

基于机器学习的混凝土自生收缩 预测算法与解释

王庆贺¹,戴蕊宏¹,王仕奇²,王艳惠³

(1. 沈阳建筑大学土木工程学院,辽宁 沈阳 110168;2. 浙江大学建筑工程学院,浙江 杭州 310058;
3. 中建三局集团(浙江)有限公司,上海 200000)

摘要 目的 研究混凝土自生收缩的多因素作用机理,建立适用于混凝土自生收缩预测的机器学习模型,增强机器学习算法的可解释性。方法 将水灰比、水胶比等 14 个指标作为输入变量,混凝土自生收缩值作为输出变量进行预测;采用 BPNN、SVM、RF 及 XGBoost 算法建立混凝土自生收缩预测模型,基于判定系数 R^2 、均方根误差 RMSE 及平均绝对误差 MAE,选取最适用于混凝土自生收缩的预测模型;采用 SHAP 法解释输入变量对输出变量的贡献程度、相关性及各输入变量的作用机理。结果 相较于其他算法而言,XGBoost 算法可以有效预测混凝土的自生收缩,此时得到的 R^2 、RMSE 及 MAE 分别为 0.956、0.055 及 0.026。结论 骨灰比是影响混凝土自生收缩的关键变量;骨灰比、高吸水树脂掺量等指标与混凝土自生收缩呈现负相关;时间与硅灰掺量等指标与混凝土自生收缩呈现正相关;采用 SHAP 法可以有效解决机器学习模型存在的黑盒问题,提高模型的可解释性。

关键词 混凝土;自生收缩;机器学习;SHAP;预测

中图分类号 TU528

文献标志码 A

Prediction Algorithm and Interpretation for Autogenous Shrinkage of Concrete Based on Machine Learning

WANG Qinghe¹, DAI Ruihong¹, WANG Shiqi², WANG Yanhui³

(1. School of Civil Engineering, Shenyang Jianzhu University, Shenyang, China, 110168; 2. College of Civil Engineering and Architecture, Zhejiang University, Hangzhou, China, 310058; 3. China Construction Third Engineering Bureau Group (Zhejiang) Co. Ltd., Shanghai, China, 200000)

Abstract: In order to study the working mechanism of concrete autogenous shrinkage with multiple factors, a machine learning model suitable for predicting concrete autogenous shrinkage is

收稿日期:2022-10-15

基金项目:国家自然科学基金项目(51808351);辽宁省应用基础研究计划(2022JH2/101300130);沈阳市中青年科技人才项目(RC200143);住房和城乡建设部科学技术计划项目(2019-K-054)

作者简介:王庆贺(1987—),男,教授,博士,博士研究生导师,主要从事混凝土材料长期性能方面研究。

established to enhance the interpretability of machine learning algorithms. 14 indexes such as water-cement ratio and water-binder ratio were used as input variables while concrete autogenous shrinkage was used as output variable; BPNN, SVM, RF, and XGBoost algorithms were used to establish the prediction model of concrete autogenous shrinkage, and the best prediction model was obtained by comparing the coefficient of determination (R^2), root means square error ($RMSE$) and mean absolute error (MAE); the SHAP method was used to explain the degree of contribution of the input variables to the output variables, the correlation and the mechanism of each input variable. The results show that the XGBoost algorithm can effectively predict the autogenous shrinkage of concrete compared with the remaining three algorithms, the mean values of R^2 , $RMSE$, and MAE are 0.956, 0.055, and 0.026, respectively; the aggregate-cement-ratio is the critical variable affecting the autogenous shrinkage of concrete, and variables such as aggregate-cement ratio, the content of highly absorbent resin have a negative correlation with autogenous shrinkage of concrete while time and silica fume content have a positive correlation. The SHAP method can effectively solve the black box problem of the machine learning model and improve the interpretability of the model.

