

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

郑伟鹏^{1,2}, 黄建国³, 宋 奔^{1,2}, 屠金昌³, 盛月强³, 杨明秋³, 杨 露¹, 王发洲^{1,2}, 胡传林¹(1. 武汉理工大学硅酸盐建筑材料国家重点实验室, 武汉 430070; 2. 武汉理工大学材料科学与工程学院, 武汉 430070;
3. 浙江新都水泥有限公司, 浙江 嘉兴 314511)

摘 要: 随着“碳中和”、“碳达峰”战略的持续推进, 降低水泥生产的碳排放刻不容缓。采用响应面法研究了水泥与多元矿物材料的复合效应。首先, 采用四因素三水平 Box-Behnken 设计来讨论粉煤灰、石灰石粉、凝灰岩粉和矿粉这 4 个自变量对水泥力学性能和水化性能的影响并构建了数学模型。方差分析结果表明, 多元矿物材料对水泥的力学性能具有显著影响。然后, 在响应面模型的基础上进行可靠性分析和基于非支配排序遗传算法(NSGA-II)的多目标优化。最后, 得到可靠性不低于 6Sigma(99.999 7%)的最佳优化结果, 即当粉煤灰掺量为 2.72%(质量分数), 石灰石粉掺量为 7.14%(质量分数), 凝灰岩粉掺量为 9.95%(质量分数), 矿粉掺量为 19.93%(质量分数)时, 多元矿物材料体系的性能将在综合考虑力学性能、水化性能和节能减排的前提下达到最优。证实了组合设计(响应面设计和基于 NSGA-II 的多目标优化)在多元矿物材料体系的鲁棒性和可行性, 获得了更加可靠和精度更高的多目标优化方法, 对水泥基材料的实际生产具有极高的实际意义和参考价值。

关键词: 多元矿物材料; 多目标优化; 响应面; 非支配排序遗传算法

中图分类号: TQ172 文献标志码: A 文章编号: 0454-5648(2024)09-3036-11

网络出版时间: 2024-08-22



随着全球变暖的加剧, 节能减排成为国际社会关注的重要议题, 建筑材料在全球变暖和节能减排方面扮演着关键角色^[1-3]。为了实现碳中和和碳达峰的战略目标, 建筑行业节能减排刻不容缓。迄今为止, 减少建筑行业碳排放的主要努力集中在降低建筑材料的能耗上。在实际应用中, 由于建筑材料生产碳排放占整个建筑产业碳排放的 80%^[4-5], 因而用 1 种或多种多元矿物材料如粉煤灰、石灰石粉、凝灰岩粉、矿粉等组合代替水泥, 不仅可以提高水泥产品的物理性能, 而且可以减少水泥熟料的使用, 从而减少水泥生产的碳排放并节约资源, 有利于保护环境^[6-7]。粉煤灰可以替代部分水泥, 以提高材料的强度、耐久性和可持续性; 适量添加石灰石粉能够增加水泥的早期强度和硬化速率, 并改善耐久性; 凝灰岩粉的适度添加可提升水泥的强度和耐久性, 并改善工作性能。此外, 不同类型的矿粉在水泥基材料中可以发挥着不同的作用, 例如硅酸盐矿粉可提高水泥的强度和耐久性, 而铝酸盐矿粉则有助于促进水泥的早期硬化并提升抗裂性能。然而, 由于

水泥基材料的复杂性质和多个相互关联的目标, 如 3 d 抗压强度、28 d 抗压强度、水化放热和多元矿物材料掺量等, 使得这些材料在水泥基材料中的优化设计面临挑战。目前水泥和掺合料的配比优化一般采用试错法、穷举法或单因素试验设计方法, 以满足各种性能指标的配合比设计要求。这些方法需要在水泥的实际生产应用中进行多次试验, 无疑会导致实验数量、工作量和经济成本的大幅增加, 也会使实验结果在多次实验带来的机械误差和实验误差下变得不准确^[8-9]。因此, 需要寻找更高效、准确的方法来进行水泥基多元矿物材料的优化设计。

为了解决上述问题, 研究者们^[10-12]开始应用响应面法(RSM)和非支配排序遗传算法(NSGA-II)进行水泥基多元矿物材料的多目标优化设计。RSM 是一种基于统计建模的方法, 通过建立数学模型来预测材料性能, 并通过优化设计来找到最佳配方。RSM 可基于实验设计, 构建仿真模型, 预测材料性能, 利用统计分析工具来优化不同因素之间的关系。目前 RSM 已被广泛用于研究水泥基材料的强度、耐

收稿日期: 2023-10-21。 修订日期: 2023-11-10。

基金项目: 国家自然科学基金项目(No. 52172025)。

第一作者: 郑伟鹏(1999—), 男, 硕士研究生。

通信作者: 杨 露(1985—), 男, 博士, 研究员。

Received date: 2023-10-21. Revised date: 2023-11-10.

First author: ZHENG Weipeng (1999—), male, Master candidate.

E-mail: 1848357180@qq.com

Correspondent author: YANG Lu (1985—), male, Ph.D., Professor.

E-mail: yanglu@whut.edu.cn

久性等参数^[13-16]。Khan 等^[17]应用了基于 RSM 和机器学习的人工神经网络的统计建模,探究了纳米二氧化硅胶体的用量及其比表面积如何影响砂浆胶凝材料的力学性能。Ho 等^[18]利用 RSM 研究了水灰比和钢渣含量对水泥砂浆性能的影响。Li 等^[19]通过 RSM 和单因素试验分析了 MgO-MgCl 和 H₂O-MgCl 的摩尔比对氯氧镁水泥抗压强度的影响,并优化了其原料配比。在水泥多元矿物材料的实际应用中,通常会涉及到多个性能指标,例如 3 d 抗压强度、28 d 抗压强度和水化放热量等。采用多目标优化可以同时考虑这些指标,并通过调节不同因素来优化性能指标,使材料在多个目标领域均达到最优的效果^[20-22]。NSGA-II 是一种常用的多目标优化算法,通过模拟自然进化的过程,在保持不同目标之间平衡的同时找到最优解集。在水泥基材料领域,Dong 等^[23]利用机器学习技术和 NSGA-II 解决了石墨基纳米材料增强水泥基复合材料的多目标设计优化问题,Chen 等^[24]利用 NSGA-II 进行多目标优化,在提高严寒地区混凝土耐久性的同时,实现了混凝土的经济环保生产。综上所述,采用以 NSGA-II 为基础的多目标优化可以较为完美实现水泥基材料各性能的协调统一,但在可靠性分析和模型优化结果验证方面还需进一步深入研究

与推演,以获得更为普适和科学可靠的多目标优化结果。

本研究在上述研究的基础上,采用响应面法构建数学模型,探究了多元矿物材料对水泥的影响,在此基础上进行了可靠性分析和基于 NSGA-II 的 6Sigma(99.997%)稳健性多目标优化,获得了更加可靠和精度更高的多目标优化结果与验证方法,为水泥配方设计提供了新的解决方案,对实际生产具有极高的实际意义和参考价值。此外,本研究通过优化水泥配比,降低了水泥的熟料用量,以减少水泥生产中的碳排放和能源消耗,从而促进了水泥生产的节能减排和可持续发展。

1 实验

1.1 材料

使用的原材料包括普通硅酸盐水泥和矿物掺合料,普通硅酸盐熟料采用上峰水泥熟料。出于对水泥性能的考虑,多元矿物材料采用 II 级粉煤灰, S95 级矿粉,石灰石粉及凝灰岩粉。外掺石膏采用天然石膏和脱硫石膏 2 种。水泥熟料及多元矿物材料的化学组成如表 1 所示。此外,所用上峰水泥熟料符合中国国家标准 GB/T 21372—2008, X 射线荧光光谱仪(XRF)分析其矿物组成见表 2。

表 1 原料化学组成

Table 1 Chemical composition of raw materials

w/%

Materials	SiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	CaO	MgO	SO ₃	Loss
Fly ash	49.86	34.83	5.68	5.45	0.52	0.52	2.08
Limestone	7.68	2.28	0.82	47.76	1.91	0	39.55
Tuff	68.47	13.5	5.59	1.88	2.22	0	3.78
Slag	34.17	16.28	0.97	39.05	9.23	0	-1.36
Cement	21.74	5.63	3.32	65.33	1.86	0	0.40
Gesso	5.62	1.84	0.98	33.01	0.87	40.48	16.18

w is mass fraction; Loss is burnt mass.

