

基于物理驱动与数据修正协同的复合胶凝材料水化热预测模型

元 强^{1,2}, 夏 瑞^{1,2}, 刘 易^{1,2}, 马嘉璐^{1,2}, 伍 军³(1. 中南大学土木工程学院, 长沙 410075; 2. 高速铁路建造技术国家工程研究中心, 长沙 410075;
3. 中国中铁股份有限公司, 北京 100039)

摘 要: 复合胶凝材料是现代混凝土的基本特征, 其水化热的精准预测对混凝土抗裂及强度发展调控具有重要意义。本工作提出一种物理驱动与数据修正协同的水化热预测模型, 将 S-F 方程、Krstulović-Dabić 模型等水化动力学方程作为物理先验嵌入神经网络前向传播路径, 通过物理参数预测分支与残差修正分支协同实现“物理驱动+数据修正”的水化热曲线端到端建模。结果表明, 所提出的 SFQmaxDecompNet 模型在预测精度、泛化能力和稳健性方面均优于纯数据驱动模型, 将水化动力学方程作为归纳偏置嵌入神经网络, 是实现水化热预测精度与可解释性协同提升的有效途径。

关键词: 复合胶凝材料; 水化热; 物理嵌入神经网络; 水化动力学方程; 残差修正; 可解释性

中图分类号: TP181; TU528 文献标志码: A 文章编号: 0454-5648(2026)10-3328-17

网络出版时间: 2026-07-29



水泥是全球产量最大的工业产品之一, 年产量约 40 亿 t, 其生产过程中的 CO₂ 排放约占全球总量的 7%~8%^[1]。水泥水化反应是混凝土凝结硬化的核心过程, 主导着其凝结时间、微观结构演变和力学性能发展^[2-4]; 在大体积混凝土中, 水化热积聚引起的温度梯度也是早期开裂的重要诱因^[5]。因此, 准确预测水化放热过程对水泥基材料体系的配合比设计与早龄期温控防裂均具有重要价值。然而, 水泥水化是工程科学中最复杂的物理化学过程之一^[6, 7]。随着低碳混凝土的发展, 辅助胶凝材料和化学外加剂的广泛应用使水化行为变得更加复杂^[8-10]。面对日趋复杂的胶凝材料体系, 传统的经验公式和简化解析模型已难以准确描述多组分水化放热行为。因此, 亟须建立能够从配合比组成出发, 直接预测水化放热曲线的通用模型。

当前, 辅助胶凝材料(Supplementary cementitious material, SCM) 已广泛用于替代水泥熟料以降低碳排放^[11]。据统计, 水泥中熟料占比已从 2003 年的 85% 降至 2010 年的 77%, 并有望进一步降至 71%^[12]。粉煤灰(Fly ash, FA)、粒化高炉矿渣(Ground granulated blast-furnace slag, GGBS)和硅灰(Silica fume, SF)是目

前常用的 SCM, 它们主要通过稀释填充、异相成核和火山灰反应等影响水化^[2, 11]。SCM 替代熟料后可提高有效水胶比, 为水化产物的沉淀提供了额外空间; 其颗粒表面也可作为 C-S-H 异相成核与生长的位点^[13]。FA 和 SF 消耗水泥水化产物 Ca(OH)₂ 生成额外的 C-S-H 凝胶, GGBS 则可在碱性环境下直接参与水化^[14]。同类 SCM 的反应活性也受化学组成影响, 如高钙 FA (Class C)因含有较多活性铝酸盐相而兼具火山灰活性和自硬化能力, 低钙 FA (Class F)则以火山灰反应为主且反应速率显著偏低^[14]。多组分胶凝体系中各组分间复杂的时变交互作用至今仍未被充分揭示, 制约着水化预测模型的发展。

过去 40 余年间, 学界发展了多种水化动力学模型, 如基于 Arrhenius 速率理论的 S-F 指数模型^[15]、考虑成核-相边界-扩散多阶段机制的 Krstulović-Dabić 模型^[16]和基于粒径分散性的 Knudsen 双曲线模型^[17]。它们物理意义明确, 但其参数需按配合比分别拟合, 缺乏由配合比特征到模型参数的直接映射, 无法对未知配合比进行先验预测。近年来兴起的机器学习(Machine learning, ML) 方法可直接从数据中学习配合比与放热行为之间的非线性映射, 为该问题提供了新思路。

收稿日期: 2026-05-09。 修订日期: 2026-06-04。

基金项目: 国家自然科学基金面上项目(52378278); 中国中铁股份有限公司科技研究开发计划项目(2023-重大-08)。

第一作者: 元 强(1981—), 男, 博士, 教授。

Received date: 2026-05-09. Revised date: 2026-06-04.

First author: YUAN Qiang (1981—), male, Ph.D., Professor.

E-mail: yuanqiang@csu.edu.cn

ML 可通过数据建立材料性能与组分特征之间的映射, 推动材料研发由“经验-试错”逐步转向“数据驱动”^[18, 19]。在水泥基材料领域, ML 已用于抗压强度预测、耐久性评价与配合比优化^[20-22]。在水化热预测方面, Han 等^[23]采用深度森林(Deep Forest)模型和水化理论引导的数据分割策略, 实现了含 FA 胶凝材料水化动力学和抗压强度的联合预测。

然而, 纯数据驱动方法仍存在一定局限。Willard 等^[24]指出, 即使是最先进的 ML 模型, 在科学应用中仍受限于大数据需求、物理一致性缺失和域外泛化不足三大瓶颈。Von Rueden 等^[25]也指出, 当训练数据不足时, 纯数据驱动方法的预测性能会明显下降。对于水化热预测而言, 等温量热试验周期长、成本高, 系统性数据通常有限, 导致模型容易产生不符合物理规律的结果。其根源在于数据驱动模型主要依赖于数据中的统计相关性进行拟合, 而没有充分利用已有的物理先验。

将科学知识融入 ML 已成为提升模型性能的重要方向。Karpatne 等^[26]提出“理论引导的数据科学”(TGDS)范式, 强调在数据驱动建模中引入科学一致性, 并总结了知识引导的数据增强、模型架构设计、损失函数约束、学习算法改进和输出后处理等融合方式。Von Rueden 等^[25]进一步从知识来源、

知识表示和集成方式对相关方法进行了分类。Reichstein 等^[27]在地球科学领域指出, 物理过程模型与数据驱动 ML 结合有助于提高模型在复杂系统中的泛化能力。材料领域也已有研究指出, 要将领域知识嵌入模型、算法和建模策略, 以缓解高维小样本和可解释性不足问题^[28]。总体来看, 将领域知识作为归纳偏置(Inductive bias)嵌入模型, 有助于在保留数据驱动模型非线性拟合能力的同时, 提高模型的物理一致性和小样本鲁棒性^[29]。但在水泥水化热预测中, 水化动力学方程作为物理先验的嵌入方式及其对精度和可解释性的影响仍缺乏系统研究。

基于此, 本工作提出物理驱动与数据修正协同的水化热预测模型, 如图 1 所示。该模型将 S-F、Krstulović-Dabić 和 Knudsen 方程嵌入神经网络前向传播路径。物理参数预测分支由配合比特征预测方程关键参数, 物理方程层据此计算理论放热量, 残差修正分支则补偿物理模型的系统偏差, 从而实现“物理驱动+数据修正”的端到端预测。本工作设计并对比 10 种模型变体, 涵盖 S-F 系列、KD 系列、简单方程和纯数据驱动基准模型, 系统评估不同物理先验对预测精度、泛化能力和物理一致性的影响, 并从物理参数和模型输出两个层面展开可解释性分析。

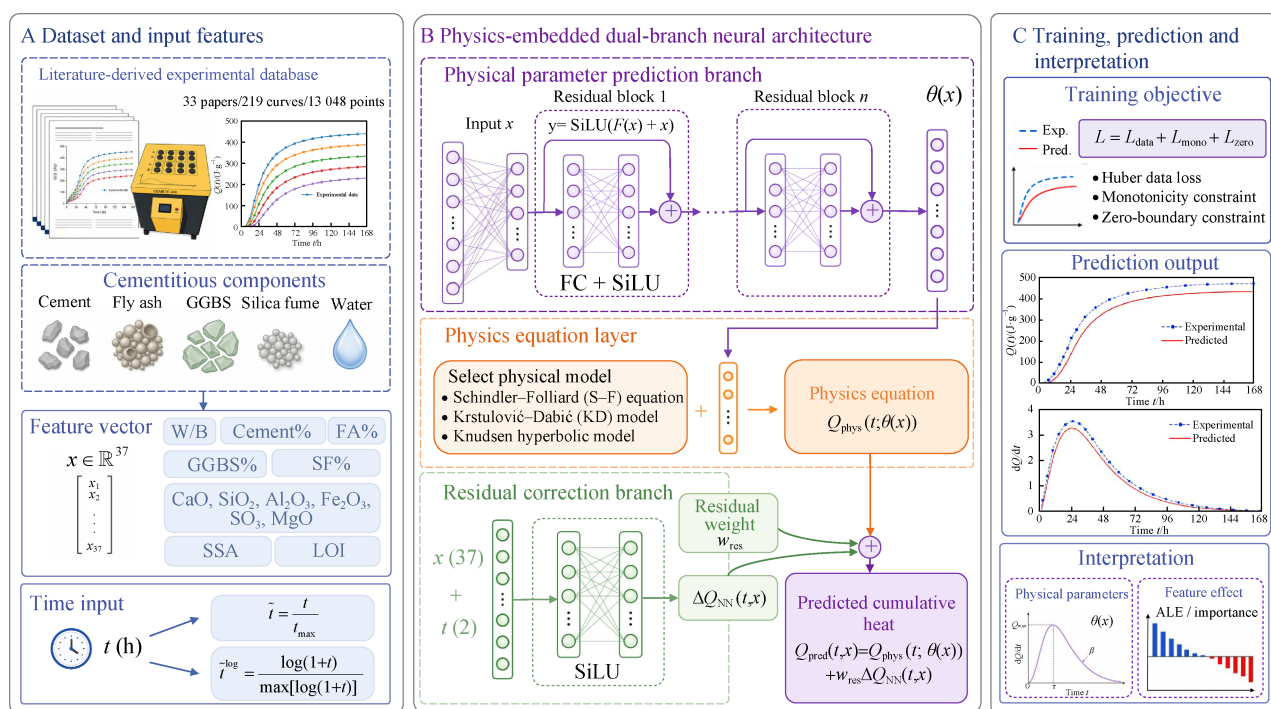


图 1 物理驱动与数据修正协同的水化热预测框架

Fig. 1 Physics-driven and data-correction synergistic framework for hydration heat prediction

1 数据集与模型训练

1.1 数据集

以已发表文献报道的等温量热试验数据为基础, 构建水化热预测数据集。主要收集对象为水泥基浆体及由普通硅酸盐水泥与粉煤灰、矿渣粉和硅灰组成的复合胶凝材料体系, 优先选取配合比、材料氧化物组成和物化性质信息较完整, 并具有完整累积水化热曲线的文献数据。采用 Origin 的图像数字化功能提取时间–累积放热量数据。据此整理得到的数据集涵盖 33 篇文献中的 219 条累积水化热曲线, 共计 13 048 个数据点。

模型输入为水泥基浆体的配合比特征和水化时间, 预测对应时刻的累积水化热。如表 1 所示, 配合比特征涵盖水胶比(W/B)、各组分质量占比(Cement、FA、GGBS、SF), 各组分的氧化物含量(CaO、SiO₂、Al₂O₃、Fe₂O₃、SO₃、MgO)、比表面

