第 54 卷第 3 期　　硅 酸 盐 学 报　　Vol. 54，No. 3
2026 年 3 月　　JOURNAL OF THE CHINESE CERAMIC SOCIETY　　March，2026
http://jccsoc.cbpt.cnki.net　　DOI：10.14062/j.issn.0454-5648.20250798

基于生成式优化算法的多流态场景修补砂浆配合比优化设计

李琴飞[1,2]，张　波[1]，郭翔宇[1,2]，王　琳[3,4]，李长姣[3]，侯鹏坤[1,2]，陈　衡[1,2]，程　新[1,2]，杨　波[3,4]

(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，材料科学与工程学院，济南 250022；
3. 济南大学，山东省泛在智能计算重点实验室，济南 250022；4. 泉城实验室，济南 250014)

摘　要：混凝土结构在服役过程中易受环境与荷载作用而产生损伤，亟须开发与应用高性能修补材料。然而，不同施工场景对修补材料的流变性、工作性和力学性能等存在差异化需求，传统配合比优化方法难以兼顾不同流态场景的实际性能需求并实现高效优化。围绕有机改性贝利特硫铝酸盐水泥砂浆体系，提出一种基于变分自编码器的生成式优化算法(VAE-GOA)来解决该挑战。以流动度作为场景约束，以 7 d 抗压、7 d 抗折与 7 d 黏结强度构建加权综合性能作为评估指标，VAE-GOA 利用“多场景锦标赛选择　自适应全局探索　高低流态协同迭代”的优化流程，直接在全局配合比空间中估计并聚焦高性能解的概率分布，同时兼顾探索有潜力的区域以避免陷入局部最优区域。结果表明：VAE-GOA 结合全局探索策略和多轮迭代技术可有效提高发现高潜力配合比的能力，使高流态砂浆综合性能提升约 20%，低流态提升则超过 25%；同时识别出不同流态下的最佳配合比范围，为不同流态场景提供多样化的配合比选择。

关键词：配合比优化设计；多流态场景修补砂浆；生成式优化算法；生成式模型
中图分类号：TU526　　**文献标志码：**A　　**文章编号：**0454–5648(2026)03–0857–11
网络出版时间：2026–02–10

混凝土作为道路、桥梁、港口、机场等现代土木工程中最大宗的建筑材料[1]，受外界荷载、冻融破坏、盐类侵蚀等不利因素影响，混凝土结构表面易出现不同程度的剥蚀病害，导致其服役寿命加速衰减，显著影响安全性[2–3]。目前，聚合物改性砂浆[4]、环氧树脂材料[5]等是混凝土结构修补加固的常用手段。有机改性贝利特硫铝酸盐水泥砂浆凭借其快硬、早强等优势，逐渐开始应用于混凝土结构修补工程领域[6–7]。然而，不同修补场景对修补材料性能要求差异显著：低流态施工场景(如立面或顶面施工)需砂浆保持较低流动度以避免施工时造成流挂，其力学性能更依赖黏结强度，对抗压和抗折要求相对宽松；而高流态场景(如路面施工或大面积浇筑)则要求砂浆具备较高流动性以实现良好的铺展与充填工作性，其力学性能以抗压强度为核心，同时需兼顾抗折与黏结性能，这种需求差异使得单一贝利特硫铝酸盐水泥(HB-CSA)配合比难以同时满足上述多种修补场景的性能需求，因此，开展面向多场景的 HB-CSA 修补材料配合比优化设计具有重要意义。

传统材料优化设计依赖研究人员对水泥组分相互作用的理解，采用经验法、正交法等方法逐步调整配合比等参数来提升性能[8–10]。然而，随着掺合物种类与掺量的增加，传统方法难以解析多掺合物与性能间复杂的耦合关系，进而因依赖实验试错和专家经验导致人力与时间成本较高[11]。近年来，代理优化算法[12]，利用响应曲面、高斯过程、神经网络、XGboost 等模型[13–16]作为代理，从数据中学习规律，对配合比的性能进行预测并结合智能优化算法可有效克服上述挑战，从而实现配合比的自动化设计[11]。

收稿日期：2025–11–01。　修订日期：2025–11–13。
基金项目：国家自然科学基金面上项目(61872419，62072213，52572029)；全国建材行业重大科技攻关“揭榜挂帅”项目(202401JBGS11-01，2023JBGS11-03)；国家自然科学基金区域创新发展联合基金(U22A20126)；山东省自然科学基金重大基础研究项目(ZR2022ZD01)；山东省自然科学基金杰出青年基金项目(ZR2022JQ30)。
第一作者：李琴飞(1984　)，男，博士，副教授；
张　波(1999　)，男，博士研究生。
通信作者：王　琳(1983　)，男，博士，教授。

Received date: 2025–11–01.　**Revised date:** 2025–11–13.
First author: LI Qinfei (1984–), male, Ph.D., Associate Professor.
ZHANG Bo (1999–), male, Doctoral candidate.
E-mail: mse_liqf@ujn.edu.cn; boll_zhang@qq.com
Correspondent author: WANG Lin (1983–), male, Ph.D., Professor.
E-mail: ise_wanglin@ujn.edu.cn

尽管此类方法在加速配合比筛选与降低实验成本方面的有效性已被广泛证实[11]，但其性能预测通常过度倾向于对已知数据区域的内插(interpolation)，而在未知区域的外推(extrapolation)能力相对不足[17]，这种“外推不足”挑战主要表现在以下 2 个方面：1)从建模角度，代理模型难以实现对未知区域性能的准确预测，易将低性能配合比误判为高性能，从而误导优化[18–19]；2)从采样角度，内插倾向使得代理模型所引导的优化往往过度关注已知数据区域，难以主动探索潜在的高性能未知区域[20–21]。因此，为解决上述挑战，探索新的优化范式以推动 HB-CSA 修补材料乃至水泥基材料配合比设计的发展至关重要。

伴随着深度搜索(DeepSeek)、ChatGPT 等生成式大模型取得突破性进展，其底层核心–生成式模型–从建模最优配合比概率分布的角度为解决上述问题提供了全新的优化范式，即生成式优化算法[22](GOAs)。不同于代理优化算法通过预测配合比的性能指导优化，GOAs 的核心在于利用生成式模型逐步估计最优配合比在全局搜索空间中的概率分布。GOAs 通过为有潜力区域分配一定的采样概率以主动探索潜在的高性能区域，在避免陷入局部最优陷阱的同时减轻确定性建模导致误判风险。最近，这类方法已在 DNA 蛋白质序列优化[23–24]、汽油调配调度[25]等任务上获得了有效验证。

本工作选取有机改性贝利特硫铝酸盐水泥砂浆体系，在水泥材料领域率先引入一种先进的基于变分自编码器(VAE)[26]的生成式优化算法(VAE-GOA)，以解决高流态和低流态 2 种场景修补材料的配合比与性能优化问题。以流动度作为区分高、低流态场景的约束，将 7 d 抗压强度、7 d 抗折强度和 7 d 黏结强度作为优化目标，验证自适应探索及多轮迭代优化策略在配合比优化设计中的潜力，并分析不同流态贝利特硫铝酸盐水泥修补材料的最佳配比范围及性能，该方法有望突破传统代理优化方法的窘境，为水泥基材料的配合比优化设计提供全新的优化范式。