表 2 熟料矿物组成

Table 2 Chemical composition of raw materials

w/%

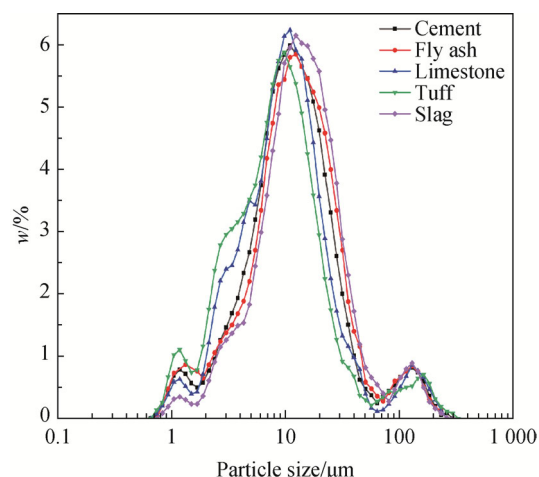
C ₃ S	C ₂ S	C ₃ A	C ₄ AF	f-CaO
52.51	22.74	9.29	10.09	1.40

由激光粒度分析仪获得的水泥熟料和硅酸盐矿物粉体材料的粒度分布如图 1 所示。水泥熟料、粉煤灰、石灰石粉、凝灰岩粉及矿粉的粒径中位数分别为 10.85、11.85、9.63、8.55 μm 和 12.82 μm。由图 1a 可见,水泥与 4 种矿物掺合料的粒径分布基本一致,这表明凝灰岩粉可以在一定程度上替代石灰石粉等辅助胶凝材料,起到相似的物理填充效

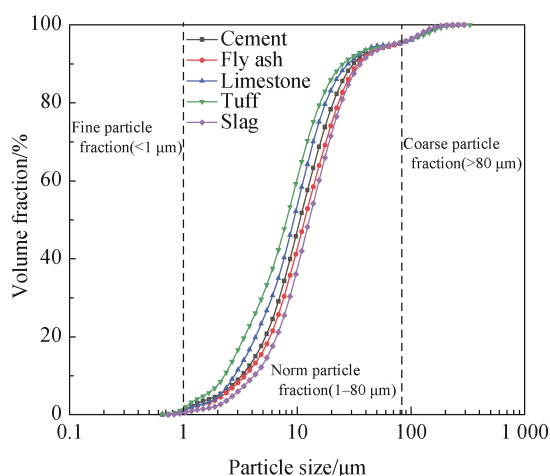
果,以在水泥体系中达到相似的物理效果^[25]。由图 1b 可见,实验原材料的 80 μm 筛上率均小于 5%,符合水泥胶砂实验的一般标准。此外,本研究中水泥胶砂实验所用标准砂均符合欧洲标准 EN 196—1:2005。

1.2 测试方法

本研究通过水化热分析表征了水泥熟料和矿物掺合料的早期水化性能,为了探究不同矿物掺合料对比对水泥施工性能的影响,本研究采用 International Standard Organization 法进行水泥胶砂强度检验(GB/T 17671—2021)。



(a) Particle size distribution of raw materials



(b) Cumulative particle size distribution of raw materials

图1 原材料激光粒度分析图

Fig. 1 Laser particle size analysis of raw materials

1.3 响应面实验设计

本研究采用 Design Expert 13.0 软件进行 Box-Behnken 响应面设计(BBD),由 4 因素 3 水平组成,选取粉煤灰掺量(A)、石灰石粉掺量(B)、凝灰岩粉掺量(C)和矿粉掺量(D) 4 个因素,以水泥 3d 抗压强度(Y_1)、28d 抗压强度(Y_2)和 3d 累积水化放热(Y_3)为响应值并设计了 29 个实验点,其中包括 5 个中心点,16 个轴向点和 8 个边界点,得到实验编码及实验设计矩阵如表 3、表 4 所示。

表3 实验因子及因子水平编码

Factors	Factor level		
	-1	0	1
Fly ash content (A)	2	6	10
Limestone content (B)	2	6	10
Tuff content (C)	2	6	10
Slag content (D)	10	15	20

表4 响应面实验矩阵及实验结果

Table 4 Response surface experiment matrix and experimental results

Experiment No.	Factor				Response quantity		
	A	B	C	D	Y_1/MPa	Y_2/MPa	$Y_3/(\text{J}\cdot\text{g}^{-1})$
1	0	-1	0	1	22.23	49.53	228.33
2	0	-1	1	0	23.70	44.53	223.59
3	0	1	0	1	21.30	46.27	220.52
4	-1	-1	0	0	25.60	52.20	226.34
5	0	0	0	0	25.97	50.23	224.58
6	0	0	0	0	26.10	50.60	225.45
7	0	0	1	-1	24.43	46.60	204.35
8	1	0	0	-1	24.60	48.40	206.15
9	1	-1	0	0	22.50	49.13	227.20
10	0	1	0	-1	24.70	45.50	220.76
11	0	0	0	0	23.63	49.10	223.95
12	-1	0	1	0	26.10	48.60	213.81
13	0	1	1	0	21.60	42.93	213.75
14	1	0	-1	0	26.00	49.23	230.22
15	0	0	1	1	20.80	46.10	225.20
16	-1	0	-1	0	29.30	52.97	237.64
17	1	0	0	1	21.47	47.50	217.31
18	-1	0	0	-1	24.83	51.40	245.37
19	0	0	-1	1	23.20	52.70	224.51
20	0	0	0	0	25.90	50.70	227.76
21	1	0	1	0	22.83	47.53	222.87
22	0	0	-1	-1	27.60	49.40	249.14
23	0	0	0	0	25.97	49.67	230.35
24	-1	1	0	0	26.37	47.80	227.91
25	1	1	0	0	22.60	44.57	216.46
26	-1	0	0	1	25.80	52.90	217.36
27	0	1	-1	0	25.40	44.80	232.55
28	0	-1	0	-1	25.30	50.40	229.05
29	0	-1	-1	0	27.07	51.10	235.11

Y_1 is 3 day compressive strength; Y_2 is 28 day compressive strength; Y_3 is net slurry fluidity.

