

Научная статья

УДК 691.32; 004.85

<https://doi.org/10.15828/2075-8545-2023-15-2-171-186>

CC BY 4.0

Прогнозирование прочности при сжатии и проектирование составов конструкционных легких бетонов с применением методов машинного обучения

Артемий Сергеевич Балыков* , Елена Александровна Каледина , Сергей Валерьевич Володин 

Национальный исследовательский Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарёва, Саранск, Россия

* Автор, ответственный за переписку: e-mail: artbalrun@yandex.ru

АННОТАЦИЯ: Введение. Снижение плотности, повышение прочности и других физико-технических характеристик легких бетонов являются актуальными задачами современного строительного материаловедения. Для их решения необходимо рассмотреть новые подходы к разработке составов цементных систем с использованием эффективных пористых заполнителей, вяжущих веществ, химических и минеральных добавок, в том числе наномодификаторов различной природы (углеродные нанотрубки, фуллерены, наночастицы SiO_2 , Al_2O_3 , Fe_2O_3 и др.). Сложность проектирования модифицированных цементных бетонов во многом обусловлена их многокомпонентностью и большим количеством параметров, влияющих на ключевые характеристики материала. Качественное решение подобных многокритериальных задач возможно при комплексной реализации рациональных физических и вычислительных экспериментов с использованием математического моделирования и компьютерных технологий. С развитием методов машинного обучения появляются новые возможности в моделировании процессов структурообразования и прогнозировании свойств многокомпонентных строительных материалов. Целью данного исследования являлась разработка алгоритмов машинного обучения, способных эффективно устанавливать количественные зависимости прочности при сжатии модифицированных легких бетонов от их состава, а также выявление на основе полученных многофакторных моделей оптимальных диапазонов варьирования рецептурных параметров для достижения требуемого уровня контролируемой механической характеристики. **Методы и материалы.** Обработка и анализ результатов экспериментальных исследований проводились с применением современных методов машинного обучения с учителем, используемых в задачах восстановления регрессии, извлечения знаний и прогнозирования. Реализация разработанных алгоритмов осуществлялась на языке программирования Python с применением библиотек NumPy, Pandas, Scikit-learn, Matplotlib, Seaborn. **Результаты и обсуждение.** Установлено, что среди полученных моделей машинного обучения наиболее точной является модель градиентного бустинга, характеризующаяся следующими метриками качества: $R^2 = 0,9557$; $\text{MAE} = 2,4847$; $\text{MSE} = 12,7704$; $\text{RMSE} = 3,5736$; $\text{MAPE} = 11,1813\%$. По результатам анализа данной многофакторной модели выявлены оптимальные дозировки пуццоланового и расширяющего модификаторов, составляющие $4,5 \div 6,0$ и $6,0 \div 7,5\%$ от массы вяжущего (портландцемент + модификатор) соответственно, обеспечивающие достижение требуемого уровня прочности при сжатии ($40 \div 70$ МПа) легких бетонов в возрасте 28 суток при сниженной на $3 \div 10\%$ плотности материала (рассматриваемый диапазон $1200 \div 1900$ кг/м³). **Заключение.** Таким образом, итоги выполненных исследований показали перспективность применения методов машинного обучения для проектирования составов и прогнозирования свойств многокомпонентных цементных систем.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: легкий бетон, наномодификатор, комплексная добавка, наночастица, полая микросфера, прочность при сжатии, проектирование, прогнозирование, оптимизация, машинное обучение, алгоритм, модель, метрика качества.

БЛАГОДАРНОСТИ: исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 21-73-00228), <https://rscf.ru/project/21-73-00228/>.

ДЛЯ ЦИТИРОВАНИЯ: Балыков А.С., Каледина Е.А., Володин С.В. Прогнозирование прочности при сжатии и проектирование составов конструкционных легких бетонов с применением методов машинного обучения // Нанотехнологии в строительстве. 2023. Т. 15, № 2. С. 171–186. <https://doi.org/10.15828/2075-8545-2023-15-2-171-186>. – EDN: CCPGIF.

ВВЕДЕНИЕ

Актуальным направлением современного строительного материаловедения является разработка

физико-химических и технологических основ получения модифицированных цементных систем, характеризующихся комплексом высоких эксплуатационных характеристик [1–7]. Известно, что проявление

© Балыков А.С., Каледина Е.А., Володин С.В., 2023

свойств такого рода бетонов в процессе эксплуатации зависит от их состава, структуры и состояния [8].

В работе [9] приведены основные обобщенные принципы формирования структуры высокофункциональных цементных бетонов: обеспечение повышенной плотности на каждом из масштабных уровней строения материала (макро-, мезо-, микро-, нано-) наряду с максимально увеличенной площадью межкомпонентной поверхности раздела; повышение прочности структурных связей; достижение оптимальной однородности-неоднородности строения; оптимизация содержания структурных компонентов для обеспечения требуемого уровня эксплуатационных свойств материала (прочность, упругость, ударная вязкость, проницаемость, коррозионная стойкость и др.) при механическом нагружении и воздействии окружающей среды.

Одним из перспективных видов модифицированных цементных систем являются высокопрочные легкие бетоны, обладающие повышенными прочностными показателями при сниженной плотности материала. Мировой опыт показывает, что добиться высокой удельной прочности легких бетонов можно за счет использования специально подобранных пористых заполнителей, оптимизации компонентов вяжущего и каркасообразующей составляющей, а также путем применения наномодификаторов [10–14]. При этом среди пористых заполнителей свою эффективность в рецептуре конструкционных легких бетонов показали керамзит, полые стеклянные и алюмосиликатные микросферы, пористые породы вулканического происхождения, продукты переработки многотоннажных техногенных отходов металлургии и тепловой энергетики и др. [14–16].

Отдельно стоит остановиться на важности применения в составах высокофункциональных цементных систем различного рода модификаторов — химических и минеральных добавок, используемых индивидуально или объединяемых в комплексы согласно принципам аддитивности и синергизма. В частности, для рецептуры высокопрочных бетонов наибольшую эффективность имеют:

- пластифицирующие добавки, позволяющие значительно повысить технологические характеристики бетонных смесей и физико-механические показатели бетонов за счет способности оказывать водоредуцирующее и пластифицирующее действие на цементные системы [17–19];
- тонкодисперсные пуццолановые добавки природного и техногенного происхождения, характеризующие преимущественно силикатным и алюмосиликатным составом с повышенным содержанием аморфного кремнезема и глинозема, а также других реакционноспособных фаз: опал-кristобалитовые породы [20–22], метак-

олин и прокаленные полиминеральные глины [23–26], микрокремнезем [27, 28], зола уноса [29, 30], доменный шлак [30] и др.;

- расширяющие добавки сульфалюминатного типа [31–33], обладающие способностью управлять деформациями цементного камня путем стимуляции и интенсификации процессов образования кристаллогидратов с увеличенным объемом (этtringит и др.);
- перспективные наномодификаторы (углеродные нанотрубки, фуллерены, наночастицы SiO_2 , Al_2O_3 , Fe_2O_3 и др.), способствующие повышению упруго-прочностных характеристик цементного камня, снижению усадочных деформаций бетонов и их проницаемости для агрессивных сред за счет возможности управления структурно-энергетическим состоянием межфазных границ, направленного изменения качества твердой фазы и геометрии порового пространства [4, 34–36].

В настоящее время, несмотря на неослабевающий интерес к высокофункциональным бетонам, до сих пор не найдено относительно простых и универсальных методов проектирования составов и прогнозирования их свойств. Во многом это обусловлено многокомпонентностью модифицированных цементных систем, а также большим количеством параметров, влияющих на ключевые характеристики материала.

На данный момент одним из наиболее востребованных методов, используемых при оптимизации рецептурно-технологических параметров получения многокомпонентных строительных материалов, является экспериментально-статистическое моделирование [36–39]. Однако данный метод не только требует корректной формулировки относительно сложной многокритериальной задачи, но зачастую характеризуется невысокой точностью ЭС-моделей, получаемых в результате обработки небольших объемов данных при наличии в их отношении многочисленных допущений.

С развитием технологий искусственного интеллекта появляются новые возможности в проектировании многокомпонентных строительных материалов, в том числе и модифицированных цементных систем. Об этом свидетельствуют результаты исследований отдельных зарубежных авторов, касающиеся применения методов машинного обучения для прогнозирования свойств высокофункциональных бетонов [40–43]. Стоит отметить, что рост числа публикаций по рассматриваемой проблематике подтверждает интенсивное развитие данного научного направления.

Целью данного исследования являлась разработка алгоритмов машинного обучения, способных эффективно устанавливать количественные зависимости прочности при сжатии модифицированных легких

бетонов от их состава, а также выявление на основе полученных многофакторных моделей оптимальных диапазонов варьирования рецептурных параметров для достижения требуемого уровня контролируемой механической характеристики.