1 实验

1.1 原材料

本工作中制备基体砂浆所使用的 P·O 42.5 普通硅酸盐水泥(OPC)由山东山水水泥集团有限公司生产，修补材料用高贝利特硫铝酸盐水泥(HB-CSA)由唐山北极熊建材有限公司生产。辅助胶凝材料超细矿物掺合料(USCMs)由河北邯郸市德煜再生资源利用有限公司生产。OPC、HB-CSA 和 USCMs 的化学成分如表 1 所示。粉体 PC-801 型聚羧酸减水剂由山东浩宇建材科技有限公司生产。保水剂纤维素醚(HPMC)由山东一滕新材料股份有限公司生产。醋酸乙烯酯–乙烯可再分散胶粉 328(后文统称 Wacker 328)由瓦克化学(南京)有限公司生产，6 mm 聚丙烯纤维(PP)则由常州市天怡工程纤维有限公司生产。

表 1 OPC、HB-CSA 和 USCMs 的化学成分分析表

Table 1 Chemical composition analysis of OPC, HB-CSA and USCMs *w*/%

Materials	CaO	MgO	Al_2O_3	SiO_2	Fe_2O_3	TiO_2	SO_3	LOI
OPC	58.87	2.65	5.59	24.95	2.78	0.21	3.12	1.83
HB-CSA	39.56	4.78	18.63	18.64	1.11	0.98	14.93	1.37
USCMs	16.82	4.88	26.60	42.66	2.74	1.10	3.23	1.97

w—Mass fraction.

1.2 实验方法

本工作系统探究了贝利特硫铝酸盐水泥砂浆的流动度(GB/T 2419—2024《水泥胶砂流动度测定方法》)、7 d 抗压与抗折强度(GB/T 17671—2021《水泥胶砂强度检验方法》)和 7 d 黏接强度(JTG E30—2005《公路工程水泥及水泥混凝土试验规程》)等 4 种宏观性能。为观察试样的黏结界面，对样品喷金后使用扫描电子显微镜(HITACHI Regulus 8100)选择背散射模式在高真空环境下进行扫描，加速电压选择 10.00 kV，工作距离为 7.8 mm。

1.3 高流态及低流态场景

低流态场景(如立面或顶面施工)通常需要良好的初黏与贴附性以实现立面黏贴修补，因此，在力学性能需求方面更依赖界面黏结强度，对抗压和抗折要求相对宽松；而高流态场景(如路面施工或大面积浇筑)的力学性能则以抗压强度为核心，以满足早期开通与长期承载的双重需求，同时需兼顾抗折与黏结性能。作为工程施工时高低流态场景最具差异的工作性指标，考虑到低流态场景须保持较低流动度以避免流挂与泌水，结合工程经验将其区间设定为 16~19 cm；而高流态场景则要求砂浆具备较高流动性与自密实能力，以充分铺展与充填复杂孔隙与不规则凹陷，但过高流动度会导致离析、泌水加剧与界面稀释等问题，因此将高流态区间设定为

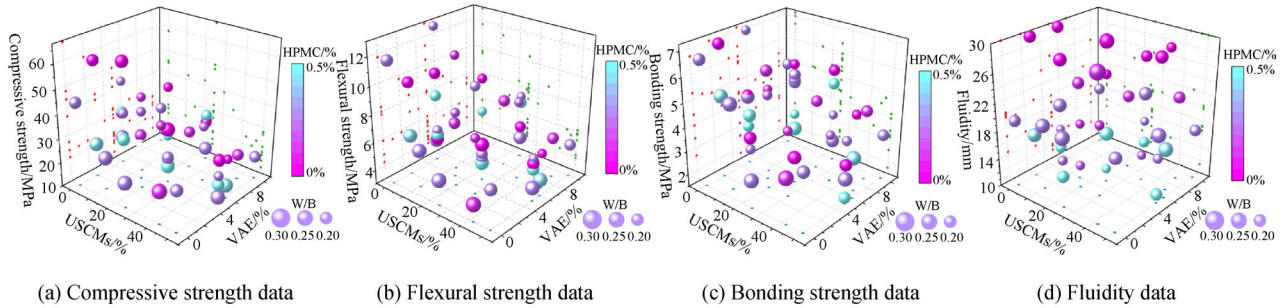
21~27 cm。

1.4　初始数据

初始数据集共 40 组，其中，27 组通过响应面法获得，13 组采用拉丁超立方采样法获取。图 1 呈现了该 40 组初始配合比数据及其对应的性能。由图 1 可见，由于数据集的性能水平较为有限：抗压强度超过 50 MPa 的配合比仅占 5 %(即 2 组)；黏结强度超过 6 MPa 的配合比仅占 10 %(即 4 组)；大多数配合比无法在满足不同流态场景流动度要求的同时兼顾该场景对多项力学性能的需求。例如，在符合低流态流动度要求的配合比中，没有 1 组能够达到 6 MPa 的黏结强度，难以满足低流态工况下对黏结强度的基本要求。由此可见，现有数据的整体性能不足且可应用场景有限，难以为不同修补场景提供有效支持。

1.5　成本计算

以修补材料配合比中 1 kg 混合料(不含拌合水)为计量基准，成本为各组分单价与其用量的乘积之和，其中：HB-CSA 单价为 1.04 ￥/kg；USCMs 的单价为 0.12 ￥/kg；Wacker 328 单价为 4.80 ￥/kg；HPMC 单价为 28.00 ￥/kg。每使用 1%质量分数的 USCMs 替代 HB-CSA 时，修补材料成本降低约 0.89%。



(a) Compressive strength data　(b) Flexural strength data　(c) Bonding strength data　(d) Fluidity data

图 1　初始配合比及其 7 d 抗压强度、7 d 抗折强度、7 d 黏结强度与流动度

Fig. 1　Initial mixtures and 7-d compressive strengths, 7-d flexural strengths, 7-d bond strengths, and fluidity

2　问题定义及算法介绍

2.1　配合比优化问题定义

为统一描述本研究所涉及的不同流态场景，本节从数学角度对单一流态场景下的配合比优化问题进行形式化定义：

$$\begin{aligned}&\underset{x}{\mathrm{Argmax}}\left(\sum_{i=1}^{3}w_i f_i(x)-p\right)\\&s.t.\ a\leqslant f_4(x)\leqslant b\end{aligned}\tag{1}$$

式中：x 为优化变量，即配合比，选择 USCMs、Wacker 328、HPMC 和水灰比 4 个变量，其中，USCMs 作为水泥替代材料，掺量范围为 0~50%，Wacker 328 和 HPMC 作为外加剂分别占整体质量的 0~10%和 0~0.5%，水灰比范围则限定为 0.2~0.3；$(\sum_{i=1}^{3}w_i f_i(x)-p)$定义为加权综合性能，为反应配合比的综合性能指标。$f_1(x)$、$f_2(x)$、$f_3(x)$ 分别为配合比 x 的抗压、抗折和黏结强度；w_1、w_2、w_3 分别为特定场景对 3 种性能需求的重要性权重，该权重直接决定了所优化配合比的水泥性能的偏向与权衡，权重越大，该性能提升对目标函数的边际收益越高，优化过程将优先沿该指标方向搜索(必要时在其他指标上做出权衡)。根据施工经验，仅关注 2 种特定权重的修补场景：权重比例为 0.5 : 0.3 : 0.2 的高流态场景和权重比例为 0.1 : 0.1 : 0.8 的低流态场景；b 为流动度约束范围，不同流态约束范围详见内容 1.3；p 为惩罚项，惩罚流动度 $f_4(x)$ 不符合规定流动度范围的配合比，以迫使算法朝着符合流动度约束(无惩罚)的方向搜索，其形式化定义为 $p=2\times\max\{a-f_4(x),\ 0,\ f_4(x)-b\}$。优化目标为获取特定场景下最大化综合性能的配合比 x。