2 结果与讨论

2.1 RSM 拟合模型

采用 BBD 方法进行实验设计,得到的实验结果见表 4。 Y_1 、 Y_2 和 Y_3 的取值范围分别为 20.80~29.30 MPa、44.53~52.97 MPa, 204.35~249.14 J/g。在计算概率值(p)以验证回归系数的显著性时,一般认为, p 小于 0.05 的模型项影响显著,而 p 大于 0.05 的模型项影响不显著^[26]。剔除不显著项($p>0.05$)后的数学函数为:

$$Y_1 = 12.148 + 0.748A + 0.690B - 0.392C + 2.089D - 0.078A \times D - 0.066B^2 - 0.065D^2 \quad (1)$$

$$Y_2 = 49.595 - 1.179A + 0.893B + 0.654C + 0.381D + 0.042A \times C + 0.073B \times C - 0.048CD + 0.048A^2 - 0.155B^2 - 0.094C^2 \quad (2)$$

$$Y_3 = 368.801 - 12.309A + 0.369B - 12.273C - 7.958D - 0.192A \times B + 0.258A \times C + 0.757A \times D + 0.569C \times D \quad (3)$$

响应面模型的精度可以采用决定系数 R^2 和调整决定系数 R_{adj}^2 来验证, 如式(4)和式(5)所示:

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

$$R_{adj}^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^k (y_i - \hat{y}_i)^2 (k-1)}{\sum_{i=1}^k (y_i - \bar{y}_i)^2 (k-f-1)} \quad (5)$$

式中: k 为样本点个数; f 为自由度; y_i 为响应量实测值; $\hat{y}_i$ 为响应量预测值; $\bar{y}_i$ 为响应量实测值平均值。当 R^2 和 R_{adj}^2 的值均大于 0.9 时模型的精度就令人满意。且 R^2 和 R_{adj}^2 的值越接近 1, 拟合精度就越高。由表 5 可知 Y_1 、 Y_2 和 Y_3 的拟合精确度值(R^2 和 R_{adj}^2)均高于 0.9, 完全满足模型精度要求。总的来说, 根据方差分析已经证明所构建的 BBD 模型的精确度可以用于描述多元矿物材料对水泥 Y_1 、 Y_2 和 Y_3 的影响。

2.2 各因素对响应量的影响

2.2.1 响应面实验 Y_1 方差分析 响应面实验 Y_1 方差分析结果如表 6 所示。模型 p 值均小于 0.000 1, 表示该模型非常显著, 失拟项的 f 值为 0.92 意味着缺乏拟合相对于纯误差并不显著, 表明所建立的模型是理想的, 可以用来导航设计空间。当模型项 p 值小于 0.05 时表示该模型项显著且在 95%置信水平上具有统计学显著性, 在这种情况下 A 、 B 、 C 、 D 、 $A \times D$ 、 B^2 、 D^2 是重要的模型项。这意味着 A 、 B 、 C 及 D 均对 Y_1 有着极大的影响。为进一步研究各因素对 Y_1 的影响大小, 本研究进行了如图 2 所示的数值分析。通过评估不同组分的趋势曲线的斜率可以反映所构建模型对各组分含量变化的敏感性, 水泥的 Y_1 随 4 种掺合料掺量的增加而呈现出不同程度的下降, 这是因为相对于水泥熟料, 掺合料的活性较低, 导致水化速率降低, 使其抗压强度下降。同时, 随着多元矿物掺合料掺量的持续增加, 其稀释作用更为明显, 导致水泥的 Y_1 的进一步降低^[27]。其中, A 对 Y_1 的影响最大, 其掺量的增加会明显导致 Y_1 降低。此外, C 是导致 Y_1 下降的另一个关键因素。

表 5 近似模型精度验证

Table 5 Accuracy verification of the approximate model

Evaluation index	Y_1/MPa	Y_2/MPa	$Y_3/(\text{J} \cdot \text{g}^{-1})$
R^2	0.966 0	0.969 0	0.946 3
Adjusted R^2	0.954 1	0.947 7	0.919 5

表 6 Y_1 方差分析结果

Table 6 Experimental results of Y_1 variance

Source	Sum of squares	df	Mean square	F	p
Model	100.26	7	14.32	81.21	<0.000 1
A	29.43	1	29.43	166.89	<0.000 1
B	1.92	1	1.92	10.89	0.003 6
C	29.45	1	29.45	167.00	<0.000 1
D	27.17	1	27.17	154.03	<0.000 1
$A \times D$	6.43	1	6.43	36.48	<0.000 1
B^2	7.41	1	7.41	42.00	<0.000 1
D^2	16.74	1	16.74	94.94	<0.000 1
Residual	3.53	20	0.18		
Lack of Fit	2.78	16	0.17	0.92	0.602 6
Pure Error	0.75	4	0.19		
Cor Total	103.79	27			

df is number of degrees of freedom; F is ratio of between-group mean square to within-group mean square; p is probability of no significant effect.

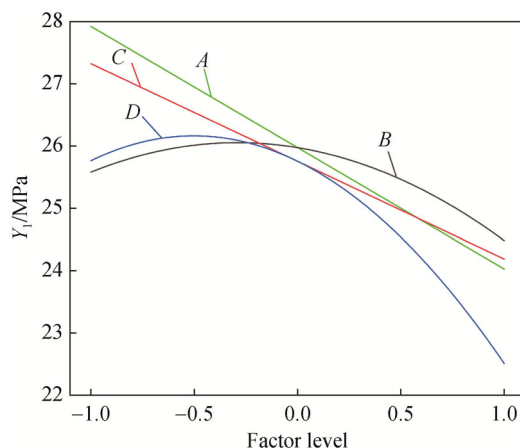


图 2 不同成分对 Y_1 的影响

Fig. 2 Influence of different components on Y_1

2.2.2 响应面实验 Y_2 方差分析 响应面实验 Y_2 方差分析结果如表 7 所示。模型 p 值小于 0.000 1 表示该模型非常显著, 且在 95%置信水平上具有统计学显著性。这无疑证明了所建立的模型是理想的, 可以用来导航设计空间。在这种情况下, A 、 B 、 C 、 D 、 $B \times C$ 、 $C \times D$ 、 A^2 、 B^2 、 D^2 是重要的模型项, 这意味着 A 、 B 、 C 、 D 均对 Y_2 有着极大的影响。为进一步研究各因素对 Y_2 的影响大小, 本研究进行了如图 3 所示的数值分析。通过评估不同组分的趋势曲线的斜率可以反映所构建模型对各组分含量变化的

敏感性。水泥的 Y_2 随 A 、 B 、 C 的增加而降低，但会随 D 的增加而呈现缓慢上升的趋势，其中 B 对 Y_2 的影响最大，其掺量超过 0 水平后继续增大会明显导致 Y_2 降低，这是因为石灰石粉属于惰性材料。 D 对水泥 Y_2 的影响最小。

表 7 Y_2 方差分析结果

Table 7 Experimental results of Y_2 variance

Source	Sum of squares	df	Mean square	F	p
Model	198.17	10	19.82	47.93	<0.000 1
A	21.71	1	21.71	52.52	<0.000 1
B	52.22	1	52.22	126.32	<0.000 1
C	47.6	1	47.6	115.14	<0.000 1
D	2.46	1	2.46	5.94	0.026 0
A×C	1.78	1	1.78	4.30	0.053 6
B×C	5.52	1	5.52	13.36	0.002 2
C×D	3.61	1	3.61	8.73	0.008 9
A^2	3.77	1	3.77	9.12	0.007 7
B^2	39.92	1	39.92	96.56	<0.000 1
C^2	14.82	1	14.82	35.84	<0.000 1
Residual	7.03	17	0.41		
Lack of fit	5.22	13	0.40	0.89	0.613 2
Pure error	1.81	4	0.45		
Cor total	205.2	27			