Key words: concrete; autogenous shrinkage; machine learning; SHAP; prediction

混凝土因其成本低、强度高等特点,现已广泛应用于各类建筑工程。在混凝土浇筑早期时,混凝土的抗拉强度较低,其自生收缩可能引起构件的提前开裂,进而影响构件的耐久性^[1]。目前,研究者主要采用试验方法对混凝土自生收缩进行研究^[2-5]。丁文胜等^[6]采用线性回归模型对混凝土自生收缩进行预测,而混凝土的自生收缩受龄期、水灰比等多因素影响,使得采用线性回归模型得到的预测结果精确度较低。近年来,机器学习在预测混凝土性能方面展现了良好的优越性。H. Naderpour 等^[7]采用 ANN 算法对再生骨料混凝土的抗压强度进行了预测,所选网络的训练集、验证集和测试集的回归值 R 分别为 0.903, 0.890 和 0.829,模型的平均绝对误差为 4.45×10^{-3} 。黄炜等^[8]采用 PSO 算法和 GA 算法优化 BP 神经网络,并针对再生砖骨料混凝土的抗压强度进行预测,发现两种模型可以有效预测再生砖混骨料混凝土的抗压强度。李地红等^[9]采用 BP 神经网络进行混凝土综合性能预测,得到的结果较为精确,与试验值相比,误差在 15% 以内。L. Bal 等^[10]采用 ANN 算法针对混凝土的干燥收缩进行预测并与 ACI209、CEB 等模型进行了

对比分析,得出 ANN 算法得到的预测结果更为精确。J. Zhu 等^[11]采用 CNN 算法对混凝土的收缩徐变进行预测,发现采用 CNN 算法的预测结果优于 B4 模型,预测误差小于 15%。

然而机器学习算法虽然可以得到精确的预测结果,但是无法有效分析变量之间的相互作用,从而降低了机器学习模型的可解释性与可靠性^[12-13]。S. M. Lundberg 等^[14]提出了可解释机器学习算法的方法 (SHAP 法),该方法通过计算 *Shapley* 值,量化各输入变量对输出结果的影响,同时可以解释各变量之间的相互影响。因此,SHAP 法可以有效针对机器学习模型进行解释与分析,现已初步应用于混凝土结构性能的预测与解释。冯德成等^[15]采用 SHAP 法对钢筋混凝土矮墙的受剪承载力进行了解释,发现矮墙的墙高与其承载力呈负相关。V. Q. Tran 等^[16]采用 GB 算法和 SHAP 法对混凝土中氯离子扩散系数进行预测和解释,发现水灰比和骨料掺量是影响混凝土氯离子扩散系数的关键变量。

目前,学者们对采用机器学习算法预测混凝土收缩进行了初步研究^[10],但均未考虑

预测算法的可解释性,不能有效揭示各输入变量对输出变量的贡献及变量之间的相互作用。基于此,笔者为了建立最适用于混凝土自生收缩预测的机器学习模型,增强机器学习算法的可解释性,利用收集到的混凝土自生收缩数据,采用4种机器学习算法(BPNN、SVM、RF、XGBoost)对混凝土自生收缩进行预测;采用判定系数 R^2 、均方根误差RMSE等指标对预测结果进行评估,确定最适用于混凝土自生收缩的预测模型;并在此基础上,采用SHAP法分析水灰比等14个输入变量对混凝土自生收缩的贡献,对比分析各输入变量之间的相互作用及相关程度。