积(SSA)和烧失量(LOI), 共计 37 个静态特征。对于配合比中未掺入的组分, 其对应特征按零处理。

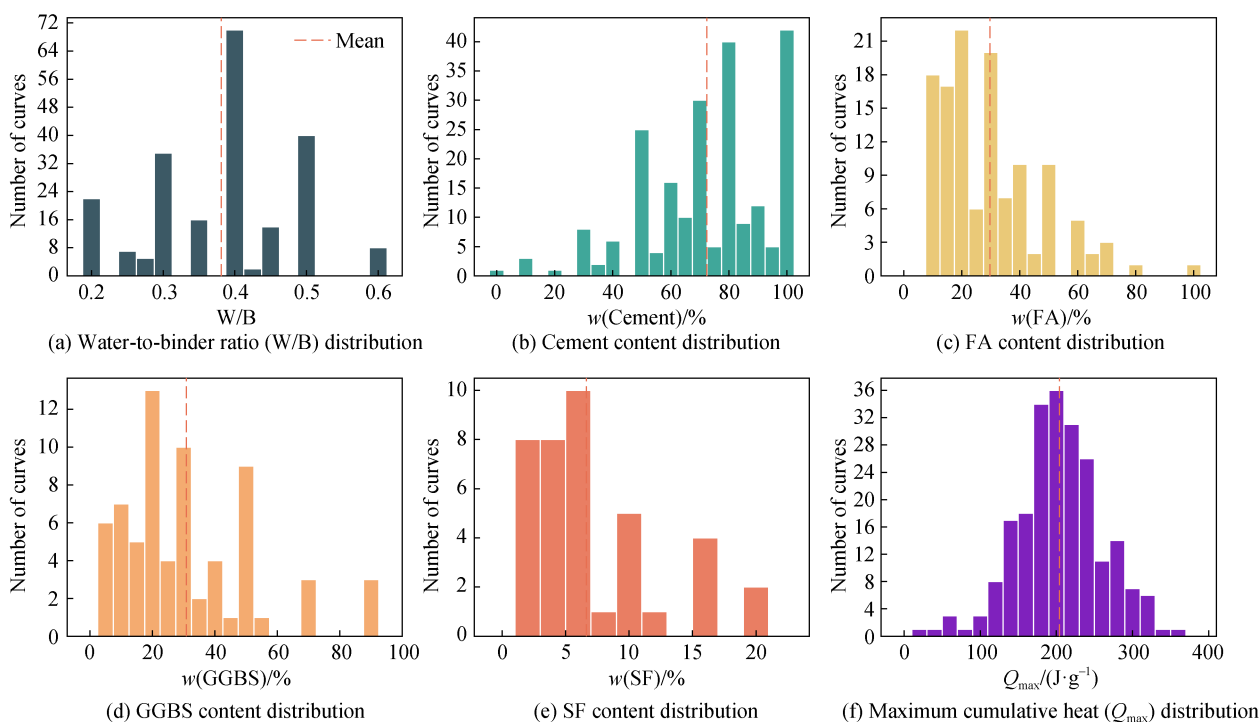
表 1 输入特征分类

Table 1 Input feature categories

Category	Features
Mix proportion	W/B, $w(\text{Cement})\%$, $w(\text{FA})\%$, $w(\text{GGBS})\%$, $w(\text{SF})\%$
Cement oxides	CaO, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , SO ₃ , MgO
FA oxides	CaO, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , SO ₃ , MgO
GGBS oxides	CaO, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , SO ₃ , MgO
SF oxides	CaO, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ , Fe ₂ O ₃ , SO ₃ , MgO
Physical properties	SSA(per component), LOI (per component)

w is mass fraction; SSA is specific surface area; LOI is loss on ignition.

数据集变量统计分布如图 2 所示, 数据集覆盖水胶比 0.20~0.60, 水泥质量占比 0%~100%, 粉煤灰替代率最高 98%, 矿渣粉最高 90%, 硅灰最高 20%。曲线最大累积水化热为 368 J/g, 均值为 204 J/g。



w is mass fraction.

图 2 数据集关键变量统计分布
Fig. 2 Statistical distribution of key dataset variables

1.2 模型架构

建立的模型架构由物理参数预测分支、物理方程层和残差修正分支 3 部分构成:

$$Q_{\text{pred}}(t, x) = Q_{\text{phys}}(t; \theta(x)) + w_{\text{res}} \Delta Q_{\text{NN}}(t, x) \quad (1)$$

式中: x 为 37 维配合比静态特征; t 为水化龄期; $\theta(x)$ 为由配合比特征预测得到的物理方程参数; Q_{phys} 为物理方程层根据 $\theta(x)$ 计算得到的理论累积水化热;

ΔQ_{NN} 为残差修正分支输出的局部修正量; w_{res} 为残差权重系数。

物理参数预测分支用于连接配合比特征与物理方程, 将水胶比、胶凝材料组成、氧化物组成、比表面积和烧失量等输入信息映射为方程参数。采用深度残差网络(Deep residual network, ResNet)构建该分支, 以表征配合比特征与方程参数之间的非线性关系。

ResNet 由 He 等^[30]提出, 其核心是在网络中引入残差连接。多层感知机网络中, 输入特征通常沿网络层级逐层变换后输出。残差块则在非线性变换主分支之外引入短接路径, 使输入特征能够直接参与输出计算, 并与主分支学习到的非线性映射相加, 再经激活函数得到输出:

$$y = \text{SiLU}(F(x) + x) \quad (2)$$

式中: x 为残差块的输入特征; $F(x)$ 为主分支提取到

的非线性特征; y 为残差块输出; SiLU 为激活函数。残差连接相当于为特征传递保留了一条直接通道, 使网络在保留原有信息的同时学习必要的修正量。相比常规多层感知机, 这种结构更容易训练, 也能降低深层网络中特征逐层退化的风险, 从而提高小样本条件下物理参数预测的稳定性。物理参数预测分支的结构如图 3 所示, 输入特征 x 经输入层和多个残差块提取非线性表征后, 输出物理参数 $\theta(x)$ 。

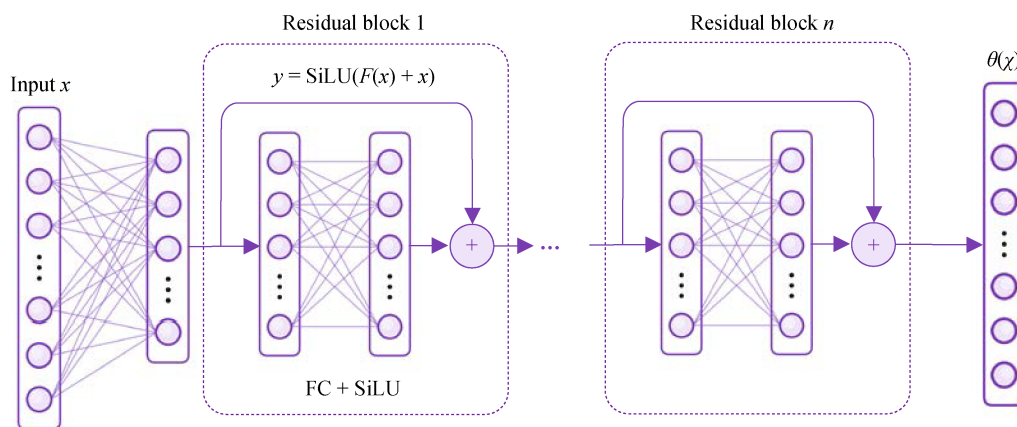


图 3 物理参数预测分支的残差网络结构示意图

Fig. 3 Schematic of the ResNet-based physical-parameter prediction branch

获得 $\theta(x)$ 后, 物理方程层不再对每个龄期点分别预测水化热, 而是将 $\theta(x)$ 代入方程, 直接生成整条理论累积放热曲线 Q_{phys} 。因此, 模型只需预测少量方程参数, 即可得到连续龄期上的水化热变化, 并为输出结果提供符合水化反应规律的曲线形态约束。与此同时, 考虑到实际文献数据受到材料来源、试验条件和数字化误差等因素影响, 仅依靠物理方程难以完全拟合所有曲线细节, 本工作进一步引入残差修正分支, 对物理方程输出进行局部修正。

残差修正分支采用 2 层全连接网络, 以 37 维配合比特征与 2 维时间编码为输入, 经含 SiLU 激活函数的 64 维隐藏层输出逐时间步的修正项 ΔQ_{NN} 。残差权重系数 w_{res} 由超参数搜索确定, 用于控制残差修正项对最终预测的贡献。最终预测由物理方程输出 Q_{phys} 与加权残差修正项 $w_{\text{res}}\Delta Q_{\text{NN}}$ 叠加得到。

在该模型架构下, 共设置 10 种候选模型。各模型在数据划分、超参数搜索和训练流程等方面保持一致, 仅在物理方程及其参数化方式上有所不同, 以使性能差异主要反映不同物理先验形式及其参数化方式的影响。

S-F 方程由 Schindler 等提出^[15], 以极限放热量

Q_{max} 、特征时间参数 τ 和形状参数 β 3 个参数描述累积水化热的时间演化:

$$Q(t) = Q_{\text{max}} \cdot \exp \left[- \left(\frac{\tau}{t} \right)^\beta \right] \quad (3)$$

式中: Q_{max} 为极限放热量; τ 为特征时间参数, 反映水化反应过程的时间尺度, 可理解为主要放热过程发生的时间范围; β 为形状参数, 用于表征水化曲线由诱导期向减速期过渡的陡缓程度。

S-F 方程通常将体系极限放热量视为单一常数 Q_{max} , 但复合胶凝材料中水泥熟料、FA、GGBS 和 SF 反应活性差异显著, 统一的 Q_{max} 难以表征各组分的水化放热潜能。为此, 提出 SFQmaxDecompNet 模型, 模型名中的 S-F、 Q_{max} decomposition 和 Net 分别对应 Schindler-Folliard 方程、极限放热量分解和神经网络。该模型通过神经网络预测各组分极限放热量 $Q_{\text{max},i}$, 再按组分质量分数加权得到体系总极限放热量 $Q_{\text{max,total}}$, 在 SFQmaxDecompNet 中对应 S-F 方程中的 Q_{max} , 并代入 S-F 方程预测累积水化热:

$$Q_{\text{max,total}} = \sum_i f_i \cdot Q_{\text{max},i} \quad (4)$$

式中: f_i 为第 i 种组分的质量分数; $Q_{\text{max},i}$ 为对应组分的极限放热量, 由模型根据配合比特征进行预测。

除 SFQmaxDecompNet 外, 还进一步构建了 2 种改进形式作为对照。SFBetaTNet 中的 BetaT 表示 time-dependent beta, 即形状参数 β 随时间变化。S-F 方程一般使用固定 β 描述整条水化热曲线, 而 SFBetaTNet 允许 β 随时间由早期值平滑过渡至后期值, 以表征水化曲线形状随龄期变化的过程:

$$\beta(t) = \beta_0 + \Delta\beta \cdot \sigma\left(\frac{t-t_s}{\gamma}\right) \quad (5)$$

式中: β_0 为早期初始形状参数; $\Delta\beta$ 为后期增量; t_s 为过渡半值时间; $\sigma(\cdot)$ 为 sigmoid 函数; γ 为平滑过渡参数, 控制 β 从 β_0 到 $\beta_0 + \Delta\beta$ 过渡的速率。

SFWresNet 中的 w_{res} 表示 residual weight, 即残差修正权重。该模型不使用固定残差权重, 而是让残差项的权重随时间变化, 使模型能够在不同水化龄期自适应调节物理方程与数据修正项的相对贡献:

$$w_{\text{res}}(t) = w_0 \cdot \left[1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau_w}\right) \right] \quad (6)$$

式中: w_0 为残差权重的渐近上界; τ_w 为权重由低值向渐近上界过渡的时间尺度。该形式使 w_{res} 早期较小、后期逐渐增大。这种形式主要是考虑到水化早期累积放热量较小, 残差权重不宜过大, 否则模型输出容易被残差项主导。随着龄期增加, 累积放热量逐渐增大, 再提高残差权重, 使残差分支更多参与中后期曲线修正^[31]。