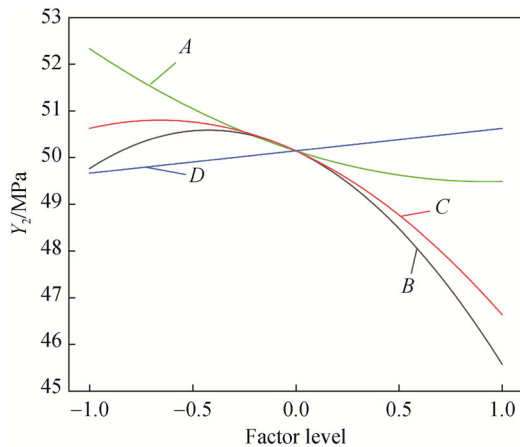


图 3 不同成分对 Y_2 的影响

Fig. 3 Influence of different components on Y_2

2.2.3 响应面实验 Y_3 方差分析 响应面实验 Y_3 方差分析结果如表 8 所示。模型 p 值小于 0.000 1 表示该模型非常显著，且在 95%置信水平上具有统计学显著性。失拟项的 f 值为 1.22 意味着缺乏拟合相对于纯误差不显著，这表明所建立的模型是理想的，可以用来导航设计空间。在这种情况下， A 、 B 、 C 、 $A \times B$ 、 $A \times C$ 、 $A \times D$ 、 $C \times D$ 是重要的模型项，这意味着 A 、 B 、 C 均对 Y_3 有着极大的影响。而 D 对模型的影响不显著。为进一步研究各因素对 Y_3 的影响

大小，本研究进行了如图 4 所示的数值分析。由图 4 可见， A 、 B 、 C 、 D 与 Y_3 之间具有优异的线性相关性，其中 C 对 Y_3 的影响最为显著，且随着 C 的持续升高会使 Y_3 急剧下降。

表 8 Y_3 方差分析结果

Table 8 Experimental results of Y_3 variance

Source	Sum of squares	df	Mean square	F	p
Model	2 475.660 0	8	309.460 0	38.060 0	<0.000 1
A	51.980 0	1	51.980 0	6.390 0	0.020 5
B	118.250 0	1	118.250 0	14.540 0	0.001 2
C	929.280 0	1	929.280 0	114.300 0	<0.000 1
D	0.002 2	1	0.002 2	0.000 3	0.987 1
A×B	37.880 0	1	37.880 0	4.660 0	0.043 9
A×C	67.900 0	1	67.900 0	8.350 0	0.009 4
A×D	630.490 0	1	630.490 0	77.550 0	<0.000 1
C×D	517.110 0	1	517.110 0	63.600 0	<0.000 1
Residual	154.470 0	19	8.130 0		
Lack of Fit	126.810 0	15	8.450 0	1.220 0	0.466 7
Pure Error	27.670 0	4	6.920 0		
Cor Total	2 630.130 0	27			

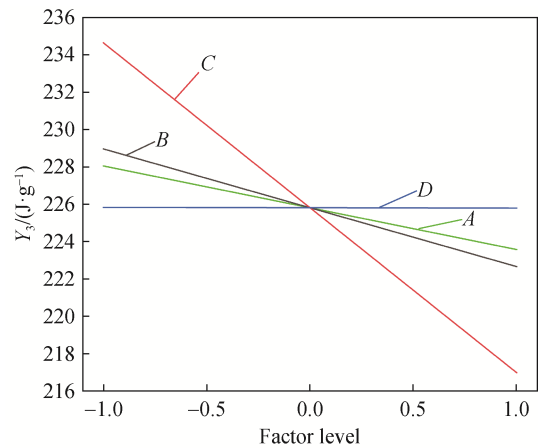
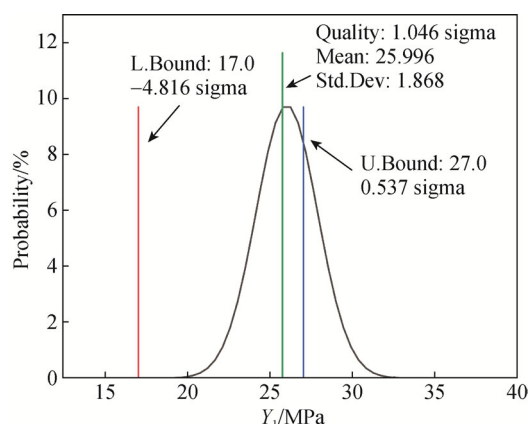
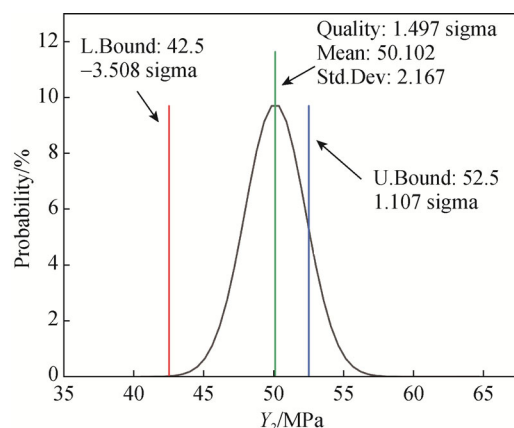
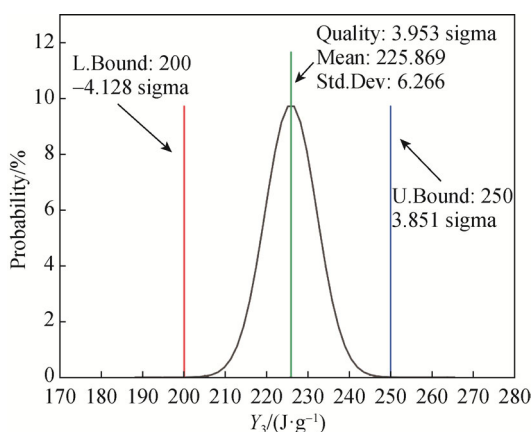


图 4 不同成分对 Y_3 的影响

Fig. 4 Influence of different components on Y_3

2.3 多元矿物材料多目标优化分析

2.3.1 可靠性分析 为了统计随机变量对水泥性能的扰动，采用蒙特卡罗抽样方法分析各响应量的可靠性。选取工艺因子作为噪声，随机抽取 8 000 个样本点来分析每个随机输入变量对响应的贡献度，最终确认其分布特性，包括均值、标准差和 Sigma 水平，如图 5 所示。 Y_1 和 Y_2 的 Sigma 水平值分别为 1.046 和 1.497，可靠度分别为 70.45% 和 86.55%，均低于 90%，而 Y_3 的 Sigma 水平值为 3.953，可靠度为 93.83%。这表明以响应面模型进行确定性多目标优化会导致优化结果的可靠性较低。

(a) Reliability analysis of Y_1 (b) Reliability analysis of Y_2 (c) Reliability analysis of Y_3

L.Bound is lower limit of the interval; U.Bound is upper limit of the interval; Quality is interval reliability; Mean is average value; Std.Dev is standard deviation