В процессе исследования были решены следующие задачи:

- 1) получен необходимый объем экспериментальных данных;
- 2) осуществлена постановка задачи машинного обучения по прецедентам;
- 3) выполнена предобработка экспериментальных данных и извлечение из них признаков;
- 4) осуществлен выбор типов многопараметрических моделей и разработаны алгоритмы машинного обучения для их получения;
- 5) проведена подготовка данных для обучения и оценки (обучающей и тестовой выборки), осуществлено обучение, а также решение проблем оптимизации и переобучения моделей;
- 6) выполнена оценка качества моделей машинного обучения;
- 7) на основе анализа наиболее эффективной модели проведена оптимизация содержания комплексных минеральных добавок (пуццоланового и расширяющего модификаторов) для достижения требуемого уровня прочности при сжатии легких бетонов в возрасте 28 суток.

МЕТОДЫ И МАТЕРИАЛЫ

Материалы

Для получения высокопрочных легких бетонов использовались следующие основные компоненты:

- портландцемент ЦЕМ I 42,5Б (ПЦ) производства ПАО «Мордовцемент»;
- песок кварцевый природный средний (КП) Хромцовского месторождения (Ивановская область) с модулем крупности $M_{кр} = 2,1$;
- микросферы полые стеклянные (ПСМ) марки ForeSphere 3000 российской компании ООО «Форэс» с преимущественным размером частиц $30 \div 160$ мкм, прочностью на гидростатическое сжатие не менее 20 атм (3000 psi), истинной и насыпной плотностью 0,53 и 0,3 г/см³ соответственно;
- суперпластификатор поликарбоксилатный (ПС) Melflux 5581 производства BASF Construction Additives;
- два вида комплексных минеральных добавок (МД) с распределением гранулометрического состава в микрометрическом и верхнем нанометрическом диапазонах:

1) кремниевый пуццолановый модификатор (КПМ) — двухкомпонентный порошкообразный

материал с удельной поверхностью $S_{уд} = 1,85$ м²/г, полученный путем помола смеси опал-кристобалитовых пород месторождений Республики Мордовия (диатомит + опока);

2) сульфоалюмосиликатный расширяющий модификатор (СРМ) — двухкомпонентный порошкообразный материал с удельной поверхностью $S_{уд} = 0,6$ м²/г, полученный путем помола и прокаливания смеси полиминеральной глинистой породы месторождения Республики Мордовия и полуводного формовочного гипса марки Г-6 Б III (ГОСТ 125-2018) производства ООО «Магма».

Методы

Обработка и анализ результатов экспериментальных исследований проводились с применением современных методов машинного обучения с учителем, используемых в задачах восстановления регрессии, извлечения знаний и прогнозирования. Реализация разработанных алгоритмов осуществлялась на языке программирования Python с применением библиотек NumPy, Pandas, Scikit-learn, Matplotlib, Seaborn.

Процесс решения задач машинного обучения включал следующие основные этапы: постановку задачи; предобработку экспериментальных данных и извлечение из них признаков; выбор типов многопараметрических моделей; подготовку данных для обучения и оценки (обучающей и тестовой выборки); обучение, решение проблем оптимизации и переобучения, оценку качества моделей; выбор наиболее эффективной модели; итоговое представление результатов работы.

Предварительная обработка данных

Для проверки данных на мультиколлинеарность в работе использовались матрица корреляции, а также коэффициент инфляции дисперсии (*variance inflation factor, VIF*), рассчитываемый по формуле:

$$VIF_j = \frac{1}{1 - R_j^2}, \quad (1)$$

где R_j^2 — коэффициент детерминации j -го атрибута.

При значении $VIF_j > 10$ считается, что j -й признак обладает мультиколлинеарностью.

С целью устранения мультиколлинеарности признаков применялся метод главных компонент (*principal component analysis, PCA*).

Ввиду того, что входные параметры характеризовались различными масштабами и диапазонами варьирования, на заключительном этапе предобработки данных выполнялась их нормализация. Для предотвращения дисбаланса между влиянием

входных переменных, а следовательно, исключения получения некорректных зависимостей, в работе использована следующая формула нормализации данных:

$$x_{norm} = \frac{x - x_{min}}{x_{max} - x_{min}}, \quad (2)$$

где x_{norm} и x — нормализованное и текущее значения каждой входной переменной;

x_{min} и x_{max} — минимальное и максимальное значения каждой входной переменной.

Используемые модели машинного обучения

В работе применялись следующие модели машинного обучения:

1. *Линейная регрессия (Linear regression)* — модель вида:

$$a(x) = \langle w, x \rangle. \quad (3)$$

Параметрами модели являются коэффициенты весов w , которые находятся посредством градиентных методов обучения.

2. *Automatic relevance determination (ARD regression)* — разновидность байесовской регрессии, в которой для каждого коэффициента выводится апостериорная оценка дисперсии. На следующем этапе коэффициенты, характеризующие низким значением дисперсии, обнуляются.

3. *Дерево решений (Decision tree) с поиском гиперпараметров* — непараметрический контролируемый алгоритм машинного обучения. Данная модель характеризуется способностью предсказывать значение целевой переменной на основе изучения простых правил принятия решений, выведенных из характеристик данных. Дерево решений может рассматриваться как кусочно-постоянное приближение. Функционал качества $Q(R_m, j, s)$ при этом имеет вид:

$$Q(R_m, j, s) = H(R_m) - \frac{|R_l|}{|R_m|} H(R_l) - \frac{|R_r|}{|R_m|} H(R_r), \quad (4)$$

где R_l и R_r — объекты, попадающие соответственно в левое и правое поддереву при заданном предикате;

R_m — множество объектов, попавших в вершину, разбиваемую на данном шаге;

j — номер входного параметра, по которому осуществляется разбиение в данном предикате;

s — порог классификатора, разделяющий множество R_m на правое и левое поддереву;

$H(R_l)$, $H(R_r)$ и $H(R_m)$ — критерии информативности, которые оценивают качество распределения целевой переменной среди объектов множеств R_l , R_r и R_m соответственно.

Для задач регрессии критерий информативности $H(R_m)$ выглядит следующим образом:

$$H(R_m) = \frac{1}{|R_m|} \sum_{(x_i, y_i) \in R_m} (y_i - \frac{1}{|R_m|} \sum_{(x_j, y_j) \in R_m} y_j)^2, \quad (5)$$

где y_i и x_i — значения соответственно выходного и входных параметров для i -го объекта выборки, принадлежащего множеству R_m ;

y_j и x_j — значения соответственно выходного и входных параметров для j -го объекта выборки, принадлежащего множеству R_m .

Для повышения качества рассматриваемой модели машинного обучения выполнялась настройка ее гиперпараметров, т.е. параметров, определяемых до начала процесса обучения. Поиск оптимального набора гиперпараметров проводился с использованием метода *GridSearch*.

4. *Бэггинг регрессор (Bagging regressor)* — ансамблевый алгоритм, подбирающий базовые регрессоры для каждого из случайных подмножеств исходного набора данных с последующим объединением и усреднением их индивидуальных прогнозов для получения итогового прогнозируемого результата.

5. *Случайный лес (Random forest)* — ансамбль независимых решающих деревьев, при обучении которых для каждого разбиения признаки выбираются из некоторого случайного подмножества признаков. Итоговый классификатор $a(x)$ для задачи регрессии представляет собой усредненное значение деревьев $b_i(x)$:

$$a(x) = \frac{1}{K} \sum_{i=1}^K b_i(x), \quad (6)$$

где K — общее количество решающих деревьев $b_i(x)$ в ансамбле, является подбираемым параметром.

6. *Градиентный бустинг (Gradient boosting)* — метод машинного обучения, который создает решающую модель прогнозирования $a_K(x)$ в виде ансамбля K базовых алгоритмов $b_1, \dots, b_K$:

$$a_K(x) = \sum_{i=1}^K \gamma_i b_i(x), \quad (7)$$

где K — общее количество базовых алгоритмов прогнозирования $b_i(x)$. В качестве базового алгоритма в данной модели были использованы деревья решений фиксированной длины.

γ_i — числовые коэффициенты при базовых алгоритмах $b_i(x)$, $i = \overline{1, K}$.

Использование данного метода позволяет строить модель поэтапно с возможностью оптимизации

произвольной дифференцируемой функции потерь. На этапе, когда получена композиция из $K-1$ алгоритма, следующий базовый алгоритм $b_K(x)$ формируется исходя из минимизации ошибки построения и приближения градиента функции потерь s_{iK} на обучающей выборке:

$$\sum_{i=1}^N L(y_i, a_{K-1}(x_i) + \gamma b_K(x_i)) \rightarrow \min_{b_K, \gamma_K} \quad (8)$$

$$b_K(x) = \arg \min_b \sum_{i=1}^N (b(x_i) - s_{iK})^2 \quad (9)$$

где L – выбранная функция потерь, чаще всего является квадратичной;

N – размер обучающей выборки;

y_i и x_i – текущие значения соответственно выходного и входных параметров для i -го объекта выборки;

$a_{K-1}(x)$ – регрессионная модель на шаге $K-1$.

