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.0454-5648.20250699

小样本深度学习优化固废基胶凝材料　以赤泥超硫酸盐水泥为例

宁　帅[1]，王若愚[3]，赵　丹[3]，马　洋[3]，王　琳[2,4]，侯鹏坤[3]，杨　波[2,4]，程　新[1]

(1. 济南大学，山东省绿色与智能建筑材料重点实验室，济南 250022；2. 济南大学，山东省泛在智能计算重点实验室，济南 250022；3. 济南大学材料科学与工程学院，济南大学，济南 250022；4. 泉城省实验室，济南 250014)

摘　要：利用工业固废作为辅助胶凝材料部分替代水泥熟料可有效降低能耗和碳排放，开发了大掺量矿渣/粉煤灰水泥、超硫酸盐水泥等胶凝材料体系，实现了工业固废的高效利用、变废为宝。然而，仍有海量堆存赤泥、煤矸石等工业固废尚未得到有效利用，在制备胶凝材料时，普遍 面临活性低、成分/性能波动大等难题。传统试错法难以应对其配比与性能间的复杂关系，而深度学习方法则常受制于小样本问题，且获得的单点最优配比难以适应原料波动。针对上述挑战，提出了一种基于小样本深度学习的胶凝材料配比优化方法，通过构建变分信息瓶颈预测模型，并结合配比可行域进行优化，以提升配比方案对原料波动的适应性。本工作以热活化赤泥替代矿渣制备超硫酸盐水泥为例。结果表明，该方法在小样本条件下成功获得了兼顾抗压强度与碳排放的配比可行域，为性能波动的工业固废在低碳胶凝材料中的应用提供了有效的品质控制方法。

关键词：赤泥；赤泥超硫酸盐水泥；深度学习；小样本建模；多目标优化
中图分类号：TU525　　**文献标志码**：A　　**文章编号**：0454–5648(2026)03–0935–12
网络出版时间：2026–02–10

水泥工业是典型的高能耗、高排放行业。生产过程中的“两磨一烧”工序大量煅烧化石燃料，高温分解碳酸钙($CaCO_3$)产生二氧化碳(CO_2)是主要的碳排放来源[1]。统计显示，全球水泥工业碳排放量约占人为 CO_2 排放总量的 8%，能源消耗占全球工业总能耗的 12%～15%[2–3]。因此，研发低碳胶凝材料是缓解水泥工业碳排放压力、推动绿色低碳转型的关键途径。

工业固废如矿渣、粉煤灰、赤泥、煤矸石等排放量巨大，长期堆存对生态环境构成显著挑战，其处理与资源化利用是相关领域的重要课题。以这些工业固废作为辅助性胶凝材料(SCMs)制造低碳水泥体系备受青睐，其中，将矿渣、粉煤灰等作为SCMs在工业中的应用相对成熟，如矿渣硅酸盐水泥利用矿渣较大的活性潜力，可替代水泥熟料 20%~70%[4]，其 28 d 抗压强度不低于 32.5 MPa。超硫酸盐水泥进一步增加水泥熟料的替代量，生产仅需 1%~5%的熟料、混合 75%~85%的矿渣和 10%~ 20%的石膏，CO_2 排放量仅为普通硅酸盐水泥的十分之一，这些新型胶凝材料为固废资源化提供了有效途径，降低了水泥生产的碳排放与成本[1,5]。

与矿渣、粉煤灰等材料相比，赤泥、煤矸石等惰性固废目前依然存量庞大、利用率偏低、缺乏成熟的消纳与应用方案[6–7]。尽管已有研究证明其在活化后具有较高的可行性用作 SCMs [8–10]，但尚未得到广泛利用，其根本原因在于这类固废普遍存在化学反应活性低、组分复杂等特性[11]，对材料设计提出了严峻挑战。基于此类固废开发的胶凝材料性能受控因素多、波动大，配比–性能关系呈现高度复杂的非线性特征。如何设计适应性强、兼容不同来源固废的配比方案仍是技术难点，迫切需要发展高效的配比设计方法。

赤泥、煤矸石等惰性固废成分的波动性，导致设计出的配比方案在不同批次、不同来源的固废原

收稿日期：2025–09–21。　修订日期：2025–10–15。
基金项目：国家自然科学基金(61872419，62072213)；国家重点研发计划(2023YFE0126000)；全国建材行业重大科技攻关“揭榜挂帅”项目课题(2023JBGS11-03)；山东省自然科学基金(ZR2022JQ30，ZR2022ZD01)。
第一作者：宁　帅(1997　)，男，博士研究生。
通信作者：王　琳(1983　)，男，教授；
侯鹏坤(1983　)，男，教授。

Received date: 2025–09–21.　**Revised date:** 2025–10–15.
First author: NING Shuai (1997–), male, Doctoral candidate.
E-mail: ningshuai@stu.ujn.edu.cn
Correspondent author: WANG Lin (1983–), male, Ph.D., Professor.
HOU Pengkun (1983–), male, Ph.D., Professor.
E-mail: ise_wanglin@ujn.edu.cn; pkhou@163.com

料上存在一定的性能差异，实际生产中为了最大化固废用量，需要针对不同批次的固废原料重复进行配比设计。然而，当前胶凝材料配比设计主要依赖经验性的“试错法”，该方法需要大量实验进行验证，导致研究成本高昂、周期冗长[12−13]。尽管正交试验和响应面分析等统计分析设计方法能减少实验次数，但对于高度复杂的配比–性能关系，其处理能力依然有限。针对该问题，本研究提出以满足性能要求的一系列配比组合范围(配比可行域)替代单个最佳配比的材料设计思路，在实际生产中可以根据固废成分快速调整配比，以提高配比设计对固废原料波动性的适应。然而，传统建模方法难以精准描绘高度复杂的配比–性能关系，进而影响了得到配比可行域的可用性。

人工神经网络(ANN)[14]、支持向量回归(SVR)[15]或高斯过程回归(GPR)[16]等人工智能方法具备从数据中学习复杂关系的能力，能够突破传统建模方法的局限性，在复杂体系设计任务中已取得积极进展[17−19]。在此背景下，利用人工智能模型对固废基胶凝材料性能进行快速评估，进而加速其设计的研究已见报道[20−21]。同时，基于多目标优化方法实施兼顾多种目标的配比设计工作也取得一定的进展[22−23]。

然而，常规深度学习技术普遍存在模型复杂性与样本需求量之间的矛盾[24−25]。在数据量有限时，构建的模型往往对未知数据预测能力(泛化能力)较弱。常规基于深度学习的配比优化方法，只关注找到单个最优配比，对模型泛化性能的要求较低。但优化配比可行域需要考虑全部配比的性能表现，对预测模型的泛化能力提出了更高的要求。因此，如何构建高精度且强泛化能力的预测模型，是实现配比可行域优化的关键。小样本深度学习方法[26]是人工智能领域的重要方向之一，专注利用少量数据构建具有强泛化能力的模型，为解决此问题提供了可行的技术路径。

综上所述，本工作旨在探索小样本深度学习在复杂胶凝材料配比优化中的应用，提出基于配比可行域的胶凝材料设计方法，提高配比设计对原料波动的适应性，建立了小样本深度学习驱动的胶凝材料配比优化方法。为了验证所提配比优化方法的有效性，本工作利用热活化后的赤泥替代矿渣制备超硫酸盐水泥，并采用所提出的小样本深度学习驱动的配比优化方法。首先，建立了赤泥超硫酸盐水泥性能预测模型，并基于该模型获得了兼顾力学性能与碳减排效益的配比可行域，结果为赤泥及其他大宗、波动性显著的工业固废在低碳胶凝材料中的高效与可持续利用提供了一种数据驱动的、兼顾性能与环境效益的配比设计新路径。

1 实验

1.1 原材料

赤泥为热活化赤泥，原状赤泥来自中国山东滨州的山东魏桥铝电有限公司，密度为 3.47 g/cm³，比表面积为 656 m²/kg。根据标准 GB36600—2018《土壤环境质量建设用地土壤污染风险管控标准(试行)》[27]，赤泥中的铅含量远低于建设用地土壤污染风险管控值[0.016%(质量分数)＜0.25%]。采用的碱性激发剂为熟料，由山东山水水泥集团有限公司提供，比表面积为 379 m²/kg。采用的矿粉等级为 S95，比表面积为 531 m²/kg。石膏为分析纯二水石膏，由上海麦克林生化科技股份有限公司提供，比表面积为 371 m²/kg。标准砂采购于厦门艾思欧标准砂有限公司，表 1 给出了熟料、矿渣、原状赤泥的主要化学组成和物理特性。

表 1 原料的主要化学组成和物理特性

Table 1 Major chemical composition and physical properties of raw material ***w*/%**

Raw material	SiO_2	CaO	Al_2O_3	Fe_2O_3	MgO	SO_3	TiO_2	Na_2O	Cr_2O_3	PbO	ZnO	Others	LOI
Clinker	18.78	65.59	4.42	3.81	1.78	3.37						2.16	2.59
Slag	31.96	37.86	15.76	0.4	8.53	2.51						2.96	–1.44
Original red mud	10.35	1.17	21.44	49.19			9.85	6.8	0.161	0.016	0.015	1.008	

w is Mass fraction.