图 5 可靠性分析结果

Fig. 5 Reliability analysis results

2.3.2 6Sigma 稳健性多目标优化模型 采用 6Sigma 稳健多目标优化的主要目的是使多目标优化的结果在满足约束条件的同时尽可能减小均方差, 使多目标优化结果的可靠度达到最高, 这种优

化方法可以很好地将确定性优化转化为可靠性优化, 以实现在多元矿物材料的目标性能和可靠概率之间寻找最优的设计空间, 由此确定了多元矿物材料基于稳健性的多目标优化设计的设计变量、优化目标和约束条件如下:

1) 设计变量: 多元矿物材料掺量;

2) 优化目标: Y_1 最小、 Y_2 最大以及 Y_3 最小, 多元矿物材料掺量之和(Y_4)最大;

3) 约束条件: Y_1 的确定性约束范围为 17.0~27.0 MPa, Y_2 的确定性约束范围为 42.5~52.5 MPa; Y_3 设定为不高于可靠性分析的均值且不低于 170.0 J/g; Y_4 设定为不低于材料总量的 30%。且各性能响应和设计变量的可靠性不低于 6Sigma。综上, 基于上述设计变量、优化目标和约束条件确定了多元矿物材料的多目标优化设计的数学模型, 如式(6)~式(22)所示:

$$\text{Max}\{Y_1(A_i, B_i, C_i, D_i), Y_2(A_i, B_i, C_i, D_i), -Y_3(A_i, B_i, C_i, D_i), Y_4(A_i, B_i, C_i, D_i)\} \quad (6)$$

$$\mu[Y_1(A_i, B_i, C_i, D_i)] + 6\sigma[Y_1(A_i, B_i, C_i, D_i)] \leq 27.0 \quad (7)$$

$$\mu[Y_1(A_i, B_i, C_i, D_i)] - 6\sigma[Y_1(A_i, B_i, C_i, D_i)] \geq 17.0 \quad (8)$$

$$\mu[Y_2(A_i, B_i, C_i, D_i)] + 6\sigma[Y_2(A_i, B_i, C_i, D_i)] \leq 52.5 \quad (9)$$

$$\mu[Y_2(A_i, B_i, C_i, D_i)] - 6\sigma[Y_2(A_i, B_i, C_i, D_i)] \geq 42.5 \quad (10)$$

$$\mu[Y_3(A_i, B_i, C_i, D_i)] + 6\sigma[Y_3(A_i, B_i, C_i, D_i)] \leq 225.9 \quad (11)$$

$$\mu[Y_3(A_i, B_i, C_i, D_i)] - 6\sigma[Y_3(A_i, B_i, C_i, D_i)] \geq 170.0 \quad (12)$$

$$\mu[Y_4(A_i, B_i, C_i, D_i)] + 6\sigma[Y_4(A_i, B_i, C_i, D_i)] \leq 50.0 \quad (13)$$

$$\mu[Y_4(A_i, B_i, C_i, D_i)] - 6\sigma[Y_4(A_i, B_i, C_i, D_i)] \geq 30.0 \quad (14)$$

$$2.0 \leq \mu(A_i) \pm 6\sigma(A_i) \leq 10.0 \quad (15)$$

$$2.0 \leq \mu(B_i) \pm 6\sigma(B_i) \leq 10.0 \quad (16)$$

$$2.0 \leq \mu(C_i) \pm 6\sigma(C_i) \leq 10.0 \quad (17)$$

$$10.0 \leq \mu(D_i) \pm 6\sigma(D_i) \leq 20.0 \quad (18)$$

$$A_i = [A_1, A_2, A_3, \dots, A_n]^T \quad (19)$$

$$B_i = [B_1, B_2, B_3, \dots, B_n]^T \quad (20)$$

$$C_i = [C_1, C_2, C_3, \dots, C_n]^T \quad (21)$$

$$D_i = [D_1, D_2, D_3, \dots, D_n]^T \quad (22)$$

式中: A_i 、 B_i 、 C_i 和 D_i 对应的是响应面参数 A 、 B 、 C 和 D ; Y_4 为多元矿物材料掺量(质量分数)之和, 即 $Y_4 = A + B + C + D$; $\mu(A_i)$ 、 $\mu(B_i)$ 、 $\mu(C_i)$ 和 $\mu(D_i)$ 是响应面模型参数 A 、 B 、 C 和 D 对应的均值; $\sigma(A_i)$ 、 $\sigma(B_i)$ 、 $\sigma(C_i)$ 和 $\sigma(D_i)$ 是响应面模型参数 A 、 B 、 C 、 D 对应的方差。

2.3.3 响应量帕累托(pareto)前沿和可靠性分析 本研究根据式(6)~式(22)所述数学模型以及式(1)~式(3)所述数学方程, 采用 NSGA-II 进行多目标优化。优化时将 NSGA-II 的初始种群数设置为 200, 遗传

代数设置为 20, 交叉分布指数设置为 10, 变异算子设置为 20。经过 4 000 次计算, NSGA-II 驱动目标在优化空间中寻找最优 pareto 解, 并形成 pareto 解集, 将 pareto 解集映射到函数空间, 得到 pareto 前沿如图 6 所示。与此同时, 为验证 NSGA-II 驱动多目标优化的可靠性, 对样本点数据进行可靠性分析

得到数据均值、方差和 6Sigma 水平如图 7 所示。

由图 7 可见, Y_1 、 Y_2 、 Y_3 和 Y_4 的多目标优化所选样本点的 Sigma 水平值均不低于 6, 这意味着 Y_1 、 Y_2 、 Y_3 和 Y_4 的多目标优化的可靠性均不低于 99.99%, 满足 6Sigma 稳健性多目标优化原则的可靠性要求。

