第 54 卷第 2 期
2026 年 2 月

硅 酸 盐 学 报
JOURNAL OF THE CHINESE CERAMIC SOCIETY

Vol. 54，No. 2
February，2026

http://jccsoc.cbpt.cnki.net

DOI：10.14062/j.issn.0454-5648.20250706

粉煤灰混凝土冻融性能智能预测方法

潘 磊[1,2]，傅宇方[1,2]，王元丰[3]

(1. 交通运输部公路科学研究院，北京 100088；2. 北京大杜社公路材料腐蚀与工程安全国家野外科学观测研究站，北京 101103；3. 北京交通大学土木建筑工程学院，北京 100044)

摘 要：冻融是寒区混凝土结构耐久性失效的主要诱因之一，而传统冻融性能预测方法存在效率低、精度不足等问题。针对现代混凝土结构对冻融耐久性预测需求，本工作提出了一种融合最大信息系数(MIC)、特征选择、智能优化算法和机器学习算法的智能预测方法体系。通过收集 537 组实验数据，构建了包含水泥用量、冻融循环次数等 14 个输入变量的数据库，运用 MIC 和 Lasso 回归算法实现特征选择。采用贝叶斯优化算法对随机森林、支持向量回归和极端梯度提升算法的超参数进行优化，分别建立粉煤灰混凝土质量损失率和相对动弹性模量的预测模型，并采用 Shapley 加法解释法和部分依赖图法，确定关键参数的贡献度与非线性效应。结果显示：1) 采用特征选择方法可以有效提升模型的预测效果；2) 极端梯度算法建立的预测模型具有最优预测精度和泛化能力，其决定系数 R^2 值分别达 0.9224 和 0.9127；3) 获取了特征重要性和相关性分析结果，可为寒区粉煤灰混凝土配合比设计提供组分优化参考。

关键词：粉煤灰混凝土；冻融循环；机器学习；冻融性能预测；特征分析
中图分类号：TP181; TU528　　**文献标志码**：A　　**文章编号**：0454–5648(2026)02–0793–18
网络出版时间：2026–01–14



混凝土作为全球应用最广、用量最大的建筑材料，其核心胶凝材料硅酸盐水泥的生产过程伴随着高碳排放。据统计，每生产 1 t 硅酸盐水泥排放 0.6~1.0 t CO_2，占全球人为碳排放总量的 8%~10%[1]。在“双碳”目标背景下，通过技术创新提升材料耐久性并减少硅酸盐水泥用量，已成为推动基础设施绿色转型的关键。

冻融作为寒区混凝土结构耐久性失效的关键诱因，在复杂环境下破坏机理更为复杂。在冻融循环作用下，混凝土内部孔隙水反复相变产生的膨胀应力是引发微裂纹等初始损伤的直接原因。随着冻融循环次数的增加，混凝土内部损伤逐渐扩大、累积，其内部孔隙结构不断变化，孔隙率增大，微观裂纹不断产生和扩展，致使混凝土抗压强度与动弹性模量等性能逐渐劣化，严重影响混凝土结构的耐久性和承载力，威胁工程安全性与服役寿命[2–5]。据统计，中国发生冻融破坏的地区面积达 190.32×10^4 km^2，占国土面积的 19.83%，突出的地方包括西藏、青海、黑龙江、新疆、甘肃等[6]。冻融破坏具有“点多、面广、量大”的区域分布特点，对寒区内交通、水利、港口、电力等工程结构长期性能具有重要影响。

粉煤灰因其火山灰活性被广泛用于替代水泥，不仅有助于碳减排，还能改善混凝土的微观结构，提升力学性能和耐久性等[7–12]。历史研究和工程实践积累了大量粉煤灰混凝土的冻融性能数据，众多学者通过理论分析和实验数据回归相结合的方法，建立了多种抗冻融预测模型[13–15]，用以描述粉煤灰混凝土冻融劣化过程和预测服役寿命。然而，传统冻融性能预测方法存在效率低、精准度不足等问题，难以满足现代寒区混凝土工程结构对冻融耐久性预测需求。因此，迫切需要提升和完善寒区混凝土工程结构冻融性能预测方法。

人工智能技术凭借强大的非线性建模与高维数据处理能力，为材料性能预测提供了新思路。机器学习算法能有效预测材料组成与宏观性能，并在混凝土强度预测、耐久性评估等领域展现出显著优

收稿日期：2025–09–24。　修订日期：2025–10–21。
基金项目：国家自然科学基金(U24B20112)；中央级公益性科研院所基本科研业务费专项资金(2025-9047)。
第一作者：潘 磊(1991—)，男，博士，助理研究员。
通信作者：傅宇方(1972—)，男，博士，研究员。

Received date: 2025–09–24.　**Revised date:** 2025–10–21.
First author: PAN Lei (1991–), male, Ph.D., Assistant Researcher.
E-mail: l.pan@rioh.cn
Correspondent author: FU Yufang (1972–), male, Ph.D., Professor.
E-mail: yf.fu@rioh.cn

势[16–19]。针对粉煤灰混凝土，一些学者采用机器学习算法建立了力学性能预测模型[20, 21]，在冻融性能的智能化预测方面进行了探索研究[22]。但是，粉煤灰混凝土冻融性能预测模型在输入变量类型、特征选择方法、可解释性和泛化能力等方面研究仍处于起步阶段，而且仅针对单一指标建立预测模型，难以客观反映寒区粉煤灰混凝土配合比设计的需要。

质量损失率(MLR)和相对动弹性模量(RDME)是衡量混凝土冻融性能的关键指标。为提升寒区混凝土冻融性能预测的准确性，本工作提出一种融合最大信息系数(MIC)、特征选择、智能优化算法和机器学习算法的粉煤灰混凝土冻融性能预测方法。通过 MIC 方法识别变量的多重共线性(强相关性)，利用特征选择方法与超参数智能优化算法，建立粉煤灰混凝土冻融性能(MLR 和 RDME)的高精度预测模型。最后，采用 Shapley 加法解释(SHAP)法和部分依赖图(PDP)法，确定关键参数的贡献度与非线性效应。本研究旨在为寒区粉煤灰混凝土工程的材料设计与耐久性评估提供理论支持，并推动人工智能在基础设施领域的深度应用。

1 研究方法

粉煤灰混凝土冻融性能预测模型本质是自变量与因变量的非线性映射关系，需处理“多因素、高阶非线性、高交互、数据复杂”等核心问题。机器学习方法无需预先定义明确的数学关系，而是让算法从大量历史实验数据中自行学习和发现其高度复杂的非线性关系，从而提升预测模型的预测精度和效率，在本研究中粉煤灰混凝土冻融性能预测工作流程见图 1。

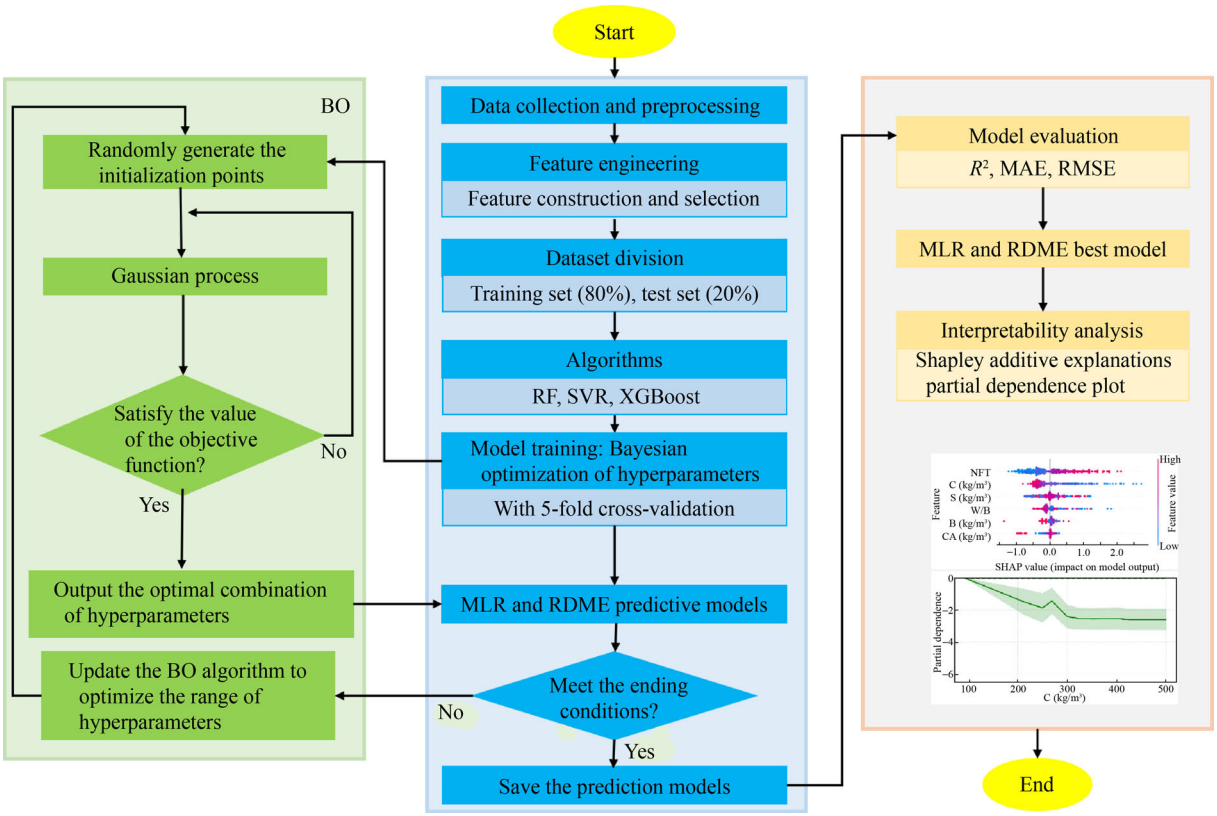


图 1 粉煤灰混凝土冻融性能预测流程框架

Fig. 1 Framework for predicting the freeze-thaw performance of fly ash concrete

1.1 数据库建立

1.1.1 数据收集与预处理

首先，利用中国知网收集粉煤灰混凝土冻融性能文献[14, 23–41]，通过检验混凝土抗冻融试验方法是否符合 GB/T50082—2024[42]规范进行文献初步筛选；其次，筛选出具有相同配合比混凝土的质量损失率和相对动弹性模量作为数据；最后，依据 GB/T50082—2024 规范中快冻法试验停止条件规定对数据进行二次筛选。本研究目标是建立粉煤灰混凝土在有效服役阶段(从冻融循环开始至达到规范规定的破坏标准之前)的冻融性能预测模型，因此仅保留 MLR≤5%且 RDME≥60%的数据样本，

