

基于可解释机器学习的混凝土碳化深度显式预测公式构建

李文佳, 冯 攀, 刘 新, 谢 辉, 李迪宁

(东南大学材料科学与工程学院, 重大基础设施工程材料全国重点实验室, 南京 211189)

摘 要: 准确预测混凝土碳化深度对于钢筋混凝土结构耐久性评估、服役寿命预测及水泥基材料碳吸收能力分析具有重要意义。传统公式模型难以准确刻画材料组成、养护制度和服役环境之间的非线性耦合作用, 而机器学习(ML)模型虽具有较高预测精度, 但缺乏明确解析表达形式, 限制了其机理分析和工程应用。为实现由高精度黑箱预测模型向可解释公式模型的转化, 本工作基于自然碳化文献数据库, 采用决策树(DT)、随机森林(RF)、XGBoost(XGB)和 CatBoost(CB)建立碳化深度预测模型, 并结合沙普利加性解释(Shapley additive explanations, SHAP)方法进行特征筛选和变量贡献函数拟合, 构建显式预测模型。结果表明, 基于 log1p 变换、FS2 特征组合和 CB 算法的模型表现最佳, 训练集和测试集均方根误差(RMSE)分别为 0.55 mm 和 1.14 mm。SHAP 分析表明, 在最终 FS2-CB 模型中, W/CaO、碳化时间和碳化环境是最主要的 3 个影响变量, 说明混凝土碳化深度主要受孔隙传输条件、碳化缓冲能力、暴露时间和环境作用共同控制。其中, W/CaO 能够同时反映孔隙传输能力和碳化缓冲能力, 是表征混凝土抗碳化能力的重要特征。基于 SHAP 贡献函数建立的预测公式(PF)模型在外部数据集验证上的 RMSE 为 4.48 mm, 低于 ML 模型和传统公式模型 F1~F3, 其 RMSE 分别为 5.07 mm 和 5.91~8.52 mm, 表现出更好的跨数据集泛化性能。上述结果表明, 本工作提出的“机器学习建模-SHAP 解释分析-变量贡献函数拟合-显式公式构建”方法框架能够在保持较高预测精度的同时提高模型简洁性和可解释性, 并从数据驱动角度揭示传输条件、碳化缓冲能力和环境作用对混凝土碳化过程的协同影响。

关键词: 机器学习; 碳化深度预测; SHAP; 特征筛选; 显式公式提炼

中图分类号: TP181; TU528 文献标志码: A 文章编号: 0454-5648(2026)10-3373-16

网络出版时间: 2026-07-29



混凝土碳化是影响钢筋混凝土结构耐久性的重要因素^[1]。碳化会降低混凝土碱度从而诱发钢筋腐蚀, 导致结构服役寿命的降低^[2]。同时, 碳化过程实现了水泥基材料对大气 CO₂ 的再吸收, 对降低混凝土结构全生命周期碳排放具有积极作用^[3]。因此, 准确预测混凝土碳化深度对于钢筋混凝土结构耐久性评估及水泥基材料碳吸收能力分析具有重要意义。

混凝土碳化过程受到材料组成、养护条件及服役环境等多种因素的共同影响^[4-6]。水胶比、胶凝材料体系、辅助胶凝材料(SCM)掺量及孔隙结构等材料因素, 以及 CO₂ 浓度、温度和相对湿度等环境因素, 均会影响 CO₂ 在混凝土中的传输与碳化反应过程^[7-9]。各因素之间存在复杂的非线性耦合作用, 使得混凝土碳化深度与影响变量之间呈现复杂的非线性

性关系, 从而增加了碳化深度预测的难度^[10]。

现有碳化预测公式模型通常基于少量关键输入变量建立经验关系^[11], 难以充分描述材料组成与环境因素之间复杂的多变量耦合作用。近年来, 随着混凝土碳化相关数据的不断积累, 神经网络、支持向量机及集成学习等机器学习(ML)方法逐渐被引入碳化深度预测研究^[12-14]。相较于传统公式模型, 机器学习模型能够同时处理多变量输入, 并从大量数据中学习输入变量之间的复杂非线性关系^[15], 从而更好地刻画混凝土碳化过程的多因素耦合影响。已有研究进一步利用 SHAP(Shapley additive explanations)方法分析输入变量对碳化深度预测结果的贡献, 例如识别养护方式、暴露时间、水胶比及 SCM 掺量等关键影响因素^[16-18]。然而, 这些研究多停留在变

收稿日期: 2026-05-15。 修订日期: 2026-05-29。

基金项目: 江苏省科技计划专项资金(前沿引领技术基础研究)重大项目(BK20222004); 国家自然科学基金项目(52478238, 52408240)。

第一作者: 李文佳(2001—), 男, 博士研究生。

通信作者: 冯 攀(1988—), 女, 博士, 教授。

Received date: 2026-05-15. Revised date: 2026-05-29.

First author: LI Wenjia (2001—), male, Doctoral candidate.

E-mail: 230268388@seu.edu.cn

Correspondent author: FENG Pan (1988—), female, Ph.D., Professor.

E-mail: pan.feng@seu.edu.cn

量重要性排序或影响趋势解释层面, SHAP 分析结果主要用于辅助理解模型预测机制, 尚未进一步形成可用于预测的显式数学表达^[19]。同时, 机器学习模型通常缺乏明确的解析表达形式, 其预测过程具有一定“黑箱”特征, 使得模型中变量之间的关系难以直接表达, 从而在工程应用及机理分析中存在一定局限^[20]。因此, 在保持机器学习预测精度优势的基础上, 如何利用可解释分析结果提炼关键变量关系, 并建立具有明确解析表达形式的碳化深度预测模型, 仍是当前研究中的重要问题。

基于上述问题, 本工作提出一种结合特征筛选与可解释机器学习的碳化深度预测方法, 通过从机器学习模型中提炼显式预测公式, 实现预测精度与模型可解释性的统一。首先, 建立不同机器学习预测模型, 并利用 SHAP 方法分析输入变量对预测结果的贡献, 在综合考虑预测精度、变量数据易获得性及碳化机理合理性的基础上, 筛选出关键输入变量, 构建兼顾材料配合比因素与环境因素的优化特征组合。随后, 分析输入变量取值与其 SHAP 贡献之间的关系, 将 SHAP 解释结果由变量重要性分析进一步拓展为变量贡献关系拟合, 并建立相应函数表达式, 从而构建具有明确解析形式的碳化深度显式预测公式。最后, 通过外部自然碳化数据库验证

所提显式公式模型的跨数据来源泛化能力, 为混凝土碳化深度预测及其他水泥基材料性能预测模型的显式化构建提供参考。

1 混凝土碳化深度预测与公式提取方法

1.1 研究框架

混凝土碳化深度预测与公式提取的整体流程如图 1 所示。首先, 基于文献数据库进行参数设计、数据筛选和配合比识别, 构建用于模型训练的混凝土碳化数据库, 并按照配合比分组方式划分训练集和测试集。随后, 以初始参数集合 FS0 为基础, 采用决策树(DT)、随机森林(RF)、XGBoost(XGB)和 CatBoost(CB) 4 种 ML 算法, 结合交叉验证和超参数优化建立碳化深度预测模型, 使用均方根误差(RMSE)和决定系数(R^2)评价模型性能。在此基础上, 利用 SHAP 方法对输入特征进行重要性排序, 并结合冗余性检查、特征删减和机理相关变量保留原则, 逐步构建不同特征集合。最后, 基于最终模型的 SHAP 解释结果拟合变量贡献函数, 构建具有显式数学表达形式的碳化深度预测公式。后续小节将分别对模型构建、特征筛选及公式拟合方法进行说明。

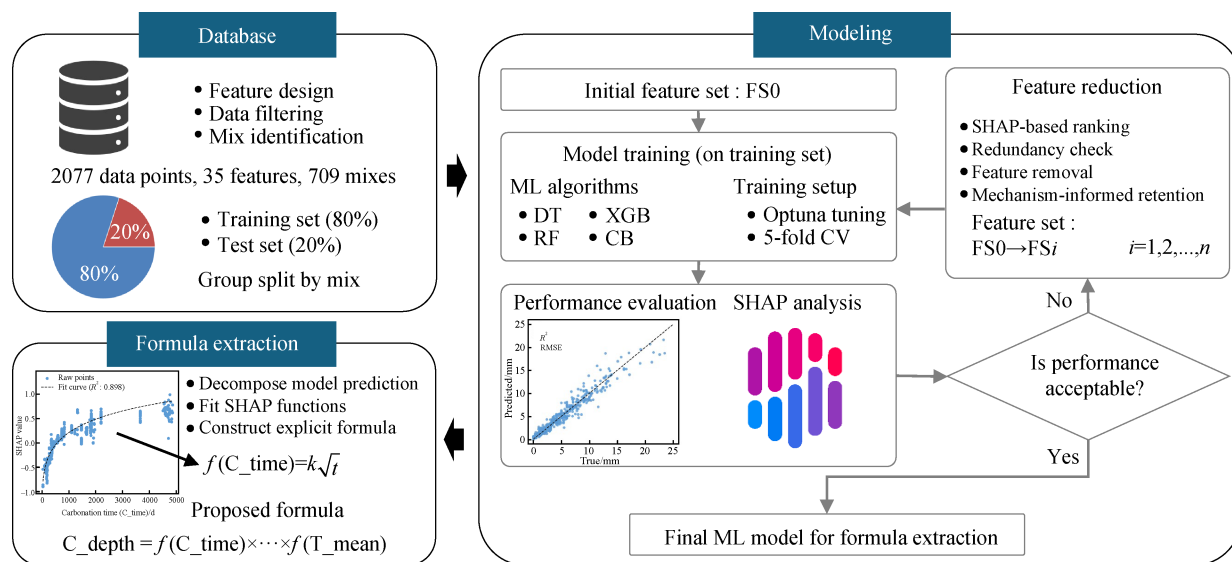


图 1 混凝土碳化深度预测与显式公式提取框架

Fig. 1 Framework for concrete carbonation depth prediction and explicit formula extraction

1.2 数据来源与预处理

为构建混凝土碳化深度预测模型, 使用了 Marani 等^[17]分享的 2165 条自然碳化的数据库。考虑到原始输入变量数量较多且部分参数存在信息冗

余, 在结合混凝土材料组成特征及碳化机理的基础上, 对原始变量进行了整理与重构: 一方面删除并整理了信息重复的变量, 另一方面根据材料组成与环境参数构建了若干组合特征, 并将所有输入变量

归纳为胶凝材料特性、配合比参数、碳化环境条件、养护条件及材料性能 5 类特征。同时, 对同一配合比及相同暴露条件下的多龄期碳化深度数据进行了筛选, 考虑到自然碳化过程中碳化深度通常随暴露时间增加而逐渐增大, 剔除了同一配合比及相同暴露条件下后续龄期碳化深度小于前一龄期的异常数据点, 以减少实验波动或数据记录误差对模型训练的影响。共剔除 88 条不满足单调递增关系的数据, 占原始数据集的 4.1%。最终获得 709 个不同配合比的 2077 条碳化深度数据, 并构建包含 35 个输入特征的数据集用于后续模型构建与分析。