1.2 试验方法

1.2.1 赤泥的热活化处理 原状赤泥经粉磨后过 80 目筛(孔径 265.5 μm)。将筛后赤泥置于马弗炉中，以 5 ℃/min 升温至 900 ℃并保温 2 h，出炉后在空气中急冷至室温，装袋密封保存，所得为 28 d 抗压强度试验使用的热活化赤泥。

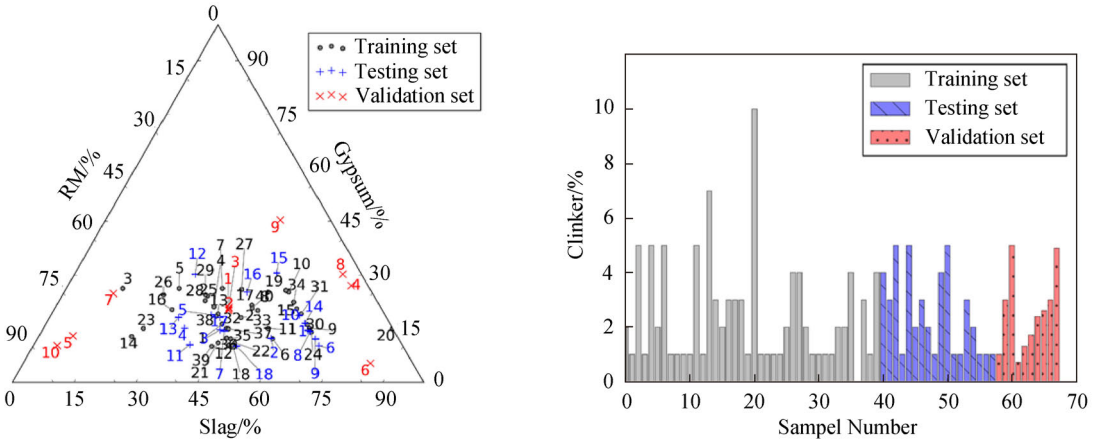
1.2.2 砂浆样品 28 d 抗压强度试验使用的样品根据 GB/T 17671—2021《水泥胶砂强度检验方

法》[28]制备。砂浆水灰比为 0.5，胶砂比为 1∶3，所用模具尺寸为 40 mm×40 mm×40 mm。成型后将砂浆样品置于标准养护室[湿度≥95%，(20±3) ℃]内养护，24 h 后脱模。样品 28 d 抗压强度按照 GB/T 17671—2021《水泥胶砂强度检验方法》[28]要求，在标准养护实验室养护的砂浆试块在 28 d 龄期时进行抗压强度试验，测试误差时间为±8 h。抗压强度取 3 个样品的平均值，舍去超过平均值 10%幅度的值，抗压强度的单位为 MPa，实验数据精确到 0.1 MPa。

1.3　数据获取

本工作初始选取了 58 组不同配比的赤泥超硫酸盐水泥数据构建 28 d 抗压强度预测模型。选取配比参考前期探索实验与常规超硫酸盐水泥中不同成分的含量，其中辅助胶凝材料即赤泥和矿渣的总含量在 75%~85%。在此基础上，为满足建模需求，又额外增加了少数高石膏含量与高熟料含量的配比。获得的配比中，熟料含量为 0%~10%，石膏含量为 10%~30%，矿渣含量为 13%~84%，赤泥含量为 0%~60%。

获得的配比数据按 7∶3 比例划分为训练集(47 个样本)和测试集(11 个样本)。在性能预测模型验证及更新过程中，重新实验了 10 组配比对应的抗压强度，参见表 2。收集到的数据如图 1 所示，其中图 1a 对应的三元相图对应配比中矿渣、赤泥、石膏的含量，图 1b 对应的柱状图为不同配比熟料的含量，其中，灰色空白柱子和蓝色斜纹柱子对应的配比分别属于训练集(Training Set)和测试集(Testing Set)，是构建模型使用的数据，红色点纹柱子对应的验证集(Validation Set)配比是为了验证以及更新模型采集的数据。



(a) Mix proportion of RM, Gypsum and Slag　　(b) Mix proportion of Clinker

图 1　赤泥超硫酸盐水泥配比

Fig. 1　Mix proportion of red mud-based supersulfated cement

2　小样本深度学习驱动的胶凝材料配比优化方法

2.1　小样本胶凝材料性能预测模型

2.1.1　配比数据预处理方法　　胶凝材料性能预测模型对应的输入与输出数据通常为配比数据与性能(如抗压强度)数据。其中配比数据内各组分的质量分数之和恒为 1，导致输入变量间相互影响，一个组分增加必然导致其他组分减少，这种相互关联性(多重共线性)会使计算模型难以准确分析各组分的影响。针对该问题，本研究设计两步式数据预处理方法：首先对各组分含量取对数，以减弱“此消彼长”的相互牵制，并使数据分布更均匀；再用 Z 分数标准化(即对每个变量减去其均值并除以标准差)，将不同变量调整到接近的数值范围，从而提升模型训练的稳定性与收敛速度。

2.1.2　基于变分信息瓶颈结构的小样本预测模型　信息瓶颈机制被普遍认为是神经网络模型能够有效应用于各类预测任务的重要原因之一[29]。该机制能够从复杂的原料配比数据中提取出真正影响材料性能的关键因素，忽略无关的干扰信息(如噪声)。变分信息瓶颈(VIB)理论由 Alemi 等[30]提出，其核心在于引入变分推断技术，以可计算的方式衡量并约束输入中与预测无关的噪声，并将这一控制目标直接融入模型训练过程。因此，变分信息瓶颈对信息提取过程有更严格的控制，能够更好地保留有用信息并去除噪声。基于该机制，通过调整超参数可实现不同的瓶颈大小，从而适用于不同的预测任务需求。

胶凝材料抗压强度等性能预测模型的常见输出通常为非负值。但是，神经网络模型的输出范围为

$(-\infty,+\infty)$，若直接采用输出层神经元的原始输出，可能产生负强度等不符合物理实际的预测结果。针对该问题，本工作设计了一种用于抗压强度预测的激活函数，该函数定义为分段函数形式，如式(1) 所示。鉴于抗压强度通常在 1 MPa 以上，为确保梯度的有效传播，避免梯度消失或梯度爆炸等问题，在强度 $[1,+\infty)$ 范围内，该激活函数仅对输出层的原始输出进行线性变换。

$$f(x)=\begin{cases}\mathrm{e}^{x}, & x<0\\ x+1, & x\geqslant 0\end{cases} \tag{1}$$

式中：x 为输出层神经元的原始输出。正则化技术是抑制神经网络模型过拟合现象的重要手段之一，这种技术通过在训练过程中对模型参数更新施加特定约束，避免模型过度拟合训练样本的特定信息，从而有效提升模型对未知样本的泛化能力，尤其在训练数据量有限且难以全面覆盖数据分布特征的情况下表现更为显著。本工作模型的构建采用了 2 种正则化策略以增强泛化性能：首先，在模型各层均引入批量归一化(Batch Normalization)机制[31]；其次，在变分层应用随机失活(Dropout)机制[32]，以确保模型训练的稳定性，同时保证变分信息瓶颈机制的有效性。