2.2　基于变分自编码器的生成式优化算法

GOAs 是一类新型的基于生成式模型的分布估计式黑盒优化算法，其核心是利用生成式模型的通用分布学习能力，逐步估计全局搜索空间中每个解是全局最优解的概率分布，并以此分布为指导搜索[21]。

图 2 为 VAE-GOA 优化流程。由图 2 可见，利用变分自编码器作为核心生成式模型对最优配合比的分布建模，同时使用锦标赛选择、自适应全局探索和迭代优化策略可主动发现更优的配合比区域。

2.2.1　变分自编码器　　VAE 通过编码器和解码器协同训练来学习最优配合比 x 的概率分布。其中，

编码器将输入配合比 x 映射为潜空间中的概率分布[通常为均值 μ 和标准差 σ 表示的正态分布 $N(\mu,\sigma)$]。随后从该分布采样得到潜向量 z，并输入解码器以重建出原始输入 x。

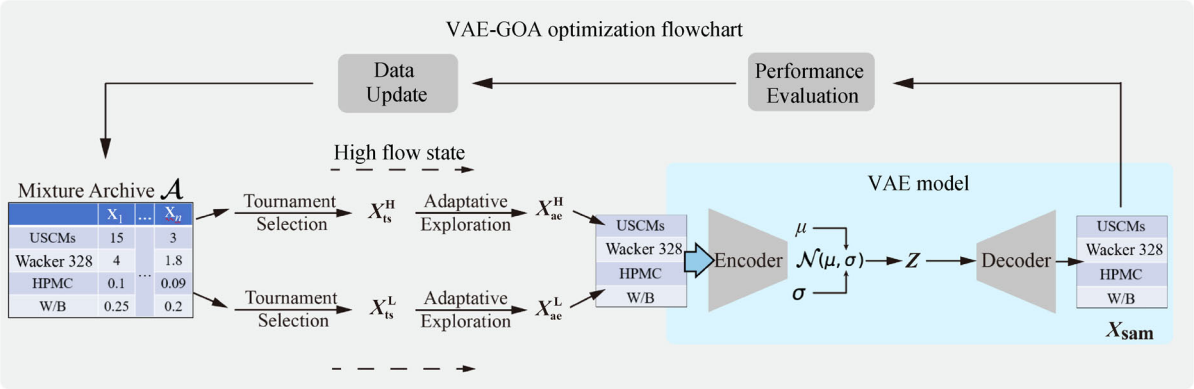


图 2 VAE-GOA 优化流程

Fig. 2 Optimization Flowchart of VAE-GOA

为训练编码器和解码器的参数 θ 和 ϕ 以学习目标数据分布，目标函数被定义为：

$$\mathcal{L}(\theta,\phi;x)=-\mathbb{E}_{q_\phi(z|x)}\left[\lg p_\theta(x|z)\right]+\beta\mathrm{KL}\left(q_\phi(z|x)\|\,p(z)\right) \tag{2}$$

式中：第 1 项为重构损失，度量输入配合比 x 与重构配合比 $\hat{x}$ 之间的差值；第 2 项是正则项，利用 KL 散度量化后验分布 $N(\mu,\sigma)$ 和先验分布 $p(z)$ 之间的散度；超参数 β 控制重构损失和正则项之间的平衡。通过最小化该损失，VAE 可以学习目标问题的最优配合比分布。

2.2.2 多场景锦标赛选择 为引导算法主动聚焦于潜在最优区域并加快收敛，采用多场景锦标赛选择方法为最优配合比赋予更大选择权重。在形式化定义中，设定锦标赛规模为 k，每次从配合比库中随机无放回地随机抽取 k 个配合比，计算其在 2 种场景中的加权综合性能，并分别进行比较选择最优者。重复该过程，直到为多种场景收集到足够配合比 x。

2.2.3 自适应全局探索策略 为主动探索优化空间中具有高性能潜力的区域，本工作引入了一种自适应高斯全局探索策略，通过探索高性能配合比 x 的局部区域，从而将搜索扩展到其邻近甚至全局的高性能区域。其定义如下：

$$x_{ae}\sim N(x,\sigma_s^2\cdot I) \tag{3}$$

式中：σ_s 作为标准差，控制围绕配合比 x 的局部探索范围。较大的 σ_s 有助于实现全局搜索但难以精细挖掘高性能区域；较小的 σ_s 有利于局部精细搜索，却容易陷入局部最优。为实现探索范围的自适应调整，引入累积步长适应机制[27]，其定义如下：

$$\begin{aligned}P_{t+1}&=(1-c)\cdot P_t+\sqrt{c\cdot(2-c)}\cdot\frac{(m_{t+1}-m_t)}{\sigma_s}\\ \sigma_{s+1}&=\sigma_s\cdot\exp\left(\frac{c_\sigma}{d_\sigma}\cdot\left(\frac{\|P_{t+1}\|}{\|\mathcal{N}(0,I)\|}-1\right)\right)\end{aligned} \tag{4}$$

式中：c、c_σ 为平衡系数；d_σ 为阻尼系数；P_t 和 m_t 分别为第 t 代采样 x 的进化路径和均值向量。该机制根据历史采样的配合比 x 及其对应的性能动态调整搜索尺度 σ_s，鼓励跨问题结构和搜索尺度的自适应平衡探索。

2.2.4 高低流态协同的迭代优化策略 图 2 为 VAE-GOA 用于解决多场景配合比优化问题的协同迭代优化策略框架。由图 2 可见，首先基于历史配合比库，根据高、低流态场景的加权综合性能，利用多场景锦标赛为不同场景分别选择具有潜力的配合比集 X_{ts}，随后使用自适应探索策略分别构造训练集 X_{ae}。通过 2 种流态的训练集 X_{ae} 来训练 VAE 模型，使其学习到不同流态具有性能潜力配合比的信息。训练完成后，重复上述锦标赛并选择自适应探索流程以获取与采样数相同数量的 X_{ae} (包含重复)，并作为流态条件输入至 VAE 模型，通过“编码–潜向量采样–解码”的程序以生成新的配合比 X_{sam}。随后对新采样的配合比 X_{sam} 的性能进行实验评估，并更新历史配合比库。通过重复迭代上述整个过程，以实现高低流态的协同迭代优化。

本工作所使用算法超参数设置如下：2 种流态场景下，每次迭代优化共计采样 18 次；锦标赛选择的 k 值为当前配合比总数的 25%，初始 σ_s 为 1.5，

平衡系数 c 和 c_σ 分别设置为 0.51 和 0.25，d_σ 为 2.5；VAE 模型的 β 设置为 0.05，编码器与解码器均使用 2 层 256 个神经元的多层感知机和 LeakRelu 激活函数，批大小为 128，学习率为 $2e^{-4}$，并使用 AdamW 优化器训练，每代训练 1000 次。为确保恰当的引用和长期维护，完整的代码见 https://github.com/marcoboll/CementMixtureOptimization。