После нахождения базового алгоритма $b_K(x)$ определяется коэффициент при нем γ_K :

$$\gamma_K = \arg \min_{\gamma \in R} \sum_{i=1}^N L(y_i, a_{K-1}(x_i) + \gamma b_K(x_i)). \quad (10)$$

7. Градиентный бустинг с поиском оптимальных гиперпараметров путем использования метода GridSearch.

Метрики качества моделей

Для оценки качества моделей машинного обучения в работе использован коэффициент детерминации R^2 . Данная метрика вычислялась по формуле:

$$R^2(y, \hat{y}) = 1 - \left(\sum_{i=1}^l (y_i - \hat{y}_i)^2 / \sum_{i=1}^l (y_i - \bar{y})^2 \right), \quad (11)$$

где y_i и $\hat{y}_i$ – соответственно фактические и прогнозируемые значения целевой переменной для i -го объекта тестовой выборки;

$\bar{y}$ – среднее из фактических значений;

l – общее число объектов тестовой выборки.

Для оценки отклонения предсказаний моделей от истинных значений использовались следующие метрики ошибок регрессии:

1. Средняя абсолютная ошибка (mean absolute error, MAE), вычисляемая по формуле:

$$MAE(y, \hat{y}) = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^l |y_i - \hat{y}_i|. \quad (12)$$

При использовании данной метрики ошибка модели рассчитывается как среднее абсолютных разностей между целевыми значениями и прогнозами. MAE является линейной оценкой, в которой различия для каждого объекта взвешены в среднем одинаково.

2. Средний квадрат ошибки (mean squared error, MSE). Для каждой точки вычисляется квадрат разницы между прогнозным и целевым значениями модели, а затем эти показатели усредняются. Расчетная формула данной метрики:

$$MSE(y, \hat{y}) = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^l (y_i - \hat{y}_i)^2. \quad (13)$$

3. Среднеквадратичная ошибка (root mean squared error, RMSE), представляющая собой квадратный корень из MSE:

$$RMSE(y, \hat{y}) = \sqrt{\frac{1}{l} \sum_{i=1}^l (y_i - \hat{y}_i)^2}. \quad (14)$$

4. Среднее процентное отклонение (mean absolute percentage error, MAPE), рассчитываемое по формуле:

$$MAPE(y, \hat{y}) = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^l \left| \frac{y_i - \hat{y}_i}{y_i} \right| \times 100\%, \quad (15)$$

где y_i и $\hat{y}_i$ и l в формулах (12), (13), (14) и (15) – то же, что и в формуле (11).

Показатель MAPE представляет собой относительную ошибку, рассчитываемую для анализируемого объекта из набора обучающих данных путем деления абсолютной ошибки на целевое значение. Таким образом, MAPE также можно рассматривать как взвешенную версию MAE. С помощью данной метрики возможно сравнивать эффективность моделей на разных обучающих выборках.

В условиях малого набора данных для более точного расчета метрик анализируемых моделей использовалась перекрестная проверка (cross validation, CV). В подходе, называемом k -fold CV, обучающая выборка разбивается на k частей и выполняется k итераций. На каждой итерации модель обучается на $k-1$ группе и тестируется на оставшейся части данных, не использованной в обучении. Показатель производительности $CV(a, X^L)$, сообщаемый k -кратной перекрестной проверкой, представляет собой среднее значение параметров, вычисленных в цикле:

$$CV(a, X^L) = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k Q(a(X^L \setminus X^{k_i}), X^{k_i}). \quad (16)$$

где $a(x)$ — модель машинного обучения;
 Q — метрика;
 X^L — вся обучающая выборка;
 X^{k_i} — часть обучающей выборки с номером k_i .

Дополнительные валидационные тесты

Помимо метрики качества R^2 и указанных выше метрик ошибок для дополнительного сравнения наиболее эффективных моделей использованы следующие тесты оценки их качества:

1. *Анализ REC-кривой модели.* Для сравнения регрессионных моделей между собой, а также с базовым прогнозом производилось построение REC-кривых, график которых показывает точность модели в зависимости от допустимого размера ошибки. Далее выполнялся расчет площади над кривой (AOC — Area Over Curve) для исследуемой модели (AOC_{model}) и базового прогноза ($AOC_{baseline}$) с последующей оценкой ее качества на основании отношения $AOC_{model}/AOC_{baseline}$.

Площадь над REC-кривой асимптотически равна математическому ожиданию ошибки, что позволяет использовать данную метрику для сопоставления моделей.

2. *Коэффициент корреляции Спирмена*, являющийся оценкой меры линейной связи между случайными величинами и вычисляемый по формуле:

$$\rho(y, \hat{y}) = \frac{cov(r_{g_y}, r_{g_{\hat{y}}})}{\sigma_{r_{g_y}} \sigma_{r_{g_{\hat{y}}}}}, \quad (17)$$

где $rg_y, rg_{\hat{y}}$ — ранги фактических и прогнозируемых значений;

$\sigma_{rg_y}, \sigma_{rg_{\hat{y}}}$ — дисперсии фактических и прогнозируемых значений.

Расчет данного коэффициента позволяет оценить степень согласованности прогнозируемых и фактических значений исследуемой величины.

3. *Построение кривой обучения (learning curve)*, являющейся графиком изменения скорости обучения модели. Данный тест дает возможность установить степень изначальной сложности обучения, позволяет определить уровень точности подгонки модели, ее переобучения, а также репрезентативность данных.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Описание анализируемого набора данных

Для построения моделей машинного обучения использовался набор экспериментальных данных, состоящий из 407 записей (точек). Входные данные представляли собой 8 варьируемых параметров: возраст легкого бетона (сут) и расход основных рецептурных компонентов (кг/м³): портландцемента (ПЦ), кремниевое пуццоланового (КПМ) и сульфоломо-силикатного расширяющего (СРМ) модификаторов, поликарбоксилатного суперпластификатора (ПС), природного кварцевого песка (КП), полых стеклянных микросфер (ПСМ) и воды (В). Исследуемой целевой переменной являлся показатель прочности при сжатии (МПа).

Таблица 1

Статистические характеристики датасета

Статистические показатели	Целевой параметр	Входные параметры							
		Воз- раст бето- на, сут	Расход рецептурных компонентов, кг/м³						
	Прочность при сжатии, МПа		ПЦ	КПМ	СРМ	ПС	КП	ПСМ	В
число точек	407,00								
среднее	45,41	21,64	675,85	26,56	31,17	7,33	420,58	163,12	285,08
станд. отклон.	16,40	10,71	44,91	38,27	41,57	0,19	261,78	45,62	19,05
минимум	3,70	1,00	595,00	0,00	0,00	7,00	56,00	97,60	255,20
25%	37,85	7,00	641,20	0,00	0,00	7,20	194,45	124,40	266,60
50%	47,80	28,00	675,90	0,00	0,00	7,30	410,80	165,00	285,90
75%	57,50	28,00	711,80	54,80	57,20	7,50	638,60	203,20	302,60
максимум	72,10	28,00	764,10	112,60	114,00	7,60	794,70	227,80	313,20