所设计的模型整体结构如图 2 所示，模型训练过程中使用的损失函数定义见式(2)~式(4)。

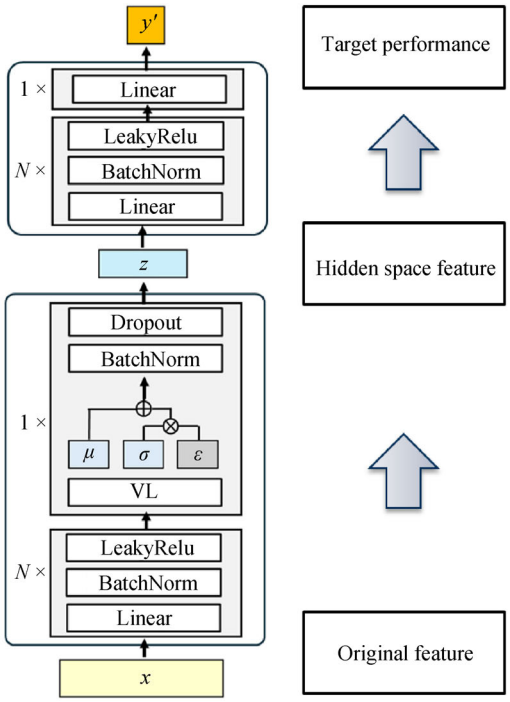


图 2 基于变分信息瓶颈机制的神经网络模型结构图

Fig. 2 Neural Network Architecture Based on Variational Information Bottleneck Mechanism

$$\mathrm{Loss}=\mathrm{Loss}_{\mathrm{MSE}}+\beta\cdot\mathrm{Loss}_{\mathrm{KLD}} \tag{2}$$

$$\mathrm{Loss}_{\mathrm{MSE}}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i-y'_i)^2 \tag{3}$$

$$\mathrm{Loss}_{\mathrm{KLD}}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\sigma_i^2+\mu_i^2-\lg(\sigma_i)-1) \tag{4}$$

式中：$\mathrm{Loss}_{\mathrm{MSE}}$ 为用于衡量预测精度的均方差误差；$\mathrm{Loss}_{\mathrm{KLD}}$ 为实现变分信息瓶颈的 KL 散度(相对熵)损失；β 为用于调节变分信息瓶颈大小的超参数；y_i 和 y'_i 分别为第 i 个样本的实验测得真实强度与模型预测输出；σ_i 和 μ_i 分别为潜空间编码器输出的均值和标准差，用以生成潜变量 z_i。

2.2 基于配比可行域的配比优化策略

2.2.1 配比可行域优化方法 在前述小样本条件下建立的性能预测模型基础上，可对不同配方的 28 d 抗压强度等指标进行快速评估，从而缩短配比筛选周期。传统方法多据此寻找满足特定性能需求的单一最优配比。但由于固废原料成分与活性存在批次波动，单个最优配比在生产中往往难以保持稳定的性能表现，为了保证产品质量符合标准，在配比设计时需要保留一定的余量，因此，限制了固废的最大化利用。

为解决该问题，本工作设计了原材料配比可行域优化思路，其中，配比可行域是指在整个配比空间内，依据特定性能阈值(如 28 d 抗压强度达到既定标准)，筛选得到的全部达标配比的不同组分的调控范围，能够通过多组三元相图的形式给出某种胶凝材料的配比可行域。与单一最优配比优化相比，可行域能够系统揭示达到目标性能所需的组分变化范围。在实际生产中，根据当前固废原料的成分、反应活性等特征对实际使用的配方进行调整。例如当生产使用的固废质量较好时，可以在可行域范围内选取固废掺量较高的配比进行生产。而当固废原料反应活性较差或生产监控发现产品质量出现波动时，则可以选取固废掺量相对较低的配比进行生产，从而在保证产品质量合格的前提下，最大化固废用量。

可行域的优化方法首先在设定的配比空间内按一定步长进行网格化取点，并利用性能预测模型计算各取点的指标值；随后依据预设的性能阈值与工程约束进行达标判定，形成可行点集并在三元相图上描绘其分布；在此基础上统计各组分的取值区间与可行区域面积等量化信息，提炼可用于现场调控的配料窗口；最后，从可行域内选取代表性配方开展试验复核，并将实测结果用于修正模型与区域边界。

2.2.2　面向多目标设计的配比可行域优化方法　　为了提高对工业固废材料的消纳能力，固废基胶凝材料的配比设计，除了考虑 28 d 抗压强度等基本力学性能指标外，还需考虑碳排放效益与固体废弃物消纳能力等环境性能要求。基于此，本节在前述可行域配比优化的基础上，构建了涵盖力学性能、环境效益等多重目标的综合配比设计方法，旨在实现材料工程性能与生态环境效益的协同优化。

在需要同时满足多项性能指标的配比优化中，传统方法可分为 2 类。第 1 类是多目标优化方法，其目的是搜索并确定帕累托前沿上的配比集合。帕累托前沿是指在不牺牲任何一项指标(如强度、流动度、耐久性、成本)的情况下，其他任何指标都无法得到进一步改进的配比的边界，因此集合内各配比方案之间不存在优劣关系，均为最优方案；第 2 类是目标函数重构法，该方法将多个指标通过加权求和等方式合并为一个单一的综合目标，再利用单目标优化技术进行配比优化，其中，各指标的权重可根据工程实际需求(如优先考虑早强、耐久性或满足成本约束)进行调整，以适应不同的应用场景。尽管多目标优化方法能够输出多个配比方案，但这些方案本质上代表了不同目标权重优先级下的最优解集合。

鉴于本工作提出的配比设计方法能够直接输出配比可行区域，为此，采取了第 2 种策略构建了一种面向可行区域的优化方法，该方法利用数学运算将某个配比的不同性能计算为综合性能，在综合性能的基础上，该方法首先绘制“配比—综合性能”地形图，同时以抗压强度等力学性能指标作为约束条件，搜索所有可行配比，从而给出兼顾多种性能的可行配比区域。

3　赤泥超硫酸盐水泥配比优化

利用所提基于小样本深度学习的胶凝材料配比可行域优化方法，得到了抗压强度与低碳排放兼备的赤泥超硫酸盐水泥最优配比区域，验证了所提方法的有效性。

所构建的赤泥超硫酸盐水泥 28 d 抗压强度预测模型具备 5 层隐藏层，其中，第 3 层为变分层，其余 4 层为全连接层。全连接层每层含 50 个神经元，变分层包含 2 个神经元，超参数 β 设置为 15。对照模型采用全连接结构，具备 3 层隐藏层，每层 50 个神经元，2 种模型均采用自适应矩估计(Adam)优化器[33]进行训练。上述超参数在前期探索实验中优化调整确定。

在构建神经网络预测模型时，通过注入专家先验知识有助于提升模型在小样本情况下的预测性能。因此，本工作采用了合成伪样本强制模型学习物理约束的手段注入先验知识，针对赤泥基超硫酸盐水泥体系，以水泥熟料作为激发剂。虽然赤泥具有较高碱含量，理论上不添加熟料时赤泥–矿渣–石膏体系可能通过碱激发形成强度，但在初始测试的 58 组样本中，熟料含量为 0 的样本(即赤泥掺量 40%，矿渣掺量 45%，石膏掺量 15%，熟料掺量 0%)，其对应的试块至规定龄期脱模时没有硬化，这与本实验赤泥化学性质有关，其自身所含的不可溶性碱无法为超硫酸盐水泥(SSC)水化环境提供足够碱度。

因此，在注入专家先验知识时，为了简化知识注入过程，降低模型构建复杂度，选取了“熟料含量为 0，则强度为 0”的规律。在每次迭代中，会随机生成 1 组熟料含量为 0，且其他组分配比随机的伪样本，并将其 28 d 抗压强度标签设为 0 MPa，以此强制模型学习对应的专家先验知识。

