

•装配式乡村住宅•

DOI:10.12454/j.jsuese.202401032



本刊网刊

基于BO-XGBoost算法的气凝胶混凝土力学和保温性能预测方法

熊峰^{1,2,3}, 陈腾盛³, 邓楚兵³, 李云飞³, 曾一^{1,3*}

(1. 四川大学 深地科学与工程教育部重点实验室, 四川 成都 610065; 2. 四川大学 破坏力学与工程防灾减灾四川省重点实验室, 四川 成都 610065; 3. 四川大学 建筑与环境学院, 四川 成都 610065)

摘要:气凝胶混凝土是制备保温承重一体化墙板的优质材料,其抗压强度和导热系数是重要的研究参数。为了获取最优的抗压强度和导热系数,需要在实验室多次重复进行配合比设计及性能测定,需要大量的人力和时间。采用公式分析方法或统计方法可获得最佳性能,但因为气凝胶混凝土的抗压强度和导热系数与各影响因素存在高度的非线性关系,由此得到的经验公式精度低,对自身实验有很强的依赖性,无法推广和泛化。而利用机器学习方法可以有效地通过数据库建立输入与输出特征之间的映射关系。本文利用贝叶斯优化的极端梯度提升算法(BO-XGBoost)建立了一个气凝胶混凝土性能预测模型,并基于335组数据,进行模型训练与测试。为了验证采用带可解释特征作为输入特征的方案的有效性,采用两个模型分别预测抗压强度和导热系数的优势,设置两个对比方案进行性能比较。此外,为了分析BO-XGBoost模型在气凝胶混凝土性能预测上的优势,使用随机森林、人工神经网络等多个模型与之进行比较,并采用全新数据探究模型的泛化能力。结果表明,BO-XGBoost模型效果很好,抗压强度和导热系数预测模型的测试集的决定系数 R^2 均在0.97以上,预测能力优于其他模型,且具有较好的泛化能力。此外,采用SHAP模型进行可解释分析,结果表明,影响气凝胶混凝土性能的最主要因素是气凝胶掺量和水胶比。

关键词:气凝胶混凝土;性能预测;贝叶斯优化;XGBoost算法;SHAP可解释分析

中图分类号:TU528

文献标志码:A

文章编号:2096-3246(2025)05-0001-13

能耗占比大、排碳量居高不下一直是建筑行业的痛点之一^[1]。降低建筑能耗的常见方法就是在建筑外墙铺设保温层,增强其保温性能。目前常见的发泡聚苯乙烯(EPS)、挤塑聚苯乙烯(XPS)等有机保温材料易燃且燃烧会产生有毒气体;膨胀珍珠岩、岩棉等无机保温材料导热系数高,所需保温层更厚^[2-4]。因此,开发一种机械强度高、导热系数低的新型建筑材料,对提高建筑外墙保温具有重要的现实意义^[5]。

气凝胶材料是一种新型纳米材料,材料内部90%以上为孔隙,具有导热系数极低(0.003~0.020 W/(m·K))、密度极低(3~100 kg/m³)、质轻等优点,已在航空航天、工业供暖管道、节能玻璃、新能源汽车等领域得到良好的应用^[6]。利用气凝胶替代部分砂制备的气凝胶混凝土因保温性能好、防火隔热、质量小等优点被学者广泛研究。欲得到机械性能与保温性能俱优的气凝

胶混凝土,就需要在实验室多次重复进行配合比设计及性能测定,会消耗大量人力和时间。也可采用拟合公式分析或统计方法获得最佳性能,但由于气凝胶混凝土的抗压强度和导热系数与各影响因素存在高度的非线性关系^[7-9],以往采用的线性或非线性经验拟合公式,精度低,实验周期长,对自身实验有很强的依赖性,无法推广和泛化等问题^[10]。

随着人工智能的兴起,机器学习方法在土木工程领域得到了广泛应用^[11-13],如混凝土机械强度预测^[14-15],混凝土在疲劳荷载作用下的剩余强度预测^[16],以及钢筋混凝土框架结构的基本周期预测^[17]等。戴理朝等^[18]发现,利用极端梯度提升算法(XGBoost)、支持向量回归算法(SVR)等建立的锈蚀钢筋混凝土构件抗剪承载力模型,其决定系数(R^2)均大于0.96,相较于已有的经验公式,精度得到了较高的提升。周帅等^[19]考虑超高性

收稿日期:2024-12-12 修回日期:2025-02-21 网络出版日期:2025-05-21

基金项目:国家自然科学基金项目(52278197);四川省博士后创新人才支持项目(BX202314)

作者简介:熊峰(1963—),女,教授,博士。研究方向:装配式结构。E-mail: fxiong@scu.edu.cn.