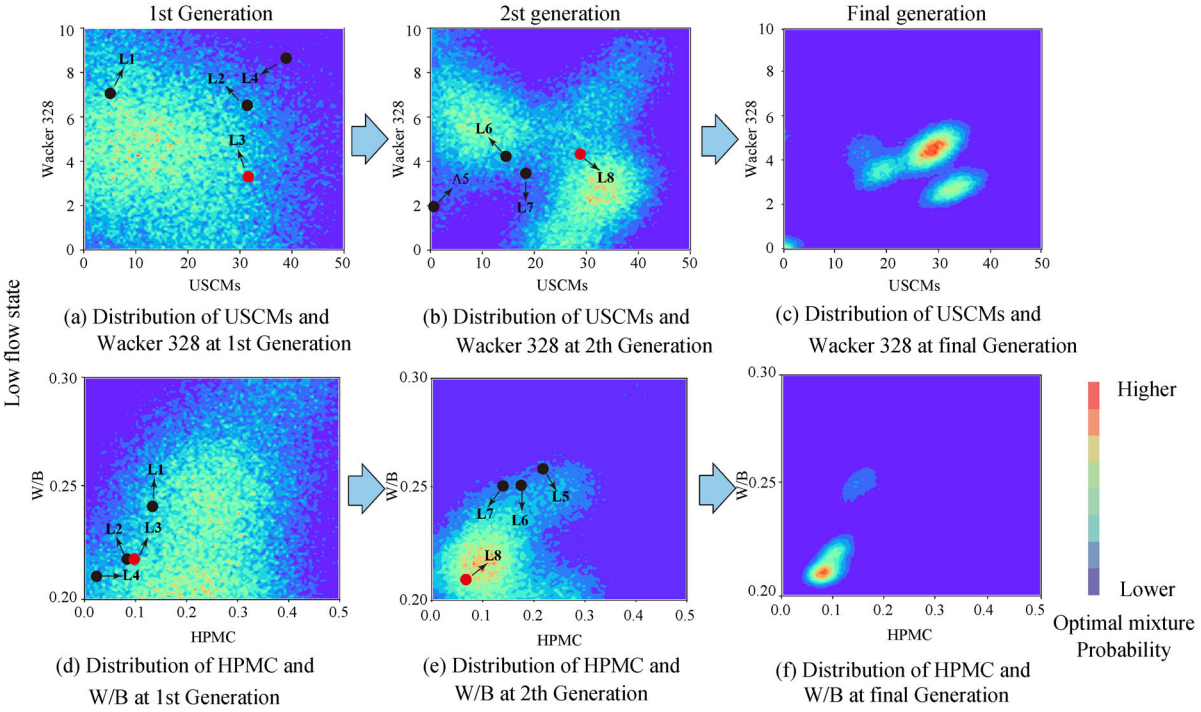
3　结果与讨论

为了直观呈现 VAE-GOA 的算法特性及优化结果，本节将从优化过程可视化、2 轮迭代优化结果、最优配合比范围、优化性能提升等 4 个方面进行分析。

3.1　VAE-GOA 优化过程可视化分析

图 3 和图 4 分别可视化了 VAE-GOA 在低流态和高流态场景估计的最优配合比分布随迭代过程的演化趋势。其中：图 3a、图 3d 为第一代优化的分布结果，图 3b、图 3e 为第二代优化结果，图 3c 和图 3f 为最终估计的最优配合比分布结果。每张图绘制方法为：将配合比空间均匀划分为 10 000 个网格，遵循 2.2.4 节内的采样流程，每轮迭代从 VAE-GOA 算法中随机采样 100 000 个配合比，统计所有配合比在各网格中的分布密度，并利用 Python 的 contourf 函数绘制热图[21]。鉴于四维空间的复杂性难以在单一图像中直观表达，本节选取 2 张二维切片图以揭示 4 个变量之间的分布关联关系：图 3a、图 3b、图 3c 所示 USCMs 与 Wacker 328 的联合分布，图 3d、图 3e、图 3f 则展示 HPMC 与 W/B 的联合分布。

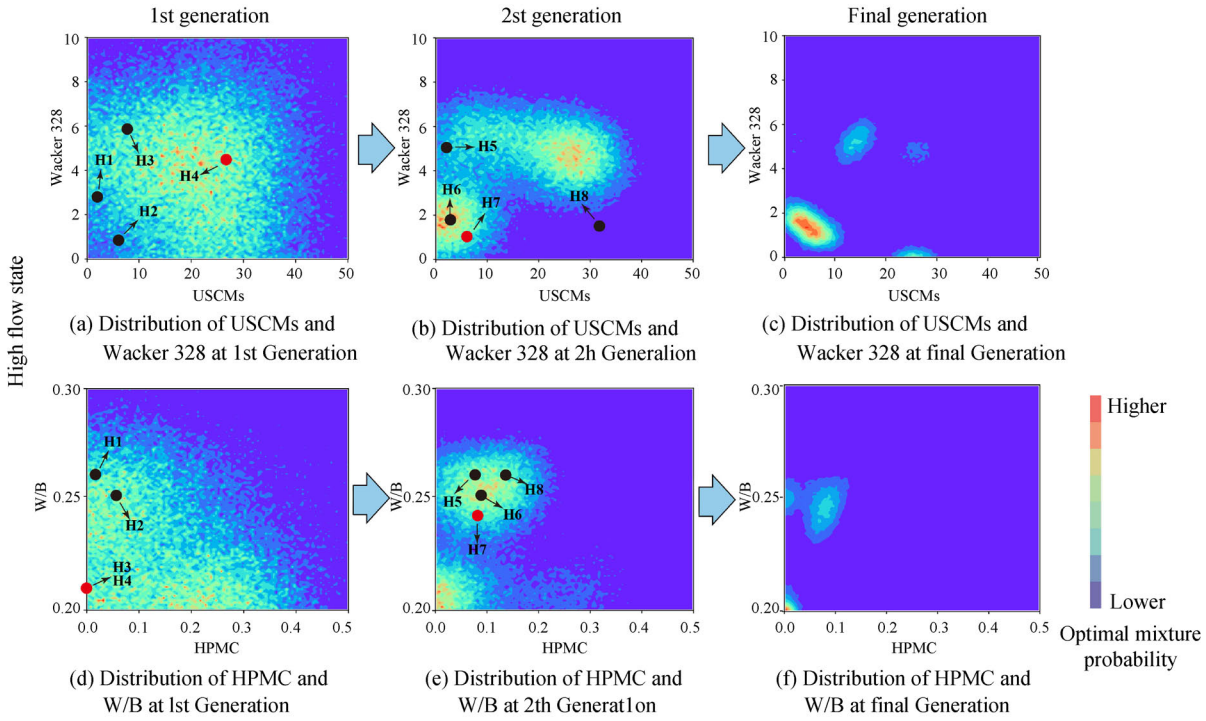
为呈现 VAE-GOA 的迭代优化特性，本节以低流态场景(图 3)为例进行阐述。凭借全局探索能力，VAE-GOA 在第一代优化(图 3a、图 3d)中实现了较为广泛的采样分布，尽管这一策略使得 VAE-GOA 将部分注意力集中于 L1、L2、L4 所在的性能较差区域(性能见图 5)，但有助于新探索到如 L3 的高性能潜力区域，这种探索策略有助于主动跳出初始数据所在的局部最优区域，避免陷入局部最优的陷阱。图 3b、图 3e 展示了第二代优化结果，相比于第一代，VAE-GOA 在此过程中表现出由全局探索向局部挖掘的过渡特征，通过逐步减少对低性能区域的关注，采样分布逐渐向高性能区域收敛，并挖掘到更优的配合比 L8(性能见图 6)。最终经过 2 轮迭代后(图 4c、图 4f)，VAE-GOA 最优配合比分布收敛到局部区域，可为低流态修补砂浆的配合比设计提供有效的参考范围。



Red point indicates the optimal mixture sampled in each generation.

图 3　低流态场景 VAE-GOA 估计的最优配合比分布图

Fig. 3　Optimal distribution of mixture estimated by VAE-GOA in the low-flow state scenario



Red point indicates the optimal mixture sampled in each generation.