数据库的输入特征的名称、缩写和单位如表 1 所示, 根据混凝土材料组成、配合比设计及碳化过程影响因素的不同, 将所有输入特征划分为胶凝材料特性、配合比参数、碳化环境条件、养护条件和

材料性能 5 类。其中, 胶凝材料特性主要包括普通硅酸盐水泥(OPC)及 SCM 的氧化物组成以及 SCM 类型, 这里考虑的 SCM 包括粉煤灰(F)、矿渣(SI)、石灰石粉(L)、硅灰(SF)和偏高岭土(M), 需要说明的是, 本工作数据库仅包含单一 SCM 掺入体系的数据, 未纳入多种 SCM 复掺体系。配合比参数包括胶凝材料、水、细骨料和粗骨料等组分用量, 以及水胶比(W/B)、水与 CaO 比(W/CaO)、SCM 替代率等关键配合比指标。碳化环境条件包括相对湿度和温度的最大值、最小值及平均值、CO₂ 浓度、碳化环境类型(C_envir)以及碳化暴露时间, 其中 C_envir 采用离散变量表示, 1、2 和 3 分别代表户外无遮挡、室外遮蔽和室内环境^[16]。养护条件以养护时间表示, 材料性能则包括 28 d 水化度(DOH)和 28 d 抗压强度(CS)。

表 1 输入特征的名称、缩写以及单位
Table 1 Names, abbreviations, and units of all input features

Category	Features
Binder properties	Oxide composition [%] of OPC and SCM, SCM type {fly ash (F), slag (SI), limestone (L), silica fume (SF), metakaolin (M)}
Mix proportion	Unit content [kg·m ⁻³] of binder (B), OPC, water (W), fine aggregate (FA), coarse aggregate (CA), SCM, Superplasticizer (SP), air-entraining agent (AE), water-to-binder ratio (W/B), water-to-CaO ratio (W/CaO), SCM replacement level [%] (SCM/B)
Carbonation condition	Annual min, mean, max of monthly average relative humidity [%] (RH_min, RH_mean, RH_max), Annual min, mean, max of monthly average temperature [°C] (T_min, T_mean, T_max), Annual average of CO ₂ concentration [%] (CO ₂), Carbonation environment {indoor (3), outdoor sheltered (2), outdoor unsheltered (1)} (C_envir), Carbonation exposure time [day] (C_time)
Curing condition	Curing time [day] (Cu_time)
Material properties	Degree of hydration at 28 d [%] (DOH), compressive strength at 28 d [MPa] (CS)

Note: Abbreviations in () and units in [].

图 2 为混凝土碳化深度数据库中各输入变量及目标变量的经验累计分布, 用于表征不同特征的数据取值范围及样本分布特征。由图 2 可见, 不同变量的分布形式存在明显差异: 胶凝材料用量、集料用量及水用量等配合比参数主要集中在常用工程配比范围内。温度、相对湿度、CO₂ 浓度及碳化时间等环境与试验条件变量表现出一定的离散性, 反映了不同文献中试验制度和暴露条件的差异。部分 SCM、外加剂及氧化物组成变量在低值区间样本占比较高, 说明相关变量在数据库中具有一定的偏态分布特征。碳化环境采用离散数值进行表征, 较大碳化深度样本数量相对较少, 表明数据集存在一定的不均衡分布。上述结果说明, 混凝土碳化数据库具有多源异质性和非均匀分布特征, 且目标变量碳化深度存在明显偏态分布。因此, 有必要在模型构建过程中进行目标变量变换、特征筛选及泛化能力

评价。

1.3 机器学习建模方法

为构建碳化深度预测模型, 采用 DT、RF、XGB 和 CB 4 种机器学习算法进行建模。选择上述算法主要是因为树类模型能够处理非线性关系和变量交互作用, 对变量尺度不敏感, 且具备较好的可解释性。DT 是一种基于树结构的非参数学习方法, 通过递归划分特征空间实现预测, RF 通过构建多棵决策树并进行集成平均, 以降低模型方差并提高预测稳定性^[21], XGB 是一种基于梯度提升框架的集成学习算法, 通过逐步优化残差实现模型性能提升^[22], CB 则在梯度提升算法基础上针对类别变量处理及过拟合问题进行了优化, 具有较好的泛化能力^[23]。上述模型既能反映不同树类算法的预测能力差异, 也为后续基于特征重要性和 SHAP 的模型解释提供基础。

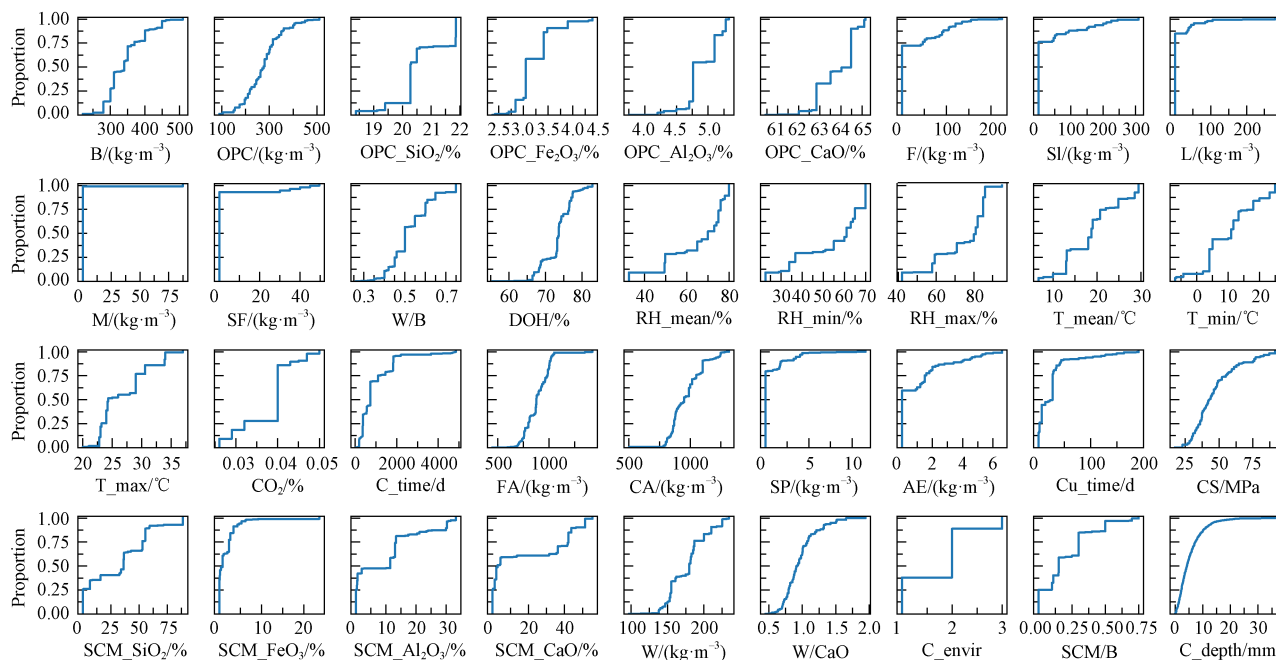


图2 输入变量及碳化深度的经验累计分布

Fig. 2 Empirical cumulative distributions of input variables and carbonation depth

由于碳化深度数据主要集中于较小数值区间，而较大碳化深度样本数量相对较少，目标变量呈现一定的偏态分布特征。为减弱极端值对模型训练过程的影响，并提高模型拟合稳定性，对碳化深度进行 $\log_{1p}$ 变换处理，即

$$C'_{\text{depth}} = \ln(1 + C_{\text{depth}}) \quad (1)$$

其中： C'_{depth} 为变换后的碳化深度； C_{depth} 为原始碳化深度。对于采用 $\log_{1p}$ 变换训练的模型，模型预测结果首先通过反变换恢复至原始碳化深度尺度，随后再计算 RMSE 和 R^2 。因此，本报告中的 RMSE 均为原始碳化深度尺度下的误差，单位为 mm，而非 $\log_{1p}$ 变换尺度下的误差。该处理保证了不同模型预测误差之间的直接可比性。

在模型训练过程中，采用分组划分方式构建训练集和测试集。除碳化时间外，若样本的材料组成、配合比参数、养护条件和碳化环境条件等输入变量完全相同，则识别为同一配合比组。训练集和测试集以配合比组为单位按照 8:2 的比例划分，保证同一配合比组内不同碳化时间的样本不会同时出现在训练集和测试集中，从而降低多龄期数据造成的潜在信息泄露风险。在训练阶段采用五折交叉验证 (5-fold CV) 对模型进行评估，以提高模型训练的稳健性。同时，使用 Optuna^[24] 对模型关键超参数进行自动优化，并固定随机种子以保证实验的可重复性。

模型性能通过 RMSE 和 R^2 进行评价，其表达式分别为

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (2)$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \quad (3)$$

其中： y_i 为真实值； $\hat{y}_i$ 为预测值； $\bar{y}$ 为真实值均值； n 为样本数量。

1.4 特征筛选

为全面考虑材料组成、配合比参数及环境条件等因素对混凝土碳化行为的影响，在初始建模阶段构建了包含全部输入变量的特征集合。然而，过多的输入特征不仅会增加模型复杂度和计算负担，还可能引入信息冗余及多重共线性问题，进而影响模型的稳定性和泛化能力^[25]。因此，有必要在保证预测精度的基础上对输入变量进行筛选，以获得更加简洁、稳定且具有明确物理意义的特征组合。

采用基于 SHAP 值的特征重要性分析方法进行特征筛选。首先，基于全部输入特征建立机器学习预测模型，并利用 SHAP 方法量化各变量对模型预测结果的贡献。随后，根据不同特征的平均绝对 SHAP 值进行重要性排序，并结合模型预测精度变化、变量相关性及混凝土碳化机理认识，逐步剔除贡献较低或存在明显信息冗余的变量，最终确定优

化后的输入特征集合。SHAP 方法基于博弈论中的 Shapley value, 能够定量表征各输入变量对模型输出的边际贡献。第 j 个特征的重要性可表示为

$$\text{Importance}_j = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |\text{SHAP}_{i,j}| \quad (4)$$

其中: $\text{SHAP}_{i,j}$ 表示第 i 个样本中第 j 个特征对预测结果的贡献; n 为样本数量。通过计算各特征的平均绝对 SHAP 值并进行排序, 可以定量评价不同变量对碳化深度预测结果的相对影响, 为后续模型构建和机理分析提供依据。

1.5 公式提取方法

尽管机器学习模型能够有效刻画混凝土碳化深度与多源影响因素之间的复杂非线性关系, 但其模型结构通常较为复杂, 难以直接形成可用于机理分析和工程估算的显式表达形式。相比之下, 公式模型具有形式简洁、变量含义明确和应用便利等特点, 能够更直观地反映材料组成、配合比参数及环境因素对碳化过程的影响规律。因此, 在特征筛选和高精度模型构建的基础上, 进一步利用 SHAP 解释结果提取显式预测公式, 以实现由高精度黑箱预测模型向可解释公式模型的转化。