1 试验数据库与分析

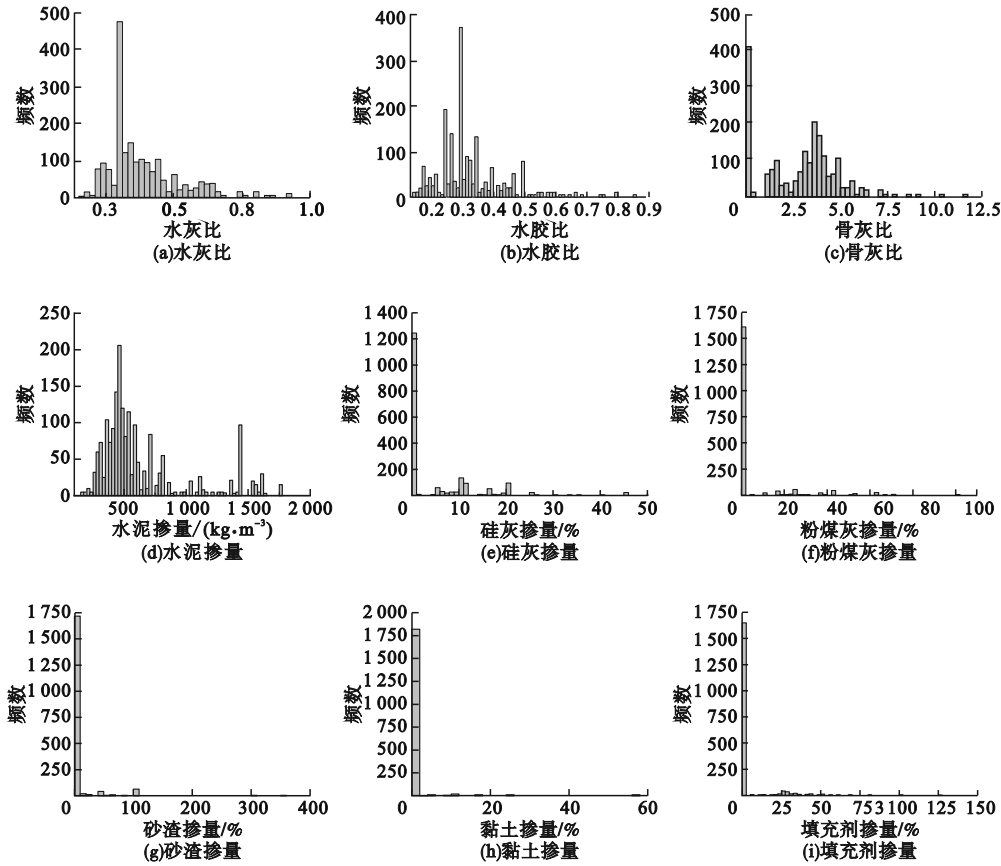
1.1 数据库的建立

笔者采用收集到的约1800组^[17-21]混

凝土自生收缩试验数据作为数据库,选取水灰比 w/c 、水胶比 w/b 、骨灰比 a/c 、水泥掺量 m_c 、硅灰掺量 a_{sf} 、粉煤灰掺量 a_{fa} 、矿渣掺量 a_s 、黏土掺量 a_m 、填充剂掺量 m_f 、塑化剂掺量 a_{sp} 、高吸水树脂掺量 a_{sap} 、高吸水树脂粒径 m_{ss} 、高吸水树脂(Super Absorbent Polymer, SAP)吸水率 ω_{sw} (SAP吸水质量与SAP质量之比,%)及时间 t 等14个参数作为输入变量,混凝土自生收缩值 $\varepsilon_{sh}(t, t_0)$ 作为输出变量。

1.2 数据的特征值

各变量的频数分布直方图如图1所示,可以发现,水灰比 w/c 与水胶比 w/b 等变量的数据分布较为均匀,此时水灰比 w/c 与水胶比 w/b 的取值分别集中在0.30~0.05与0.25~0.40, t 的取值为1 d、2 d、7 d、14 d及28 d。



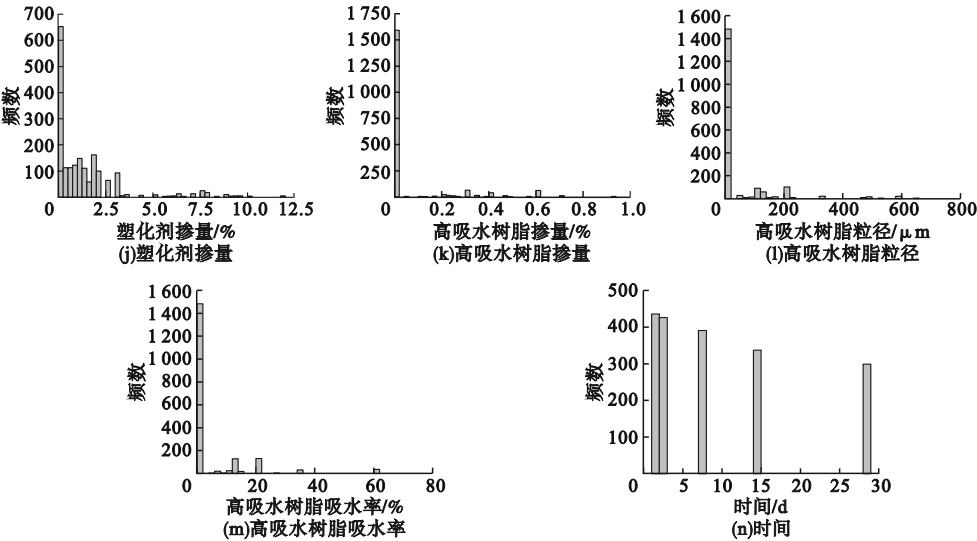


图1 不同参数的频数分布直方图

Fig.1 The histograms of frequency distributions for different parameters

1.3 数据的评价指标

采用判定系数 (R^2)、均方根误差 ($RMSE$)、平均绝对误差 (MAE) 对预测模型的性能进行评价。 $RMSE$ 为试验值与预测值差值的标准差,其数值越小说明模型的预测越精确; R^2 反映模型拟合程度,其数值越接近 1.0 说明模型的拟合程度越好; MAE 表示试验值和预测值的绝对误差平均值,其数值越小说明模型的性能越好,具体的计算方法如下:

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - y)^2}.$$
 (1)

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - y)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - y_{mean})^2}.$$
 (2)

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y - y_i|.$$
 (3)

式中: n 为样本个数; y_i 为试验值; y 为预测值; y_{mean} 为试验值的均值。

2 预测算法与参数选取

在进行机器学习时,常采用数据标准化处理以消除数据量纲对预测结果的影响。笔者采用偏差标准化方法对数据进行预处理,

将数据样本结果映射到 $[0,1]$ 的区间。传递函数为

$$x' = \frac{x - \min(x)}{\max(x) - \min(x)}.$$
 (4)

式中: x' 为归一化处理后的样本; $\min(x)$ 为样本中最小值; $\max(x)$ 为样本中最大值; x 为未归一化的样本。

2.1 BP神经网络算法

BP神经网络 (Back Propagation Neural Network, BPNN)^[22] 使用误差逆向传播算法训练,具有强大的映射能力,但存在计算收敛速度慢与易陷入局部最优的情况,故笔者采用遗传算法优化网络结构,避免其陷入局部最优。

2.2 支持向量机算法

支持向量机 (Support Vector Machine, SVM)^[23] 具有很强的非线性回归能力,该方法将样本的向量进行非线性变换映射到高维空间中,通过使各类数据到达超平面的距离最大化,进行实现升维和非线性化。

2.3 随机森林算法

随机森林 (Random Forests, RF)^[24] 算法通过从原始的训练集 N 中随机抽取 n 个样本形成决策树,将上述步骤重复 m 次以得到

m 棵决策树,把每一个决策树的输出值进行平均以得到最终的回归结果。

2.4 极限梯度提升算法

极限梯度提升(eXtreme Gradient Boosting, XGBoost)^[25]算法基于迭代决策树,通过不断分裂决策树并拟合前一步的结果。最终,通过对生成的所有决策树的分数进行加权求和,得到对应的预测值。

2.5 参数选取

笔者将数据分为训练集、测试集及验证集三部分,按照 70%、15% 及 15% 的比例进行分配。

(1)BPNN

采用遗传算法(GA)优化 BPNN 的预测性能,比较使用不同数目的隐藏层所产生的 MSE 值,将最小 MSE 值所对应的隐藏层数目作为最佳参数,因此得到最佳的神经网络结构为 14-12-1。

(2)SVM

SVM 采用 RBF 核函数,采用 libsvm 工具箱对 SVM 的惩罚系数 c 和参数 g 进行寻优,得到最优的 c 和 g 分别为 0.35 和 4.0。

(3)RF

通过遍历确定最优树的个数及节点个数(见图 2),可以发现,当节点数取 5 且树的个数取 400 时,均方误差 MSE 最低,因此 RF 模型的最优树个数为 400 且最优节点数为 5。

(4)XGBoost

采用网格搜索法进行参数寻优,得到学

习率为 0.1,树最大深度为 5。

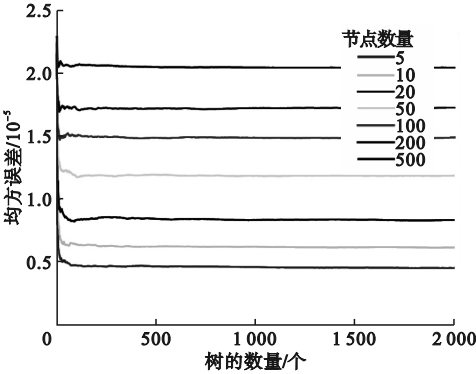
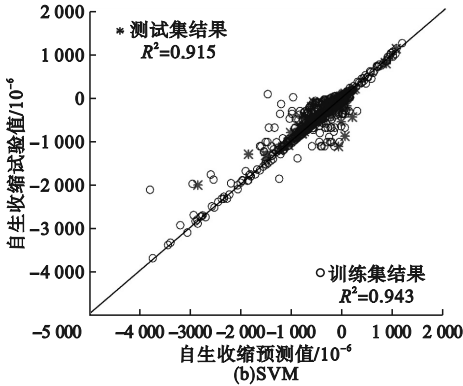
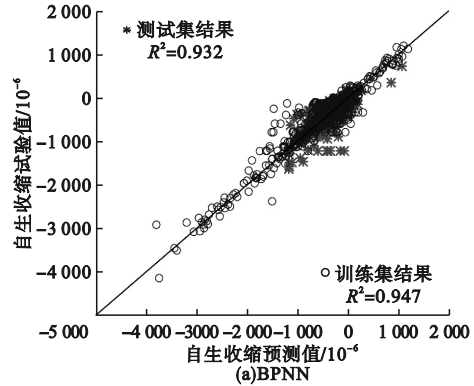