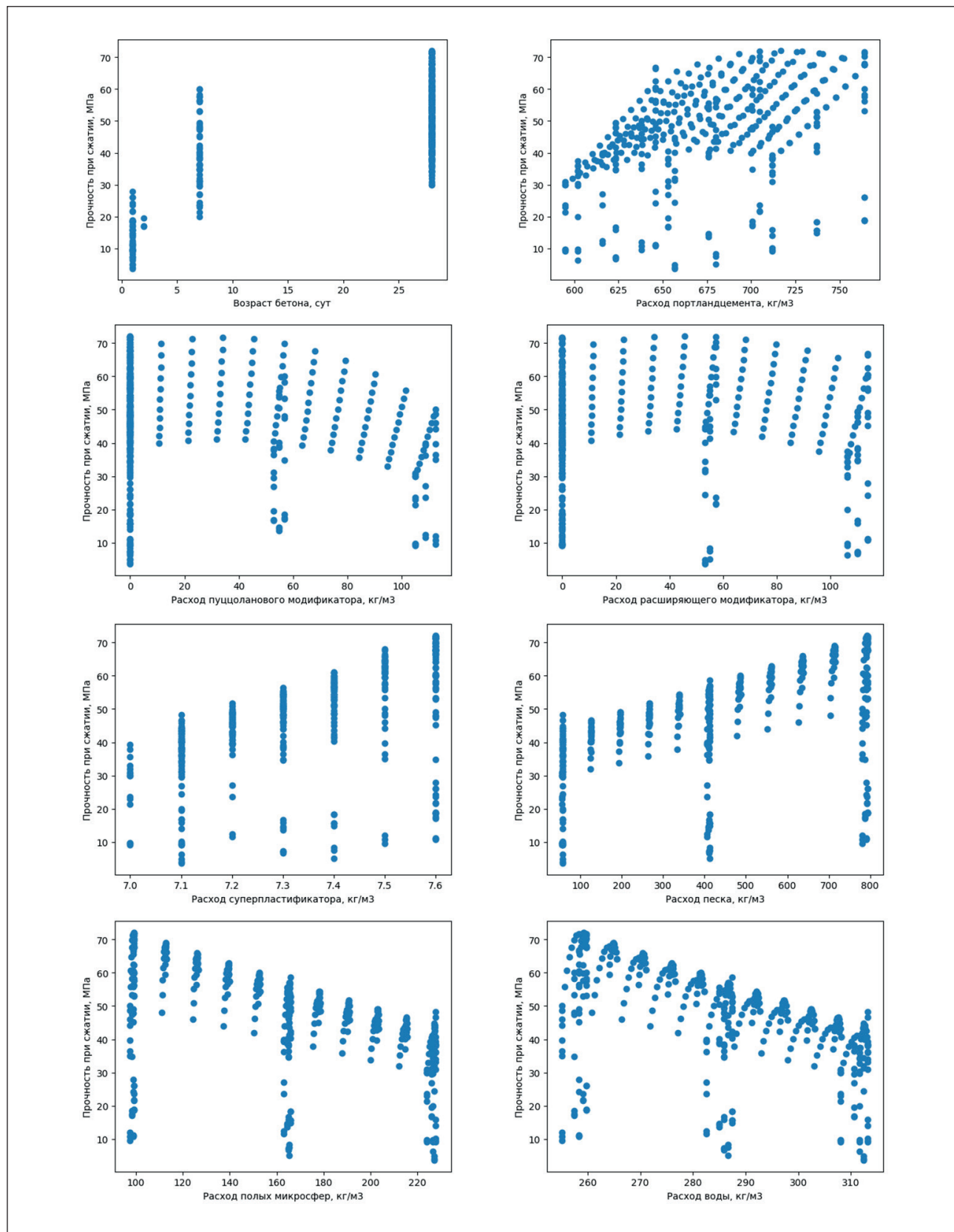


Рис. 1. Графики попарных зависимостей целевого показателя «Прочность легкого бетона при сжатии» от отдельных входных параметров (расхода рецептурных компонентов и возраста материала)

В табл. 1 показаны статистические характеристики исследуемых экспериментальных данных. Анализ значений целевого и входных параметров показал, что ни одна из переменных не имеет выбросов.

На рис. 1 представлены графики попарных зависимостей прочности легкого бетона при сжатии от расхода рецептурных компонентов и возраста материала. По результатам исследования установлено, что между целевым показателем и каждым входным параметром отсутствует линейная корреляция, что свидетельствует о наличии сложных нелинейных взаимосвязей в бинарных системах «Прочность при сжатии – расход рецептурного компонента / возраст бетона».

На следующем этапе выполнена проверка входных параметров на коллинеарность путем использования результатов корреляционного анализа данных и вычисления коэффициента инфляции дисперсии

(variance inflation factor, VIF). Корреляционная матрица в виде так называемой «тепловой карты» представлена на рис. 2.

Матрица корреляций показывает линейную связь между параметрами «Суперпластификатор», «Песок», «Микросферы» и «Вода». В свою очередь, результаты вычисления VIF указывают на наличие мультиколлинеарности в указанных входных показателях, что может снизить эффективность работы разработанных алгоритмов машинного обучения. С целью преодоления мультиколлинеарности при предварительной обработке данных в исследовании был использован метод главных компонент.

Обучение моделей

Обучающий набор данных был разделен на тренировочную и тестовую выборки в соотношении

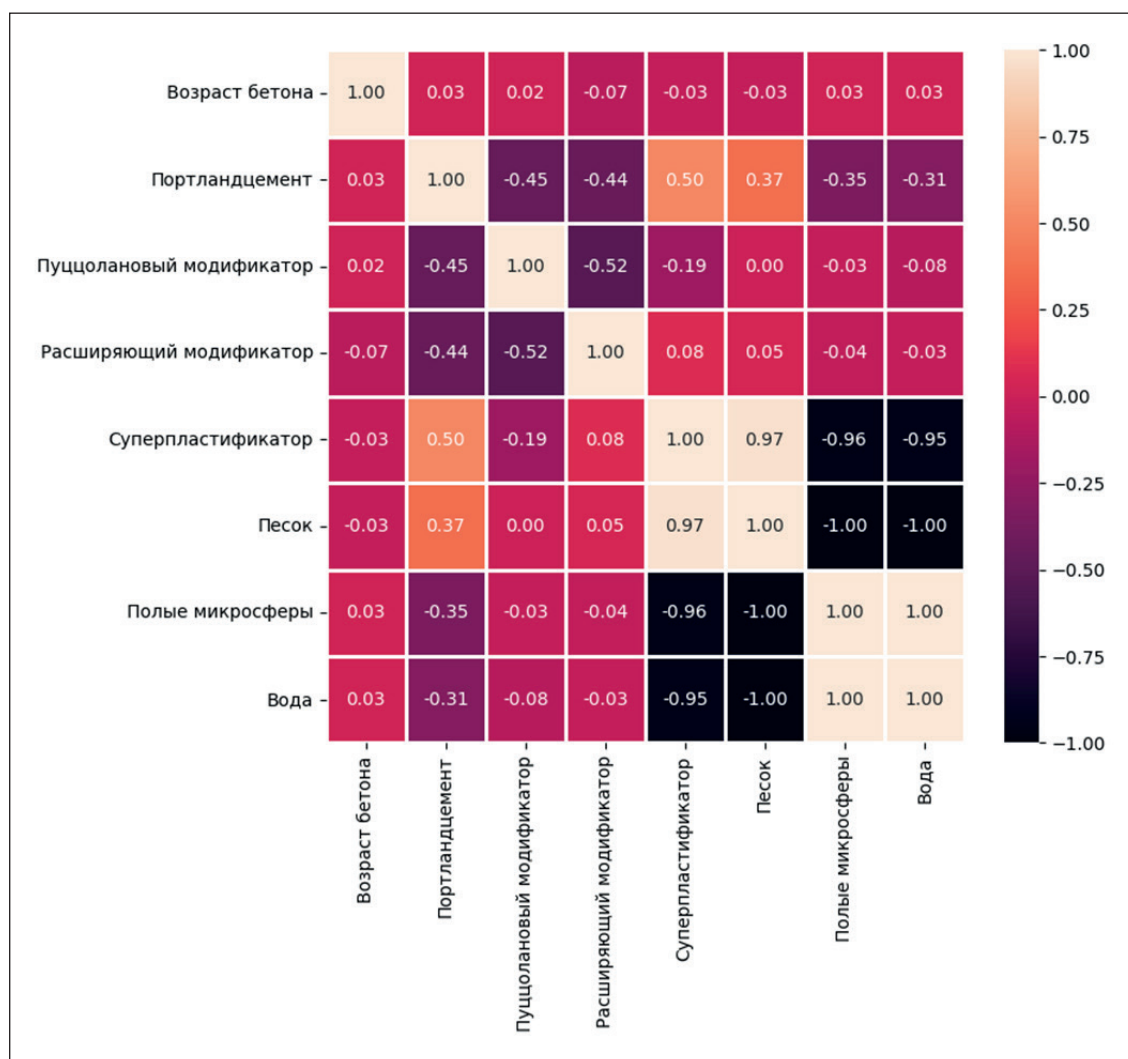


Рис. 2. Корреляционная матрица входных параметров

65/35 (для обучения моделей было использовано 265 объектов (точек данных), для тестирования — 142).

На рис. 3, 4 и 5 представлены изменения фактических значений исследуемого выходного параметра по всему набору экспериментальных данных в сравнении с прогнозируемыми значениями, предсказанными каждым разработанным алгоритмом машинного обучения. Установлено, что модели «Линейная регрессия», «ARD», «Бэггинг регрессор» и «Случайный лес» склонны к некоторому завышению значений прочности легкого бетона при сжатии.

В табл. 2 приведены метрики качества разработанных моделей машинного обучения (значения коэффициента детерминации R^2 и ошибок регрессии MAE, MSE, RMSE, MAPE).

Установлено, что наибольшие значения коэффициента детерминации имеют следующие модели машинного обучения: градиентный бустинг ($R^2 = 0,9557$), градиентный бустинг с поиском оптимальных гиперпараметров по сетке ($R^2 = 0,9465$), бэггинг регрессор ($R^2 = 0,9411$) и случайный лес ($R^2 = 0,9401$). Остальные алгоритмы, несмотря на достаточно высокие значения анализируемого параметра качества моделей, показали сниженную эффективность, особенно на тестовых данных. В частности, стоит отметить значительное отклонение тестовых и тренировочных данных от модельной прямой для линейной регрессии и ARD (рис. 6 а, б, в, г).