3.1　赤泥超硫酸盐水泥性能预测模型

3.1.1　模型构建与分析　　训练过程中损失函数随迭代次数的变化如图 3 所示。其中,对比了 2 种模型在训练集和测试集的损失，同时也包括变分信息瓶颈的 KL 散度损失，其中，3 层全连接神经网络(MLP)的测试集预测损失与训练集预测损失之间差距随训练进程逐步扩大，这提示该模型过度拟合了训练样本的特征信息，难以提取不同样本间的共性模式。相比之下，所提模型(Ours)在整个训练过程中训练损失与测试损失之间始终保持较小差距，同时 KLD 损失从开始时的较小值逐渐增大到较大值并保持稳定，这反映变分信息瓶颈的损失与预测损失进行对抗，以此保证模型不会出现严重的过拟合现象，证明所设计的网络结构与正则化策略的有效性。

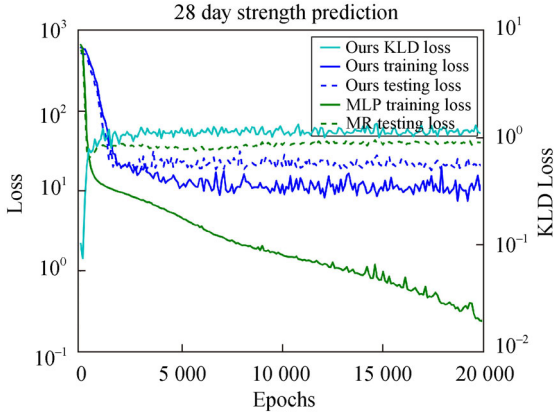
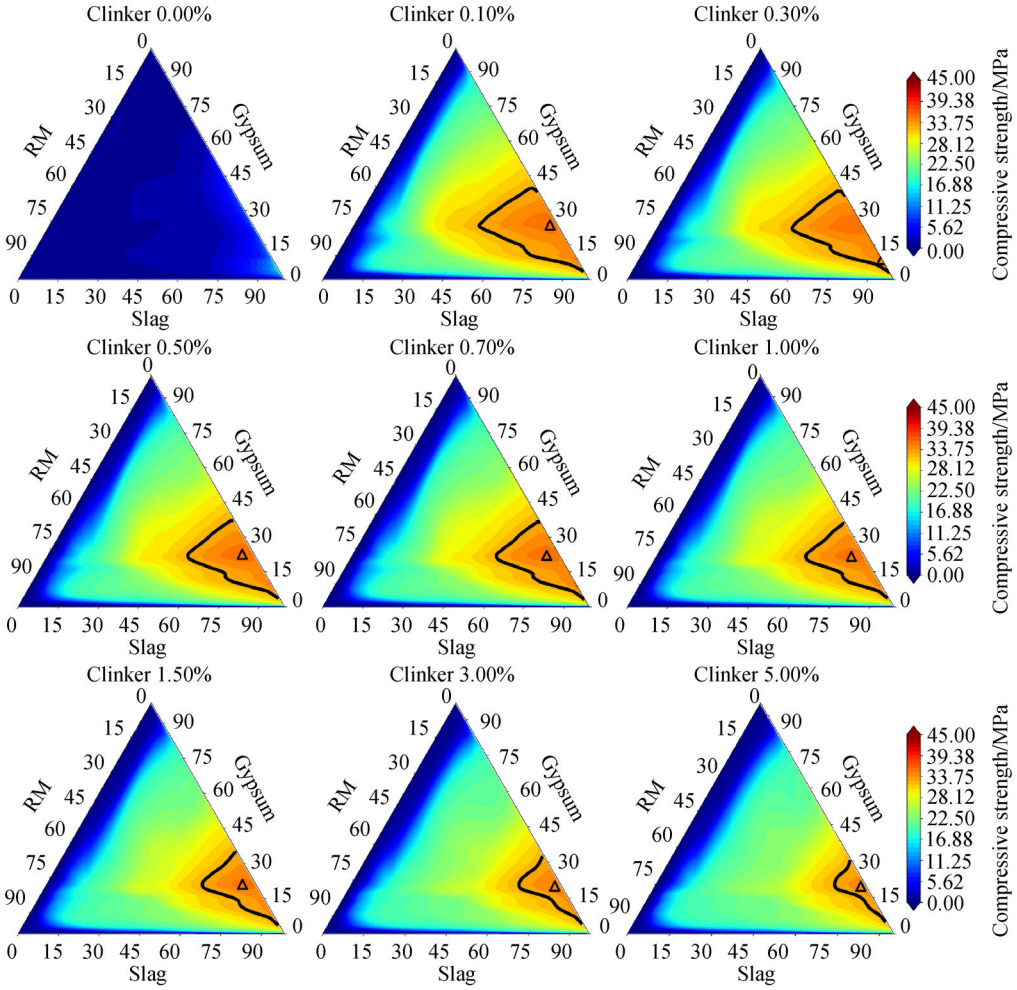


图 3　所提模型与 MLP 训练损失对比

Fig. 3　Comparison of Loss between the proposed model and MLP model

图 4 为基于训练所得的小样本预测模型对不同配比 28 d 抗压强度预测结果生成的“配比—抗压强度”地形图。由图 4 可见，当熟料含量为 0 时，预测强度接近零，证明所提专家知识注入策略的有效性。



Colors represent different 28-day compressive strengths (warmer colors, approaching red, indicate higher strength); Triangle marks the optimal mix proportion for 28-day compressive strength and the black line delineates the region where 28-day compressive strength meets the acceptable threshold.

图 4 “配比—抗压强度”地形图

Fig. 4 “Mix proportion–compressive strength” contour map

3.1.2 预测模型性能验证及更新 传统基于代理模型的优化方法进行配比设计时，在建立代理模型后通常采用网格搜索、粒子群算法等智能优化算法对配比空间进行搜索，以确定最优配比。根据优化算法的特性，基于性能提升幅度或预测不确定性等准则选取一个或多个候选配比开展实验验证，测定其真实抗压强度，并将实验结果与代理模型预测值进行比对，据此不断改进和更新代理模型。通过多次迭代验证，提高代理模型在最优配比领域的预测精度，确保最优配比的可靠性。

然而，本工作提出的基于可行配比区域的配比设计方法给出的是满足性能要求的可行区域，而非单个最优配比。该方法要求代理模型对所有配比均具备较高的预测精度，而非仅关注最优配比领域的预测准确性。因此，传统上依赖当前最优配比的模型验证与更新策略不适用于本工作所建立的代理模型。为此，本研究采用随机选取与专家知识指导相结合的验证配比选取策略：在 10 个验证配比中，7 个由算法随机生成，以充分验证代理模型的总体预测精度；同时，依据图 4 所示的“配比–抗压强度”地形图分析，人工选取 3 个具有特殊性的配比进行验证。选取的 10 个配比如表 3 所示，验证配比与建模所用原始数据的关系见图 1。

为验证所提模型(ours)与 MLP 在小样本场景下的泛化能力，表 2 为 2 种模型 5 折交叉验证中不同数据划分下的测试损失。其中，Ours 的平均测试损失仅为 33.5，远低于 MLP 的 236.7，表现出更强的泛化能力与稳定性。特别地，在第 2 折中，2 种模

表 2　5 折交叉验证测试集损失对比

Table 2　Comparison of test set loss in five-fold cross-validation

Methods	Fold 1	Fold 2	Fold 3	Fold 4	Fold 5	Average
Ours	18.061	93.072	29.265	13.211	13.878	33.497
MLP	33.269	1079.806	22.776	22.092	25.77	236.743

表 3　验证配比及其实验强度和 2 种模型的预测强度

Table 3　Verification mix proportion and its experimental strength and predicted strength of two models