图 2 RF 模型中节点和树的数量对误差的影响

Fig. 2 The influence of nodes and trees on errors in the RF model

3 预测模型的验证

采用 BPNN、SVM、RF 及 XGBoost 模型对训练集与测试集进行拟合,结果见图 3。由图可知,采用 4 种模型均能较好的预测混凝土的自生收缩。通过对比上述 4 种模型得到的判定系数 R^2 、均方根误差 RMSE 及平均绝对误差 MAE(见表 1),得到最适用于混凝土自生收缩的预测模型。可以发现,相比其他 3 种模型,XGBoost 模型具有更好的泛化能力,采用 XGBoost 模型的 R^2 、RMSE 及 MAE 均值分别为 0.956、0.055 及 0.026。这是因为 XGBoost 模型支持对数据列进行抽样,能极大地降低过拟合的风险,同时能有效考虑数据缺失值对模型预测的影响,提高了计算效率。



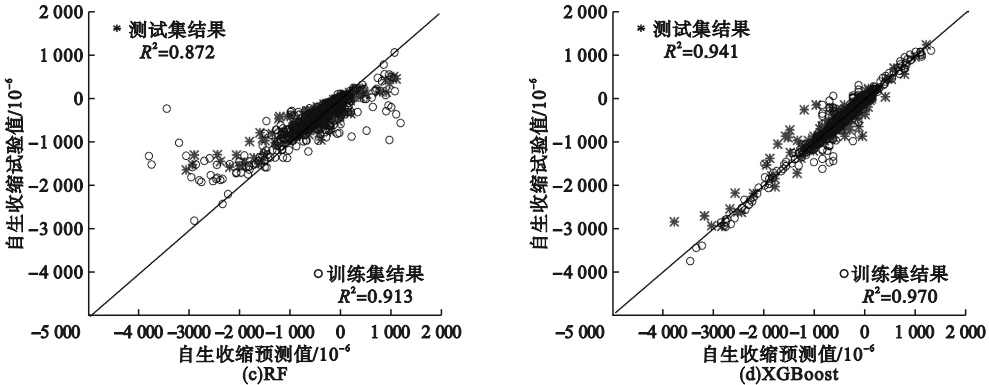


图3 自生收缩值的模型预测结果与试验结果对比情况

Fig. 3 Comparison of autogenous shrinkage between the prediction results and experimental results

表1 模型预测性能评估

Table 1 The performance evaluation of the prediction model

| 模型 | R ² | | RMSE | | MAE | |
|---------|----------------|-------|-------|-------|-------|-------|
| | 训练集 | 测试集 | 训练集 | 测试集 | 训练集 | 测试集 |
| BPNN | 0.947 | 0.932 | 0.035 | 0.170 | 0.034 | 0.148 |
| SVM | 0.943 | 0.915 | 0.068 | 0.079 | 0.020 | 0.032 |
| RF | 0.913 | 0.872 | 0.067 | 0.070 | 0.052 | 0.046 |
| XGBoost | 0.970 | 0.941 | 0.048 | 0.062 | 0.029 | 0.022 |

况如图4(a)所示。可以发现,骨灰比 a/c 是影响混凝土自生收缩的关键变量。高吸水树脂掺量 a_{sap} 、时间 t 为影响混凝土自生收缩的重要变量,其平均绝对 $Shapley$ 值约为 a/c 的85%;水胶比 w/b 、硅灰掺量 a_{sf} 及水泥掺量 m_c 为影响混凝土自生收缩的次要变量,这3种变量 $Shapley$ 值的平均绝对值约为 a/c 的40%;黏土掺量 a_m 对混凝土自生收缩的影响较小,其平均绝对 $SHAP$ 值仅0.6%。

