能力之间寻求平衡，以实现对新样本的稳定预测。核函数决定了数据在高维空间中的映射方式，进而影响拟合效果。而 Epsilon 参数则调节模型敏感度区间。

GBRT 的关键超参数包括决策树数量(N-estimators)、最大深度(Max depth)和学习率(Learning rate)。增加树的数量和深度可增强模型拟合能力，但会提升计算复杂度并可能引发过拟合。为控制过拟合风险，需配合调节叶节点最小样本数和节点划分最小样本数来约束单棵树的生长规模。学习率作为梯度下降的步长参数，其取值直接影响训练效率和模型收敛性：较低的学习率虽能提高训练稳定性，但会显著增加迭代次数需求。

XGBoost 在 GBRT 基础上，引入了 3 项核心参数：Gamma 参数通过控制节点分裂的最小损失衰减来实现正则化剪枝，抑制过拟合；样本采集比例(Subsample)通过随机子采样策略降低单棵树对特定训练样本的依赖，提升模型泛化能力；特征采样比例(Colsample bytree)则采用特征随机选择机制，在提升计算效率的同时增强模型鲁棒性。这 3 项参数的协同优化使 XGBoost 适用于高维大规模数据的多目标预测任务。

ANN 的性能依赖于 3 个关键超参数的设置:学习率(Learning rate)、网络深度(Hidden layers)和训练轮次(Epochs)。学习率需权衡收敛速度与稳定性，过高易震荡，过低则训练缓慢。网络层数与神经元数量决定模型表征能力，更深网络可学习更复杂特征，但也增加了计算开销和过拟合风险。训练轮次需平衡计算成本与模型收敛程度。

INN 在继承 ANN 基础超参数体系的基础上，因其特殊的可逆架构而具有独特的参数要求。网络深度和变换函数的选择须满足每一层变换都具备精确可逆的特征。这种可逆性约束使得 INN 在层数设计时需要考虑信息传递的保真度与计算效率的平衡。通过精心调节这些超参数，INN 能够在保持可逆特性的前提下，实现对复杂数据的高效建模和稳定预测。

模型超参数优化前后的结果对比如表 2 所示，为了评估 5 种模型对抗压强度、抗拉强度、拉伸应变率 3 个目标性能的预测精度，引入 R^2 对模型数据测试集预测精度进行评估，计算公式如式(2)所示。R^2 越接近 1 表示模型的预测精度越高。由表 2 可知，进行超参数优化后的模型均取得不同程度的预测精度提升。

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

其中：y_i 为真实值；$\hat{y}_i$ 为预测值；$\bar{y}$ 指真实值的均值；n 为样本数。

2.2.2 模型性能评估 结合表 2 所示的预测性能评估指标 R^2 结果，发现 INN 模型在 5 个比对模型中展现出最优的正向预测精度。为更直观评估模型预测性能，依据机器学习文献中类似研究常用的数据划分方式，选择数据集中 30% (约 48 组数据)作为预测集，绘制模型生成的预测值与数据组中真实值的对比图(见图 2)，可视化展示真实值与预测值之间的关系[64, 65]。图中蓝色散点表示模型生成的预测值，蓝点与黑色参考线(y=x)的接近程度直接反映预测精度。结果显示，INN 模型对 3 个目标性能参数的预测值均紧密分布在参考线附近，进一步验证了其较高的预测准确性。

表 2　模型的超参数优化结果

Table 2　Model hyperparameter optimization results

Model type	Hyperparameter	Before optimization	After optimization	Before/After optimization's R^2	Optimization method
ANN	Learning rate	0.001	0.010	σ_c:0.82/0.82	Experience-based/ Grid search
	Hidden layers	4	2	σ_{tu}:0.74/0.83	
	Epochs	250	2500	ε_{tu}:0.72/0.88	
INN	Optimizer	Adam	Adam		
	Epochs	250	2500	σ_c:0.96/0.99	
	Batch size	64	32	σ_{tu}:0.96/0.98	
	Learning rate	0.010	0.001	ε_{tu}:0.98/0.99	
SVR	*C*	1000	100		
	Kernel type	Rbf	rbf	σ_c:0.70/0.82	
	Epsilon	0.01	0.10	σ_{tu}:0.60/0.75	
GBRT	N-estimators	500	190	ε_{tu}:0.60/0.71	
	Learning rate	0.018	0.019		
	Max depth	8	6	σ_c:0.80/0.91	Grid search
	Min samples leaf	10	3	σ_{tu}:0.86/0.90	
	Min samples split	2	4	ε_{tu}:0.81/0.93	
XGBoost	Max depth	10	3		
	Learning rate	0.2	0.1		
	Colsample bytree	0.5	0.7	σ_c:0.90/0.92	
	Gamma	0	0	σ_{tu}:0.87/0.90	
	Subsample	1.0	0.5	ε_{tu}:0.88/0.96	

如表 3 所示，5 种模型的性能评估结果表明，INN 模型在抗压强度、抗拉强度和拉伸应变率 3 个目标性能上均表现出显著优势，均达到 0.98 及以上[66]。

2.3　特征重要性分析

由于 EGC 的性能受多种配比参数协同影响，传统方法往往难以直接量化各参数的贡献度。为此，本工作选用基于博弈论的 SHAP (SHapley Additive exPlanations)方法进行特征重要性分析。SHAP 方法通过计算 Shapley 值，公平量化各特征对模型预测结果的边际贡献，从而提供一致且直观的模型解释。该方法具有模型无关性，可统一应用于不同模型以确保结果具有可比性，并能同时提供全局特征重要性排序及个体样本预测解释，满足多层次分析需求。基于前期模型评估(表 3)确定的 INN 最优模型，本工作应用 SHAP 方法，深入分析 11 个配比参数对 EGC 的 3 个关键目标性能(抗压强度、抗拉强度、拉伸应变率)的影响机制，分析结果详见图 3。特征重要性分析结果通过 2 种可视化形式呈现，特征贡献柱状图直观展示各参数对目标性能的相对影响程度，其中参数按平均 SHAP 值降序排列，SHAP 值越大表明该参数对性能预测的贡献越显著；SHAP 散点图则深入揭示参数值与性能之间的定量关系，图中每个数据点代表一个样本的 SHAP 值，其颜色梯度(蓝色至红色)对应参数值的连续变化。分析显示，当高参数值(红色区域)与高 SHAP 值区域重合时，表明该参数与目标性能呈正相关；反之，若低参数值(蓝色区域)集中于高 SHAP 值区域，则反映两者存在负相关关系。

GGBS、AAD、AAM、FTS、FLD、FC 及 FL 等参数的 SHAP 值为正(见图 3a)，表明它们对抗压性能具有正向贡献；其中，矿粉掺量、碱激发剂模数和碱当量对模型预测影响尤为显著，其数值增加可显著提升 EGC 抗压强度。相比之下，粉煤灰掺量、砂胶比与水胶比呈现负向 SHAP 值，说明这些变量的增加将抑制 EGC 抗压性能的提升。矿粉中的高活性 CaO 经过解聚、缩聚反应生成更多 C-S-H、C-A-S-H 凝胶并填充在孔隙中，从而显著提升 EGC 的强度[67, 68]。而碱当量直接影响溶液中 OH^- 浓度，较高的碱当量可促进地聚物反应中的解聚过程，有利于强度发展。此外，碱激发剂的模数决定了溶液中活性硅的含量，活性硅组分能与钙铝组分反应形成凝胶体系，提高凝胶结构的致密性[69]。纤维对抗压强度的影响机制主要体现在高抗拉强度纤维(如 PE 纤维)能有效改善 EGC 的受力破坏模式，通过增强纤维与