KD 系列模型基于 Krstulović-Dabić 水化动力学理论构建^[16]。该理论将水泥水化划分为成核与晶体生长(Nucleation and growth, NG)、界面反应(Interface, I)和扩散控制(Diffusion, D) 3 个依次占据主导的控制阶段, 对应的动力学形式分别为

$$\alpha_{\text{NG}} = 1 - \exp(-(K_1 t)^n) \quad (7)$$

$$\alpha_{\text{I}} = 1 - (1 - K_2 t)^3 \quad (8)$$

$$\alpha_{\text{D}} = 1 - (1 - \sqrt{K_3 t})^3 \quad (9)$$

式中: K_1 、 K_2 、 K_3 分别为 NG、I、D 阶段的速率常数; n 为 Avrami 指数。在此基础上, 构造 3 种 KD 模型变体, 差异在于上述 3 种机制的组合方式。KD-A 采用乘法包络形式, 整体演化受较慢机制控制, 对应多机制并行约束的假设:

$$\alpha = \alpha_{\text{NG}} \cdot \alpha_{\text{I}} \cdot \alpha_{\text{D}} \quad (10)$$

KD-B 采用双峰叠加形式, 用于刻画复合胶凝体系中水泥早期水化与掺合料后期反应共同形成的多峰放热特征:

$$Q = Q_1 \alpha_{\text{NG}}(t) + Q_2 \alpha_{\text{D}}(t - t_{\text{lag}}) \quad (11)$$

式中: Q_1 和 Q_2 分别为主峰和次峰的放热量上限; t_{lag} 为掺合料反应相对于水泥早期水化主峰的滞后时间。

KD-C 则采用 sigmoid 软切换加权形式:

$$\alpha = w_1 \alpha_{\text{NG}} + w_2 \alpha_{\text{I}} + w_3 \alpha_{\text{D}} \quad (12)$$

式中: 权重 w_1 、 w_2 、 w_3 由 2 个过渡时间点 t_1 和 t_2 通过 sigmoid 函数确定, 实现主导机制在 NG、I、D 3 阶段之间的平滑切换。

此外, 引入 2 种简单方程作为对比。KnudsenNet 采用 Knudsen 双曲线模型^[17], FirstOrderNet 采用一阶动力学模型, 二者均以最简形式描述累积水化热随龄期增长趋于稳定的渐近过程。PureNN 则不含物理方程, 直接学习配合比特征、时间编码与累积水化热之间的映射。其深度残差网络架构、残差修正分支、超参数搜索空间与训练流程均与其他候选模型保持一致。10 种候选模型的汇总见表 2。

表 2 10 种候选模型
Table 2 Ten candidate models

Category	Model	Equation	Params
S-F series	SFBaselineNet	$Q = Q_{\text{max}} \exp[-(t/\tau)^n]$	3
	SFQmaxDecompNet	$Q_{\text{max}} = \sum_i Q_{\text{max},i}$	6
	SFBetaTNet	$\beta(t) = \beta_0 + \Delta\beta \cdot \sigma[(t-t_s)/\gamma]$	6
	SFWresNet	$w_{\text{res}}(t) = w_0 (1 - e^{-t/\tau_w})$	5
KD series	KD-A	$\alpha = \alpha_{\text{NG}} \cdot \alpha_{\text{I}} \cdot \alpha_{\text{D}}$	5
	KD-B	$Q = Q_1 \cdot \alpha_{\text{NG}}(t) + Q_2 \cdot \alpha_{\text{D}}(t - t_{\text{lag}})$	6
	KD-C	$\alpha = w_1 \alpha_{\text{NG}} + w_2 \alpha_{\text{I}} + w_3 \alpha_{\text{D}}$	7
Classical	KnudsenNet	$Q = Q_{\infty} \cdot t / (t + t_{50})$	2
	FirstOrderNet	$Q = Q_{\infty} [1 - \exp(-kt)]$	2
Data-driven	PureNN	Data-driven mapping: (features, t) $\rightarrow Q$	

1.3 训练策略

1.3.1 数据划分与预处理 为避免同一配合比在不同龄期的数据点同时出现在训练集和测试集中而导致信息泄露, 采用 GroupShuffleSplit 策略, 将 219 条曲线按 70%、15%、15% 的比例随机划分为训练集、验证集和测试集, 并确保同一配合比对应的所有时间点仅出现在同一子集中。

由于各特征的量纲与数量级差异显著, 训练前采用 Z-score 标准化对静态配合比特征进行变换:

$$x'_i = \frac{x_i - \mu_i}{\sigma_i} \quad (13)$$

式中: x_i 为第 i 个特征的原始值; μ_i 和 σ_i 分别为该特征在训练集上的均值和标准差。标准化参数仅由训练集拟合得到, 并用于验证集和测试集的变换, 防

止信息泄露。

1.3.2 损失函数 总损失函数由数据拟合项 L_{data} 、单调性约束 L_{mono} 和零值约束 L_{zero} 3 项共同构成:

$$L = L_{\text{data}} + \lambda_{\text{mono}} L_{\text{mono}} + \lambda_{\text{zero}} L_{\text{zero}} \quad (14)$$

式中: L_{data} 用于度量模型预测值与实测累积水化热之间的误差; L_{mono} 用于约束累积水化热随龄期单调增长; L_{zero} 用于约束模型在 $t=0$ 时的预测值接近零。本工作中 λ_{mono} 和 λ_{zero} 均取 1.0。

数据拟合项采用 Huber 损失:

$$L_{\text{data}} = \frac{1}{N_d} \sum_i L_{\delta}(Q_{\text{pred},i} - Q_{\text{obs},i}), \quad L_{\delta}(a) = \begin{cases} \frac{a^2}{2\delta}, & |a| \leq \delta \\ |a| - \frac{\delta}{2}, & |a| > \delta \end{cases} \quad (15)$$

式中: $Q_{\text{pred},i}$ 和 $Q_{\text{obs},i}$ 分别为第 i 个有效数据点的预测值和实测值; N_d 为有效数据点数量; δ 为平方误差与绝对误差的切换阈值。本工作取 $\delta=5$ J/g, 约为数据集平均累积放热量的 2%, 用于兼顾对数据点的精确拟合与对异常点的鲁棒性。

单调性约束定义为

$$L_{\text{mono}} = \frac{1}{N_m} \sum_{j=1}^{N_m} \text{ReLU} \left[-\frac{Q_{\text{pred}}(t_{j+1}) - Q_{\text{pred}}(t_j)}{t_{j+1} - t_j} \right] \quad (16)$$

式中: N_m 为有效相邻时间间隔数量; t_j 和 t_{j+1} 为相邻 2 个有效龄期; $Q_{\text{pred}}(t_j)$ 为模型在 t_j 处的预测值; ReLU 为修正线性单元函数。该项仅对预测曲线中出现负增长的部分施加惩罚, 从而减少累积水化热随时间下降的非物理现象。

零值约束定义为

$$L_{\text{zero}} = \frac{1}{N_b} \sum_{k=1}^{N_b} [Q_{\text{pred},k}(t=0)]^2 \quad (17)$$

式中: N_b 为批次内样本数; $Q_{\text{pred},k}(t=0)$ 为第 k 条曲线在初始时刻的预测值。由于累积水化热在初始时刻应为零, 该项用于约束模型满足水化热曲线的初始边界条件。由于不同样本的时间序列长度不一致, 训练时将同一批次内的曲线零填充至等长, 并通过掩码(mask)排除填充位置对损失和梯度的影响。

1.3.3 超参数搜索 采用 Optuna 框架进行贝叶斯超参数优化。搜索采用 TPE(Tree-structured parzen estimator)采样器。搜索空间如表 3 所示, 每个模型独立执行 80 个实验, 每次训练 300 轮, 以验证集各曲线 R^2 均值为优化目标。与基于单个散点的全局拟合 R^2 相比, 该指标能够更直接地反映模型对各配合

比累积水化热曲线整体形状的刻画能力。

表 3 超参数搜索空间

Hyperparameter	Type	Range
Hidden dim	Categorical	{128, 192, 256, 320, 512}
Number of residual blocks	Categorical	{2, 3, 4, 5}
Learning rate	Log-uniform	$[2 \times 10^{-4}, 0.01]$
Dropout	Uniform	[0.02, 0.4]
Weight decay	Log-uniform	$[10^{-7}, 0.5]$
Residual weight w_{res}	Uniform	[0.01, 0.5]

1.3.4 训练流程 第 1 阶段利用训练集和验证集进行 Optuna 搜索, 确定最优超参数。第 2 阶段将训练集与验证集合并, 采用最优超参数训练最终模型。最终训练最多进行 600 轮, 每 10 轮计算一次完整训练集上的损失; 若连续 20 次评估训练损失均无下降, 则提前终止训练。优化器采用 AdamW, 并以余弦退火策略将学习率逐步衰减至 10^{-6} 。测试集在超参数优化和模型训练中保持独立, 仅用于最终评估。

2 模型性能评估

2.1 模型预测性能对比

各候选模型均在上述统一实验设置下完成训练, 表 4 给出了 10 种候选模型的预测性能。评价时, 除采用测试集各曲线 R^2 均值作为核心指标外, 还结合泛化间隙(Gap = Train R^2 - Test R^2)、高精度曲线占比(≥ 0.9)及最差曲线 R^2 (min R^2)作为辅助指标, 对模型的预测精度、泛化能力和稳健性进行综合评估。

表 4 10 种候选模型预测性能对比

Table 4 Prediction performance comparison of ten candidate models

No.	Model	Params	Train R^2	Test R^2	Gap	$\geq 0.9/\%$	min R^2
1	SFQmaxDecompNet	6	0.980	0.962	0.018	94	0.777
2	KD-B	6	0.970	0.937	0.033	76	0.694
3	SFBetaTNet	6	0.971	0.930	0.041	82	0.303
4	SFWresNet	5	0.981	0.912	0.069	82	0.012
5	KD-A	5	0.975	0.904	0.071	82	-0.174
6	KnudsenNet	2	0.941	0.902	0.039	70	0.582
7	SFBaselineNet	3	0.968	0.897	0.072	82	-0.349
8	PureNN		0.944	0.874	0.070	70	0.189
9	KD-C	7	0.924	0.868	0.056	82	-0.642
10	FirstOrderNet	2	0.912	0.867	0.046	58	0.441

R^2 is coefficient of determination; $\geq 0.9/\%$ is the percentage of test curves with R^2 not less than 0.9; min R^2 is the minimum curve-level R^2 .