每个输入变量的 $Shapley$ 值分布及其变化趋势对混凝土自生收缩的影响如图4(b)所示,其中横坐标表示 $Shapley$ 值,纵坐标表示输入变量的重要性排序。数据点从灰色变为黑色表示样本数据从小到大的变化趋势,可以发现, $SHAP$ 法可以很好地分析输入变量与输出变量的正负相关性。由图4(b)可

4 预测模型的解释

鉴于XGBoost模型在混凝土自生收缩预测方面表现良好,故采用SHAP法对采用XGBoost模型得到的预测结果进行解释。SHAP法对XGBoost预测模型的整体解释情

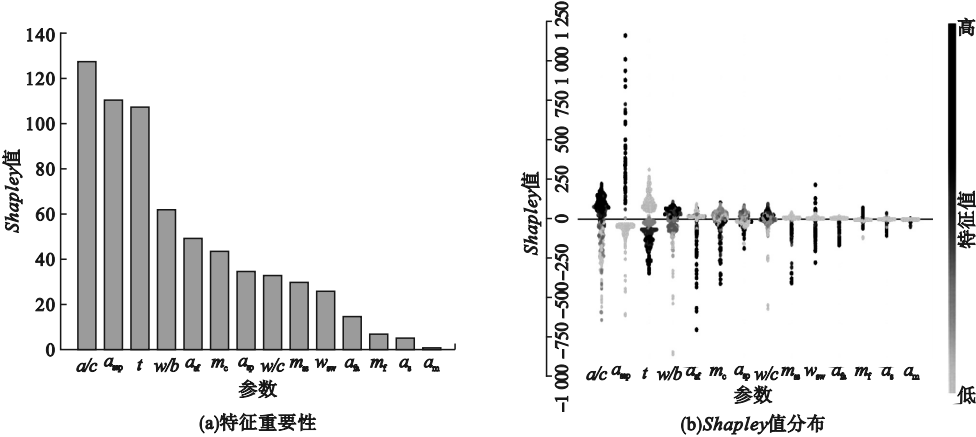


图4 参数对 shapley 值的影响

Fig. 4 Effects of parameters on Shapley value

知, *Shapley* 值随骨灰比 a/c 、高吸水树脂掺量 a_{sap} 取值的增加而增大, 这说明骨灰比 a/c 、高吸水树脂掺量 a_{sap} 等变量与混凝土自生收缩呈现负相关, 即混凝土自生收缩随骨灰比 a/c 、高吸水树脂掺量 a_{sap} 等指标取值的增大而减小; 而 *Shapley* 值随时间 t 、硅灰掺量 a_{sf} 取值的增加而减小, 这说明时间 t 、硅灰掺量 a_{sf} 等变量与混凝土自生收缩呈现正相关, 即混凝土自生收缩随该类变量的增加而增大。

对各输入变量之间的相互作用进行了分析, 如图 5 所示。可以发现, 水胶比 w/b 、水灰比 w/c 及高吸水树脂掺量 a_{sap} 的 *Shapley* 值

均随变量本身取值的增大而增大; 水泥掺量 m_c 与时间 t 的 *Shapley* 值均随变量本身取值的增大而减小; 而塑化剂掺量 a_{sp} 的 *Shapley* 值随变量本身取值的增大呈现先增后减的趋势。还可以发现, 当 w/b 小于 0.25、 w/c 小于 0.24 及 a_{sap} 小于 0.04 时, 混凝土自生收缩随水胶比 w/b 、水灰比 w/c 及高吸水树脂掺量 a_{sap} 增大而增大。

当输入变量取值相同时, SHAP 法还可以分析其他输入变量变化对 *Shapley* 值的影响。当 $w/c = 0.24$ 时, *Shapley* 值随水泥掺量 m_c 的增加而增大, $w/c = 0.8$ 时, *Shapley* 值随水泥掺量 m_c 的增加而减小。

