

基于背散射电子图像与反卷积密度网络的水泥熟料化学成分 概率密度回溯估测

吴 旭¹, 李苏杭², 宁 帅¹, 王 琳^{2,3}, 李长姣², 叶家元⁴, 杨 波^{2,3}

(1. 济南大学, 山东省绿色与智能建筑材料重点实验室, 济南 250022; 2. 济南大学, 山东省泛在智能计算重点实验室, 济南 250022; 3. 泉城省实验室, 济南 250014; 4. 中国建筑材料科学研究总院有限公司, 北京 100024)

摘 要: 水泥基材料作为道路、桥梁及房屋建筑等现代土木工程中用量最大、应用最广的建筑材料, 其产品质量是决定工程结构安全性与服役寿命的关键因素。然而, 在工程质量事故责任追溯中, 熟料氧化物含量至关重要, 其检测高度依赖未水化的原始留样, 缺失后无法补测。利用水泥基材料微观结构图像反推其宏观力学性能、水灰比乃至初始组成特征已有相关研究。但是, 基于微观图像的传统回归模型呈现“黑箱”特性, 缺乏可量化的精度依据。本工作基于条件概率密度估计方法, 提出一种基于反卷积密度网络(DDN)的模型, 利用已硬化水泥浆体的背散射电子(BSE)图像, 结合残差网络(ResNet)的特征提取与水灰比、龄期等养护条件编码, 实现了对水泥熟料中主要氧化物(如 CaO 、 SiO_2 等)百分含量的概率密度估计。实验结果表明, 该方法在精度为 90% 时, 对测试集中 5 种氧化物的百分含量估测准确率可以达到 90% 以上, 不仅能够输出各氧化物含量的最可能值, 还能给出概率密度估计及对应精度。为工程质量事故追责提供了一条客观、定量且具备精度评定的熟料质量回溯检测新途径, 有望推动水泥基材料质量仲裁技术范式的革新。

关键词: 水泥基材料; 背散射电子图像; 反卷积密度网络; 化学成分回溯检测; 概率密度估计

中图分类号: TU525 文献标志码: A 文章编号: 0454-5648(2026)10-3518-12

网络出版时间: 2026-09-02



水泥基材料作为道路、桥梁、房屋建筑、港口码头等现代土木工程中用量最大、应用最广的建筑材料^[1], 其产品质量是决定工程结构安全性与服役寿命的关键因素^[2, 3]。随着中国城镇化率逐步提高, 城市建设已由大规模增量扩张全面转入存量提质与精细化管理的新阶段, 大量 20 世纪 90 年代至 21 世纪初建成使用的民用建筑、公路桥梁及港口码头等工程, 其设计使用年限已经过半或接近末期, 早期因施工技术水平限制或原材料质量不合格所遗留的缺陷与问题开始集中暴露^[4]。在频发的工程质量事故与责任追溯中, 如何科学、客观地判别质量事故根源于施工工艺控制不当, 还是水泥等原

材料产品质量存在缺陷, 已成为当前工程质量检测的关键问题^[5]。因此, 迫切需要研发一种能够对已硬化结构中初始水泥产品质量进行精确回溯检测的可靠方法。

水泥熟料质量是决定水泥基材料水化活性与宏观力学性能的关键^[6]。衡量熟料质量的核心指标在于其化学成分, 通常以氧化钙(CaO)、二氧化硅(SiO_2)、氧化铝(Al_2O_3)、氧化铁(Fe_2O_3)等主要氧化物, 及三氧化硫(SO_3)、氧化钠(Na_2O)、氧化镁(MgO)、氧化钾(K_2O)等微量组分的质量百分含量呈现。这些氧化物的比例不仅决定了熟料的潜在矿物组成[如硅酸三钙(C_3S)、硅酸二钙(C_2S)、铝酸三钙(C_3A)和

收稿日期: 2026-05-21。 修订日期: 2026-06-18。

基金项目: 国家自然科学基金面上项目(62676171, 62072213); 全国建材行业重大科技攻关“揭榜挂帅”项目(2023JBGS11-03); 山东省自然科学基金重大基础研究项目(ZR2022ZD01); 山东省自然科学基金杰出青年基金项目(ZR2022JQ30); 山东省自然科学基金(ZR2023LZH006)。

第一作者: 吴 旭(1995—), 男, 博士研究生;

李苏杭(2000—), 男, 硕士研究生。

通信作者: 王 琳(1983—), 男, 博士, 教授。

Received date: 2026-05-21. Revised date: 2026-06-18.

First author: WU Xu (1995—), male, Doctoral candidate.

LI Suhang (2000—), male, Master candidate.

E-mail: wuxvforever@foxmail.com; 1541168367@qq.com

Correspondent author: WANG Lin (1983—), male, Ph.D., Professor.

E-mail: ise_wanglin@ujn.edu.cn

铁铝酸四钙(C_4AF]), 也直接关系到水泥的凝结时间、强度发展和体积安定性。依据水泥化学分析方法的相关国家标准(GB/T 176—2025), 熟料的化学成分可方便地通过 X 射线荧光光谱(XRF)等方法进行快速、准确的定量检测。然而, 在工程质量事故的追溯性检测场景中, 该类方法高度依赖施工前按规定留置、妥善保存的未水化水泥样品。实际工程管理常存在留样制度执行不严、样品丢失或封存标识不清等问题, 致使后续鉴定无原始样品可用。水泥一旦与水拌和后, 熟料中的 C_3S 、 C_2S 等活性矿物即发生不可逆的水化反应。反应生成的水化硅酸钙(C-S-H)凝胶、氢氧化钙(CH)及钙矾石(Aft)等水化产物在随后长期的碳化作用下又转化为碳酸钙等, 体系内元素的化学结合形态与空间分布已发生变化^[7, 8]。因此, 直接由硬化浆体的元素含量反演施工前水泥熟料的原始化学成分, 在理化原理上存在挑战, 构成了水泥熟料质量回溯的瓶颈。

近年来, 伴随着人工智能特别是深度卷积神经网络与计算机视觉技术的迅猛发展, 利用水泥基材料微观结构图像反推其宏观力学性能、水灰比乃至初始组成特征的研究已得到实验证实^[9, 10]。水泥基材料微观结构图像根据其成像原理可主要分为显微计算机断层成像(CT)图像、二次电子图像以及背散射电子图像(BSE)。其中, BSE 图像衬度取决于样品表面微区的平均原子序数, 平均原子序数越高的区域背散射电子产额越高, 图像呈现亮区, 反之则呈现暗区^[11, 12]。因此, BSE 图像中明暗交错的微观形貌, 隐含了各物相的元素分布信息, 与熟料原始化学成分存在内在的映射关联, 具备从微结构图像回溯熟料质量指标的潜力^[13]。Sheiati 等^[14]利用深度学习技术实现了从 BSE 图像中自动化的定量识别各组分的物相。Mao 等^[15]提出一种基于机器学习的 BSE-EDS 图像分析框架, 通过量化元素组成和二维空间分布的各个相, 将相识别和量化从单组分体系扩展到含矿渣、粉煤灰的复合胶凝材料体系中。上述工作表明, BSE 图像的灰度与形貌特征能够有效解析硬化浆体中的矿物相和元素分布, 尤其是未水化熟料颗粒的矿物组成直接受控于原始熟料的化学组成, 这为利用 BSE 图像反推原始熟料氧化物组成提供了关键的材料学基础。然而, 传统机器学习回归方法如人工神经网络(ANN)、支持向量回归(SVR)、随机森林, 以及基于深度卷积网络(CNN)^[16]的直接回归模型, 虽然可通过训练建立图像特征与化学成分之间的非线性映射, 但其本质均为确定

性点预测模型, 仅能输出单一数值, 无法表征预测结果的可靠程度^[17]。这些模型呈现典型的“黑箱”特性, 决策过程缺乏可解释性, 在训练集未充分覆盖时极易给出错误判断, 极大限制了此类人工智能方法在水泥质量追溯中的实际应用^[18]。