由表 4 可知, SFQmaxDecompNet 综合表现最优, Test R^2 为 0.962, Gap 为 0.018, 高精度曲线占比 94%, 最差曲线 R^2 为 0.777, 预测精度、泛化能力和稳健性均优于其他模型。SFBaselineNet 的 Test R^2 为 0.897, 表明该方程本身已具备较强的预测能力。SFBetaTNet 和 SFWresNet 的 Test R^2 分别提高至 0.930 和 0.912, 但前者最差曲线 R^2 仅 0.303, 后者 Gap 达 0.069, 二者在稳健性或泛化能力上仍不及 SFQmaxDecompNet。

纯数据驱动的 PureNN 的 Test R^2 为 0.874, 低于多数物理方程嵌入模型, 说明仅依赖数据拟合难以准确刻画水化热曲线。KD 系列中, KD-B 与 KD-A 的 Test R^2 分别为 0.937 和 0.904, 预测精度较好。而 KD-C 包含最多的 7 个物理参数, Test R^2 却仅为 0.868, 低于参数更少的 KD-B、KD-A 和 KnudsenNet。可见模型性能并不由参数数量简单决定, 物理方程形式及参数化方式是否与当前数据中的水化热曲线

特征相匹配, 同样是影响模型表现的重要因素。

表 5 为各模型最优的超参数。SFQmaxDecompNet 采用 192 维隐藏层和 3 层残差块, w_{res} 为 0.292。KD-A 和 KD-B 的模型权重衰减系数(Weight decay)较大, 说明多参数多机制模型需要更强正则化以抑制过拟合。PureNN 虽采用了最大的网络容量(512 维、5 层), 预测表现却较差, 进一步表明在缺乏物理先验约束的条件下, 单纯增加网络规模难以有效提升模型性能, 也难以弥补物理信息缺失所带来的表达不足。

2.2 模型预测效果验证

图 4 为 SFQmaxDecompNet 与 PureNN 在测试集上的预测值与实测值对比。SFQmaxDecompNet 数据点主要分布于 1:1 理想线附近, 绝大多数点落在误差带内; PureNN 在中等水化热区域明显偏离理想线, 离散程度显著增大。两种模型在低水化热区域均较为离散, 可能与该区域放热量绝对值小、图形数字化误差被放大有关, 并不完全反映模型预测能力。

表 5 10 种候选模型最优超参数
Table 5 Best hyperparameters of ten candidate models

No.	Model	Hidden dim	Residual blocks	Learning rate	Dropout	Weight decay	w_{res}
1	SFQmaxDecompNet	192	3	4.10×10^{-3}	0.081	2.28×10^{-4}	0.292
2	KD-B	320	4	1.38×10^{-3}	0.048	2.69×10^{-1}	0.216
3	SFBetaTNet	320	5	2.63×10^{-3}	0.039	1.61×10^{-5}	0.058
4	SFWresNet	128	5	3.99×10^{-3}	0.041	2.97×10^{-4}	
5	KD-A	192	4	3.19×10^{-3}	0.028	3.14×10^{-1}	0.418
6	KnudsenNet	320	2	3.15×10^{-3}	0.091	6.31×10^{-4}	0.363
7	SFBaselineNet	128	3	6.27×10^{-3}	0.094	7.74×10^{-3}	0.303
8	PureNN	512	5	4.73×10^{-3}	0.136	4.51×10^{-7}	0.345
9	KD-C	256	4	2.51×10^{-3}	0.035	1.58×10^{-4}	0.371
10	FirstOrderNet	192	4	2.52×10^{-3}	0.061	1.31×10^{-4}	0.249

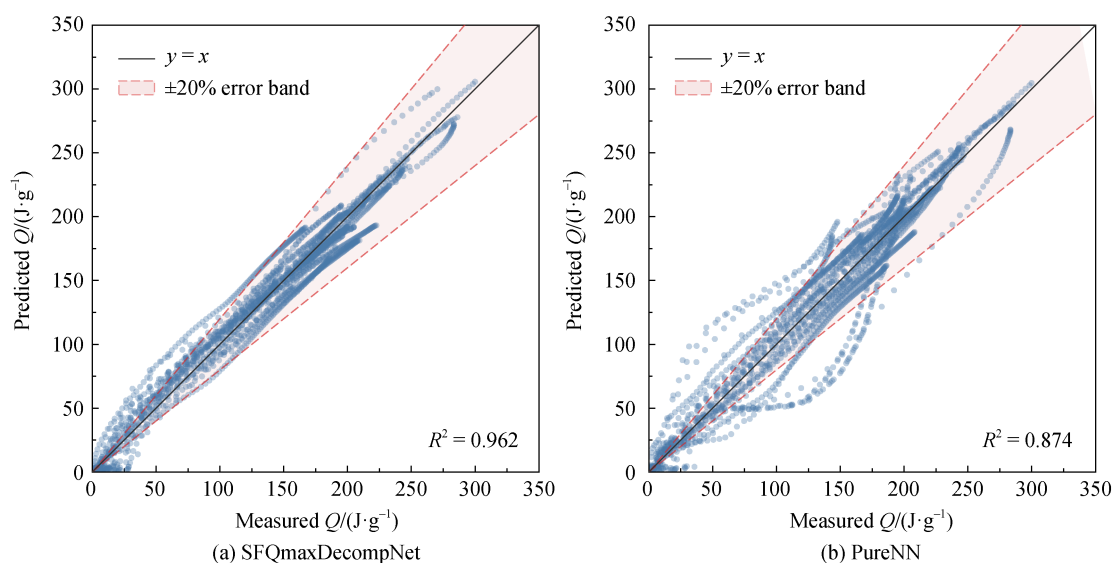


图 4 测试集预测值与实测值回归对比图

Fig. 4 Regression comparison between predicted and measured cumulative hydration heat on the test set

图5进一步展示了2个模型在测试集曲线上的预测效果。按SFQmaxDecompNet曲线 R^2 排序,选取最优($R^2=0.996$)、中位($R^2=0.980$)和最差($R^2=0.777$)3条曲线。图5上排为累积放热量 $Q(t)$,下排为对应的水化放热速率 dQ/dt ,右轴标注残差修正分支占总预测值的比例。

SFQmaxDecompNet的 $Q(t)$ 预测曲线在最优和

中位样本上与实测曲线高度吻合,在最差样本上仍能捕捉总体趋势,但存在明显偏差。其中物理分支 Q_{phys} 能够独立刻画累积水化热演化的主要趋势,而残差修正分支仅在物理方程难以精确描述的局部区间提供有限修正。残差比例在水化中后期普遍低于5%,模型的预测以物理方程为主导,残差网络仅承担局部修正作用。

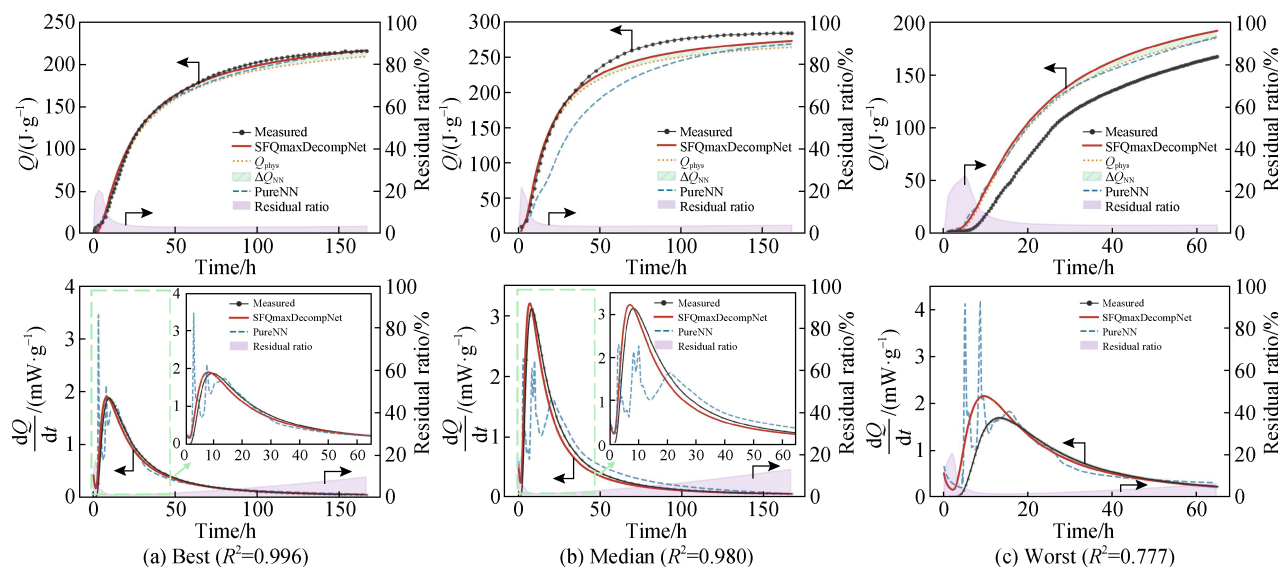


图5 测试集曲线预测效果
Fig. 5 Prediction results for test curves

dQ/dt 由模型对 $Q(t)$ 自动微分得到。SFQmaxDecompNet 在峰位、峰高和衰减趋势上均与实测速率曲线吻合良好; PureNN 则表现出明显的非物理振荡,尤其在诱导期末至加速期出现剧烈的尖峰波动。这一现象原因在于 PureNN 完全由神经网络拟合,缺乏物理方程提供的平滑函数形式约束。虽然其 $Q(t)$ 在散点层面的累积水化热误差尚可接受,但网络对训练数据的局部过拟合会在 $Q(t)$ 中引入幅度极小的非单调波动,这些在累积水化热图中几乎不可察觉的波动经微分运算后被急剧放大,形成不合理的速率尖峰。相反, S-F 方程则可自然生成平滑的钟形 dQ/dt 轮廓,在导数层面抑制虚假振荡,这正是物理先验对模型输出提供正则化约束的直接体现。

2.3 模型数据效率分析

在模型中加入物理先验知识约束引导模块的首要目标是降低模型对训练数据规模的依赖。为此,本节设计了不同数据规模下的对比实验,分别使用训练集中 100%、70%、50% 和 30% 的配合比样本曲线对 SFQmaxDecompNet 与 PureNN 进行训练,并

在固定的测试集上比较两者的泛化性能。对于 70%、50% 和 30% 3 种数据比例,均采用 10 组不同随机种子独立进行数据采样,以评估模型的平均性能及其稳健性。

如图 6 所示,训练数据减少时 2 种模型 R^2 均下降,但 SFQmaxDecompNet 的下降幅度明显小于 PureNN。100% 数据下二者 R^2 分别为 0.962 和 0.874,差距 0.088; 70% 和 50% 数据下差距扩大至 0.130 和 0.180; 当训练数据仅保留 30% 时, SFQmaxDecompNet R^2 为 0.571, 而 PureNN 则下降至 0.035, 近乎失效,差距达到 0.536。SFQmaxDecompNet 在 30% 数据比例下仅 45 条曲线条件下的平均性能仍优于 PureNN 在 50% 数据条件下的表现,说明物理先验有效降低了模型对样本数量的需求。

图 6 中随机种子的离散分布也反映了模型稳健性的变化。随着训练数据规模的减少,两种模型的标准差均有所增大。在 50% 数据条件下, SFQmaxDecompNet 的标准差为 0.091, 与 PureNN 的 0.096 差异较小。当数据进一步降至 30% 时, PureNN 标准差骤增至 0.324, 部分结果甚至出现接

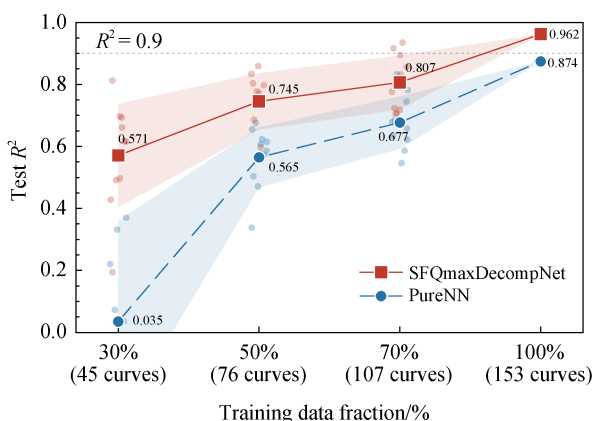


图6 不同训练数据比例下 SFQmaxDecompNet 与 PureNN 的测试 R^2 对比

Fig. 6 Comparison of test R^2 between SFQmaxDecompNet and PureNN under different training data fractions