Кроме этого, по результатам анализа графиков обучения можно сделать вывод о переобученности полученной модели дерева решений. Подтверждением этому служит скученность тренировочных данных вокруг модельной прямой при минимальном количестве выбросов (рис. 6 д), а также заметное снижение коэффициента детерминации в результате обработки алгоритмом тестовых данных (рис. 6 е).

Стоит отметить, что согласно табл. 2 наименьшие значения ошибок регрессии имеют модели «Градиентный бустинг» и «Градиентный бустинг с поиском оптимальных гиперпараметров»: MAE = $2,4847 \div 2,4917$; MSE = $12,7704 \div 15,4094$; RMSE = $3,5736 \div 3,9255$; MAPE = $11,1813 \div 11,6773\%$. При этом среди разработанных моделей машинного обучения наиболее точной является модель градиентного бустинга, характеризующаяся следующими параметрами: функция потерь Хьюбера, максимальная глубина дерева — 10, минимальное количество выборок, необходимое для конечного узла — 6, минимальное количество выборок, требуемое для разделения внутреннего узла — 10, количество деревьев — 1100. На рис. 7 представлены результаты оценки эффективности работы алгоритма градиентного бустинга на обучающей и тестовой частях экспериментальных данных.

Оптимизация содержания комплексных минеральных модификаторов в составах высокопрочных легких бетонов

На заключительном этапе на основе анализа разработанной многофакторной модели градиентного бустинга проведена оптимизация содержания комплексных минеральных добавок (кремниевое пуццоланового (КПМ) и сульфаталюмосиликатного расширяющего (СРМ) модификаторов) для достижения требуемого уровня исследуемой прочностной характеристики бетонов в возрасте 28 суток. С целью эффективного решения поставленной задачи были построены графики в виде изолиний изменения прочности при сжатии легких бетонов в зависимости от содержания полых стеклянных микросфер, дозировок пуццолановой и расширяющей добавок (рис. 8).

По результатам анализа полученных графических зависимостей установлено, что оптимальная дозировка кремниевое пуццоланового и сульфаталюмосиликатного расширяющего модификаторов составляет $4,5 \div 6,0$ и $6,0 \div 7,5\%$ от массы вяжущего (портландцемент (ПЦ) + минеральная добавка (МД)) соответственно. Использование добавок КПМ и СРМ в указанных концентрациях обеспечивает достижение требуемого уровня прочностного показателя ($40 \div 70$ МПа) при сниженной на $3 \div 10\%$ плотности материала (рассматриваемый диапазон $1200 \div 1900$ кг/м³) за счет возможности повышения содержания микросфер (на $2 \div 4\%$ от массы вяжущего) без ущерба для механической характеристики. При этом согласно рис. 8 увеличение прочности при сжатии легких бетонов до уровня $70 \div 73$ МПа может быть достигнуто при дозировках полых микросфер, пуццоланового и расширяющего модификаторов $13; 2 \div 7$ и $2 \div 10\%$ от массы вяжущего (ПЦ + МД) соответственно.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенные научные исследования позволили разработать алгоритмы машинного обучения, способные эффективно устанавливать количественные зависимости прочности при сжатии модифицированных легких бетонов от их состава. По результатам анализа полученных многофакторных моделей выявлены оптимальные диапазоны варьирования дозировок пуццоланового и расширяющего модификаторов, обеспечивающие достижение требуемого уровня контролируемой механической характеристики при сниженной плотности материала.

Итоги выполненных исследований показали перспективность применения методов машинного обучения для проектирования составов и прогнозирования свойств многокомпонентных легких бетонов.

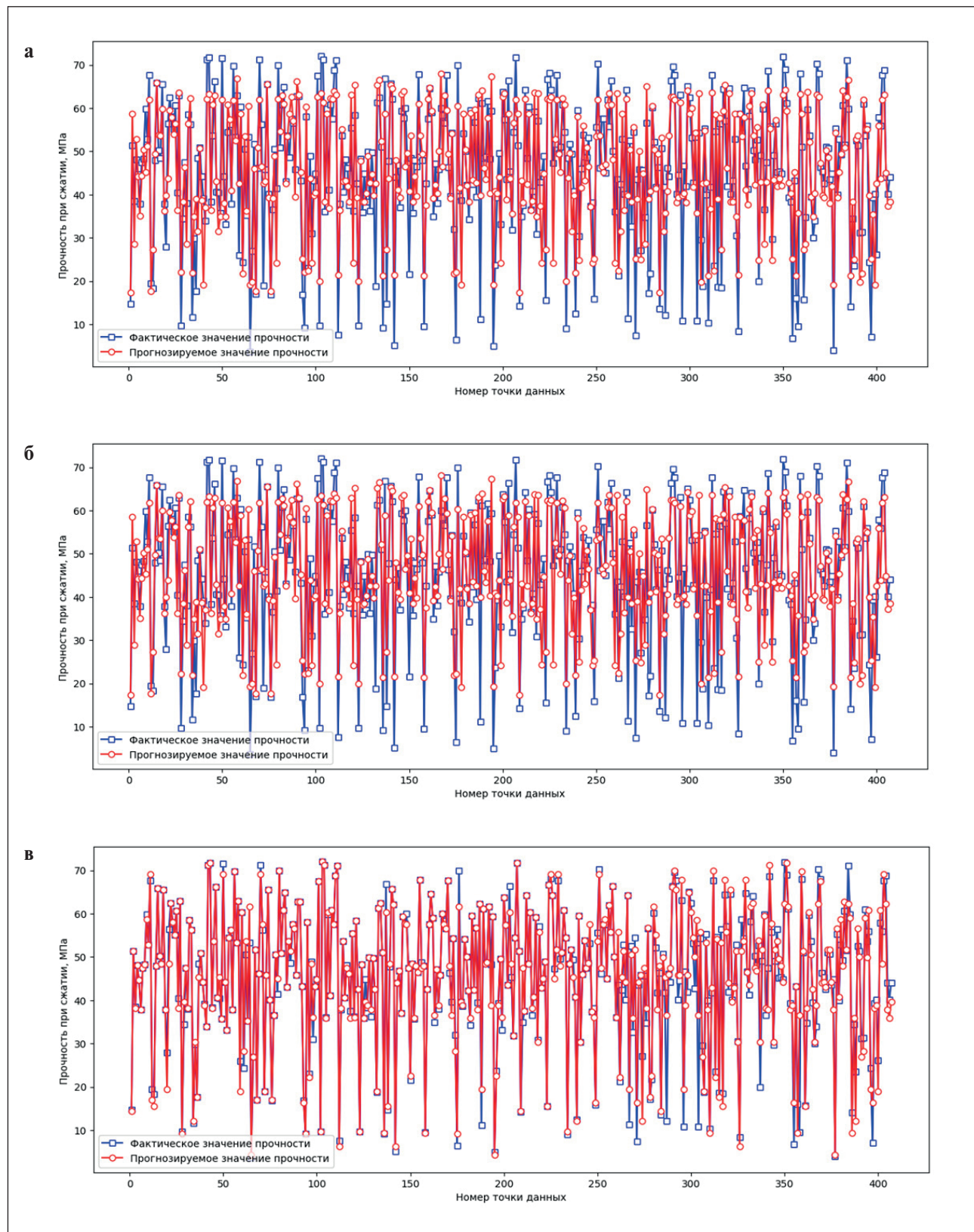


Рис. 3. Сравнение фактических и прогнозируемых значений прочности легкого бетона при сжатии на всем наборе данных при использовании следующих моделей машинного обучения: (а) линейная регрессия; (б) ARD; (в) дерево решений