条件概率密度估计方法为从根本上突破上述困境提供了革新性的技术途径^[19]。该类方法放弃预测单一目标值, 转而直接建模输出变量在给定输入条件下的完整条件概率密度分布。其代表性技术包含混合密度网络(Mixture density network, MDN)^[20]、归一化流(Normalizing flows)^[21]、反卷积密度网络(Deconvolutional density network, DDN)^[22]等。条件概率密度估计方法不仅可以提供最可能的预测值, 还能输出预测的完整概率密度曲线估计及对应精度, 实现了对不确定性的定量刻画, 为工程质量追责的决策提供了符合计量学规范的可信依据。已在时间序列预测^[23]、自动驾驶行为建模^[24]等领域证明其有效性。

因此, 本工作基于条件概率密度估计方法, 利用已硬化水泥浆体的 BSE 微观结构图像, 对水泥熟料的主要化学成分进行回溯估测。为此, 引入一种反卷积密度网络模型, 用于估测各氧化物含量的概率密度分布。该模型以残差网络(Residual network, ResNet)^[25]作为图像特征提取层, 逐层捕获微观结构从局部纹理到全局形貌的多尺度特征信息; 同时, 将水灰比与龄期等水化条件编码为特征向量, 与提取的图像深层特征进行融合, 再经由反卷积操作, 最终输出各氧化物含量的条件概率密度分布。针对每一张输入的 BSE 图像, 模型给出的不再是单一的确定性数值, 而是各氧化物含量的完整概率密度分布。本工作首次实现了从硬化浆体微观结构图像到熟料原始化学成分的带不确定性量化的反向估测。成功突破了传统回归模型的局限, 为工程质量事故追责提供了一条客观、定量且具备精度评定的熟料质量回溯检测新途径, 有望推动水泥基材料质量仲裁技术范式的革新。

1 实验

1.1 原材料

本工作使用的水泥粉末来自 47 家不同水泥厂, 通过山东省产品质量检验研究院提供。其熟料主要化学成分如表 1 所示。采用的无水乙醇来自天津富宇精细化工有限公司。环氧树脂来自北京锦虹世纪科技有限公司。

表 1 部分水泥熟料化学成分分析表
Table 1 Partial chemical composition analysis of cement clinker

Cement	CaO	SiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	SO ₃	Na ₂ O	MgO	K ₂ O
1	65.50	21.31	4.71	3.69	0.23	0.10	3.12	0.48
2	66.55	21.50	4.64	3.08	0.45	0.15	2.06	0.83
3	65.76	20.50	4.56	4.11	1.12	0.21	1.96	0.59
4	64.66	20.95	5.40	3.30	0.58	0.16	2.94	0.71
5	64.51	21.87	5.17	3.15	0.35	0.08	3.11	0.55
6	63.48	21.22	5.07	3.54	0.57	0.12	3.24	1.02
7	65.63	20.93	4.40	3.73	0.31	0.14	2.94	0.69
8	65.32	20.53	4.71	3.72	0.34	0.21	3.33	0.60
9	64.90	21.28	5.33	3.54	0.42	0.08	2.55	0.51
10	65.65	21.84	4.68	3.41	0.29	0.20	2.52	0.67

w is mass fraction.

1.2 实验方法

1.2.1 水泥样品制备 由于扫描电镜的背散射成像对样品大小的限制,使用 3ds MAX 软件设计了一个水泥制样过程中所需的专用成型模具,它由 3D 打印工艺制作而成,材质为树脂。该模具由完全相同的两部分组成,每部分中间有 5 条半圆形空槽,空槽的直径是 3 mm,高度是 10 mm。将模具两部分对齐放在一起,就形成了一个外形为立方体的完整模具,中间有 5 个直径为 3 mm 的孔洞。将水泥粉末加水拌和后在模具中成型,在温度为(20±2)℃、

相对湿度大于 95%环境下养护 1 d 后脱模。成型后的样品水养至指定龄期,接着使用无水乙醇浸泡停止水化。各样品对应的水灰比及龄期如表 2 所示。样品真空干燥后使用环氧树脂包埋固化。使用金相砂纸在磨抛机上打磨样品横截面,砂纸粗细程度用目数表示,即每平方英寸面积内研磨介质颗粒数,先使用 800 目砂纸进行粗磨,再逐步使用 1000~2000 目砂纸细磨,最后使用抛光绒布进行抛光,期间在无水乙醇中进行清洗,磨平抛光后制作成抛光样品准备扫描。

表 2 各水泥样品的水灰比及龄期
Table 2 Water-cement ratio and curing age of each cement sample

Cement sample	1	2	3	4	5	6	7	8
W/C	0.45	0.60	0.45	0.35	0.60	0.55	0.50	0.30
Age/d	1	28	3	28	17	13	27	18
Cement sample	9	10	11	12	13	14	15	16
W/C	0.50	0.25	0.40	0.35	0.35	0.60	0.45	0.30
Age/d	7	10	19	24	9	3	6	11
Cement sample	17	18	19	20	21	22	23	24
W/C	0.50	0.55	0.25	0.65	0.65	0.70	0.45	0.70
Age/d	19	2	2	14	5	11	22	25
Cement sample	25	26	27	28	29	30	31	32
W/C	0.40	0.50	0.60	0.55	0.25	0.65	0.55	0.35
Age/d	12	14	5	10	28	7	22	23
Cement sample	33	34	35	36	37	38	39	40
W/C	0.25	0.50	0.45	0.70	0.35	0.55	0.40	0.25
Age/d	20	15	12	4	21	8	4	16
Cement sample	41	42	43	44	45	46	47	
W/C	0.30	0.70	0.65	0.70	0.40	0.25	0.30	
Age/d	16	9	21	3	1	7	13	

1.2.2 BSE 图像获取 抛光后的样品表面做喷金镀膜处理, 采用日本电子场发射扫描电子显微镜 JSM-7610F 进行 BSE 图像获取, 扫描放大倍数设置为 200 倍, 加速电压为 15 kV。所获取图像如图 1 所示, 分辨率为 1280×1024 。其像素分辨率为 $0.47 \mu\text{m}$, 视野为 $601 \mu\text{m} \times 451 \mu\text{m}$, 该设置可提供足以区分不同水泥熟料原始化学组成的物理信息^[14]。为扩充数据量, 对同一样品再次打磨抛光以暴露新鲜截面, 并重新采集 BSE 图像。每个样品分 2 次进行扫描, 每次扫描选取 9 个不重叠的区域。因此, 每个样品可获取 18 张 BSE 图像。数据集共涵盖 47 家水泥厂样品, 共获得 844 张无重叠独立 BSE 图像。

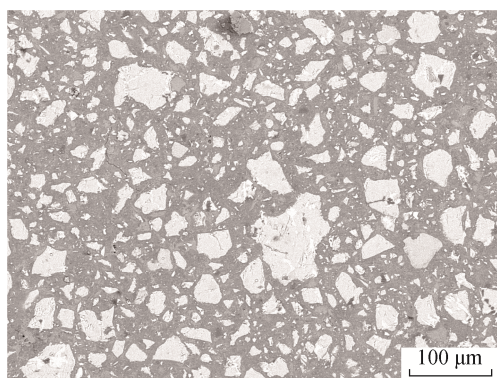


图 1 通过扫描电镜所获取的原始 BSE 图像
Fig. 1 Original BSE image obtained via SEM

1.3 数据预处理

将原始图像数据进行裁剪, 去除黑色边框及水印标尺信息, 尺寸为 1280×960 。将裁剪后的图像及其对应 8 种氧化物百分含量组合构成本工作的数据集, 数据集中包含 844 张不重叠的 BSE 图像。为模拟熟料质量回检中同一化学组成下不同微区独立验证的实际应用场景, 将数据集随机排序后按照 4:1 的比例划分训练集与测试集。训练集中包含 675 张 BSE 图像, 用于模型的训练。测试集中包含 169 张 BSE 图像, 用于测试模型的表现。训练集和测试集中的每张图像都各自独立地反映其熟料原始化学组成。在进行模型的训练和测试时, 为避免因输入图像尺寸过大带来的模型训练效率下降问题, 将数据集中的图像进行统一裁剪, 裁剪尺寸设定为 640×480 , 裁剪后的图像如图 2 所示。