构建适用于工程实际、能够准确反映材料在破坏阈值内性能演化规律的数据库。数据收集工作和数据库构建流程见图 2，经预处理后，共得到 537 个有效样本。

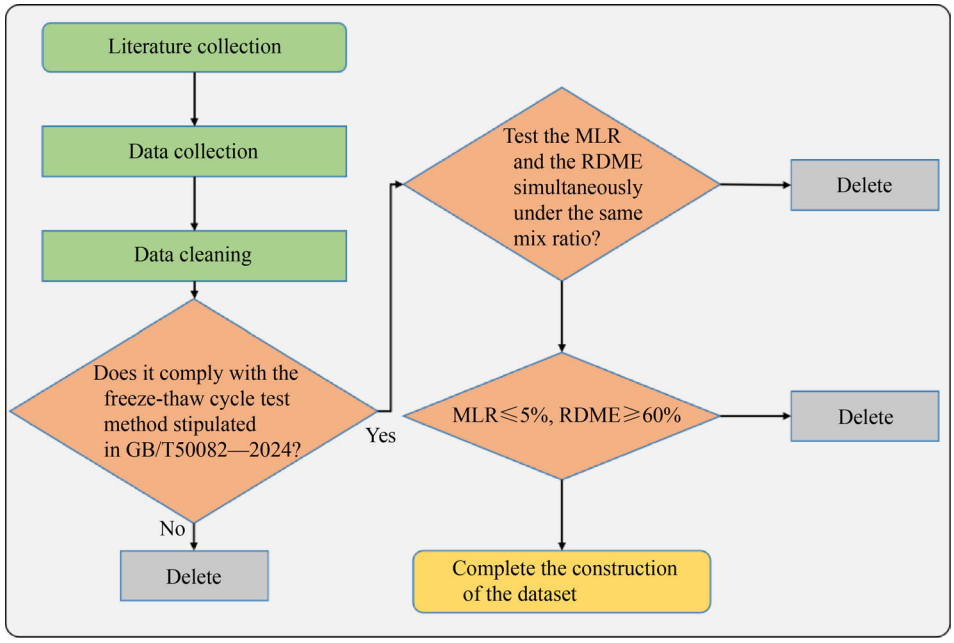


图 2　数据库构建流程

Fig. 2　Flowchart of dataset construction

鉴于输入变量的形式会影响预测模型的预测性能[43]，为充分挖掘原有数据的有用信息，在原有水泥(C)用量、粉煤灰(FA)用量、水(W)用量、石子(CA)用量、砂子(S)用量、减水剂(SP)用量和冻融循环次数(NFT)等 7 个变量的基础上，通过特征构建得到 7 个衍生变量，分别为：总胶凝材料(B)、总骨料(TA)、水胶比(W/B)、砂率(S/TA)、胶凝材料与总骨料比(B/TA)、粉煤灰与总胶凝材料比(FA/B)、减水剂与胶凝材料比(SP/B)，进而得出可用于建立粉煤灰混凝土冻融性能预测模型的初始数据库。

1.1.2　输入变量特征选择

特征选择是从初始数据特征中选取有效特征以降低数据库维度的过程，是提高机器学习算法效率的一个重要环节[44]。

MIC 是一种大数据相关性分析方法，用于衡量多个变量之间关联程度的统计方法，具有捕捉线性或非线性关系、对数据中的噪声具有鲁棒性、适用于高维数据的能力。当采用 MIC 方法识别出变量间存在多重共线性(变量间呈现强相关性)后，在预测模型建立时就需进行特征选择。

Lasso 算法[45]是一种在线性回归基础上引入 L1 正则化项的回归方法，通过压缩回归系数来实现特征选择，能自动选择与目标变量相关的重要特征，同时将不相关或冗余特征的系数压缩至 0，从而得到一个稀疏的、只包含关键变量的模型。这一特性使得 Lasso 算法能有效解决输入变量间存在的多重共线性问题，并完成特征的自动筛选，是进行维度约简和提升模型泛化能力的强有力工具。将 MIC 方法和 Lasso 算法串联用于特征选择，将强相关性变量的冗余特征系数置 0，最终建立出适用于人工智能需要的粉煤灰混凝土冻融性能数据库。

1.2　预测模型构建

1.2.1　算法

材料科学与工程领域的机器学习研究表明，大样本量有助于训练出高性能的预测模型[18, 46, 47]。模型过拟合的风险不仅与样本绝对数量有关，更与样本数量与有效特征数量的比例有关。在完成特征选择后，用于建立 MLR 和 RDME 预测模型的有效输入变量分别降至 6 个和 10 个，样本数量与有效特征数量的比值分别高达约 90 和 54 (本工作称之为高质量数据)，远高于机器学习中为避免过拟合所推荐的最小比值(3~5)，这些高质量数据为模型训练提供了稳健的映射关系[48]。

随机森林(RF)、支持向量回归(SVR)和极端梯度提升(XGBoost)等算法能有效捕捉复杂关系且实现较高的预测精度，常用于复杂非线性问题研究，在

预测混凝土性能方面表现良好[18, 46, 47]。因此，采用RF[49]、SVR[21, 50–53]和 XGBoost[54, 55]算法建立粉煤灰混凝土冻融性能预测模型，再利用高质量数据进行训练，筛选出预测效果最优的模型。

1) RF

RF 是一种基于决策树的集成算法，算法超参数包括：决策树数量(n_estimators)、每棵决策树最大深度(max_depth)、内部节点分裂所需的最小样本数(min_samples_split)、叶节点所需的最小样本数(min_samples_leaf)等。RF 超参数需协同作用才能实现最佳预测效果，表现出显著的“制衡与增强”特性。例如，n_estimators 过小，即使 max_depth 调至合理范围，模型仍会因基学习器多样性不足导致欠拟合；若 max_depth 过大，仅靠增加 n_estimators 难以抵消过拟合，反而因冗余计算降低效率，这种多参数间非线性、动态的协同关系，使人工调参难以精准找到最优平衡点，而智能优化算法可通过迭代学习参数间的协同规律，高效搜索全局最优组合，避免因单一参数调优导致整体性能不佳。

2) SVR

SVR 是一种基于核函数的回归算法，算法超参数包括：核函数(kernel)、核函数参数(γ)、正则化参数(C_1)等。SVR 超参数间存在强耦合性，如 γ 直接决定样本在高维空间的映射方式，γ 过大时样本映射过于分散，此时若 C_1 过小，模型易因对异常值惩罚不足产生过拟合；若 C_1 过大，又可能因过度约束导致模型欠拟合。人工调参时易陷入“顾此失彼”的困境，而智能优化算法可将多参数作为整体优化目标，通过量化参数间的协同影响，快速定位兼顾拟合精度与泛化能力的最优组合。

3) XGBoost

XGBoost 是一种基于梯度提升的树集成算法，算法超参数包括：n_estimators、max_depth、学习率(learning_rate)、叶子节点的最小样本权重(min_child_weight)等。超参数协同作用体现在模型复杂度与训练效率的相互影响，如 max_depth 增大时，若 min_child_weight 过小，模型易生成复杂树导致过拟合，需同步调大 min_child_weight 以限制节点分裂。在此基础上，learning_rate 减小虽能降低单棵树的权重、提升模型稳健性，但需对应增加 n_estimators 以保证模型拟合能力。若两者比例失衡，模型易欠拟合。人工调参不仅耗时，还易因忽略层级间的关联(如仅调优 learning_rate 而未调整 n_estimators)导致模型性能瓶颈，而智能优化算法可在全局搜索空间内精准找到最优参数组合，是实现 XGBoost 性能最大化的必要手段。

4) 贝叶斯优化算法(BO)

BO 是一种基于概率模型的高效优化方法，优点是具有概率建模+主动学习的智能化搜索策略，相比随机搜索、网格搜索、遗传算法等方法，能以更少的实验次数快速找到最优超参数组合[54]。针对 RF 算法采用 BO 优化超参数 n_estimators、max_depth、min_samples_split 和 min_samples_leaf，优化空间分别为[50, 500, 1]、[2, 30, 1]、[2, 10, 2]和[1, 10, 1]，其中优化步长分别为 1、1、2 和 1。针对 SVR 算法采用 BO 优化超参数 kernel、gamma 和 C_1，优化空间分别为[‘linear’, ‘rbf’, ‘poly’]、[0.001, 1000, log-uniform]和[0.001, 1000, log-uniform]，其中 γ 和 C_1 的优化步长采用 log-uniform (对数均匀分布)采样的方式进行设置。针对 XGBoost 算法采用 BO 优化超参数 n_estimators、max_depth、min_child_weight 和 learning_rate，优化空间分别为[50, 500, 1]、[3, 30, 1]、[2, 20, 2]和[0.01, 0.9, log-uniform]，其中前 3 个超参数的优化步长分别为 1、1 和 2，第 4 个超参数的优化步长采用 log-uniform 采样的方式进行设置。

1.2.2 模型训练

将获取的高质量数据随机打乱确保每个批次的数据中类别分布更加均匀，划分出训练集(80%)和测试集(20%)。在训练集上，采用 BO 优化超参数与五折交叉验证[18]相结合的方式进行模型训练，其中五折交叉验证是防止训练模型出现过拟合或欠拟合。训练完成后，在测试集上评估模型的预测效果。

1.2.3 模型评价指标

目前常用的模型评价指标有决定系数(R^2)、均方误差(MSE)、均方根误差(RMSE)、平均绝对误差(MAE)等[56, 57]，选用 R^2、MAE 和 RMSE 指标对建立的预测模型进行评价，数学表达式如式(1)~式(3)所示。

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

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

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

式中：n 为每个数据库的数据数量；Y_i、$\bar{Y}_i$ 和 $\hat{Y}_i$ 分别为观测值、平均值和预测值。

2　结果与讨论

2.1　数据库

2.1.1　数据统计指标

由数据库中各变量的统计指标(表 1)可知，各变量的值均在较大的变化范围内，说明所建立数据库可以训练出适用性较高的粉煤灰混凝土冻融性能预测模型。需要特别指出的是，本数据库涵盖了从普通混凝土到粉煤灰混凝土的广泛范围，其中 FA 含量为 0 kg/m^3 的样本(即普通混凝土)有 182 组，占总样本量的 33.89%。这种数据构成能够确保预测模型反映混凝土材料冻融性能的普遍规律，而非仅限于粉煤灰混凝土，为模型的通用性奠定了数据基础。

表 1　初始输入和输出变量的统计指标(基础变量)

Table 1　Statistical indicators of initial input and output variables (Basic variable)　kg·m^{-3}

Index	C	FA	W	CA	S	SP	B	TA
Mean	320.9	93.22	164.4	1100.33	686.64	4.61	414.12	1786.97
SD	96.98	89.72	18.88	135.37	65.73	2.93	67.84	113.28
Minimum	60	0	119	665	451	0	293	1330
25%	257	0	160	1077	636	3	354	1740
50%	310.5	75	165	1117	687.8	4	404	1806
75%	404	150	180	1126	728	5.21	500	1847
Maximum	526	441	220	1588	809	23.31	630	2066

Note: SD is standard deviation; C, FA, W, CA, S, SP, B, and TA respectively represent cement, fly ash, water, coarse aggregate, sand, superplasticizer, total cementitious material and total aggregate.

表 2　初始输入和输出变量的统计指标(衍生变量)

Table 2　Statistical indicators of initial input and output variables (Derived variable)

Index	W/B	S/TA	B/TA	FA/B	SP/B	NFT	MLR/%	RDME/%
Mean	0.41	0.39	0.23	0.22	0.01	122.96	1.01	86.95
SD	0.07	0.05	0.05	0.21	0.01	80.28	1.18	11.18
Minimum	0.25	0.23	0.14	0	0	10	–1.28	60.3
25%	0.33	0.36	0.19	0	0.01	50	0.15	79
50%	0.41	0.38	0.22	0.2	0.01	100	0.58	90.04
75%	0.45	0.4	0.28	0.4	0.01	175	1.5	96.99
Maximum	0.6	0.5	0.45	0.83	0.04	300	4.9	103.1

Note: W/B, S/TA, B/TA, FA/B, SP/B, NFT, MLR and RDME respectively represent water-binder ratio, sand ratio, total cementitious material to total aggregate ratio, fly ash to total cementitious material ratio, superplasticizer to cementitious material ratio, number of freeze-thaw cycles, mass loss ratio, and relative dynamic modulus of elasticity, respectively.