Sample	RM /%	Slag /%	Gpysum /%	Clinker /%	28 d strength /MPa	Ours		MLP		GPR		Random forest	
						Predict/MPa	Error/MPa	Predict/MPa	Error/MPa	Predict/MPa	Error/MPa	Predict/MPa	Error/MPa
1	37	42	20	1	30.742	29.067	1.675	31.439	0.697	30.742	0.696	30.742	1.241
2	36	41	20	3	26.778	26.575	0.203	27.024	0.246	26.778	2.859	26.778	1.323
3	35	40	20	5	31.806	24.857	6.949	24.921	6.885	31.806	6.88	31.806	6.887
4	4.1	68.3	26.9	0.7	35.644	34.657	0.987	40.716	5.072	35.644	11.293	35.644	0.069
5	77.7	8.1	12.9	1.3	3.159	12.653	9.494	–2.627	5.786	3.159	0.255	3.159	10.864
6	10.1	82.9	5.3	1.7	19.415	29.898	10.483	34.528	15.113	19.415	2.704	19.415	15.928
7	61.5	11.8	24.3	2.4	8.939	15.082	6.143	7.807	1.132	8.939	2.959	8.939	5.682
8	4.4	63.5	29.5	2.6	28.669	32.493	3.824	29.010	0.341	28.669	10.256	28.669	0.696
9	11.8	41.2	44	3	28.844	23.818	5.026	–3.062	31.906	28.844	25.765	28.844	7.069
10	79.8	5.5	9.8	4.9	5.714	9.860	4.146	–3.194	8.908	5.714	2.927	5.714	7.987
Average							4.893		7.609		6.659		5.775

型的测试误差均明显上升，这是由于该折训练集与测试集之间存在显著的分布偏移，训练集构建的模型难以泛化到测试集。但 Ours 模型的性能下降幅度更小，证明其泛化性能优于 MLP 模型。即使排除第 2 折这一异常情况，Ours 模型的平均测试误差为 18.6，而 MLP 模型为 26.0，仍能证明本工作模型具有更强的泛化性能与抗过拟合能力。

图 5 为在相同熟料用量条件下，10 个验证配方的抗压强度表现与预测误差分布，其中五角星标记表示验证配比的具体位置。表 3 进一步给出了高斯过程回归(GPR)模型、随机森林(Random Forest)模型、MLP 模型与本工作模型对验证样本的预测结果与实验实测值的误差对比。结果表明，本工作所提模型(Ours)相比 MLP、GPR、Random Forest 的预测误差更低。根据图 1 分析发现，本工作模型与 MLP 模型的预测结果，对于配比与建模数据集分布相近的样本，模型的预测误差均较小，而对于配比与训练数据差异较大的样本，Ours 模型误差明显较小，这表明，本工作构建的模型具有更优的泛化性能，在整个配比空间内的预测精度更为稳定可靠。此外，表 4 对比了不同训练集大小下模型在 10 个验证集配比上的平均绝对值误差，每个大小重复 5 次计算均值和标准差。随着训练集增大，预测误差及其波动明显下降，同时数据从 50%增加至 70%时，性能提高的增速明显减小，模型逐渐达到数据量和性能的平衡。

表 4　不同大小训练集的验证集误差对比

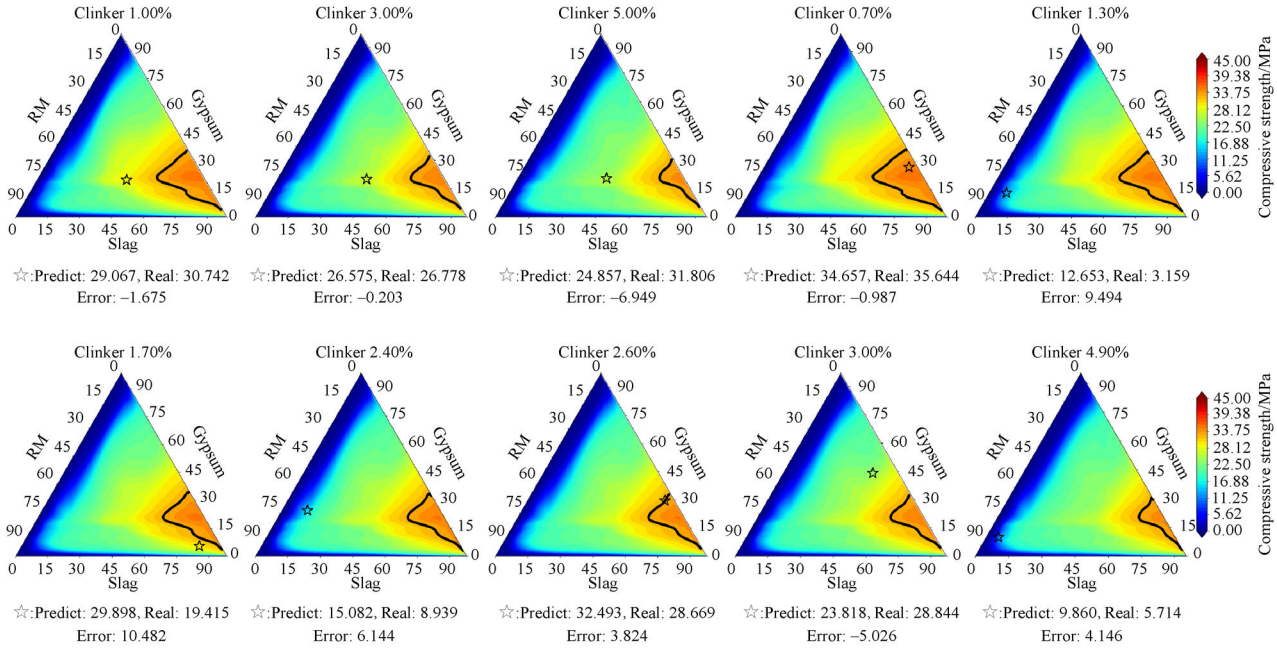
Table 4　Comparison of validation set errors across different training set sizes

Training set size	Mean/MPa	Std/MPa
10%	14.372 6	3.999 6
30%	8.257 4	3.222 7
50%	5.879 7	1.847 0
70%	4.672 5	0.912 6
100%	2.885 4	0.344 6

3.2　可行域驱动的赤泥超硫酸盐水泥配比优化

3.2.1　面向抗压强度的配比可行域优化　　图 4 为基于训练所得的小样本预测模型对不同配比 28 d 抗压强度预测结果生成的“配比—抗压强度”地形图。各子图内由黑色曲线包围的区域表示在不同熟料用量条件下，能够满足设定强度指标(本研究实验中以 28 d 抗压强度≥32.5 MPa 作为合格阈值)的赤泥、矿渣和石膏各自的用量比例。结果表明，随着熟料掺量在 0.1%~5% 区间内的增加，可接受的赤泥掺量逐渐减少。此外，在不同熟料用量条件下，较高比例的矿渣有助于保证材料抗压强度达标，这与赤泥反应活性低于矿渣的特性相一致。进一步分析显示，当矿渣含量处于 75%~85%、石膏含量处于 10%~20% 范围内时，材料通常表现出最优的 28 d 抗压强度。该结果与超硫酸盐水泥常用矿渣、石膏比例相符，证明构建的 28 d 抗压强度预测模型具有较高的可靠性。