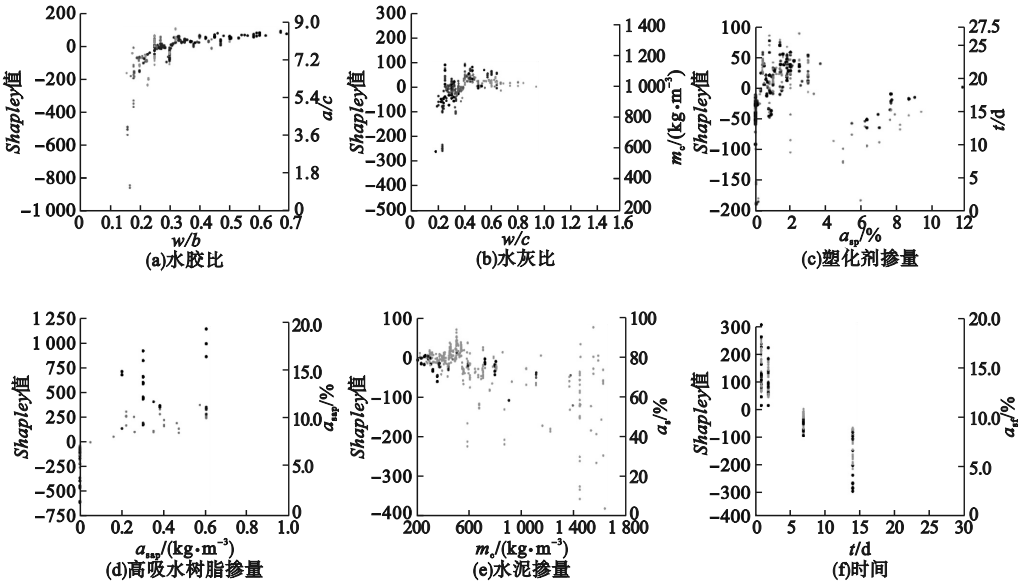


图 5 不同变量的相互作用
Fig. 5 Interactions between different variables

5 结 论

(1) XGBoost 模型可以有效预测混凝土自生收缩, 采用 XGBoost 模型得到的 R^2 、 $RMSE$ 及 MAE 均值分别为 0.956、0.055 及 0.026, 相较于其余 3 种预测模型而言, XGBoost 模型具有更好的泛化能力与自适应能力。

(2) 骨灰比 a/c 、水胶比 w/b 、高吸水树脂掺量 a_{sap} 等变量与混凝土自生收缩呈现正相关, 时间 t 、硅灰掺量 a_{sf} 及水灰比 w/c 等变量与混凝土自生收缩呈现负相关。

(3) SHAP 法可以有效解决机器学习模型存在的黑盒问题, 增强预测模型的可解释性, 能够确定各输入变量对输出变量的影响规律, 进而有效拓展机器学习在混凝土基本性能领域的应用。

参考文献

[1] 白卫峰, 沈鋈鑫, 管俊峰, 等. 基于统计损伤理论的混凝土应力-应变行为[J]. 建筑材料学报, 2021, 24(3): 551-561.
(BAI Weifeng, SHEN Junxin, GUAN Junfeng, et al. Stress-strain behavior of concrete based on statistical damage theory [J]. Journal of