2.1.2　输入变量特征选择

各变量间的 MIC 结果(图 3)表明，对 MLR 影响最大的输入变量是 NFT 值，其次是 S/TA 值，最小的是 FA 含量，其 MIC 值分别为 0.36、0.28 和 0.19。S/TA 的 MIC 值大于 C、FA、W 等输入变量，体现出特征构建将提升粉煤灰混凝土冻融性能预测模型的预测效果。此外，对 RDME 影响最大的输入变量(MLR 除外)是 S/TA 值，最小的是 FA 含量和 FA/B 值，同样体现出特征构建的重要性。然而，输入变量存在多重共线性，将会降低预测模型的预测效果。由图 3 可见，特征构建后，输入变量存在显著的多重共线性，如 FA/B 值与 FA 含量、CA 含量与 B/TA 值等，对应的 MIC 值为 1。因此，在建立粉煤灰混凝土冻融性能预测模型时，对输入变量进行特征选择是十分必要的。

采用 Lasso 算法进行特征选择，结果见图 4。特征选择后，分别采用 RF、SVR 和 XGBoost 算法，将 C、CA、S、B 含量和 W/B、NFT 值作为输入变量建立 MLR 预测模型；将 C、FA、W、CA、S、SP、B、TA 含量和 W/B、NFT 等 10 个值作为输入变量建立 RDME 预测模型。此外，分别将 C、FA、W、CA、S 和 SP 等 6 个质量参数作为输入变量，分别建立 MLR 和 RDME 预测模型，用以衡量特征构建和特征选择对模型预测效果的提升能力。为检验特征选择结果的稳健性，开展系列对照试验发现，针对强多重共线性的变量对(如 FA 与 FA/B)，虽然

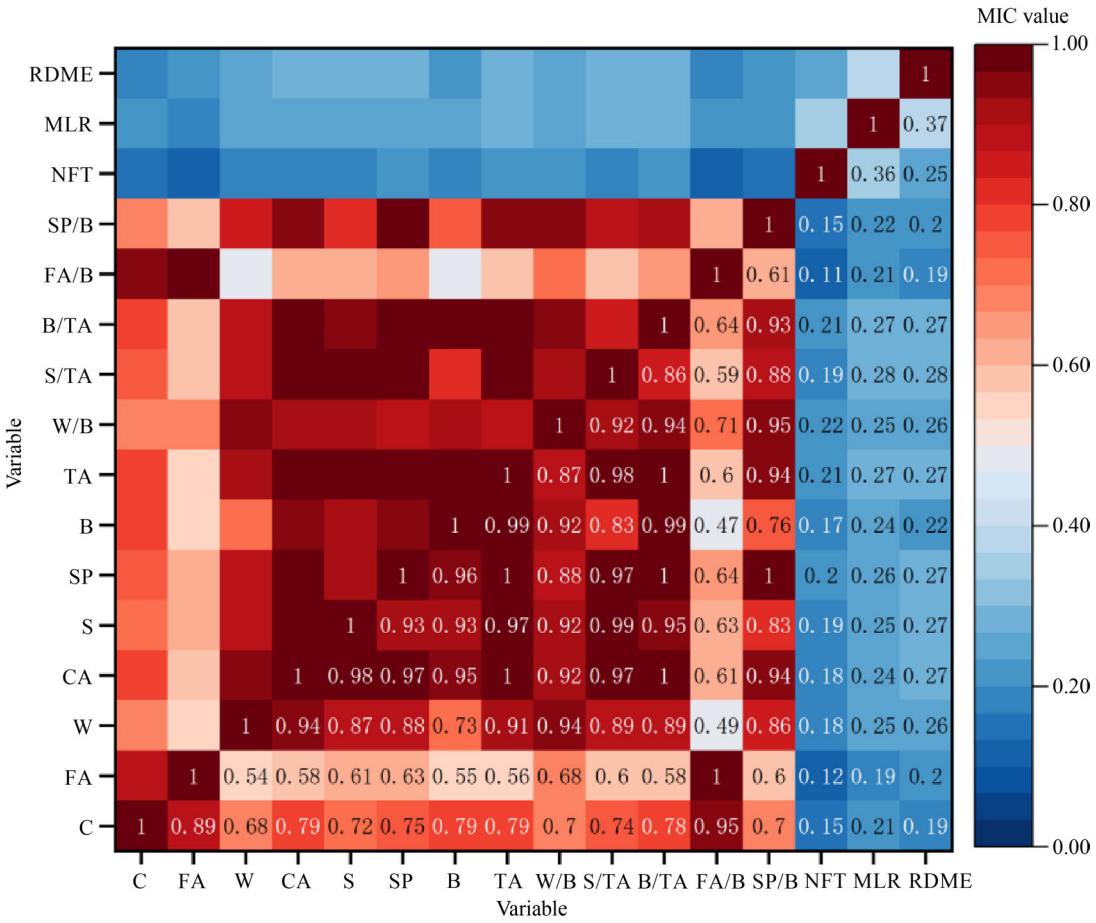
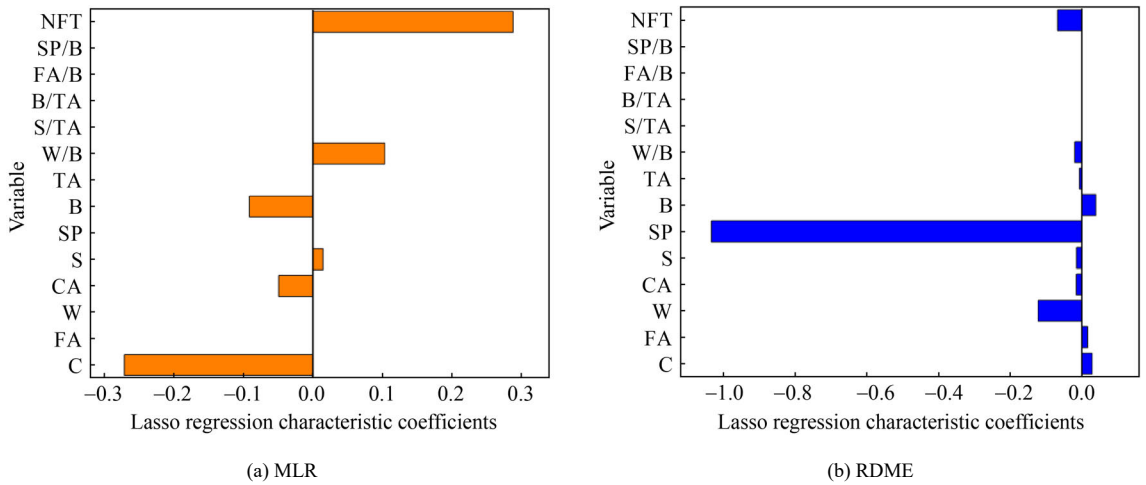


图 3 各变量间的最大信息系数(MIC)热力图

Fig. 3 Maximum information coefficient (MIC) heatmap among variables



(a) MLR (b) RDME

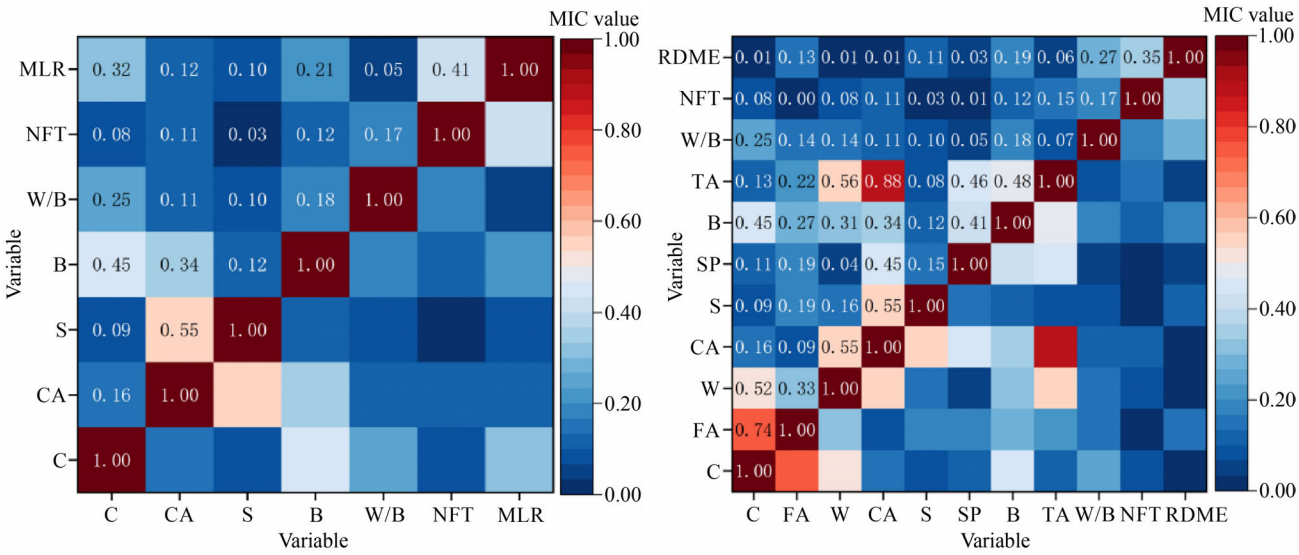
图 4 Lasso 回归算法筛选后的输入变量

Fig. 4 Input variables screened by the Lasso regression algorithm

Lasso 算法的选择存在波动，但是核心变量(如 NFT、C、W/B 等)在所有试验中均被稳定地选取，仅对次要变量(如 S/TA、SP/B)的取舍略有不同。更重要的是，由不同特征子集所构建的预测模型，其预测效果(R^2、MAE、RMSE)差异甚微，说明次要变量的细微调整对模型预测性能的影响很小。这表明本研究采用的特征选择方法在剔除冗余的同时，能够有效捕捉到影响冻融性能的关键因素，具有良好的稳健性，图 4

结果为多次尝试中模型预测性能最优的一组特征。

特征选择后，各变量间的 MIC 结果见图 5。通过特征选择可以显著降低变量的多重共线性，为提升预测模型的预测精度和泛化能力提供保障。



(a) MLR　　(b) RDME

图 5　特征选择后各变量间的 MIC 热力图

Fig. 5　MIC heatmap among variables after feature selection

2.2　冻融性能预测

针对 MLR 和 RDME，由 BO 优化超参数(RF、SVR、XGBoost)得到的 3 种算法，其最佳超参数组合分别见表 3 和表 4 (T 表示对输入变量进行特征选择，如 RF-T，下文同此)。采用 R^2、MAE 和 RMSE 指标衡量模型的预测效果，从而筛选出预测效果最好的模型，并与简单人工神经网络(ANN)进行了对比。参数设置规则及其原理见文献[48]。

2.2.1　MLR 预测模型

每个模型的评价指标见表 5。数据表明，与 RF、SVR 模型相比，XGBoost 模型具有最好的预测精度，其 R^2、MAE 和 RMSE 分别为 0.8422、0.4555%和 0.2680%。相较于 RF、SVR 和 XGBoost 模型，RF-T、SVR-T 和 XGBoost-T 模型的预测精度均得到了提升，其 R^2 值分别提升了 6.87%、6.01%和 9.52%，MAE 值分别降低了 14.22%、4.20%和 35.28%，RMSE 值分别降低了 14.98%、0.22%和 23.67%，表明特征构建和特征选择有助于提升模型的预测效果。XGBoost-T 模型具有最高的预测精度，其 R^2、MAE 和 RMSE 分别为 0.9224、0.3367%、0.2167%。相较于 ANN 模型，XGBoost-T 模型的 R^2 提升了 10.03%，MAE 和 RMSE 分别降低了 27.78%和 21.82%。

泛化能力是评估模型性能的重要指标，训练集和测试集评价指标间的差异越小，表示模型的泛化

表 3　特征选择后 3 种算法的超参数优化结果

Table 3　Hyperparameter optimization results of three algorithms after feature selection

Algorithm	Meaning of hyperparameters	Set range and step size	Optimization results
SVR-T	kernel	[‘linear’, ‘rbf’, ‘poly’]	‘rbf’
	γ	[0.001, 1000, log-uniform]	0.47
	C_1	[0.001, 1000, log-uniform]	27.49
RF-T	n_estimators	[50, 500, 1]	213
	max_depth	[2, 30, 1]	10
	min_samples_split	[2, 10, 2]	2
	min_samples_leaf	[1, 10, 1]	1
XGBoost-T	n_estimators	[50, 500, 1]	168
	max_depth	[3, 30, 1]	3
	learning_rate	[0.01, 0.9, log-uniform]	0.21
	min_child_weight	[2, 20, 2]	6

Note: γ and C_1 are the regularization parameter and the kernel function parameter, respectively.

