

面向低碳超高性能混凝土智能设计的可解释贝叶斯网络建模

李依芮^{1,2,4,5}, 曾晓辉^{2,3}, 曾永平³, 王 鑫⁶, 梁 昱⁷, 龙广成², 谢友均²

(1. 伊犁师范大学物理科学与技术学院, 新疆 伊犁 835000; 2. 中南大学土木工程学院, 长沙 410083;
3. 海南大学热带海洋工程材料及评价全国重点实验室, 海口 570228; 4. 新疆凝聚态相变与微结构自治区重点实验室,
新疆 伊犁 835000; 5. 伊犁绿色硅基材料工程研究中心, 新疆 伊犁 835000; 6. 建筑材料工业技术情报研究所
固废利用与低碳建材研究中心, 北京 100024; 7. 伊犁师范大学化学化工学院, 新疆 伊犁 835000)

摘 要: 针对低碳超高性能混凝土(UHPC)配合比变量维度高、组分耦合复杂及传统强度预测模型物理可解释性不足的问题, 本工作提出一种融合水化—堆积机理先验与数据驱动结构学习的小样本可解释贝叶斯网络(Bayesian network, BN)建模方法。根据系统性文献综述获得 491 组 UHPC 原始配合比数据, 基于数据完整性和机理变量计算要求, 经单位统一、变量转换、异常值核查和有效样本筛选后, 获得 136 组有效建模样本。进一步依据胶凝材料水化反应和颗粒紧密堆积原理, 构建包含胶凝材料反应活性指数、水胶比、激发剂掺量、胶砂比、钢纤维掺量、活性钙硅比、活性硫铝比和初始颗粒堆积密实度的水化—堆积特征体系, 并建立“材料及工艺参数层—中间机理层—目标性能层”的 BN 预测模型。结果表明, BN 模型在 10 折交叉验证中获得较高预测精度($R^2=0.910$), 同时通过基于机理约束的干预敏感性分析量化了水化效应(47.9%)、堆积效应(35.1%)及水化—堆积协同效应(17.0%)对 28 d 抗压强度的贡献。5 组独立验证结果初步表明, 在本工作验证样本范围内, 模型预测强度与实测强度具有较好的一致性, 实测值均落入模型预测区间内。本工作可为低碳 UHPC 候选配比筛选、抗压强度预测和智能化设计, 提供兼具预测能力与机理解释性的建模工具。

关键词: 低碳超高性能混凝土; 贝叶斯网络; 抗压强度; 可解释建模; 智能设计

中图分类号: TU528 文献标志码: A 文章编号: 0454-5648(2026)10-3483-16

网络出版时间: 2026-09-03



超高性能混凝土(UHPC)具有高抗压强度、高韧性和优异耐久性, 在桥梁、隧道、装配式结构及复杂服役环境工程中具有广泛应用前景。然而, 传统 UHPC 通常依赖较高水泥用量、大掺量活性粉体和钢纤维增强以获得超高性能, 其单位体积碳排放显著高于普通混凝土^[1, 2]。为降低 UHPC 环境负荷, 采用矿渣、粉煤灰、硅灰、石粉、贝利特硅酸盐水泥及其他低碳胶凝材料部分替代普通硅酸盐水泥, 已成为低碳 UHPC 发展的重要方向^[3]。

低碳胶凝材料的引入虽然降低了水泥熟料用量, 但也显著增加了配合比设计难度。不同胶凝材料在氧化物组成、反应活性、颗粒粒径分布和水化产物类型方面存在明显差异^[4, 5], 使 UHPC 抗压强度受到水化反应、颗粒堆积、纤维增强和养护制度等多种因素共同控制。传统经验试验法和单一颗粒

堆积模型难以完整表达这种高维、强耦合、非线性的材料体系。

机器学习方法已被广泛用于 UHPC 强度预测^[6], 但多数模型仍以统计拟合为主, 难以解释材料组分如何通过水化产物生成、颗粒填充和基体致密化过程影响宏观强度。沙普利加性解释(SHAP)、局部可解释的模型无关解释(LIME)等事后解释方法虽可给出特征重要性, 但在严格体积约束和物理边界条件下, 可能产生缺乏材料意义的虚拟配比^[7-9], 但它们本质上仍是对统计相关性的事后归因。在面对 UHPC 配合比这一存在严格物理边界约束的体系时, 此类方法隐含的特征独立性假设, 极易在计算边缘贡献时生成大量缺乏物理意义的伪样本(如不合理水胶比, 或体积约束的虚拟配比)。此外, 局部线性拟合难以应对低碳体系中水化反应与微观密实效

收稿日期: 2026-05-13。 修订日期: 2026-06-15。

基金项目: 国家重点研发计划(2023YFB2604304-2); 伊犁师范大学高层次人才引进项目(2025RCYJ24)。

第一作者: 李依芮(1995—), 女, 博士, 讲师。

通信作者: 曾晓辉(1982—), 男, 博士, 教授。

Received date: 2026-05-13. Revised date: 2026-06-15.

First author: LI Yirui (1995—), female, Ph.D., Lecturer.

E-mail: lixiao1117@163.com

Correspondent author: ZENG Xiaohui (1982—), male, Ph.D., Professor.

E-mail: zxhzlh@126.com

应间强烈的非线性耦合与阈值效应。这种仅停留在宏观唯象层面的数值权重分配,无法向下穿透并揭示氧化物活性反应、微观结构演化等核心机制。

从材料本质上看,低碳 UHPC 抗压强度的形成并非单一变量的线性叠加,而是胶凝材料水化效应、颗粒堆积效应及其耦合作用共同演化的结果。已有研究表明,UHPC 力学性能既受控于颗粒体系的初始紧密堆积状态,也高度依赖于后期水化反应对孔隙的持续填充^[10–13]。在低碳胶凝体系中,不同活性氧化物的组成差异会直接改变水化产物的生成路径与致密化程度^[14–16]。若仅从宏观原始配比出发进行经验拟合,而忽略真正的中间机理变量,则会因原材料组成复杂性使得预测模型的预测精度偏低。现有机器学习模型虽然以大数据为背景展开研究,但海量数据带来的是样本质量以及预测黑箱问题。因此,低碳 UHPC 智能设计需要一种能够嵌入水化与堆积机理、同时保持预测能力的可解释建模框架。

贝叶斯网络(Bayesian networks, BN)能够通过有向无环图描述变量间的条件依赖关系,并允许将领域先验知识嵌入网络结构^[17, 18],这不仅能提供可解释分析,还能将专家定性经验或知识直接转化为约束条件,从而弥补小样本数据不足导致的预测精度偏低问题。基于此,本工作以低碳 UHPC 胶凝材

料体系为对象,构建水化–堆积机理约束下的 BN 模型,重点解决 3 方面问题:1) 将高维配合比参数转化为具有材料意义的中间机理变量;2) 在小样本条件下通过结构约束和自助抽样法(Bootstrap)稳定边筛选以提高网络可靠性;3) 结合交叉验证、干预敏感性分析和独立试验验证,评价模型的预测能力与机理解释能力。

1 数据与方法

1.1 建模数据来源

本工作训练数据来源于系统性文献综述调研所得 491 组 UHPC 原始配合比数据。目标变量为 UHPC 28 d 抗压强度,记为 Z_1 ,单位为 MPa。原始变量包括胶凝材料、骨料、外加剂、钢纤维、用水量和养护温度等直接配比参数;补充变量包括胶凝材料氧化物组成、颗粒级配、密度和反应活性参数等。

文献检索参考 PRISMA 流程^[19],以 Web of Science 核心数据库为主要检索来源,并结合相关综述文献和纳入文献的参考文献追溯进行补充核查,以“(TI=(UHPC)) AND (AB=(CO₂ or carbon emission or GWP))”为检索式,筛选时间范围为 2000 年 9 月 30 日至 2025 年 9 月 30 日。经去重、题录筛选、全文筛选和综述文献补充后,最终纳入 15 篇文献^[3, 14, 16, 20–31],共计 491 组数据,筛选过程见图 1。

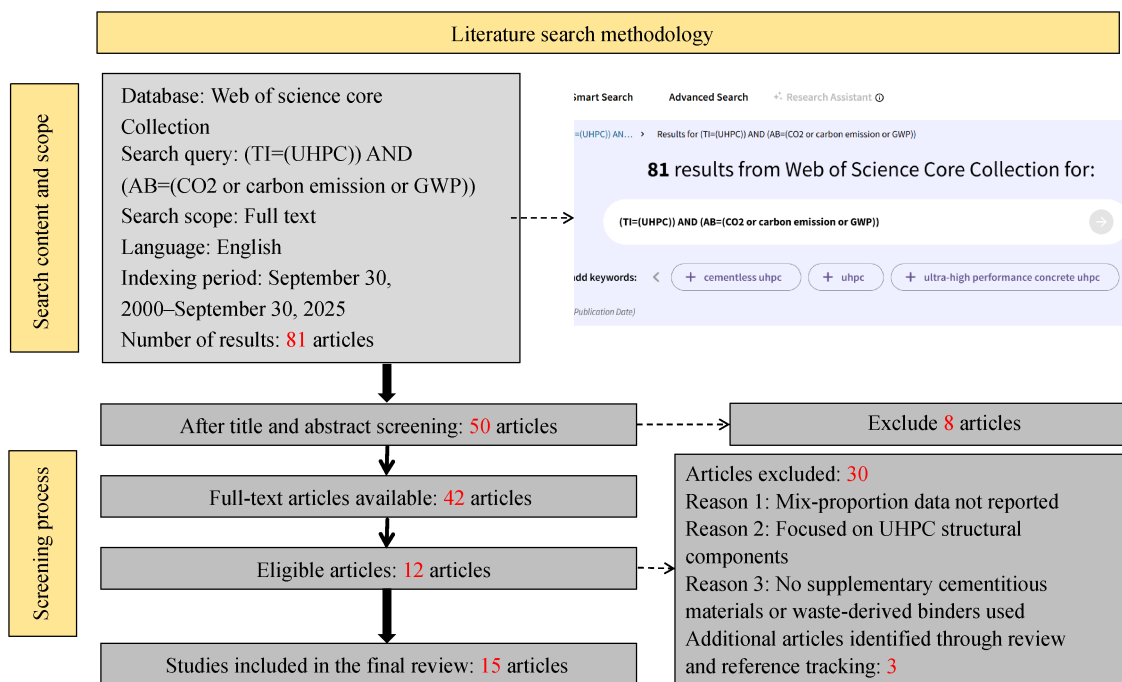


图 1 UHPC 碳排放研究文献综述检索方法

Fig. 1 Retrieval method for literature review on carbon emissions of UHPC

因为本工作研究对象为低碳 UHPC 配合比设计, 所以检索式中加入 CO₂、carbon emission 和 GWP(Global warming potential)等关键词, 需要样本具有低碳胶凝材料替代、碳排放评价或全球变暖潜势相关信息。GWP 为全球变暖潜势, 是低碳材料环境影响评价中的常用指标, CO₂ 排放是其重要组成部分。需要说明的是, 该检索策略并非旨在穷尽所有 UHPC 强度研究, 而是构建可重复、可追溯且服务于低碳 UHPC 机理变量建模的数据集。因此, 本工作模型适用范围限定于与本工作样本分布相近的低碳 UHPC 体系。