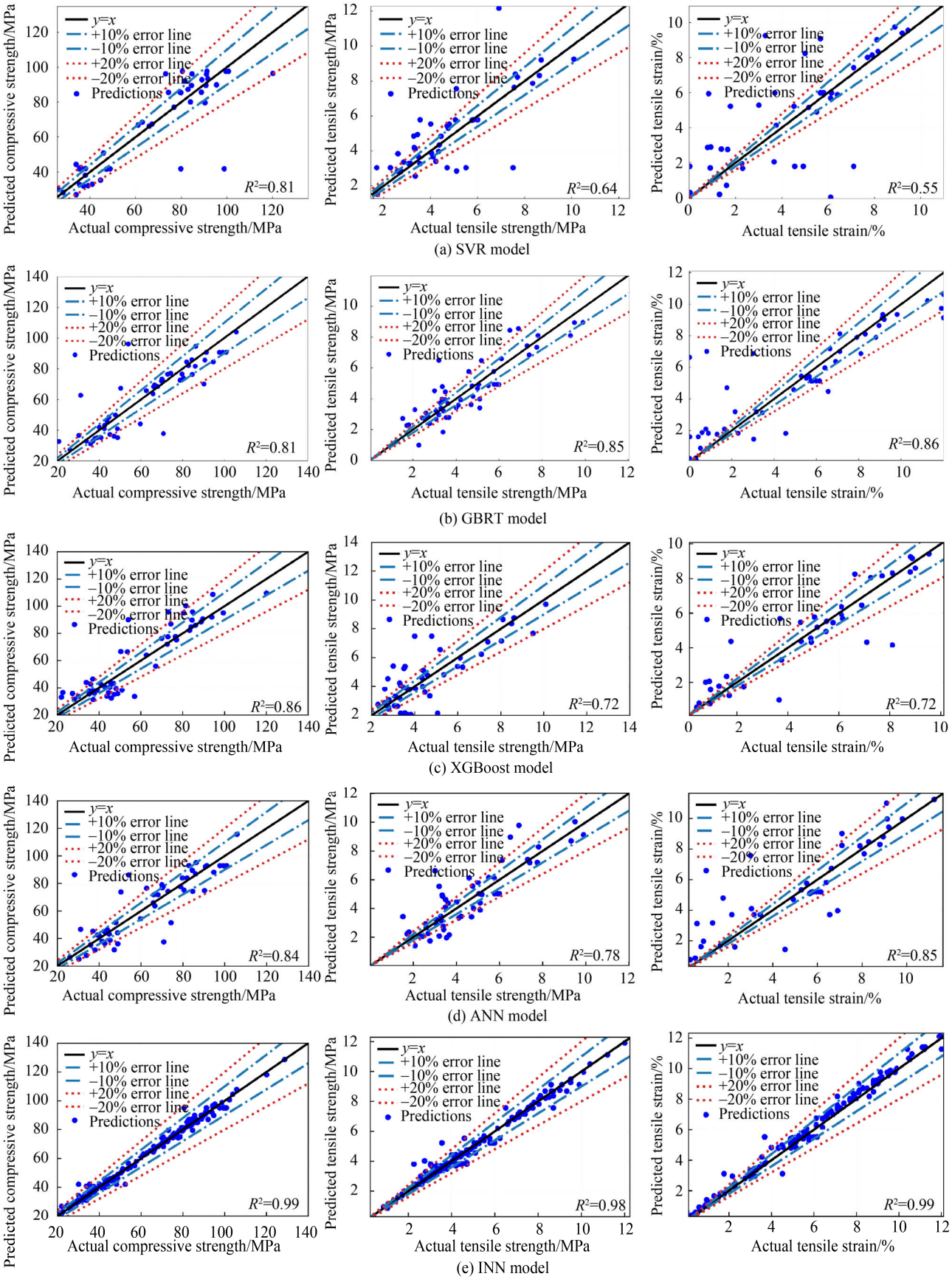


图 2 5 类模型的正向预测精确性评估图

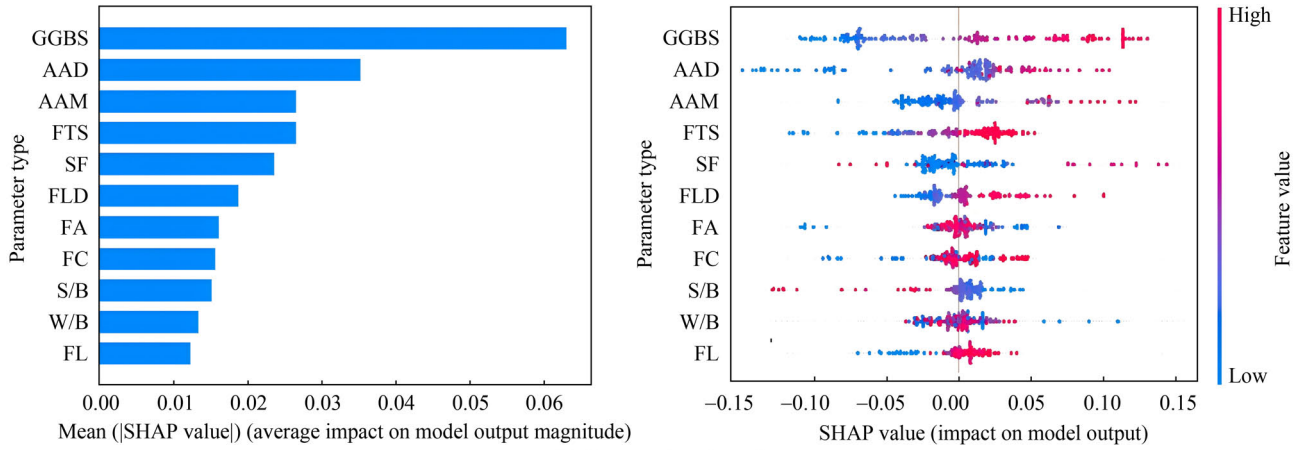
Fig. 2 Predictive accuracy evaluation plots for the five model types

表 3　目标性能预测模型评估指标

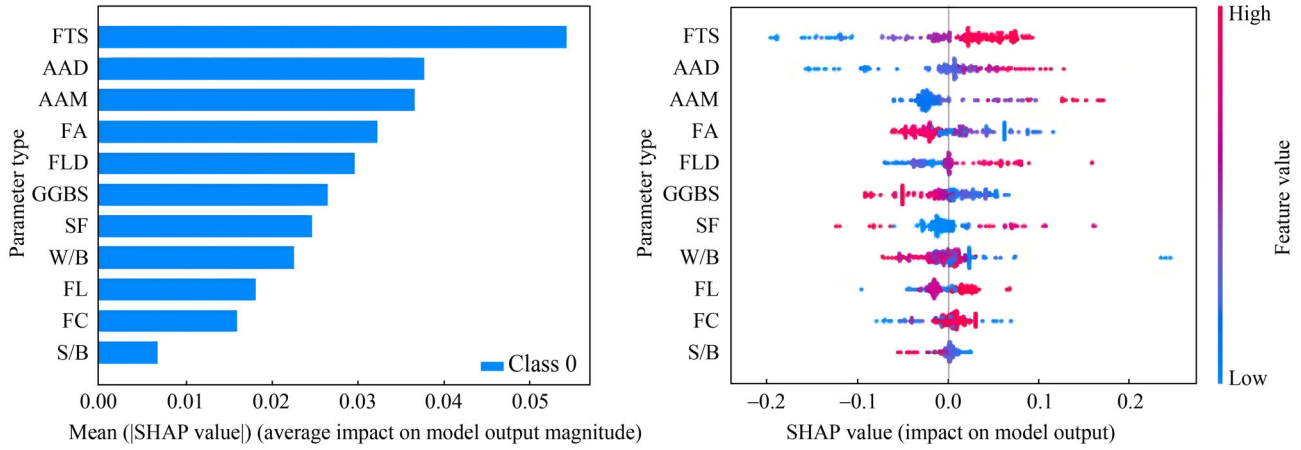
Table 3　Evaluation metrics (R^2) for target performance prediction models

Target performance	SVR	GBRT	XGBoost	ANN	INN
Compressive strength/MPa	0.82	0.81	0.86	0.84	0.99
Tensile strength/MPa	0.64	0.85	0.72	0.78	0.98
Tensile strain/%	0.55	0.86	0.72	0.85	0.99

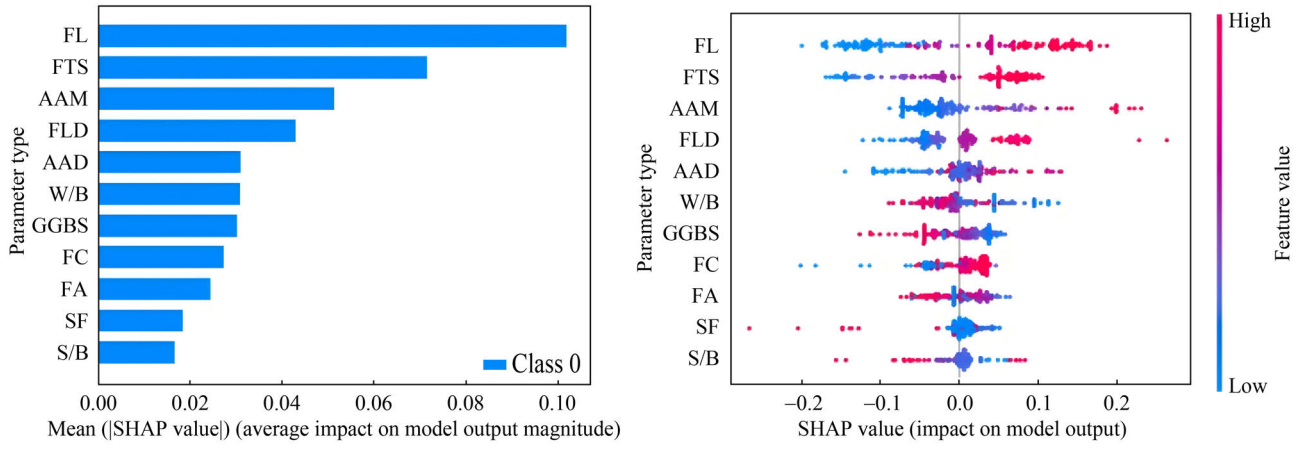
基体界面黏结性能来延缓裂缝扩展，防止材料发生脆性断裂，从而提升整体抗压强度[70–73]。试验结果表明，使用 PE 纤维的试件，其抗压强度显著高于使用 PVA 纤维增强的试件，证实了纤维抗拉强度与材料抗压性能的正相关性。该发现与刘扬等[69]关于地聚物混凝土的研究结论一致，即各参数对抗压强度的影响程度排序为：矿渣掺量>碱当量>水胶比>水玻璃模数。



(a) Compressive strength



(b) Tensile strength



(c) Tensile strain

图 3　基于 SHAP 的特征重要性分析

Fig. 3　Feature importance analysis based on SHAP values for target properties

由图 3b 可见，在预测 EGC 抗拉强度时，FTS、AAM、AAD、FLD 和 FL 呈现正向贡献，GGBS、W/B 和 S/B 则呈负向贡献。影响 EGC 抗拉强度的显著变量包括纤维抗拉强度、碱当量、碱激发剂模数及粉煤灰掺量，其中纤维抗拉强度是对 EGC 抗拉强度影响最显著的变量，这是由于在进行单轴拉伸试验时，高抗拉强度的纤维能更有效地实现应力传递，促进多裂缝开展，从而表现出更高的延性和抗拉强度。纤维掺量对拉伸性能影响呈现非线性特征。纤维掺量过低时，纤维难以充分发挥桥接作用；掺量过高则易引起纤维团聚，破坏基体均匀性，进而影响材料性能。碱激发剂的碱当量与模数决定了反应环境的碱度与活性硅组分的含量，影响反应产物的生成量和基体致密化程度，进而对基体强度产生直接影响[71, 74]。此外，粉煤灰活性相对较低，且颗粒多为球形结构，过量掺入粉煤灰会引入类球形的缺陷结构，导致材料在受力状态下产生应力集中现象，削弱材料强度。

由图 3c 可见，EGC 的拉伸应变率主要受纤维和碱激发剂的协同作用影响。其中，纤维长度(FL)、纤维抗拉强度(FTS)、碱激发剂模数(AAM)、纤维长径比(FLD)和纤维掺量(FC)呈现显著正向贡献，而水胶比(W/B)、矿粉掺量(GGBS)和硅灰掺量(SF)则表现出负向影响，这是由于较高的纤维抗拉强度能够促进基体内多重裂缝扩展，避免纤维过早断裂；而较长的纤维增大了桥接区域，从而提升拉伸性能[56]。碱当量通过调控激发剂中的氧化钠含量，提高碱激发剂的 pH 值，从而促进地聚合反应进程，并生成更多 N-A-S-H 凝胶，以增强基体强度；与此同时，碱激发剂模数影响水化硅铝酸钠的结构演化。二者的协同作用促使材料在拉伸过程中形成稳定的微裂纹扩展机制，进而改善 EGC 的拉伸性能[66, 75]。水胶比和矿渣掺量的增加会降低材料的拉伸应变率，这与基体孔隙率增加、纤维与基体间界面过渡区弱化有关。

2.4 变量交互影响

为进一步探究重要配比参数对 EGC 性能的交互影响，对各性能指标重要性排前 4 的特征进行交互效应研究。首先，对配比参数对 EGC 抗压强度影响进行探讨，结果见图 4。由图 4 可见，在 GGBS 与 AAD 的交互作用方面，当碱当量超过 6%时，二者表现出显著的协同增强效应，这源于高碱环境下矿粉活性组分能够发生更充分的解聚–缩聚反应，促进高聚合度地聚物的形成[76]。然而，当碱当量降至 3%时，其抗压强度显著低于 6%和 9%碱当量组，表明碱当量需维持在 6%以上，方能显著提升 EGC 的抗压强度，低于此阈值则强化效果减弱。

由图 4 可见，GGBS 和 AAM 之间呈现相互促进的趋势，但当 AAM 仅为 1.2，GGBS 量小于 60%时，强度提升有限。这表明，该协同效应存在明显的阈值特性。从图 4 中可以看出 GGBS 与 FTS 间的关系，使用低强度纤维时，矿粉掺量增加能够有效提升强度，这是因为低强度基体与低强度纤维之间的界面黏结性能更优，使得应力能够有效传递，从而实现复合材料强度的显著提升[77]。相比之下，高强度纤维需要匹配相应的高强度基体才能充分发挥增强作用，否则在高矿粉掺量区域会出现强度增长迟滞现象。