图 4 高流态场景 VAE-GOA 估计的最优配合比分布图

Fig. 4 Optimal distribution of mixture estimated by VAE-GOA in the high-flow state scenario

3.2 第一代优化结果

VAE-GOA 第一代优化所得部分配合比及其实测性能分别见表 2 和图 5，图 3 及图 4a、图 4d 则为相应配合比的位置分布。与初始数据相比，低流态最佳配合比(L3)和高流态最佳配合比(H2)较最佳初始配合比的加权综合性能提升分别超过 5%和 19%，且配合比呈现高度多样性，表 2 所示数据其流动度都在规定范围内，这确保了良好的施工工作性。在低流态场景中，L1、L2 和 L4 的黏结强度偏低，未能满足低流态的性能要求，这与算法在早期阶段强调全局探索有关。然而，该探索过程也成功发现了性能更优的配合比 L3，其抗压强度达 46.7 MPa，黏结强度达 6.3 MPa，成为本代低流态场景的最优配合比；而在高流态场景下，H1~H4 在符合高流动度的前提下，抗压强度均超过 40 MPa，且黏结强度稳定在 5 MPa 以上。其中：H2 的抗压强度最高，达 54.5 MPa；H4 不仅抗压强度超过 50 MPa，黏结强度亦达到 6.6 MPa。H4、L2~L4 的 USCMs 掺量均在 30%左右，在保证性能的同时降低约 27%的生产成本。

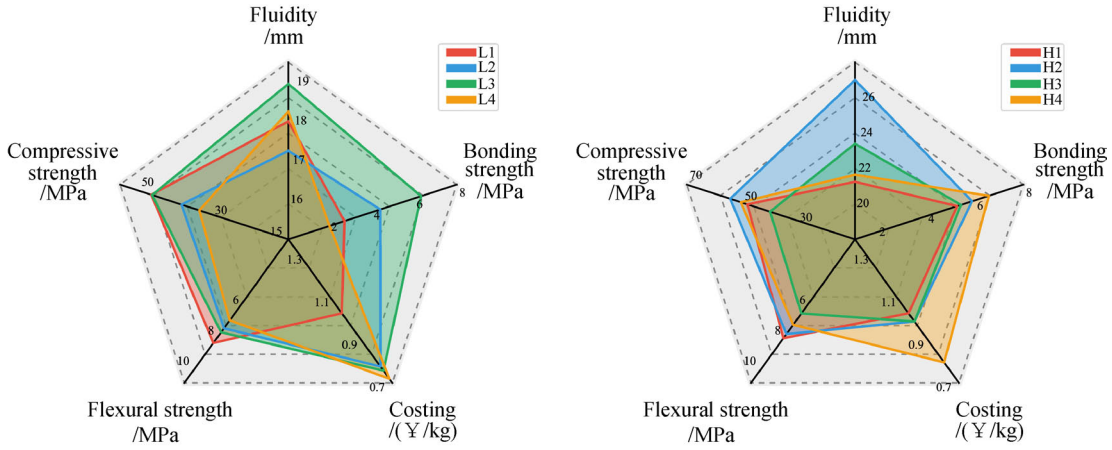
表 2 第一代优化的部分配合比

Table 2 Selected mixtures of the first-generation optimization

Flow Scenario	Index	USCMs	Wacker 328	HPMC	W/B
Low flow state	L1	4.17	7.04	0.13	0.24
	L2	32.1	6.43	0.09	0.22
	L3	32.51	2.67	0.1	0.22
	L4	39.27	8.48	0.01	0.21
High flow state	H1	1.21	1.63	0.14	0.26
	H2	5.46	1.45	0.05	0.25
	H3	7.21	5.91	0	0.21
	H4	28.44	4.29	0	0.21

3.3 第二代优化结果

表 3 和图 6 为 VAE-GOA 第二代优化的部分配合比及其实测性能表现，其相应配合比的位置分布则由图 3 及图 4b、图 4e 可视化。与第一代最优结果相比，第二代低流态最佳配合比(L8)的加权综合性能提升接近 14.2 %；而高流态最佳配合比(H7)的提升约 5 %。图 6 结果显示本轮优化的配合比在确保良好的施工工作性的同时具有较高的综合力学性能。在低流态场景中，L5~L8 在符合低流动度的前提下，抗压强度均超过 40 MPa，且 L6~L8 的黏结强度均高于 6 MPa，其中，L7 黏结强度达到 6.7 MPa，而 L8 抗压强度和抗折强度分别达到 48.6 MPa 和 9.2 MPa，且黏结强度超过 6.5 MPa，综合性能优



(a) Performance of low-flow state scenario at lst generation　　(b) Performance of high-flow state scenario at 1st generation

图 5　第一代优化的部分配合比多种性能实测结果

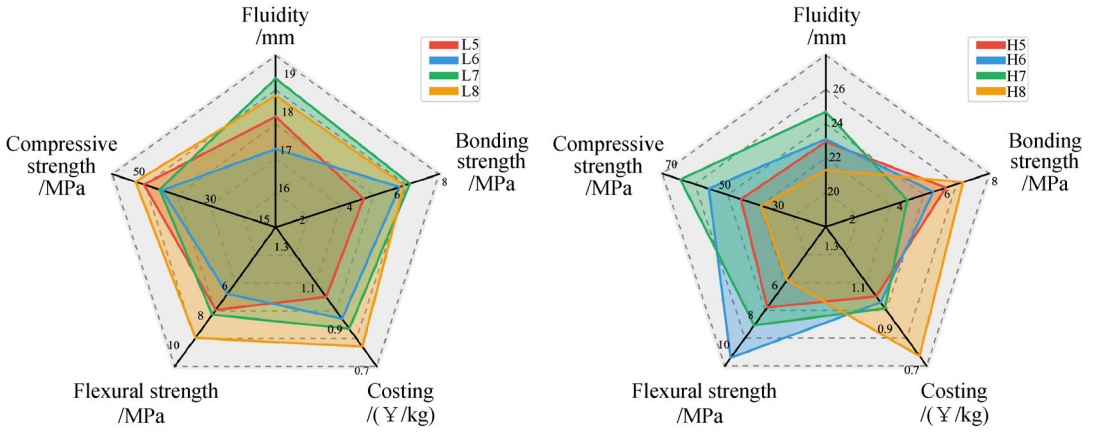
Fig. 5　Experimental results of multiple performance for selected mixtures of the first-generation optimization

表 3　第二代优化的部分配合比

Table 3　Selected mixtures of the second-generation optimization

Flow scenario	Index	USCMs	Wacker 328	HPMC	W/B
Low flow state	L5	0.82	1.94	0.22	0.26
	L6	14.14	4.33	0.19	0.25
	L7	18.00	3.39	0.14	0.25
	L8	28.85	4.46	0.07	0.21
High flow state	H5	2.24	5.02	0.06	0.26
	H6	3.01	1.81	0.09	0.25
	H7	6.19	1.00	0.07	0.24
	H8	33.09	1.65	0.14	0.26

异，完全符合低流态场景性能要求，且 USCMs 的使用降低了约 26 %的生产成本，L8 与 H4 配合比接近，但二者流动度差异较大，这主要是由于 L8 中少量 HPMC 的保水增稠作用导致的[28]；在高流态场景中，配合比的多种性能呈现出高度多样性，可为不同场景提供更灵活的选择。其中：H6 的抗压强度达到 53 MPa，抗折强度超过 10 MPa，黏结强度为 5.6 MPa，展现了良好的综合性能；H7 则呈现最高的抗压强度，达到 63.4 MPa；H8 与 H1 使用的 USCMs、HPMC 和水灰比掺量基本一致，而 USCMs 的用量增加超过 30%，这使得 H8 的抗压强度相较 H1 下降 14.7 MPa，但黏结强度提升至 6.9 MPa，呈现出最佳黏结性能，且成本降低约 30%。