近零或负值的 R^2 , 表现出明显的规模依赖性。

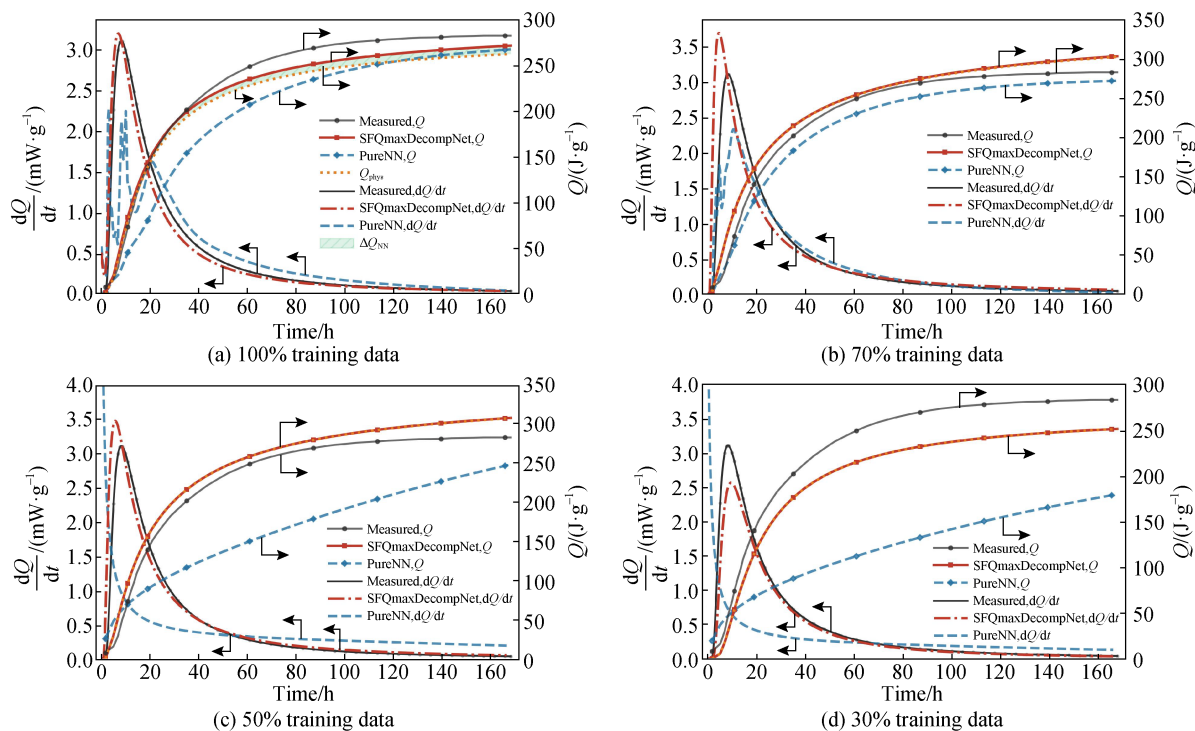


图7 不同训练数据比例下中位样本的预测效果对比

Fig. 7 Prediction comparison of a median-performing sample under different training data fractions

图7中的分解结果显示, 训练数据规模会改变物理分支与残差分支的相对贡献。在100%数据条件下, ΔQ_{NN} 能提供可辨识的局部修正; 当训练数据减少时, Q_{phys} 与总输出几乎重合, 模型完全由物理分支主导。这说明残差网络可在数据充足时捕捉物理方程难以描述的局部偏差从而提高预测精度, 而物理方程可在数据不足时作为结构性先验主导预测

当样本数量低于一定阈值时, 其预测稳定性和泛化性能将明显恶化。而 SFQmaxDecompNet 在相同条件下的标准差为 0.166, 说明物理先验在样本数量有限时能够为模型提供结构性约束, 减弱其对样本数量的依赖。

为直观比较 2 种模型在不同数据规模下的预测行为差异, 图7以测试集中 R^2 的中位曲线为例, 给出了在不同训练数据比例下的累积放热量 $Q(t)$ 和放热速率 dQ/dt 预测曲线。

如图7所示, 100%和70%数据下, SFQmaxDecompNet 对 $Q(t)$ 和 dQ/dt 均能实现较好的拟合效果, PureNN 虽能大致刻画 $Q(t)$ 的整体趋势, 但 dQ/dt 出现明显振荡。数据降至50%和30%时, SFQmaxDecompNet 仍能较准确预测 $Q(t)$ 的曲线形态和 dQ/dt 的主峰位置, 而 PureNN 对累积放热量和放热速率的预测均已明显失真, $Q(t)$ 被系统性低估。

过程抑制过拟合并保持预测稳定。

不同文献的材料来源、试验条件和数字化误差等因素可能存在差异。为检验模型是否对某一来源产生系统性偏移, 本工作将测试集33条曲线按文献来源进行分组, 并统计各来源的曲线平均 R^2 和平均偏差, 结果如图8所示。其中, 平均偏差定义为预测累积水化热与实测累积水化热之差的平均值。

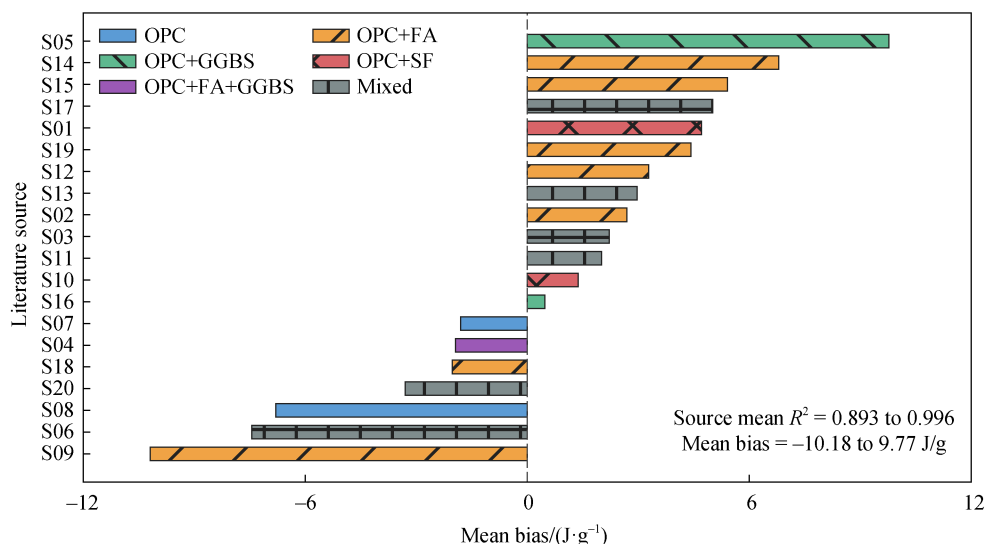


图 8 不同文献来源的平均预测偏差

Fig. 8 Mean prediction bias grouped by literature source

按文献来源统计,测试集曲线来自 20 个文献来源。结果表明, SFQmaxDecompNet 在各来源上的曲线平均 R^2 为 0.893~0.996, 平均偏差为 -10.18~9.77 J/g, 相对最大累积放热量的偏差为 -6.46%~5.08%。各文献来源的平均偏差均匀分布于零线两侧, 未观察到某一文献来源相对于其他来源出现明显的系统性偏离。

按胶凝材料体系统计, OPC、OPC+FA、OPC+GGBS、OPC+FA+GGBS 和 OPC+SF 体系的 R^2 分别为 0.982、0.957、0.958、0.955 和 0.971, 平均偏差范围为 -3.31~3.60 J/g。上述结果表明, 尽管不同文献在材料来源、试验条件和数字化误差等方面可能存在差异, 模型在不同来源和不同胶凝体系上均保持了较稳定的预测能力。

3 模型可解释性分析

3.1 物理参数可解释性分析

SFQmaxDecompNet 根据配合比特征预测 S-F 方程的 $Q_{\max}$ 、 τ 和 β 。为检验其物理合理性, 按胶凝

材料组成对 219 条曲线进行分组统计。排除 1 条不含水泥的纯 FA+SF 配合比后, 其余 218 条曲线划分为 7 种配比组合。采用 Kruskal-Wallis 检验评估各参数在不同配比组合间的整体差异, 再以纯水泥组 OPC 为参照, 采用 Dunn 事后检验并结合 Holm 校正进行两两比较。

由表 6~表 8 可知, 3 个参数的组间差异并不相同。 $Q_{\max}$ 整体差异显著, 但各组与 OPC 相比均未达到校正后显著性水平。 τ 差异最强, 所有含 GGBS 组均显著高于 OPC, 表明矿渣会延长水化放热特征时间, 使主要放热过程整体后移。 β 也存在显著差异, 其中 OPC+GGBS 组低于 OPC, 表明其放热过程更分散, 主峰后的衰减过程更平缓。OPC+SF 组 β 较高, 但该组样本量较小且 W/B 中位数仅为 0.2, 因此该结果更应理解为低 W/B 与 SF 共同作用下的统计现象, 而不宜单独归因于 SF 本身。

为进一步分析单一组分掺量连续变化时的参数响应及其与 W/B 之间的交互关系, 以各组分质量分

表 6 不同配比组合下 SFQmaxDecompNet 模型预测的极限放热量 $Q_{\max}$ 统计Table 6 Statistical summary of maximum heat release ($Q_{\max}$) identified by SFQmaxDecompNet for different binder compositions

Binder composition	n	Median	Mean	Std	IQR	p (Holm)
OPC	42	237.4	241.2	63.7	[202, 272]	Ref
OPC+FA	82	202.4	228.7	91.4	[163, 267]	0.892
OPC+GGBS	37	240.8	246.4	54.4	[224, 274]	1.000
OPC+SF	16	191.1	225.7	88.8	[176, 217]	1.000
OPC+FA+GGBS	19	199.0	244.3	94.9	[170, 316]	1.000
OPC+FA+SF	10	174.6	159.5	107.5	[59, 219]	0.189
OPC+FA+GGBS+SF	12	215.7	220.4	10.1	[213, 229]	1.000

Kruskal-Wallis test: $H = 14.95$, $p = 0.021$. Post-hoc: Dunn's test with Holm correction vs. OPC (ref).

表 7 不同配比组合下 SFQmaxDecompNet 模型预测的特征时间参数 τ 统计

Table 7 Statistical summary of characteristic time parameter (τ) identified by SFQmaxDecompNet for different binder compositions

Binder composition	<i>n</i>	Median	Mean	Std	IQR	<i>p</i> (Holm)
OPC	42	13.1	13.7	3.7	[11.0, 15.5]	Ref
OPC+FA	82	15.6	15.6	4.9	[12.6, 17.7]	0.141
OPC+GGBS	37	18.9	19.9	5.4	[16.2, 23.3]	<0.001***
OPC+SF	16	14.4	14.7	3.7	[12.3, 15.6]	1.000
OPC+FA+GGBS	19	22.3	23.4	9.1	[15.6, 30.3]	<0.001***
OPC+FA+SF	10	17.3	19.6	8.1	[14.5, 25.4]	0.126
OPC+FA+GGBS+SF	12	18.0	18.0	0.3	[17.7, 18.2]	0.003**

Kruskal–Wallis test: $H = 49.16$, $p = 6.93 \times 10^{-9}$. Post-hoc: Dunn's test with Holm correction vs. OPC (ref). ** means $p < 0.01$, *** means $p < 0.001$.

表 8 不同配比组合下 SFQmaxDecompNet 模型预测的形状参数 β 统计

Table 8 Statistical summary of shape parameter (β) identified by SFQmaxDecompNet for different binder compositions

Binder composition	<i>n</i>	Median	Mean	Std	IQR	<i>p</i> (Holm)
OPC	42	1.19	1.27	0.39	[1.02, 1.41]	Ref
OPC+FA	82	1.14	1.16	0.24	[0.96, 1.31]	1.000
OPC+GGBS	37	0.93	0.94	0.15	[0.83, 1.03]	<0.001***
OPC+SF	16	2.32	2.10	0.86	[1.35, 2.87]	0.348
OPC+FA+GGBS	19	0.97	1.05	0.35	[0.70, 1.27]	0.213
OPC+FA+SF	10	1.12	1.10	0.25	[0.90, 1.28]	1.000
OPC+FA+GGBS+SF	12	0.97	0.97	0.03	[0.95, 1.00]	0.075

Kruskal–Wallis test: $H = 46.06$, $p = 2.88 \times 10^{-8}$. Post-hoc: Dunn's test with Holm correction vs. OPC (ref). *** means $p < 0.001$.