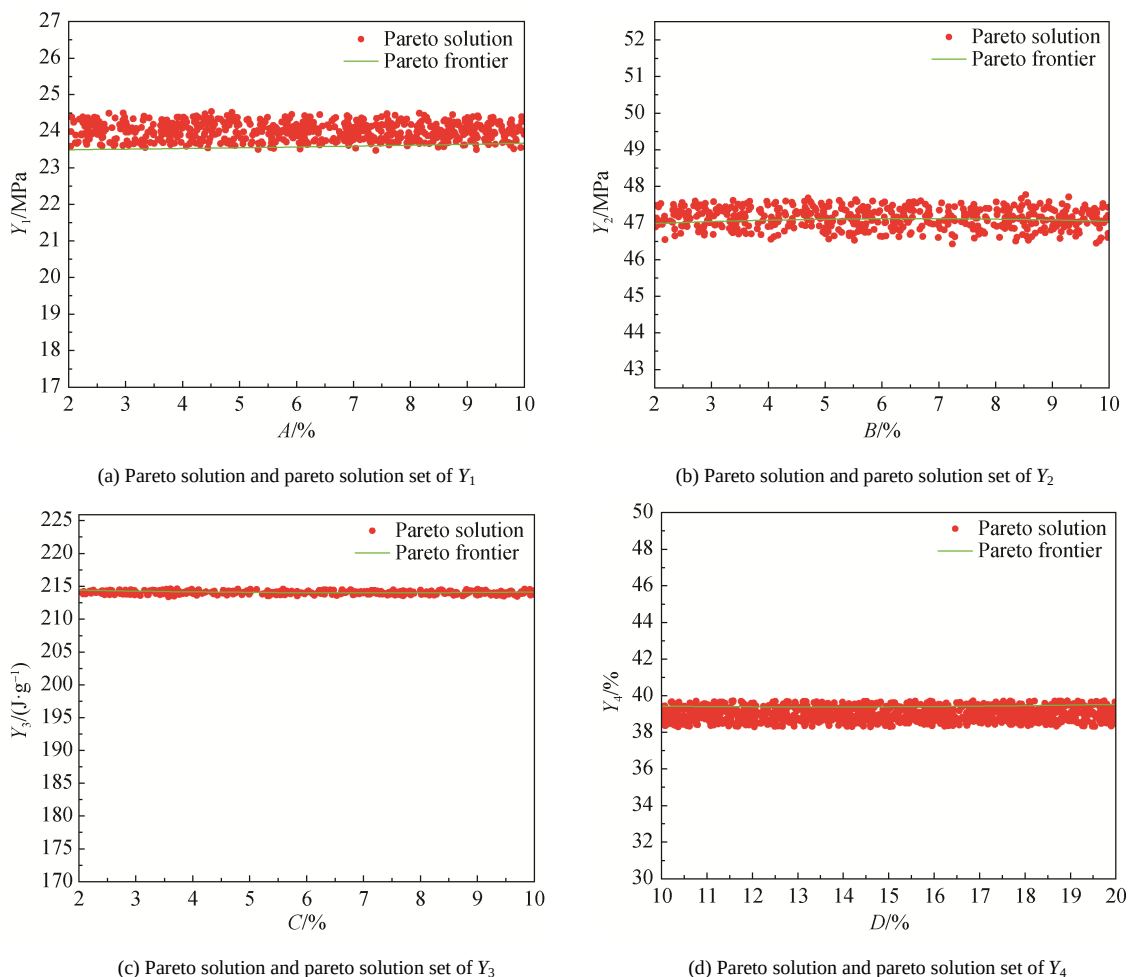


图 6 Pareto 解及 Pareto 解集

Fig. 6 Pareto solution and Pareto solution set

2.3.4 响应量稳健性多目标优化决策准则 为了保证水泥基多元矿物材料的施工性能, Y_1 和 Y_2 的权重值应大于 Y_3 的权重值和 Y_4 的权重值。出于减少水泥熟料量以节能减排的考虑, Y_4 的权重值应大于 Y_3 的权重值。因此, 根据式(23)和式(24)划分目标性能权重的可行域, 并得到权重值。

$$\text{Max}\{\omega_1[Y_1(A_i, B_i, C_i, D_i)] + \omega_2[Y_2(A_i, B_i, C_i, D_i)] + \omega_3[-Y_3(A_i, B_i, C_i, D_i)]\} \quad (23)$$

$$\omega_1 + \omega_2 + \omega_3 + \omega_4 = 1 \quad (\omega_1, \omega_2 > \omega_4 > \omega_3) \quad (24)$$

式中: ω_1 、 ω_2 、 ω_3 和 ω_4 分别为 Y_1 、 Y_2 、 Y_3 的权重值和 Y_4 的权重值。

根据材料的性能需求确定各优化目标的权重值, 本研究将 ω_1 设置为 0.35, 将 ω_2 设置为 0.35,

将 ω_3 设置为 0.1, 并将 ω_4 设置为 0.2。再根据式(23)对 Pareto 前沿进行排序, 并筛选出最优解。

2.3.5 多目标优化结果及实验验证 基于可靠性的多目标优化根据优化结果确定了工艺参数, A 为 2.72%、 B 为 7.14%、 C 为 9.95%、 D 为 19.93%, 优化后的 Y_1 为 23.43 MPa、 Y_2 为 46.82 MPa、 Y_3 为 214.36 J/g、 Y_4 为 39.74%。

如表 9 所示, 对最优方案进行了 5 次重复试验验证, 试验值与预测的优化数值均比较接近, 最大相对误差为 3.71%, 在可接受的误差范围内(>90%的置信水平), 这无疑证实了 6Sigma 稳健性多目标优化结果的可靠性。需要说明的是, 该方法主要考察了力学性能、水化放热性能、掺合料用量等的影