(a) Performance of low-flow state scenario at 2st generation　　(b) Performance of high-flow state scenario at 2st generation

图 6　第二代优化的部分配合比多种性能实测结果

Fig. 6　Experimental results of multiple performance for selected mixtures of the second-generation optimization

为探究 H8 黏结强度高的原因，将其作为优化组，并选取与 H8 相同水灰比，而 USCMs、Wacker 328 和 HPMC 均为 0 %的配合比作为空白对照组，进行背散射电子显微镜实验，定性分析 2 组修补材料与旧 OPC 基体的界面结构。

图 7 为对应的界面特征：在对照组中，修补材料与旧 OPC 基体的黏结界面存在大量孔隙和明显裂缝，界面过渡区(ITZ)结构松散；而在 VAE-GOA 优化后的 H8 组中，ITZ 区域孔隙明显减少，结构更加致密。这归因于 H8 中 USCMs 的孔隙填充作用增强了界面结合力[29]；此外，Wacker 328 在水泥浆体中再分散形成网膜结构，进一步改善了界面致密性从而提高了材料的黏结性能[30]。综上所述，该定性 ITZ 孔隙分析在一定程度上支撑了微结构致密使得宏观黏结增强的结论。

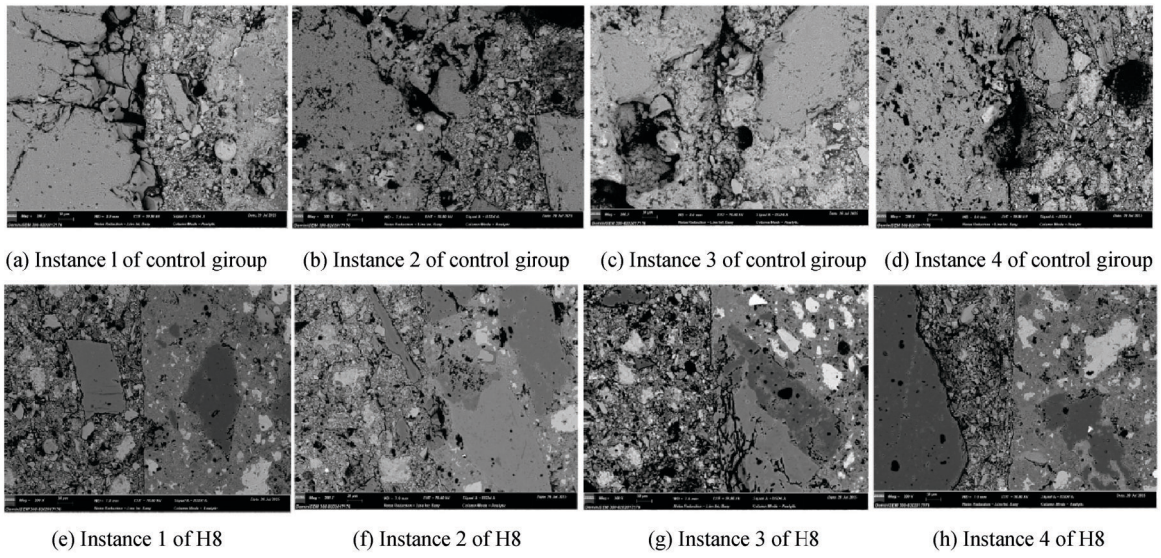


图 7 黏结界面背散射图像

Fig. 7 Backscattered electron (BSE) images of the bonding interface

3.4 最佳配合比范围分析

VAE-GOA 最终估计的高性能配合比分布(图 3 和图 4c、图 4f)为确定最佳配合比范围提供了参考。优化结果表明，在低流态场景中，随着 USCMs 含量增加，HPMC 掺量呈现非线性下降趋势，且较高的 USCMs 常需要低水灰比。约 15%~30%的 USCMs、2%~6%的 Wacker 328 与约 0.1%的 HPMC 结合 0.22 左右的水灰比，可兼具低流动性和较高黏结性能。Wacker 328 含量增加通常会对力学性能产生不利影响，这主要是因为其提高了砂浆的孔隙率和平均孔径[30]。在高流态场景中，由于 HPMC 具有保水增稠作用[28]，当其掺量控制在 0.1%以下时，有利于维持较高流动度。约 5%的 USCMs 与 1%的 Wacker 328 配合 0.25 的水灰比具有最佳性能；当 USCMs 掺量提升至 15%或 30%时，配合 5%的 Wacker 328 与的 0.2 水灰比，兼具低成本和较高力学性能。使用 15%~30%的 USCMs 替代 HB-CSA 不仅有助于调控流动度，改善黏结性能，还可降低 13%~27%的生产成本。VAE-GOA 优化得到的高性能配合比范围呈现出高度多样性，可为不同流态场景下的修补材料设计提供灵活选择。

3.5 迭代优化性能提升分析

多轮迭代优化能够为配合比设计带来持续的性能增益。然而考虑到经过 2 轮迭代优化后，高、低流态组的最优配合比性能均已满足各自场景需求，因此，本工作在优化 2 轮后停止迭代。

图 8 为 2 组在各轮迭代中最优配合比加权综合性能的变化趋势。由图 8 可见，即便仅经过 2 轮迭代优化，高流态组的最佳加权综合性能较初始数据提升约 20%，而低流态组的提升幅度则超过 25%。进一步对比，在 VAE-GOA 优化得到的配合比中，抗压强度超过 50 MPa 的配合比达到 6 组，是初始数据对应数量的 3 倍；黏结强度超过 6 MPa 的配合比则达到 12 组，同样较初始数据增加至原来的 3 倍。VAE-GOA 优化的配合比具有高度多样性，从而显著拓展了满足关键性能指标的可行配合比空间，为不同流态场景提供更灵活的选择。

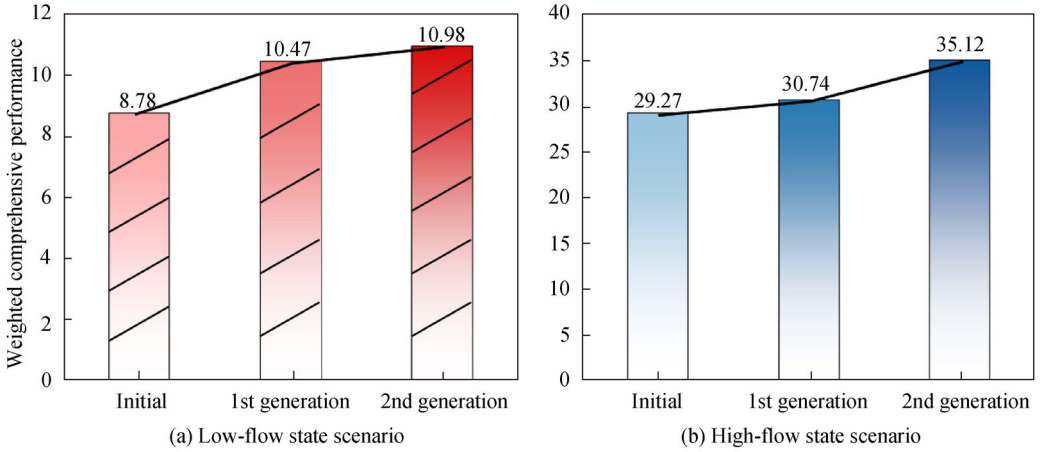


图 8　符合流动度要求的最优组加权综合性能的变化趋势

Fig. 8　Evolution of the weighted comprehensive performance of the optimal groups meeting the fluidity requirements during optimization