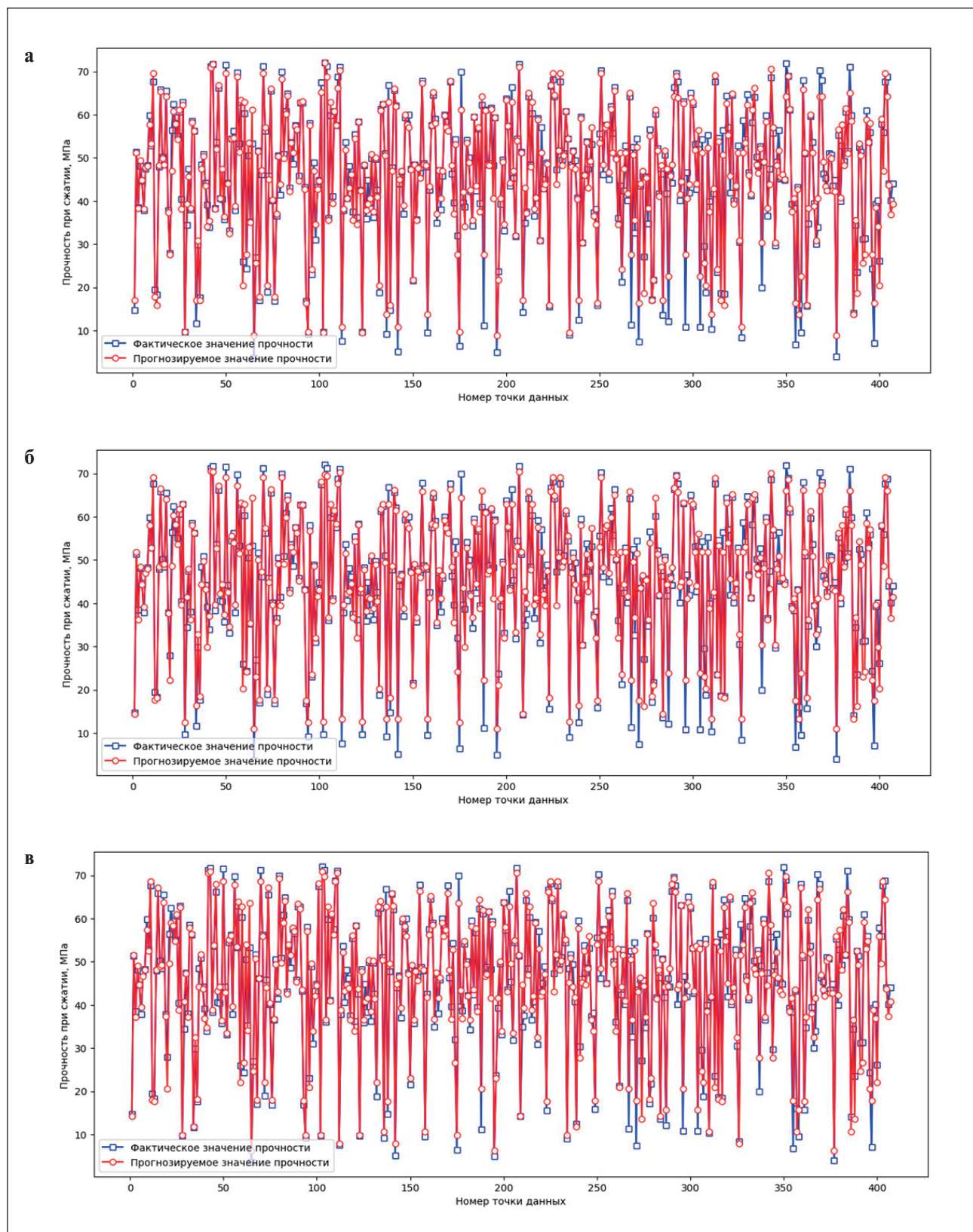


Рис. 4. Сравнение фактических и прогнозируемых значений прочности легкого бетона при сжатии на всем наборе данных при использовании следующих моделей машинного обучения: (а) бэггинг регрессор; (б) случайный лес; (в) градиентный бустинг

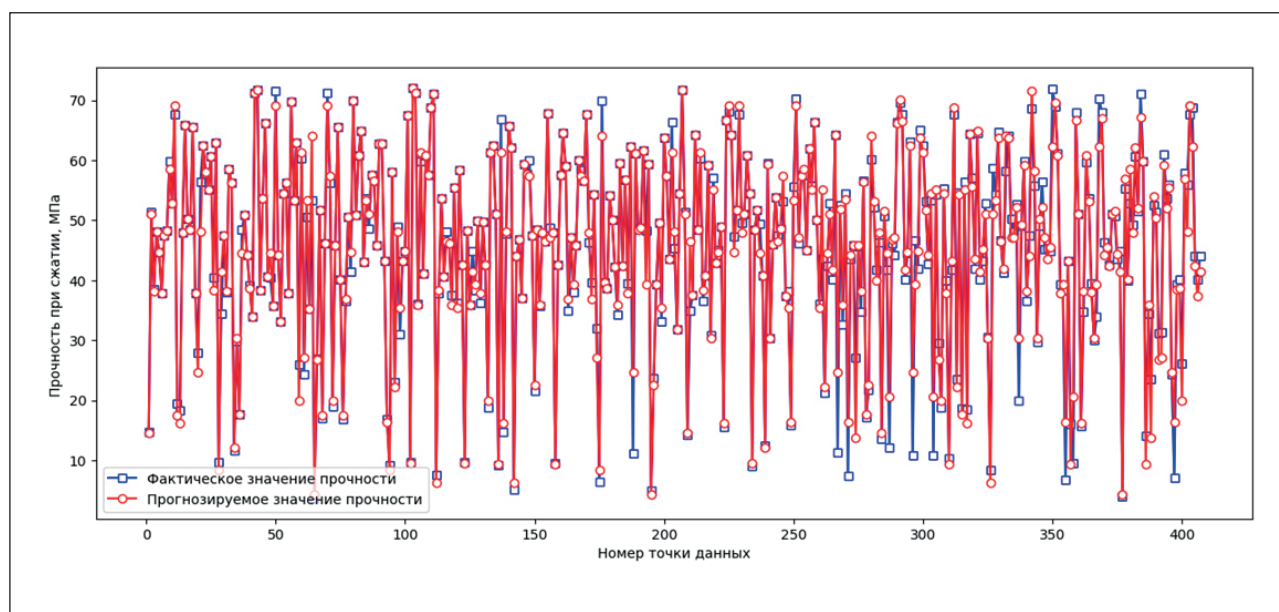


Рис. 5. Сравнение фактических и прогнозируемых значений прочности легкого бетона при сжатии на всем наборе данных при использовании модели машинного обучения «Градиентный бустинг с поиском оптимальных гиперпараметров»

Таблица 2

Метрики качества разработанных моделей машинного обучения (значения коэффициента детерминации и ошибок регрессии)

Модели машинного обучения	Метрики качества моделей				
	R^2	MAE	MSE	$RMSE$	$MAPE$ (%)
Линейная регрессия	0,7374	6,0752	75,6671	8,6987	31,5038
ARD	0,7361	6,0861	76,0399	8,7201	31,6589
Дерево решений	0,8953	3,4091	30,1583	5,4917	15,5677
Бэггинг регрессор	0,9411	2,7292	16,9749	4,1201	13,3829
Случайный лес	0,9401	2,7790	17,2584	4,1543	14,0700
Градиентный бустинг	0,9557	2,4847	12,7704	3,5736	11,1813
Градиентный бустинг с поиском оптимальных гиперпараметров	0,9465	2,4917	15,4094	3,9255	11,6773

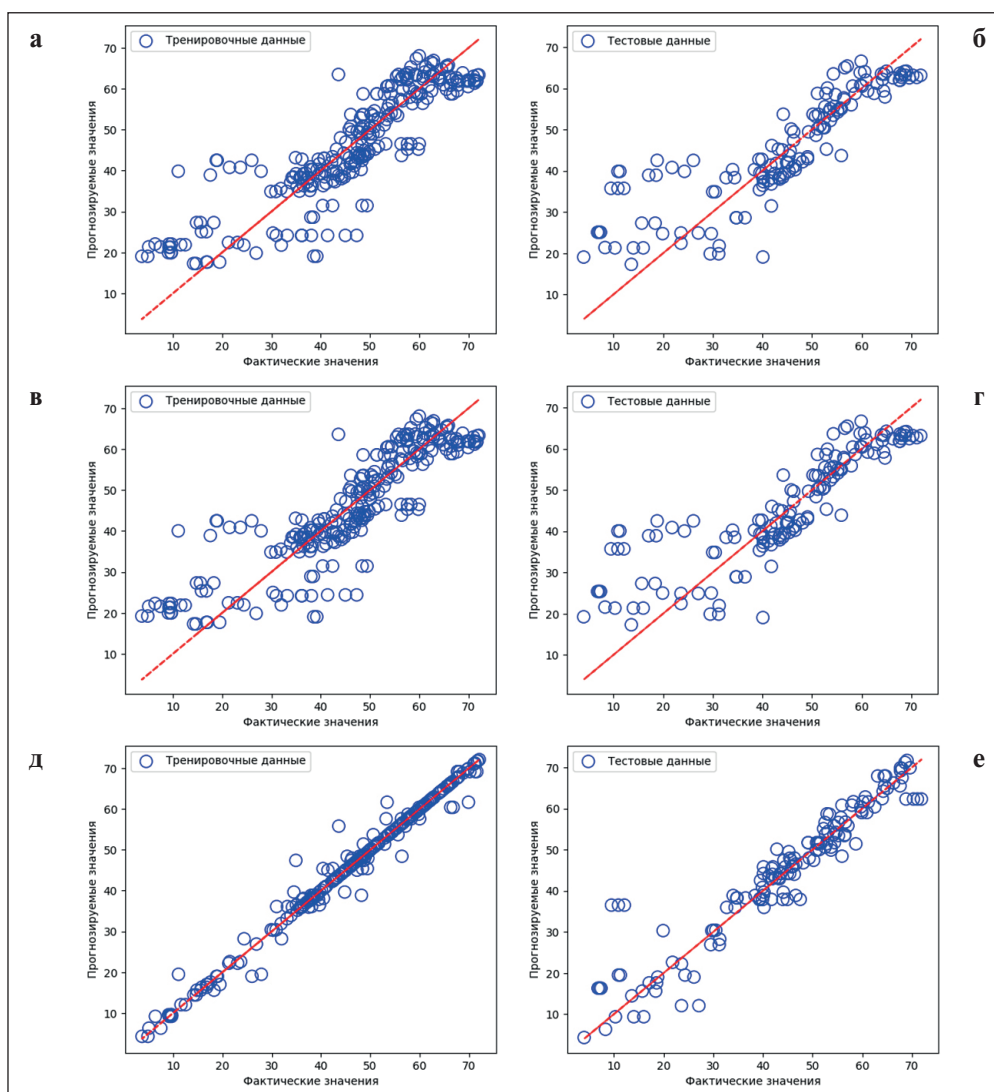


Рис. 6. Эффективность работы алгоритмов линейной регрессии (а, б), ARD (в, г) и дерева решений (д, е) на обучающей (а, в, д) и тестовой (б, г, е) частях экспериментальных данных (красной линией обозначена модельная прямая)