- building materials, 2021, 24(3): 551 – 561.)
- [2] TANG S, HUANG D, HE Z. A review of autogenous shrinkage models of concrete [J]. Journal of building engineering, 2021, 44: 103412.
- [3] YANG W S, PARK B W, JUNG E H, et al. Iodide management in formamidinium-lead-halide-based perovskite layers for efficient solar cells [J]. Science, 2017, 356(6): 1376 – 1379.
- [4] 汤灿, 郑文忠. 一个新的多系数混凝土收缩模型 [J]. 建筑材料学报, 2016, 19(5): 826 – 831.
(TANG Can, ZHENG Wenzhong. A new multi-coefficient shrinkage model of concrete [J]. Journal of building materials, 2016, 19(5): 826 – 831.)
- [5] 肖建庄, 许向东. 再生混凝土收缩徐变试验及徐变神经网络预测 [J]. 建筑材料学报, 2013, 16(5): 752 – 757.
(XIAO Jianzhuang, XU Xiangdong. Shrinkage and creep of recycled aggregate concrete and their prediction by ANN method [J]. Journal of building materials, 2013, 16(5): 752 – 757.)
- [6] 丁文胜, 吕志涛, 孟少平, 等. 混凝土收缩徐变预测模型的分析比较 [J]. 桥梁建设, 2004, 33(6): 13 – 16.
(DING Wensheng, Lü Zhitao, MENG Shaoping, et al. Analysis and comparison of concrete shrinkage and creep prediction models [J]. Bridge construction, 2004, 33(6): 13 – 16.)
- [7] NADERPOUR H, RAFIEAN A H, FAKHARIAN P. Compressive strength prediction of environmentally friendly concrete using artificial neural networks [J]. Journal of building engineering, 2018, 16(5): 213 – 219.
- [8] 黄炜, 周焱, 葛培, 等. 基于 PSO-BP 和 GA-BP 神经网络再生骨料混凝土强度模型的对比研究 [J]. 材料导报, 2021, 35(15): 15026 – 15030.
(HUANG Wei, ZHOU Lang, GE Pei, et al. A comparative study on strength models of recycled brick aggregate concrete based on PSO-BP and GA-BP neural networks [J]. Materials reports, 2021, 35(15): 15026 – 15030.)
- [9] 李地红, 高群, 夏娟, 等. 基于 BP 神经网络的混凝土综合性能预测 [J]. 材料导报, 2019, 33(增刊 2): 317 – 320.
(LI Dihong, GAO Qun, XIA Xian, et al. Prediction of comprehensive performance of concrete based on BP neural network [J]. Materials reports, 2019, 33(S2): 317 – 320.)
- [10] BAL L, BUYLE-BODIN F. Artificial neural network for predicting drying shrinkage of concrete [J]. Construction and building materials, 2013, 38(1): 248 – 254.
- [11] ZHU J, WANG Y. Convolutional neural networks for predicting creep and shrinkage of concrete [J]. Construction and building materials, 2021, 306: 124868.
- [12] 张润, 王永滨. 机器学习及其算法和发展研究 [J]. 中国传媒大学学报(自然科学版), 2016, 23(2): 11 – 17.
(ZHANG Run, WANG Yongbin. Research on machine learning with algorithm and development [J]. Journal of communication university of China(science and technology), 2016, 23(2): 11 – 17.)
- [13] 全文君. 数据挖掘过程中的可解释性问题的研究 [D]. 重庆: 重庆大学, 2018.
(QUAN Wenjun. Study on interpretability in data mining [D]. Chongqing: Chongqing University, 2018.)
- [14] LUNDBERG S M, LEE S I. A unified approach to interpreting model predictions [C]// Proceedings of the 31st international conference on neural information processing systems. [s. l.]: [s. n.], 2017: 4768 – 4777.
- [15] 冯德成, 吴刚. 混凝土结构基本性能的可解释机器学习建模方法 [J]. 建筑结构学报, 2022, 43(4): 228 – 238.
(FENG Decheng, WU Gang. Interpretable machine learning-based modeling approach for fundamental properties of concrete structures [J]. Journal of building structures, 2022, 43(4): 228 – 238.)
- [16] TRAN V Q. Machine learning approach for investigating chloride diffusion coefficient of concrete containing supplementary cementitious materials [J]. Construction and building materials, 2022, 328: 127103.
- [17] HUBLER M H, WENDNER R, BAZANT Z P. Comprehensive database for concrete creep and shrinkage; analysis and recommendations for testing and recording [J]. ACI materials journal, 2015, 112(4): 547 – 558.
- [18] AKKAYA Y, OUYANG C, SHAH S P. Effect of supplementary cementitious materials on shrinkage and crack development in concrete [J]. Cement and concrete composites, 2007, 29(2): 117 – 123.
- [19] HOLT E. Contribution of mixture design to chemical and autogenous shrinkage of concrete at early ages [J]. Cement and concrete research, 2005, 35(3): 464 – 472.
- [20] ZHANG M H, TAM C T, LEOW M P. Effect of water-to-cementitious materials ratio and silica fume on the autogenous shrinkage of concrete [J]. Cement and concrete research, 2003, 33(10): 1687 – 1694.
- [21] LEE K M, LEE H K, LEE S H, et al. Autogenous shrinkage of concrete containing granulated blast-furnace slag [J]. Cement and concrete research, 2006, 36(7): 1279 – 1285.
- [22] TIPU R K, PANCHAL V R, PANDYA K S. An ensemble approach to improve BPNN model precision for predicting compressive strength of high-performance concrete [J]. Structures, 2022, 45(11): 500 – 508.
- [23] KESHTEGAR B, BAGHERI M, YASEEN Z M. Shear strength of steel fiber-unconfined reinforced concrete beam simulation; application of novel intelligent model [J]. Composite structures, 2019, 212(5): 230 – 242.
- [24] CHEN H, DENG T, DU T, et al. An RF and LSSVM-NSGA-II method for the multi-objective optimization of high-performance concrete durability [J]. Cement and concrete composites, 2022, 129(5): 104446.
- [25] LUAT N V, HAN S W, LEE K. Genetic algorithm hybridized with extreme gradient boosting to predict axial compressive capacity of CCFST columns [J]. Composite structures, 2021, 278: 114733.
(责任编辑: 刘春光 英文审校: 范丽婷)