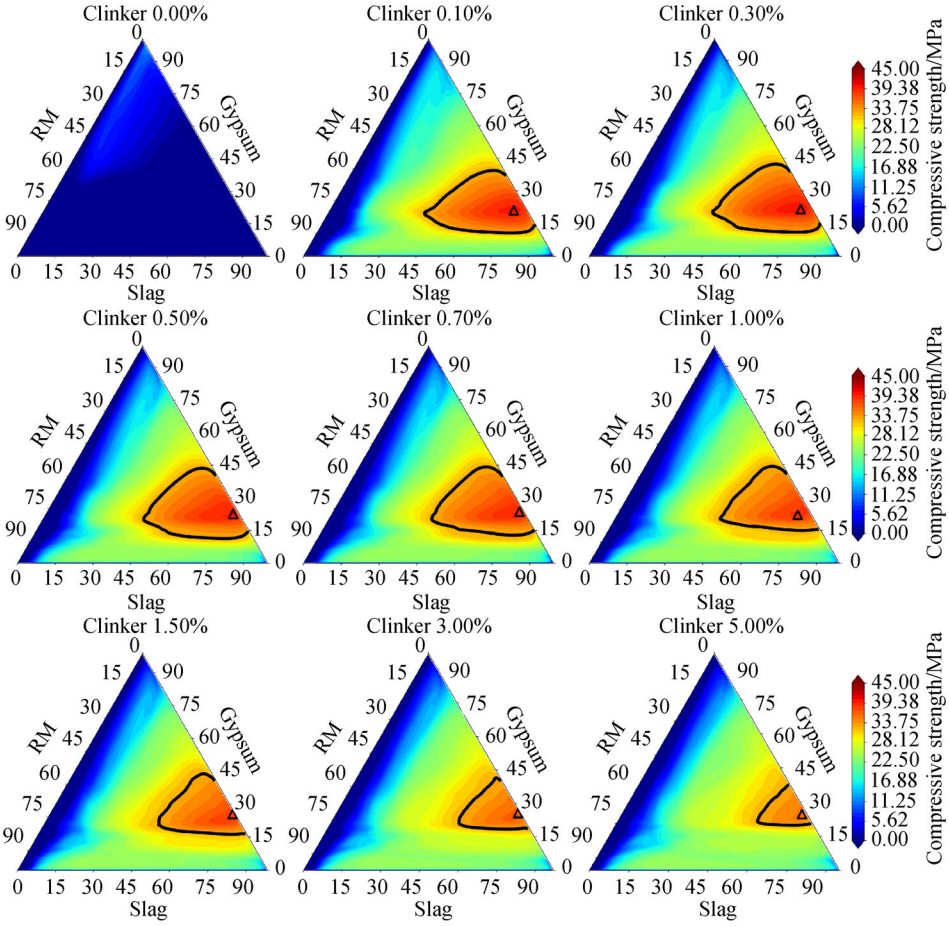
图 6 为引入验证配方后重新训练神经网络模型获得的“配比—抗压强度”地形图。与图 4 对比分析



Black pentagons indicate the locations of the validation mixtures, while the black lines enclose the region satisfying the strength acceptance criteria.

图 5 验证配比在地形图上的位置与预测误差

Fig. 5 Position of verification mix proportion on the landscape and prediction error

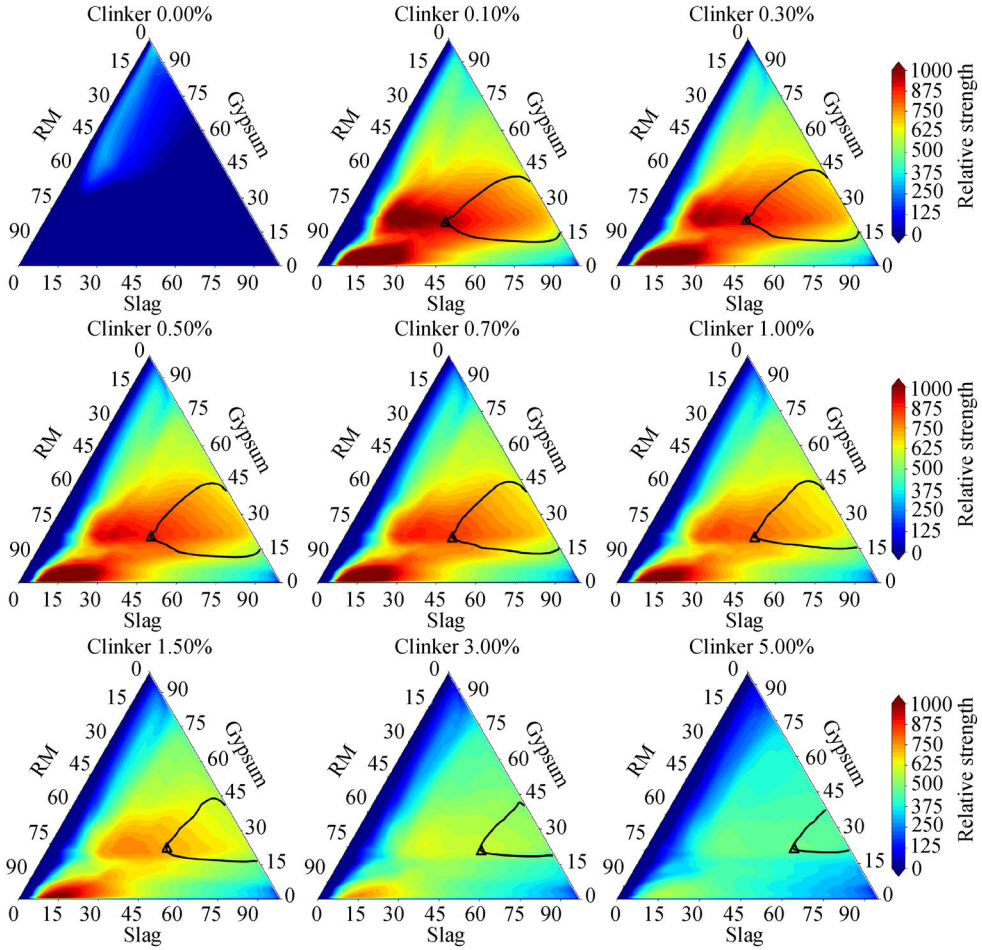


Meaning of all graphical elements is consistent with those in Fig. 5.

图 6 更新的“配比–抗压强度”地形图，图中元素含义与图 5 相同

Fig. 6 Updated “Mix Proportion–Compressive Strength” contour map in Fig. 5

可知，由于验证配比在三元相图中边缘位置样本数量较多，更新后的地形图中满足性能要求的可行配比区域范围显著缩小，这一现象表明，初始训练的代理模型因训练数据配比分布过于集中，导致对边缘区域配比的抗压强度预测存在偏差，更新后的模型有效修正了此类预测误差。进一步对比两图可以发现，三角形标记所示的最优抗压强度配比位置基本保持稳定，均位于 75%矿渣用量、20%石膏用量、5%赤泥用量附近。该配比中矿渣与石膏用量比例与标准超硫酸盐水泥的典型配比相近，这一结果验证了本工作构建的代理模型及所确定的满足性能要求的配比范围具有较高的可信度。



Colors represent different relative strength values (warmer tones, approaching red, indicate higher relative strength). The triangle marks the optimal mix proportion for maximum relative strength, and the black line delineates the region where 28-day compressive strength meets the acceptable threshold.

图 7　“配比—相对强度”地形图

Fig. 7　“Mix Proportion-Relative Strength” contour map

3.2.2　面向多目标性能的配比可行域优化　　本工作使用的综合性能定义如式(5)所示，为 28 d 抗压强度除以碳排放总量 $P(CO_2)$ (kg/t)得到相对强度 F，该相对强度代表单位碳排放下能够取得的强度为多少。碳排放总量计算见式(6)。

$$F=\frac{R_c}{P(CO_2)} \tag{5}$$

$$P(CO_2)=5.148A+79.11B+32.8C+920D \tag{6}$$

式中：R_c 为 28 d 抗压强度；A 为赤泥掺量；B 为矿渣掺量；C 为石膏掺量；D 为熟料掺量。各掺料的碳排放系数参考相关文献[34–36]确定。

图 7 为“配比–相对强度”地形图。由图 7 可见，由于熟料的碳排放因子显著高于其他掺料，随着熟料用量增加，三元相图中对应的相对强度呈明显降低趋势。同时，在其他掺料中矿渣的碳排放因子最高，随着矿渣用量逐渐减少，相对强度逐渐增高。然而，矿渣对胶凝材料抗压强度形成具有关键作用，具有最高相对强度的配比区域其抗压强度已无法满足预设标准，即图中深红色区域通常位于黑色曲线所包围的可行区域之外。根据给出的可行区域，在