数为横轴、W/B 为纵轴，绘制 $Q_{\max}$ 、 τ 和 β 的等值线图(图 9~图 11)。图中灰色空心圆表示数据集样本位置，白色区域为数据支撑不足的区域。

如图 9 所示， $Q_{\max}$ 受组分掺量和 W/B 共同影响。水泥含量在低 W/B 下主要呈正向作用；当 W/B 较

高时，等值线在水泥含量约 35% 附近出现高值区域，该现象表明当水分充足时，适量掺合料的加入可提升体系的放热潜力。FA 的影响随 W/B 改变，低 W/B 下以降低放热量为主，高 W/B 下，FA 掺量增加反而对应更高的 $Q_{\max}$ ，反映水分充足时 FA 的

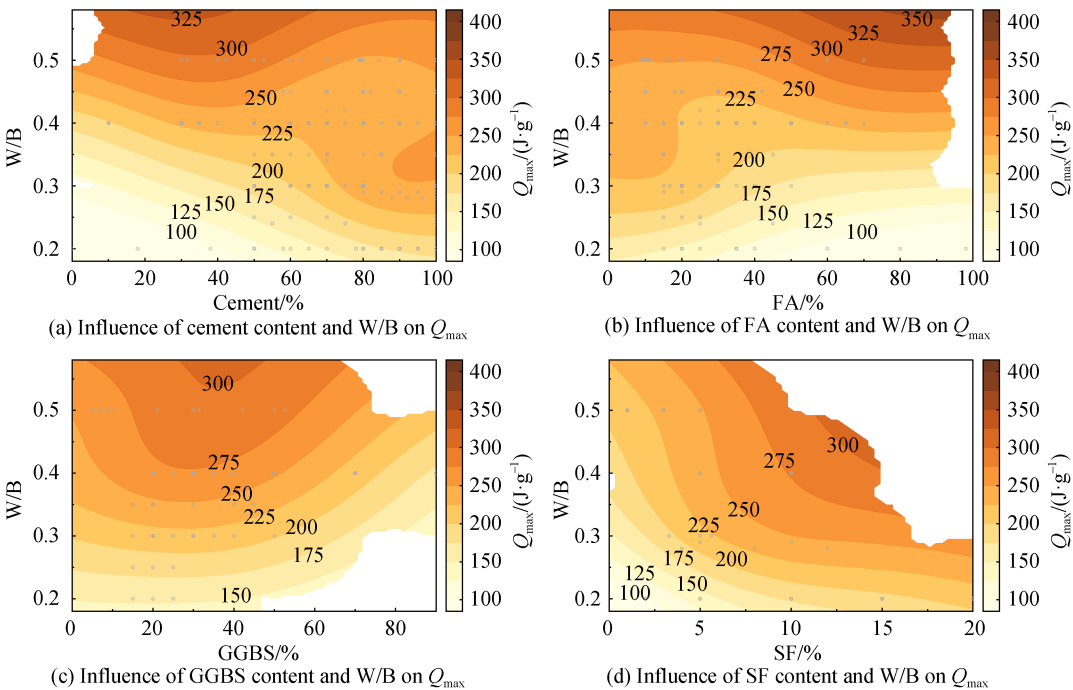


图 9 不同组分掺量和 W/B 对 $Q_{\max}$ 的等值线响应

Fig. 9 Contour response of $Q_{\max}$ to each component content and W/B

后期火山灰反应更充分,从而提高体系的长期放热量^[32]。GGBS 对应的 $Q_{\max}$ 呈非单调变化,在约 20%~40%掺量附近出现较高值,继续增加后反而下降。SF 在 0~20%范围内整体表现为正向响应,其高比表面积和火山灰活性有助于提高体系放热潜力。

如图 10 所示, τ 对掺合料类型较为敏感,反映出不同体系水化放热过程的时间尺度差异。水泥含量增加使 τ 由约 30 h 降至 15 h,且这一趋势受 W/B

影响很小。换言之,掺合料替代水泥会使主要放热过程后移。FA 掺量增加则使 τ 升高,低 W/B 条件下延缓效应更明显。这可能是因为低 W/B 限制了水泥早期水化和离子扩散, $\text{Ca}(\text{OH})_2$ 生成与迁移均受到抑制,从而推迟了 FA 的火山灰反应^[33]。GGBS 掺量增加同样使 τ 增大,等值线从约 12 h 过渡至 33 h。SF 掺量增加则使 τ 降低,表明硅灰可促进早期反应,使水化放热过程提前。

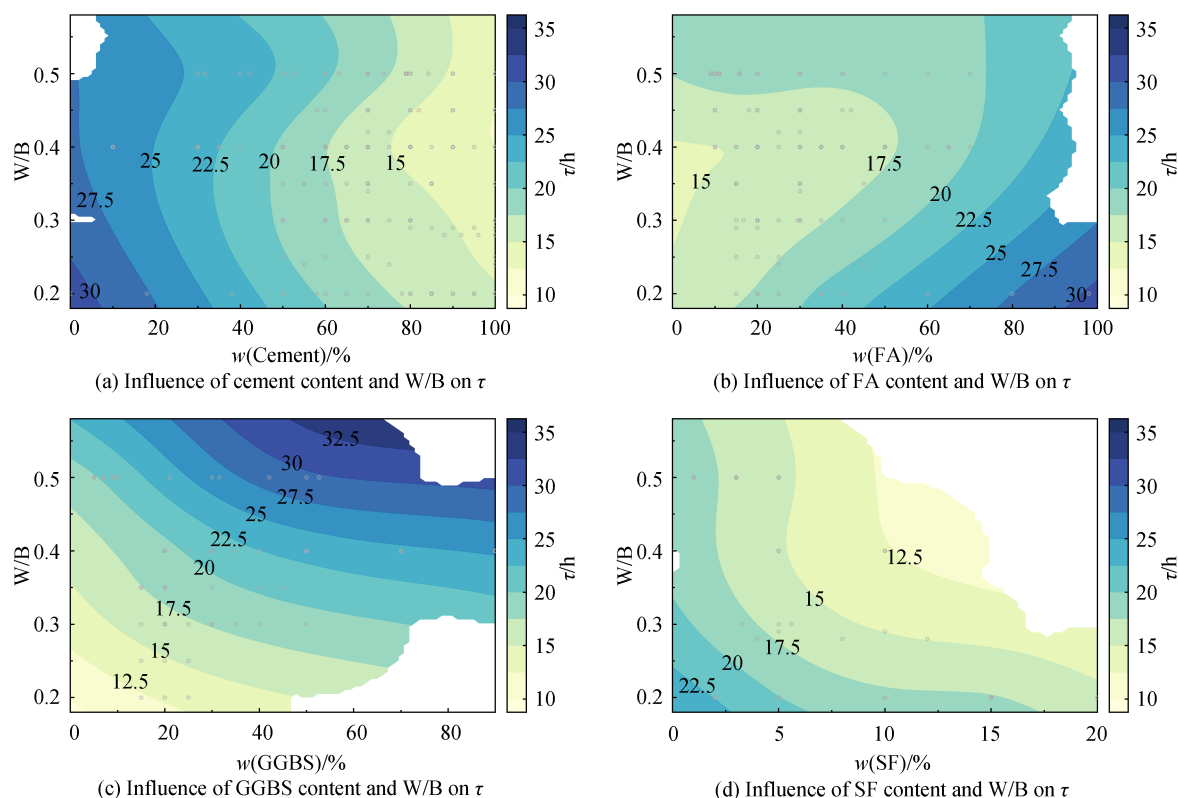


图 10 不同组分掺量和 W/B 对 τ 的等值线响应

Fig. 10 Contour response of τ to each component content and W/B

如图 11 所示, β 主要受 W/B 控制,低 W/B 区域数值较高,表明水分受限时放热过程更为集中。水泥含量增加使 β 升高,低 W/B 时可由约 1.2 升至 2.2,而高 W/B 时仅由约 0.8 升至 1.0。FA 的影响较弱,多数区域在 1.0~1.4 之间。GGBS 使 β 略有降低,表明其可能使水化放热过程在时间上更为分散。SF 的影响更集中于低 W/B 区域, β 可升至 2.6 以上,表明低 W/B 与硅灰共同作用会使放热过程更加紧凑。

综上,模型预测的 3 个物理参数具有明确的物理意义。其中, $Q_{\max}$ 表征体系的总放热潜力,受组分活性和水分条件共同影响; τ 反映水化放热时间尺度,能够区分 GGBS、FA 的延缓效应和 SF 的早期促进效应; β 表征放热过程的集中程度,主要受 W/B

控制。这些参数均为模型识别所得,其物理解释主要基于参数变化趋势与已有水化规律之间的一致性。这些规律并未作为显式机理规则输入模型,而是由模型从数据中学习得到。这表明 SFQmaxDecompNet 兼具较高的预测精度和参数可解释性。

3.2 模型输出可解释性分析

第 3.1 节从物理参数层面验证了模型可解释性。本节进一步面向实际预测输出,剖析各输入特征对模型输出的直接影响及其时间演化规律。采用置换重要性(Permutation importance)评估各输入特征对整体精度的影响,并采用累积局部效应(Accumulated local effects, ALE)分析关键特征对 Q 和 dQ/dt 的时间依赖响应。

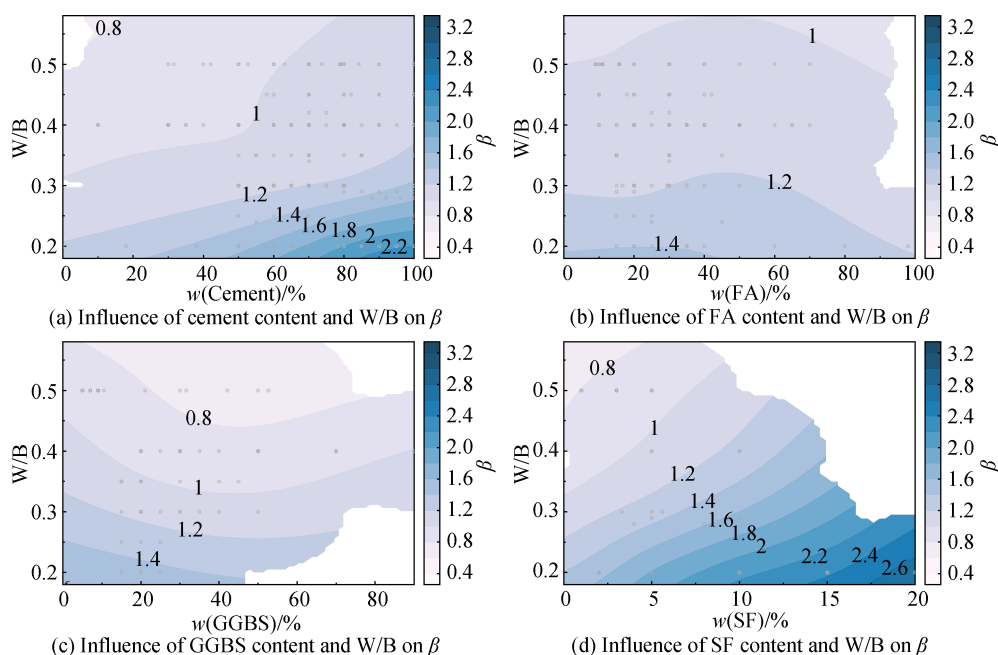
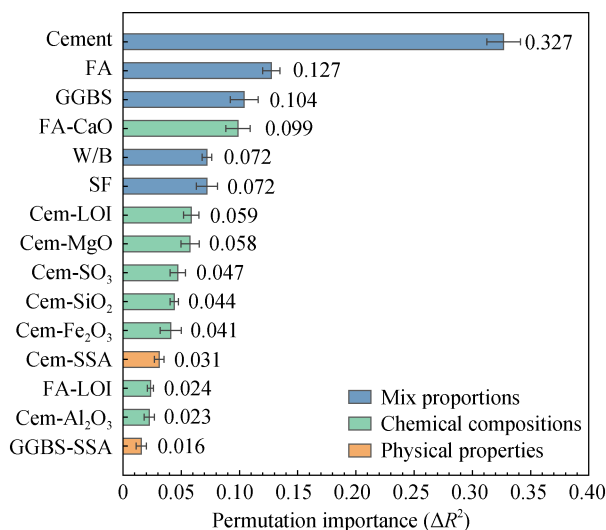
图 11 不同组分掺量和 W/B 对 β 的等值线响应Fig. 11 Contour response of β to each component content and W/B