SHAP 方法基于博弈论中的 Shapley value, 将模型预测结果分解为基准值与各输入变量贡献之和, 其基本表达式为

$$y_i = y_{\text{base}} + \sum_{j=1}^k f(x_{i,j}) \quad (5)$$

其中: y_i 为第 i 个样本的预测值; y_{base} 为基准值; $f(x_{i,j})$ 为第 i 个样本中第 j 个变量对预测结果的贡献, 即 SHAP 值; k 为输入变量数量。

因此, 模型预测结果可以表示为

$$y_{\text{prediction}} = y_{\text{base}} + \sum_{j=1}^k \text{SHAP}(x_j) \quad (6)$$

通过上述方法, 机器学习模型中隐含的非线性响应关系可被转化为由多个变量贡献函数组成的显式表达式。该公式不仅能够保持较好的预测能力, 还可以揭示不同变量对碳化深度的作用方向、影响强度及非线性变化特征, 从而为混凝土碳化行为的机理解释和工程预测提供更加直观的数学工具。

2 混凝土碳化深度预测模型构建

2.1 基于 SHAP 和相关性分析的特征重要性评价

图 3 为基于全部输入特征建立的机器学习模型的 SHAP 特征重要性排序。由图 3 可见, 不同变量对碳化深度预测结果的贡献存在明显差异。其中, C_time、W/CaO、C_envir、OPC 和 Cu_time 的平均 SHAP 值较高, 说明碳化时间、水与 CaO 比、碳化环境类型、OPC 用量及养护时间是影响模型预测结果的主要变量。已有基于机器学习的混凝土碳化深度预测研究亦表明, 碳化时间、水用量与胶凝体系中 CaO 含量的比值、胶凝材料组成、养护条件及环境因素等变量对模型输出贡献较大^[16, 18]。上述结论与本工作的特征重要性排序结果基本一致, 进一步说明本工作模型在关键影响因素识别方面表现出较好的合理性。相比之下, RH_mean、RH_min、T_max、T_min 等环境变量以及 CS、SCM_CaO、AE 和 W 等变量的贡献程度相对较低, 表明其对模型预测结果仍具有一定影响, 但重要性弱于碳化时间、配合比和环境类别等主控因素。RH_max、T_mean、CO₂、SCM/B、DOH 及部分矿物掺合料组成参数的平均 SHAP 值进一步降低, 说明这些变量在当前数据集和模型条件下对预测结果的边际贡献有限。

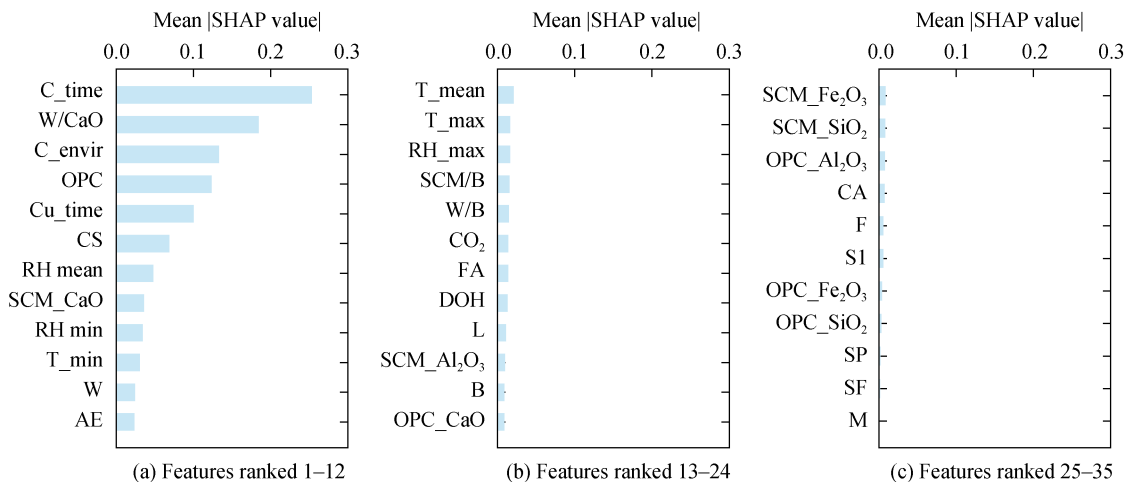


图 3 基于 FS0 输入特征建立的 ML 模型的 SHAP 特征重要性
Fig. 3 SHAP feature importance of the ML model established with FS0 input features

在 5 种 SCM 中, L 的平均 SHAP 值相对较高, 而 F、SI、SF 和 M 等变量的平均 SHAP 值接近于 0, 说明石灰石粉对碳化深度预测结果的影响更为明显。这可能是由于石灰石粉中的钙主要以 CaCO_3 形式存在, 对 CO_2 缓冲能力的贡献有限, 从而改变了总 CaO 与有效可反应 CaO 之间的对应关系^[26]。对于 OPC、 Al_2O_3 、SCM、 SiO_2 、CA、OPC、 Fe_2O_3 、OPC、 SiO_2 和 SP 等变量, 其平均 SHAP 值接近于 0, 说明这些特征对模型输出的影响较弱, 可能存在信息冗余。总体来看, SHAP 分析结果表明, 碳化深度预测主要受碳化时间、W/CaO、碳化环境及 OPC 含量等变量控制, 而部分氧化物组成、外加剂掺量及部分 SCM 类型等特征变量对模型预测的贡献较低。因此, 可依据特征重要性排序, 并结合变量相关性和混凝土碳化机理认识, 对贡献较低或存在冗余的变量进行筛选, 以降低模型复杂度并提高模型可解释性。

为进一步评估变量相关性对特征筛选的影响, 选取 SHAP 重要性较高、与后续特征组合构建密切相关的主要候选变量, 以及 W/B、OPC 和 CS 等容易产生共线性影响的关键变量, 构建主要变量相关性矩阵, 如图 4 所示。图 4 用于分析主要候选变量之间的信息重叠关系, 并为后续特征筛选提供补充依据。由图 4 可见, W/B 与 W/CaO 呈较强正相关, 相关系数为 0.76, 说明 W/CaO 在一定程度上包含水胶比相关信息。OPC 与 SCM/B 呈较强负相关, 相关系数为 -0.81, 表明 SCM 替代率提高通常伴随 OPC 用量降低。CS 与 W/B 和 W/CaO 均呈负相关, 相关系数分别为 -0.54 和 -0.53, 说明抗压强度与水胶比及胶凝体系 CaO 供给水平之间存在一定关联。

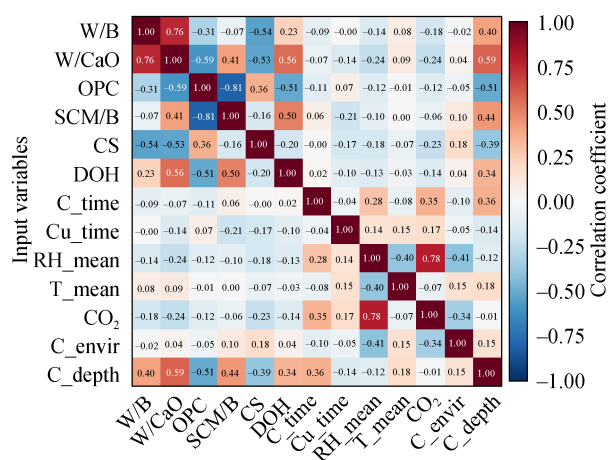


图 4 主要变量及碳化深度之间的 Pearson 相关性矩阵

Fig. 4 Pearson correlation matrix among major variables and carbonation depth

因此, 相关性分析可作为 SHAP 重要性排序的补充, 用于辅助判断变量之间的信息重叠关系, 并为后续特征筛选提供依据。

2.2 不同特征组合下的模型性能比较

表 2 列出了不同输入特征集合的组成及变量删减情况, 用于说明本工作的特征筛选过程。FS0 为初始特征集合, 包含全部输入变量。特征筛选主要依据图 3 所示的 SHAP 特征重要性分析结果和图 4 所示的变量相关性分析结果, 并综合考虑变量的数据易获得性、工程应用便利性以及已有碳化预测模型中的常用参数设置。FS1 在 FS0 的基础上, 删除了 OPC 和 SCM 的氧化物组成特征。同时, 考虑到多数已有碳化预测模型通常采用平均温度和平均相对湿度表征碳化环境, 因此进一步删除了温度和相对湿度的最大值、最小值。FS2 在 FS1 的基础上进一步剔除了部分 SHAP 贡献较低、信息冗余或工程应用中获取难度较高的变量。其中, DOH 和 CS 由材料组成、配合比参数及养护条件等因素共同决定^[27], 将其作为输入变量虽然可以提供一定有效信息, 但会增加模型在实际应用中的数据获取难度, 削弱公式模型的工程适用性。同时, 相关性分析表明 CS 与 W/B 和 W/CaO 存在一定相关性, 说明其与配合比参数并非完全独立。因此, 本工作在综合考虑变量相关性、数据可获得性和工程应用便利性的基础上, 在 FS2 中删除 CS 和 DOH。FS3 则在 FS2 的基础上继续删除特征重要性相对较低的 RH_mean、T_mean 和 SCM/B, 形成更为简化的特征组合。通过构建 FS0–FS3 不同特征集合, 可系统比较输入变量数量变化对模型预测性能的影响, 从而在预测精度、模型复杂度、变量可解释性和工程应用便利性之间进行综合权衡。

表 2 用于混凝土碳化深度预测的不同特征集合

Table 2 Different feature sets for concrete carbonation depth prediction

Feature set	Features used for modeling	Removed features
FS0	All features	
FS1	B, OPC, F, SI, L, M, SF, W/B, DOH, RH_mean, T_mean, CO_2 , C_time, FA, CA, SP, AE, Cu_time, CS, W, W/CaO, C_envir, SCM/B	OPC_oxides, SCM_oxides, RH_max, RH_min, T_max, T_min
FS2	OPC, RH_mean, T_mean, CO_2 , C_time, Cu_time, W/CaO, C_envir, SCM/B	B, F, SI, L, M, SF, W/B, DOH, FA, CA, SP, AE, CS, W
FS3	OPC, CO_2 , C_time, Cu_time, W/CaO, C_envir	RH_mean, T_mean, SCM/B

图 5 和图 6 为对碳化深度进行 $\log_{1p}$ 变换前后不同机器学习模型的预测性能。图 5 和图 6 比较了不同输入特征组合下, DT、RF、XGB 和 CB