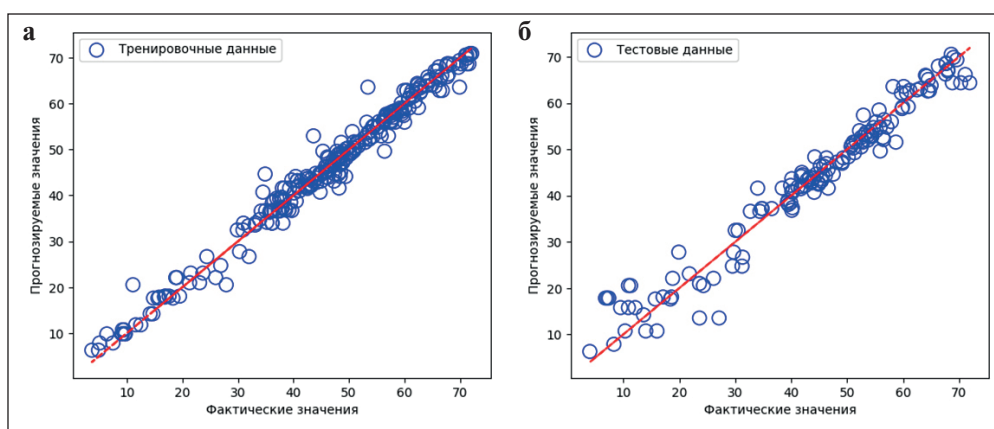


Рис. 7. Эффективность работы алгоритма градиентного бустинга на обучающей (а) и тестовой (б) частях экспериментальных данных (красной линией обозначена модельная прямая)

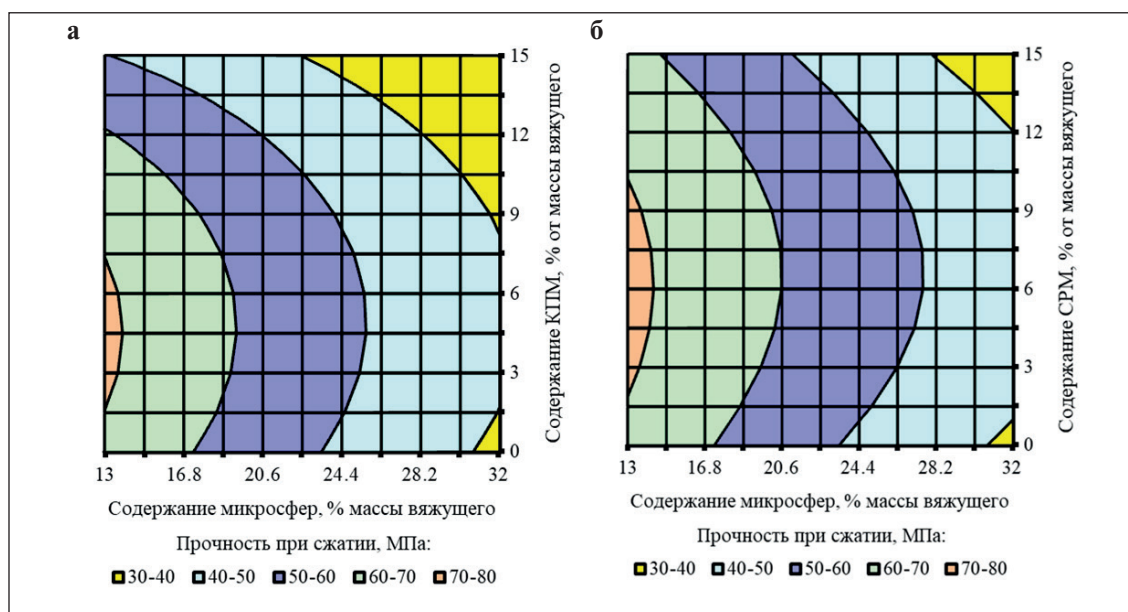


Рис. 8. Изолинии изменения прочности при сжатии легких бетонов в возрасте 28 суток в зависимости от содержания микросфер, дозировок пуццолановой (а) и расширяющей (б) добавок

СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

1. Tayeh B.A., Akeed M.H., Qaidi S., Bakar B.H.A. Ultra-high-performance concrete: Impacts of steel fibre shape and content on flowability, compressive strength and modulus of rupture. *Case Studies in Construction Materials*. 2022; 17: e01615. <https://doi.org/10.1016/j.cscm.2022.e01615>
2. O'Hegarty R., Kinnane O., Newell J., West R. High performance, low carbon concrete for building cladding applications. *Journal of Building Engineering*. 2021; 43: 102566. <https://doi.org/10.1016/j.jobbe.2021.102566>
3. Shin H.O., Yoo D.Y., Lee J.H., Lee S.H., Yoon Y.S. Optimized mix design for 180 MPa ultra-high-strength concrete. *Journal of Materials Research and Technology*. 2019; 8: 4182–4197. <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2019.07.027>
4. Nizina T.A., Balykov A.S., Korovkin D.I., Volodin V.V. Physical and mechanical properties of modified fine-grained fibre-reinforced concretes containing carbon nanostructures. *International Journal of Nanotechnology*. 2019; 16: 496–509. <https://doi.org/10.1504/IJNT.2019.106621>
5. Толстой А.Д., Лесовик В.С., Загороднюк Л.Х., Ковалева И.А. Порошковые бетоны с применением техногенного сырья // Вестник МГСУ. 2015. № 11. С. 101–109.
6. Каприелов С.С., Шейнфельд А.В., Кардумян Г.С., Чилин И.А. О подборе составов высококачественных бетонов с органоминеральными модификаторами // Строительные материалы. 2017. № 12. С. 58–63.
7. Калашников В.И. Эволюция развития составов и изменение прочности бетонов. Бетоны настоящего и будущего. Часть 1. Изменение составов и прочности бетонов // Строительные материалы. 2016. № 1-2. С. 96–103.
8. Чернышов Е.М., Макеев А.И. О проблеме управления рецептурно-технологическими факторами получения бетонов в задачах конструирования и синтеза оптимальных их структур // Академия. Архитектура и строительство. 2018. № 3. С. 135–143. <https://doi.org/10.22337/2077-9038-2018-3-135-143>
9. Баженов Ю.М., Чернышов Е.М., Коротких Д.Н. Конструирование структур современных бетонов: определяющие принципы и технологические платформы // Строительные материалы. 2014. № 3. С. 6–14.
10. Sifan M., Nagaratnam B., Thamboo J., Poologanathan K., Corradi M. Development and perspectives of lightweight high strength concrete using lightweight aggregates. *Construction and Building Materials*. 2023; 362: 129628. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2022.129628>
11. Zhou Y., Gong G., Huang Y., Chen C., Huang D., Chen Z., Guo M. Feasibility of incorporating recycled fine aggregate in high performance green lightweight engineered cementitious composites. *Journal of Cleaner Production*. 2021; 280: 124445. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2020.124445>