图 12 特征置换重要性排序

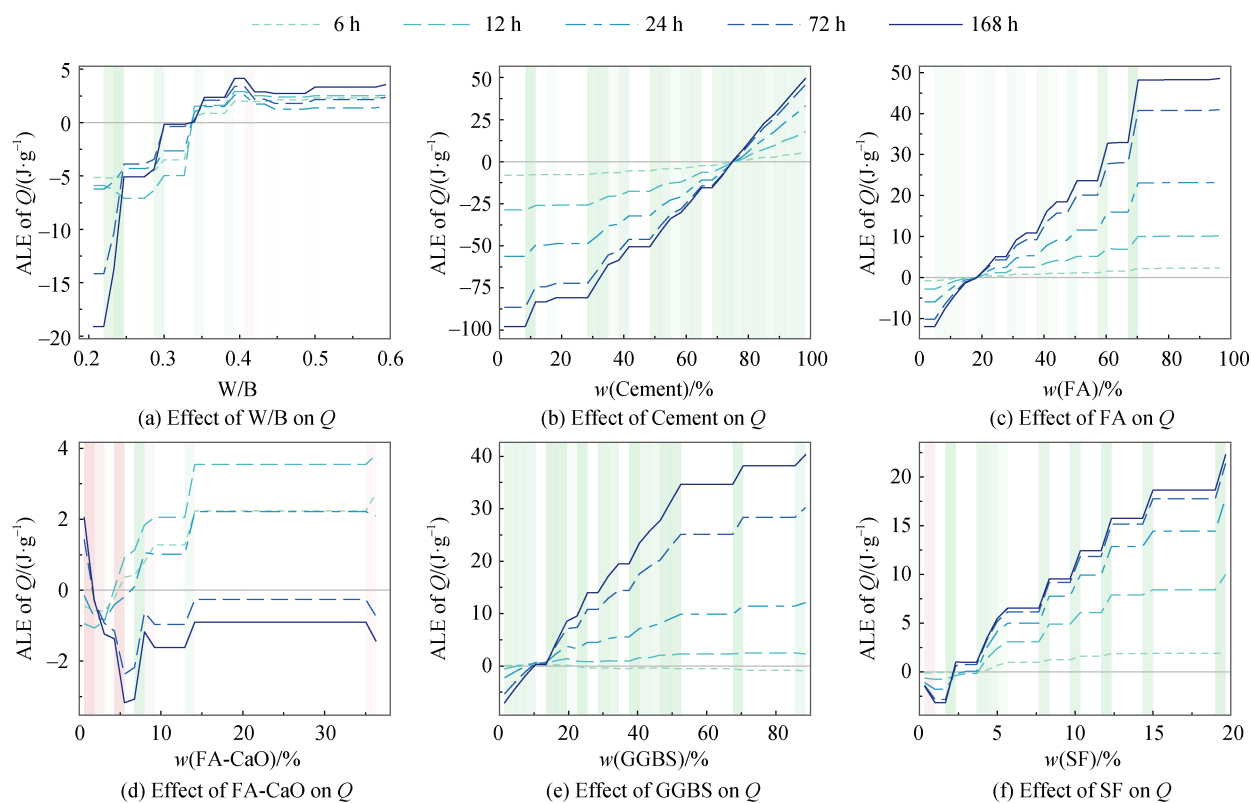
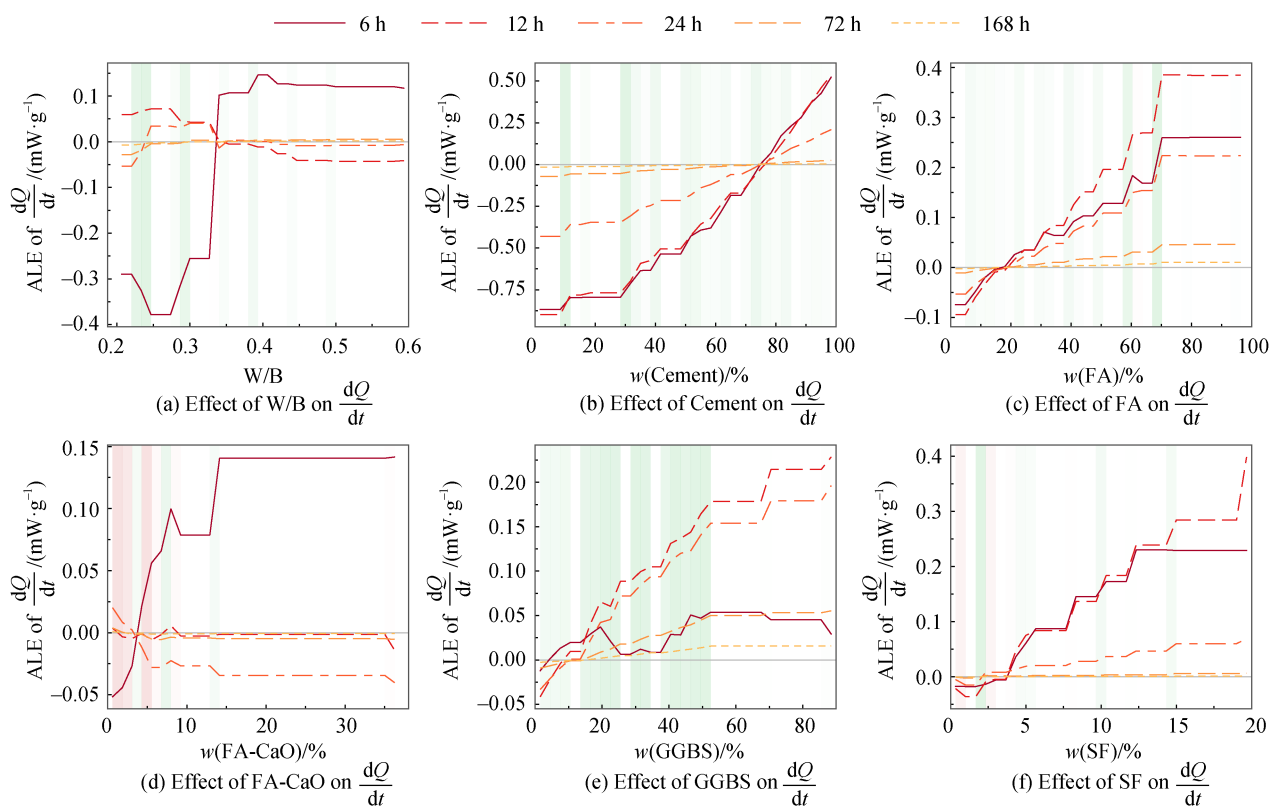
Fig. 12 Permutation importance ranking of features

置换重要性以随机打乱单个特征后模型 R^2 的下降幅度(ΔR^2)衡量特征贡献。如图 12 所示, 配合比类特征占主导地位, 其中水泥含量的重要性最高, $\Delta R^2=0.327$, 明显高于其他特征。FA 和 GGBS 分别为 0.127 和 0.104, 反映掺合料替代对水化过程的显著影响。FA-CaO 位居第 4(0.099), 是贡献最高的化学组成特征, 表明粉煤灰钙含量会影响其反应活性。W/B 和 SF 的重要性均约为 0.072。相比之下, 物理性质特征的贡献较低。总体上, 模型输出首先受配合比控制, 化学组成进一步修正, 物理性质的边际贡献相对有限。

根据置换重要性的排序, 选取 W/B、Cement、FA、FA-CaO、GGBS 和 SF 作为关键特征, 进一步采用 ALE 方法进行分析。ALE 通过沿特征分布区间逐步微扰输入并累积局部梯度来构建效应曲线, 相较于偏依赖图(Partial dependence plot, PDP)能够有效降低特征相关性引入的干扰^[34]。为揭示各特征影响的时间演化规律, 分别在 6、12、24、72 h 和 168 h 5 个关键时间点计算 ALE 效应。

如图 13 所示, 各特征对 Q 的 ALE 效应随龄期延长而放大。W/B 影响集中在 0.20~0.40 区间, 超过 0.40 后, 继续增加水分对总放热量的提升有限。水泥含量对 Q 的影响最强, 168 h 时 ALE 总变幅约 150 J/g。FA 早期影响接近于零, 168 h 时在高掺量区可升至约 50 J/g, 表明其热贡献主要来自后续的火山灰反应。FA-CaO 幅度较小, 但曲线随龄期变化, 表明其作用并非简单线性。其早期正效应可能与高钙粉煤灰中活性钙相直接参与水化有关, 而长龄期响应的转折则可能反映了水泥水化、火山灰反应和体系碱度变化之间的耦合影响。GGBS 正效应随龄期增强, 168 h 时总变幅约 50 J/g, 而 6 h 时几乎不明显, 反映矿渣潜在水硬性反应的滞后特征^[32]。SF 各龄期均为正效应, 且 6 h 已存在明显效应, 与其早期促进水化相吻合。

如图 14 所示, 各特征对 dQ/dt 的 ALE 效应与 Q 呈相反的时间规律, 早期效应最强, 随后随龄期延长逐渐衰减。这一结果符合放热速率表征瞬时反应

图 13 各特征对累积水化热 Q 的 ALE 效应Fig. 13 ALE effects of each feature on cumulative hydration heat Q 图 14 各特征对水化放热速率 dQ/dt 的 ALE 效应Fig. 14 ALE effects of each feature on hydration rate dQ/dt

强度的物理含义,表明各特征对水化反应速率的影响主要体现在早期和中期。 W/B 在 6 h 时影响最为明显,0.25~0.35 区间内 ALE 抬升约 0.5 mW/g,表明低 W/B 条件下水分供应不足会显著限制早期水化速率。水泥含量在 6 h 时的 ALE 变幅约 1.4 mW/g,明显高于其他特征,表明水泥含量是决定放热速率的主导因素。不同掺合料的速率时间响应规律并不相同。FA 对 dQ/dt 的影响在 12 h 附近最明显,高 FA 区约为 0.4 mW/g,其速率贡献晚于水泥反应。GGBS 在 6 h 时响应较弱,至 12 h 后增强,并在 12~24 h 范围内保持较明显影响,表明其速率贡献具有一定滞后性。SF 在 12 h 时响应最强,6 h 时已表现出正效应,表明硅灰能够较早参与水化过程。FA-CaO 的影响主要出现在 6 h,并在 0~15% 范围内随 CaO 含量增加而增强,表明粉煤灰中的钙相组成可能直接参与早期水化过程,从而改变其早期放热响应。

4 结论

本工作提出了一种物理驱动与数据修正协同的水化热预测模型,通过将水化动力学方程作为物理先验引入神经网络,有效提升了复合胶凝材料体系中水化放热过程的预测精度、物理一致性和小样本鲁棒性,为复合胶凝材料体系的配合比设计与早龄期温控防裂提供了新的技术途径。主要结论如下:

1) 所开发的 SFQmaxDecompNet 综合表现最优,其测试集 R^2 达 0.962, $R^2 \geq 0.9$ 曲线占比为 94%。模型性能并非简单由参数数量决定,含有 7 个物理参数的 KD-C 性能($R^2=0.868$)反而低于参数更少的 KD-A(0.904)和 KD-B(0.937)。物理方程作为归纳偏置效果显著,在缺乏物理先验时单纯增加网络规模作用有限。