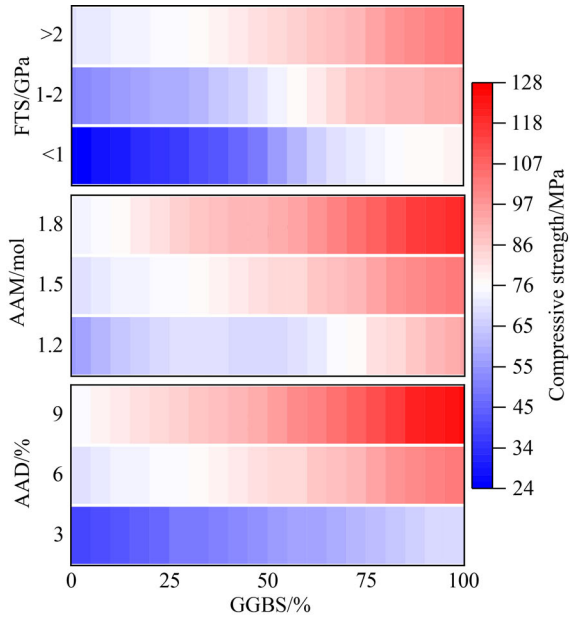


图 4 双变量对抗压强度的影响规律

Fig. 4 Influence patterns of dual variables on compressive strength

图 5 为关键参数对 EGC 抗拉强度的影响机制。由图 5 可见，EGC 的抗拉强度与纤维抗拉强度之间并非简单的线性关系。当纤维抗拉强度低于 2000 MPa 时，抗拉强度随碱当量和模数的增加而显著提升，表明此时基体与纤维之间存在良好的协同作用。然而，当碱当量和碱激发剂模数超过临界值后，基体强度提升效果趋于饱和甚至下降；且当纤维强度与基体强度不匹配时，继续增加纤维强度并不能显著提升复合材料的抗拉强度[78]。进一步分析表明，粉煤灰掺量对强度发展具有重要影响。当粉煤灰掺量达到 0.8 时，虽然抗拉强度仍与纤维强度呈正相关，但其绝对值显著低于低

粉煤灰掺量组别，这主要归因于粉煤灰基地聚物基体强度较低，应力无法连续传递[79]。随着粉煤灰掺量降低，矿粉基体的增强作用得以充分发挥，使得复合材料在相对较低的纤维强度下即可获得较高的抗拉强度。

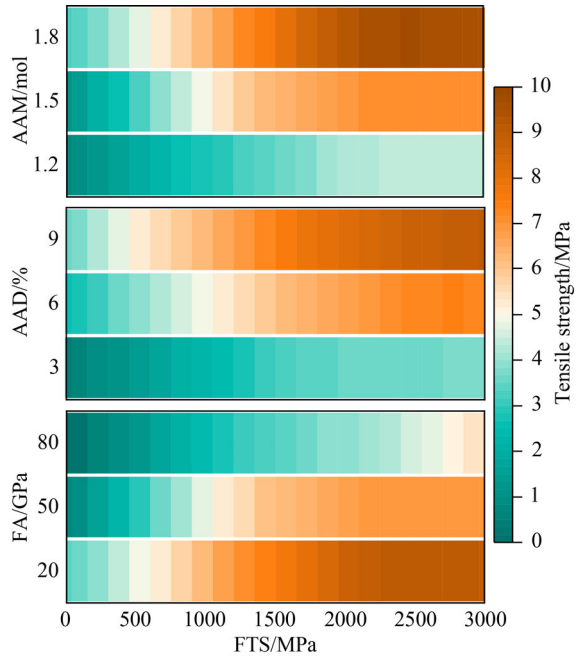


图 5　双变量对抗拉强度的影响规律

Fig. 5　Influence patterns of dual variables on tensile strength

图 6 为双变量对拉伸应变率的影响规律。由图 6 可以看出，纤维长度和纤维抗拉强度对拉伸应变率存在明显的相互促进关系，较长的纤维和较高的纤维抗拉强度可有效提升材料的延性，这主要归因于纤维桥接作用的增强。纤维过长往往会影响 EGC 的制备过程，导致纤维分散不均匀，使各项性能降低。当纤维长度大于 18 mm 时，EGC 的延性缓慢增长[80]。而图 6 则反映了基体与纤维的相互作用对纤维拉伸应变率的影响。当纤维长度小于 18 mm 时，碱激发剂模数与拉伸应变率呈现明显的强正相关，表明此时基体与纤维之间的黏结作用良好。SHAP 分析表明 GGBS 对抗压强度贡献最为显著(见图 3a)，图 4 进一步揭示了当矿粉掺量处于 50%~80%区间时，其与碱当量(AAD≥6%)及碱激发剂模数(AAM≈1.5~1.8)的协同作用可显著提升抗压强度与基体密实度，GGBS 过高(>80%)或过低(<50%)均可能导致反应不充分或基体脆性增加。碱当量直接影响 OH^-浓度，碱激发剂模数决定活性硅含量，二者协同调控地聚物反应进程。

图 4 与图 5 表明，当碱当量低于6%时，体系反应活性不足，高于9%则易引起碱骨料反应；碱激发剂模数在 1.5~1.8 范围内可优化硅铝酸盐凝胶结构，提升基体强度与纤维–基体界面黏结性能。图 6 表明纤维长度与抗拉强度之间存在明显协同效应，纤维过短(<12 mm)，桥接作用有限，过长(>20 mm)则易导致纤维分散不均匀；抗拉强度接近 2500 MPa 时，纤维能有效传递应力、促进多裂缝开展，实现高韧性与高抗拉强度的平衡(见图 3b 和图 3c)。综合考虑各项性能指标，EGC 的配合比设计建议采用以下优化区间：矿粉掺量 50%~80%，碱当量 6%~9%，碱激发剂模数 1.5~1.8，纤维长度 12~20 mm，纤维抗拉强度约 2500 MPa。

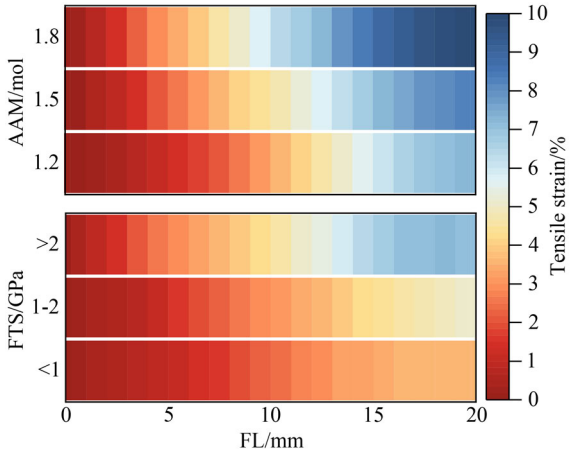


图 6　双变量对拉伸应变率的影响规律

Fig. 6　Influence patterns of dual variables on tensile strain

2.5　最优预测模型的试验验证

利用 INN 对试验中的 10 组配合比进行性能预测，再与试验真实值进行对比，验证最优模型性能预测的可靠性，结果如表 4 所示。基于 INN 模型对已知配合比 EGC 的关键力学性能(抗压强度、抗拉强度、拉伸应变率)进行预测时，其预测精度(R^2)均达到 0.98 及以上(见表 3)。将模型生成的预测值与真实值进行对比发现，平均误差为 7.78%，最低误差仅为 0.22%。抗压强度与抗拉强度的平均误差分别在 4.25%和 8.22%，而拉伸应变率的误差在 10.48%，说明这 3 个性能指标的预测误差均在±10%的合理范围内。将经过 INN 正向预测验证的数据放入数据集中以扩充数据集，进行下一步多目标优化。

利用 SVR、XGBoost、GBRT、ANN、INN 等多种机器学习模型，基于 EGC 数据库，利用 EGC 配比参数对 EGC 3 个目标性能(抗压强度、抗拉强度和拉伸应变率)进行正向预测；同时结合模型预测性能评估指标，选出预测精度较优的模型 INN，INN 模型具有独特的双向映射机制，能更好地处理多维

度复杂数据关系，其平均预测精度为 0.98，远超其他模型。利用 INN 模型输入具体的配比进行目标性能值预测，并与实际试验数据进行对比，其误差在±10%的合理范围内。

表 4 预测值与真实值对比

Table 4 Comparison of Predicted vs. Actual values for target properties

Variable								Predictied value			Actual value		
GGBS	FA	SF	AAM	AAD	S/B	W/B	FC	σ_c	σ_{tu}	ε_{tu}/%	σ_c	σ_{tu}	ε_{tu}/%
0.50	0.5	0.00	1.5	0.06	0.25	0.38	2	78.5	7.5	7.12	82.9	6.8	7.50
0.70	0.3	0.00	1.5	0.06	0.25	0.38	2	95.6	8.6	7.08	95.4	7.9	7.70
0.60	0.4	0.00	1.5	0.06	0.25	0.38	2	87.9	8.2	7.13	86.3	7.7	8.20
0.50	0.5	0.00	1.1	0.06	0.25	0.38	2	75.5	5.8	5.79	72.6	5.3	6.60
0.50	0.5	0.00	1.3	0.06	0.25	0.38	2	77.5	6.7	6.42	74.5	5.9	7.40
0.44	0.5	0.06	1.5	0.06	0.25	0.38	2	68.4	5.7	7.38	72.9	5.7	8.00
0.50	0.5	0.00	1.3	0.06	0.25	0.36	1	74.5	5.9	6.32	70.8	5.3	7.10
0.50	0.5	0.00	1.3	0.06	0.25	0.38	1	72.4	5.7	5.79	76.4	6.0	6.60
0.50	0.5	0.00	1.3	0.06	0.25	0.40	1	74.5	5.6	5.42	79.9	6.6	6.00
0.50	0.5	0.00	1.3	0.06	0.30	0.38	1	70.5	5.5	5.78	76.4	5.8	6.60

Note: In the above mix proportions, the values of the three parameters FL, FLD, and FTS are identical, being 18, 0.75, and 3000, respectively.

3 EGC 的多目标靶向性能优化设计

3.1 模型介绍

在超高韧性地聚物复合材料多目标优化设计中，需同时优化抗压强度、抗拉强度与拉伸应变率 3 个目标性能指标。由于这些目标之间存在复杂权衡关系，传统单目标优化方法难以有效捕捉其非线性交互机制。本工作提出一种结合 CatBoost 回归模型与 NSGA-III多目标进化算法的靶向性能优化框架，通过设置不同的优化任务与权重配置，真正实现 EGC 配合比的可定制化、精准化的“靶向”设计，从而显著提升材料设计效率(见图 7)。

3.1.1 Catboost 模型 CatBoost 模型在小样本预测中，首先，可有效缓解模型在高维有限数据下的过拟合问题；其次，内置的特征组合策略能自动捕捉配比参数与多目标性能间的复杂非线性关系；最后，相较于传统响应面法，该模型无需预设多项式阶数，更适应高维非平衡数据特性。

3.1.2 NSGA-III NSGA-III是基于达尔文进化论原理的多目标优化算法，通过模拟自然选择与遗传变异机制，对候选解集进行迭代进化，最终逼近 Pareto 最优前沿。相较于 NSGA-II 算法，NSGA-III 的核心创新在于引入参考点机制，有效解决了高维目标空间下解集多样性维护的难题，这一特性使其特别适用于土木工程中需同时权衡多个竞争性指标的优化问题，如结构设计中的强度、成本与耐久性协同优化。遗传算法已被人们广泛地应用于组合优化、机器学习、信号处理、自适应控制和人工生命等领域[81]。

NSGA-III 通过均匀分布的参考点将归一化后的目标空间划分为若干子区域，个体选择时优先保留关联到稀疏参考点的解(见图 8)。这种机制可类比于“荷载工况覆盖”思想，确保解集全面表征不同设计目标的权衡关系。例如，在超高韧性地聚物复合材料配合比优化中，参考点可系统覆盖“高强度–高拉伸应变”、“中等强度–低拉伸应变”等典型设计方向。