2 方法介绍与模型结构

2.1 概率密度估计方法

监督学习是机器学习中最常见的任务范式, 其核心是从标注数据中学习输入到输出的映射关系。

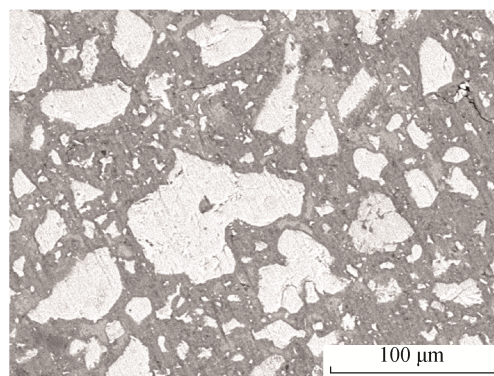


图 2 经过裁剪处理后的 BSE 图像
Fig. 2 Cropped BSE image

根据输出类型的不同, 监督学习通常分为分类(classification)与回归(regression) 2 类, 前者预测离散类别标签, 后者预测连续的数值变量。从概率的视角来看, 分类和回归本质上都是在估计条件分布 $p(y|x)$ 的某些摘要统计量, 分类取的是分布的众数(mode), 回归取的是期望(expectation)^[26]。然而, 摘要统计量所能提供的信息存在本质局限。当条件分布较为复杂时, 例如呈现出多峰特征或较高不确定性, 仅给出点估计便不再充分, 需要获知完整的条件分布形态。这便引出了条件密度估计(Conditional density estimation, CDE), 其目标正是直接估计出 $p(y|x)$ 的整个概率密度曲线。

利用水泥 BSE 图像预测熟料化学成分正属于此类场景。BSE 图像的灰度衬度反映的是物相的平均原子序数差异, 而熟料中同一物相可能因固溶体成分波动而对应不同的化学组成, 相似灰度区域也可能来自不同的矿物组合, 从而出现“非唯一解”问题。这种成像模态固有的信息模糊性, 使得同一张 BSE 图像可能对应多种合理的化学成分组合。若采用回归模型, 模型倾向于预测条件均值, 当真实分布为双峰(如一峰合规、一峰不合规)时, 回归可能仅给出合规的均值结果, 导致质量回检时无法发现潜在风险。因此, 该任务需要显式地估计完整的条件概率密度, 而非仅做点估计, 从而自然地刻画映射关系中的不确定性, 有效应对“非唯一解”问题。

条件密度估计方法可分为显式估计与隐式估计 2 大类。隐式估计模型(如生成式对抗网络^[27]、基于能量的模型^[28]等)能够从条件分布中采样, 但通常需要借助蒙特卡洛采样等来近似似然值, 计算代价高且难以直接评估任意点的概率密度。显式估计模型则直接参数化 $p(y|x)$, 可快速计算任意输出值的似然, 更适合需要直接评估概率的质量管控场景。

代表性的显式密度估计方法包括混合密度网络(Mixture density network, MDN)^[20]、归一化流(Normalizing flows)^[21]以及基于分段常数离散化的方法(如 PixelRNN^[29]、JBCENN^[30])。MDN 以高斯混合模型参数化条件分布,但受限于高斯分量的假设;归一化流通过一系列可逆变换将简单基分布映射为复杂分布,但当目标分布与基分布差异显著时其拟合能力有限;分段常数方法将连续域划分为离散区间并对每个区间预测概率,理论上不对分布形式做任何假设,可逼近任意自由形式分布,但在样本不足时估计的分布充满毛刺,且在多变量场景遭遇维度灾难。

反卷积密度网络(Deconvolutional density network, DDN)是 Chen 等^[22]提出的一种显式条件密度估计模型,采用分段常数的方式对连续域进行离散化。与以往方法不同的是,DDN 将图像生成

中常用的反卷积操作引入条件密度估计,利用反卷积在不同尺度上逐步建立空间关联,即便数据量有限,也能得到灵活且平滑的密度估计。传统分布估计方法在样本不足时估计出的分布往往充满毛刺,导致密度估计模型退化为普通的回归模型;而 DDN 通过多层反卷积的层次化空间相干性缓解了这一问题。因此,DDN 成为本任务的首选密度估计方法。

2.2 概率密度估计模型

如图 3 所示,本工作采用的概率密度估计模型主要由特征提取层、条件编码器和反卷积层组成。特征提取层主要负责对高维图像进行处理,将其压缩为低维特征信息;条件编码器主要针对水灰比、龄期与各氧化物含量进行编码,得到条件特征;反卷积层主要处理 2 个编码器提取的特征,最后得到各氧化物的概率密度估计。

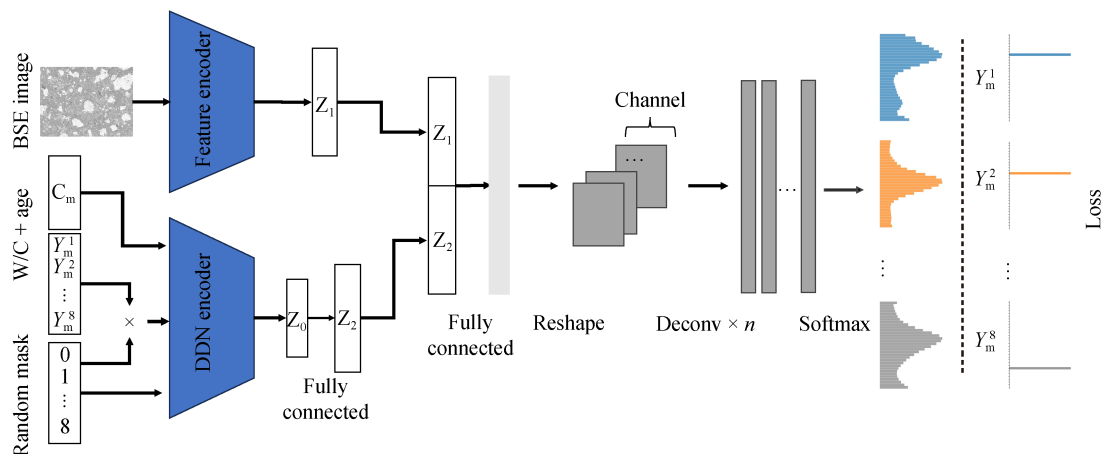


图 3 本工作采用的概率密度估计模型结构

Fig. 3 Structure of the probability density estimation model used in this work

2.2.1 特征提取层 为充分提取 BSE 图像中与化学成分相关特征,基于残差网络(Residual nets, ResNet)的结构设计了本工作预测模型的特征提取层,采用多个残差块对图像进行特征提取,相比其他的深度学习网络,残差网络凭借残差连接有效缓解了深层网络的梯度消失问题,可以让梯度传播到更深的层,使得信息不会在网络中消失,在拥有更少量参数的同时,还具有更强的模型泛化能力,可以提取到更复杂的图像特征。

如图 4 所示,特征提取层由特征提取器、特征重构器构成。为了让模型具备更好的特征提取能力,本工作选择基于自重构的自监督学习策略,通过编码器-解码器使网络自发地从输入图像中挖掘并保留具有判别力的信息,驱使着编码器学习图像中的

关键结构信息,构建出具备良好泛化能力的特征提取器。

为了更好地恢复图像细节,缓解信息瓶颈,本工作同时引入了与 U-Net^[31]类似的跨层跳跃连接。传统的自编码器将图像压缩为低维特征 z ,解码器只能通过低维的 z 来重构图像,会导致边缘、纹理等关键细节丢失,采用跨层的跳跃连接可以显著提升重构图像的保真性。同时跨层跳跃连接也可以提供多尺度的监督信号,强制编码器保留层级特征,稳定梯度传播,并加快模型收敛。