2) 物理先验显著提升了小样本条件下的数据效率。在仅 30%(45 条曲线)的训练数据条件下, SFQmaxDecompNet 的 R^2 仍达 0.571, 优于 PureNN 在 50% 数据条件下的表现(0.565), 能够以更少的数据达到纯数据驱动方法在更大数据规模下才能实现的预测精度,而纯数据驱动模型表现出明显的数据需求阈值效应。物理方程在数据匮乏时能够起到结构性正则化作用,有效抑制了过拟合与非物理振荡,保证了预测结果的稳定性与物理一致性。

3) SFQmaxDecompNet 的可解释性在物理参数和模型输出两个层面得到验证。物理参数层面, $Q_{\max}$ 受 W/B 和组分掺量共同影响, τ 能反映 GGBS 的延

缓和 SF 的早期促进作用。模型输出层面,水泥含量是核心驱动特征($\Delta R^2=0.327$), Q 的 ALE 幅度随龄期放大,而 dQ/dt 的 ALE 幅度随龄期衰减。FA、GGBS 和 SF 的输出响应与粉煤灰火山灰反应、矿渣潜在水硬性反应的逐步激发,以及硅灰对早期水化过程的促进作用相一致。

(第二十八届中国科协年会学术论文)

参考文献:

- [1] MA X S, HU H B, LUO Y, et al. A carbon footprint assessment for usage of recycled aggregate and supplementary cementitious materials for sustainable concrete: A life-cycle perspective in China[J]. J Clean Prod, 2025, 490: 144772.
- [2] SCRIVENER K L, MATSCHEI T, GEORGET F, et al. Advances in hydration and thermodynamics of cementitious systems[J]. Cem Concr Res, 2023, 174: 107332.
- [3] JOHN E, LOTHENBACH B. Cement hydration mechanisms through time—a review[J]. J Mater Sci, 2023, 58(24): 9805–9833.
- [4] BULLARD J W, JENNINGS H M, LIVINGSTON R A, et al. Mechanisms of cement hydration[J]. Cem Concr Res, 2011, 41(12): 1208–1223.
- [5] YANG J L, YUAN Q, ZHANG K, et al. Early-age thermal cracking behavior of high-speed railway bridge piers in plateau regions: Formwork removal recommendations[J]. J Cent South Univ, 2025, 32(10): 4055–4072.
- [6] 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.
- [7] THOMAS J J, BIERNACKI J J, BULLARD J W, et al. Modeling and simulation of cement hydration kinetics and microstructure development[J]. Cem Concr Res, 2011, 41(12): 1257–1278.
- [8] 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.
- [9] 蔡景顺, 李华, 舒鑫, 等. 提升结构混凝土耐久性的外加剂研究进展[J]. 硅酸盐学报, 2025, 53(3): 553–573.
- [10] YUAN Q, ZHOU D J, LI B Y, et al. Effect of mineral admixtures on the structural build-up of cement paste[J]. Constr Build Mater, 2018, 160: 117–126.
- [11] LOTHENBACH B, SCRIVENER K, HOOTON R D. Supplementary cementitious materials[J]. Cem Concr Res, 2011, 41(12): 1244–1256.
- [12] IEA /WBCSD. Technology roadmap: low-carbon transition in the cement industry[R]. Paris: International Energy Agency, 2018: 66.
- [13] BERODIER E, SCRIVENER K. Understanding the filler effect on the nucleation and growth of C-S-H[J]. J Am Ceram Soc, 2014, 97(12): 3764–3773.
- [14] JUENGER M C G, SNEELLINGS R, BERNAL S A. Supplementary cementitious materials: New sources, characterization, and performance insights[J]. Cem Concr Res, 2019, 122: 257–273.
- [15] SCHINDLER A K, FOLLIARD K J. Heat of hydration models for cementitious materials[J]. Mater J, 102(1): 24–33.
- [16] KRSTULOVIC R, DABIĆ P. A conceptual model of the cement

- hydration process[J]. *Cem Concr Res*, 2000, 30(5): 693–698.
- [17] KNUDSEN T. The dispersion model for hydration of Portland cement I. General concepts[J]. *Cem Concr Res*, 1984, 14(5): 622–630.
- [18] 姜占, 滕乐, 童昕阳, 等. 人工智能驱动可持续混凝土: 方法、机遇、挑战[J]. *硅酸盐学报*, 2026, 54(3): 1016–1031.
- JIANG Zhan, TENG Le, TONG Xinyang, et al. *J Chin Ceram Soc*, 2026, 54(3): 1016–1031.
- [19] 张文生, 曹传荔, 郅晓, 等. 机器学习方法用于水泥基材料的研究进展[J]. *硅酸盐学报*, 2024, 52(11): 3617–3630.
- ZHANG Wensheng, CAO Fuli, ZHI Xiao, et al. *J Chin Ceram Soc*, 2024, 52(11): 3617–3630.
- [20] BEN CHAABENE W, FLAH M, NEHDI M L. Machine learning prediction of mechanical properties of concrete: Critical review[J]. *Constr Build Mater*, 2020, 260: 119889.
- [21] 元强, 夏瑞, 刘易, 等. 基于多目标寻优的低碳混凝土智能设计[J]. *硅酸盐学报*, 2026, 54(3): 878–893.
- YUAN Qiang, XIA Rui, LIU Yi, et al. *J Chin Ceram Soc*, 2026, 54(3): 878–893.
- [22] LIU Y, ZHANG J L, ZHANG S H, et al. Machine learning-guided optimization of coarse aggregate mix proportion based on CO₂ intensity index[J]. *J CO₂ Util*, 2024, 85: 102862.
- [23] HAN T H, BHAT R, PONDURU S A, et al. Deep learning to predict the hydration and performance of fly ash-containing cementitious binders[J]. *Cem Concr Res*, 2023, 165: 107093.
- [24] WILLARD J, JIA X W, XU S M, et al. Integrating scientific knowledge with machine learning for engineering and environmental systems[J]. *ACM Comput Surv*, 2023, 55(4): 1–37.
- [25] VON RUEDEN L, MAYER S, BECKH K, et al. Informed machine learning—A taxonomy and survey of integrating prior knowledge into learning systems[J]. *IEEE Trans Knowl Data Eng*, 2023, 35(1): 614–633.
- [26] KARPATNE A, ATLURI G, FAGHMOUS J H, et al. Theory-guided data science: A new paradigm for scientific discovery from data[J]. *IEEE Trans Knowl Data Eng*, 2017, 29(10): 2318–2331.
- [27] REICHSTEIN M, CAMPS-VALLS G, STEVENS B, et al. Deep learning and process understanding for data-driven Earth system science[J]. *Nature*, 2019, 566(7743): 195–204.
- [28] 杨正伟, 刘子图, 张王颖, 等. 材料领域知识嵌入的分而治之机器学习[J]. *硅酸盐学报*, 2026, 54(1): 14–24.
- YANG Zhengwei, LIU Zitu, ZHANG Wangying, et al. *J Chin Ceram Soc*, 2026, 54(1): 14–24.
- [29] KARNIADAKIS G E, KEVREKIDIS I G, LU L, et al. Physics-informed machine learning[J]. *Nat Rev Phys*, 2021, 3(6): 422–440.
- [30] HE K M, ZHANG X Y, REN S Q, et al. Deep residual learning for image recognition[C]//2016 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR). Las Vegas, NV, USA. IEEE, 2016: 770–778.
- [31] LI S R, FENG X L. Dynamic weight strategy of physics-informed neural networks for the 2D navier–stokes equations[J]. *Entropy*, 2022, 24(9): 1254.
- [32] SKIBSTED J, SNELLINGS R. Reactivity of supplementary cementitious materials (SCMs) in cement blends[J]. *Cem Concr Res*, 2019, 124: 105799.
- [33] 阎培渝, 徐志全. 水胶比和组成对补偿收缩胶凝材料的水化反应的影响[J]. *硅酸盐学报*, 2003, 31(8): 790–794.
- YAN Peiyu, XU Zhiqun. *J Chin Ceram Soc*, 2003, 31(8): 790–794.
- [34] APLEY D W, ZHU J Y. Visualizing the effects of predictor variables in black box supervised learning models[J]. *J R Stat Soc Ser B Stat Methodol*, 2020, 82(4): 1059–1086.

作者贡献声明:

元强: 提出研究方向、完善论文框架、修订论文
夏瑞: 设计论文框架、撰写论文
刘易: 完善论文框架、修订论文
马嘉璐: 参与修订论文与数据分析
伍军: 参与修订论文与数据分析

Physics-Driven and Data-Correction Synergistic Model for Hydration Heat Prediction of Composite Cementitious Materials

YUAN Qiang^{1,2}, XIA Rui^{1,2}, LIU Yi^{1,2}, MA Jialu^{1,2}, WU Jun³

(1. School of Civil Engineering, Central South University, Changsha 410075, China; 2. National Engineering Research Center for High-speed Railway Construction Technology, Changsha 410075, China; 3. China Railway Group Limited, Beijing 100039, China)

Extended Abstract

Introduction Hydration heat prediction is important for mixture design, thermal control, and early-age cracking risk assessment for cement-based materials. The increasing use of supplementary cementitious materials (SCMs) and chemical admixtures in low-carbon concrete has made hydration behavior more complex, while conventional empirical or simplified analytical models have difficulty describing multicomponent heat release. Therefore, this study develops a general model for predicting cumulative hydration heat directly from mixture composition.

Methods A database of 219 cumulative hydration heat curves and 13 048 data points was compiled from 33 published isothermal calorimetry studies, covering ordinary Portland cement and blends with fly ash, ground granulated blast-furnace slag, and silica fume. The input features included water-to-binder ratio, component fractions, oxide compositions, specific surface area, and loss on ignition. Hydration kinetic equations, including the Schindler-Folliard, Krstulovic-Dabic, and Knudsen equations, were embedded into neural networks as physical priors. The framework consisted of a physical-parameter prediction branch, a physical-equation layer, and a residual-correction branch, enabling end-to-end physics-driven prediction with data correction. Ten model variants were trained and compared under identical experimental settings.

Results and discussion SFQmaxDecompNet achieved the best overall performance, with a test R^2 of 0.962, a generalization gap of 0.018, and 94% of test curves reaching $R^2 \geq 0.9$. Its component-wise decomposition of $Q_{\max}$ better represented the different heat-release potentials of cement, FA, GGBS, and SF. KD-B ranked second ($R^2 = 0.937$), benefiting from its two-peak representation of early cement hydration and delayed SCM reactions. In contrast, KD-C had seven physical parameters but reached only $R^2 = 0.868$, showing that model performance depended more on the consistency between physical assumptions and data characteristics than on the number of parameters alone. PureNN reached $R^2 = 0.874$, lower than several physics-embedded models.

Data-efficiency tests showed that physical priors reduced the dependence on training data. When only 30% of the training curves (45 curves) were used, SFQmaxDecompNet still achieved $R^2 = 0.571$, whereas PureNN degraded nearly completely. The physics branch dominated under limited data, while the residual branch provided local corrections when data were sufficient. Interpretability analyses further showed that $Q_{\max}$ represented the total heat potential, τ reflected the hydration time scale, and β described the concentration of heat release. Permutation importance and ALE analyses identified cement content as the dominant output feature, followed by FA, GGBS, FA-CaO, W/B, and SF. The temporal ALE trends of Q and dQ/dt were consistent with the delayed reactions of FA and GGBS and the early promoting effect of SF.

Conclusions The proposed physics-driven and data-correction synergistic neural network provides accurate and interpretable hydration heat prediction of composite cementitious materials. Embedding hydration kinetic equations as inductive biases improves generalization, suppresses non-physical oscillations, and enhances robustness under small-sample conditions. This framework provides a useful route for mixture design, thermal analysis, and early-age crack-risk control in low-carbon cement-based materials.

Keywords composite cementitious materials; hydration heat; physics-embedded neural network; hydration kinetics; residual correction; interpretability