模型在训练集与测试集上的 RMSE 变化情况, 以评估目标变量变换及特征筛选对模型预测性能的影响。

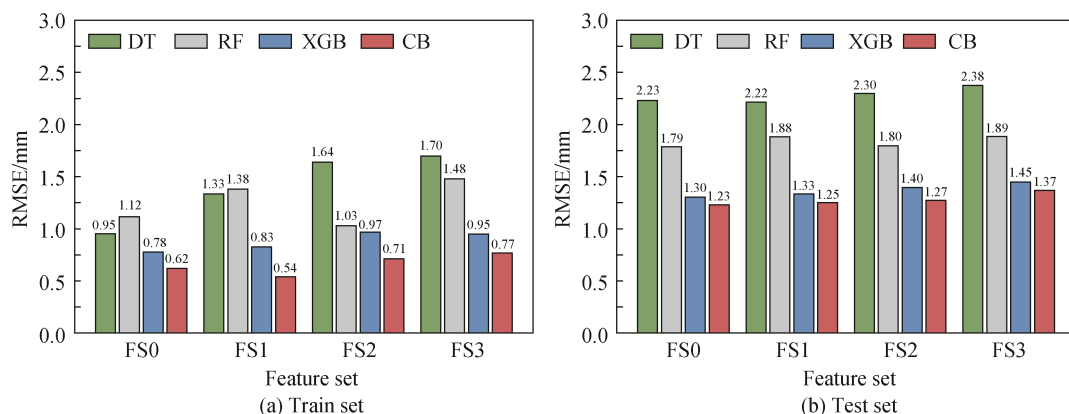


图 5 原始尺度下不同 ML 模型的预测性能

Fig. 5 Prediction performance of different ML models on the original scale

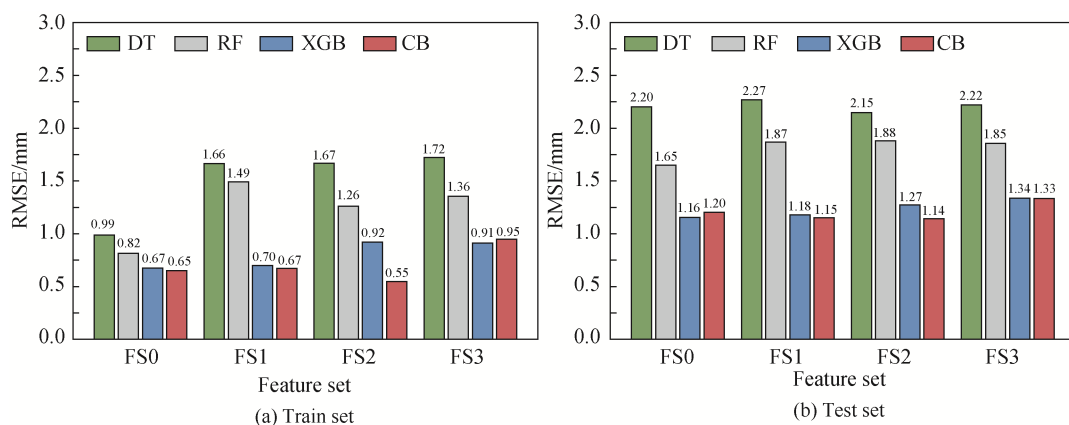


图 6 $\log_{1p}$ 变换后不同 ML 模型的预测性能

Fig. 6 Prediction performance of different ML models after $\log_{1p}$ transformation

图 5 为基于原始碳化深度建立的机器学习模型预测结果。由图 5 可见, 4 类模型在不同特征组合下均表现出一定的预测能力, 但不同算法之间存在明显差异。DT 模型在训练集上的 RMSE 较低, 最低可达 0.95 mm, 但其测试集 RMSE 普遍较高, 为 2.22~2.38 mm, 说明单棵决策树对训练数据存在明显拟合优势, 泛化能力相对不足。RF 模型的测试集 RMSE 为 1.79~1.89 mm, 整体高于 XGB 和 CB 模型, 表明其在本工作数据集上的预测能力相对较弱。相比之下, XGB 和 CB 模型表现出更优的预测性能, 其中 CB 模型在测试集上的 RMSE 为 1.23~1.37 mm, 整体低于其他模型, 说明梯度提升类集成学习算法能更有效刻画混凝土碳化深度与多源影响因素之间的复杂非线性关系。

从特征组合的影响来看, 随着输入特征由 FS0 逐步减少至 FS3, 部分模型测试集 RMSE 呈增大趋

势。例如, 原始尺度下 CB 模型的测试集 RMSE 由 FS0 的 1.23 mm 增加至 FS3 的 1.37 mm, XGB 模型由 1.30 mm 增加至 1.45 mm, 说明过度删减特征会造成有效信息损失, 从而削弱模型预测能力。相比之下, FS2 特征组合在减少输入变量数量的同时, 仍能保持较低测试误差。例如, 原始尺度下 FS2 的 CB 模型的测试集 RMSE 为 1.27 mm, 仅略高于 FS0 的 1.23 mm, 说明 FS2 在模型精度与变量简化程度之间取得了较好平衡。

图 6 为碳化深度经 $\log_{1p}$ 变换后的模型预测结果。总体来看, 不同算法的性能变化规律与原始尺度下基本一致, 即 XGB 和 CB 模型仍表现出较好的预测精度和泛化能力。经过 $\log_{1p}$ 变换后, CB 模型在 FS1 和 FS2 特征组合下的测试集 RMSE 分别为 1.15 mm 和 1.14 mm, 低于原始尺度下对应的 1.25 mm 和 1.27 mm, 表明目标变量变换能够在一定程度上

改善碳化深度分布不均衡对模型训练的影响。同时, FS2 的 CB 模型在训练集上的 RMSE 为 0.55 mm, 测试集 RMSE 为 1.14 mm, 在保持较高预测精度的同时保留了较少输入变量。综合考虑模型预测性能、泛化能力及特征组合的简化程度, 本工作最终选取基于 $\log_{1p}$ 变换的 FS2 特征组合及 CB 模型作为后续 SHAP 解释分析和显式公式模型拟合的基础。

2.3 最优模型预测结果与解释分析

图 7 为在 FS2 的特征组合下 CB 模型在训练集与测试集上的预测结果与真实值之间的对比关系。总体来看, 预测值与真实值之间偏差较小,

大部分数据点分布在 $y=x$ 对角线附近, 表明模型能够较准确地刻画目标变量的变化规律。训练集预测结果的 R^2 为 0.98, RMSE 为 0.55 mm, 说明模型对训练数据具有较高的拟合精度。测试集上 R^2 为 0.93, RMSE 为 1.14 mm, 虽然较训练集略有降低, 但整体仍保持较高预测精度, 大部分预测点仍集中于对角线附近, 表明模型具有良好的泛化能力。部分高值区域数据点离散程度略有增加, 可能与样本分布不均或数据波动有关。总体而言, 所构建模型在训练集与测试集上均表现出较好的预测性能与稳定性。

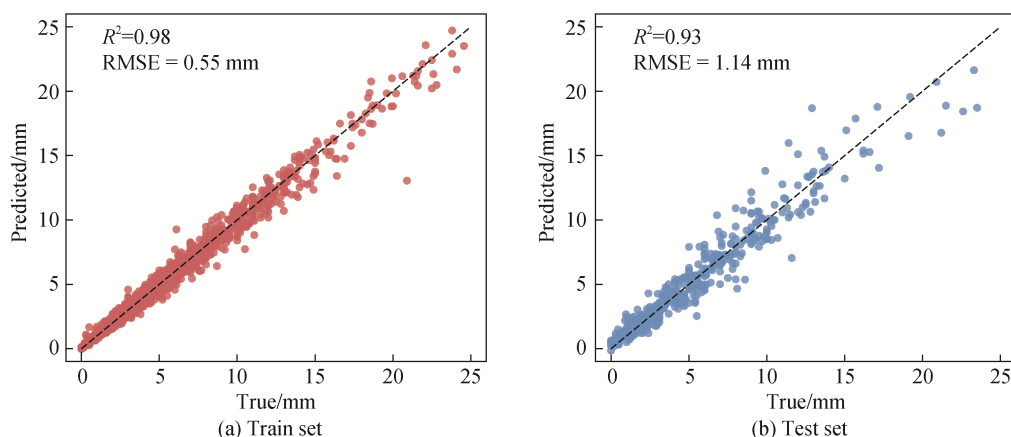


图 7 FS2 特征组合下 CB 模型的预测结果
Fig. 7 Prediction results of the CB model with the FS2 feature set

图 8 为 FS2 特征组合下 CB 模型对混凝土碳化深度预测结果的 SHAP 解释结果, 其中浅蓝色柱状图表示各变量的平均绝对 SHAP 值, 用于表征其全局重要性, 散点分布表示不同样本中变量取值对预测结果的局部贡献, 颜色由蓝色到红色分别代表变量取值由低到高, 横坐标正负则分别表示该变量对预测碳化深度的促进或抑制作用。由图 8 可见, W/CaO、C_time 和 C_envir 的平均 SHAP 值较高, 是影响模型预测结果的 3 个主要变量。其中, W/CaO 高取值样本主要分布在正 SHAP 值区域, 说明较高的 W/CaO 会促进碳化深度发展。已有研究表明, W/CaO_{reactive} 可用于表征单位胶凝浆体体积内的 CO_2 缓冲能力, 同时也包含水胶比、孔隙率和微观结构信息^[28]。本工作采用的 W/CaO 基于胶凝材料总 CaO 计算, 可反映拌合水用量与胶凝体系 CaO 供给之间的相对关系, 但不能完全等同于可反应 CaO 计算的 W/CaO_{reactive} 。不同胶凝材料中 CaO 的存在形式和反应活性存在差异, 例如石灰石粉中的钙主要以 $CaCO_3$ 形式存在, 对 CO_2 缓冲能力的贡献

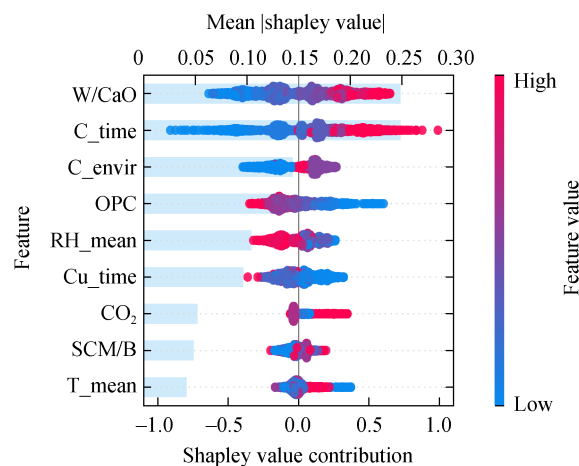


图 8 FS2 特征组合下 CB 模型的 SHAP 分析
Fig. 8 SHAP analysis of the CB model with the FS2 feature set

不同于 OPC 水化产物中的可反应 CaO。因此, 采用总 CaO 计算 W/CaO 可能带来一定不确定性, 但在大规模文献数据库中, 因可反应 CaO 的含量难以获得, W/CaO 仍可作为表征孔隙传输条件和碳化缓冲