需要说明的是, 本工作样本剔除主要由机理变量可计算性和输入变量定义一致性决定, 而非依据抗压强度水平进行选择。本工作 BN 模型不仅

使用常规配比变量, 还引入活性钙硅比、活性硫铝比和初始颗粒堆积密实度等水化-堆积机理变量。其中, 活性氧化物摩尔比需要胶凝材料氧化物组成和反应活性参数, 初始颗粒堆积密实度需要颗粒级配和密度参数。若保留缺失上述信息的样本, 将无法保证不同样本输入特征定义一致, 还会削弱模型的物理可解释性和可复现性。因此, 本工作样本筛选主要受数据完整性和机理变量计算要求驱动, 而非人为选择高性能样本。由于部分剔除样本正是因为缺少关键变量, 本工作未对全部剔除样本开展完整同维度统计比较, 具体样本筛选情况见表 1; 最终模型适用范围应限定于与本工作样本分布相近且能够获得必要机理变量的低碳 UHPC 体系。

表 1 样本筛选情况表
Table 1 Sample screening status

Screening Step	Remaining samples	Samples excluded	Reason for exclusion
Initial data extraction from the literature	491	0	Obtained through a systematic review
Missing oxide composition data	400	91	Oxide composition could not be calculated
Missing particle-size distribution or density parameters	258	142	Particle packing density could not be calculated
Untraceable units or mix proportions	140	118	Data could not be converted to consistent units
Preliminary valid samples	140	0	Used for descriptive statistical analysis
Removal of anomalous samples after physical plausibility checks	136	4	Values exceeded physically reasonable ranges

1.2 水化-堆积特征变量构建

低碳 UHPC 强度形成并非单一组分线性贡献, 而是胶凝材料水化反应、颗粒初始堆积和纤维增强共同作用的结果^[32-34]。结合鲍尔斯(Powers)胶空比思想和水化体积增量概念, UHPC 强度可近似理解为初始颗粒堆积、后期水化填充和纤维增强的综合结果。该机理关系在本工作中主要用于指导变量构建, 而不作为直接回归方程。其概念形式可表示为

$$\sigma = \sigma_1[\phi_0 + \lambda \sum (\alpha_i v_i)] + m p_f^k \quad (1)$$

式中: σ 为 UHPC 抗压强度; σ_1 为密实度为 1 时不掺纤维的基体抗压强度; ϕ_0 为浆体初始堆积密实度; $\Delta\phi = \lambda \sum (\alpha_i v_i)$ 为水化反应引起的密实度增量; α_i 为各胶凝材料组分(水泥、硅灰、粉煤灰、矿渣)的水化程度; v_i 为各胶凝材料体积分数(满足 $\sum v_i = 1$); λ 为养护制度修正系数(标准养护 28 d 时 $\lambda = 1$); p_f 为钢纤维体积掺量率; m 和 k 均为纤维增强效应经验系数。

为降低高维原始配比变量带来的模型复杂度, 基于该机理关系, 本工作将原始配合比参数转化为具有材料学含义的中间机理变量。模型输入分为 3 类: 材料及工艺参数变量 X , 包括胶凝材料反应活

性指数 X_0 、水胶比 X_1 、外加剂或激发剂与胶凝材料的质量比 X_2 、胶砂比 X_3 和钢纤维体积掺量 X_4 ; 中间机理变量 Y , 包括活性钙硅比 Y_1 、活性硫铝比 Y_2 和初始颗粒堆积密实度 Y_3 ; 目标性能变量为 28 d 抗压强度 Z_1 。

胶凝材料综合反应活性指数 X_0 按式(2)计算:

$$X_0 = \sum k_i m_i / \sum m_i \quad (2)$$

式中: k_i 和 m_i 分别为胶凝材料的相对反应活性指数(表 2)和质量分数。活性氧化物摩尔比按式(3)、式(4)和式(5)计算:

$$Y_1 = n(\text{CaO_active}) / n(\text{SiO}_2_active) \quad (3)$$

$$Y_2 = n((\text{SO}_3_active) / n(\text{Al}_2\text{O}_3_active) \quad (4)$$

$$n(\text{Oxide_active}) = \sum (m_i \cdot w_{i,oxide} \cdot k_i / M_{oxide}) \quad (5)$$

式中: $w_{i,oxide}$ 为第 i 种胶凝材料中相应氧化物质量分数, M_{oxide} 为氧化物摩尔质量。

Y_1 用于表征 C-S-H 凝胶生成潜势, Y_2 用于表征硫酸盐与铝相之间的反应平衡, Y_3 用于表征颗粒体系初始堆积密实程度。基于胶凝材料组成和胶凝材料反应程度估算 X_0 、 Y_1 、 Y_2 , 并基于 CPM 模型^[51] 计算 Y_3 , 为 BN 建模提供了具有材料机理意义的中间变量。

表 2 胶凝材料反应程度
Table 2 Reaction degree of cementitious materials

Binder materials	Reaction degrees	References
Portland cement	b 0.80	[25, 35]
Ground granulated blast-furnace slag	a/c 0.425	[25, 36]
Fly ash	a/c 0.088	[25, 36–39]
Silica fume	a/d 0.585	[25, 37–39]
Brick dust	a 0.160	[37]
Lithium slag	a 0.063	[39]
Steel slag	e 0.0565	[40]
Limestone powder	f 0.048	[41, 42]
Metakaolin	a 0.153	[38]
Dehydrated cement mortar powder	e 0.30	[43]
Quartz powder	e 0.015	[44]
Coal bottom ash	e 0.149	[45]
Glass powder	e 0.007	[46]
Copper powder	e 0.400	[47]
Calcined clay	e 0.489	[48]
Sewage sludge ash	a/c 0.745	[49, 50]
Nano-materials	e 0.75	[25]

Values were calculated (a) lime adsorption; (b) XRD/RQPA or DTG; (c) BSE imaging; (d) LF-NMR; (e) strength activity index ratio; (f) hydration kinetics.

为进一步增强模型对非线性和协同效应的表达能力, 本工作在原有变量基础上构造了 4 类衍生特征: 基于泰勒展开三阶近似的非线性多项式项、基于机理的交互项、反映关键参数比例关系的比率项, 以及反映响应变量趋势的统计特征项。

需要说明的是, 本工作构造的衍生特征并非无约束扩展, 而是基于水化反应、颗粒堆积和水胶比调控关系形成的机理启发候选变量。结构学习过程中, 候选特征需经过贝叶斯高斯等效(BGe)评分、贝叶斯信息准则(BIC)/Akaike信息准则(AIC)敏感性比较、Bootstrap稳定边筛选和最大父节点数限制后才可能进入最终网络结构。因此, 高阶项和交互项并非全部强制保留, 而是由结构学习根据预测性能、网络稀疏性和机理合理性综合筛选。对于连续目标变量 Z_1 , 本工作进一步采用贝叶斯岭回归进行参数学习, 以降低小样本条件下多重共线性和高阶候选特征对参数估计稳定性的影响。该处理有助于在保留水化–堆积非线性耦合信息的同时, 降低衍生特征引起的过拟合风险。受限于当前样本规模, 本工作尚未对全部衍生特征组合开展系统消融或敏感性分析, 后续研究将结合更大规模数据进一步检验不同衍生特征对模型稳定性和泛化能力的影响。机理交互项包括 $Y_1 \times Y_3$ 、 $Y_2 \times Y_3$ 和 $X_1 \times Y_3$ 。其中, $Y_1 \times Y_3$ 可表征C-S-H凝胶生成潜势与初始堆积密实度的协同作用; $Y_2 \times Y_3$ 可表征硫铝反应与孔隙填充过程的耦合关

系; $X_1 \times Y_3$ 可反映水胶比与颗粒堆积状态共同影响基体孔隙结构的过程。

1.3 数据预处理、结构学习与参数学习

不同文献来源的配合比首先统一换算为单位体积用量(kg/m^3), 并统一养护温度、钢纤维体积掺量和减水剂含水量等表达方式, 将数据进行归一化处理。对于偏态明显或存在极端值的变量, 采用对数/幂变化(Box-Cox)转换、鲁棒标准化或温莎化(Winsorization)缩尾处理。异常值处理遵循“统计识别–物理核查–合理修正”原则, 避免将具有真实材料背景的极端低碳配比简单删除。

BN 初始结构采用“材料及工艺参数层–中间机理层–目标性能层”3 层框架。为避免纯数据驱动搜索产生违反材料机理的路径, 将 $Y_1 \rightarrow Z_1$ 、 $Y_2 \rightarrow Z_1$ 、 $Y_3 \rightarrow Z_1$ 和 $X_4 \rightarrow Z_1$ 设为强制保留路径, 同时禁止 Z_1 反向指向配合比参数或中间机理变量。对于方向不确定但可能存在条件依赖的变量关系, 交由结构学习算法识别。

结构学习方面, 本工作采用基于机理先验的多算法协同策略, 包括爬山算法(Hill-Climbing, HC)、最大–最小爬山算法(MMHC)和禁忌搜索算法(Tabu Search), 并结合 Bootstrap 重抽样保留稳定边^[52]。针对 136 组样本和多个连续变量共存的建模特点, 评分函数以 BGe 评分为主, 并以 BIC 和 AIC 作为敏感性指标, 以评估不同评分准则下的预测性能和网络结构稳定性。参数学习结合最大似然估计和带正则化的贝叶斯参数估计完成。通过上述策略, 本工作在小样本($n=136$)、高维特征($p=8$)的条件下构建了可解释的强度预测模型, 并将材料学知识嵌入网络结构之中。

为提高网络结构稳健性, 采用 Bootstrap 重采样评估边稳定性。本工作将 Bootstrap 重采样次数设为 1000 次, 以降低小样本随机波动对网络结构的影响。边保留阈值在 0.6、0.7、0.8 和 0.9 之间进行敏感性分析。阈值过高会导致网络过稀疏, 降低模型表达能力; 阈值过低则可能引入不稳定边并增加过拟合风险。因此, 应结合预测精度、网络稀疏性和机理合理性综合确定最终阈值。此外, 为控制网络复杂度, 最大父节点数建议限制在 5 个以内。对于 136 组样本而言, 父节点数过多会显著增加参数估计不确定性, 降低模型泛化能力。通过限制父节点数量、删除不显著边和保留高稳定性边, 可以在模型复杂度和预测能力之间取得平衡。综上所述, 本工作中低碳 UHPC 可解释 BN 建模流程如图 2 所示。