CatBoost 模型和遗传算法是相辅相成的。没有准确的模型，遗传算法即使再强大，也可能因为错误的预测而找不到真正好的解。反之，没有高效的优化算法，即使有准确的模型，也难以在巨大的参数空间中找到最优解。如果模型的预测不准确，那么优化结果也会偏离实际。因此，在优化之前，需要确保模型在测试集上有良好的表现，即 R^2 值高、RMSE 低等。

3.2 约束条件设置

约束条件设置是遗传算法多目标优化的重要部分，关系到输出结果的精度。本工作结合第 2 章中 2.3 特征重要性分析及 2.4 变量交互影响的结果，将矿粉掺量设置为 0.5~0.8，碱当量设置为≤9% (见表 5)。当纤维掺量超过 2%或纤维长度大于 20 mm 时会影响基体内流动度，不能发挥纤维在基体内的桥接作用[7]。为了保证复合材料具有一定拉伸应变能力，纤维掺量设置不宜低于 0.75%，将纤维掺量设置在 0.75%~2.00%，纤维长度设置于 12~20 mm 范围[82]。设置水胶比的变化范围在 0.22~0.42，以保证超高韧性地聚物复合材料具有一定和易性，同时避免材料泌水[7]。同时设置矿粉掺量、粉煤灰掺量、硅灰掺量之和等于 1。

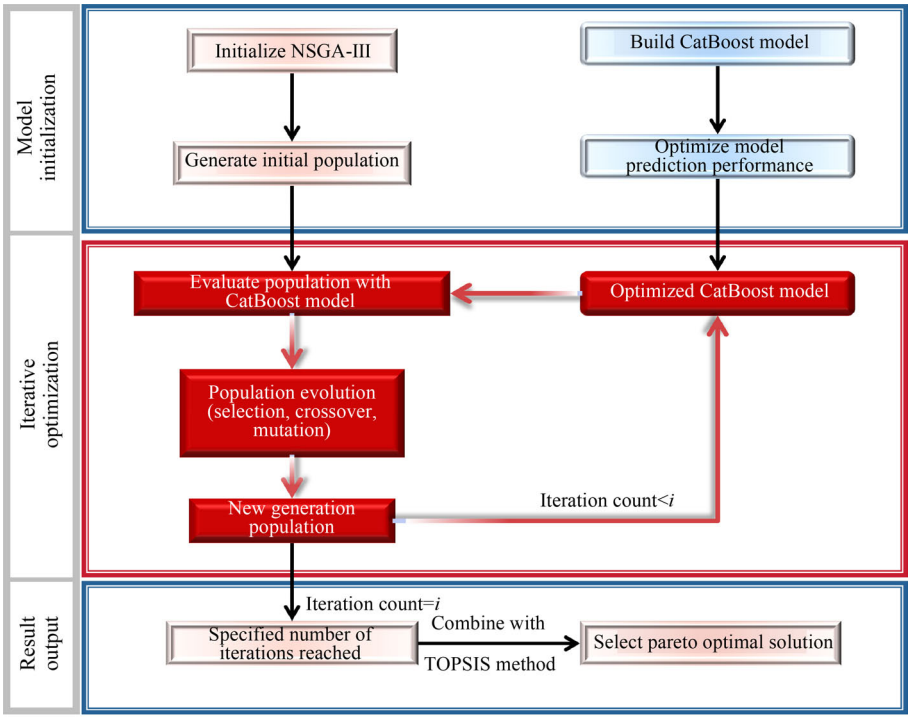


图 7　CatBoost-NSGA-III多目标优化框架

Fig. 7　CatBoost-NSGA-III multi-objective optimization framework

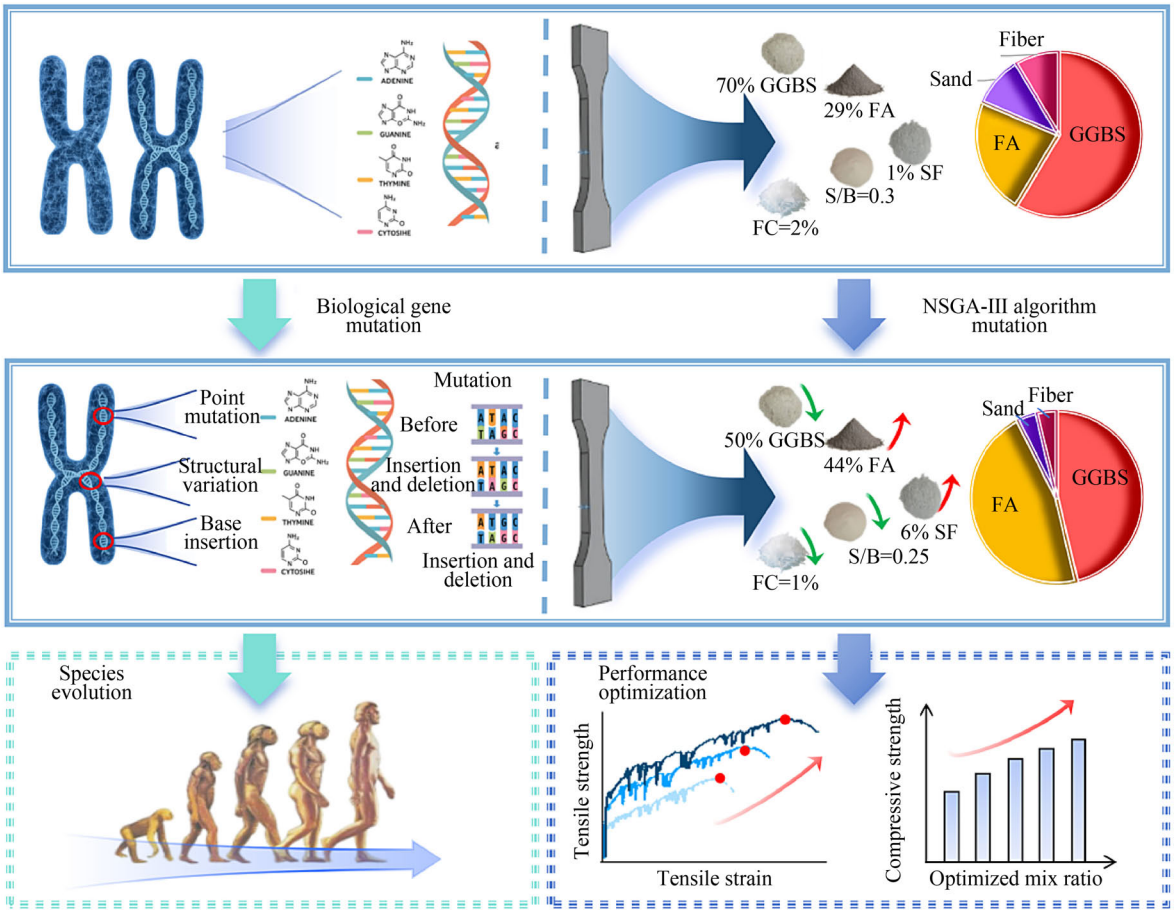


图 8　遗传算法 NSGA-III 优化思路

Fig. 8　Conceptual flowchart of the genetic algorithm (NSGA-III) optimization process

表 5 参数约束条件限制

Table 5 Parameter constraints for multi-objective optimization

Variable	GGBS	FA	SF	S/B	W/B	AAM	AAD	FC	FL	FLD	FTS
Min	0.5	0	0.00	0.0	0.22	0.86	4.08	0.75	12	0.0	1000
Max	0.8	1	0.12	1.6	0.42	2.25	9.00	2.00	20	1.5	5000

3.3 多目标靶向性能优化

为验证模型逆向预测配比的可行性，本工作结合常见工程应用场景，提出 3 种多目标优化设计任务，分别是设计最大化目标性能(抗压强度、抗拉强度、拉伸应变率)、设计最大化拉伸应变率和设计给定的目标性能。为进一步优化配比方案选择，本工作引入 TOPSIS (优劣解距离法)对 Pareto 前沿解集进行综合评价。TOPSIS 是一种经典的多准则决策方法，其核心思想是通过计算各方案与理想解和负理想解的相对接近度对其进行排序[83, 84]。通过 TOPSIS 评分对 3 种工程应用场景的候选配比进行排序，筛选出综合性能最优的推荐方案。

3.3.1 目标性能最大化 在 CatBoost 结合 NSGA-III的模型中，将优化问题设置为最大化抗压强度、抗拉强度、拉伸应变率的目标值，设置抗压强度、抗拉强度、拉伸应变率 3 个目标权重均为 1，并通过控制参数精度对生成的 Pareto 重复解进行过滤。共生成 13 个 Pareto 最优解，结合 TOPSIS 算法给 13 个解评分，评分越高代表解越优。结合 TOPSIS 分数，0.60 分为最高分，其对应解为最优解，将此组别编号为“MAX3”，以进行下一步试验验证，见表 6。将所得的所有最优解可视化，见图 9 和图 10。由图 10 可见，在本模型输出的结果中，EGC 的抗压强度与抗拉强度呈正相关关系，而拉伸应变率则与抗压强度和抗拉强度呈负相关关系，综述[7]也有类似的结论。

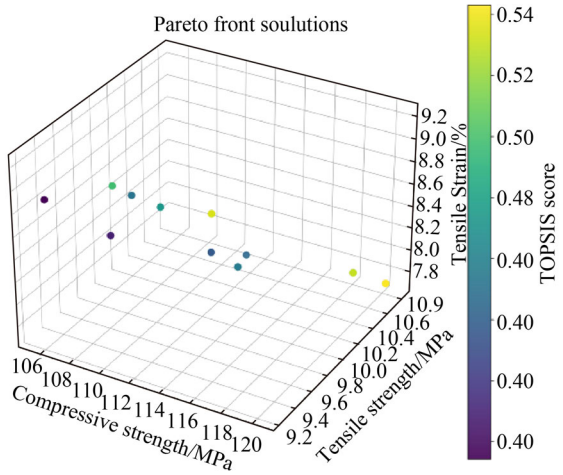
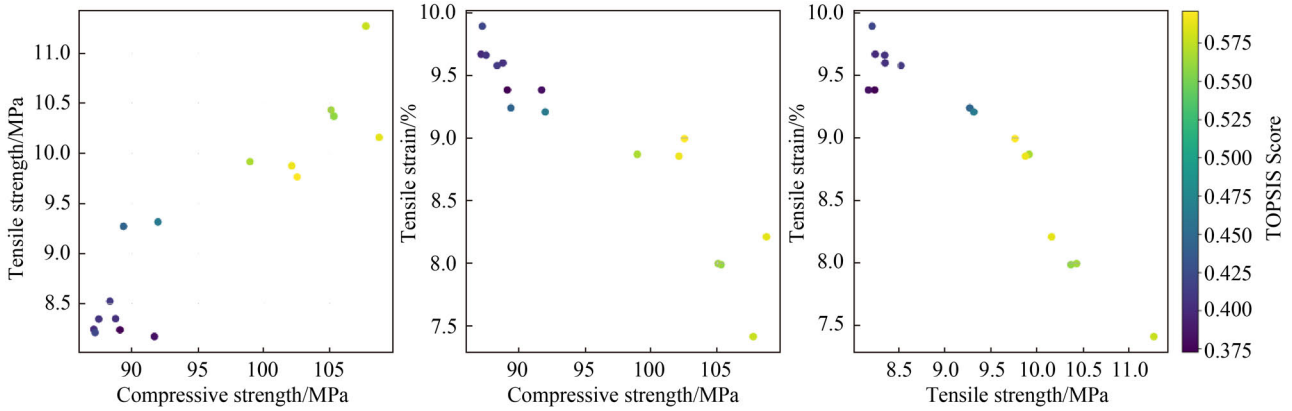