2.2.2 条件编码器与反卷积层 条件编码器承担 2 项功能: 1) 实现水灰比、龄期等养护条件的输入, 2) 实现掩码自回归机制。反卷积层则将潜在向量经全连接映射展开为特征图,再通过逐层上采样与卷

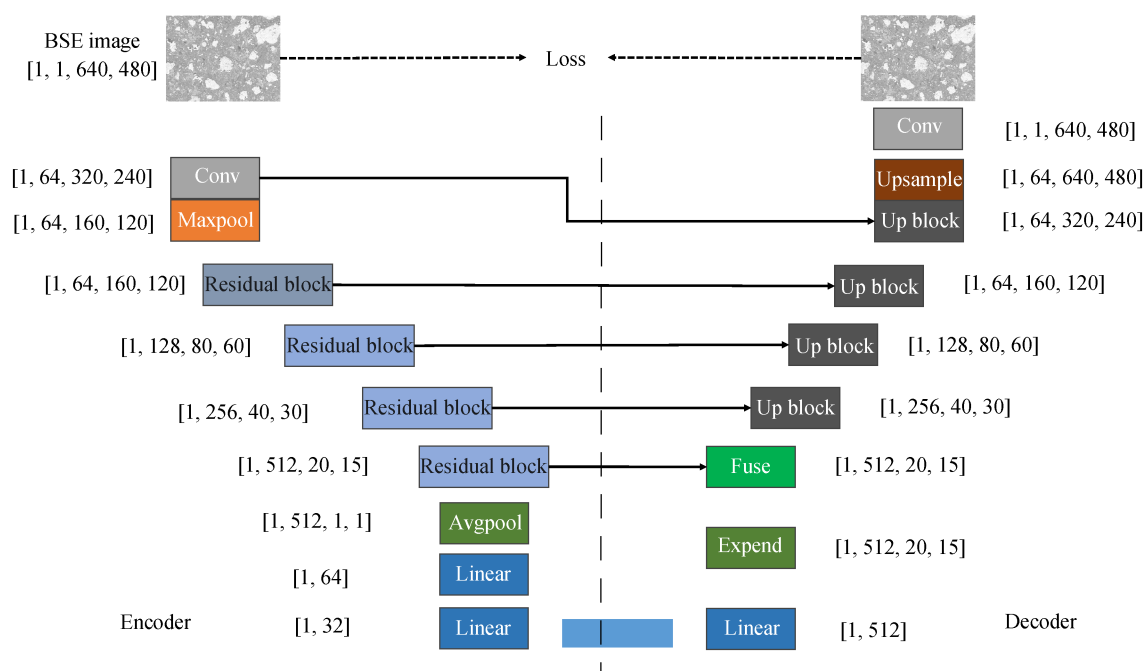


图4 特征提取层结构
Fig. 4 Feature extraction layer structure

积操作逐步构建出离散概率密度估计。其中,卷积的共享权重使得相邻区间之间自然地趋于平滑。在多变量密度估计任务中,若直接对 J 维联合分布使用反卷积,则需执行 J 维反卷积操作,计算复杂度随维度指数增长,实践中难以实现。为此,借助概率链式法则,将 J 维联合分布拆解为一系列一维条件分布的乘积:

$$p[y^{(1)}, \dots, y^{(J)} | x] = \prod_{j=1}^J p[y^{(j)} | x, y^{(1)}, \dots, y^{(j-1)}] \quad (1)$$

将 J 维联合分布拆解为若干一维条件分布后,每个一维目标氧化物的离散概率密度均可依靠反卷积解码架构独立建模,且各维的取值区间可灵活设定,互不相同。训练时,模型通过条件编码器的随机掩码在统一框架下学习所有分解路径;推理时则对多条路径的估计结果取平均值作为最终输出,这一设计有效规避了分段常数方法在多变量场景下遭遇的“维度灾难”。此外,为了减少目标变量排列顺序带来的偏差,采用多种排列顺序进行推理后取平均值。

3 结果与讨论

3.1 模型构建

特征提取层的训练过程为图像特征的提取能力训练。图像特征的提取能力训练主要由特征提取层(编码器)与特征重构层(解码器)组成,编码器(Encoder)将高维图像(image)映射为低维空间特征

(x),解码器(Decoder)需要将低维空间特征 x 重构为高维特征 r ,通过最小化image与 r 之间的差异训练特征提取层。其损失函数采用均方误差(Mean squared error, MSE),公式如式(2)所示:

$$\text{Loss}_{\text{feature}} = \frac{1}{M} \sum_m^M (r_m - \text{image}_m)^2 \quad (2)$$

其中: $\text{Loss}_{\text{feature}}$ 为MSE, M 表示样本总量, image_m 表示第 m 张图像, r_m 表示第 m 张重构图像。

在条件编码器和反卷积网络层训练中,首先冻结住特征提取层的参数,将水灰比、龄期、各氧化物含量经过条件编码器得到条件特征;随后与图像特征进行特征融合,为保证跨模态特征融合的有效性,使条件特征与图像特征维度严格对齐,确保条件编码器与特征提取层具备对等的表征能力;再经过反卷积得到各氧化物的概率密度估计,反卷积模块采用多级线性插值上采样与一维分组卷积级联的解码结构,共设置5组2倍率上采样单元,最终实现总放大倍率32倍的特征序列升维。

在概率密度估计前,需预先确定每种氧化物输出分布的离散取值区间。针对各氧化物样本数据单独划定专属上下限:以数据集内该氧化物实测含量的最小值作为区间下界,实测最大值作为区间上界,每种氧化物均匹配贴合自身数据分布特征的独立取值范围。最后通过计算概率密度估计的负对数似然,得到损失值。公式如式(3)所示:

$$\text{Loss}_{\text{DDN}} =$$

$$\frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \left\{ -\frac{1}{J} \sum_{j=1}^J \sum_{i=1}^N \log [p_{ij}(y_m^{(j)} | x, c)] \times 1_{B_i}(y_m^{(j)}) \right\} \quad (3)$$

其中: N 表示区间数量, M 表示样本数量, J 表示预测的氧化物数量, p_{ij} 表示第 j 个输出变量落在第 i 个区间的概率, c 表示水灰比与龄期条件变量, x 表示提取的图像特征, B_i 表示第 i 个区间, $y_m^{(j)}$ 表示第 m 个样本第 j 个氧化物的百分含量, $1_{B_i}[y_m^{(j)}]$ 表示当且仅当该 $y_m^{(j)}$ 属于 B_i 时为 1, 其他情况下为 0。

特征提取层将输入图像映射为 32 维全局特征向量。特征提取层的初始学习率为 1×10^{-4} , 批大小为 64, 学习率调整策略为余弦退火, 并使用随机梯度下降(SGD)优化器训练, 训练轮数为 300 轮。训练过程中损失曲线如图 5 所示, 训练损失和验证损失随着训练代数逐渐下降, 在第 300 代时, 验证损失已降低到 0.25 以下, 拟合效果良好。由于训练时使用了随机数据增强, 训练损失在第 50 代时开始出现了数值波动。

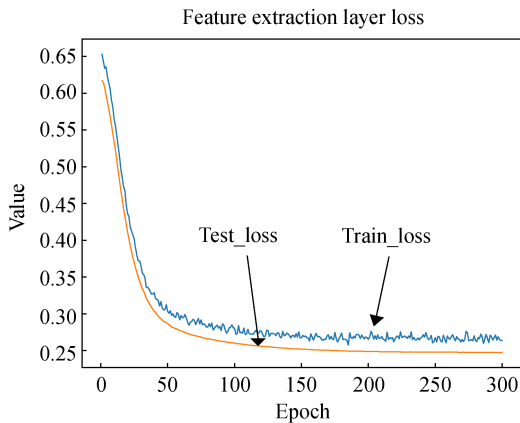


图 5 特征提取层训练过程 loss 曲线下降情况

Fig. 5 Loss curve decline during training of the feature extraction layer

概率密度估计训练中, 初始学习率为 3×10^{-4} , 批大小为 64, 区间数量 N 为 256, 排列顺序种类数量 Q 为 8, 学习率调整策略为余弦退火, 并使用 SGD 优化器训练, 训练轮数为 500 轮。区间数量 N 取 256 可实现拟合精度与计算成本的平衡。分段数过少时, 区间粒度粗糙, 含量分布多峰、偏态细节丢失, 估计误差增大; 分段数过多时则易引入噪声干扰, 且计算开销大幅上涨。256 的区间划分粒度既能完整捕捉数据分布特征, 又不会产生冗余计算。