表 4 特征选择后 3 种算法的超参数优化结果

Table 4 Hyperparameter optimization results of three algorithms after feature selection

Algorithm	Meaning of hyperparameters	Set range and step size	Optimization results
SVR-T	kernel	['linear', 'rbf', 'poly']	'rbf'
	γ	[0.001, 1000, log-uniform]	0.37
	C_1	[0.001, 1000, log-uniform]	32.17
RF-T	n_estimators	[50, 500, 1]	308
	max_depth	[3, 30, 1]	26
	min_samples_split	[2, 10, 2]	2
	min_samples_leaf	[1, 10, 1]	1
XGBoost-T	n_estimators	[50, 500, 1]	375
	max_depth	[3, 30, 1]	5
	learning_rate	[0.01, 0.9, log-uniform]	0.12
	min_child_weight	[2, 20, 2]	4

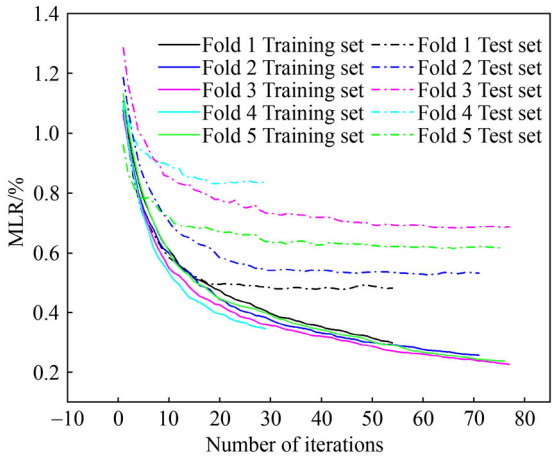
表 5 具有最佳超参数的模型评价指标

Table 5 Evaluation metrics of models with optimal hyperparameters

Model	Test type	R^2	MAE/%	RMSE/%
RF	Training set	0.971 7	0.197 9	0.140 2
	Test set	0.828 5	0.481 9	0.290 9
SVR	Training set	0.984 5	0.148 1	0.103 5
	Test set	0.819 0	0.471 7	0.268 5
XGBoost	Training set	0.974 9	0.187 1	0.127 7
	Test set	0.842 2	0.455 5	0.268 0
RF-T	Training set	0.993 8	0.091 2	0.065 1
	Test set	0.885 4	0.421 9	0.253 0
SVR-T	Training set	0.994 8	0.083 0	0.059 7
	Test set	0.868 2	0.452 7	0.267 9
XGBoost-T	Training set	0.996 9	0.064 6	0.045 8
	Test set	0.922 4	0.336 7	0.216 7

能力越强。RF-T、SVR-T 和 XGBoost-T 模型在测试集和训练集上的 R^2 值之差分别为 0.1084、0.1266 和 0.0745，MAE 值之差分别为 0.3307%、0.3697%和 0.2721%，RMSE 值之差分别为 0.1879%、0.2082%和 0.1709%。ANN 模型的在测试集和训练集上的 R^2 值之差为 0.1462，MAE 值之差为 0.3195%，RMSE 值之差为 0.1771%。XGBoost-T 模型预测精度最高，泛化能力最好。此外，XGBoost-T 模型在五折交叉验证训练过程中，由于采用贝叶斯优化算法对模型超参数进行了优化，使其训练过程很快收敛，并且 5 次结果相差较小，说明 XGBoost-T 模型并未出现过拟合现象(图 6)，进一步体现出 XGBoost-T 模型在具有较好预测精度的同时，也具有较好的泛化能力。

将试验值和预测值绘制成散点图，如图 7 所示。对角线实线表示预测精度为 100%，虚线表示预测值相对误差在±10%以内。数据点沿对角线分布越集



MLR is the mass loss rate.

图 6 XGBoost-T 模型训练过程的迭代次数和损失值

Fig. 6 The number of iterations and loss values in the training process of the XGBoost-T model

中，模型的预测精度越高；离对角线越远，预测精度越低。相较于 RF-T、SVR-T 和 XGBoost-T 模型，RF、SVR 和 XGBoost 模型分别表现出与对角线实线更明显偏差，更多的数据点落在±10%相对误差范围之外。这一结果凸显出特征构建和特征选择的重要性。相较于 RF-T 和 SVR-T 模型，XGBoost-T 模型的数据点更为集中，与对角线实线的对称性更好，分布在±10%相对误差范围之外的数据点较少，说明 XGBoost-T 模型对粉煤灰混凝土 MLR 具有更好的预测效果。

2.2.2 RDME 预测模型

每个模型的评价指标(表 6)表明，与 RF、SVR 模型相比，XGBoost 模型具有最好的预测精度，R^2、MAE 和 RMSE 分别为 0.8718、4.2088%和 2.7997，其次是 SVR 模型，RF 模型的预测精度最低。相较

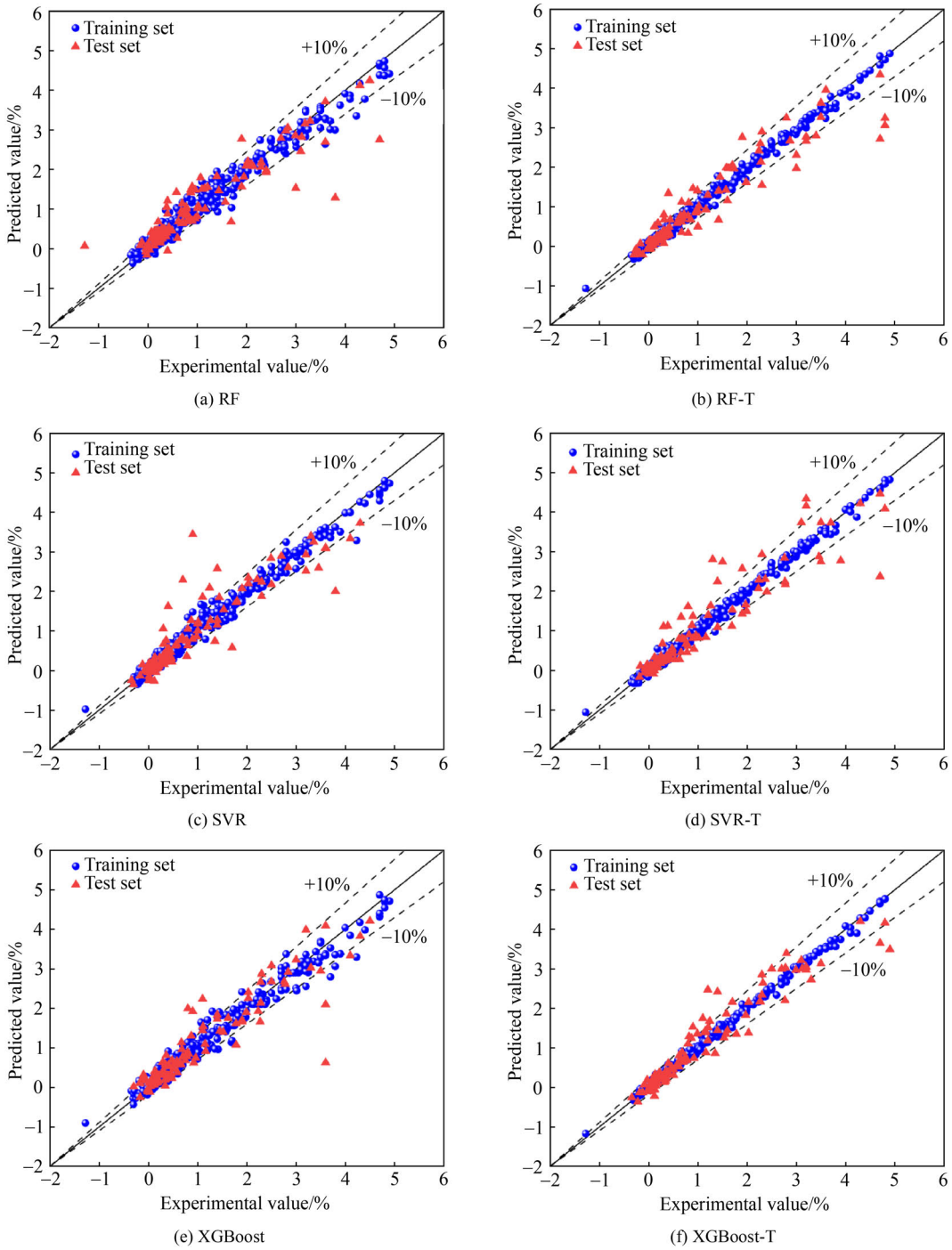


图 7　MLR 预测模型预测值与试验值比较

Fig. 7　Comparison between predicted and experimental values of MLR prediction models

于 RF、SVR 和 XGBoost 模型，RF-T、SVR-T 和 XGBoost-T 模型的预测精度均得到了提升，其 R^2 值分别提升了 5.61%、4.36%和 4.69%，MAE 值分别降低了 7.65%、29.00%和 17.29%，RMSE 值分别降低了 0.05%、22.48%和 18.69%，体现出特征构建和特征选择对提升模型预测效果的重要性。XGBoost-T 模型预测精度最高，其 R^2、MAE 和 RMSE 分别为 0.9127、3.5883%和 2.3589%。相较于 ANN 模型，R^2 提升了 5.15%，MAE 和 RMSE 分别降低了 8.52%和 9.15%。

RF-T、SVR-T 和 XGBoost-T 模型在测试集和训练集上的 R^2 值之差分别为 0.1229、0.0938 和 0.0697，MAE 值之差分别为 2.7289%、2.0787%和 1.6374%，RMSE 值之差分别为 1.9467%、1.9350%和 1.6519%。

ANN 模型的在测试集和训练集上的 R^2 值之差为 0.1180，MAE 值之差为 2.5880%，RMSE 值之差为 1.6541%。同时，XGBoost-T 模型并未出现过拟合现象(图 8)，并且由于采用贝叶斯优化算法对模型超参数进行了优化，使其训练过程很快收敛。XGBoost-T 模型具有最高的预测精度，同时泛化能力最好。

表 6 具有最佳超参数的模型评价指标(RDME)

Table 6 Evaluation metrics of models with optimal hyperparameters (RDME)

Model	Test type	R^2	MAE/%	RMSE/%
RF	Training set	0.9740	1.8025	0.7301
	Test set	0.8038	4.9304	2.9948
SVR	Training set	0.9821	1.4975	1.0195
	Test set	0.8585	4.1776	2.7687
XGBoost	Training set	0.9838	1.4019	0.9847
	Test set	0.8718	4.2088	2.7997
RF-T	Training set	0.9718	1.8511	1.0467
	Test set	0.8489	4.5800	2.9934
SVR-T	Training set	0.9897	1.1598	0.8256
	Test set	0.8959	3.2385	2.7606
XGBoost-T	Training set	0.9824	0.9509	0.7070
	Test set	0.9127	2.5883	2.3589

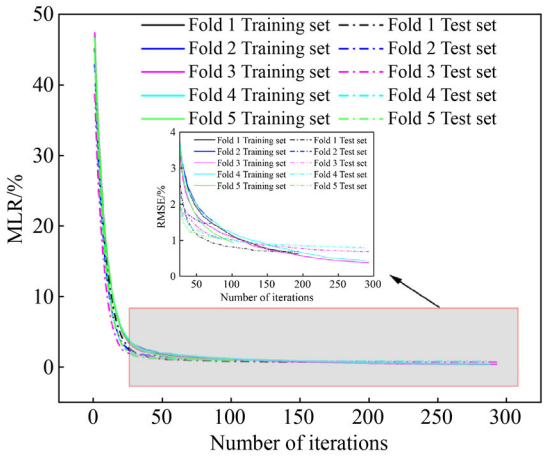


图 8 XGBoost-T 模型训练过程的迭代次数和损失值

Fig. 8 The number of iterations and loss values in the training process of the XGBoost-T model