能力的综合统计特征^[16]。C_time 高取值样本也主要对应正 SHAP 值, 表明碳化深度随暴露时间延长而增加, 符合碳化过程受 CO₂ 扩散和反应共同控制的基本规律。C_envir 的 SHAP 分布则说明不同暴露环境对碳化深度具有显著影响, 反映了室内、室外遮蔽和室外无遮挡条件下水分状态、CO₂ 传输及雨淋作用差异对碳化过程的综合影响。

OPC、RH_mean 和 Cu_time 的平均 SHAP 值次之, 表明其对碳化深度也具有一定调控作用。其中, OPC 高取值样本多分布于负 SHAP 值区域, 说明较高 OPC 用量有助于提高碳化缓冲能力, 从而降低碳化深度。RH_mean 的 SHAP 分布表现出一定非线性特征, 说明相对湿度对碳化的影响并非简单单调关系, 这主要是由于适宜湿度有利于 CO₂ 溶解和碳化反应, 而过高湿度会增加孔隙水饱和度

并阻碍 CO₂ 扩散^[29]。Cu_time 增加则有助于提高水化程度并促进孔结构细化, 从而降低 CO₂ 传输能力并抑制碳化发展^[30]。相比之下, CO₂、SCM/B 和 T_mean 的平均 SHAP 值较小, 说明在当前自然碳化数据范围内, 其全局贡献相对有限。总体而言, SHAP 分析结果表明, 混凝土碳化深度主要受碳化时间、孔隙传输能力、碳化缓冲能力和暴露环境共同控制。

为明确后续 SHAP dependence 拟合及显式公式的适用范围, 表 3 统计了最终 CB 模型中各输入变量的取值范围及其 SHAP 贡献范围。由于后续公式拟合基于上述变量区间内的 SHAP 贡献关系, 因此表 3 所列范围可作为本工作显式碳化深度预测公式的主要适用区间。对于超出该范围的样本, 公式预测结果可能存在较大的外推不确定性。

表 3 最终模型输入变量取值范围及 SHAP 贡献范围
Table 3 Ranges of input variables and SHAP contributions in the final model

Feature	W/CaO	C_time/d	C_envir	OPC/(kg·m ⁻³)	RH_mean/%	Cu_time/d	CO ₂ /%	SCM/B	T_mean/°C
Input min	0.45	28.00	1.00	90.00	32.60	1.00	0.03	0.00	6.70
Input max	1.95	4852.00	3.00	510.00	80.00	191.00	0.05	0.75	29.50
SHAP min	-0.64	-0.91	-0.40	-0.35	-0.32	-0.36	-0.06	-0.20	-0.17
SHAP max	0.65	0.99	0.27	0.60	0.26	0.32	0.35	0.20	0.37

3 显式碳化深度预测公式构建与验证

3.1 SHAP 结果拟合与显式预测公式构建

表 4 汇总了不同文献中提出的典型混凝土碳化深度预测模型, 用于为本工作显式公式构建提供参考^[7, 31-34]。由表可见, 既有模型大多以碳化时间的平方根项 $\sqrt{t}$ 为基本形式, 反映了碳化过程受 CO₂ 扩散控制的基本特征。在此基础上, 不同模型进一步引入水胶比、水泥用量、辅助胶凝材料掺量、温度、相对湿度、CO₂ 浓度、暴露环境及强度发展等修正项, 以描述材料组成、环境条件和养护制度对碳化深度的影响。其中, 模型 F2~F5 均采用多个影响因子相乘的形式, 说明传统碳化预测公式通常通过乘积型修正项表征多因素对碳化过程的共同作用。

为提高机器学习模型的可解释性, 并在保证预测精度的基础上建立具有明确数学表达形式的碳化深度显式公式模型, 本工作在获得最优机器学习模型后, 进一步采用 SHAP 方法对模型预测结果进行解释分析。通过 SHAP dependence 图分析建立特征取值与其 SHAP 贡献之间的关系, 并选取适当的函数形式对 SHAP 值进行拟合, 从而实现由 SHAP 值

向函数表达式的转化。

为进一步将机器学习模型的非线性响应关系转化为显式数学表达, 基于性能最优的 CB 模型的 SHAP dependence 结果, 建立各输入变量特征与其 SHAP 贡献值之间的函数关系。对于离散型参数 C_envir, 由于其取值为有限类别, 本工作首先计算该特征在各取值条件下对应样本的 SHAP 值平均值, 并将该平均 SHAP 值作为该类别对模型预测贡献的代表值, 进而用于构建显式公式模型。考虑到建模过程中对碳化深度进行了 log1p 变换, 采用对数型函数形式对 SHAP 关系进行表达, 使得最终建立的预测方程能够转化为乘积形式, 在形式上与传统碳化公式模型 F2~F5 保持一致^[7, 32-34], 拟合公式的一般形式如式(7)~式(10)所示^[35]:

$$\text{linear-ln: } y = \ln(ax + b) + c \quad (7)$$

$$\text{Half-power-ln: } y = \ln(ax^{1/2} + b) + c \quad (8)$$

$$\text{Quadratic-ln: } y = \ln(ax^2 + bx + c) + d \quad (9)$$

$$\text{Logistic-ln: } y = \ln\left(\frac{a}{1 + (x/x_0)^d} + b\right) + c \quad (10)$$

其中: x 为输入参数; a 、 b 、 c 、 d 、 x_0 为拟合参数。

表 4 不同文献提出的混凝土碳化深度预测模型

Table 4 Concrete carbonation depth prediction models proposed in different studies

Model	Expression	Ref.
F1	$x = -0.56213 - 8.792 / \sqrt{t} + 17.8372 (W/B)$ Where x : carbonation depth, t : carbonation time, W/B : Water-to-binder ratio	[31]
F2	$C = k \times \alpha_1 \times \alpha_2 \times \alpha_3 \times \beta_1 \times \beta_2 \times \beta_3 \times \sqrt{t}$ Where C : carbonation depth (mm), t : time (year), k : Kishitani model coefficient, α_1 : coefficient related to concrete type, α_2 : coefficient related to cement type, α_3 : coefficient related to water-to-binder ratio, β_1 : temperature coefficient, β_2 : humidity coefficient, β_3 : CO ₂ concentration coefficient	[32]
F3	$d_c = K_x (W/C - 0.106) (C_c^2 - 508.351C_c - 1195.624) (F + 112.460) (T - 277.662) (C_d^{0.538}) (RH^2 - 125.410RH + 2351.806) \sqrt{t}$ Where d_c : carbonation depth of concrete (mm), K_x : overall carbonation influence coefficient, W/C : water-to-cement ratio, C_c : cement content (kg/m ³), F : content of supplementary cementitious materials (e.g., fly ash) (kg/m ³), T : carbonation test temperature (K), C_d : CO ₂ concentration in the simulation test (%), RH : relative humidity in the simulation test (%), t : carbonation time (d)	[7]
F4	$d_{t,t} = e_h e_s e_c c_{em} (F_{c,t})^{g\sqrt{t}}$ Where $d_{t,t}$: carbonation depth at time t , e_h : correction coefficient for environmental relative humidity, e_s : correction coefficient for sheltering or rainfall exposure conditions, e_c : correction coefficient for environmental CO ₂ concentration, c_{em} : coefficient related to cement type or binder system, $F_{c,t}$: strength development function considering curing age, g : carbonation transfer factor reflecting the influence of cement or supplementary cementitious materials, t : carbonation time	[33]
F5	$x = f_1(RH) f_2(T) f_3([CO_2]) f_4(f, a/c) \sqrt{t}$ Where x : carbonation depth, $f_1(RH)$: function describing the influence of relative humidity, $f_2(T)$: function describing the influence of temperature, $f_3([CO_2])$: function describing the influence of CO ₂ concentration, $f_4(f, a/c)$: function representing the combined influence of compressive strength and aggregate-to-cement ratio RH: relative humidity, T : temperature, $[CO_2]$: CO ₂ concentration, f : compressive strength, a/c : aggregate-to-cement ratio, t : carbonation time	[34]

由图 9 可见, W/CaO 与其 SHAP 值呈明显正相关关系, 说明 W/CaO 增大会促进碳化深度发展。这是因为 W/CaO 增大通常反映了孔隙传输能力增强和胶凝体系 CO₂ 缓冲能力降低, 使 CO₂ 更易向混凝土内部扩散并推动碳化前沿发展。因此, 采用对数线性函数对 W/CaO 的 SHAP 贡献进行拟合, 拟合效果较好, R^2 为 0.873。C_time 的 SHAP 值随碳化时间增加而升高, 并呈现出与 $\sqrt{t}$ 相近的增长趋势, 符合碳化深度随时间发展的扩散控制特征, 其拟合 R^2 为 0.898。OPC 的 SHAP 值则随 OPC 用量增加而降低, 表明较高 OPC 含量有助于提高胶凝体系中可反应 CaO 含量和碳化缓冲能力, 从而降低碳化深度^[28]。因此, 采用对数线性函数描述 OPC 对模型输出的贡献关系。

RH_mean 的 SHAP 分布表现出一定非线性特征, 已有研究表明, 相对湿度对混凝土碳化的影响并非简单单调关系: 适宜湿度有利于 CO₂ 溶解和碳化反应进行, 而当湿度过高时, 孔隙水饱和度增加会阻碍 CO₂ 扩散, 从而降低碳化速率^[29], 因此碳化速率和碳化深度可能降低。基于上述非单调影响规律, 采用 ln 形式的二次函数进行拟合, 与模型 F3 中湿度修正项的非线性形式相一致。对于 Cu_time,

随着养护时间延长, 水化反应更加充分, 孔结构逐渐致密化, 有助于降低 CO₂ 在混凝土孔隙中的传输速率, 并在一定程度上抑制碳化发展^[18]。考虑到 Cu_time 的 SHAP dependence 点分布相对离散, 采用 ln 形式的 Logistic 函数进行近似描述, 以表征养护时间增加后其抑制作用逐渐趋缓的变化特征。

对于 CO₂、SCM/B 和 T_mean, 其平均 SHAP 值相对较小, 但仍具有明确的碳化机理意义。CO₂ 浓度升高会增强内外 CO₂ 浓度梯度并加快碳化反应过程^[36], 因此采用与模型 F5 中 CO₂ 修正项相近的 $\sqrt{CO_2}$ 形式进行拟合。SCM/B 增大通常意味着熟料用量降低和 Ca(OH)₂ 含量减少, 从而削弱胶凝体系的碳化缓冲能力^[37], 采用对数线性函数描述其贡献关系。T_mean 升高会在一定程度上提高 CO₂ 传输速率和碳化反应速率^[38], 参考模型 F3 中的温度修正形式, 采用对数线性函数进行拟合。

CO₂、SCM/B 和 T_mean 的 SHAP 拟合 R^2 相对较低, 主要与其贡献幅度较小和多源文献数据离散性有关。由图 8 可知上述变量的 SHAP 贡献明显低于 W/CaO、C_time 和 C_envir 等主导变量, 因此其在最终公式中主要作为次要修正项, 而非控制预测结果的主导项。本工作保留这些变量, 是因为其分别