响, 若需考察多元矿物材料的颗粒构成、化学组成和性质等的影响, 则需要将这些参数纳入上述方法中进行多目标优化、可靠性分析与验证, 得到的优

化结果可能会有适当变化, 若得到的结果不在可接受的误差范围内, 则需要补充实验对响应面模型进行调整。

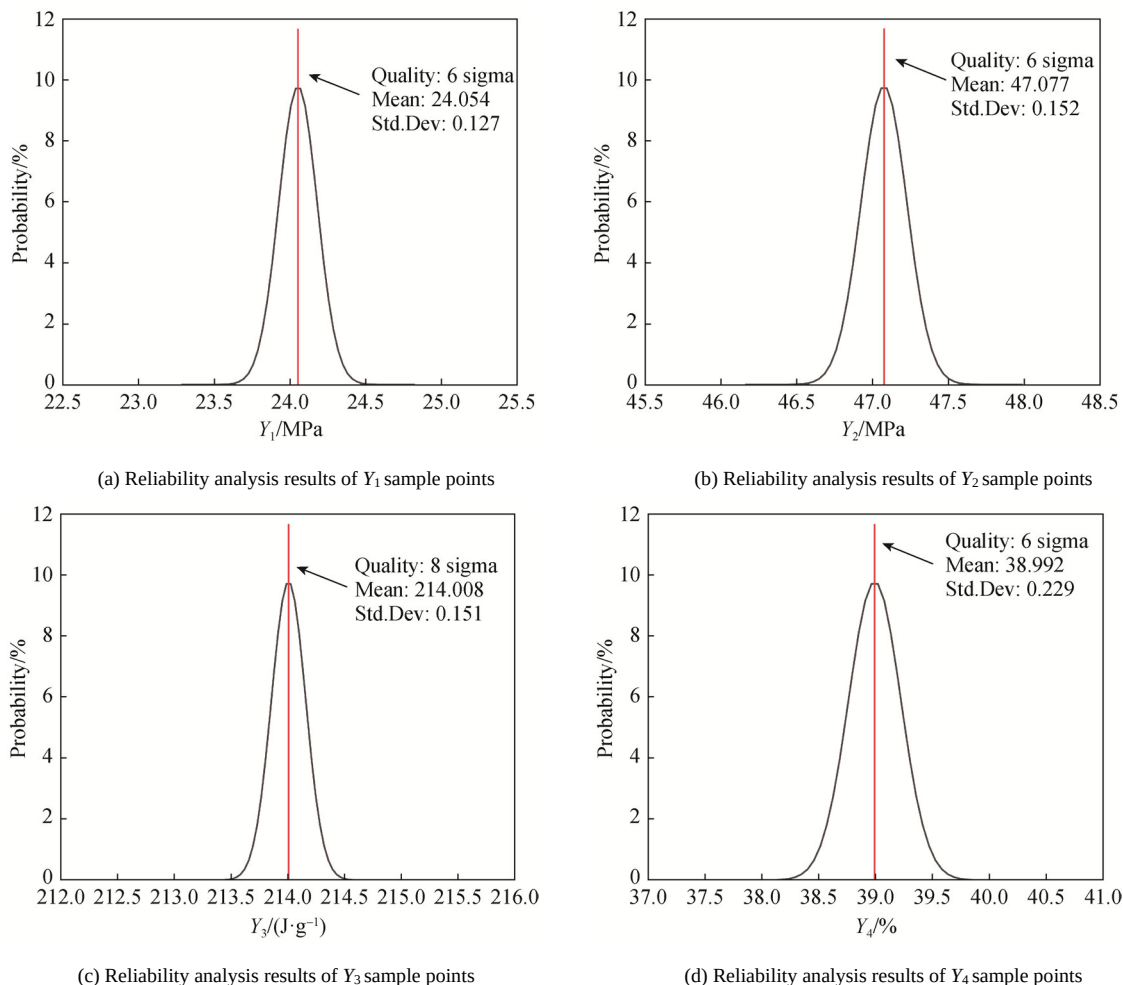


图 7 样本点可靠性分析结果

Fig. 7 Reliability analysis results of sample points

表 9 6Sigma 稳健性多目标优化结果验证

Table 9 Verification of 6Sigma robust multi-objective optimization results

Response quantity	Y_1/MPa	Relative error	Y_2/MPa	Relative error	$Y_3/(\text{J}\cdot\text{g}^{-1})$	Relative error
Predicted value	23.43		46.82		214.36	
Test 1	23.60	-0.72%	46.95	-0.29%	214.87	-0.24%
Test 2	22.90	2.27%	46.70	0.25%	213.42	0.44%
Test 3	23.70	-1.15%	46.30	1.10%	215.84	-0.69%
Test 4	24.10	-2.85%	46.40	0.89%	218.37	-1.87%
Test 5	24.30	-3.71%	47.30	-1.03%	219.65	-2.47%

3 结论

本研究提出了一种多元矿物材料的多目标优化方法。为了实现该方法, 本研究采用四因素三水平 BBD 设计方法对硅酸盐水泥-粉煤灰-石灰石粉-凝

灰岩粉-矿粉五组分体系的 3d 抗压强度、28d 抗压强度及水化热进行了评价, 并建立了 1 个数学模型。经过对数学模型进行 6Sigma 可靠性分析和进一步的多目标优化数学建模, 为 6Sigma 稳健性多目标优化打下了基础。最后通过 NSGA-II 驱动目标在优化空间中寻找到了最优 pareto 解。根据本研究的全过程可以得出以下结论:

- 1) 凝灰岩粉可以替代部分辅助胶凝材料以纳入多元矿物材料体系;
- 2) 多元矿物材料体系与水泥力学性能具有良好的相关性;
- 3) 多元矿物材料与水泥水化热具有优异的线性相关性;
- 4) 根据多元矿物材料与水泥力学性能和水化热之间的相关关系可采用基于 NSGA-II 的多目标优

化方法进行最优配方求解;

5) 采用6Sigma稳健性多目标优化方法可以得到可靠的多目标优化结果, 即当 A 为 2.72%、 B 为 7.14%、 C 为 9.95%、 D 为 19.93%时, 对应 Y_1 为 23.43 MPa、 Y_2 为 46.82 MPa、 Y_3 为 214.36 J/g;

6) 证实了组合设计(响应面设计和基于 NSGA-II 的多目标优化)在多元矿物材料体系的鲁棒性和可行性。

参考文献:

- [1] 薄文斐. 再生绿色建材对环境影响的成本分析[D]. 青岛: 山东科技大学, 2019.
BO Wenfei. Cost Analysis of Environmental Impact of Recycled Green Building Materials [D]. Qingdao: Shandong University of Science and Technology, 2019.
- [2] WANG Y H, PAN W. The contribution of cleaner production in the material industry to reducing embodied energy and emissions in China's building sector[J]. *Build Environ*, 2023, 242: 110555.
- [3] ZHOU W, FU W W, LV G Y, et al. Preparation and properties of $\text{CaCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ /silica aerogel composite phase change material for building energy conservation[J]. *J Mol Liq*, 2023, 382.
- [4] CHANG Y, RIES R J, LEI S H. The embodied energy and emissions of a high-rise education building: A quantification using process-based hybrid life cycle inventory model[J]. *Energy Build*, 2012, 55: 790–798.
- [5] HUANG P J, HUANG S L, MARCOTULLIO P J. Relationships between CO_2 emissions and embodied energy in building construction: A historical analysis of Taipei[J]. *Build Environ*, 2019, 155: 360–375.
- [6] HAMID H, CHORZEPA M G. Quantifying maximum temperature in 17 mass concrete cube specimens made with mixtures including metakaolin and/or slag[J]. *Constr Build Mater*, 2020, 252: 118950.
- [7] LANGAN B W, WENG K, WARD M A. Effect of silica fume and fly ash on heat of hydration of Portland cement[J]. *Cem Concr Res*, 2002, 32(7): 1045–1051.
- [8] DEROUSSEAU M A, KASPRZYK J R, SRUBAR W V III. Computational design optimization of concrete mixtures: A review[J]. *Cem Concr Res*, 2018, 109: 42–53.
- [9] HARIRI-ARDEBILI M A, SEYED-KOLBADI S M, NOORI M. Response surface method for material uncertainty quantification of infrastructures[J]. *Shock Vib*, 2018, 2018: 1784203.
- [10] SOLTANI M, MOAYEDFAR R, VUN R, et al. Using response surface methodology to assess the performance of the pervious concrete pavement[J]. *IJPRT*, 2023, 16: 576–591.
- [11] NEMATI M, NEMATZADEH M, RAHIMI S. Effect of fresh concrete compression technique on pre- and post-heating compressive behavior of steel fiber-reinforced concrete: Experiments and RSM-based optimization[J]. *Constr Build Mater*, 2023, 400: 132786.
- [12] WU C, PAN H, LUO Z, et al. Multi-objective optimization of residential building energy consumption, daylighting, and thermal comfort based on BO-XGBoost-NSGA-II[J]. *Build Environ*, 2024, 254: 111386.
- [13] KOKSAL F, NAZLI T, BENLI A, et al. The effects of cement type and expanded vermiculite powder on the thermo-mechanical characteristics and durability of lightweight mortars at high temperature and RSM modelling[J]. *Case Stud Constr Mater*, 2021, 15: e00709.
- [14] BHEEL N, ALI M O A, SHAFIQ N, et al. Utilization of millet husk ash as a supplementary cementitious material in eco-friendly concrete: RSM modelling and optimization[J]. *Structures*, 2023, 49: 826–841.
- [15] ZERIG T, AIDOU A, BELACHIA M, et al. Combined sand eco-mortar reinforced with polyethylene Terephthalate: Behavior and optimization using RSM method[J]. *Constr Build Mater*, 2023, 404.
- [16] BHEEL N, MOHAMMED B S, ALI M O A, et al. Effect of graphene oxide as a nanomaterial on the bond behaviour of engineered cementitious composites by applying RSM modelling and optimization[J]. *J Mater Res Technol*, 2023, 26: 1484–1507.
- [17] KHAN K, JOHARI M A M, AMIN M N, et al. Optimization of colloidal nano-silica based cementitious mortar composites using RSM and ANN approaches[J]. *Results Eng*, 2023, 20: 101390.
- [18] HO C M, DOH S I, LI X, et al. RSM-based modelling of cement mortar with various water to cement ratio and steel slag content[J]. *Phys Chem Earth*, 2022, 128: 103256.
- [19] LI K, WANG Y S, ZHANG X, et al. Raw material ratio optimisation of magnesium oxychloride cement using response surface method[J]. *Constr Build Mater*, 2021, 272: 121648.
- [20] WEI X D, QIAO X L, CHEN T L. Design framework for rehabilitation grout materials during metro operation period: A combination of improved central composite design modeling and multi-objective particle swarm optimization[J]. *Constr Build Mater*, 2023, 401: 132690.
- [21] TANHADOUST A, ALI EMADI S A, NASROLLAHPOUR S, et al. Optimal design of sustainable recycled rubber-filled concrete using life cycle assessment and multi-objective optimization[J]. *Constr Build Mater*, 2023, 402: 132878.
- [22] ZHANG C, LIU J M, LI X Q, et al. Multi-objective optimization design of TRISO-based fully ceramic microencapsulated fuel[J]. *J Nucl Mater*, 2023, 585.
- [23] DONG W, HUANG Y M, LEHANE B, et al. Multi-objective design optimization for graphite-based nanomaterials reinforced cementitious composites: A data-driven method with machine learning and NSGA-II[J]. *Constr Build Mater*, 2022, 331: 127198.
- [24] CHEN H Y, CAO Y, LIU Y, et al. Enhancing the durability of concrete in severely cold regions: Mix proportion optimization based on machine learning[J]. *Constr Build Mater*, 2023, 371: 130644.
- [25] LIU Y, ZHANG Z Q, HOU G H, et al. Preparation of sustainable and green cement-based composite binders with high-volume steel slag powder and ultrafine blast furnace slag powder[J]. *J Clean Prod*, 2021, 289: 125133.
- [26] LI Z P, LU D G, GAO X J, et al. Multi-objective optimization of gap-graded cement paste blended with supplementary cementitious materials using response surface methodology, *Constr Build Mater*, 2020, 248: 118552–118552.
- [27] LIU S H, FANG P P, WANG H L, et al. Effect of tuff powder on the hydration properties of composite cementitious materials[J]. *Powder Technol*, 2021, 380: 59–66.