试验值和预测值的散点图如图 9 所示。相较于 RF-T、SVR-T 和 XGBoost-T 模型，RF、SVR 和 XGBoost 模型分别表现出与对角线实线更明显偏差，更多的数据点落在±10%相对误差范围之外。相较于 RF-T、SVR-T 模型，XGBoost-T 模型的数据点更为集中，与对角线实线的对称性更好，分布在±10%相对误差范围之外的数据点较少，说明 XGBoost-T 模型对粉煤灰混凝土 RDME 具有更好的预测效果。

2.3 可解释性分析

为探讨各输入变量对粉煤灰混凝土冻融性能的影响，选择预测效果最优的 XGBoost-T 模型进行分析。

2.3.1 MLR 预测模型

1) 特征重要性分析

Shapley 加法解释(SHAP)法是一种基于博弈论的模型解释方法，主要用于表征各输入变量对预测结果的贡献[16, 18]。

由图 10 可见，SHAP 值随着 NFT 的增加而增加，表明粉煤灰混凝土冻融损伤逐渐加剧，表面剥落增加，致使 MLR 增加[58]。随着 C 用量增加，粉煤灰混凝土 MLR 逐渐减小，原因是水泥用量增加，其水化产生的 C-S-H 凝胶与 $Ca(OH)_2$ 等产物增多，填充混凝土内部的孔隙和缺陷，使粉煤灰混凝土的微观结构更加致密，从而降低水的渗透性，使得界面过渡区(ITZ)的结构更加均匀致密，减少了界面处的孔隙和薄弱区域[59, 60]。然而，随着 B 和 W/B 的增大，SHAP 值既有增加也有减小，表明不同 B 和 W/B 对粉煤灰混凝土的冻融损伤有不同影响，这主要是因为当粉煤灰掺量较大时 MLR 随粉煤灰掺量增加而急剧增大[61]。此外，随着 S 和 CA 含量的增加，SHAP 值既有增加也有减小，表明不同 S 和 CA 含量对粉煤灰混凝土的冻融损伤有不同影响，体现出在进行粉煤灰混凝土配合比设计时确定合理砂率的重要性。但是，高蕾和陈拴发[62]指出砂率对高性能混凝土的冻融损伤无显著影响，因此针对不同类型混凝土，开展砂率对冻融损伤的影响值得进一步深入研究。

2) 关联性分析及机理解释

部分依赖图(PDP)是机器学习可解释性领域的重要工具，用于分析输入变量与输出变量间的非线性关系。XGBoost-T 模型的 PDP (图 11)显示，随着 C 含量的增加，其正面影响逐渐增强(负值)，表明粉煤灰混凝土 MLR 随着 C 含量的增加而减小，当 C 含量超过 300 kg/m^3 时影响程度趋于稳定。这主要是因为水泥水化生成的 C-S-H 凝胶与 $Ca(OH)_2$ 可填充混凝土内部原生孔隙，尤其在 ITZ，降低冻融循环中水分迁移的通道，从而抑制冰晶膨胀应力引发的微裂纹扩展。相反，随着 NFT 次数的增加，其负面影响逐渐增强(正值)，表明 NFT 越高，粉煤灰混凝土 MLR 越大。这一观察结果与 SHAP 的研究结果一致。

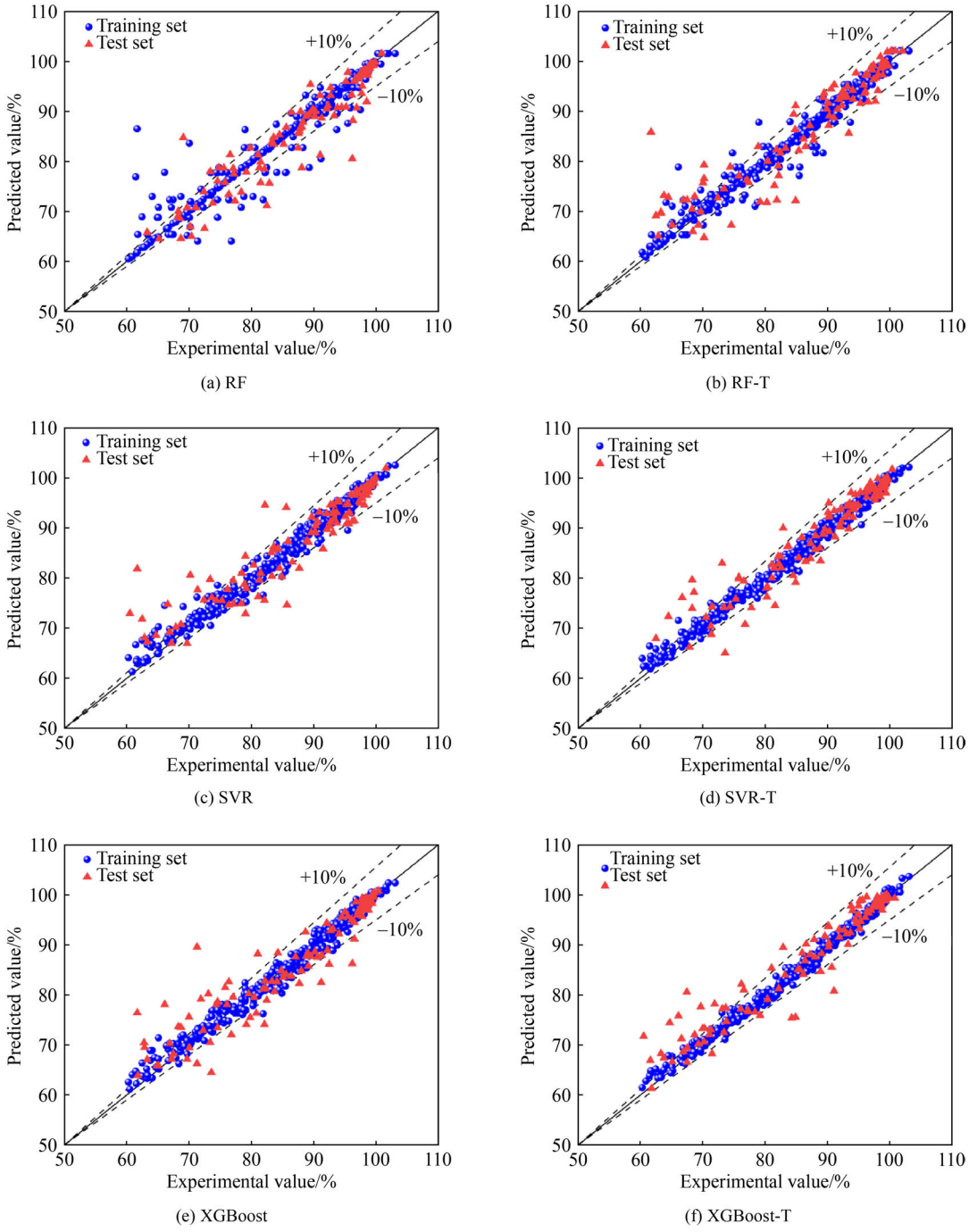


图 9　RDME 预测模型预测值与试验值比较

Fig. 9　Comparison between predicted and experimental values of RDME prediction models

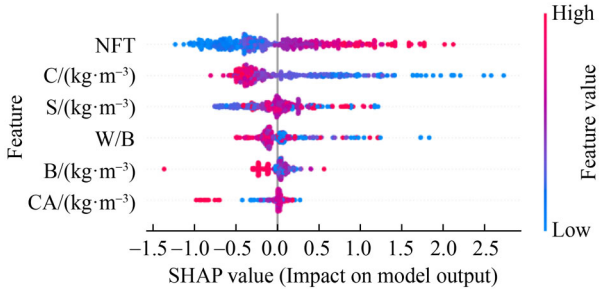


图 10　SHAP 蜂群图

Fig. 10　SHAP beeswarm plot

总体而言，随着 B 含量的增加，其正面影响逐渐增强，表明粉煤灰混凝土 MLR 随着 B 含量的增加而减小，但是存在小范围负面影响增加的情况，这是由于粉煤灰掺量过高致使火山灰反应滞后，未水化颗粒形成薄弱区造成的。当 B 含量超过 500 kg/m^3 时，其影响程度趋于稳定。

随着 W/B 的增大，其影响呈现先正面增强后负面增强的趋势，表明低水胶比有助于降低粉煤灰混凝土 MLR。寒冷地区粉煤灰混凝土的水胶比建议不

超过 0.5。此外，随着 S 和 CA 含量的增加，其影响呈现先正面影响增强，然后负面影响增强，再正面影响增强的趋势。这是因为砂率过低时，粗骨料形成的骨架间隙过大，砂浆无法完全填充，冻融中冰晶在间隙内膨胀导致骨架松散；砂率过高时，砂浆层厚度不足，在冻融循环中易开裂，二者均会导致 MLR 升高。在进行粉煤灰混凝土配合比设计时，应注重考虑合理的砂率以降低 MLR。

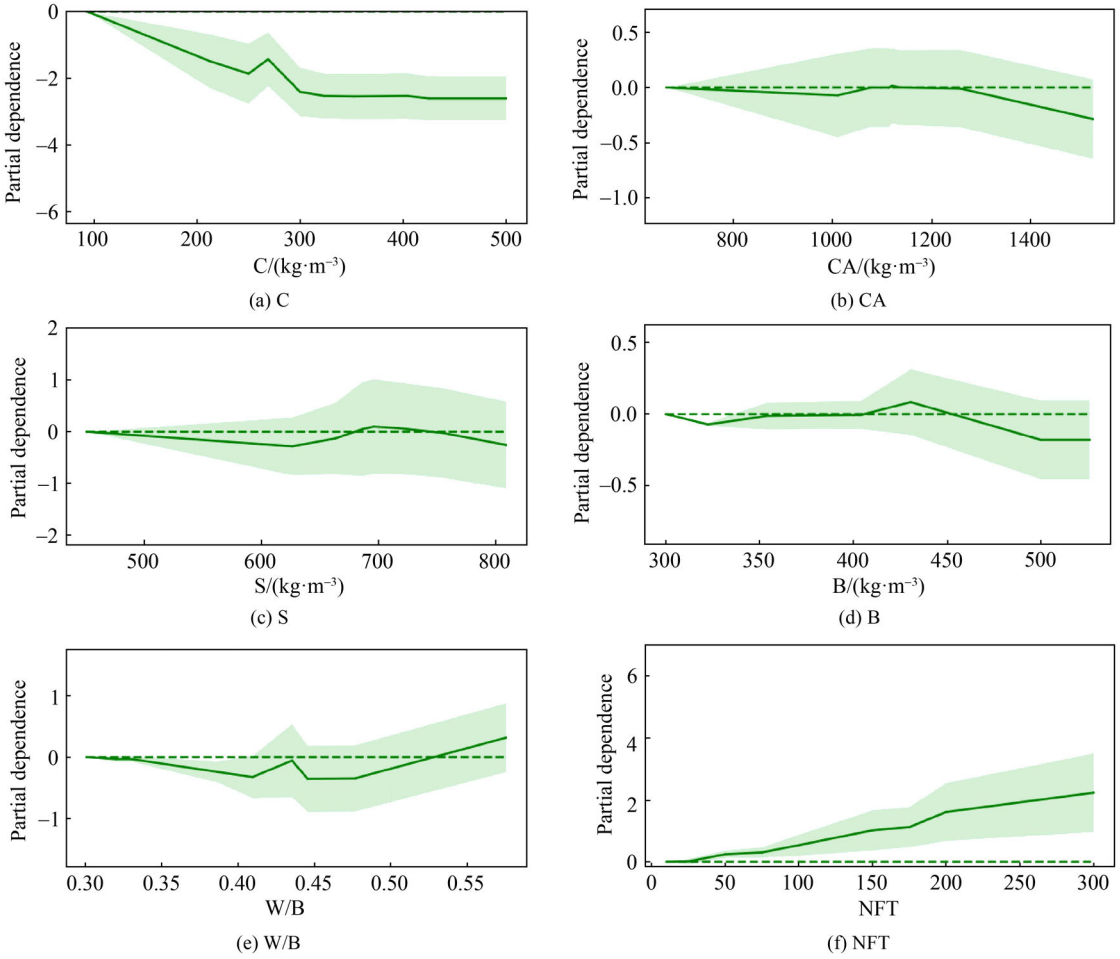


图 11 各输入变量的部分依赖图

Fig. 11 Partial dependence plots of input variables

2.3.2 RDME 预测模型

1) 特征重要性分析

由图 12 可见，SHAP 值随着 NFT 的增加而逐渐减小，粉煤灰混凝土冻融损伤逐渐扩大，导致 RDME 降低。在一定范围内 S 含量与 NFT 的影响趋势类似，随着 S 含量的增加 RDME 降低，但是 S 含量在超过一定量时对 RDME 体现出积极影响。随着 CA 和 TA 含量的增加，SHAP 值既有增加也有减小，表明不同 CA 和 TA 掺量对粉煤灰混凝土的冻融损伤有不同影响，结合 S 的影响进一步突出合理砂率重要性。