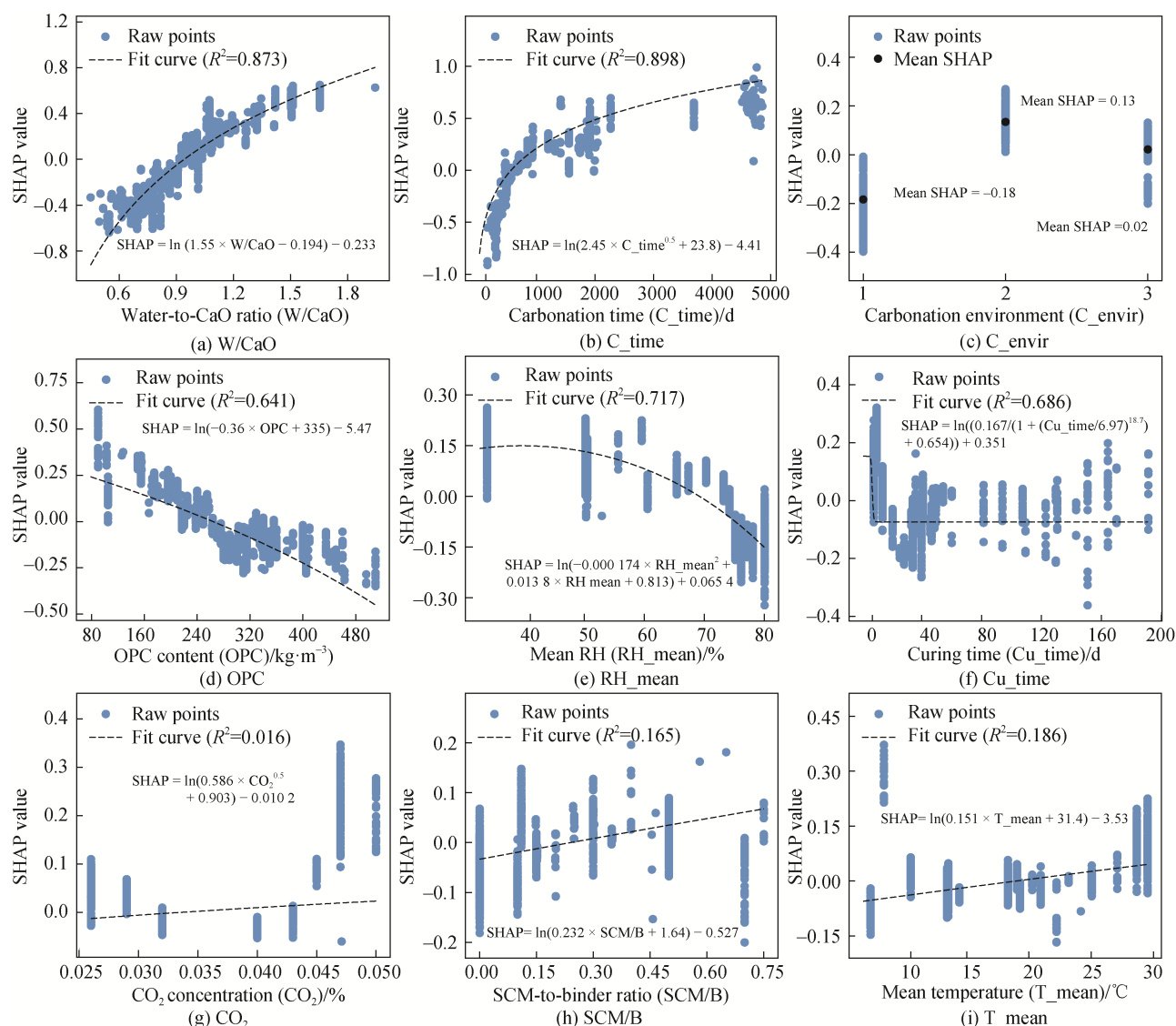


图 9 输入变量与 SHAP 贡献值之间的拟合关系

Fig. 9 Fitted relationships between input variables and SHAP contributions

对应 CO₂ 浓度梯度、SCM 替代引起的碳化缓冲能力变化以及温度对传输和反应速率的影响, 具有明确的碳化机理意义。外部数据集验证结果也表明, 预测公式(PF)模型仍表现出较好的跨数据来源预测能力。

根据式(6), 变换后的碳化深度预测结果可表示为基准项与各输入变量 SHAP 贡献之和, 即式(11)。

$$\begin{aligned} \ln(C_depth + 1) = & c_0 + SHAP(W/CaO) + SHAP(C_time) + \\ & SHAP(OPC) + SHAP(RH_mean) + \\ & SHAP(Cu_time) + SHAP(CO_2) + \\ & SHAP(SCM/B) + SHAP(T_mean) + \\ & SHAP(C_envir) \end{aligned} \quad (11)$$

为便于将 SHAP 加性贡献转化为具有显式数学形式的预测公式, 进一步假设各变量的 SHAP 贡献均可表示为对数函数项与常数项之和:

$$\ln(C_depth + 1) = c_0 + \sum_i SHAP(x_i) \quad (12)$$

$$SHAP(x_i) = \ln h_i(x_i) + c_i \quad (13)$$

其中: x_i 为第 i 个输入变量; c_0 为模型输出的基准项; $h_i(x_i)$ 为该变量对应的拟合函数; c_i 为拟合常数。将式(13)代入式(12), 并对两侧取指数, 可得到碳化深度的乘积形式预测公式:

$$C_depth = \exp(c_0 + \sum_i c_i) \prod_i h_i(x_i) - 1 \quad (14)$$

由此, 机器学习模型中各变量的 SHAP 加性贡献被转化为乘积型修正项, 既保留了模型对非线性

关系的刻画能力, 也使最终预测公式具有更清晰的变量物理含义和更便于工程应用的显式表达形式。

根据 SHAP 分析结果以及考虑碳化机理和文献的经验公式, 最终得到的不同的输入参数的拟合公式如式(15)~式(23)所示:

$$\text{SHAP}(W/\text{CaO}) = \ln(1.55 \times W/\text{CaO} - 0.194) - 0.233 \quad (15)$$

$$\text{SHAP}(C_{\text{time}}) = \ln(2.45 \times C_{\text{time}}^{0.5} + 23.8) - 4.41 \quad (16)$$

$$\text{SHAP}(\text{OPC}) = \ln(-0.36 \times \text{OPC} + 335) - 5.47 \quad (17)$$

$$\text{SHAP}(\text{RH}_{\text{mean}}) = \ln \left(\frac{-0.000174 \text{RH}_{\text{mean}}^2}{+0.0138 \text{RH}_{\text{mean}} + 0.813} \right) + 0.0654 \quad (18)$$

$$\text{SHAP}(\text{Cu}_{\text{time}}) = \ln \left[\frac{0.167}{1 + (\text{Cu}_{\text{time}} / 6.97)^{18.7}} + 0.654 \right] + 0.351 \quad (19)$$

$$\text{SHAP}(\text{CO}_2) = \ln(0.586 \times \text{CO}_2^{0.5} + 0.903) - 0.0102 \quad (20)$$

$$\text{SHAP}(\text{SCM}/B) = \ln(0.232 \times \text{SCM}/B + 1.64) - 0.527 \quad (21)$$

$$\text{SHAP}(T_{\text{mean}}) = \ln(0.151 \times T_{\text{mean}} + 31.42) - 3.53 \quad (22)$$

$$\text{SHAP}(C_{\text{envir}}) = \begin{cases} C_{\text{envir}} = 1: -0.18, C_{\text{envir}} \\ = 2: 0.13, C_{\text{envir}} = 3: 0.02 \end{cases} \quad (23)$$

整理式(11)~式(23), 可以得到最终的碳化深度预测式(24)。

$$\begin{aligned} C_{\text{depth}} = & 5.13 \times 10^{-6} (1.55 \times W / \text{CaO} - 0.194) \\ & (2.45 \times C_{\text{time}}^{0.5} + 23.8) (-0.36 \times \text{OPC} + 335) \\ & \left(\frac{-0.000174 \times \text{RH}_{\text{mean}}^2}{+0.0138 \times \text{RH}_{\text{mean}} + 0.813} \right) \\ & \left(\frac{0.167}{1 + (\text{Cu}_{\text{time}} / 6.97)^{18.7}} + 0.654 \right) \\ & (0.586 \times \text{CO}_2^{0.5} + 0.903) (0.232 \times \text{SCM} / B + 1.64) \\ & (0.151 \times T_{\text{mean}} + 31.4) K_{\text{envir}} - 1 \end{aligned} \quad (24)$$

其中: K_{envir} 为碳化环境修正系数, 其取值分别为: 户外无遮挡环境($C_{\text{envir}}=1$)取 0.833, 室外遮蔽环境($C_{\text{envir}}=2$)取 1.14, 室内环境($C_{\text{envir}}=3$)取 1.02。

为减少参数取值四舍五入对公式预测结果的影响, 式中各系数均保留 3 位有效数字。主要适用于表 3 所列变量范围内的普通混凝土及单一 SCM 掺合料混凝土自然碳化深度预测。对于再生骨料混凝土、高性能混凝土、超高性能混凝土、多 SCM 复掺体系及加速碳化条件, 仍需结合相应数据库进一步验证或重新标定。

3.2 预测性能比较与外部验证

图 10 比较了不同公式模型(F1~F5)、机器学习模型(ML)及基于 ML 解释结果构建的公式模型(PF)在训练集与测试集上的预测性能。总体来看, ML 模型的预测误差最低, 训练集和测试集 RMSE 分别为 0.55 mm 和 1.14 mm, 说明其能够较好地捕捉不同输入变量对混凝土碳化深度的非线性影响。传统公式模型 F1~F5 的测试集 RMSE 为 4.32~6.53 mm, 其中 F4 表现最好, 测试集 RMSE 为 4.32 mm。PF 模型在训练集和测试集上的 RMSE 分别为 2.45 mm 和 2.28 mm, 虽然高于 ML 模型, 但明显低于公式模型 F1~F5。与测试集表现最好的 F4 模型相比, PF 模型的 RMSE 降低了约 47.2%, 相较于 F1、F2、F3 和 F5, RMSE 分别降低约 54.4%、65.1%、62.7%和 50.4%。

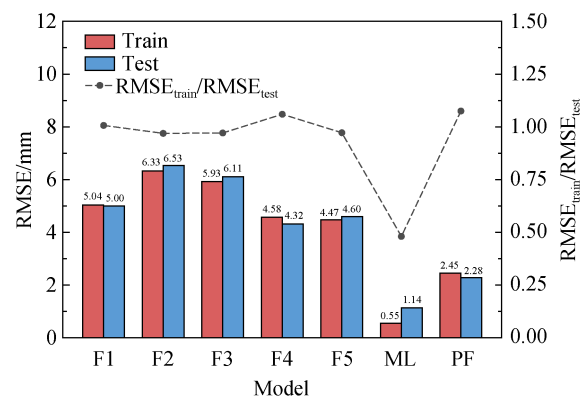


图 10 不同模型在训练集与测试集上的 RMSE 及其比值比较
Fig. 10 Comparison of RMSE values on the training and test data and $\text{RMSE}_{\text{train}}/\text{RMSE}_{\text{test}}$ ratios for different models