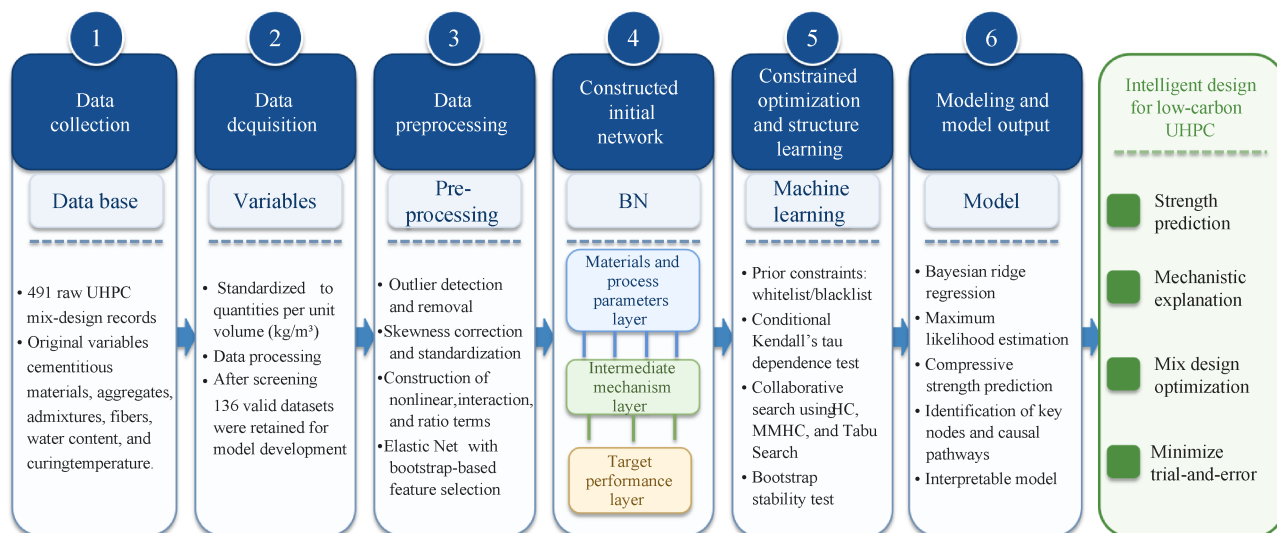


图 2 低碳 UHPC 可解释 BN 建模流程图

Fig. 2 Flowchart of interpretable Bayesian network modeling for low-carbon UHPC

1.4 模型验证与数据泄漏控制

为避免模型评估过程中出现数据泄漏，本工作采用 10 折交叉验证评估模型泛化性能。每一折中，变量转换、标准化参数估计、异常值阈值确定、BN 结构学习、Bootstrap 稳定边筛选和参数学习均仅在训练折内完成，验证折仅用于最终性能评价。

需要说明的是，本工作中结构学习算法、评分函数、最大父节点数和稳定边阈值等设置主要依据材料机理先验、文献经验和小样本复杂度控制原则预设，并非通过验证折反复调优获得。因此，本工作交叉验证结果表示在既定机理约束和参数设置下的模型泛化性能，而非经过大规模超参数搜索后的最优性能。后续研究将结合更大规模数据，对结构学习参数开展系统敏感性分析，以进一步评估其对模型预测性能和网络结构稳定性的影响。

1.5 独立试验验证设计

为检验模型在实际配合比设计中的适用性，本工作选取 5 组未参与模型训练的低碳 UHPC 配合比作为独立验证样本(表 3)。验证试验所用胶凝材料包括普通硅酸盐水泥(PC)、贝利特硅酸盐水泥(BC)、

硅灰(SF)、玄武岩石粉(BP400~BP700)和粒化高炉矿渣粉(GGBS400~GGBS700)。细骨料采用多级配石英砂，钢纤维采用直线型镀铜钢纤维。各验证样本在低水胶比、高粉体体积分数和多级颗粒填充原则下设计，并通过调整贝利特水泥、矿渣、玄武岩石粉和硅灰比例形成不同水化反应活性和堆积状态。每组样本按照第 1.2 节方法计算 X_0 、 X_1 、 X_2 、 X_3 、 X_4 、 Y_1 、 Y_2 和 Y_3 ，并输入已训练 BN 模型获得 28 d 抗压强度预测值。

胶凝材料初始颗粒堆积密实度采用最小需水量法测试，Ca/Si 和 S/Al 根据能量色散 X 射线(EDX)能谱区域面扫得到的数据计算其摩尔比的平均值^[53]。UHPC 试件制备过程中，先将胶凝材料和细骨料干混，使粉体充分均匀分散；随后加入水和高效减水剂进行湿拌，待浆体达到均匀流动状态后缓慢加入钢纤维，并继续搅拌至纤维均匀分散。拌和物成型于 40 mm×40 mm×160 mm 三联模具中，经振动密实后覆盖保鲜膜以减少水分蒸发。试件 1 d 后脱模，并在标准养护条件下养护至 28 d。标准养护温度为(20±2)℃，相对湿度为(97%±2%)。

表 3 独立验证试验配合比

Table 3 Independent validation experiment mix proportions

Samples	BC	SF	BP400	BP500	BP600	BP700	GGBS400	GGBS700	Sand	Water	SP
B1	321	214	0	45.5	42	141	123.0	183.5	1177	192.6	26.8
B2	428	214	107.0	68.2	49	54	96.3	53.5	1177	171.2	28.5
B3	428	214	0	0	91	0	230.0	107.0	1177	192.6	26.8
B4	428	214	45.8	0	32	0	218.2	132.0	1177	192.6	26.8
B5	375	214	0	0	79	0	402.0	0	1177	181.9	21.0

PC is Portland cement; BC is belite cement; SF is silica fume; BP400–BP700 are basalt powder with different fineness levels; GGBS400 and GGBS700 are ground granulated blast-furnace slag with different fineness levels.

28 d 抗压强度测试按照水泥基材料力学性能测试方法进行。每组配合比至少制备 3 个试件, 取其抗压强度平均值作为该组样本的实测强度。模型预测性

能通过均方根误差(RMSE)进行评价。

胶凝材料氧化物组成、XRD 谱以及粒径分布情况分别见表 4、图 3 和图 4。

表 4 胶凝材料的氧化物组成

Table 4 Oxide composition of cementitious materials

Materials	Mass fraction/%										Ignition loss/%	Density/(g·cm ⁻³)
	CaO	SiO ₂	Al ₂ O ₃	SO ₃	Fe ₂ O ₃	MgO	K ₂ O	Na ₂ O	f-CaO	Else		
PC	62.63	18.10	4.36	3.84	3.34	1.57	0.66	0.63	0.70	2.10	2.10	3.08
BC	60.70	19.89	3.87	3.48	5.08	3.99	0.65	0.13	0.66	0.50	1.05	3.15
BP	14.58	48.71	14.84	4.90	2.76	1.62	1.83	3.45			5.72	3.19
GGBS	47.93	26.51	12.10	1.91	1.22	5.86	0.54	0.47	0.52	0.81	2.03	2.86
SF	0.40	92.50	0.60	0.80	0.60				0.40	0.50	3.40	2.10

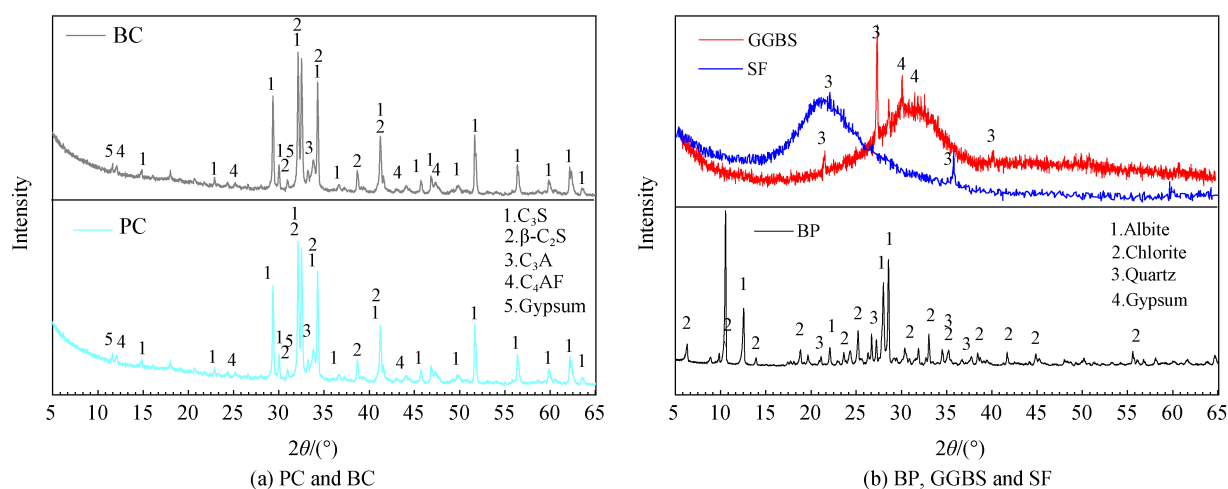


图 3 胶凝材料 XRD 谱

Fig. 3 XRD patterns of cementitious materials

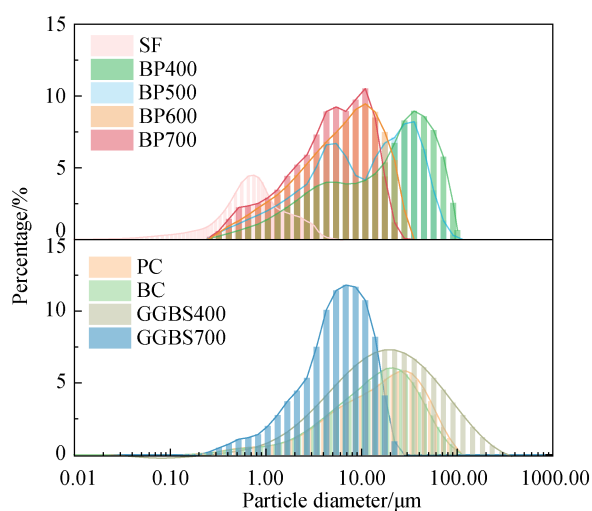


图 4 颗粒细化后各胶凝材料颗粒区间粒径分布曲线

Fig. 4 Interval particle size distribution curves of cementitious materials after particle refinement

2 结果与讨论

2.1 数据特征与模型优化必要性

由于部分文献缺少氧化物组成、颗粒级配及原材料理化参数, 过滤无效数据后获得 140 组初步有效样本。该部分样本主要用于变量分布特征分析和异常值识别, 其描述性统计结果如表 5 所示。经进一步物理核查并剔除 4 组明显超出材料合理范围的异常样本后, 最终获得 136 组有效样本用于 BN 结构学习、参数学习和模型验证。表 5 描述性统计结果显示, 抗压强度 Z_1 的峰度(kurtosis)=1.13 显示数据分布稍尖峰, 但总体接近正态。

钢纤维掺量 X_4 的偏态=-0.12 表明数据轻微左偏, 但幅度较小, 可能无须处理。钙硅比 Y_1 的偏态=2.53 显示显著右偏, 这可能需要对数转换; 其峰度 8.22 远高于正态范围, 存在 5.657 的极大值,

表 5 140 组初步有效样本的变量描述性统计表

Table 5 Descriptive statistics of variables for the 140 preliminary valid samples

Variable	Number of samples	Mean	Median	Min	Max	Skew	Kurtosis
Z_1	140	141.210	142.500	42.00	243.000	0.38	1.13
X_0	140	0.641	0.661	0.330	0.861	-0.77	-0.22
X_1	140	0.173	0.170	0.035	0.220	-1.44	3.67
X_2	140	0.037	0.025	0.004	0.176	3.59	14.21
X_3	140	0.957	0.910	0.649	1.666	0.65	0.54
X_4	140	0.010	0.015	0.000	0.021	-0.12	-1.84
Y_1	140	1.835	1.682	0.459	5.657	2.53	8.22
Y_2	140	0.823	0.751	0.225	1.998	1.01	0.35
Y_3	140	0.682	0.686	0.560	0.704	-2.70	9.51

Skew is skewness.