4　结论

1)　从宏观角度出发，VAE-GOAs 使用自适应探索策略，使高流态组加权综合性能提升约 20%，低流态组提升超过 25%，相比单轮优化，基于多轮迭代的流程更能实现持续的宏观性能增益；从微观结构来看，黏结性能的增强归因于新旧界面过渡区孔隙率显著降低、结构明显致密化。

2)　在高流态场景中，最佳配合比为约 6% USCMs、1% Wacker 328 和水灰比 0.24，此时抗压、抗折和黏结强度分别达到 63.4 MPa、8.3 MPa 和 4.5 MPa。当 USCMs 掺量提升至 28%、Wacker 328 约 4%、水灰比降至 0.20、HPMC 为 0%时，抗压、抗折和黏结强度分别达到 50.7 MPa、7.4 MPa 和 6.6 MPa，同时相比纯水泥组，生产成本降低约 25 %。

3)　在低流态场景中，较高比例的 USCMs (15%~30%)与少量 HPMC(约 0.1%)以及适中的水灰比(0.22~0.25)有助于在维持适宜流动度的同时保持较高黏结强度。18% USCMs、3% Wacker 328、0.14% HPMC 和 0.25 水灰比，可实现最佳黏结强度 6.8 MPa。

4)　未来展望：本工作以流动度作为工作性约束，以抗压、抗折、黏结强度等多种力学性能作为加权优化目标，已实现多场景修补砂浆良好工作性与力学性能兼顾的阶段性任务。未来的目标将专注于耐久与体积稳定(干缩率、抗冻、抗盐侵、耐久)等关键性能指标优化，并围绕关键机理进行验证：聚焦“OTZ/ITZ 致密化–孔隙结构调–离子/水分迁移抑制–界面相组成优化”这一链条，阐明多性能协同提升的内在机制，从而支撑多场景的复杂应用。

参考文献:

[1] BIERNACKI J J, BULLARD J W, SANT G, et al. Cements in the 21st century: Challenges, perspectives, and opportunities[J]. J Am Ceram Soc, 2017, 100(7): 2746–2773.

[2] SONG F C, LI Q H, HONG C K, et al. Overlay transition zone in concrete repair: Insights into microstructural evolution and micromechanical properties[J]. Cem Concr Res, 2025, 193: 107868.

[3] ZARZUELA R, LUNA M, CARRASCOSA L M, et al. Producing C-S-H gel by reaction between silica oligomers and portlandite: A promising approach to repair cementitious materials[J]. Cem Concr Res, 2020, 130: 106008.

[4] 刘浩研, 刘聪. 纤维素醚和乳胶粉对水泥基材料的改性及对性能的影响试验[J]. 中国胶粘剂, 2025, 34(7): 57–62.
LIU Haoyan, LIU Cong. China Adhes, 2025, 34(7): 57–62.

[5] QIAN J S, YOU C, WANG Q Z, et al. A method for assessing bond performance of cement-based repair materials[J]. Constr Build Mater, 2014, 68: 307–313.

[6] 杜鹏, 贾斐涵, 卢晓磊, 等. 利用固体废弃物煅烧硫铝酸盐水泥熟料研究进展[J]. 硅酸盐学报, 2022, 50(2): 340–353.
DU Peng, JIA Feihan, LU Xiaolei, et al. J Chin Ceram Soc, 2022, 50(2): 340–353.

[7] YANG F Z, TCHEKWAGEP J J K, WANG S D, et al. The effect of extensive heat exposure on the mechanical properties of polymer-modified sulfoaluminate cement repair mortar[J]. Case Stud Constr Mater, 2024, 20: e03348.

[8] 郭向阳, 芦令超, 王守德, 等. 钡掺杂对高阿利特硅酸盐水泥熟料组成与性能的影响[J]. 硅酸盐学报, 2009, 37(12): 2083–2089.
GUO Xiangyang, LU Lingchao, WANG Shoude, et al. J Chin Ceram Soc, 2009, 37(12): 2083–2089.

[9] FENG L, CHEN X Q, WEN X D, et al. Investigating and optimizing the mix proportion of sustainable phosphate-based rapid repairing material[J]. Constr Build Mater, 2019, 204: 550–561.

[10] CHAI L J, YUE Z H, GUO L P, et al. Performance optimization design of high ductility concrete rapid repair material incorporating coal gangue aggregate[J]. Constr Build Mater, 2024, 446: 138044.

[11] 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.

[12] LING C Y, KUO W, XIE M. An overview of adaptive-surrogate-model-assisted methods for reliability-based design optimization[J]. IEEE Trans Reliab, 2023, 72(3): 1243–1264.
[13] 郑伟鹏, 黄建国, 宋奔, 等. 多元矿物材料对水泥性能影响的数学模型及多目标优化方法[J]. 硅酸盐学报, 2024, 52(9): 3036–3046.
ZHENG Weipeng, HUANG Jianguo, SONG Ben, et al. J Chin Ceram Soc, 2024, 52(9): 3036–3046.
[14] PARK K B, NOGUCHI T, PLAWSKY J. Modeling of hydration reactions using neural networks to predict the average properties of cement paste[J]. Cem Concr Res, 2005, 35(9): 1676–1684.
[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] 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.
[17] LIAO W J, YUAN R H, XUE X Y, et al. Unsupervised learning-aided extrapolation for accelerated design of superalloys[J]. NPJ Comput Mater, 2024, 10: 171.
[18] KUMAR A, LEVINE S. Model inversion networks for model-based optimization[C]//Advances in neural information processing systems, online, 2020, 33: 5126–5137.
[19] LU M F, NING S, LIU S R, et al. OPT-GAN: A broad-spectrum global optimizer for black-box problems by learning distribution[J]. Proc AAAI Conf Artif Intell, 2023, 37(10): 12462–12472.
[20] LEE J, PARK J, YUN S J, et al. Guided trajectory generation with diffusion models for offline model-based optimization[C]//Advances in Neural Information Processing Systems 37. Vancouver, BC, Canada, 2024: 83847–83876.
[21] KRISHNAMOORTHY S, MASHKARIA S M, Grover A. Diffusion models for black-box optimization[C]//International Conference on Machine Learning, Honolulu, America, 2023: 17842–17857.
[22] HE C, HUANG S H, CHENG R, et al. Evolutionary multiobjective optimization driven by generative adversarial networks (GANs)[J]. IEEE Trans Cybern, 2021, 51(6): 3129–3142.
[23] GUPTA A, ZOU J. Feedback GAN for DNA optimizes protein functions[J]. Nat Mach Intell, 2019, 1: 105–111.
[24] BROOKES D, PARK H, Listgarten J. Conditioning by adaptive sampling for robust design[C]//International conference on machine learning, Long Beach, America, 2019: 773–782.
[25] FANG W X, DU W, HE R C, et al. Diffusion model-based multiobjective optimization for gasoline blending scheduling[J]. IEEE Comput Intell Mag, 2024, 19(2): 61–76.
[26] KINGMA D P, WELLING M. Auto-encoding variational bayes[C]//International Conference on Learning Representations, Banff, Canada, 2014.
[27] BEYER H G, HELLWIG M. The dynamics of cumulative step size adaptation on the ellipsoid model[J]. Evol Comput, 2016, 24(1): 25–57.
[28] 王培铭, 赵国荣, 张国防. 纤维素醚在新拌砂浆中保水增稠作用及其机理[J]. 硅酸盐学报, 2017, 45(8): 1190–1196.
WANG Peiming, ZHAO Guorong, ZHANG Guofang. J Chin Ceram Soc, 2017, 45(8): 1190–1196.
[29] 李琴飞, 顾彬彬, 侯鹏坤, 等. 超细矿物掺合料在水泥混凝土中的应用现状[J]. 硅酸盐学报, 2025, 53(8): 2374–2387.
LI Qinfei, GU Binbin, HOU Pengkun, et al. J Chin Ceram Soc, 2025, 53(8): 2374–2387.
[30] WANG H C, ZHU Y X, LI T, et al. Modification mechanism of low-dosage vinyl acetate-ethylene on ordinary Portland cement-sulfoaluminate cement binary blended rapid repair mortar[J]. Polymers, 2025, 17(11): 1501.