训练过程中损失曲线如图 6 所示, 训练损失和验证损失随着训练代数逐渐下降。由于特征提取层

训练时使用了随机数据增强, 干扰了特征提取层对训练集图像的特征提取能力, 反卷积网络所接收到的训练集中的图像特征相较于验证集的图像特征, 噪声更大一些, 因此训练损失在第 100 代时开始出现了数值波动。

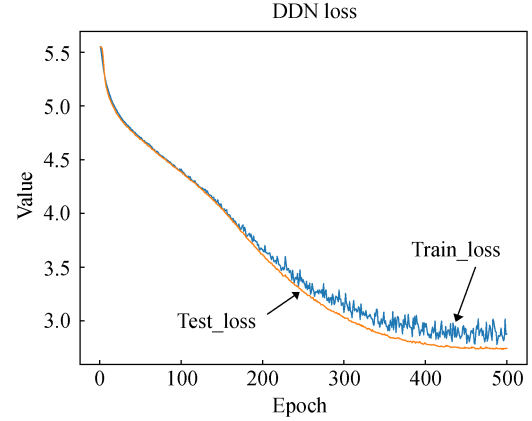


图 6 条件编码器及反卷积层训练过程 loss 曲线下降情况

Fig. 6 Loss curve decline during training of the conditional encoder and deconvolutional layer

3.2 模型估测结果

概率密度估计模型的估测效果一般使用不同精度(α)下的准确率(ACC)进行表征, 准确率越高, 代表模型在当前精度下对估测目标的估测越准确。将模型输出的最大概率值所在区间定义为点估计结果, 其计算方式如式(4)所示:

$$v_{m,j}^{\text{pred}} = \underset{i}{\operatorname{argmax}} p_{m,j,i} \quad (4)$$

其中: $p_{m,j,i}$ 表示第 m 个样本的第 j 个氧化物在第 i 个区间上的概率预测值。选择最大概率值作为点估计, 是因为它代表了给定输入条件下模型认为最可能的氧化物含量区间, 属于条件概率密度估计最自然的点估计形式。

则 ACC 的公式如下所示:

$$\text{ACC} = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M 1 \left[|v_{m,j}^{\text{pred}} - v_{m,j}| \leq (1 - \alpha) \times N \right] \quad (5)$$

$$(L_{v_{m,j}} \leq y_{m,j} < L_{v_{m,j}+1}) \times 100\%$$

其中: $\alpha \in (0,1)$ 为精度参数, 用于界定预测区间与真实区间之间容许偏差的上限, α 越大, 容许的区间偏差越小, 精度要求越高, N 表示划分的区间数量, L_i 代表第 i 个区间的下边界值, $1[\cdot]$ 表示当且仅当 $[\cdot]$ 条件成立时为 1, 其他情况为 0。

为直观展现模型估测效果, 使用平均绝对误差(MAE)、均方误差(MSE)统计模型在测试集上的表

现。其计算公式为:

$$MAE = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \left| \frac{L_{v_{m,j}^{pred}} + L_{v_{m,j}^{pred}+1}}{2} - y_{m,j} \right| \quad (6)$$

$$MSE = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \left(\frac{L_{v_{m,j}^{pred}} + L_{v_{m,j}^{pred}+1}}{2} - y_{m,j} \right)^2 \quad (7)$$

其中: $y_{m,j}$ 表示第 m 个样本、第 j 个氧化物的真实含量值, $L_{v_{m,j}^{pred}}$ 代表第 m 个样本在第 $v_{m,j}^{pred}$ 个区间的下边界值。

表 3 给出了模型在不同精度下对各元素氧化物百分含量的估测准确率。从表中可以看出, 当精度为 90% 时, 模型对 SiO_2 、 Al_2O_3 、 Fe_2O_3 、 SO_3 、 Na_2O 的估测准确率均达到 90% 以上; 当精度放宽至 75% 时, 所有 8 种氧化物估测准确率均大于 90%。从

MAE 和 MSE 指标来看, 模型对含量较高的氧化物估测误差相对较高, 而对低含量氧化物(如 Na_2O)的估测误差更小。产生这一现象主要有 2 方面的原因: 1) MAE 和 MSE 均为绝对误差指标, 其数值与组分含量正相关。 CaO 作为熟料中含量最高的氧化物(通常达 60% 以上), 其绝对误差高于 Na_2O 等微量组分。2) 本方法基于条件概率密度估计, 输出的是给定图像下氧化物含量的完整概率分布。对于 CaO 等高含量组分, 模型估计的条件概率分布展宽相对较大, 预测不确定性增加, 导致给定窄容差下的准确率偏低。相反, 某些低含量氧化物(如 SO_3 、 Na_2O)在不同样品间含量波动范围较大, 有利于模型捕捉更明确的映射关系, 因而在同等精度要求下表现出更高的准确率。

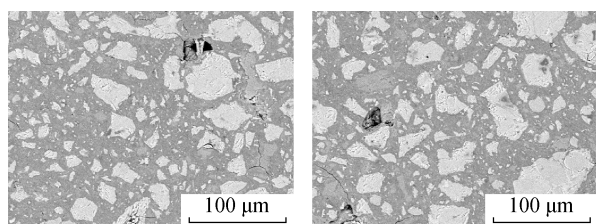
表 3 模型对各元素氧化物百分含量的估测效果

Table 3 Estimation performance of the model for the percentage content of each elemental oxide

Metrics	CaO	SiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	SO ₃	Na ₂ O	MgO	K ₂ O
ACC70/%	94.97	98.22	98.82	98.96	100.00	98.82	91.86	99.41
ACC75/%	90.53	97.04	97.34	98.96	99.85	98.82	91.57	97.49
ACC80/%	90.53	96.60	95.12	97.34	97.93	98.67	86.69	92.60
ACC85/%	89.35	95.27	94.67	95.56	97.19	97.34	83.14	91.42
ACC90/%	88.31	92.16	91.72	91.12	92.46	96.75	79.59	89.94
ACC95/%	83.88	86.83	86.54	84.91	83.88	91.72	79.14	86.09
MAE	0.28	0.10	0.09	0.08	0.05	0.02	0.25	0.06
MSE	0.67	0.08	0.05	0.03	0.01	0	0.38	0.02

ACC70–ACC95 denote model accuracy at confidence levels $\alpha = 70\%$ – 95% , respectively

此外, 为验证模型的有效性, 从测试集中选取同一个样品不同区域的 BSE 图像作为输入(图 7), 模型的输出结果分别如图 8、图 9 所示。图中黄色竖线代表样品熟料中氧化物真实含量, 红色竖线代表模型输出概率密度分布最高峰所在位置。从两张图对比来看, 对于不同输入, 模型输出的概率密度分布有所区别, 但可以看出模型估计值基本与真实值重合, 说明模型可以对来自同一样本不同区域图像的输入均做出正确估测。



(a) BSE image of the left region (b) BSE image of the right region

图 7 来自同一样本不同区域的 BSE 图像

Fig. 7 BSE images from different areas of the same specimen

3.3 条件编码消融实验

为验证条件编码器的实际作用, 分析水灰比和龄期信息对模型预测效果的影响, 进行了去除水灰比、龄期输入的消融实验。具体做法是将水灰比与龄期从条件输入中移除后重新训练和评估模型, 实验结果如表 4 所示。去除水灰比与龄期输入后, 模型在各精度等级下的估测准确率均有所下降, MAE 和 MSE 指标亦逊于表 3 中完整模型的对应指标。实验结果表明, 水灰比和龄期信息对模型估测效果可以起到积极作用, 同时表明了条件编码器在整个模型架构中的有效性。