经检查该数据不合理，剔除。激发剂掺量 X_2 的负偏态 3.59 和峰度 14.21 均异常偏高，表明存在严重右偏和离群点，剔除 2 个离群点。水胶比 X_1 负偏态 -1.44 显示左偏，结合峰度 3.67。初始颗粒堆积密实度 Y_3 偏度 -2.70 表明存在左偏异常，存在极小值 0.560，经检查该数值存在不合理性，剔除。因此，将数据使用上述图 2 所提及的方法变量转换、稳健标准化和物理核查相结合的数据处理流程是必要的。

为进一步分析配合比变量相关性，得到变量皮尔逊相关性结果(图 5)。通过皮尔逊相关系数矩阵分析可知，UHPC 抗压强度与各变量相关性异质性显著。抗压强度与养护温度、火山灰质胶凝材料掺量、石英砂掺量和钢纤维掺量呈正相关，与水胶比和水泥掺量呈弱负相关。纤维参数中仅钢纤维掺量与强度呈弱正相关，PE 纤维未显示显著线性关系。将相关系数 r 强度分为 4 类： $|r| > 0.7$ 为强相关， $0.4 < |r| < 0.7$ 为中等相关， $0.2 < |r| < 0.4$ 为弱相关， $|r| < 0.2$ 为极弱相关或无相关。图 5 是变量相关热力图，红色

为正相关，蓝色为负相关，颜色深度与相关系数绝对值成正比，红色数字表示相关系数绝对值 ≥ 0.3 。

材料组分间有四组负向相关关系，水泥与高钙类、火山灰质呈强或接近强负相关，表明高钙类和火山灰质低胶凝材料可替代水泥；石英砂与固废砂、河砂呈中等负相关，显示砂类材料替代关系。火山灰质与激发剂呈中等正相关，说明火山灰质材料使用常伴激发剂添加。减水剂-用水量呈负相关，符合减水剂降低水胶比机理。工艺参数间有两组较强相关性，养护温度、石英砂呈正相关，推测高温养护促进硅质骨料界面反应；钢纤维-固废砂呈正相关，可能源于固废砂粗糙表面对纤维锚固的增强效应。

进一步分析中间变量相关性(图 6)，除活性硫铝比 Y_2 与钢纤维掺量 X_4 呈较强负相关外，其余变量无严重共线性。除 Y_2 外，其余变量与抗压强度 Z_1 呈正相关，胶凝材料反应活性指数 X_0 与 Z_1 正相关性较高，胶砂比 X_3 与 Z_1 线性相关性最弱。

	Compressive strength	Cement	Pozzolanic	High-calcium type	High-sulfur type	River sand	Quartz sand	Solid waste sand	Water	Superplasticizer	Activator	PE fiber	Steel fiber	Curing temperature
Compressive strength	1.000	-0.118	0.229	0.028	-0.189	-0.094	0.208	-0.110	-0.132	-0.061	0.097	-0.014	0.156	0.363
Cement	-0.118	1.000	-0.669	-0.740	-0.315	-0.014	-0.181	0.166	0.137	0.206	-0.329	-0.016	-0.105	-0.197
Pozzolanic	0.229	-0.669	1.000	0.454	0.053	-0.185	0.277	-0.166	-0.032	-0.242	0.453	0.054	0.206	0.293
High-calcium type	0.028	-0.740	0.454	1.000	0.336	0.075	-0.044	0.013	0.045	-0.145	0.360	0.141	0.032	0.095
High-sulfur type	-0.189	-0.315	0.053	0.336	1.000	-0.065	-0.179	0.300	0.077	-0.086	-0.025	-0.017	0.107	-0.078
River sand	-0.094	-0.014	-0.185	0.075	-0.065	1.000	-0.540	-0.094	0.011	0.099	-0.047	0.093	-0.271	-0.174
Quartz sand	0.208	-0.181	0.277	-0.044	-0.179	-0.540	1.000	-0.663	-0.266	-0.088	0.047	-0.140	0.034	0.326
Solid waste sand	-0.110	0.166	-0.166	0.013	0.300	-0.094	-0.663	1.000	0.192	-0.043	-0.068	0.098	0.254	-0.187
Water	-0.132	0.137	-0.032	0.045	0.077	0.011	-0.266	0.192	1.000	-0.475	-0.156	0.186	-0.231	-0.112
Superplasticizer	-0.061	0.206	-0.242	-0.145	-0.086	0.099	-0.088	-0.043	-0.475	1.000	0.182	-0.013	0.103	-0.037
Activator	0.097	-0.329	0.453	0.360	-0.025	-0.047	0.047	-0.068	-0.156	0.182	1.000	-0.012	-0.002	0.115
PE fiber	-0.014	-0.016	0.054	0.141	-0.017	0.093	-0.140	0.098	0.186	-0.013	-0.012	1.000	-0.105	-0.048
Steel fiber	0.156	-0.105	0.206	0.032	0.107	-0.271	0.034	0.254	-0.231	0.103	-0.002	-0.105	1.000	0.182
Curing temperature	0.363	-0.197	0.293	0.095	-0.078	-0.174	0.326	-0.187	-0.112	-0.037	0.115	-0.048	0.182	1.000

图 5 配合比变量皮尔逊相关系数图

Fig. 5 Pearson correlation coefficient chart of mix proportion variables

	Z_1	X_0	X_1	X_2	X_3	X_4	Y_1	Y_2	Y_3
Z_1	1.00	0.45	0.28	0.18	0.05	0.31	0.16	-0.17	0.29
X_0	0.45	1.00	0.01	0.10	0.20	0.23	0.41	0.10	0.06
X_1	0.28	0.01	1.00	-0.24	-0.32	-0.07	0.02	0.03	0.03
X_2	0.18	0.10	-0.24	1.00	0.01	-0.20	0.25	0.38	-0.02
X_3	0.05	0.20	-0.32	0.01	1.00	0.36	0.31	-0.30	0.37
X_4	0.31	0.23	-0.07	-0.20	0.36	1.00	-0.36	-0.52	0.37
Y_1	0.16	0.41	0.02	0.25	-0.31	-0.36	1.00	0.60	-0.38
Y_2	-0.17	0.10	0.03	0.38	-0.30	-0.52	0.60	1.00	-0.17
Y_3	0.29	0.06	0.03	-0.02	0.37	0.37	-0.38	-0.17	1.00

图6 中间变量 Pearson 相关系数图

Fig. 6 Pearson correlation coefficient chart of intermediate variables

相关性分析中, 变量与抗压强度之间存在部分相关性交叉, 许多未达显著水平并不代表无条件依赖路径, 需通过网络结构学习加以识别。相关性分析只能反映线性统计关系, 不能揭示多变量条件依赖结构。低碳 UHPC 强度受多种因素共同影响, 部分变量可能间接影响强度, 单纯 Pearson 相关性不足以支撑智能配合比设计, 需用 BN 模型识别变量层级依赖关系。

从建模角度看, 原始 BN 模型虽通过水化-堆积中间变量提高可解释性, 但仍有优化空间。1) 样本量小且数据来源复杂, 需加强数据质量控制; 2) 部

分变量有偏态和异常值, 需稳健预处理; 3) 原始模型对变量连续性保留不足, 可能造成信息损失。因此, 引入贝叶斯岭回归 BN 有助于提高模型对连续型强度变量的预测能力。

2.2 模型预测性能

本工作首先基于低碳 UHPC 抗压强度形成机理, 构建了如图 7 所示的“材料参数层-中间机理层-目标性能层”3 层条件依赖拓扑结构。与传统机器学习模型直接将配合比参数输入预测模型不同, 该结构将材料组成对抗压强度的影响分解为可解释的中间机理路径, 从而提高了模型结构的物理合理性。

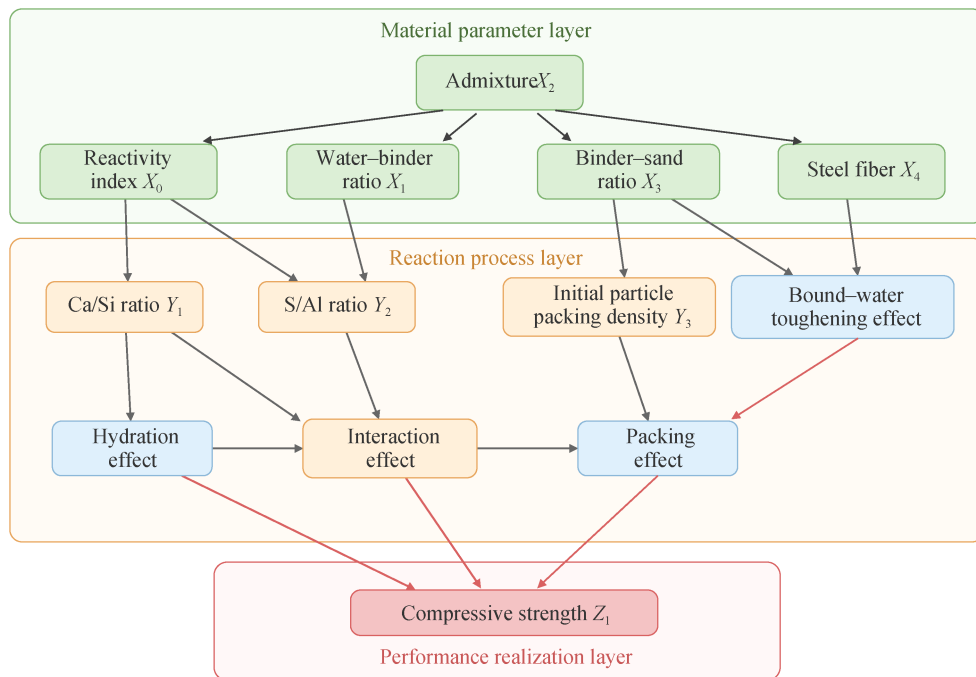


图7 贝叶斯网络初始拓扑结构

Fig. 7 Initial topology structure of the Bayesian network

本工作在相同数据划分和相同预处理流程下，对不同预测模型进行性能比较。所有模型均基于 136 组有效建模样本开展 10 折交叉验证，评价指标包括均方根误差(RMSE)、平均绝对误差(MAE)和决定系数(R^2)。为保证模型评估过程中的一致性，变量转换、标准化参数估计和模型训练均仅在训练折内完成，验证折仅用于最终性能评价。