图 9 3 个目标变量之间的关系

Fig. 9 Relationships between the three target performance variables



(a) Compressive strength *vs*. Tensile strength (b) Compressive strength *vs*. Tensile strain (c) Tensile strength *vs*. Tensile strain

图 10 双目标性能间关系

Fig. 10 Relationships between pairs of target performance variables

3.3.2 拉伸应变率最大化 设置拉伸应变率的权重为 1，设置抗压强度和抗拉强度两个目标权重均为 0.01，将优化问题控制为最大化拉伸应变率，进一步生成配比。由表 7 可知，基于 TOPSIS 评分，0.42 分对应组别为最优解，将此组编号为“MAXS”，以便开展后续试验验证。

3.3.3 设计给定目标值 通过设置抗压强度、抗拉强度、拉伸应变率的权重为 1，将优化问题设置为目标具体值设计，进一步生成配比。利用 CatBoost 模型结合 NSGA-III进行多目标优化，生成最接近目标性能的 1 组配比，并开展试验，该组为 Pareto 前沿上最接近预设目标的唯一最优解，其抗压强度、抗拉强度、拉伸应变率分别为 80 MPa、5 MPa、8%，如表 8 所示。将最优组编号为“TARV”，进行后续试验验证。

3.4 试验验证

3.4.1 原材料及试验方法 基于以上 3 个任务所生成的配合比(见表 9)，MAX3、MAXS 和 TARV 组

分别对应设计最大化目标性能(抗压强度、抗拉强度、拉伸应变率)、设计最大化拉伸应变率和设计给定的目标性能等任务中的最优组。为使试验结果更具普适性，本工作中矿粉选用 S95 矿粉，粉煤灰选择 F 类一级粉煤灰，硅灰选择实验级硅灰，并选取高纯度石英砂作为细集料，结合模型所生成纤维抗拉强度范围在 2718~3000 MPa，确定试验用纤维种类为 PE 纤维，而在实际纤维生产工艺中，由于制造技术的限制，很难获得具有特殊性能的纤维，例如 14.69 mm 的纤维长度或 13.84 μm 的纤维直径。因此，在验证试验中选择了与生成配比中平均值最接近的纤维长度与直径。同时为避免浆体过早凝结，添加一定量缓凝剂，试验验证配合比和原材料性能分别见表 9~表 11 和图 11。

表 6　生成配合比

Table 6　Generated mix proportions

GGBS	FA	SF	AAM	AAD	S/B	W/B	FC	FL	FLD	FTS	σ_c	σ_{tu}	ε_{tu}	TOPSIS score
0.74	0.26	0.00	1.39	8.15	0.19	0.26	1.54	17.98	1.37	2945	89.09	8.24	9.38	0.37
0.75	0.25	0.00	1.39	8.15	0.19	0.26	1.54	17.97	1.37	2943	91.69	8.17	9.38	0.38
0.74	0.26	0.00	1.39	7.79	0.08	0.25	1.54	17.92	1.36	3000	87.10	8.24	9.67	0.40
0.77	0.23	0.00	1.39	8.12	0.08	0.24	1.53	17.96	1.37	3000	88.75	8.35	9.60	0.40
0.60	0.37	0.03	1.39	8.13	0.08	0.24	1.62	18.41	1.67	2872	89.36	9.27	9.24	0.44
0.68	0.29	0.03	1.39	8.13	0.01	0.24	1.63	17.84	1.67	2871	91.96	9.32	9.21	0.47
0.71	0.29	0.00	1.39	8.15	0.30	0.22	1.74	17.95	1.56	2937	105.29	10.37	7.99	0.56
0.71	0.29	0.00	1.39	8.15	0.30	0.22	1.89	17.96	1.55	2940	105.07	10.43	8.00	0.57
0.71	0.27	0.02	1.39	8.14	0.27	0.24	1.48	17.91	1.11	2936	98.93	9.92	8.87	0.57
0.71	0.27	0.02	1.39	8.14	0.26	0.22	1.49	17.90	1.33	3000	107.71	11.27	7.41	0.58
0.68	0.29	0.03	1.36	8.13	0.30	0.24	1.63	17.82	1.66	2880	108.72	10.16	8.21	0.59
0.74	0.25	0.01	1.39	7.95	0.27	0.24	1.53	17.95	1.36	2936	102.09	9.88	8.85	0.59
0.68	0.28	0.03	1.39	8.13	0.30	0.24	1.64	17.79	1.55	2878	102.51	8.71	9.79	0.60

表 7　生成配合比

Table 7　Generated mix proportions

GGBS	FA	SF	AAM	AAD	S/B	W/B	FC	FL	FLD	FTS	σ_c	σ_{tu}	ε_{tu}	TOPSIS score
0.74	0.26	0.00	1.39	8.12	0.10	0.24	1.53	17.97	1.36	3000	87.48	6.35	9.66	0.41
0.73	0.27	0.00	1.45	7.50	0.08	0.24	1.53	17.96	1.35	2856	88.32	6.52	9.58	0.41
0.70	0.30	0.00	1.39	7.78	0.10	0.24	1.54	17.92	1.37	2997	87.20	6.71	10.89	0.42

表 8　生成配合比

Table 8　Generated mix proportion

GGBS	FA	SF	AAM	AAD	S/B	W/B	FC	FL	FLD	FTS	σ_c	σ_{tu}	ε_{tu}	TOPSIS score
0.50	0.50	0.00	1.1	8.4	1.5	0.3	1.6	13.3	1.3	2194	80	5	8	0.5

表 9　验证配合比

Table 9　Validation mix proportions

Group	w(GGBS) /%	w(FA)/%	w(SF)/%	AAM	w(AAD)/%	S/B	W/B	v(FC)/%	FL/mm	FLD/(mm·μm^{-1})	w(Retard)/%
MAX3	69	28	3	1.39	8.13	0.30	0.24	1.64	17.79	1.55	0.03
MAXS	70	30	0	1.39	7.78	0.10	0.24	1.54	17.92	1.37	0.03
TARV	68	25	7	1.50	10.00	1.00	0.36	1.00	19.00	1.30	0.03

Note: In the above mix proportions, GGBS, FA, and SF denote the mass percentages of ground granulated blast-furnace slag, fly ash, and silica fume, respectively, with their sum defined as 100% of the binder content. AAM and AAD are parameters of the activating solution, and AAM is the modulus of the alkali activator, AAD is defined as the mass ratio of Na_2O to the total binder content, while S/B and W/B represent the mass ratios of sand and water to the binder, respectively. Fiber and retarder are incorporated as external additions. FC denotes fiber content, which is expressed as a volume fraction of the total composite. FL means fiber length, and FLD is fiber aspect ratio, defined as the length/diameter ratio. Retard is given as a mass fraction of the total composite. *w*—Mass fraction; *v*—Volume fraction.

表 10　胶凝材料化学组成

Table 10　Chemical composition of materials

w/%	SiO_2	CaO	Al_2O_3	Fe_2O_3	MgO	Na_2O	K_2O	SO_3	TiO_2
Ground granulated blast-furnace slag	39.66	34.2	12.94	1.58	6.94	0.2	1.44	0.72	2.32
Fly ash	40.7	19.5	22.4	7.34	0.85	0.45	0.69	2.17	5.94
Silica fume	92.26	0.49	0.89	1.97	0.96	0.42	1.31	0.33	1.37

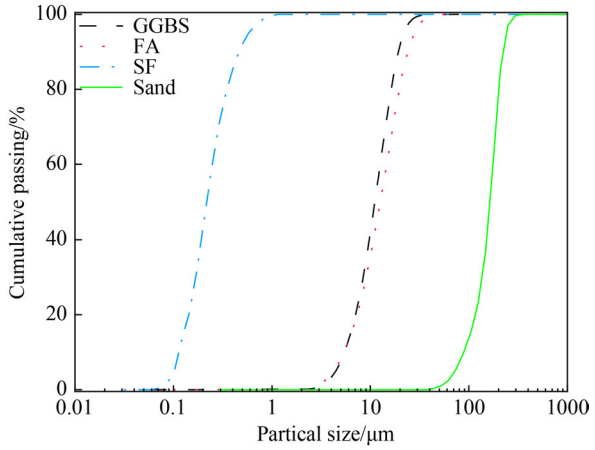


图 11 胶凝材料与细骨料的级配曲线

Fig. 11 Particle size distribution curves of cementitious materials and fine aggregate

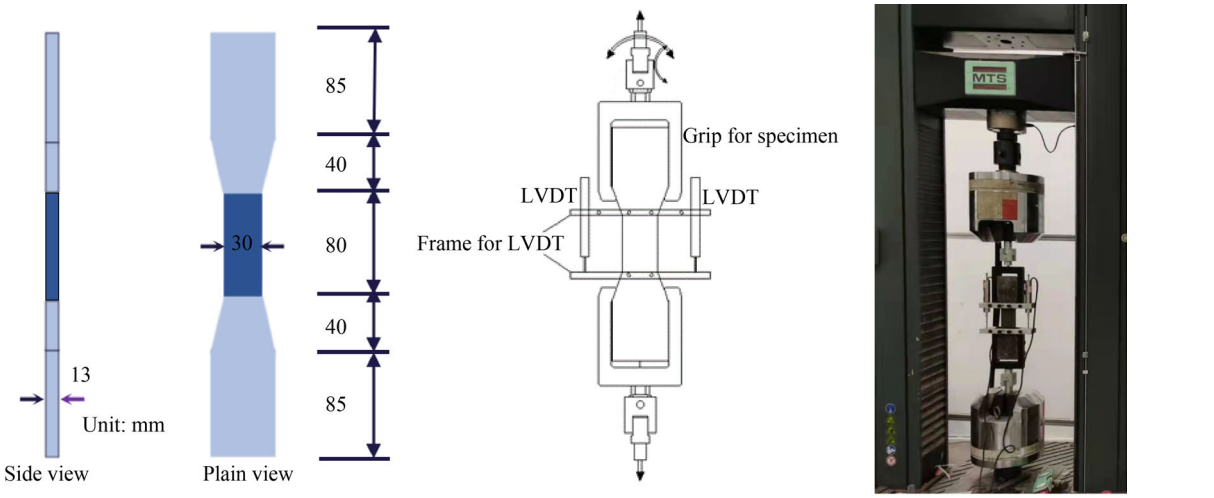
EGC 抗压强度试验参照《水泥胶砂强度检验方法(ISO 法)》(GB/T 17671—2021)[85]。利用 YAW6206 的 200 t 电液压力试验机对 EGC 抗压强度进行测量，加压速率控制在 0.5 MPa/s。抗压强度测试试件选用尺寸为 50 mm×50 mm×50 mm 的立方体。

单轴拉伸试验采用的狗骨模具及仪器见图 12，试件模具尺寸参考 JSCE，采用 300 kN 的 MTS 拉压试验机进行单轴拉伸试验加载，位移控制的加载速率为 1 mm/min，使用 2 个 LVDT 布置在试件中部两侧 80 mm 区段中，记录狗骨在拉伸作用下的应变值，并采用动态信号采集箱采集测量应变值。