Mathematical Model and Multi-Objective Optimization of the Influence of Multiple Mineral Materials on Cement Properties

ZHENG Weipeng^{1,2}, HUANG Jianguo³, SONG Ben^{1,2}, TU Jinchang³, SHENG Yueqiang³, YANG Mingqiu³,
YANG Lu¹, WANG Fazhou^{1,2}, HU Chuanlin¹

(1. State Key Laboratory of Silicate Materials for Architectures, Wuhan University of Technology, Wuhan 430070, China;

2. School of Materials Science and Engineering, Wuhan University of Technology, Wuhan 430070, China;

3. Zhejiang Xindu Cement Co., Ltd., Jiaxing 314511, Zhejiang, China)

Extended Abstract

Introduction With the continuous promotion of the "carbon neutrality" and "carbon peak" strategies, reducing carbon emissions from cement production is urgent. Replacing cement with a combination of one or multiple mineral materials can not only improve the physical properties of cement products, but also reduce the use of cement clinker, thereby reducing carbon emissions in cement production and saving resources. However, due to the complex properties and multiple interrelated properties of cement matrix composites, the optimization design of these materials in cement matrix composites faces challenges. Therefore, it is necessary to find more efficient and accurate methods for optimizing the design of cement matrix composites.

Methods Response surface experiments were conducted by using Shangfeng cement clinker that meets the Chinese national standard GB 21372-2008, standard sand that meets the European standard EN 196-1:2005, multiple mineral materials (grade II fly ash, S95 mineral powder, limestone powder, and tuff powder), and external gypsum (natural gypsum, desulfurization gypsum). The response surface experiment was conducted using Design Expert 13.0 software for Box Behnken response surface design. The response surface design consists of four factors and three levels. Four factors were selected: fly ash content (A), limestone powder content(B), tuff powder content(C), and slag content(D). The response values were cement 3 d compressive strength, 28 d compressive strength, and the cumulative hydration heat release of cement within 3 d, and 29 experimental points were designed.

Firstly, use Monte Carlo sampling method to analyze the reliability of each response quantity. Select process factors as noise, randomly select 8 000 samples points to analyze the contribution of each random input variable to the response, and confirm its distribution characteristics including mean value, standard deviation, and Sigma level. Next, Further construct optimization objectives that meet the minimum 3 d compressive strength value (Y_1), maximum 28 d compressive strength value (Y_2), and minimum the cumulative hydration heat release value of cement within 3 d (Y_3), as well as the maximum content of multiple mineral materials (Y_4). The deterministic constraint range for Y_1 is 17.0–27.0 MPa, and the deterministic constraint range for Y_2 is 42.5–52.5 MPa. Y_3 is set to be no higher than the mean value of reliability analysis and not lower than 170.0 J/g; Y_4 is set to not less than 30% of the total material quantity. And the reliability of each performance response and design variable should be not less than 6-Sigma. A multi-objective optimization design for multi mineral materials, based on the mathematical model obtained from response surface experiments and the multi-objective optimization design of multivariate mineral materials, the non-dominated sorting genetic algorithm (NSGA-II) is used for multi-objective optimization. When optimizing, set the initial population size of NSGA-II to 200, genetic algebra to 20, cross distribution index to 10, and mutation operator to 20.

Results and discussion Based on the response surface experimental matrix, the experimental results were obtained. After removing the insignificant items (p -value>0.05) from the response surface experimental results, the mathematical model was obtained as follows:

$$Y_1=12.148+0.748A+0.690B-0.392C+2.089D-0.078A \times D-0.066B^2-0.065D^2$$

$$Y_2=49.595-1.179A+0.893B+0.654C+0.381D+0.042A \times C+0.073B \times C-0.048C \times D+0.048A^2-0.155B^2-0.094C^2$$

$$Y_3=368.801-12.309A+0.369B-12.273C-7.958D-0.192A \times B+0.258A \times C+0.757A \times D+0.569C \times D$$

A 6-Sigma reliability analysis was conducted on the response surface mathematical model, and the sigma level values for Y_1 and Y_2 were 1.144 and 1.497, respectively, with reliability values of 74.76% and 86.55%, both lower than 90%. However, the sigma level value for Y_3 was 3.953, with reliability values of 93.83%. After multi-objective optimization of the mathematical model, the obtained Pareto solutions were sorted to get the optimal process parameters: A of 2.72%, B of 7.14%, C of 9.95%, and D of 19.93%. The optimized Y_1 of cement is 23.43 MPa, and the Y_2 is 46.82 MPa, the Y_3 is 214.36 J/g, and the total content of cement multi mineral materials is 39.74%. Five repeated experiments were conducted to verify the optimal process parameters, and the experimental values were close to the optimized values. The maximum relative error is 3.71%, which is within an acceptable error range (>90% confidence level).

Conclusions According to the mathematical model obtained from the response surface, it is found that there is a good correlation

between the multi mineral material system and the mechanical properties of cement. There is an excellent linear correlation between the multi mineral material system and the hydration heat of cement. Based on mathematical models, a multi-objective optimization method based on NSGA-II can be used to solve the optimal formula. In addition, by using the 6sigma robust multi-objective optimization method, the reliable multi-objective optimization results can be obtained. When the content of fly ash is 2.72%, the content of limestone powder is 7.14%, the content of tuff powder is 9.95%, and the content of slag is 19.93%, the three-dimensional compressive strength value of cement is 23.43 MPa, the 28 d compressive strength value is 46.82 MPa, and the Y_3 is 214.36 J/g. This study validated the robustness and feasibility of composite design methods (including response surface design and multi-objective optimization based on NSGA-II) in multi-component mineral systems.

Keywords multi-mineral materials; multi-objective optimization; response surface; non-dominated sorting genetic algorithm