在上述验证流程下，BN 模型在标准化尺度下获得平均 RMSE=0.281 3，平均 MAE=0.203 1，平均 R^2 =0.910 1。Bootstrap 评估得到 RMSE 的 95%区间为[0.235 3, 0.327 3]，MAE 的 95%区间为[0.174 1, 0.232 1]， R^2 的 95%区间为[0.872 1, 0.948 1]。反标准化后，预测强度均值为 162.11 MPa，预测值标准差为 24.53 MPa，预测区间平均宽度为 46.04 MPa。

为回应可解释基线模型对比不足的问题，本工作进一步补充多元线性回归和岭回归模型作为传统

可解释模型基线。多元线性回归具有参数形式清晰、结果易解释的特点；岭回归在多元线性回归基础上引入 L2 正则化，可在一定程度上缓解小样本多变量条件下的多重共线性问题。随机森林和支持向量回归则作为常用非线性监督学习模型，用于对比 BN 模型与黑箱模型在预测精度方面的差异。由表 6 可见，多元线性回归和岭回归能够提供较为直观的参数解释，但对低碳 UHPC 中水化反应、颗粒堆积、纤维增强及其非线性耦合作用的表达能力有限。随机森林模型在 RMSE 和 R^2 指标上表现较好，说明集成学习模型具有较强的非线性拟合能力；支持向量回归模型的预测精度与 BN 模型处于相近水平。需要说明的是，本工作模型对比的目的并非证明 BN 模型在所有单一精度指标上均优于其他模型，而是评价其在预测精度、条件依赖结构表达、概率推理和材料机理解释方面的综合适用性。

表 6 不同模型预测性能对比

Table 6 Comparison of prediction performance among different models

Model	RMSE	MAE	R^2	Interpretability and model characteristics
Multiple linear regression	0.345 7	0.252 8	0.861 2	Medium; clear parametric form, primarily describes linear relationships
Ridge regression	0.329 4	0.241 5	0.876 8	Medium; L2 regularization, can mitigate multicollinearity
Bayesian network	0.281 3	0.203 1	0.910 1	High; capable of capturing conditional dependencies and predictive uncertainty
Random forest	0.213 5	0.181 2	0.920 0	Low; strong nonlinear fitting capability, but weak structural interpretability
Support vector regression	0.291 2	0.196 5	0.910 0	Low; nonlinear kernel-based fitting, limited mechanistic interpretability

与多元线性回归和岭回归相比，BN 模型不仅能够进行强度预测，还能够进一步表达“材料及工艺参数层–中间机理层–目标性能层”之间的条件依赖关系；与随机森林和支持向量回归相比，BN 模型虽然在部分单一精度指标上并非最高，但能够提供网络结构、预测不确定性和干预敏感性分析结果。因此，BN 模型更适合作为低碳 UHPC 小样本数据条件下兼具预测能力和机理解释能力的智能设计工具。

图 8 为模型预测结果图。从图 8a 左上预测效果图整体来看，散点基本分布在对角线(红色虚线)附近，表明预测值与实际值有较好的相关性。预测范围大约在 50~200 之间，在中间值区域(100~150)的预测效果较好，两端的离散程度略大。整体来看，模型的预测能力尚可，但仍有改进空间。从图 8b 残差分析图可以看出，残差大多分布在 ± 20 范围内，残差呈随机分布，没有明显的系统性偏差。在预测值较大时(180 左右)，残差波动似乎略大，零线(红色虚线)两侧的残差分布相对均匀，说明模型没有明显的过度预测或低估情况。

从图 8c 预测值分布图可以看出，预测值呈现不

对称的分布，主要集中在 150~170 区间，分布呈现双峰特征，可能反映数据中存在 2 个主要群体，尾部较长，特别是右尾，表明有少量较高的预测值。在预测值及 85%置信区间图(图 8d)中，蓝点表示预测值，灰色区域表示置信区间，预测值波动范围在 100~250 之间，置信区间宽度相对稳定，表明模型预测的不确定性较为一致，某些观测点的置信区间明显较宽，说明这些点的预测不确定性较大。

综上，贝叶斯网络强度预测模型的预测效果尚可，但仍有提升空间，在极值区域的预测准确度较低，预测值分布的双峰特征可能与数据不足有关。但残差分布合理，没有明显的系统性偏差，说明该模型具备一定的可靠性。

这一结果说明，贝叶斯网络适用于低碳 UHPC 这种小样本、高维变量且强耦合的材料体系。一方面，机理先验约束降低了模型在小样本条件下产生虚假路径的风险；另一方面，概率推理机制提高了模型对不确定性的表达能力。因此，与单纯黑箱预测模型相比，BN 模型更适合作为低碳 UHPC 智能设计中的可解释预测工具。

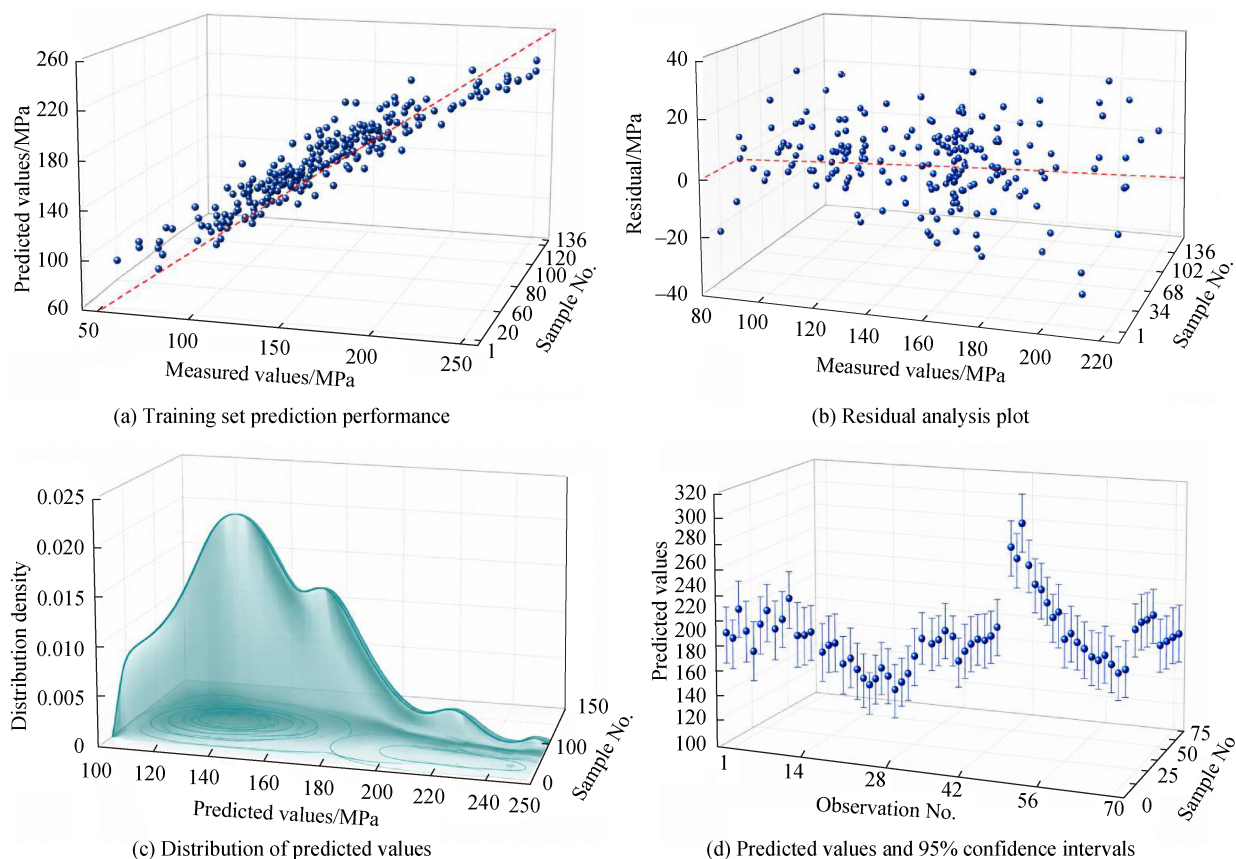


图8 模型预测结果

Fig. 8 Model prediction results

2.3 关键机理变量贡献及网络结构可解释性分析

贝叶斯网络强度预测模型优势不仅在于预测精度，更在于网络结构可视化表达。与传统黑箱机器学习模型相比，BN 模型能通过有向边展示变量间条件依赖关系，揭示低碳 UHPC 配合比参数、中间机理变量与抗压强度的作用路径。图 9 为最终贝叶斯网络结构及关键影路径，红边为主要影响路径，黄边为次要影响路径，绿节点为支持节点。

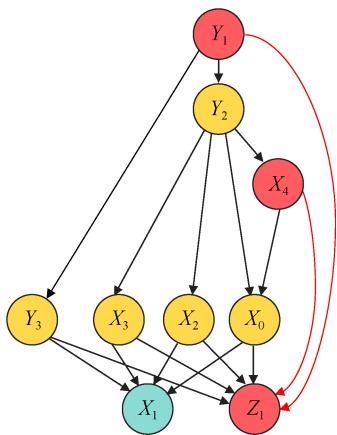


图9 最终贝叶斯网络结构及关键影响路径

Fig. 9 Final Bayesian network structure

从网络层级结构看，活性钙硅比 Y_1 在网络上游，是影响抗压强度 Z_1 的关键起始节点，不仅直接作用于抗压强度，还影响活性硫铝比 Y_2 和初始颗粒堆积密实度 Y_3 ，说明胶凝材料活性氧化物组成在低碳 UHPC 强度形成中起基础性作用。 Y_1 与 C-S-H 凝胶生成潜势密切相关，其指向 Z_1 的路径表明水化产物对抗压强度有主导影响。

活性硫铝比 Y_2 是重要中间节点，下游连接胶凝材料反应活性指数 X_0 、外加剂用量 X_2 、胶砂比 X_3 和初始颗粒堆积密实度 Y_3 等变量，说明硫铝反应平衡与水化产物组成及低碳胶凝材料体系配合比调控有关。初始颗粒堆积密实度 Y_3 主要与水胶比 X_1 和抗压强度 Z_1 存在条件依赖关系，体现颗粒物理堆积对基体致密化和强度发展的影响。需要说明的是，原始 BN 结构中存在 $Y_3 \rightarrow X_1$ 路径。该路径并不表示实际物理过程中初始颗粒堆积密实度决定水胶比；水胶比通常是配合比设计中的预设或调控变量，而 Y_3 主要由颗粒级配和密度参数计算得到。因此， $Y_3 \rightarrow X_1$ 更适宜理解为当前样本、变量集合和结构学习约束下的统计条件依赖方向，而非严格物理因果路径。该路径的出现可能与低碳 UHPC 配合比设计

中粉体体积分数、颗粒级配、用水量和工作性调控之间的耦合有关，也可能受到小样本条件下 BN 等价结构和评分函数选择的影响。

为进一步检验该路径是否影响模型预测性能和

主要机理结论，本工作将 $Y_3 \rightarrow X_1$ 加入禁止边集合，在保持样本集、变量体系、评分函数和交叉验证流程不变的条件下，重新进行 BN 结构学习和模型评价。禁止边约束前后的模型性能对比如表 7 所示。

表 7 $Y_3 \rightarrow X_1$ 禁止边约束前后 BN 模型性能对比

Table 7 Comparison of BN model performance before and after forbidding the $Y_3 \rightarrow X_1$ edge

Model setting	Structural constraint	RMSE	MAE	R^2
BN-basic	Basic mechanism constraint	0.281 3	0.203 1	0.910 1
BN-forbidden	Basic constraint + forbidden edge $Y_3 \rightarrow X_1$	0.287 6	0.208 4	0.905 4

BN-basic = original BN model with basic mechanism constraints; BN-forbidden = BN-basic plus a forbidden edge from Y_3 to X_1 .