表 11 PE 纤维的物理及力学参数

Table 11 Physical and mechanical parameters of PE fiber

Fiber type	Length/mm	Diameter/μm	Length/Diameter	Tensile strength/MPa	Elastic modules/GPa	Density/(g·cm^{-3})
PE	18	20	600	2900	116	0.97



(a) Dog-bone specimen (b) Dog-bone mold (c) Tensile testing machine

图 12 狗骨拉伸试验

Fig. 12 Dog-bone specimen and tensile test setup

3.4.2 试验结果 图 13~图 14 为 3 种优化任务的试验结果对比。由图 13~图 14 可见，在 MAX3 组中，实测抗压强度、抗拉强度和拉伸应变率分别为 95.23 MPa、7.90 MPa 和 9.20%，与预测值的误差分别为 7.1%、9.3%、7.9%。MAXS 组的实测结果为抗压强度 82.56 MPa、抗拉强度 6.71 MPa 和拉伸应变率 10.89%，与预测值的误差分别为 5.3%、10.0%、10.6%，其中拉伸性能的预测误差较大，约 10.3%。TARV 组的实测性能为抗压强度 72.70 MPa、抗拉强度 4.40 MPa 和拉伸应变率 7.39%，与预测值的误差分别为 9.1%、12.0%、8.7%。3 组试验中拉伸性能参数(抗拉强度、拉伸应变率)的预测值与实测值均存在一定偏差，这主要是由于单轴拉伸试验存在系

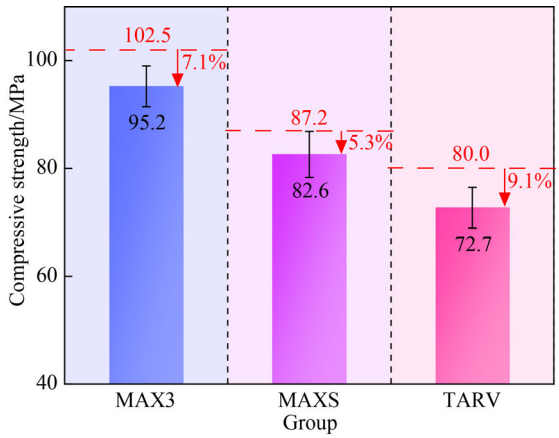


图 13 多目标优化抗压强度预测值与真实值对比

Fig. 13 Predicted *vs.* Actual compressive strength values for multi-objective optimization results

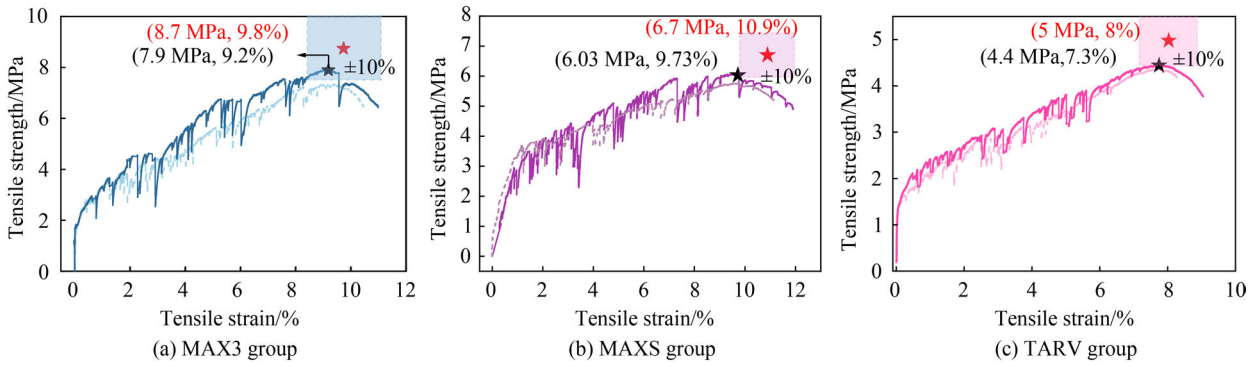


图 14　多目标优化拉伸性能预测值与真实值对比

Fig. 14　Predicted vs. Actual tensile performance values for multi-objective optimization results

统误差：试件几何缺陷及 LVDT 装配操作等均会对试验结果产生影响。此外，实测值均略低于预测值，这与缓凝剂对地聚物早期水化进程的抑制作用直接相关[83, 86]。缓凝剂颗粒会吸附在凝胶表面，抑制前驱体的溶解，阻碍早期反应中水化产物的形成，从而影响强度[87]。

利用 CatBoost 模型与 NSGA-III算法结合，通过限制配比参数约束范围及设置合理的约束条件，对超高韧性地聚物复合材料进行多目标优化，成功构建了基于多目标靶向性能(抗压强度、抗拉强度、拉伸应变率)逆向反演的 EGC 配合比智能设计框架。在已训练模型中设置 3 种任务，分别是最大化 3 个目标性能值、最大化拉伸应变率、设置 3 个目标性能具体值。同时结合 TOPSIS 评分方法，对所有生成的 Pareto 解进行评分，并收集每个任务下生成解中 TOPSIS 最高分解，进行实际目标性能测试，对比真实值与预测值之间的差距，发现 3 组配比的真实值与预测值的误差均在 10%以内，最低误差仅为 5.3%。

4　结论

本工作构建了一个基于 INN、CatBoost 与 NSGA-III算法的 EGC 材料智能设计框架，实现了从性能预测到多目标靶向优化的全流程闭环优化设计。首先，通过高精度的 INN 预测模型与 SHAP 可解释性分析，明确了影响各目标性能的“关键靶点”，如矿粉掺量之于抗压强度、纤维长度与纤维强度之于拉伸性能；进而，通过结合 CatBoost 与 NSGA-III算法，构建了能够主动“瞄准”预设性能目标的优化器；最终，通过设置不同的优化任务，验证了该框架具备“多目标协同靶向”与“单目标精准靶向”的能力，这标志着 EGC 配合比设计实现了从被动调试到主动靶向设计的跨越。主要研究成果如下：

1) 基于 GGBS、FA、SF、S/B、W/B、AAM、AAD、FC、FL、FLD 和 FTS 等 11 项关键配比参数，构建了以 28 d 抗压强度、28 d 抗拉强度及拉伸应变率作为目标性能指标的 EGC 数据库。通过系统评估 SVR、XGBoost、GBRT、ANN 和 INN 5 种模型的精度，确立 INN 为最优预测模型，INN 模型对 EGC 材料的抗压强度、抗拉强度、拉伸应变率的预测精度分别为 0.99、0.98、0.99。利用 INN 模型对 EGC 材料的 10 组配比进行正向预测，预测值与试验值的最低误差率仅为 0.22%，验证了模型的有效性。

2) 基于 SHAP 的全局敏感性分析表明：增加矿粉掺量可通过促进 2 次水化反应显著提升胶凝基体密实度，是改善抗压强度的关键参数；提高 FTS 能有效增强纤维–基体界面过渡区性能，该参数对抗拉强度贡献最为显著；延长 FL 可强化裂纹桥接效应，进而对拉伸应变率产生决定性影响；AAD 与 AAM 作为碱激发反应的核心调控参数，在 3 项性能指标中均表现出系统性影响。该解析定量揭示了材料配比参数与宏观性能的构效关系，为 EGC 材料精准设计提供了理论支撑。

3) 结合 CatBoost 算法与 NSGA-III算法，在严格约束的参数设计空间内实现了 3 类优化任务：全局多目标同步最大化、拉伸应变率专项优化及预设目标值精准匹配。基于 TOPSIS 综合评价体系对 Pareto 最优解集进行量化筛选，优选 3 组配方进行试验验证。试验结果显示，实测性能与模型预测值的最大偏差基本控制在 10%以内(最小误差仅 5.3%)，显著验证了逆向设计框架的工程精度与可靠性，成功建立了从性能指标到配方参数的闭环设计机制。

参考文献:

[1] 鲁博文, 羿庄城, 吴艳光, 等. 几种填料对偏高岭土–粉煤灰基地质聚合物的增强改性[J]. 武汉工程大学学报, 2020, 42(3): 293–297.
LU Bowen, YI Zhuangcheng, WU Yanguang, et al. J Wuhan Inst Technol, 2020, 42(3): 293–297.

[2] YAVUZ E, KUL GUL N I, KOCKAL N U. Characterization of class C and F fly ashes based geopolymers incorporating silica fume[J]. Ceram Int, 2022, 48(21): 32213–32225.

[3] FU C Q, YE H L, ZHU K Q, et al. Alkali cation effects on chloride binding of alkali-activated fly ash and metakaolin geopolymers[J]. Cem Concr Compos, 2020, 114: 103721.

[4] OHNO M, LI V C. An integrated design method of engineered geopolymer composite[J]. Cem Concr Compos, 2018, 88: 73–85.

[5] 孙滢斐, 张攀, 胡敬平, 等. 地聚物在重金属铅固化中的研究进展[J]. 材料导报, 2023, 37(7): 252–258.
SUN Yingfei, ZHANG Pan, HU Jingping, et al. 64. Mater Rev, 2023, 37(7): 252–258.

[6] 刘翼玮, 张祖华, 史才军, 等. 硅灰对高强地聚物胶凝材料性能的影响[J]. 硅酸盐学报, 2020, 48(11): 1689–1699.
LIU Yiwei, ZHANG Zuhua, SHI Caijun, et al. J Chin Ceram Soc, 2020, 48(11): 1689–1699.

[7] ZHONG H, ZHANG M Z. Engineered geopolymer composites: A state-of-the-art review[J]. Cem Concr Compos, 2023, 135: 104850.

[8] 陈庆, 马瑞, 蒋正武, 等. 基于 GA-BP 神经网络的 UHPC 抗压强度预测与配合比设计[J]. 建筑材料学报, 2020, 23(1): 176–183, 191.
CHEN Qing, MA Rui, JIANG Zhengwu, et al. 48. J Build Mater, 2020, 23(1): 176–183, 191.

[9] MOHTASHAM MOEIN M, SARADAR A, RAHMATI K, et al. Predictive models for concrete properties using machine learning and deep learning approaches: A review[J]. J Build Eng, 2023, 63: 105444.

[10] ZOU D L, WU L L, HAO Y F, et al. Composition–strength relationship study of ultrahigh performance fiber reinforced concrete (UHPFRC) using an interpretable data-driven approach[J]. Constr Build Mater, 2023, 392: 131973.

[11] LI Y Q, SHEN J L, LI Y, et al. The data-driven research on the autogenous shrinkage of ultra-high performance concrete (UHPC) based on machine learning[J]. J Build Eng, 2024, 82: 108373.

[12] GAD M A, NIKBAKHT E, RAGAB M G. Predicting the compressive strength of engineered geopolymer composites using automated machine learning[J]. Constr Build Mater, 2024, 442: 137509.

[13] ZHANG P, MAO Y F, YUAN W S, et al. A critical review on modeling and prediction on properties of fresh and hardened geopolymer composites[J]. J Build Eng, 2024, 88: 109184.

[14] ALI EFTEKHAR AFZALI S, ALI SHAYANFAR M, GHANOONI-BAGHA M, et al. The use of machine learning techniques to investigate the properties of metakaolin-based geopolymer concrete[J]. J Clean Prod, 2024, 446: 141305.

[15] PFEIFFER O P, GONG K, SEVERSON K A, et al. Bayesian design of concrete with amortized Gaussian processes and multi-objective optimization[J]. Cem Concr Res, 2024, 177: 107406.