总体而言，随着 C 和 B 用量的增加粉煤灰混凝土 RDME 逐渐增大，有助于降低粉煤灰混凝土的冻融损伤，原因与 MLR 类似。随着 W、W/B、SP 和 FA 的增大，SHAP 值既有增加也有减小，表明不同

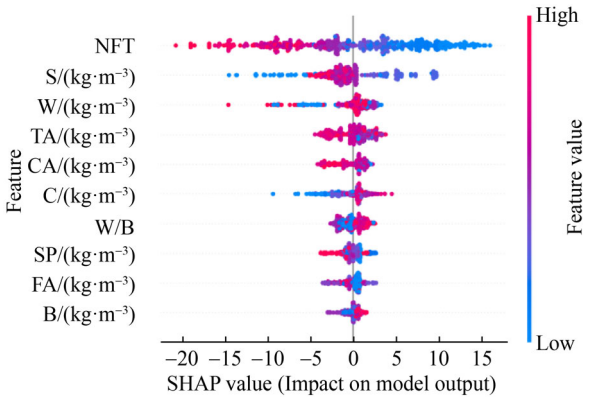


图 12 SHAP 蜂群图

Fig. 12 SHAP beeswarm plot

W、W/B、SP 和 FA 对粉煤灰混凝土冻融损伤有不同的影响。当 FA 掺量适宜时，能够降低冻融损伤，而当掺量过高时则造成不利影响[63, 64]，这也是随着

W/B 的增大 SHAP 值既有增加也有减小的原因之一。SP 的使用同样会影响 W 和 W/B 的大小，也是造成该结果的原因。此外，不确定性因素也是造成 SHAP 值既有增加也有减小的重要原因。

董昊良等[65]对比研究了 C30 及 C60 机制砂混凝土的冻融损伤过程，当 C30 混凝土的 RDME 降低至 60%时，其 MLR 不到 1.5%，而 C60 混凝土的 RDME 降低至 60%时，MLR 仅为 0.01%，几乎不出现剥落。冻融初期，混凝土内部以微裂纹萌生为主，表面剥落不明显，但 RDME 已因微裂纹扩展而下降，此时 RDME 对早期损伤更敏感，可表征为“隐性损伤”；冻融中期，微裂纹连通引发表面砂浆剥落，MLR 快速上升，RDME 下降趋缓；冻融后期，混凝土内部结构松散，MLR 接近甚至超过 5%，但 RDME 可能仍高于 60%，此时需结合 MLR 判断表面剥落风险，避免仅依赖 RDME 而低估冻融损伤程度。仅通过单一 MLR 或 RDME 指标难以对混凝土的冻融损伤进行准确评价，这也是本工作采用相同粉煤灰混凝土配合比，同时建立 MLR 和 RDME 预测模型的原因。

2) 关联性分析及机理解释

由图 13 可见，随着 C、B 含量的增加，其正面影响逐渐增强，表明粉煤灰混凝土 RDME 随着 C、

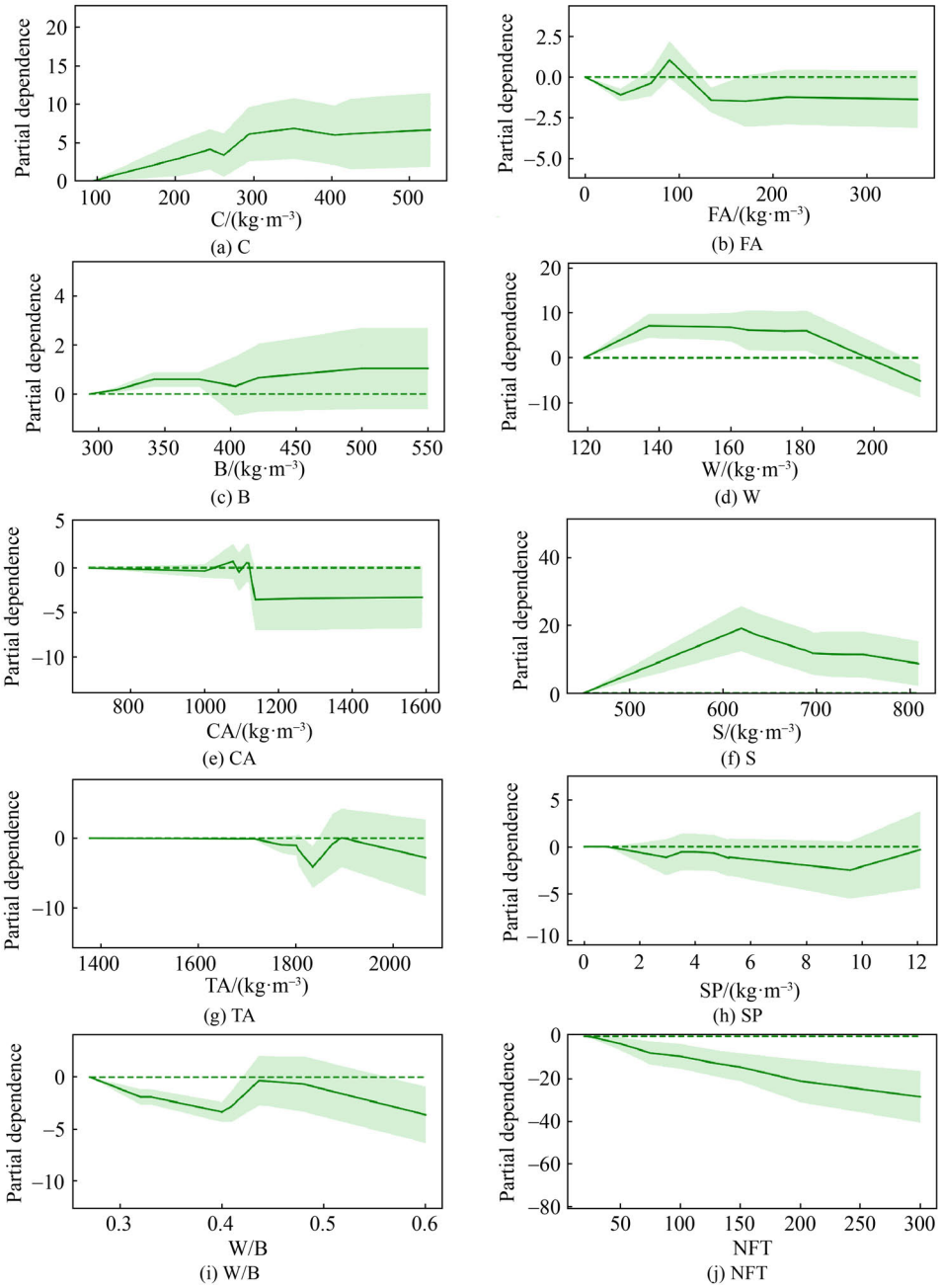


图 13　各输入变量的部分依赖图

Fig. 13　Partial dependence plots of input variables

B 含量的增加而增大，当 C 和 B 含量分别超过 300 kg/m^3 和 500 kg/m^3 时影响程度趋于稳定。相反，随着 NFT 次数和 W/B 的增加，其负面影响逐渐增强，表明 NFT 和 W/B 越高，粉煤灰混凝土 RDME 越小。可见，低水胶比可以降低粉煤灰混凝土的冻融损伤。当 W/B>0.5 时，封闭小孔转化为连通大孔，反复冻融导致孔壁剥落，致使 RDME 快速下降。但是，当 W/B 为 0.4 时存在 RDME 降低的情况，这可能是由于粉煤灰掺量过高火山灰反应滞后，未水化颗粒形成薄弱区造成的。

随着 FA 含量的增加，其影响波动性较大，当含量约 100 kg/m^3 时，对提升粉煤灰混凝土 RDME 是有利的，这是因为粉煤灰颗粒可填充水泥水化形成的孔隙，同时其活性 SiO_2、Al_2O_3 与 $Ca(OH)_2$ 反应生成额外 C-S-H 凝胶，提升密实度。粉煤灰掺量过高负面效应凸显，粉煤灰比表面积大，需更多水分包裹颗粒，易导致有效水胶比升高，且未反应的粉煤灰颗粒在冻融循环中易与砂浆脱粘，形成微裂纹。

随着 W 含量的增加，呈现先正面影响增加，然后负面影响增加，其临界点为 200 kg/m^3，表明粉煤灰混凝土 RDME 随着 W 含量的增加，呈现先增加后减小的趋势。W 含量较低(<130 kg/m^3)时，混凝土拌和物流动性差，振捣不密实易形成施工孔隙。W 含量较高(>180 kg/m^3)时，多余水分蒸发后留下毛细孔，二者均会增加冻融损伤通道。因此，建议寒冷地区粉煤灰混凝土的最佳 W 含量范围为 130~180 kg/m^3。

此外，当 CA 含量超过 1100 kg/m^3 时，将会对粉煤灰混凝土 RDME 产生较大的负面影响，这是由于 CA 过多使混凝土“ITZ 总面积增加”，而 ITZ 是冻融损伤的薄弱区。在进行寒冷地区粉煤灰混凝土配合比设计时，CA 含量以不超过 1100 kg/m^3 为宜。随着 S 含量的增加，其正面影响呈现先增强后减弱的趋势，寒冷地区粉煤灰混凝土的最佳 S 含量范围为 550~700 kg/m^3，此时砂浆既能较好填充粗骨料间隙，又能保证足够的厚度包裹骨料。

需要强调的是，通过 PDP 分析得出的参数优化区间(如 W、S、FA)，是模型基于当前特定数据库学习到的统计规律，揭示了在现有数据范围内，各组分与抗冻性之间的非线性关联，为配合比设计提供了强有力的科学参考和优化起点。目前将这些发现直接作为普适性的设计规范仍需谨慎。未来的研究工作需要通过设计专门的验证性试验，或收集大量的现场暴露试验数据，来进一步确认优化区间在实际工程中的有效性。

3 结论

通过建立一种融合 MIC 方法、Lasso 算法、贝叶斯优化算法和机器学习算法的粉煤灰混凝土冻融性能预测体系，采用 3 种机器学习算法分别建立了粉煤灰混凝土 MLR 和 RDME 预测模型，并采用 R^2、MAE 和 RMSE 作为模型评价指标，建立了预测精度高、泛化能力强的预测模型，为解决传统经验公式效率低、精度不足的问题，提供了新路径。主要结论如下：