由表 7 可见，将 $Y_3 \rightarrow X_1$ 设置为禁止边后，BN 模型的 RMSE、MAE 和 R^2 分别变化为 0.2876、0.2084 和 0.9054，整体预测性能与原 BN 模型处于相近水平。与此同时，活性钙硅比 Y_1 、活性硫铝比 Y_2 和初始颗粒堆积密实度 Y_3 仍保持为影响抗压强度的重要机理变量，关键变量贡献排序未发生根本性改变。这说明，原始网络中的 $Y_3 \rightarrow X_1$ 路径主要反映样本条件依赖方向，其存在与否不会改变本工作关于水化效应、堆积效应及其协同作用共同影响低碳 UHPC 抗压强度的主要结论。

需要强调的是，本工作不将 BN 结构学习得到的每一条有向边均解释为严格物理因果链，而是将其理解为在机理先验约束、样本分布和评分函数共同作用下形成的条件依赖结构。通过补充 $Y_3 \rightarrow X_1$ 禁止边约束前后的对比分析，可以进一步说明本工作 BN 模型的核心解释并不依赖该单一路径，而主要来自水化-堆积机理变量与抗压强度之间稳定的条件依赖关系。

从影响路径看， Y_1 和钢纤维掺量 X_4 对抗压强度具有较强直接影响； Y_2 、 Y_3 、 X_0 、 X_2 和 X_3 则通过直接或间接路径共同作用于强度发展。水胶比 X_1 是重要调控变量，但在当前 BN 结构中主要表现为与其他中间变量之间的条件依赖关系。

边强度分析显示，强度较高的交互路径包括 X_3 与 Y_3 、 X_2 与 Y_2 、 X_1 与 Y_3 、 X_4 与 Y_3 的交互效应，说明胶砂比、水胶比、外加剂用量和钢纤维掺量通过与水化变量和堆积变量耦合，共同调控 UHPC 基体结构。

为明确变量贡献度的计算过程，本工作基于训练后的 BN 模型开展机理约束下的干预敏感性分析，具体流程如图 10 所示。其基本流程为：首先选定待分析的机理变量，包括活性钙硅比 Y_1 、活性硫铝比 Y_2 、初始颗粒堆积密实度 Y_3 及水化-堆积交互

项；随后分别设定各变量的不同干预水平，并通过 BN 推理计算目标变量 Z_1 的响应变化；进一步计算不同干预水平下的干预效应(CEi)，并求得平均响应效应(ACEi)。第 i 个变量的相对贡献度按下式计算：

$$C_i = \frac{|E_i|}{\sum_j |E_j|} \times 100\% \quad (6)$$

式中： E_i 为第 i 个机理变量在 BN 干预敏感性分析中的平均响应效应， C_i 为第 i 个机理变量的相对贡献度， j 为参与归一化的变量数量。采用绝对值归一化是为了表征变量对抗压强度预测响应变化的相对影响强度；变量影响方向则结合干预响应趋势另行讨论。

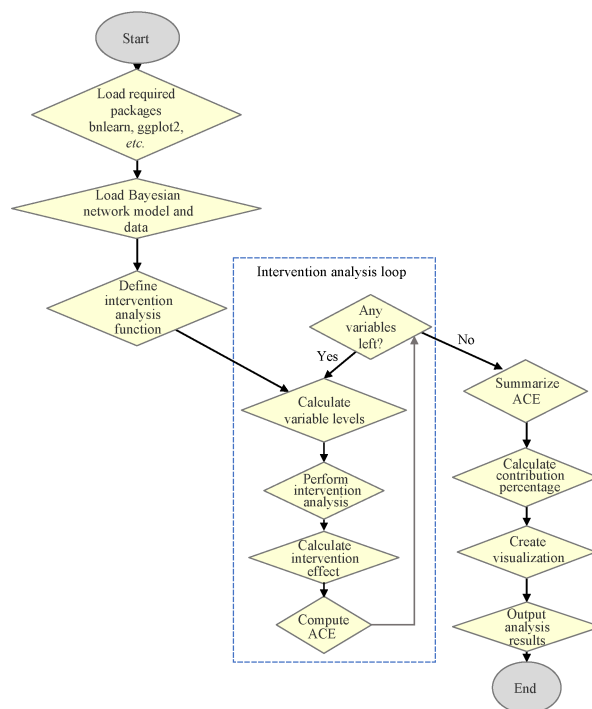


图 10 干预分析程序流程图

Fig. 10 Flowchart of the intervention analysis procedure

需要说明的是, 该贡献度仅表示在本工作样本空间、变量定义和 BN 结构约束下的相对敏感性结果, 不应理解为适用于所有低碳 UHPC 体系的普适材料机理比例。

基于训练后的 BN 模型开展变量干预分析, 将干预敏感性效应转换为贡献度后可知, 活性钙硅比 Y_1 、活性硫铝比 Y_2 、初始颗粒堆积密实度 Y_3 及其交互作用对抗压强度的贡献分别为 28.7%、19.2%、35.1% 和 17.0%。活性钙硅比和活性硫铝比表示水化效应, 初始颗粒堆积密实度表示堆积效应, 三者交互作用表示水化–堆积协同效应。分析结果表明, 低碳 UHPC 抗压强度受水化效应(47.9%)与颗粒堆积效应(35.1%)共同控制, 初始颗粒堆积密实度贡献最高, 活性钙硅比次之, 水化–堆积交互作用体现“水化–堆积协同”对强度发展的调节作用。因此, 低碳 UHPC 智能设计应优先优化活性氧化物比例、初始颗粒堆积密实度及其与胶砂比、水胶比和钢纤维掺量的匹配关系。

2.4 独立试验验证分析

基于 BN 模型和变量贡献度分析, 本工作获得 5 组低碳 UHPC 候选配比并开展独立试验验证。表 5 给出了验证样本的关键机理变量和 BN 预测强度区间。由表可知, 预测强度随初始颗粒堆积密实度

和活性 CaO/SiO_2 的提高总体增加; 当活性 $\text{SO}_3/\text{Al}_2\text{O}_3$ 偏高或堆积密实度不足时, 预测强度相应降低, 这与 BN 变量贡献度分析结果一致。

试验结果显示(图 11a), 5 组验证配合比的实测 28 d 抗压强度均落入 BN 模型给出的 95% 预测区间, 预测偏差标准差为 6.46 MPa, 平均偏差约为 0.6 MPa, 平均相对偏差约为 0.45%。该结果初步表明, 在本工作验证样本范围内, 模型对未参与训练的候选低碳 UHPC 配合比具有一定的预测能力。需要强调的是, 验证样本数量有限, 该结果主要用于检验模型在实际配合比设计场景中的初步适用性, 尚不能替代更大规模的外部验证。

从机理一致性看(图 11b), 验证样本中强度较高的配合比通常具有较高的初始颗粒堆积密实度和适宜的活性 CaO/SiO_2 , 而强度较低的样本多表现为堆积密实度偏低或活性 $\text{SO}_3/\text{Al}_2\text{O}_3$ 偏高。实测钙硅比、硫铝比和颗粒堆积密实度与强度变化趋势总体一致, 支持 BN 模型中“水化效应–堆积效应–协同效应”3 类机理路径的合理性。需要说明的是, 5 组独立验证样本主要用于检验模型在候选低碳 UHPC 配比筛选场景中的初步适用性, 其结果不作为大样本统计意义上的外部泛化验证, 初步表明模型在本工作验证样本范围内具有一定的预测能力。

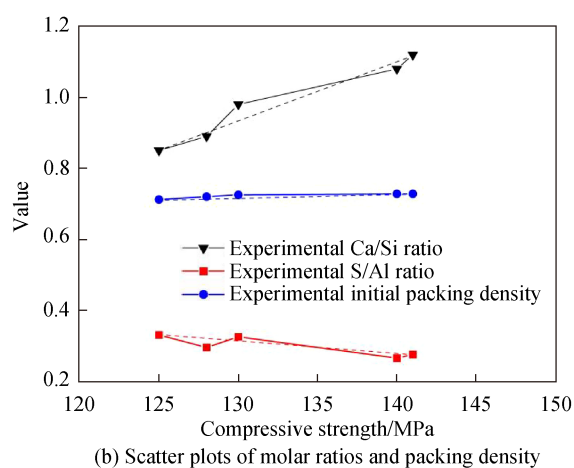
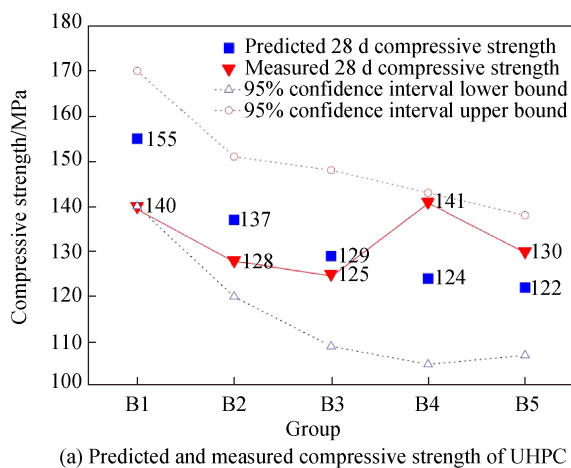


图 11 UHPC 性能预测验证

Fig. 11 Predicted validation of UHPC properties

3 结论

本工作以低碳 UHPC 胶凝材料体系为对象, 围绕 28 d 抗压强度形成机制与可解释建模问题, 构建了机理先验驱动的小样本的贝叶斯网络预测模型, 并在此基础上分析了关键变量贡献及材料学含义。主要结论如下。

1) 本工作构建了融合水化–堆积机理先验与数据驱动结构学习的小样本可解释 BN 模型, 将低碳 UHPC 配合比参数、中间机理变量和 28 d 抗压强度纳入“材料及工艺参数层–中间机理层–目标性能层”的贝叶斯网络模型框架, 实现了从原始配比变量到目标性能的层级化表达。