[16] 李硕, 艾丽菲拉·艾尔肯, 罗文波, 等. 基于 AutoML-SHAP 的超高性能混凝土抗压强度可解释预测[J]. 硅酸盐通报, 2024, 43(10): 3634–3644.
LI Shuo, Ailifira Aierken, LUO Wenbo, et al. Bull Chin Ceram Soc, 2024, 43(10): 3634–3644.

[17] 蒋志鹏, 高畅, 汤金辉, 等. 超高性能混凝土早期收缩性能及神经网络预测模型[J]. 硅酸盐学报, 2025, 53(5): 1098–1109.
JIANG Zhipeng, GAO Chang, TANG Jinhui, et al. Early-age shrinkage performance of ultra-high performance concrete and prediction model based on neural network[J]. J Chin Ceram Soc, 2025, 53(5): 1098–1109.

[18] CHEN W G, LIANG L, JIANG F M, et al. New opportunity: Materials genome strategy for engineered cementitious composites (ECC) design[J]. Cem Concr Compos, 2025, 159: 106009.

[19] 钟卿瑜, 粟森, 彭晖. 偏高岭土-矿渣地聚物宏观性能试验及 Lasso 回归模型[J]. 2022(11): 5474–5485.
ZHONG Qingyu, SU Miao, PENG Hui. Acta Materiae Compositae Sinica, 2022(11): 5474–5485.

[20] 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.

[21] SHI L, LIN S T K, LU Y, et al. Artificial neural network based mechanical and electrical property prediction of engineered cementitious composites[J]. Constr Build Mater, 2018, 174: 667–674.

[22] YASWANTH K K, REVATHY J, GAJALAKSHMI P. Artificial intelligence for the compressive strength prediction of novel ductile geopolymer composites[J]. Comput Concr , 2021, 28(1): 55–68.

[23] ALREFAEI Y, DAI J G. Tensile behavior and microstructure of hybrid fiber ambient cured one-part engineered geopolymer composites[J]. Constr Build Mater, 2018, 184: 419–431.

[24] CAI J C, JIANG J Y, GAO X, et al. Improving the mechanical properties of fly ash-based geopolymer composites with PVA fiber and powder[J]. Materials, 2022, 15(7): 2363.

[25] CHEN C C, TSAI Y K, LIN Y K, et al. Experimental and numerical investigation of the mechanical properties of a fiber-reinforced geopolymer mortar blast resistant panel[J]. Polymers, 2023, 15(16): 3440.

[26] CHEN F M, ZHAO J X, ZHANG B F, et al. Physical, mechanical and microstructural properties of ultra-lightweight high-strength geopolymeric composites[J]. Case Stud Constr Mater, 2023, 19: e02446.

[27] CHENG Z J, LIU Z Z, HAO H L, et al. Multi-scale effects of tensile properties of lightweight engineered geopolymer composites reinforced with MWCNTs and steel-PVA hybrid fibers[J]. Constr Build Mater, 2022, 342: 128090.

[28] CHENG Z J, LU Y Y, AN J P, et al. Multi-scale reinforcement of multi-walled carbon nanotubes/polyvinyl alcohol fibers on lightweight engineered geopolymer composites[J]. J Build Eng, 2022, 57: 104889.

[29] DENG Z M, YANG Z F, BIAN J, et al. Advantages and disadvantages of PVA-fibre-reinforced slag- and fly ash-blended geopolymer composites: Engineering properties and microstructure[J]. Constr Build Mater, 2022, 349: 128690.

[30] DONG B Q, LIU C X, SHUMUYE E D, et al. Effect of nano-silica on mechanical properties and microstructure of engineered geopolymer composites[J]. Cem Concr Compos, 2025, 156: 105849.

[31] FAROOQ M, BHUTTA A, BANTHIA N. Tensile performance of

eco-friendly ductile geopolymer composites (EDGC) incorporating different micro-fibers[J]. Cem Concr Compos, 2019, 103: 183–192.

[32] HUMUR G H, ÇEVIK A. Magnesium sulfate resistance of strain-hardening fiber reinforced slag and fly ash-based engineered geopolymer composites[J]. Arabian Journal for Science and Engineering, 2024, 49: 5909–5925.

[33] KAN L L, WANG F, ZHANG Z, et al. Mechanical properties of high ductile alkali-activated fiber reinforced composites with different curing ages[J]. Constr Build Mater, 2021, 306: 124833.

[34] KAN L L, WANG W S, LIU W D, et al. Development and characterization of fly ash based PVA fiber reinforced Engineered Geopolymer Composites incorporating metakaolin[J]. Cem Concr Compos, 2020, 108: 103521.

[35] KUMAR S, SEKHAR DAS C, LAO J C, et al. Effect of sand content on bond performance of engineered geopolymer composites (EGC) repair material[J]. Constr Build Mater, 2022, 328: 127080.

[36] LAO J C, HUANG B T, FANG Y, et al. Strain-hardening alkali-activated fly ash/slag composites with ultra-high compressive strength and ultra-high tensile ductility[J]. Cem Concr Res, 2023, 165: 107075.

[37] LAO J C, HUANG B T, XU L Y, et al. Engineered geopolymer composites (EGC) with ultra-high strength and ductility[M]//Strain Hardening Cementitious Composites. Cham: Springer International Publishing, 2023: 34–42.

[38] LAO J C, HUANG B T, XU L Y, et al. Seawater sea-sand engineered geopolymer composites (EGC) with high strength and high ductility[J]. Cem Concr Compos, 2023, 138: 104998.

[39] LEE B Y, CHO C G, LIM H J, et al. Strain hardening fiber reinforced alkali-activated mortar–A feasibility study[J]. Constr Build Mater, 2012, 37: 15–20.

[40] LEE S K, OH T, BANTHIA N, et al. Optimization of fiber aspect ratio for 90 MPa strain-hardening geopolymer composites (SHGC) with a tensile strain capacity over 7.5%[J]. Cem Concr Compos, 2023, 139: 105055.

[41] LEE Y, CHOI J I, KIM H K, et al. Effects of a defoamer on the compressive strength and tensile behavior of alkali-activated slag-based cementless composite reinforced by polyethylene fiber[J]. Compos Struct, 2017, 172: 166–172.

[42] LIN J X, CHEN G, PAN H S, et al. Analysis of stress-strain behavior in engineered geopolymer composites reinforced with hybrid PE-PP fibers: A focus on cracking characteristics[J]. Compos Struct, 2023, 323: 117437.

[43] LIU Y W, ZHANG Z H, SHI C J, et al. Development of ultra-high performance geopolymer concrete (UHPGC): Influence of steel fiber on mechanical properties[J]. Cem Concr Compos, 2020, 112: 103670.

[44] NEMATOLLAHI B, SANJAYAN J, AHMED SHAIKH F U. Tensile strain hardening behavior of PVA fiber-reinforced engineered geopolymer composite[J]. J Mater Civ Eng, 2015, 27(10): 04015001.

[45] NEMATOLLAHI B, SANJAYAN J, QIU J S, et al. High ductile behavior of a polyethylene fiber-reinforced one-part geopolymer composite: A micromechanics-based investigation[J]. Arch Civ Mech Eng, 2017, 17(3): 555–563.

[46] NEMATOLLAHI B, SANJAYAN J, QIU J S, et al. Micromechanics-based investigation of a sustainable ambient temperature cured one-part strain hardening geopolymer composite[J]. Constr Build Mater, 2017, 131: 552–563.

[47] NGUYỄN H H, NGUYỄN P H, LƯƠNG Q H, et al. Mechanical and autogenous healing properties of high-strength and ultra-ductility engineered geopolymer composites reinforced by PE-PVA hybrid fibers[J]. Cem Concr Compos, 2023, 142: 105155.

[48] PAN H S, XIE Z H, CHEN G, et al. Dynamic compressive behavior of high-strength engineered geopolymer composites[J]. J Build Eng, 2023, 80: 108036.

[49] PENG Y Q, ZHENG D P, PAN H S, et al. Strain hardening geopolymer composites with hybrid POM and UHMWPE fibers: Analysis of static mechanical properties, economic benefits, and environmental impact[J]. J Build Eng, 2023, 76: 107315.

[50] WANG B G, FENG H, HUANG H, et al. Bonding properties between fly ash/slag-based engineering geopolymer composites and concrete[J]. Materials, 2023, 16(12): 4232.

[51] WANG F, MA J X, DING Y, et al. Engineered geopolymer composite (EGC) with ultra-low fiber content of 0.2%[J]. Constr Build Mater, 2024, 411: 134626.

[52] WANG Y, CHAN C L, LEONG S H, et al. Engineering properties of strain hardening geopolymer composites with hybrid polyvinyl alcohol and recycled steel fibres[J]. Constr Build Mater, 2020, 261: 120585.

[53] WANG Y, WANG Y S, ZHANG M Z. Effect of sand content on engineering properties of fly ash-slag based strain hardening geopolymer composites[J]. J Build Eng, 2021, 34: 101951.

[54] WANG Y, ZHONG H, ZHANG M Z. Experimental study on static and dynamic properties of fly ash-slag based strain hardening geopolymer composites[J]. Cem Concr Compos, 2022, 129: 104481.

[55] WU J Q, LI B, CHEN Y T, et al. Effects of polyethylene fiber dosage and length on the properties of high-tensile-strength engineered geopolymer composite[J]. J Mater Civ Eng, 2023, 35(8): 04023224.

[56] ZAHID M, SHAFIQ N, RAZAK S N A, et al. Investigating the effects of NaOH molarity and the geometry of PVA fibers on the post-cracking and the fracture behavior of engineered geopolymer composite[J]. Constr Build Mater, 2020, 265: 120295.

[57] ZHANG D S, WANG Y F, ZHANG T H, et al. Engineering and microstructural properties of carbon-fiber-reinforced fly-ash-based geopolymer composites[J]. J Build Eng, 2023, 79: 107883.

[58] ZHAO Y J, SHI T, CAO L Y, et al. Influence of steel slag on the properties of alkali-activated fly ash and blast-furnace slag based fiber reinforced composites[J]. Cem Concr Compos, 2021, 116: 103875.

[59] ZHONG H, WANG Y, ZHANG M Z. Quasi-static and dynamic mechanical properties of engineered geopolymer composites with hybrid PVA and recycled steel fibres[J]. J Adv Concr Technol, 2023, 21(5): 405–420.

[60] ZHONG H, ZHANG M Z. Effect of recycled tyre polymer fibre on engineering properties of sustainable strain hardening geopolymer composites[J]. Cem Concr Compos, 2021, 122: 104167.

[61] 阚黎黎, 庞成凯, 王飞, 等. 聚乙烯纤维增强高延性碱矿渣复合材料的拉压性能及裂缝分布[J]. 复合材料学报, 2021, 38(12): 4305–4312.
KAN Lili, PANG Chengkai, WANG Fei, et al. Acta Mater Compos Sin, 2021, 38(12): 4305–4312.