此外, 从 $\text{RMSE}_{\text{train}}/\text{RMSE}_{\text{test}}$ 比值来看, 机器学习模型的该比值明显低于 1, 说明其在测试集上的误差显著高于训练集, 存在一定的泛化性能下降。而多数传统公式模型的该比值接近或高于 1, 表明其在训练集和测试集上的误差分布相对均衡, 但整体预测误差较大。PF 模型的 $\text{RMSE}_{\text{train}}/\text{RMSE}_{\text{test}}$ 比值接近 1, 且训练集和测试集 RMSE 均较低, 说明其在保持较高预测精度的同时具备较好的预测稳定

性。综合来看, PF 模型兼具较高预测精度、较好泛化稳定性以及显式化和可解释化特征, 具备较好的工程应用潜力。

为进一步验证 PF 模型的泛化性能, 对 Chan 等^[16]收集并整理的混凝土自然碳化数据库进行筛选, 选取包含完整 OPC 与 SCM 成分组成、温度及湿度等信息的数据, 共得到 843 条样本作为外部数据集, 经核查, Chan 等^[16]整理的外部数据集与本工作建模所用原始数据集来源于不同文献, 不存在重复样本, 因此可用于评价所提 PF 模型的跨数据来源泛化能力。在此基础上, 利用该外部数据集对不同碳化预测模型的预测误差进行对比分析, 以评估各模型的泛化能力。为进一步说明外部数据集与原始数据集之间的数据分布差异, 表 5 对 2 个数据集中主要输入变量及碳化深度的取值范围进行了对比。

由表 5 可见, 外部数据集与原始数据集在主要

变量取值范围上总体表现出较好的重叠性, 但仍存在一定差异。其中, 外部数据集的 OPC、C_time、Cu_time 和 SCM/B 取值范围相对较窄, 说明其在胶凝材料组成、碳化龄期和养护制度方面的数据覆盖程度低于原始数据集; 尤其是 Cu_time 的最大值由原始数据集的 191 d 降低至 29 d, 表明外部数据集中长期养护样本较少。相比之下, 外部数据集的 T_mean 最大值达到 35.0 °C, 高于原始数据集的 29.5 °C, 说明外部数据集包含更高温度条件下的自然碳化样本。此外, 外部数据集中 CO₂ 浓度集中于 0.04% 左右, 而原始数据集为 0.03%~0.05%, 反映出不同数据库在环境参数记录和取值范围上的差异。总体而言, 外部数据集与原始数据集既具有相近的变量分布基础, 又存在一定的数据来源和变量范围差异, 因此可用于检验不同模型在跨数据来源条件下的泛化能力。

表 5 原始数据集与外部数据集主要变量取值范围对比

Table 5 Comparison of main variable ranges between the original and external datasets

Feature	OPC/(kg·m ⁻³)	RH_mean/%	T_mean/°C	CO ₂ /%	C_time/d	Cu_time/d	W/CaO	C_envir	SCM/B	C_depth/mm
Original min	90.0	32.6	6.7	0.03	28.0	1.0	0.45	1.0	0.0	0.0
Original max	510.0	80.0	29.5	0.05	4852.0	191.0	1.95	3.0	0.75	36.2
External min	125.0	50.0	6.0	0.04	28.0	1.0	0.51	1.0	0.0	0.0
External max	451.0	79.0	35.0	0.04	4015.0	29.0	1.96	3.0	0.65	34.6

图 11 比较了不同模型在原始全数据集(包含原始的测试集和训练集)和外部数据集上的 RMSE, 用于评价不同模型在跨数据来源条件下的泛化能力。由图 11 可见, 当模型应用于外部数据集时, 各模型的预测误差均有不同程度增加。其中, 传统公式模型 F1、F2 和 F3 在外部数据集上的 RMSE 分别为 5.91、8.52 mm 和 8.17 mm, 较原始全数据集分别增加了 0.88、2.15 mm 和 2.21 mm, 说明传统公式模型在面对不同来源数据时预测稳定性有限。此外, 由于外部数据集中缺少部分公式模型所需的强度变量, 模型 F4 和模型 F5 未在外部数据集上进行预测。与公式模型相比, ML 模型在原始全数据集上的 RMSE 最低, 仅为 0.71 mm, 表明机器学习模型对原始数据分布中的复杂非线性关系具有较强拟合能力。然而, 当应用于外部数据集时, ML 模型的 RMSE 增加至 5.07 mm, 误差增幅较大, 说明高精度机器学习模型对原始数据分布具有一定依赖性, 其跨数据来源泛化能力受到限制。尽管如此, ML 模型在外部数据集上的预测误差仍低于多数传统公式模型, 说明其仍具有相对较高的预测精度。

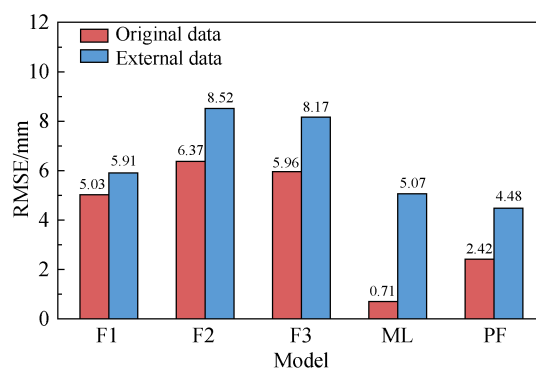


图 11 不同模型在原始全数据集与外部数据集上的 RMSE 比较

Fig. 11 Comparison of RMSE values of different models on the original full dataset and the external dataset

本工作提出的 PF 模型在原始全数据集和外部数据集上的 RMSE 分别为 2.42 mm 和 4.48 mm。虽然其在原始全数据集上的预测精度低于 ML 模型, 但在外部数据集上的 RMSE 低于 ML 模型和传统公式模型, 在已完成外部验证的模型中表现出最优的外部数据集预测效果。与在外部数据集上表现最好的传统模型 F1 相比, PF 模型的 RMSE 由 5.91 mm

降低至 4.48 mm, 降幅约为 24.2%。相较于 ML 模型, PF 模型的 RMSE 进一步由 5.07 mm 降低至 4.48 mm, 降幅约为 11.6%。这表明 PF 模型在跨数据来源条件下具有更优的预测精度和泛化稳定性。

4 结论

本工作提出了一种基于可解释机器学习的混凝土碳化深度预测与显式公式提取方法。通过文献数据库整理、特征筛选、机器学习建模和 SHAP 贡献函数拟合, 实现了由高精度黑箱模型向可解释公式模型的转化。主要结论如下:

1) 基于 Marani 等分享的自然碳化数据库, 经变量重构、配合比识别和异常数据筛选, 最终获得 709 个不同配合比、2077 条碳化深度数据。结合特征重要性、变量相关性和碳化机理认识, 确定 FS2 为最优特征组合, 在减少输入变量数量的同时保持了较好的预测性能, 有助于降低模型复杂度并提高可解释性。

2) 碳化深度数据呈明显偏态分布, $\log_{1p}$ 变换能够改善模型训练稳定性和测试集预测效果。综合比较 DT、RF、XGB 和 CB 模型在不同特征组合下的预测性能, 确定基于 $\log_{1p}$ 变换、FS2 特征组合和 CB 算法的模型表现最优。该模型训练集 $R^2=0.98$ 、RMSE=0.55 mm, 测试集 $R^2=0.93$ 、RMSE=1.14 mm, 表明该模型能够较准确地预测混凝土自然碳化深度。

3) SHAP 分析表明, 在最终 FS2-CB 模型中, W/CaO、碳化时间和碳化环境是影响碳化深度预测结果的 3 个最主要变量。说明混凝土碳化深度主要受孔隙传输条件、碳化缓冲能力、暴露时间和环境作用共同控制。其中, W/CaO 能够同时反映孔隙传输能力和碳化缓冲能力, 是表征混凝土抗碳化能力的重要特征。基于 SHAP dependence 关系拟合变量贡献函数, 实现了由黑箱模型向显式预测公式的转化。

4) PF 模型在测试集上的 RMSE 为 2.28 mm, 较公式模型中预测性能最优的 F4 模型降低约 47.2%, 表明其在测试集上具有优于传统公式模型的预测精度。在外部数据集上, PF 模型 RMSE 为 4.48 mm, 较 ML 模型的 5.07 mm 降低约 11.6%, 并低于公式模型 F1~F3 的 5.91~8.52 mm。结果表明, PF 模型虽然在原始全数据集上的预测精度低于最优机器学习模型, 但兼具较高预测精度、显式数学表达和较好的跨数据来源泛化能力, 能够为混凝土碳化深度预测及水泥基材料性能预测中的显式模型构建提供

参考。

(第二十八届中国科协年会学术论文)

参考文献:

- [1] STEFFENS A, DINKLER D, AHRENS H. Modeling carbonation for corrosion risk prediction of concrete structures[J]. *Cem Concr Res*, 2002, 32(6): 935–941.
- [2] STEFANONI M, ANGST U, ELSENER B. Corrosion rate of carbon steel in carbonated concrete—A critical review[J]. *Cem Concr Res*, 2018, 103: 35–48.
- [3] NIU L, WU S B, ANDREW R M, et al. Global and national CO₂ uptake by cement carbonation from 1928 to 2024[J]. *Earth Syst Sci Data*, 2025, 17(5): 2231–2247.
- [4] ANGULO RAMIREZ D E, MEIRA G R, QUATTRONE M, et al. A review on reinforcement corrosion propagation in carbonated concrete—Influence of material and environmental characteristics[J]. *Cem Concr Compos*, 2023, 140: 105085.
- [5] EKOLU S O. A review on effects of curing, sheltering, and CO₂ concentration upon natural carbonation of concrete[J]. *Constr Build Mater*, 2016, 127: 306–320.
- [6] TURCRY P, OKSRI-NELFIA L, YOUNSI A, et al. Analysis of an accelerated carbonation test with severe preconditioning[J]. *Cem Concr Res*, 2014, 57: 70–78.
- [7] LIU P, YU Z W, CHEN Y. Carbonation depth model and carbonated acceleration rate of concrete under different environment[J]. *Cem Concr Compos*, 2020, 114: 103736.
- [8] SONG H W, KWON S J, BYUN K J, et al. Predicting carbonation in early-aged cracked concrete[J]. *Cem Concr Res*, 2006, 36(5): 979–989.
- [9] ZHANG Q, FENG P, SHEN X Y, et al. Comparative analysis of carbonation strengthening mechanisms in full solid waste materials: Steel slag vs. carbide slag[J]. *Cem Concr Compos*, 2025, 157: 105927.
- [10] SILVA A, NEVES R, DE BRITO J. Statistical modelling of carbonation in reinforced concrete[J]. *Cem Concr Compos*, 2014, 50: 73–81.
- [11] TAFSESE W Z, SISTONEN E, PUTTONEN J. CaPrM: Carbonation prediction model for reinforced concrete using machine learning methods[J]. *Constr Build Mater*, 2015, 100: 70–82.
- [12] CHEN Z Y, LIN J L, SAGOE-CRENTSIL K, et al. Development of hybrid machine learning-based carbonation models with weighting function[J]. *Constr Build Mater*, 2022, 321: 126359.
- [13] KHAN A Q, MUHAMMAD S G, RAZA A, et al. Machine learning models for predicting carbonation depth in fly ash concrete: Performance and interpretability insights[J]. *J Road Eng*, 2026, 6(1): 74–90.
- [14] LONDHE S N, KULKARNI P S, DIXIT P R, et al. Predicting carbonation coefficient using Artificial neural networks and genetic programming[J]. *J Build Eng*, 2021, 39: 102258.
- [15] LI W J, FENG P, ZHANG Y W, et al. Multi-objective concrete mix design for sulfate attack resistance using interpretable machine learning predictions[J]. *Case Stud Constr Mater*, 2025, 23: e05419.
- [16] CHAN T C, YIO M H N, WONG H S. Natural carbonation of concrete: A data-driven analysis[J]. *Cem Concr Compos*, 2026, 167: 106436.
- [17] MARANI A, OYINKANOLA T, PANESAR D K. Probabilistic deep learning prediction of natural carbonation of low-carbon concrete incorporating SCMs[J]. *Cem Concr Compos*, 2024, 152: 105635.
- [18] MARANI A, PANESAR D K. Unravelling the correlation between natural and accelerated carbonation of low-carbon concrete using machine learning[J]. *Sustain Mater Technol*, 2025, 45: e01561.
- [19] ALIZAMIR M, GHOLAMPOUR A, KIM S, et al. Designing a robust

- extreme gradient boosting model with SHAP-based interpretation for predicting carbonation depth in recycled aggregate concrete[J]. *Artif Intell Rev*, 2026, 59: 4.
- [20] RIBEIRO M, SINGH S, GUESTIN C. “Why should I trust you?”: Explaining the predictions of any classifier[C]//*Proceedings of the 2016 Conference of the North American Chapter of the Association for Computational Linguistics: Demonstrations*. San Diego, California. Stroudsburg, PA, USA: ACL, 2016: 97–101.
- [21] BREIMAN L. Random forests[J]. *Mach Learn*, 2001, 45(1): 5–32.
- [22] CHEN T Q, GUESTIN C. XGBoost: A scalable tree boosting system[C]//*Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*. San Francisco California USA. ACM, 2016: 785–794.
- [23] PROKHORENKOVA L, GUSEV G, VOROBIEV A, et al. CatBoost: Unbiased boosting with categorical features [C]//*Advances in Neural Information Processing Systems: Vol. 31*. Montréal, Canada, 2018: 6639–6649.
- [24] AKIBA T, SANO S, YANASE T, et al. Optuna: A next-generation hyperparameter optimization framework[C]//*Proceedings of the 25th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery & Data Mining*. Anchorage AK USA. ACM, 2019: 2623–2631.
- [25] HU M W, TAN Q Y, KNIBBE R, et al. Investigation of age-hardening behaviour of Al alloys *via* feature screening-assisted machine learning[J]. *Mater Sci Eng A*, 2024, 916: 147381.
- [26] LEEMANN A, MORO F. Carbonation of concrete: The role of CO₂ concentration, relative humidity and CO₂ buffer capacity[J]. *Mater Struct*, 2017, 50: 30.
- [27] ZHANG K, ZHANG K, BAO R, et al. A framework for predicting the carbonation depth of concrete incorporating fly ash based on a least squares support vector machine and metaheuristic algorithms[J]. *J Build Eng*, 2023, 65: 105772.
- [28] LEEMANN A, NYGAARD P, KAUFMANN J, et al. Relation between carbonation resistance, mix design and exposure of mortar and concrete[J]. *Cem Concr Compos*, 2015, 62: 33–43.
- [29] LIU M W, JU X L, WU L J, et al. Carbonation depth model for loaded reinforced concrete (RC) beams under time-dependent relative humidity conditions[J]. *J Build Eng*, 2023, 65: 105618.
- [30] OTIENO M, IKOTUN J, BALLIM Y. Experimental investigations on the effect of concrete quality, exposure conditions and duration of initial moist curing on carbonation rate in concretes exposed to urban, inland environment[J]. *Constr Build Mater*, 2020, 246: 118443.
- [31] CZARNECKI L, WOYCIECHOWSKI P. Concrete carbonation as a limited process and its relevance to concrete cover thickness[J]. *ACI Mater J*, 2012, 109(3): 275–282.
- [32] LEE H, LEE H S, SURANENI P. Evaluation of carbonation progress using AIJ model, FEM analysis, and machine learning algorithms[J]. *Constr Build Mater*, 2020, 259: 119703.
- [33] EKOLU S O. Model for natural carbonation prediction (NCP): Practical application worldwide to real life functioning concrete structures[J]. *Eng Struct*, 2020, 224: 111126.
- [34] DUAN K K, CAO S Y. Data-driven parameter selection and modeling for concrete carbonation[J]. *Materials*, 2022, 15(9): 3351.
- [35] ZHANG P F, ZHAO X L, ZHANG D X, et al. Prediction of bond strength and failure mode of FRP bars embedded in UHPC or UHPSSC utilising extreme gradient boosting technique[J]. *Compos Struct*, 2024, 346: 118437.
- [36] LIU Z Y, VAN DEN HEEDER P, ZHANG C, et al. Carbonation of blast furnace slag concrete at different CO₂ concentrations: Carbonation rate, phase assemblage, microstructure and thermodynamic modelling[J]. *Cem Concr Res*, 2023, 169: 107161.
- [37] SHAH V, MACKECHNIE J, SCOTT A. Determination of carbonation resistance of concrete through a combination of cement content and tortuosity[J]. *J Build Eng*, 2022, 60: 105176.
- [38] DROUET E, POYET S, LE BESCOP P, et al. Carbonation of hardened cement pastes: Influence of temperature[J]. *Cem Concr Res*, 2019, 115: 445–459.

作者贡献声明:

李文佳: 论文构思、设计研究方法和模型算法、分析/综合数据并推导结论、撰写初稿

冯攀: 调查研究、数据管理、获取资助、监督指导、审阅与修订

刘新: 分析/综合数据并推导结论、绘制图表

谢辉: 论文构思、数据管理、验证

李迪宁: 调查研究、数据管理、验证

Construction of an Explicit Prediction Formula for Concrete Carbonation Depth Based on Interpretable Machine Learning

LI Wenjia, FENG Pan, LIU Xin, XIE Hui, LI Dining

(School of Materials Science and Engineering, Southeast University, State Key Laboratory of Engineering Materials for Major Infrastructure, Nanjing 211189, China)

Extended Abstract

Introduction Accurate prediction of concrete carbonation depth is essential for durability assessment and service-life prediction of reinforced concrete structures, as well as for evaluating the CO₂ uptake capacity of cement-based materials. Concrete carbonation is affected by material composition, mix proportions, curing conditions, and the exposure environment, and these factors exhibit complex nonlinear coupling effects. Traditional empirical models are generally based on simplified assumptions and limited variables, making it difficult to fully describe the carbonation process. Machine learning (ML) models can capture nonlinear relationships from large datasets and achieve high prediction accuracy, but they usually lack explicit analytical expressions. To balance prediction accuracy, model simplicity, and interpretability, this study proposes an interpretable ML-based framework for constructing an explicit prediction formula for concrete carbonation depth.

Methods A natural carbonation database shared by Marani et al. was used in this study. After data cleaning and feature processing, a database containing 35 input features, 2077 carbonation-depth data points, and 709 concrete mixtures was obtained. Decision tree (DT), random forest (RF), XGBoost (XGB), and CatBoost (CB) models were established for carbonation depth prediction. Considering the skewed distribution of carbonation depth, log1p transformation was applied to the target variable. The data were divided by concrete mixture group to avoid data leakage. SHAP analysis was then used to rank feature importance and guide feature selection. Based on the optimal CB model, the relationships between input variables and their SHAP contributions were fitted, and the additive SHAP contribution terms were further transformed into a multiplicative explicit prediction formula.

Results and discussion The carbonation depth data showed an obvious skewed distribution, and log1p transformation improved model training stability and test-set prediction performance. By comparing different ML algorithms and feature sets, the CB model based on log1p transformation and the FS2 feature set showed the best overall performance. The root mean square error (RMSE) values of the training and test sets were 0.55 mm and 1.14 mm, respectively, and the corresponding coefficient of determination (R^2) values were 0.98 and 0.93. These results indicated that the model could accurately predict natural carbonation depth and effectively capture the nonlinear relationship between input variables and carbonation depth. In the final FS2-CB model, SHAP analysis showed that W/CaO, carbonation time, and carbonation environment were the three most important variables affecting the prediction of carbonation depth. Among them, W/CaO showed the highest feature importance, indicating that it was a key combined variable influencing model prediction. Based on the SHAP dependence relationships, variable contribution functions were fitted, thereby enabling transformation from a black-box model to an explicit prediction formula (PF).

The PF model achieved an RMSE of 2.28 mm on the test set, which was approximately 47.2% lower than that of F4, the best-performing formula model on the same test set. This indicated that the PF model had higher prediction accuracy than traditional formula models on the original dataset. On the external dataset, the PF model achieved an RMSE of 4.48 mm, which was 11.6% lower than that of the ML model (5.07 mm), and also lower than those of formula models F1–F3, which ranged from 5.91 mm to 8.52 mm. These results showed that although the PF model was less accurate than the optimal ML model on the original full dataset, it combined relatively high prediction accuracy, an explicit mathematical expression, and better cross-source generalization ability, indicating its potential for engineering application.

Conclusions This study proposes an interpretable machine learning-based method for concrete carbonation depth prediction and explicit formula extraction. Through literature database processing, feature selection, machine learning modeling, and SHAP contribution function fitting, a high-accuracy black-box model is transformed into an interpretable formula model. The CB model with log1p transformation and the FS2 feature set achieves the best prediction performance. In the final FS2-CB model, SHAP analysis shows that W/CaO, carbonation time, and carbonation environment are the dominant variables controlling carbonation depth, indicating that concrete carbonation is mainly governed by pore transport conditions, carbonation buffering capacity, exposure time, and environmental effects. The constructed PF model shows higher accuracy than traditional formula models and better cross-source generalization performance than the ML model on the external dataset. Overall, the proposed method improves model simplicity and interpretability while maintaining relatively high prediction accuracy, providing a useful reference for explicit model construction in concrete carbonation depth prediction and other performance prediction tasks of cement-based materials.

Keywords machine learning; carbonation depth prediction; SHAP; feature selection; explicit formula extraction