3.4 与 ResNet 回归模型对比

为全面地评估所提方法的有效性, 本节将其与基于 ResNet 的确定性回归模型进行对比。为保证 2 类模型评价指标一致, 采用统一的准确率指标, 沿用概率密度估计模型的区间划分规则将各元素含量值域离散化, 针对给定的精度范围设定对应的误差范围, 若回归预测值与真值所属区间的编号差值不

超过误差范围,即判定模型预测正确。ResNet 模型估测效果如表 5 所示,当精度在 70%时,ResNet 模型对部分元素氧化物百分含量估测准确率表现略好于所提概率密度估计模型。但随着精度的提升,ResNet 模型对各元素氧化物百分含量估测准确率表现快速下降,均低于概率密度估计模型。对比结果

表明,确定性回归模型在面对 BSE 图像到化学组成的复杂映射时,仅能输出单一预测值,难以捕捉映射关系中固有的不确定性;而所提条件概率密度估计方法通过输出完整的条件概率分布,能够在不同精度要求下保持较为稳定的估测表现,在不确定性度量方面具有显著优势。

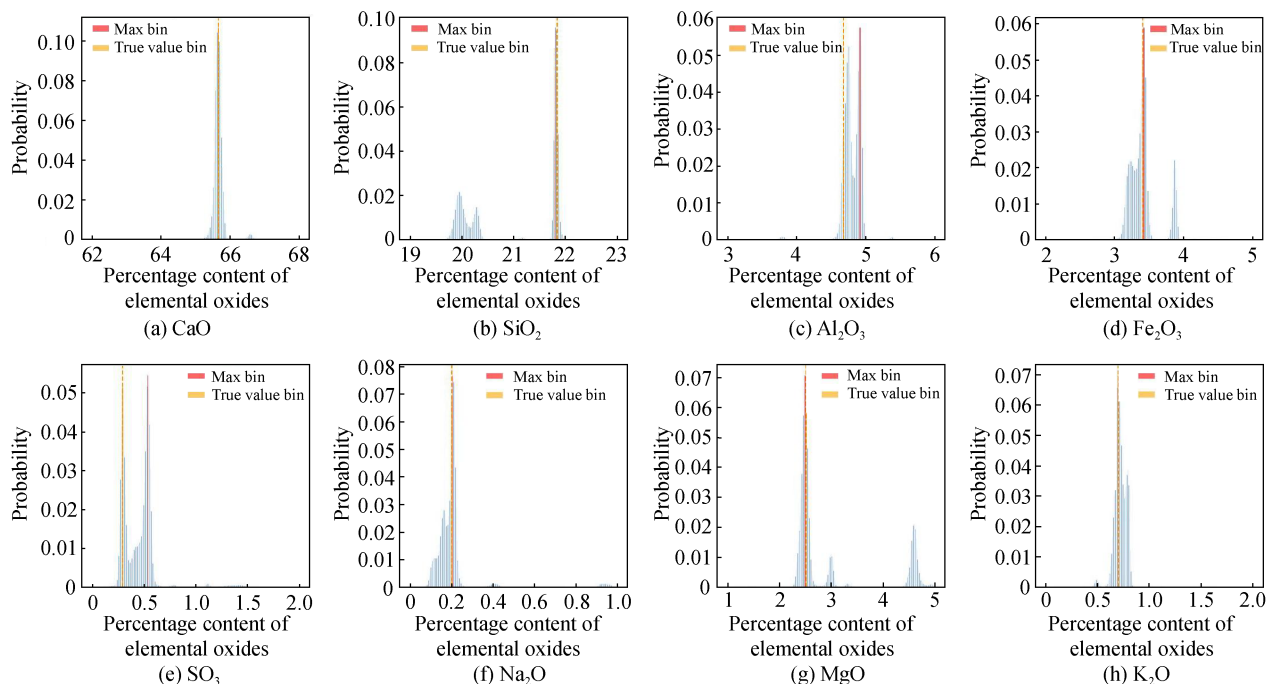


图 8 模型输出的各氧化物含量概率密度估计图(输入为图 7 中左侧图像)

Fig. 8 Probability density estimation of oxide contents output by the model (Input: the left image in Fig. 7)

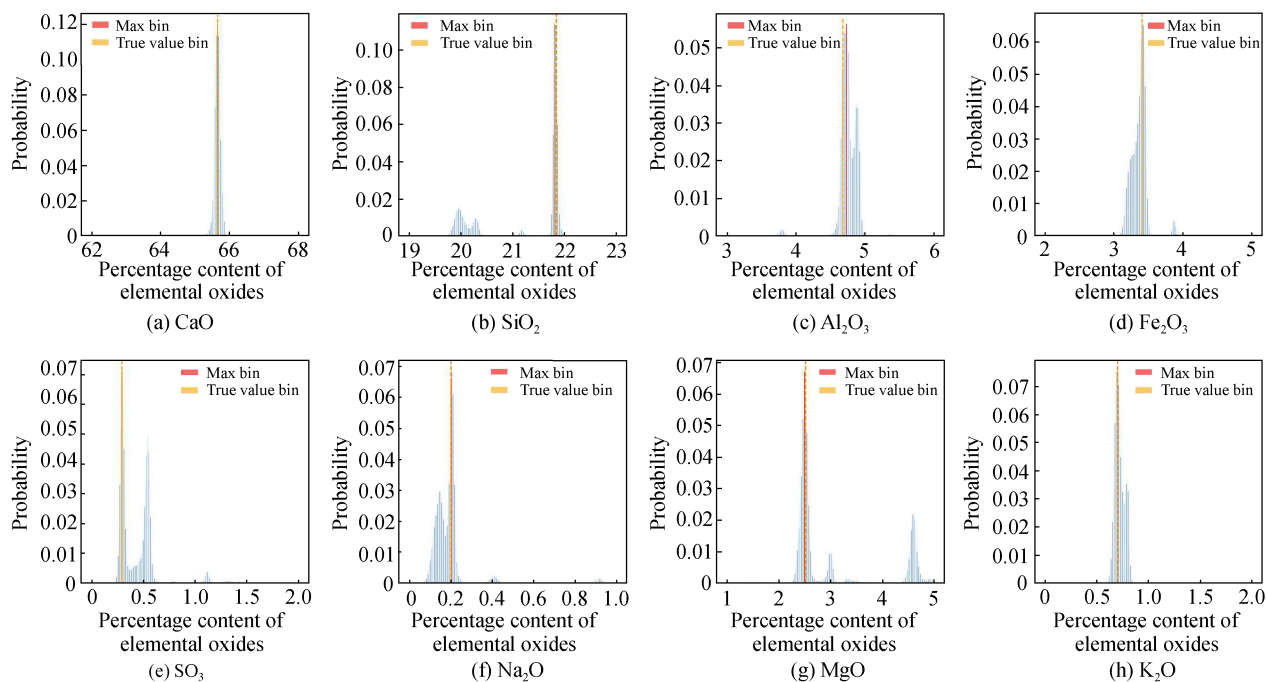


图 9 模型输出的各氧化物含量概率密度估计图(输入为图 7 中右侧图像)

Fig. 9 Probability density estimation of oxide contents output by the model (Input: the right image in Fig. 7)

表 4 去除水灰比和龄期输入后模型对各元素氧化物百分含量的估测效果

Table 4 Estimation performance of the model for the percentage content of elemental oxides after removing water-to-cement ratio and age inputs

Metrics	CaO	SiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	SO ₃	Na ₂ O	MgO	K ₂ O
ACC70/%	85.65	90.53	95.12	96.89	95.27	98.22	85.21	94.97
ACC75/%	83.58	85.80	91.72	94.23	93.49	96.75	79.88	92.31
ACC80/%	74.26	78.40	83.73	89.05	86.09	93.49	68.93	85.06
ACC85/%	62.13	68.05	71.15	82.84	75.89	91.57	61.83	80.03
ACC90/%	56.95	47.04	53.40	67.01	70.86	86.69	46.30	64.50
ACC95/%	42.46	36.54	37.72	40.98	53.11	76.48	32.25	42.60
MAE	0.76	0.50	0.32	0.26	0.16	0.05	0.56	0.18
MSE	1.17	0.44	0.19	0.13	0.06	0.01	0.54	0.06

ACC70–ACC95 denote model accuracy at confidence levels $\alpha = 70\%$ – 95% , respectively.