实际生产赤泥超硫酸盐水泥时，可根据赤泥的反应活性选取适宜配比进行生产，从而兼顾产品性能与低碳效益。

3.2.3 局限性与未来研究方向 本工作以赤泥基超硫酸盐水泥配比设计为案例，基于该材料的配比与 28 d 抗压强度数据，利用小样本深度学习技术构建了性能预测模型，并在此基础上，结合不同配比的强度表现与碳排放评估，获得了兼顾强度要求与低碳排放的配比可行域，证明了所提配比设计方法的可行性。然而，受限于当前数据收集的局限性，案例仍存在进一步优化空间，以更加充分地验证所提方法的普适性与实用价值。首先，构建的模型在输入数据和输出性能指标方面具有一定的针对性，实验中使用的赤泥均为同一来源的热活化赤泥，当前模型未将化学成分等特征作为主要输入变量，仅考虑了 28 d 抗压强度单一性能作为输出性能，后续研究可进一步引入多样化输入特征并拓展至耐久性、工作性能、经济成本等多目标综合优化下的配比设计。同时，探索赤泥的反应活性的量化方法，分析组分复杂度等因素对模型性能的影响也十分重要，能够为未来探索多固废、多组分体系的建模规律提供参考。此外，本案例采用了合成伪样本的策略进行数据层面的专家知识注入，未来可探索物理信息神经网络、迁移学习等模型层面的专家知识融合方法，进一步提升模型在小样本条件下的泛化能力与预测精度。

4 结论

1) 提出了一种基于小样本深度学习的胶凝材料配比优化方法，设计了结合信息瓶颈机制的胶凝材料性能预测模型，提出了针对配比数据的预处理方法和适用于非负值抗压强度预测的激活函数。样本量敏感性分析证实，模型预测误差随训练样本的增加而显著降低，并在第 47 个样本(占总量的 70%)时，误差下降的趋势明显放缓。证明了该方法在小样本场景下构建可靠神经网络模型的有效性。

2) 针对固废胶凝材料设计中，成分波动导致配比的性能存在明显波动，单个最优配比设计难以兼顾固废用量和质量达标的难题，提出了以满足性能要求的一系列配比组合范围(配比可行域)替代单个最佳配比的材料设计策略。在实际生产中即使原料性质不稳定，也可基于可行域快速选取适宜配比，以保证产品性能的稳定性。

3) 针对热活化赤泥替代矿渣制备超硫酸盐水泥，应用所提出的基于小样本深度学习的配比优化方法进行优化。结果显示，赤泥掺量在 30%时，28 d 抗压强度仍可与未掺赤泥的对照组相当，掺量 40%时能够取得 28 d 抗压强度达标下的最佳碳排放效益。该实验验证了所提小样本性能预测模型和基于可行域配比优化方法的有效性。

参考文献:

[1] ROSKOVIĆ R, BJEGOVIĆ D. Role of mineral additions in reducing CO_2 emission[J]. Cem Concr Res, 2005, 35(5): 974–978.

[2] 栗思琪, 茆纬杰, 王钰洁, 等. 基于机器学习和原料碱激发活性特征的矿粉基碱激发胶凝材料抗压强度预测研究[J]. 复合材料学报, 2025, 42(12): 7075–7086.
LI Siqi, MAO Weijie, WANG Yujie, et al. Prediction of compressive strength of mineral powder based alkali-activated materials based on machine learning and alkali reactivity of precursor[J]. Acta Materiae Compositae Sinica, 2025, 42(12): 7075–7086.

[3] ALI M B, SAIDUR R, HOSSAIN M S. A review on emission analysis in cement industries[J]. Renew Sustain Energy Rev, 2011, 15(5): 2252–2261.

[4] 国家市场监督管理总局, 国家标准化管理委员会. GB 175—2023 通用硅酸盐水泥[S]. 北京: 中国标准出版社, 2023.

[5] WU Q Y, XUE Q Z, YU Z Q. Research status of super sulfate cement[J]. J Clean Prod, 2021, 294: 126228.

[6] MUKIZA E, ZHANG L L, LIU X M, et al. Utilization of red mud in road base and subgrade materials: A review[J]. Resour Conserv Recycl, 2019, 141: 187–199.

[7] 刘松辉. 拜耳法赤泥制备低钙胶凝材料及凝结硬化机理[D]. 焦作: 河南理工大学, 2019.
LIU Songhui. Preparation of low calcium cementitious materials from Bayer red mud and its setting and hardening mechanism [D]. Jiaozuo: Henan Polytechnic University, 2019.

[8] TSAKIRIDIS P E, AGATZINI-LEONARDOU S, OUSTADAKIS P. Red mud addition in the raw meal for the production of Portland cement clinker[J]. J Hazard Mater, 2004, 116(1/2): 103–110.

[9] 夏瑞杰, 朱建平, 刘少雄, 等. 赤泥和脱硫石膏制备高贝利特硫铝酸盐水泥熟料[J]. 有色金属工程, 2017, 7(6): 58–63.
XIA Ruijie, ZHU Jianping, LIU Shaoxiong, et al. Nonferrous Met Eng, 2017, 7(6): 58–63.

[10] LI Y X, LUO Y, ZHOU H, et al. Preparation of environmental-friendly cementitious material from red mud and waste glass sludge by mechanical activation[J]. Constr Build Mater, 2024, 423: 135861.

[11] 郝勇, 信翔宇, 黄永波, 等. 工业固废赤泥在水泥制备中的应用研究进展[J]. 中国粉体技术, 2022, 28(2): 1–6.
HAO Yong, XIN Xiangyu, HUANG Yongbo, et al. China Powder Sci Technol, 2022, 28(2): 1–6.

[12] BAYKASOĞLU A, DERELI T, TANıŞ S. Prediction of cement strength using soft computing techniques[J]. Cem Concr Res, 2004, 34(11): 2083–2090.

[13] GUO J F, LIU Z L, PHILIP CHEN C L, et al. An efficient inspection system based on broad learning: Nondestructively estimating cement compressive strength with internal factors[J]. IEEE Trans Ind Inform, 2022, 18(6): 3787–3798.

[14] HORNIK K, STINCHCOMBE M, WHITE H. Multilayer feedforward networks are universal approximators[J]. Neural Netw, 1989, 2(5):