1) 通过特征工程和 MIC 方法分别进行特征构建和多重共线性识别，并采用 Lasso 算法筛选关键输入变量消除冗余特征，有效提升模型预测精度和泛化能力；

2) 与 XGBoost 模型相比，XGBoost-T 模型(MLR 和 RDME)的预测精度均得到了提升，其 R^2 值分别提升了 9.52%和 4.69%；

3) XGBoost-T 模型在预测粉煤灰混凝土 MLR 和 RDME 方面表现出最优的预测精度和泛化能力，其 R^2 值分别达到 0.9224 和 0.9127，MAE 值分别为 0.3367%和 3.5883%，RMSE 值分别为 0.2167%和 2.3589%；

4) 水泥用量和总胶凝材料的增加有助于降低 MLR 和提高 RDME，而水胶比和冻融循环次数的增加则会增加 MLR 并降低 RDME。此外，砂率也是影响粉煤灰混凝土冻融损伤的重要参数；

5) 特征重要性和相关性分析结果可为寒区粉煤灰混凝土配合比设计提供优化方向与参考。PDP 分析表明，当水含量处于 130~180 kg/m^3、砂含量处于 550~700 kg/m^3 区间时，粉煤灰混凝土倾向于表现出更优的冻融性能，粉煤灰掺量为 100 kg/m^3 时表现出积极的抗冻效果。上述运用数据挖掘获取的优化区间为配合比初步设计提供了定量参考，但其普适性与有效性还需更多的独立试验和工程实践进一步验证。

6) 单一指标(MLR 或 RDME)难以全面、准确地评价粉煤灰混凝土的冻融损伤，需要通过 MLR 和 RDME 预测模型对混凝土冻融损伤进行“双指标联合评价”，弥补单一指标低估冻融损伤的缺陷，以便更科学地表征混凝土的冻融损伤。

由于工作量的限制，模型仍存在一定的局限性，主要如下：1) 模型的输入变量未纳入环境温湿度、冻融循环温度、加热–冷却速率等因素，可能影响模型在复杂实际工况下的预测精度；2) 虽然收集了

537 组实验数据，但数据分布可能存在不均衡的问题；3) 尚未建立从冻融性能目标反推粉煤灰混凝土配合比的反分析模型；4) 预测模型聚焦于粉煤灰混凝土在达到规范规定的冻融破坏阈值之前的性能演化。尽管这符合工程设计和耐久性评估的常规需求，但未包含“失效后”的数据，在一定程度上限制了模型对冻融全周期劣化行为的描述。

未来将主要开展如下工作：1) 构建来源更为广泛的数据库；2) 建立基于冻融性能目标的粉煤灰混凝土配合比反分析模型，实现从性能需求到材料组成的逆向设计；3) 尝试引入深度学习算法，利用其更强的高维数据处理和非线性建模能力，进一步提升模型的预测效果；4) 系统性评估模型在不同关键子群(如不同冻融循环阶段、粉煤灰掺量水平及水胶比范围)中的预测稳健性与不确定性，以进一步细化其工程应用边界。

参考文献:

[1] ANDREW R M. Global CO_2 emissions from cement production[J]. Earth Syst Sci Data, 2018, 10(1): 195–217.

[2] 李扬波, 刘爱峰, 李滨田, 等. 冻融循环作用下赤泥基泡沫混凝土强度劣化机理与模型研究[J]. 混凝土, 2025(3): 59–63.
LI Yangbo, LIU Aifeng, LI Bintian, et al. Concrete, 2025(3): 59–63.

[3] 许丽丽, 黄钰程, 阚德明, 等. 不同矿物掺和量对路面混凝力学性能以及耐久性的影响研究[J]. 金属矿山, 2025(5): 303–310.
XU Lili, HUANG Yucheng, KAN Deming, et al. Met Mine, 2025(5): 303–310.

[4] 刘西拉, 唐光普. 现场环境下混凝土冻融耐久性预测方法研究[J]. 岩石力学与工程学报, 2007, 26(12): 2412–2419.
LIU Xila, TANG Guangpu. Chin J Rock Mech Eng, 2007, 26(12): 2412–2419.

[5] 汪尧, 黎圣君, 叶敏, 等. 冻融循环下混凝土细观结构演化及力学损伤特性研究进展[J]. 科学技术与工程, 2023, 23(14): 5853–5874.
WANG Yao, LI Shengjun, YE Min, et al. Sci Technol Eng, 2023, 23(14): 5853–5874.

[6] 苏怀智, 谢威. 寒区水工混凝土冻融损伤及其防控研究进展[J]. 硅酸盐通报, 2021, 40(4): 1053–1071.
SU Huaizhi, XIE Wei. Bull Chin Ceram Soc, 2021, 40(4): 1053–1071.

[7] GUNASEKARA C, LAW D W, SETUNGE S. Long term permeation properties of different fly ash geopolymer concretes[J]. Constr Build Mater, 2016, 124: 352–362.

[8] 梁卓悦, 余波, 蔡盛源, 等. 基于材料成本与碳排放成本最小化的低碳混凝土配合比优化设计方法[J]. 材料导报, 2025, 39(14): 89–94.
LIANG Zhuoyue, YU Bo, CAI Shengyuan, et al. Mater Rep, 2025, 39(14): 89–94.

[9] ŞAHMARAN M, LI V C. Durability properties of micro-cracked ECC containing high volumes fly ash[J]. Cem Concr Res, 2009, 39(11): 1033–1043.

[10] BHAGATH SINGH G V P, DURGA PRASAD V. Environmental impact of concrete containing high volume fly ash and ground granulated blast furnace slag[J]. J Clean Prod, 2024, 448: 141729.

[11] 潘钢华, 秦鸿根, 孙伟, 等. 粉煤灰混凝土冻融破坏机理研究[J]. 建筑材料学报, 2002, 5(1): 37–41.
PAN Ganghua, QIN Honggen, SUN Wei, et al. J Build Mater, 2002, 5(1): 37–41.

[12] ZHANG D S, MAO M J, ZHANG S R, et al. Influence of stress damage and high temperature on the freeze–thaw resistance of concrete with fly ash as fine aggregate[J]. Constr Build Mater, 2019, 229: 116845.

[13] 刘明辉, 王元丰. 冻融循环下粉煤灰混凝土弹性模量损伤预测模型[J]. 土木工程学报, 2011, 44(增刊 1): 66–70.
LIU Minghui, WANG Yuanfeng. China Civ Eng J, 2011, 44(Suppl 1): 66–70.

[14] 霍俊芳, 于乃领, 王婷. 大掺量粉煤灰混凝土冻融损伤模型及剩余寿命预测[J]. 混凝土, 2013(12): 107–109.
HUO Junfang, YU Nailing, WANG Ting. Concrete, 2013(12): 107–109.

[15] DU S, GE Y, SHI X M. Multiphase sphere modeling of high-volume fly ash concrete: Freezing–thawing performance[J]. J Mater Civ Eng, 2021, 33(7): 04021168.

[16] LI Y, LI H W, JIN C Y, et al. The study of effect of carbon nanotubes on the compressive strength of cement-based materials based on machine learning[J]. Constr Build Mater, 2022, 358: 129435.

[17] LUO X, LI Y, LIN H, et al. Research on predicting compressive strength of magnesium silicate hydrate cement based on machine learning[J]. Constr Build Mater, 2023, 406: 133412.

[18] LI Y, JIN K K, LIN H, et al. Analysis and prediction of freeze-thaw resistance of concrete based on machine learning[J]. Mater Today Commun, 2024, 39: 108946.

[19] PAN L, WANG Y F, ZHANG B Q, et al. Intelligent optimization of FAH concrete mix ratio design considering the carbon emission allocation principles of by-products and critical transportation distances[J]. J Clean Prod, 2025, 490: 144656.

[20] 石旭峰, 丁丹婧, 宋慧平, 等. 基于机器学习的粉煤灰基地聚合物混凝土抗压强度预测[J]. 工业建筑, 2025, 55(6): 278–287.
SHI Xufeng, DING Danjing, SONG Huiping, et al. Ind Constr, 2025, 55(6): 278–287.

[21] PAN L, WANG Y F, LI K, et al. Predicting compressive strength of green concrete using hybrid artificial neural network with genetic algorithm[J]. Struct Concr, 2023, 24(2): 1980–1996.

[22] WU X G, ZHENG S Y, FENG Z B, et al. Prediction of the frost resistance of high-performance concrete based on RF-REF: A hybrid prediction approach[J]. Constr Build Mater, 2022, 333: 127132.

[23] 王晓聪. III级粉煤灰不同取代方式对路面混凝土抗冻性的影响[D]. 银川: 宁夏大学, 2020.
WANG Xiaocong. Influence of different replacement methods of grade III fly ash on pavement concrete frost resistance[D]. Yinchuan: Ningxia University, 2020.

[24] 王苏然, 杜曦, 陈有亮, 等. 不同粉煤灰掺量的混凝土抗冻融性能研究[J]. 上海理工大学学报, 2015, 37(5): 493–499.
WANG Suran, DU Xi, CHEN Youliang, et al. J Univ Shanghai Sci Technol, 2015, 37(5): 493–499.

[25] 赵丙芳. 掺加粉煤灰和硅粉混凝土抗冻性能试验研究[D]. 长春: 长春工程学院, 2015.
ZHAO Bingfang. Experimental study on the frost resistance of fly ash and silica fume concrete[D]. Changchun: Changchun Institute of Technology, 2015.

[26] 张志银. 超细粉煤灰再生混凝土力学性能及抗冻性试验研究[D]. 郑州: 华北水利水电大学, 2024.
ZHANG Zhiyin. Experimental study on mechanical properties and frost resistance of superfine fly ash recycled concrete[D]. Zhengzhou: North China University of Water Resources and Electric Power, 2024.

[27] 董敬勋. 持续荷载对粉煤灰混凝土冻融性能的影响[D]. 北京: 北京交通大学, 2011.
DONG Jingxun. Influence of sustained load on freeze-thaw properties of fly ash concrete[D]. Beijing: Beijing Jiaotong University, 2011.

[28] 季晓霞. 大掺量粉煤灰高性能混凝土抗冻性试验研究[J]. 江西建材, 2015(7): 8.
JI Xiaoxia. Jiangxi Build Mater, 2015(7): 8.

[29] 陆建飞. 大掺量粉煤灰混凝土冻融循环作用下的力学性能研究[D]. 杨凌: 西北农林科技大学, 2011.
LU Jianfei. The study about mechanical properties of high volume fly ash concrete under the action of freeze-thaw cycle[D]. Yangling: Northwest A&F University, 2011.

[30] 徐路军. 大掺量粉煤灰混凝土抗冻及冻后自愈合性能的试验研究[D]. 杨凌: 西北农林科技大学, 2010.
XU Lujun. Test studies on frost-resistance and self-healing properties of high volume fly ash concrete[D]. Yangling: Northwest A&F University, 2010.

[31] 高环宇. 大掺量粉煤灰混凝土配合比设计及抗冻性能的研究[D]. 呼和浩特: 内蒙古农业大学, 2009.
GAO Huanyu. Adulterate amounts disheartened fine coal concretes greatly fitting ratio design and the go into resisting to freeze a function[D]. Hohhot: Inner Mongolia Agricultural University, 2009.

[32] 刘振, 张众. 大掺量粉煤灰抗冻混凝土的试验研究[J]. 混凝土, 2014(10): 103–104.
LIU Zhen, ZHANG Zhong. Concrete, 2014(10): 103–104.

[33] 李伟民, 王印, 冯晓阳. 冻融循环作用下不同含气量混凝土抗冻性研究[J]. 河北农业大学学报, 2019, 42(3): 131–135.
LI Weimin, WANG Yin, FENG Xiaoyang. J Hebei Agric Univ, 2019, 42(3): 131–135.

[34] 侯铁军. 粉煤灰掺量对混凝土冻融性质的影响研究[J]. 粉煤灰综合利用, 2019, 33(3): 33–36.
HOU Tiejun. Fly Ash Compr Util, 2019, 33(3): 33–36.