[62] OHNO M, LI V C. A feasibility study of strain hardening fiber reinforced fly ash-based geopolymer composites[J]. Constr Build

Mater, 2014, 57: 163–168.
[63] WANG H X, DUAN Z Q, GUO Q W, et al. Machine learning design of aluminum–lithium alloys with high strength[J]. Comput Mater Continua, 2023, 77(2): 1393–1409.
[64] 孙巍巍, 张正洋, 董浩林, 等. 混杂纤维增强水泥基复合材料抗冲击性能研究[J]. 混凝土, 2016, 12: 86–89.
Sun Weiwei, Zhang Zhengyang, Dong Haolin, et al. Concr, 2016, 12: 86–89.
[65] 冯德成, 吴刚. 混凝土结构基本性能的可解释机器学习建模方法[J]. 建筑结构学报, 2022, 43(4): 228–238.
FENG Decheng, WU Gang. J Build Struct, 2022, 43(4): 228–238.
[66] PEI X L, PEI J Q, HOU H, et al. Optimizing casting process using a combination of small data machine learning and phase-field simulations[J]. NPJ Comput Mater, 2025, 11: 27.
[67] LING Y F, WANG K J, LI W G, et al. Effect of slag on the mechanical properties and bond strength of fly ash-based engineered geopolymer composites[J]. Compos Part B Eng, 2019, 164: 747–757.
[68] 刘刚, 丁明巍, 刘金军, 等. 碱激发矿粉–粉煤灰–偏高岭土地聚物水化行为和力学性能[J]. 硅酸盐通报, 2023, 42(6): 2106–2114.
LIU Gang, DING Mingwei, LIU Jinjun, et al. Bull Chin Ceram Soc, 2023, 42(6): 2106–2114.
[69] 刘扬, 王集昭, 鲁乃唯, 等. 碱激发矿渣粉煤灰地聚物力学性能研究[J]. 中外公路, 2024, 44(6): 67–74.
LIU Yang, WANG Jizhao, LU Naiwei, et al. J Chin Foreign Hwy, 2024, 44(6): 67–74.
[70] ABUFARSAKH R, AMADOR G A, NOORVAND H, et al. Influence of sand and fiber type on the fiber-bridging properties of metakaolin-based engineered geopolymer composites[J]. Transp Res Rec J Transp Res Board, 2024, 2678(12): 1639–1658.
[71] LI V C. Engineered cementitious composites (ECC)-tailored composites through micromechanical modeling[M]. Berlin: Springer-Verlag, 1998: 101–135.
[72] AHMED S F U, MAALEJ M. Tensile strain hardening behaviour of hybrid steel–polyethylene fiber reinforced cementitious composites[J]. Constr Build Mater, 2009, 23(1): 96–106.
[73] GESOGLU M, GÜNEYISI E, MUHYADDIN G F, et al. Strain hardening ultra-high performance fiber reinforced cementitious composites: Effect of fiber type and concentration[J]. Compos Part B Eng, 2016, 103: 74–83.
[74] DUXSON P, FERNÁNDEZ-JIMÉNEZ A, PROVIS J L, et al. Geopolymer technology: The current state of the art[J]. J Mater Sci, 2007, 42(9): 2917–2933.
[75] HUANG B-T, WANG Y-T, WU J-Q, et al. Effect of fiber content on mechanical performance and cracking characteristics of ultra-high-performance seawater sea–sand concrete (UHP-SSC)[J]. Adv Struct Eng, 2021, 24(6): 1182–1195.
[76] 麻鹏飞, 杨文, 程宝军, 等. 碱激发磷石膏复合胶凝材料力学性能研究[J] 混凝土与水泥制品, 2021, 8: 83–87.
MA Pengfei, YANG Wen, CHENG Baojun, et al. Chin Concr Cem Produ, 2021, 8: 83–87.
[77] 张江华, 罗雅婷, 王耀存, 等. 纤维增强碱激发矿粉固化淤泥的力学性能[J]. 铁道建筑技术, 2025, 5: 14–17.
ZHANG Jianghua, LUO Yating, WANG Yaocun, et al. Railw Constr Technol, 2025, 5: 14–17.
[78] 崔祎菲, 刘梦华, 张益聪, 等. 超高性能碱激发混凝土的性能及环境影响研究[J]. 硅酸盐通报, 2025, 44(5): 1689–1702.
CUI Yifei, LIU Menghua, ZHANG Yicong, et al. Bull Chin Ceram Soc, 2025, 44(5): 1689–1702.
[79] 王彦朝, 吕景辉, 王英倡, 等. PE/PP 混杂纤维应变硬化碱激发复合材料力学性能研究[J]. 硅酸盐通报, 2024, 43(8): 2879–2887.
WANG Yanchao, LU Jinghui, WANG Yingchang, et al. Bull Chin Ceram Soc, 2024, 43(8): 2879–2887.
[80] 訾进甲, 李维斌, 王吉洪, 等. PE 纤维增强水泥基材料抗冲磨性能及机理分析[J]. 工程科学与技术, 2025, 57(1): 1–17.
ZI Jinjia, LI Weibin, WANG Jihong, et al. Adv Eng Sci, 2025, 57(1): 1–17.
[81] DEB K, PRATAP A, AGARWAL S, et al. A fast and elitist multiobjective genetic algorithm: NSGA-II[J]. IEEE Trans Evol Comput, 2002, 6(2): 182–197.
[82] WANG F, ZHAI J B, DING Y, et al. Design-driven approach for engineered geopolymer composite with recorded low fiber content[J]. Compos Part B Eng, 2024, 287: 111834.
[83] 王敬宇, 叶家元, 程华, 等. 负 10 ℃条件下缓凝剂对快硬硫铝酸盐水泥水化及强度的影响[J]. 硅酸盐学报, 2020, 48(8): 1285–1294.
WANG Jingyu, YE Jiayuan, CHENG Hua, et al. J Chin Ceram Soc, 2020, 48(8): 1285–1294.
[84] YE H Z, ZHU B R, PING P X, et al. Mechanical performance, impact behavior and environmental assessment of coal furnace slag based low-carbon ultra-high performance engineered cementitious composites (UHP-ECC)[J]. J Clean Prod, 2024, 450: 141921.
[85] 中国建筑材料科学研究总院有限公司. GB/T 17671-2021 水泥胶砂强度检验方法(ISO 法)[S]. 北京: 中国标准出版社, 2021.
[86] 马以宏, 陈兴涛, 汤雷. 混凝土用新型缓凝剂的制备及其性能评价[J] 混凝土, 2024, 9: 105–108.
MA Yihong, CHEN Xingtao, TANG Lei. Preparation and performance evaluation of a novel retarder for concrete[J]. Concr, 2024, 9: 105–108.
[87] SINHA A K, TALUKDAR S. Enhancement of the properties of silicate activated ultrafine-slag based geopolymer mortar using retarder[J]. Constr Build Mater, 2021, 313: 125380.

Intelligent Design of Ultra-High Toughness Engineered Geopolymer Composites for Multi-Objective Performance

GUO Menghuan, *XIE Yongfei*, *ZHOU Yingwu*, *CHENG Zhuxin*, *ZHOU Junhao*
(Guangdong Provincial Key Laboratory of Durability for Marine Civil Engineering, Shenzhen University, Shenzhen 518060, Guangdong, China)

Extended Abstract

Introduction For the “dual carbon” (*i.e.*, carbon peak and carbon neutrality) goals and global sustainable development strategies,

the construction materials sector rapidly transitions from conventional cement-based materials toward low-carbon, environmentally friendly, and high-performance alternatives. Engineered geopolymer composites (EGC) as a new generation of green building materials exhibit superior mechanical properties, thermal stability, and environmental compatibility. However, the performance of EGC is synergistically governed by multiple factors (*i.e*., alkali activator concentration, liquid-to-solid ratio, aggregate characteristics, and fiber geometry). The intricate, nonlinear interactions among these parameters present significant challenges for precise mix design and performance optimization. Conventional trial-and-error approaches are prohibitively expensive and time-consuming, rendering them fundamentally incapable of effectively exploring the expansive combinatorial space of EGC mix formulations. Furthermore, EGC mix design often requires the simultaneous satisfaction of multiple, potentially conflicting performance targets, such as high compressive strength and high tensile strain capacity. Therefore, this study was to develop an intelligent design framework for EGC integrating performance prediction and multi-objective optimization. This framework directly addressed the limitations of conventional "black-box" and "experience-driven" approaches, enabling the intelligent and precise design of sustainable cementitious materials.

Methods This study established a closed-loop intelligent design framework for EGC based on machine learning (ML), incorporating "prediction–optimization–feedback". Firstly, a comprehensive EGC database was systematically integrated, comprising 309 sets of experimental data from domestic and international literature. Eleven key mix proportion parameters (*i.e.*, ground granulated blast furnace slag (GGBS), fly ash (FA), silica fume (SF), sand-to-binder ratio (S/B), water-to-binder ratio (W/B), alkali activator modulus (AAM), alkali equivalent (AAD), fiber content (FC), fiber length (FL), fiber length-to-diameter ratio (FLD), and fiber tensile strength (FTS)) were selected as input variables. The 28-d compressive strength, tensile strength, and tensile strain capacity were chosen as target output indicators. Five ML models (*i.e*., Support Vector Regression (SVR), Gradient Boosting Regression Tree (GBRT), XGBoost, Artificial Neural Network (ANN), and Invertible Neural Network (INN)) were developed to predict the key mechanical properties of EGC from its mix design parameters. Hyperparameter optimization was conducted using grid search and experience-based tuning. The SHapley Additive exPlanations (SHAP) method was employed to quantitatively analyze the influence of each mix parameter on the EGC performance. Finally, the CatBoost model was integrated with the NSGA-III (Non-dominated Sorting Genetic Algorithm III) multi-objective evolutionary algorithm to achieve targeted performance optimization, while automatically searching for optimal balanced solutions under various engineering scenarios.

Results and discussion Among the five ML models evaluated, the INN model exhibits the maximum predictive accuracy, achieving R^2 values of 0.99, 0.98, and 0.99 for compressive strength, tensile strength, and tensile strain, respectively. The results of SHAP-based global sensitivity analysis reveal that increasing GGBS content significantly enhances compressive strength *via* promoting secondary hydration reactions. The fiber tensile strength (FTS) is the most influential parameter for tensile strength, and the fiber length (FL) critically determines the tensile strain capacity *via* improving crack-bridging effects. Alkali equivalent (AAD) and alkali activator modulus (AAM) both affect all three performance indices. Three optimization objectives are implemented by the integration of CatBoost and NSGA-III, *i.e*., 1) simultaneous maximization of all three target performances, 2) targeted optimization focusing on maximum tensile strain, and 3) precise matching of predefined target performance values. From the set of Pareto-optimal solutions, the optimal mix proportion is definitively selected using the TOPSIS ranking method for subsequent experimental validation. The validation results show that the errors between predicted and measured values for the three selected mix proportions are all within 10%, with the minimum error being only 5.3%, confirming the reliability and engineering accuracy of the proposed intelligent design framework.

Conclusions This work could establish an intelligent design framework for EGC that integrates INN prediction, SHAP interpretability analysis, and CatBoost-NSGA-III multi-objective optimization, achieving a full-process closed-loop design from performance prediction to targeted optimization. The major findings were 1) The INN model demonstrated a superior predictive accuracy for the three key performance indicators of EGC, providing a robust foundation for forward performance prediction; 2) SHAP analysis quantitatively elucidated the mechanisms of key mix parameters on EGC performance, offering a theoretical support for precise material design; and 3) The CatBoost and NSGA-III integration effectively enablec\d both multi-objective collaborative optimization and single-objective precise targeting, validating the feasibility of the reverse design from desired performance targets to optimized mix proportions through experimental verification. This intelligent design strategy effectively resolved the conventional strength-toughness conflict, thereby transcending the limitations of "black-box" and experience-driven methods and propelling a field toward a paradigm of intelligent, data-driven design for next-generation geopolymer composites.

Keywords engineered geopolymer composites; machine learning; genetic algorithm; performance optimization design