2) 经样本筛选和物理核查后, 491 组文献原始

数据最终获得136组有效建模样本。通过将活性氧化物摩尔比、胶凝材料反应活性指数和初始颗粒堆积密实度引入BN模型,在一定程度上增强了模型输入变量的物理含义和可解释性。

3) 在10折交叉验证流程下,BN模型获得平均 $R^2=0.910$,预测精度与随机森林和支持向量回归处于同一量级,相对于其他神经网络“黑箱”预测模型,贝叶斯网络预测方法更适用于需要机理解释的低碳UHPC智能设计。

4) 干预敏感性分析表明,水化效应、颗粒堆积效应和水化-堆积协同效应对抗压强度的贡献分别为47.9%、35.1%和17.0%。其中初始颗粒堆积密实度和活性钙硅比是影响强度的重要机理变量。

5) 5组独立试验验证样本的实测28d抗压强度均位于BN预测区间内,初步表明该模型在本工作验证样本范围内对候选低碳UHPC配比具有一定的预测能力。后续可进一步扩展不同低碳胶凝材料体系、养护制度和纤维掺量下的验证样本,以提高模型外部验证的可靠性。

(第二十八届中国科协年会学术论文)

参考文献:

- WANG X P, WU D, ZHANG J R, et al. Design of sustainable ultra-high performance concrete: A review[J]. *Constr Build Mater*, 2021, 307: 124643.
- ZHOU M, WU Z M, OUYANG X, et al. Mixture design methods for ultra-high-performance concrete—A review[J]. *Cem Concr Compos*, 2021, 124: 104242.
- SHI Y, LONG G C, ZENG X H, et al. Green ultra-high performance concrete with very low cement content[J]. *Constr Build Mater*, 2021, 303: 124482.
- PARK S, WU S Y, LIU Z C, et al. The role of supplementary cementitious materials (SCMs) in ultra high performance concrete (UHPC): A review[J]. *Materials*, 2021, 14(6): 1472.
- SUN G R, DU M H, SHAN B H, et al. Ultra-high performance concrete design method based on machine learning model and steel slag powder[J]. *Case Stud Constr Mater*, 2022, 17: e01682.
- FAN D Q, ZHU J Y, FAN M X, et al. Intelligent design and manufacturing of ultra-high performance concrete (UHPC)—A review[J]. *Constr Build Mater*, 2023, 385: 131495.
- BOURSAS F, BOUFARH R, ALTOWAJRI Y, et al. A hybrid machine learning approach for predicting the flexural strength of concrete reinforced with waste aluminium fibres[J]. *Sci Rep*, 2026, 16: 10763.
- ANTONIADI A M, DU Y H, GUENDOUZ Y, et al. Current challenges and future opportunities for XAI in machine learning-based clinical decision support systems: A systematic review[J]. *Appl Sci*, 2021, 11(11): 5088.
- ALMUTAIRI A. Explainable machine learning-based prediction of compressive strength in sustainable recycled aggregate self-compacting concrete using SHAP analysis[J]. *Sustainability*, 2025, 17(24): 11334.
- YU R, ZHOU F J, YIN T Y, et al. Uncovering the approach to develop ultra-high performance concrete (UHPC) with dense meso-structure based on rheological point of view: Experiments and modeling[J]. *Constr Build Mater*, 2021, 271: 121500.
- 本斯迪德 J, 巴恩斯 P. 水泥的结构和性能[M]. 廖欣, 译. 北京: 化学工业出版社, 2009.
- 梅塔 P K, 蒙特罗 P J M. 混凝土: 微观结构、性能和材料[M]. 覃维祖, 王栋民, 丁建彤, 译. 北京: 中国电力出版社, 2008.
- 覃维祖, 曹峰. 一种超高性能混凝土: 活性粉末混凝土[J]. *工业建筑*, 1999, 29(4): 16–18.
- QIN Weizu, CAO Feng. *Ind Constr*, 1999, 29(4): 16–18.
- HE Z H, HAN X D, ZHANG M Y, et al. A novel development of green UHPC containing waste concrete powder derived from construction and demolition waste[J]. *Powder Technol*, 2022, 398: 117075.
- FAN D Q, YU R, SHUI Z H, et al. A novel approach for developing a green ultra-high performance concrete (UHPC) with advanced particles packing meso-structure[J]. *Constr Build Mater*, 2020, 265: 120339.
- ZHU P, DU S J, HENG P, et al. Investigation on mix proportions of ultra-high performance concrete with recycled powder and recycled sand[J]. *Buildings*, 2025, 15(7): 1048.
- MISHRA K, PAUL P S, GHOSH C N, et al. Predicting and optimising the strength of cemented paste fills through Bayesian network model[J]. *Min Metall Explor*, 2022, 39(5): 2095–2120.
- JONG S C, ONG D E L. A Bayesian inference framework for geomaterial characterization and evaluation of complex soil-structure interactions[J]. *Comput Geotech*, 2024, 172: 106452.
- PAGE M J, MOHER D, BOSSUYT P M, et al. PRISMA 2020 explanation and elaboration: Updated guidance and exemplars for reporting systematic reviews[J]. *Bmj*, 2021: n160.
- ABDELLATIEF M, ELRAHMAN M A, ELGENDY G, et al. Response surface methodology-based modelling and optimization of sustainable UHPC containing ultrafine fly ash and metakaolin[J]. *Constr Build Mater*, 2023, 388: 131696.
- SHAO R Z, WU C Q, LI J, et al. Repeated impact resistance of steel fibre-reinforced dry UHPC: Effects of fibre length, mixing method, fly ash content and crumb rubber[J]. *Compos Struct*, 2023, 321: 117274.
- LIU Y, JING R, YAN P Y. Improving environmental efficiency of ultra-high-performance concrete (UHPC) through appropriate application of ultrafine quartz powder[J]. *J Sustain Cem Based Mater*, 2023, 12(8): 941–950.
- YANG J, ZENG J Y, HE X Y, et al. Eco-friendly UHPC prepared from high volume wet-grinded ultrafine GGBS slurry[J]. *Constr Build Mater*, 2021, 308: 125057.
- HE Z H, ZHU H N, ZHANG M Y, et al. Autogenous shrinkage and nano-mechanical properties of UHPC containing waste brick powder derived from construction and demolition waste[J]. *Constr Build Mater*, 2021, 306: 124869.
- SHI Y, LONG G C, ZEN X H, et al. Design of binder system of eco-efficient UHPC based on physical packing and chemical effect optimization[J]. *Constr Build Mater*, 2021, 274: 121382.
- SHI Y, LONG G C, MA C, et al. Design and preparation of ultra-high performance concrete with low environmental impact[J]. *J Clean Prod*, 2019, 214: 633–643.
- YU R, SPIESZ P, BROUWERS H J H. Development of an eco-friendly ultra-high performance concrete (UHPC) with efficient cement and mineral admixtures uses[J]. *Cem Concr Compos*, 2015, 55: 383–394.
- LING G, SHUI Z H, GAO X, et al. Utilizing iron ore tailing as cementitious material for eco-friendly design of ultra-high performance

- concrete (UHPC)[J]. *Materials*, 2021, 14(8): 1829.
- [29] AHMED T, ELCHALAKANI M, KARRECH A, et al. ECO-UHPC with high-volume class-F fly ash: New insight into mechanical and durability properties[J]. *J Mater Civ Eng*, 2021, 33(7): 04021174.
- [30] DU J, LIU Z, CHRISTODOULATOS C, et al. Utilization of off-specification fly ash in preparing ultra-high-performance concrete (UHPC): Mixture design, characterization, and life-cycle assessment[J]. *Resour Conserv Recycl*, 2022, 180: 106136.
- [31] QIAN D, YU R, SHUI Z H, et al. A novel development of green ultra-high performance concrete (UHPC) based on appropriate application of recycled cementitious material[J]. *J Clean Prod*, 2020, 261: 121231.
- [32] ODLER I, RÖBLER M. Investigations on the relationship between porosity, structure and strength of hydrated Portland cement pastes. II. Effect of pore structure and of degree of hydration[J]. *Cem Concr Res*, 1985, 15(3): 401–410.
- [33] RÖBLER M, ODLER I. Investigations on the relationship between porosity, structure and strength of hydrated Portland cement pastes I. Effect of porosity[J]. *Cem Concr Res*, 1985, 15(2): 320–330.
- [34] SHI C J, WU Z M, XIAO J F, et al. A review on ultra high performance concrete: Part I. Raw materials and mixture design[J]. *Constr Build Mater*, 2015, 101: 741–751.
- [35] SNELLINGS R, MACHNER A, BOLTE G, et al. Hydration kinetics of ternary slag-limestone cements: Impact of water to binder ratio and curing temperature[J]. *Cem Concr Res*, 2022, 151: 106647.
- [36] LI D L, SUN R, WANG D M, et al. Study on the pozzolanic activity of ultrafine circulating fluidized-bed fly ash prepared by jet mill[J]. *Fuel*, 2021, 291: 120220.
- [37] WALKER R, PAVÍA S. Physical properties and reactivity of pozzolans, and their influence on the properties of lime-pozzolan pastes[J]. *Mater Struct*, 2011, 44(6): 1139–1150.
- [38] DONATELLO S, TYRER M, CHEESEMAN C R. Comparison of test methods to assess pozzolanic activity[J]. *Cem Concr Compos*, 2010, 32(2): 121–127.
- [39] RAHMAN S A, DODD A, KHAIR S, et al. Assessment of lithium slag as a supplementary cementitious material: Pozzolanic activity and microstructure development[J]. *Cem Concr Compos*, 2023, 143: 105262.
- [40] ZHANG S F, NIU D T. Hydration and mechanical properties of cement-steel slag system incorporating different activators[J]. *Constr Build Mater*, 2023, 363: 129981.
- [41] WANG X Y. Analysis of hydration and strength optimization of cement-fly ash-limestone ternary blended concrete[J]. *Constr Build Mater*, 2018, 166: 130–140.
- [42] BENTZ D P. CEMHYD3D: A three-dimensional cement hydration and microstructure development modelling package. Version 2.0[R]. NISTIR 6485. Gaithersburg: National Institute of Standards and Technology, 2000.
- [43] YONIS A, OINAM Y, PYO S. Hydration, fresh and mechanical properties of clinker-free ultra-high performance concrete (UHPC) incorporating thermo-mechanically activated waste concrete powder[J]. *J Build Eng*, 2026, 120: 115550.
- [44] RASHAD A M, ZEEDAN S R. A preliminary study of blended pastes of cement and quartz powder under the effect of elevated temperature[J]. *Constr Build Mater*, 2012, 29: 672–681.
- [45] MOUSA A. Utilization of coal bottom ash from thermal power plants as a cement replacement for building: A promising sustainable practice[J]. *J Build Eng*, 2023, 74: 106885.
- [46] MUHEDIN D A, IBRAHIM R K. Effect of waste glass powder as partial replacement of cement & sand in concrete[J]. *Case Stud Constr Mater*, 2023, 19: e02512.
- [47] ESMAEILI J, ASLANI H, ONUAGULUCHI O. Reuse potentials of copper mine tailings in mortar and concrete composites[J]. *J Mater Civ Eng*, 2020, 32(5): 04020084.
- [48] SUN J F, ZUNINO F, SCRIVENER K. Hydration and phase assemblage of limestone calcined clay cements (LC3) with clinker content below 50%[J]. *Cem Concr Res*, 2024, 177: 107417.
- [49] MONZO J, PAYÁ J, BORRACHERO M V, et al. Study of cement-based mortars containing Spanish ground sewage sludge ash[M]//*Waste Materials in Construction - Putting Theory into Practice, Proceedings of the International Conference on the Environment and Technical Implications of Construction with Alternative Materials*. Amsterdam: Elsevier, 1997: 349–354.
- [50] GU C P, JI Y J, YAO J K, et al. Feasibility of recycling sewage sludge ash in ultra-high performance concrete: Volume deformation, microstructure and ecological evaluation[J]. *Constr Build Mater*, 2022, 318: 125823.
- [51] 曹荣奎. 基于 CPM 模型和比强度法的超高性能混凝土配合比设计研究[D]. 长沙: 湖南大学, 2008: 15–30.
- CAO Rongkui. Study on mix proportion design of ultra-high performance concrete based on CPM model and specific strength[D]. Changsha: Hunan University, 2008: 15–30.
- [52] 董立岩, 苑森淼, 刘光远, 等. 基于预测能力的连续贝叶斯网络结构学习[J]. *计算机工程与应用*, 2007, 43(9): 23–24.
- DONG Liyan, YUAN Senmiao, LIU Guangyuan, et al. *Comput Eng Appl*, 2007, 43(9): 23–24.
- [53] ZHOU J, ZHENG K R, LIU Z Q, et al. Chemical effect of nano-alumina on early-age hydration of Portland cement[J]. *Cem Concr Res*, 2019, 116: 159–167.