Generative Optimization Algorithm-Based Mixture Optimization Design of Repair Mortar Under Multi-Flow State Scenarios

LI Qinfei[1,2], *ZHANG Bo*[1], *GUO Xiangyu*[1,2], *WANG Lin*[3,4], *LI Changjiao*[3], *HOU Pengkun*[1,2], *CHEN Heng*[1,2], *CHENG Xin*[1,2], *YANG Bo*[3,4]

(1. Shandong Provincial Key Laboratory of Green and Intelligent Building Materials, University of Jinan, Jinan 250022, China; 2. School of Materials Science and Engineering, University of Jinan, Jinan 250022, China; 3. Shandong Key Laboratory of Ubiquitous Intelligent Computing, University of Jinan, Jinan 250022, China; 4. Quan Cheng Laboratory, Jinan 250014, China)

Extended Abstract

Introduction As a predominant construction material in modern civil infrastructure (*i.e.*, roads, bridges, ports, and airports), concrete is susceptible to adversing actions such as external loading, freeze–thaw cycling, and salt ingress. These factors readily induce surface spalling and scaling, accelerating service-life deterioration and posing significant safety risks. The existing polymer-modified mortars and epoxy-based systems are commonly employed for the repair and strengthening of concrete structures. An organically modified belite-calcium sulfoaluminate (HB-CSA) cement mortar is adopted in concrete repair projects due to its rapid setting and early strength. However, the performance requirements differ markedly across construction scenarios in low-flow applications (*e.g.*, vertical or overhead placement), the mortar must maintain a low flowability to prevent sagging/run-off during placement, and mechanical performance depends primarily on bond strength, with relatively relaxed demands on compressive and flexural strengths. By contrast, high-flow applications (*e.g.*, pavement repair or large-area casting) require a high flowability to ensure adequate spreading and filling workability. The compressive strength is a principal mechanical target, while the flexural and bond performance must be also satisfied. These divergent demands make it difficult for a single HB-CSA mixture to meet the performance

needs of multiple repair scenarios, underscoring the practical importance of multi-scenario mixture-design optimization for HB-CSA repair mortars.

Methods This study was to investigate an organically modified belite-calcium sulfoaluminate (HB-CSA) cement mortar system. Flow spread was employed as a constraint to distinguish high- and low-flow-state scenarios, while 7-d compressive, 7-d flexural, and 7-d bond strengths were taken as the optimization objectives. To address mixture optimization for both flow states, we introduced (*i.e.*, pioneering its use in the cement materials field) a variational-autoencoder-based generative optimization algorithm (VAE-GOA). The method could leverage a generative model to progressively estimate the probability distribution of optimal mixtures over the global design space. In parallel, an adaptive global-exploration strategy prioritized high-potential regions to mitigate premature convergence to local optima, and an iterative optimization scheme further drived the search toward superior solutions. The approach delineated the optimal composition windows and corresponding performance of HB-CSA repair mortars under different flow-state scenarios *via* visualizing the VAE-GOA–estimated distribution of optimal mixtures. In addition, backscattered electron (BSE) imaging of the interfacial transition zone (ITZ) was also employed to elucidate the mechanisms underlying the improvement in bond performance.

Results and discussion At the outset, the VAE-GOA conducts broad, globally exploratory sampling, while unavoidably covering some low-performing regions, effectively uncovering previously unexplored high-potential areas. As iterations proceed, probability mass progressively concentrates in high-performance regions. The search distribution transitions smoothly from global exploration to local exploitation, reduces attention to low-performing zones, and converges toward a compact subspace containing the best-performing mixtures. These dynamics substantiate the algorithm's intended explore-then-exploit behavior in a multi-constraint design space and effectively mitigate premature convergence to local optima.

Based on two optimization generations and despite strict flowability constraints and limited sampling, the VAE-GOA delivers both macro-level performance gains and a marked expansion of feasible design space. The optimum weighted comprehensive performance is improved by about 20% in the high-flow state group and by >25% in the low-flow state group. The candidates with compressive strength >50 MPa increase from 2 to 6, and those with bond strength >6 MPa increase from 4 to 12, substantially broadening mixture options that meet key targets. For low-flow state scenario, increasing the USCMs is accompanied by a nonlinear decrease in the HPMC, and higher USCMs generally require a lower water–binder ratio (w/b). A practical window of 15%–30% USCMs, 2%–6% Wacker 328, and about 0.1% HPMC at a w/b ratio of 0.22 achieves a low flowability witha high interfacial performance (*i.e.*, mixture L8 attains 48.6 MPa (compressive), 9.2 MPa (flexural), and 6.5 MPa (bond)). For high-flow state scenario, the strength-oriented optimum occurs near about 5% USCMs + 1% Wacker 328 at a w/b ratio of 0.25 (*i.e.*, H7 reaches 63.4 MPa (compressive), 8.3 MPa (flexural), and 4.5 MPa (bond)). For cost-oriented deployment, increasing the USCMs to ~30% with 5% Wacker 328 at a w/b ratio of 0.20 yields a balanced, economical option (*i.e.*, ≈50.7/7.4/6.6 MPa for compressive/flexural/bond). Overall, substituting 15%–30% the USCMs for HB-CSA regulates a flowability and enhances a bond strength as well as reduces production costs by 13%–27%.

Holding the HPMC and w/b ratio roughly fixed while pushing the USCMs beyond 30% (H8 *vs.* H1) reduces the compressive strength by 14.7 MPa but elevates the bond strength to 6.9 MPa, highlighting a deliberate bond-first Pareto choice. The backscattered electron imaging corroborates this pheoneman. The interfacial transition zone (ITZ) in H8 exhibits a significantly lower porosity and a denser microstructure at the old–new interface, explaining the observed bond enhancement.

Conclusions In this study, the VAE-GOA could expedite the discovery of high-potential HB-CSA mixtures under strict flow constraints and limited sampling. The comprehensive performance of high-flow state mortars was increased by 20%, and that of low-flow state mortars by >25%. Beyond single best points, the method could yield scenario-specific composition windows and a diverse portfolio choices that practitioners could select from according to the strength, bond, and cost priorities. In particular, low-flow applications were supported by a stable window (*e.g.*, 15%–30% USCMs with 0.1% HPMC and w/b ≈ 0.22), while high-flow placement admited both a strength-oriented option (~5% USCMs + 1% Wacker 328 at w/b = 0.25) and a cost-oriented alternative (30% USCMs + 5% Wacker 328 at w/b = 0.20). The VAE-GOA could be sample-efficient, resilient to local optima, and readily extensible to multi-objective constraints. Looking ahead, coupling the framework with durability targets (*e.g.*, freeze–thaw and chloride ingress), long-term field validation, and uncertainty-aware priors could broaden its applicability to scenario-aware specification and lifecycle-optimized repair design.

Keywords mixture optimization; multi-flow state scenario repair mortar; generative optimization algorithms; generative models