表 5 ResNet 模型对各元素氧化物百分含量的估测效果

Table 5 Estimation performance of the ResNet model for the percentage content of elemental oxides

Metrics	CaO	SiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	SO ₃	Na ₂ O	MgO	K ₂ O
ACC70/%	96.75	97.93	100.00	98.67	99.70	100.00	92.16	98.82
ACC75/%	92.01	95.86	99.11	96.89	98.82	99.56	87.13	96.30
ACC80/%	87.43	90.83	89.50	93.93	95.56	94.97	77.07	92.31
ACC85/%	81.51	75.44	75.30	81.66	87.57	90.53	58.14	83.28
ACC90/%	63.02	57.54	51.04	62.72	72.34	78.55	43.05	63.46
ACC95/%	34.91	36.39	23.37	36.54	40.98	45.27	24.70	35.06
MAE	0.58	0.39	0.31	0.26	0.15	0.07	0.55	0.18
MSE	0.58	0.24	0.14	0.12	0.04	0.01	0.48	0.05

ACC70–ACC95 denote model accuracy at confidence levels $\alpha = 70\%$ – 95% , respectively.

4 结论

1) 针对工程质量检测中熟料质量难以回检的问题,提出了基于微结构图像的已硬化水泥浆体熟料化学成分概率密度估计方法,实现了从 BSE 图像到熟料中各氧化物百分含量的估测。实验结果显示,当精度为 90%时,模型对测试集中 5 种氧化物的百分含量估测准确率可以达到 90%以上。

2) 针对回归模型难以带精度进行可信估测的问题,采用基于反卷积密度网络的概率估计方法,通过改进模型结构,实现了从硬化水泥浆体 BSE 图像到熟料化学成分的条件概率密度估计建模,不仅能输出各氧化物含量的最可能值,还给出概率密度的估计及对应精度,为工程质量回溯提供了可量化的依据。

3) 针对图像特征难以提取的问题,采用残差网络结构,并改进训练方法,实现了基于自监督学习与跨层跳跃连接的特征提取层训练,可有效捕获 BSE 图像中从局部纹理到全局形貌的多尺度特征,

并结合条件编码器融合水灰比、龄期等水化条件信息,实现了模型预测的多模态输入。
(第二十八届中国科协年会学术论文)

参考文献:

[1] SCRIVENER K L, JOHN V M, GARTNER E M. Eco-efficient cements: Potential economically viable solutions for a low-CO₂ cement-based materials industry[J]. Cem Concr Res, 2018, 114: 2–26.

[2] ALEXANDER M, BEUSHAUSEN H. Durability, service life prediction, and modelling for reinforced concrete structures—review and critique[J]. Cem Concr Res, 2019, 122: 17–29.

[3] MEHTA P K, MONTEIRO P J M. Concrete: Microstructure, Properties, and Materials[M]. 3rd ed. New York, N.Y.: McGraw-Hill, 2006.

[4] 王凤娟, 李映泽, 王赞程, 等. 基于机器学习的防护与修复混凝土寿命智能预测方法[J]. 硅酸盐通报, 2025, 44(11): 4235–4251. WANG Fengjuan, LI Yingze, WANG (Bin|Yun)(Cheng), et al. Bull Chin Ceram Soc, 2025, 44(11): 4235–4251.

[5] 徐红艳, 王瑞金. 建筑工程质量与原材料质量的溯源与截断[J]. 居业, 2024(2): 236–238. XU Hongyan, WANG Ruijin. Create Living, 2024(2): 236–238.

[6] YAO Y G, WU S, WANG X J, et al. Regulation of mineral formation of iron-rich calcium sulfoaluminate clinker by controlling SO₃ and Fe₂O₃ contents[J]. Cem Concr Res, 2024, 180: 107497.

- [7] LOLLINI F, REDAELLI E. Carbonation of blended cement concretes after 12 years of natural exposure[J]. *Constr Build Mater*, 2021, 276: 122122.
- [8] MORANDEAU A, THIÉRY M, DANGLA P. Investigation of the carbonation mechanism of CH and C-S-H in terms of kinetics, microstructure changes and moisture properties[J]. *Cem Concr Res*, 2014, 56: 153–170.
- [9] QIAN H J, LI Y, YANG J F, et al. Segmentation and analysis of cement particles in cement paste with deep learning[J]. *Cem Concr Compos*, 2023, 136: 104819.
- [10] SASEENDRAN V, YAMAMOTO N, COLLINS P J, et al. Unlocking the potential: Analyzing 3D microstructure of small-scale cement samples from space using deep learning[J]. *npj Microgravity*, 2024, 10: 11.
- [11] 王培铭, 丰曙霞, 刘贤萍. 背散射电子图像分析在水泥基材料微观结构研究中的应用[J]. *硅酸盐学报*, 2011, 39(10): 1659–1665. WANG Peiming, FENG Shuxia, LIU Xianping. *J Chin Ceram Soc*, 2011, 39(10): 1659–1665.
- [12] 张倩倩, 魏亚. 基于背散射电子图像的矿渣-水泥复合体系反应程度的定量分析[J]. *硅酸盐学报*, 2015, 43(5): 563–569. ZHANG Qianqian, WEI Ya. *J Chin Ceram Soc*, 2015, 43(5): 563–569.
- [13] JIANG M Z, RÖBLER C, WELLMANN E, et al. Workflow for high-resolution phase segmentation of cement clinker from combined BSE image and EDX spectral data[J]. *J Microsc*, 2022, 286(2): 85–91.
- [14] SHEIATI S, NGUYEN H, KINNUNEN P, et al. Cementitious phase quantification using deep learning[J]. *Cem Concr Res*, 2023, 172: 107231.
- [15] MAO L X, HE F Q, LI L H, et al. A quantitative study of phase assemblage in cement-fly ash-slag ternary systems using machine learning-assisted BSE-EDS image analysis[J]. *Constr Build Mater*, 2025, 498: 143712.
- [16] BANGARU S S, WANG C, ZHOU X, et al. Scanning electron microscopy (SEM) image segmentation for microstructure analysis of concrete using U-Net convolutional neural network[J]. *Autom Constr*, 2022, 144: 104602.
- [17] MINH D, WANG H X, LI Y F, et al. Explainable artificial intelligence: A comprehensive review[J]. *Artif Intell Rev*, 2022, 55(5): 3503–3568.
- [18] FENG D C, LIU Z T, WANG X D, et al. Failure mode classification and bearing capacity prediction for reinforced concrete columns based on ensemble machine learning algorithm[J]. *Adv Eng Inform*, 2020, 45: 101126.
- [19] ISLAM M, LIU S R, WANG L, et al. Predicting cement strength as probability density: Resolving partial observability and sample scarcity for industrial quality control[J]. *IEEE Trans Ind Inform*, 2026, 22(7): 5951–5962.
- [20] BISHOP C M. Mixture density networks[R]. NCRG/94/004. Birmingham: Aston University, 1994.
- [21] GEORGE P, ERIC N, JIMENEZ R D, et al. Normalizing flows for probabilistic modeling and inference[J]. *J MACHINE LEARNING RESEARCH*, 2021, 22(57): 1–64.
- [22] CHEN B, ISLAM M, GAO J S, et al. Deconvolutional density network: Modeling free-form conditional distributions[J]. *Proc AAAI Conf Artif Intell*, 2022, 36(6): 6183–6192.
- [23] SALINAS D, FLUNKERT V, GASTHAUS J, et al. DeepAR: Probabilistic forecasting with autoregressive recurrent networks[J]. *Int J Forecast*, 2020, 36(3): 1181–1191.
- [24] SALZMANN T, IVANOVIC B, CHAKRAVARTY P, et al. Trajectron++: Dynamically-feasible trajectory forecasting with heterogeneous data[C]// *Computer Vision – ECCV 2020*. Cham: Springer, 2020: 683–700.
- [25] 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.
- [26] BISHOP C M. *Pattern Recognition and Machine Learning*[M]. New York: Springer, 2006.
- [27] GOODFELLOW I J, POUGET-ABADIE J, MIRZA M, et al. Generative adversarial nets[C]//*Advances in Neural Information Processing Systems*. 2014, 27: 2672–2680.
- [28] ARBEL M, ZHOU L, GRETTON A. Generalized energy based models[PP/OL]. V5. arXiv (2021–12–21)[2026–06–18]. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2003.05033>.
- [29] VAN DEN OORD A, KALCHBRENNER N, KAVUKCUOGLU K. Pixel recurrent neural networks[C]//*Proceedings of the 33rd International Conference on Machine Learning*. 2016: 1747–1756.
- [30] LI R, REICH B J, BONDELL H D. Deep distribution regression[J]. *Comput Stat Data Anal*, 2021, 159: 107203.
- [31] RONNEBERGER O, FISCHER P, BROX T. U-Net: Convolutional networks for biomedical image segmentation[M]//*Medical Image Computing and Computer-Assisted Intervention–MICCAI 2015*. ChamSpringer International Publishing, 2015: 234–241.