[35] 王俊杰. 粉煤灰和矿渣粉在云南省高速公路工程混凝土中的应用研究[D]. 西安: 西安建筑科技大学, 2019.
WANG Junjie. Fly ash and slag powder application research on concrete of expressway engineering in Yunnan Province[D]. Xi'an: Xi'an University of Architecture and Technology, 2019.

[36] 程云虹, 闫俊, 刘斌, 等. 粉煤灰混凝土抗冻性能试验研究[J]. 低温建筑技术, 2008, 30(1): 1–3.
CHENG Yunhong, YAN Jun, LIU Bin, et al. Low Temp Archit Technol, 2008, 30(1): 1–3.

[37] 胡邦胜. 高寒地区大掺量粉煤灰混凝土的抗冻性能研究[D]. 重庆: 重庆交通大学, 2017.
HU Bangsheng. Study on frost resistance of high volume fly ash concrete in alpine region[D]. Chongqing: Chongqing Jiaotong University, 2017.

[38] 蔡斌. 高寒地区混凝土抗冻性的试验研究[J]. 水泥技术, 2015(6): 31–34.
CAI Bin. Cem Technol, 2015(6): 31–34.

[39] 贾佳. 高性能混凝土抗冻性能研究[D]. 乌鲁木齐: 新疆农业大学, 2015.
JIA Jia. Study on frost resistance of high performance concrete[D]. Urumqi: Xinjiang Agricultural University, 2015.

[40] 秦子鹏, 杜应吉, 田艳. 寒旱区水利工程大掺量粉煤灰混凝土试验研究[J]. 长江科学院院报, 2013, 30(9): 101–105.
QIN Zipeng, DU Yingji, TIAN Yan. J Yangtze River Sci Res Inst, 2013, 30(9): 101–105.

[41] 穆柏林. 寒冷地区碳化与冻融对混凝土桥梁耐久性影响试验研究[D]. 河北: 河北建筑工程学院, 2018.
MU Bolin. Experimental study on the effect of carbonization and freeze-thaw on durability of concrete bridges in cold regions[D]. Hebei: Hebei University of Architecture, 2018.

[42] 中华人民共和国住房和城乡建设部国家市场监督管理总局. GB/T50082—2024 混凝土长期性能和耐久性能试验方法标准[S]. 北京: 中国建筑工业出版社, 2024.

[43] MATIN S S, FARAHZADI L, MAKAREMI S, et al. Variable selection and prediction of uniaxial compressive strength and modulus of elasticity by random forest[J]. Appl Soft Comput, 2018, 70: 980–987.

[44] 刘家锋, 赵巍, 朱海龙, 等. 模式识别[M]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学出版社, 2014.

[45] TIBSHIRANI R. Regression shrinkage and selection *via* the lasso: A retrospective[J]. J R Stat Soc Ser B Stat Methodol, 2011, 73(3): 273–282.

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

[47] CUI T Y, KULASEGARAM S, LI H J. Design automation of sustainable self-compacting concrete containing fly ash *via* data driven performance prediction[J]. J Build Eng, 2024, 87: 108960.

[48] LIU Q F, IQBAL M F, YANG J, et al. Prediction of chloride diffusivity in concrete using artificial neural network: Modelling and performance evaluation[J]. Constr Build Mater, 2021, 268: 121082.

[49] 敖亦乐. 随机森林类算法在地球物理勘探中的相关应用技术研究[D]. 北京: 中国石油大学(北京), 2019.
AO Yile. Research on the application technology of random forest algorithm in geophysical exploration[D]. Shandong, China University of Petroleum (Beijing), 2019.

[50] VAPNIK V N. The Nature of Statistical Learning Theory[M]. New York, NY: Springer New York, 1995

[51] SMOLA A J, SCHÖLKOPF B. A tutorial on support vector regression[J]. Stat Comput, 2004, 14(3): 199–222.

[52] YAN K Z, SHI C J. Prediction of elastic modulus of normal and high strength concrete by support vector machine[J]. Constr Build Mater, 2010, 24(8): 1479–1485.

[53] JALAL M, JALAL H. RETRACTED: Behavior assessment, regression

analysis and support vector machine (SVM) modeling of waste tire rubberized concrete[J]. J Clean Prod, 2020, 273: 122960.

[54] 余睿, 陈飞翔, 范定强, 等. 基于机器学习技术的超高性能混凝土性能预测与精细化设计[J]. 硅酸盐学报, 2025, 53(5): 1165–1176.
YU Rui, CHEN Feixiang, FAN Dingqiang, et al. J Chin Ceram Soc, 2025, 53(5): 1165–1176.

[55] SUN Z, WANG X, HUANG H, et al. Predicting compressive strength of fiber-reinforced coral aggregate concrete: Interpretable optimized XGBoost model and experimental validation[J]. Structures, 2024, 64: 106516.

[56] BEHNOOD A, GOLAFSHANI E M. Predicting the compressive strength of silica fume concrete using hybrid artificial neural network with multi-objective grey wolves[J]. J Clean Prod, 2018, 202: 54–64.

[57] KANDIRI A, MOHAMMADI GOLAFSHANI E, BEHNOOD A. Estimation of the compressive strength of concretes containing ground granulated blast furnace slag using hybridized multi-objective ANN and salp swarm algorithm[J]. Constr Build Mater, 2020, 248: 118676.

[58] LIU D Y, TU Y M, SAS G, et al. Freeze-thaw damage evaluation and model creation for concrete exposed to freeze–thaw cycles at early-age[J]. Constr Build Mater, 2021, 312: 125352.

[59] 陶高梁, 吴小康, 杨秀华, 等. 水泥土的孔隙分布及其对渗透性的影响[J]. 工程地质学报, 2018, 26(5): 1243–1249.
TAO Gaoliang, WU Xiaokang, YANG Xiuhua, et al. J Eng Geol, 2018, 26(5): 1243–1249.

[60] 江晨晖, 吴星春, 胡丹霞. 界面过渡区对混凝土性能的影响及其改善措施[J]. 中国建材科技, 2006, 15(2): 27–30.
JIANG Chenhui, WU Xingchun, HU Danxia. China Build Mater Sci Technol, 2006, 15(2): 27–30.

[61] 董波. 粉煤灰掺量对混凝土抗冻性能的影响规律研究[J]. 粉煤灰综合利用, 2018, 32(3): 47–49.
DONG Bo. Fly Ash Compr Util, 2018, 32(3): 47–49.

[62] 高蕾, 陈拴发. 配合比设计参数对高性能混凝土抗冻性敏感特性的影响[J]. 交通运输工程学报, 2006, 6(4): 27–31.
GAO Lei, CHEN Shuanfa. J Traffic Transp Eng, 2006, 6(4): 27–31.

[63] ANDERSON I, DEWOOLKAR M M. Laboratory freezing-and-thawing durability of fly ash pervious concrete in a simulated field environment[J]. ACI Mater J, 2015, 112 (5): 603–611.

[64] 余本辉, 张皓, 张景娴, 等. 粉煤灰混凝土力学性能及耐久性研究[J]. 土木工程学报, 2023, 12(4): 483–490.
YU Benhui, ZHANG Hao, ZHANG Jingxian, et al. Journal of Civil Engineering，2023, 12(4): 483–490.

[65] 董昊良, 李化建, 杨志强, 等. 混凝土冻融破坏机理及寿命预测方法[J]. 材料导报, 2024, 38(2): 139–149.
DONG Haoliang, LI Huajian, YANG Zhiqiang, et al. Mater Rep, 2024, 38(2): 139–149.

Intelligent Prediction Method for Freeze–Thaw Performance of Fly Ash Concrete

PAN Lei[1,2], *FU Yufang*[1,2], *WANG Yuanfeng*[3]
(1. Research Institute of Highway, Ministry of Transport, Beijing 100088, China; 2. National Field Observation and Research Station of Highway Material Corrosion and Engineering Safety, Beijing Dadushe, Beijing 101103, China;
3. School of Civil Engineering, Beijing Jiaotong University, Beijing 100044, China)

Extended Abstract

Introduction Freeze–thaw (F–T) damage, characterized by microcrack propagation and material degradation caused by repeated water-ice phase transitions, is a critical factor leading to durability degradation of concrete structures in cold regions. Fly ash (FA) as an industrial byproduct is widely used to replace cement, reducing carbon emissions, while enhancing mechanical properties. However, conventional prediction methods for freeze-thaw resistance of fly ash concrete (FAC), which rely on the empirical formulas or simplified mechanical models, often exhibit limitations in efficiency and accuracy. These limitations stem from their inability to capture the complex nonlinear interactions among multifactorial parameters such as material composition, environmental conditions, and loading histories. As modern engineering increasingly demands high-precision durability assessments for infrastructure lifespan prediction, there is an urgent need to develop advanced predictive tools. This study was to propose an artificial intelligence (AI)-based framework to predict F–T resistance (*i.e.*, mass loss rate, MLR; relative dynamic modulus of elasticity, RDME) with high precision and interpretability, addressing a critical deficiency in material design and durability assessment.

Methods A comprehensive database of 537 experimental datasets was constructed, including 14 input variables (*i.e.*, cement content, FA dosage, water-to-binder ratio (W/B), F–T cycles (NFT)). To address the curse of mitigate multicollinearity, a hybrid feature selection strategy combining the Maximum Information Coefficient (MIC) and Lasso regression was implemented. The MIC quantified nonlinear correlations between input variables and target responses (*i.e.*, mass loss rate, MLR, and relative dynamic elastic modulus, RDME), while the Lasso regression performed variable subset selection through L1 regularization. Three machine learning algorithms-Random Forest (RF), Support Vector Regression (SVR), and Extreme Gradient Boosting (XGBoost) were subsequently employed to develop prediction models. Hyperparameter optimization for each algorithm was conducted *via* the Bayesian optimization with 5-fold cross-validation to prevent overfitting. The model performance was rigorously evaluated using multiple metrics, including coefficient of determination (R^2), mean absolute error (MAE), and root mean squared error (RMSE). Furthermore, the SHapley Additive exPlanations (SHAP) values and Partial Dependence Plots (PDP) were utilized to dissect the contribution

hierarchy and nonlinear marginal effects of critical parameters on the FAC freeze–thaw performance, thereby enhancing the model interpretability.

Results and discussion The XGBoost-T model (with feature selection) achieves the a maximum accuracy for MLR (R^2=0.9224) and RDME (R^2=0.9127), outperforming XGBoost model by 9.5% and 4.7%, respectively. The feature selection reduces a mean absolute error (MAE) by 26.1% (MLR) and 62.6% (RDME), proving its necessity. The study also analyzes the contributions and nonlinear effects of key parameters by the Shapley Additive Explanations (SHAP) and Partial Dependence Plots (PDP). The findings indicate that cement content and total binder content increase can reduce MLR and improve RDME, while water-to-binder ratio and freeze–thaw cycles have the opposite effects. The PDP analysis provides recommendations for optimizing FAC mix designs in cold regions, such as a water content range of 130–180 kg/m^3 and a sand content range of 550–700 kg/m^3 for optimal RDME.

Conclusions This research introduced an AI-driven framework for predicting the freeze–thaw resistance of FAC, integrating feature engineering, intelligent optimization, and explainable machine learning. The framework could overcome the limitations of conventional empirical models *via* leveraging data-driven insights and high-dimensional nonlinear modeling. The XGBoost-based prediction model demonstrated state-of-the-art accuracy and robustness, while the PDP-derived parameter sensitivity analysis offered actionable strategies for enhancing FAC durability in cold environments. This study could contribute to the theoretical advancement of FAC durability design and underscore the transformative potential of artificial intelligence in civil engineering materials research. Future work could focus on expanding the database to include emerging cementitious materials and integrating multi-physics simulations for holistic durability assessments.

Keywords fly ash concrete; freeze–thaw cycles; machine learning; performance prediction; feature analysis