359–366.
[15] Drucker H, Burges C J C, Kaufman L, et al. Support vector regression machines[C]//Proceedings of the 10th International Conference on Neural Information Processing Systems, Denver, USA, 1996: 155–161.
[16] Williams C K I, Rasmussen C E. Gaussian processes for machine learning[M]. Cambridge, MA: MIT press, 2006.
[17] CHEN B, WANG L, FENG Z B, et al. Optimization of high-performance concrete mix ratio design using machine learning[J]. Eng Appl Artif Intell, 2023, 122: 106047.
[18] DEROUSSEAU M A, KASPRZYK J R, SRUBAR W V. Computational design optimization of concrete mixtures: A review[J]. Cem Concr Res, 2018, 109: 42–53.
[19] 马士宾, 李盈霞, 闫伟阳. 基于两种方法优化磷酸镁水泥砂浆配合比研究[J]. 混凝土, 2023(1): 140–145.
MA Shibin, LI Yingxia, YAN Weiyang. Concrete, 2023(1): 140–145.
[20] WANG R Q, LI G D, LI C Y, et al. Study on the design method of multi-component industrial solid waste low carbon cementitious material with cement as the activator[J]. Case Stud Constr Mater, 2024, 21: e03478.
[21] HU Y F, HU R P, ZHENG L J, et al. Design of solid waste-based superfine tailings cemented paste backfill based on machine learning and MAA model[J]. Case Stud Constr Mater, 2025, 23: e05175.
[22] FAN M T, LI Y, SHEN J L, et al. Multi-objective optimization design of recycled aggregate concrete mixture proportions based on machine learning and NSGA-II algorithm[J]. Adv Eng Softw, 2024, 192: 103631.
[23] ZHANG J F, SHANG F Y, HUO Z H, et al. Multi-objective optimization of ternary geopolymers with multiple solid wastes[J]. Mater Today Commun, 2024, 40: 109599.
[24] WANG Y Q, YAO Q M, KWOK J T, et al. Generalizing from a few examples[J]. ACM Comput Surv, 2021, 53(3): 1–34.
[25] JING L, TIAN Y. Self-supervised visual feature learning with deep neural networks: A survey[J]. IEEE Trans Pattern Anal Mach Intell, 2021, 43(11): 4037–4058.
[26] SONG Y S, WANG T, CAI P Y, et al. A comprehensive survey of few-shot learning: Evolution, applications, challenges, and opportunities[J]. ACM Comput Surv, 2023, 55(13s): 1–40.
[27] 生态环境部南京环境科学研究所、中国环境科学研究院. GB 36600-2018 土壤环境质量 建设用地土壤污染风险管控标准[S]. 北京: 中国标准出版社, 2018.
[28] 中国建筑材料科学研究总院有限公司、厦门艾思欧标准砂有限公司、安徽海螺水泥股份有限公司、浙江礼显试验仪器制造有限公司、北京国建联信认证中心有限公司、广西建科建设工程质量检测与评价有限责任公司、黄河勘测规划设计研究院有限公司、河南豫美建设工程检测有限公司等. GB/T 17671—2021《水泥胶砂强度检验方法》[S]. 北京: 中国标准出版社, 2021.
[29] Kawaguchi K, Deng Z, Ji X, et al. How does information bottleneck help deep learning?[C]//International conference on machine learning, Hawaii, USA., 2023: 1604916096.
[30] Alemi A A, Fischer I, Dillon J V, et al. Deep Variational Information Bottleneck[C]//International Conference on Learning Representations, Toulon, France, 2017.
[31] Ioffe S, Szegedy C. Batch normalization: Accelerating deep network training by reducing internal covariate shift[C]//International conference on machine learning, Lille, France, 2015: 448–456.
[32] Srivastava N, Hinton G, Krizhevsky A, et al. Dropout: a simple way to prevent neural networks from overfitting[J]. J Mach Learn Res, 2014, 15(1): 1929–1958.
[33] Kingma D P, Ba J. Adam: A method for stochastic optimization[C]// International Conference on Learning Representations, San Diego, USA, 2015.
[34] 沈镭, 赵建安, 王礼茂, 等. 中国水泥生产过程碳排放因子测算与评估[J]. 科学通报, 2016, 61(26): 2926–2938.
SHEN Lei, ZHAO JianAn, WANG LiMao et al. Chin Sci Bull, 2016, 61(26): 2926–2938.
[35] 中华人民共和国住房和城乡建设部. GB/T 51366—2019《建筑碳排放计算标准》[S]. 北京: 中国建筑工业出版社, 2019.
[36] 林佐江, 吕光耀, 房奎圳. 四类常用矿物掺合料的碳排放因子计算与对比[J]. 混凝土世界, 2025(2): 71–76.
LIN Zuojiang, (LÜ/LV/LU/LYU) Guangyao, FANG Kuizhen. China Concr, 2025(2): 71–76.

Few-Shot Deep Learning-Based Mix Proportion Design for Solid Waste-Based Cementitious Materials: A Case Study of Red Mud Supersulfated Cement

NING Shuai[1], *WANG Ruoyu*[3], *ZHAO Dan*[3], *MA Yang*[3], *WANG Lin*[2,4], *HOU Pengkun*[3], *YANG Bo*[2,4], *CHENG Xin*[1]
(1. Shandong Provincial Key Laboratory of Green and Intelligent Building Materials, University of Jinan, Jinan 250022, China;
2. Shandong Key Laboratory of Ubiquitous Intelligent Computing, University of Jinan, Jinan 250022, China;
3. School of Materials Science & Engineering, University of Jinan, Jinan 250022, China;
4. Quan Cheng Laboratory, Jinan 250014, China)

Extended Abstract

Introduction Cement production is a highly energy and carbon-intensive process, with the industry contributing about 8% of global anthropogenic CO_2 emissions. Industrial solid wastes such as slag, fly ash, red mud, and coal gangue are produced in a large scale and persist in the environment, making their treatment and valorization a challenge. Replacing part of the clinker with supplementary cementitious materials (SCMs) is a proven strategy for lowering emissions. Nevertheless, many industrial solid wastes, such as red mud and coal gangue, remain underutilized due to their low reactivity and high impurity levels, causing a large variability in physicochemical properties. Such characteristics pose challenges for mix design due to complex mix proportion-performance relationships and restricted experimental trials.

Deep learning-based mix proportion design achieves a notable success due to its universal approximation capability. However, conventional models, such as deep neural networks, typically require large datasets to achieve robust prediction. Obtaining sufficiently large datasets for such models is highly challenging due to limited experimental trials in mix proportion design. Moreover, those methods output only a single optimal mix, failing to account for variability in physicochemical properties of some solid wastes across sources and batches. To address those problems, this study was to apply few-shot learning to develop a highly accurate and generalizable prediction model. In addition, a feasible-region-based design approach was also proposed to tackle physicochemical properties variability. Finally, a multi-objective optimization method was introduced to quantify trade-offs between carbon emission reduction and structural performance.

Furthermore, the proposed few-shot learning-based mix design method could optimize the feasible mix region for red mud-based supersulfated cement. This optimization demonstrated the effectiveness and applicability of the proposed methodology.

Methods This research was to use few-shot deep learning to construct the performance prediction models for novel solid waste cementitious materials. A variational information bottleneck (VIB) neural network was developed, exhibiting superior generalization under small-sample conditions, compared with conventional networks. This model incorporated specialized preprocessing strategies addressing multicollinearity problems. A custom activation function for compressive strength prediction was designed, along with regularization techniques such as the Batch Normalization and Dropout.

To address challenges from variability in physicochemical properties, a feasible-region-based mix design approach was proposed, offering proportion ranges instead of single optimal solutions. This enhanced an adaptability to raw-material variations across batches and sources. Furthermore, a multi-objective optimization method was developed, incorporating carbon-emission factors to obtain mix proportions that could balance compressive strength and environmental benefits. A comprehensive performance metric, the eco-efficiency ratio, defined as 28-d compressive strength divided by total carbon emissions, was introduced, representing the structural performance per unit carbon emission.

Results and discussion In this study, the proposed few-shot deep learning-based mix design method is employed to optimize red mud-based supersulfated cement. The results indicate that the proposed model outperforms conventional artificial neural networks (multilayer perceptron, MLP). Furthermore, the model maintains consistently small training-testing error gaps, indicating an effective overfitting prevention. Validation using ten verification mix proportions shows that the proposed model achieves lower prediction errors than the MLP for samples with substantially different mix proportions from the training data, confirming a superior generalization across the entire mix-proportion space.

The feasible-region-based mix design approach can identify acceptable proportion ranges from the mix proportion-compressive strength landscape generated by the model. The results indicate that as clinker content increases from 0.1% to 5.0%, acceptable red-mud content gradually decreases, while greater slag proportions contributed to meeting strength requirements. Also, the optimal 28-d compressive strength typically occurs when slag content ranges from 75% to 85% and gypsum content from 10% to 20%, consistent with supersulfated cement formulations, thereby supporting a reliability of the developed compressive-strength prediction model.

The acceptable mix-proportion ranges identified from the mix proportion-relative strength landscape indicate that the relative strength declines with increasing clinker content due to the higher carbon-emission factor of clinker. Moreover, the results indicate that the mix proportions yielding the maximum relative strength lay outside the feasible region, because the carbon-emission factor of slag is higher than that of other components, despite its superior reactivity. When producing red mud-based supersulfated cement, it is necessary to choose a mix proportion based on the reactivity of the red mud to balance product performance and carbon-reduction benefits.

Conclusions This research demonstrated a potential of few-shot deep learning-based optimization methods for mix-proportion design of solid-waste cementitious materials. A variational information bottleneck-based modeling method was developed, incorporating a specialized preprocessing strategy for mix-proportion data, a tailored activation function for compressive-strength output, and regularization techniques. A feasible-region-based mix-proportion design method was proposed to address challenges from the variability of physicochemical properties, offering adaptable solutions for different sources and batches of solid waste rather than single optimal designs. The proposed method was applied to optimize a red mud-based supersulfated cement. The results indicated that at 30% red mud content, the 28-d compressive strength could remain comparable to the control group without red mud. At 40% content, the optimal carbon emission benefit was achieved, while meeting the 28-d compressive strength requirements. This study could validate the effectiveness of the proposed few-shot performance prediction model and the feasible region-based mix proportion optimization method.

Keywords red mud; red mud-based supersulfated cement; deep learning; few-shot learning; multi-objective optimization