作者贡献声明:

李依芮: 论文构思、设计研究方法和实验方案、模型算法、撰写初稿

曾晓辉: 分析/综合数据并推导结论, 监督指导、审阅与修订

曾永平: 提供资源、获取资助、项目管理

王鑫: 论文构思、审阅与修订

梁昱: 论文构思, 审阅与修订

龙广成: 监督指导、审阅与修订

谢友均: 监督指导、审阅与修订

Interpretable Bayesian Network Modeling for Intelligent Design of Low-Carbon Ultra-High-Performance Concrete

LI Yirui^{1,2,4,5}, ZENG Xiaohui^{2,3}, ZENG Yongping³, WANG Xin⁶, LIANG Yu⁷, LONG Guangcheng², XIE Youjun²

(1. School of Physical Sciences and Technology, Yili Normal University, Yili 835000, Xinjiang, China; 2. School of Civil Engineering, Central South University, Changsha 410083, China; 3. State Key Laboratory of Tropic Ocean Engineering Materials and Materials Evaluation, Hainan University, Haikou 570228, China; 4. Xinjiang Laboratory of Phase Transitions and Microstructures in Condensed Matters, College of Physical Science and Technology, Yili 835000, Xinjiang, China; 5. Yili Engineering Research Center of Green Silicon-based Materials, Yili 835000, Xinjiang, China; 6. Research Center for Solid Waste Utilization and Low-Carbon Building Materials, Institute of Technical Information for Building Materials Industry of China, Beijing 100024, China; 7. School of Chemistry and Chemical Engineering, Yili Normal University, Yili 835000, Xinjiang, China)

Extended Abstract

Introduction Ultra-high-performance concrete (UHPC) has been widely used in bridges, tunnels, prefabricated structures, and other demanding engineering applications owing to its high compressive strength, excellent toughness, and superior durability. However, conventional UHPC typically requires a high cement content, high dosages of reactive powders, and steel fiber reinforcement, leading to considerably higher carbon emissions than ordinary concrete. The partial replacement of ordinary Portland cement (OPC) with low-carbon cementitious materials, such as ground granulated blast-furnace slag, fly ash, silica fume, limestone powder, belite cement, and other supplementary cementitious materials, has therefore become an important strategy for developing low-carbon UHPC. The incorporation of low-carbon binders enhances sustainability but also increases the complexity of mixture proportion design. Variations in oxide composition, reaction activity, particle size distribution, and hydration products jointly affect the compressive strength of low-carbon UHPC through hydration reactions, particle packing, fiber reinforcement, and curing conditions. Although machine learning models have shown good prediction performance in concrete strength prediction, most of them remain black-box approaches and provide limited physical interpretability. Post-hoc explanation methods, such as feature importance analysis, SHAP, and LIME, can identify statistical associations, but they may generate physically unrealistic virtual mixture proportions when strict mix proportion constraints and material boundaries are ignored. To address these limitations, this study proposes an interpretable Bayesian network (BN) modelling framework for the intelligent design of low-carbon UHPC. The proposed framework integrates hydration–packing mechanism priors with data-driven structure learning, aiming to describe the conditional dependencies among mixture proportion parameters, intermediate mechanism variables, and 28 d compressive strength. By introducing physically meaningful intermediate variables, the model is expected to provide both reliable strength prediction and mechanistic interpretation for low-carbon UHPC mixture design.

Methods A total of 491 original UHPC mixture proportion records were collected through a systematic literature review following the PRISMA guidelines. After unit standardization, variable transformation, outlier checking, and valid sample screening, 136 valid samples were retained for model construction. The target variable was the 28 d compressive strength of UHPC, denoted as Z_1 . To improve the physical interpretability of the model, the original high-dimensional mixture proportion variables were transformed into a hydration–packing feature system. The material/process variables included the cementitious material reaction activity index X_0 , water-to-binder ratio X_1 , activator-to-binder ratio X_2 , binder-to-sand ratio X_3 , and steel fiber volume fraction X_4 . The intermediate mechanism variables included the modified CaO/SiO_2 molar ratio Y_1 , the modified $\text{SO}_3/\text{Al}_2\text{O}_3$ molar ratio Y_2 , and the initial particle packing density Y_3 . These variables were used to represent C-S-H formation potential, sulfate-aluminate reaction balance, and the initial physical compactness of the particle system, respectively. Based on the mechanism of low-carbon UHPC strength formation, a three-layer BN structure was constructed, consisting of a material and process parameter layer, an intermediate mechanism layer, and a target performance layer. Mechanism-informed constraints were introduced to prevent physically unreasonable paths, such as reverse links from compressive strength to mix design variables. Structure learning was performed using a combined strategy involving the hill-climbing, MMHC, and Tabu Search algorithms. bootstrap resampling was adopted to evaluate edge stability, and the BGe score was used as the main scoring criterion, with BIC and AIC used for sensitivity comparison. For parameter learning, maximum likelihood estimation was used for auxiliary variables, while Bayesian ridge regression was adopted for continuous compressive strength prediction. To reduce the risk of data leakage during model evaluation, all preprocessing steps, including variable transformation, standardization parameter estimation, outlier threshold determination, BN structure learning, bootstrap-based stable edge selection, and parameter learning, were embedded within the training folds of a 10-fold cross-validation procedure. The validation folds were used only for final performance evaluation.

Results and discussion The proposed BN model achieved good prediction accuracy for the 28 d compressive strength of low-carbon UHPC. Based on 10-fold cross-validation and Bootstrap evaluation, the model obtained an average RMSE of 0.281 3, an

average MAE of 0.203 1, and an average R^2 of 0.910 1. The predicted mean compressive strength was 162.11 MPa, with a standard deviation of 24.53 MPa and an average confidence interval width of 46.04 MPa. Compared with random forest and support vector regression models, the BN model provided comparable prediction performance while also offering explicit conditional dependency paths and uncertainty representation. Correlation analysis indicated that curing temperature, pozzolanic cementitious materials, quartz sand, and steel fiber content generally were positively correlated with compressive strength, whereas the water-to-binder ratio and cement content were weakly negatively correlated. However, Pearson correlation analysis describes only linear statistical relationships and could not reveal hierarchical conditional dependencies among variables. Therefore, BN modeling was necessary to identify indirect effects and mechanism-related pathways. The final BN structure demonstrated that the modified CaO/SiO₂ molar ratio Y_1 acted as an important upstream node associated with compressive strength. This indicates that the active oxide composition of cementitious materials plays a fundamental role in low-carbon UHPC strength formation. The modified SO₃/Al₂O₃ molar ratio Y_2 served as an important intermediate node, reflecting the role of sulfate-aluminate reaction balance in hydration product formation. The initial particle packing density Y_3 was directly related to the physical compactness of the matrix and contributed substantially to strength development. Mechanism-informed intervention sensitivity analysis further showed that Y_1 , Y_2 , Y_3 , and their interaction contributed 28.7%, 19.2%, 35.1%, and 17.0% to compressive strength, respectively. When Y_1 and Y_2 were combined as the hydration effect, the hydration effect, packing effect, and hydration-packing interaction contributed 47.9%, 35.1%, and 17.0%, respectively. These results suggest that the strength development of low-carbon UHPC is jointly controlled by hydration reactions, particle packing, and their nonlinear coupling. Therefore, intelligent mix design should prioritize the optimization of active oxide ratios, initial particle packing density, and their compatibility with the binder-to-sand ratio, water-to-binder ratio, and steel fiber content. A preliminary independent validation using five unseen low-carbon UHPC mixtures showed that the measured 28 d compressive strengths were consistent with the BN-predicted values and fell within the 95% prediction intervals. The standard deviation of prediction bias was 6.46 MPa, and the average relative deviation was approximately 0.45%. This provides preliminary support for the applicability of the proposed framework for candidate mix screening and strength prediction. Nevertheless, because the number of validation mixtures was limited, further experimental data covering broader cementitious systems, curing regimes, and fiber contents are still needed to improve the generalizability of the model.

Conclusions In this study, an interpretable Bayesian network modelling framework was developed for the intelligent design of low-carbon UHPC. By integrating hydration-packing mechanism priors with data-driven structure learning, the proposed model described a hierarchical probabilistic relationship among material and process parameters, intermediate mechanism variables, and 28 d compressive strength. The mechanism-constrained BN model achieved high prediction accuracy under small-sample and high-dimensional conditions, with an average R^2 of 0.91 based on 10-fold cross-validation. Compared with conventional black-box machine learning approaches, the proposed BN framework not only maintained competitive predictive performance but also provided interpretable conditional dependency paths and uncertainty estimation. The modified CaO/SiO₂ molar ratio, modified SO₃/Al₂O₃ molar ratio, and initial particle packing density were identified as key mechanism variables governing compressive strength. The intervention sensitivity analysis showed that hydration effects (47.9%), packing effects (35.1%), and hydration-packing interactions (17.0%) jointly controlled the strength formation of low-carbon UHPC. Independent experimental validation provided preliminary support for the applicability of the proposed framework for candidate mix screening and strength prediction. This method provides a useful probabilistic modeling tool for the interpretable and intelligent design of low-carbon UHPC.

Keywords low-carbon ultra-high-performance concrete; bayesian network; compressive strength; interpretable modeling; intelligent design