作者贡献声明:

吴 旭: 论文构思、设计研究方法和实验方案、分析/综合数据并推导结论、撰写初稿

李苏杭: 数据管理、分析/综合数据并推导结论、撰写初稿、绘制图表

宁 帅: 调查研究、数据管理、分析/综合数据并推导结论

王 琳: 提供资源、获取资助、项目管理、监督指导、审阅与修订、验证

李长姣: 监督指导、审阅与修订、验证

叶家元: 提供资源、监督指导

杨 波: 提供资源、获取资助、监督指导

Retrospective Estimation of Probability Density of Cement Clinker Chemical Composition Based on BSE Images and Deconvolutional Density Network

WU Xu¹, LI Suhang², NING Shuai¹, WANG Lin^{2,3}, LI Changjiao², YE Jiayuan⁴, YANG Bo^{2,3}

(1. Shandong Provincial Key Laboratory of Green and Intelligent Building Materials, University of Jinan, Jinan 250022, China;

2. Shandong Key Laboratory of Ubiquitous Intelligent Computing, University of Jinan, Jinan 250022, China;

3. Quan Cheng Laboratory, Jinan 250014, China; 4. China Building Materials Academy Co., Ltd, Beijing 100024, China)

Extended Abstract

Introduction The chemical composition of cement clinker, particularly the percentage of key oxides, is crucial for evaluating cement quality and is vital for engineering-accident liability tracing. However, traditional methods for chemical composition analysis rely heavily on unhydrated original cement samples, which are often missing, improperly stored, or ambiguously labeled in engineering management, resulting in an insufficient basis for subsequent identification. Once cement hydrates, active minerals undergo irreversible reactions, making it challenging to invert the original clinker composition directly from the hardened paste. In contrast, backscattered electron (BSE) images of the hardened cement paste contain sufficient physical information to distinguish the original chemical compositions of different cement clinkers, thus providing a potential pathway for post-event tracing. Although deep learning methods have been explored for microstructural image mapping to infer macroscopic properties, conventional regression models are typically "black-box" point predictors that cannot quantify prediction uncertainty. The conditional probability density estimation method can not only provide the most probable predicted value, but also output the complete estimated probability-density curve along with its confidence assessment, thereby enabling quantitative characterization of prediction uncertainty. Accordingly, this study proposes a conditional probability density estimation method based on a Deconvolutional Density Network (DDN). Utilizing BSE images of hardened paste together with encoded water-to-cement (W/C) ratios and curing ages as conditional inputs, this model directly predicts the full conditional probability density of the main clinker oxide contents, providing a new objective and quantitative pathway for quality liability tracing.

Methods Cement clinker samples from 47 different plants were used to prepare cement paste specimens with W/C ratios ranging from 0.25 to 0.70 and curing ages from 1 d to 28 d. The hydration was terminated by immersion in anhydrous ethanol, and the samples were polished for subsequent scanning. BSE images were acquired *via* a JSM-7610F field-emission SEM at 200 $\times$ magnification and an accelerating voltage of 15 kV. For each sample, two scans were performed, and nine non-overlapping regions were captured per scan, resulting in a dataset of 844 independent BSE images. The proposed model consists of a feature extraction layer based on a residual network (ResNet) with self-supervised learning and cross-layer skip connections, a conditional encoder, and deconvolutional layers. The ResNet extracts multiscale morphological features from local textures to global patterns. The conditional encoder embeds the W/C ratio and curing-age conditions into the image features. The DDN is then employed to output the conditional probability density distributions for the percentages of eight oxides (CaO, SiO₂, Al₂O₃, Fe₂O₃, SO₃, Na₂O, MgO, and K₂O). The deconvolutional layers map the fused features to a smooth probability distribution over 256 discretized intervals. To evaluate the model, accuracy (ACC) under different confidence levels (α), mean absolute error (MAE), and mean squared error (MSE) were adopted as evaluation metrics.

Results and discussion The estimation results of the proposed model indicate that, at a confidence level of $\alpha = 90\%$, the model achieves an accuracy of over 90% in estimating the percentage contents of five oxides (SiO₂, Al₂O₃, Fe₂O₃, SO₃, and Na₂O) on the test set. When the confidence level is relaxed to $\alpha = 75\%$, the estimation accuracy for all eight oxides exceeds 90%. This could be attributed to the DDN's capability of modeling complete probability density distributions instead of simple point estimates, effectively resolving the nonunique-solution problem stemming from the intrinsic information ambiguity of BSE imaging. In terms of MAE and MSE metrics, the model exhibits relatively higher absolute errors for components with higher contents, such as CaO. This is generally attributed to the nature of absolute error metrics, which are positively correlated with the oxide content. Conversely, low-content oxides like Na₂O show smaller estimation errors, possibly because their larger fluctuation ranges among different samples allow the model to capture clearer mapping relationships. In addition, ablation experiments further reveal that removing the W/C ratio and age inputs leads to a decrease in estimation accuracy across all confidence levels, demonstrating the effectiveness of the conditional encoder in integrating critical hydration parameters. Compared with the deterministic ResNet regression model, the proposed DDN model exhibits significantly better stability of estimation performance under higher precision requirements. This result demonstrates that the DDN model effectively mitigates the inherent uncertainty in the mapping from BSE images to chemical compositions, a limitation typical of deterministic regression models that lack reliability quantification.

Conclusions The main conclusions of this study are summarized as follows. The proposed probability density estimation method successfully maps BSE images of hardened cement paste to the oxide contents of clinker. Experimental results demonstrate that the model achieves an accuracy of over 90% for five oxides at a confidence level of 90%. The adoption of the Deconvolutional Density Network enables the model not only to output the most probable value of each oxide content but also to provide a complete probability density curve with corresponding confidence assessment, thereby overcoming the limitation of traditional regression models that lack quantifiable reliability for quality tracing applications. Moreover, the ResNet-based feature extraction with cross-layer skip connections effectively captures multiscale features from BSE images, while the integration of W/C ratio and curing age *via* the conditional encoder significantly enhances the model predictive capability. This study demonstrates that the probabilistic retrospective estimation based on BSE images and DDN offers a robust and objective means to quantitatively infer the original clinker composition from hardened paste. As such, it holds promise as a transformative technique for cement-quality arbitration in engineering-accident liability investigations.

Keywords cement-based materials; backscattered electron images; deconvolutional density network; chemical composition retrospective detection; probability density estimation