12. Wei H., Liu Y., Wu T., Liu X. Effect of Aggregate Size on Strength Characteristics of High Strength Lightweight Concrete. *Materials*. 2020; 13: 1314. <https://doi.org/10.3390/ma13061314>
13. Ye Y., Liu J., Zhang Z., Wang Z., Peng Q. Experimental study of high-strength steel fiber lightweight aggregate concrete on mechanical properties and toughness index. *Advances in Materials Science and Engineering*. 2020; 2020: 1–10. <https://doi.org/10.1155/2020/5915034>
14. Inozemtsev A.S., Korolev E.V., Smirnov V.A. Nanoscale modifier as an adhesive for hollow microspheres to increase the strength of high-strength lightweight concrete. *Structural Concrete*. 2017; 18: 67–74. <https://doi.org/10.1002/suco.201500048>
15. Ярмаковский В.Н. Полифункциональные легкие бетоны для ресурсоэнергосберегающего промышленного домостроения // Строительные материалы. 2012. № 4. С. 4–12.
16. Иноземцев А.С., Королёв Е.В. Сравнительный анализ влияния наномодифицирования и микродисперсного армирования на процесс и параметры разрушения высокопрочных легких бетонов // Строительные материалы. 2017. № 7. С. 11–15.
17. Kapeluszna E., Chrabaszcz K. Mutual compatibility of superplasticizers (PC, SNF), grinding aids (TEA, glycol) and C₃A in Portland cement systems – Hydration, rheology, physical properties and air void characteristics. *Construction and Building Materials*. 2023; 373: 130877. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2023.130877>
18. Lin X., Pang H., Wei D., Lu M., Liao B. Effect of superplasticizers with different anchor groups on the properties of cementitious systems. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*. 2021; 630: 127207. <https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2021.127207>
19. Smirnova O.M. 2016 Compatibility of portland cement and polycarboxylate-based superplasticizers in high-strength concrete for precast constructions *Magazine of Civil Engineering*. 2016; 6: 12–22. <https://doi.org/10.5862/MCE.66.2>
20. Mota dos Santos A.A., Cordeiro G.C. Investigation of particle characteristics and enhancing the pozzolanic activity of diatomite by grinding. *Materials Chemistry and Physics*. 2021; 270: 124799. <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2021.124799>
21. Taoukil D., El meski Y., Lahlaoui M.L., Djedjig R., El bouardi A. Effect of the use of diatomite as partial replacement of sand on thermal and mechanical properties of mortars. *Journal of Building Engineering*. 2021; 42: 103038. <https://doi.org/10.1016/j.jobbe.2021.103038>
22. Балыков А.С., Низина Т.А., Кяшкин В.М., Володин С.В. Рецептурно-технологическая эффективность осадочных пород различного состава и генезиса в цементных системах // Нанотехнологии в строительстве. 2022. Т. 14, № 1. С. 53–61. <https://doi.org/10.15828/2075-8545-2022-14-1-53-61>
23. Kocak Y. Effects of metakaolin on the hydration development of Portland–composite cement. *Journal of Building Engineering*. 2020; 31: 101419. <https://doi.org/10.1016/j.jobbe.2020.101419>
24. Гайфуллин А.Р., Рахимов Р.З., Рахимова Н.Р. Влияние добавок глинистых в портландцемент на прочность при сжатии цементного камня // Инженерно-строительный журнал. 2015. № 7 (59). С. 66–73. <https://doi.org/10.5862/MCE.59.7>
25. Балыков А.С., Низина Т.А., Володин С.В. Оптимизация технологических параметров получения минеральных добавок на основе прокаленных глин и карбонатных пород для цементных систем // Нанотехнологии в строительстве. 2022. Т. 14, № 2. С. 145–155. <https://doi.org/10.15828/2075-8545-2022-14-2-145-155>
26. Balykov A.S., Nizina T.A., Volodin V.V., Kyashkin V.M. Effects of Calcination Temperature and Time on the Physical-Chemical Efficiency of Thermally Activated Clays in Cement Systems. *Materials Science Forum*. 2021; 1017: 61–70. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/MSF.1017.61>
27. Chand G., Happy S.K., Ram S. Assessment of the properties of sustainable concrete produced from quaternary blend of portland cement, glass powder, metakaolin and silica fume. *Cleaner Engineering and Technology*. 2021; 4: 100179. <https://doi.org/10.1016/j.clet.2021.100179>
28. Рассохин А.С., Пономарев А.Н., Фиговский О.Л. Микрокремнеземы различных типов для высокопрочных мелкозернистых бетонов // Инженерно-строительный журнал. 2018. № 2 (78). С. 151–160. <https://doi.org/10.18720/MCE.78.12>
29. Ribeiro R.P., Jaramillo Nieves L.J., Bernardin A.M. Effect of fiberglass waste and fly ash addition on the mechanical performance of Portland cement paste. *Cleaner Materials*. 2023; 7: 100176. <https://doi.org/10.1016/j.clema.2023.100176>
30. Nedunuri S.S.S.A., Sertse S.G., Muhammad S. Microstructural study of Portland cement partially replaced with fly ash, ground granulated blast furnace slag and silica fume as determined by pozzolanic activity. *Construction and Building Materials*. 2020; 238: 117561. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2019.117561>
31. Nontikansak M., Chaiyapoom P., Siriawatwechakul W., Jongvisuttisun P., Snguanyat C. Control the early-stage hydration of expansive additive from calcium sulfoaluminate clinker by polymer encapsulation. *Cement*. 2022; 8: 100021. <https://doi.org/10.1016/j.cement.2022.100021>

32. Carballosa P., García Calvo J.L., Revuelta D., Sánchez J.J., Gutiérrez J.P. Influence of cement and expansive additive types in the performance of self-stressing and self-compacting concretes for structural elements. *Construction and Building Materials*. 2015; 93: 223–229. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2015.05.113>
33. Le Saoût G., Lothenbach B., Hori A., Higuchi T., Winnefeld F. Hydration of Portland cement with additions of calcium sulfoaluminates. *Cement and Concrete Research*. 2013; 43: 81–94. <https://doi.org/10.1016/j.cemconres.2012.10.011>
34. Баженов Ю.М., Фаликман В.Р., Булгаков Б.И. Наноматериалы и нанотехнологии в современной технологии бетонов // Вестник МГСУ. 2012. № 12. С. 125–133.
35. Фаликман В.Р., Соболев К.Г. «Простор за пределом», или как нанотехнологии могут изменить мир бетона. Часть 1 // Нанотехнологии в строительстве. 2010. Том 2, № 6. С. 17–31.
36. Nizina T.A., Ponomarev A.N., Balykov A.S., Korovkin D.I. Multicriteria optimization of the formulation of modified fine-grained fibre concretes containing carbon nanostructures. *International Journal of Nanotechnology*. 2018; 15: 333–346. <https://doi.org/10.1504/IJNT.2018.094790>
37. Лященко Т.В. О нейронных сетях и экспериментально-статистическом моделировании // Моделирование и оптимизация строительных композитов. Одесса: Астропринт, 2016. С. 86–90.
38. Радченко С.Г. Анализ методов моделирования сложных систем // Математические машины и системы. 2015. № 4. С. 123–127.
39. Шинкевич Е.С., Чернышов Е.М., Луцкин Е.С., Тымняк А.Б. Многокритериальная оптимизация состава и свойств активированных известково-кремнеземистых композитов // Сухие строительные смеси. 2013. № 2. С. 33–37.
40. Jiang Y., Li H., Zhou Y. Compressive Strength Prediction of Fly Ash Concrete Using Machine Learning Techniques. *Buildings*. 2022; 12: 690. <https://doi.org/10.3390/buildings12050690>
41. Feng D.-C., Liu Z.-T., Wang X.-D., Chen Y., Chang J.-Q., Wei D.-F., Jiang Z.-M. Machine learning-based compressive strength prediction for concrete: An adaptive boosting approach. *Construction and Building Materials*. 2020; 230: 117000. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2019.117000>
42. Ziolkowski P., Niedostatkiewicz M. Machine Learning Techniques in Concrete Mix Design. *Materials*. 2019; 12: 1256. <https://doi.org/10.3390/ma12081256>
43. Naderpour H., Rafiean A.H., Fakharian P. Compressive strength prediction of environmentally friendly concrete using artificial neural networks. *Journal of Building Engineering*. 2018; 16: 213–219. <https://doi.org/10.1016/j.jobbe.2018.01.007>

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Балыков Артемий Сергеевич – кандидат технических наук, старший научный сотрудник научно-исследовательской лаборатории эколого-метеорологического мониторинга, строительных технологий и экспертиз, Национальный исследовательский Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарёва, Саранск, Россия, artbalrun@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9087-1608>

Каледина Елена Александровна – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры прикладной математики, дифференциальных уравнений и теоретической механики, Национальный исследовательский Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарёва, Саранск, Россия, elena.lizina@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-0992-9540>

Володин Сергей Валерьевич – студент, Национальный исследовательский Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарёва, Саранск, Россия, svolodin12@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-2018-4487>

ВКЛАД АВТОРОВ

Балыков А.С. – научное руководство; разработка концепции и развитие методологии исследования; анализ результатов исследования; написание исходного текста статьи; составление итоговых выводов.

Каледина Е.А. – обработка и анализ экспериментальных данных с применением методов машинного обучения; графическое и табличное представление результатов исследования; написание исходного текста статьи; составление итоговых выводов.

Володин С.В. – литературный обзор; проведение экспериментальной работы; сбор и систематизация экспериментальных данных.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Статья поступила в редакцию 03.03.2023; одобрена после рецензирования 31.03.2023; принята к публикации 05.04.2023.