*通信作者:曾一,副研究员, E-mail: zengyi_1@scu.edu.cn.

能混凝土(UHPC)的各组分的含量及比例等约束,利用人工神经网络算法(ANN)模型和遗传算法(GA)优化UHPC的配合比设计,降低了UHPC的成本,优化后的成本降低了16.12%。

不同的机器学习算法的侧重点不同,对各类问题的适用性也不同。不少学者研究发现,对于混凝土的性能预测,XGBoost模型和改进模型有着较大的优势。Liu等^[20]选用随机森林(RF)、SVR、XGBoost算法,以实验室制备的60个样本数据作为依据,预测混凝土的强度,发现3个模型的 R^2 均大于0.99,但XGBoost模型的均方根误差(RMSE)最小,综合比较,XGBoost模型的预测精度最高。Wang等^[21]使用K最近邻(KNN)、决策树(DT)、RF、梯度提升决策树(GBDT)、自适应提升(AdaBoost)、XGBoost等算法对228个数据样本进行混凝土抗压强度预测,发现XGBoost的预测效果较好,训练集和测试集的 R^2 分别为0.982和0.966。Nguyen等^[22]使用XGBoost及改进算法,对从文献中获得的810项数据进行抗压强度预测训练,发现每个模型的 R^2 均大于0.966,平均绝对误差均小于6.347,有较好的预测结果。

目前对于混凝土材料的抗压强度预测已有不少学者研究,且取得了不错的成果,但是针对气凝胶混凝土,尤其是针对其导热系数性能方面的机器学习预测的研究则比较少。Han等^[23]基于实验室制备的660组数据,使用RF、XGBoost等算法分别建立抗弯强度、抗压强度和导热系数的预测模型,发现轻量级梯度提升机(LightGBM)模型在抗压强度和导热系数性能预测上较优,而XGBoost模型在抗弯强度性能预测上较优。尽管Han等^[23]建立的机器学习模型预测效果较优,但因其数据库均来自团队的实验室制备,该模型的推广和泛化能力有待商榷。

相较于传统的经验公式,机器学习模型的精度较高,有很好的泛化能力。但机器学习本质上是一个“黑匣子”,无法直观反映混凝土的性能与各影响因素的具体关系。基于博弈论,Lyngdoh等^[24]研究了一种事后解释机器学习模型的方法(SHAP),SHAP方法可对黑箱预测模型内部机制进行解释,并量化输入参数对模

型的重要程度。与传统机器学习输出特征重要性计算方法相比,SHAP方法不仅能给出每个特征重要性排序和实际影响值,还能分析特征对预测结果的影响规律。刘廷滨等^[25]利用ANN和XGBoost两种机器学习算法建立了一个统一的锈蚀钢筋混凝土高温粘结强度预测模型,并基于SHAP方法对模型预测结果进行了解释。结果表明,混凝土抗压强度、黏结长度、温度是影响锈蚀钢筋混凝土高温粘结强度的关键参数。Lyngdoh等^[24]使用多种机器学习方法预测混凝土的抗压强度和抗拉强度,并根据SHAP方法进行可解释分析,发现水胶比、养护龄期对混凝土强度影响最大,与实际工程结果一致。

本文提出了一种基于XGBoost算法的气凝胶混凝土性能预测模型,便于更好分析气凝胶混凝土各组分与性能之间的非线性关系。该模型基于183组关于抗压强度和152组关于导热系数的配合比数据,以水胶比、骨料占比、气凝胶掺量、硅灰掺量、龄期可解释特征为输入变量,建立两个模型分别预测气凝胶混凝土的抗压强度和导热系数,构建了气凝胶混凝土的性能与影响因素的关系。为了证明XGBoost模型在气凝胶混凝土性能预测上的优势,使用RF、ANN等多个模型与之比较,并采用全新数据探究其泛化能力。此外,为了分析气凝胶混凝土的各影响因素对抗压强度和导热系数性能的影响,结合SHAP可解释模型进行了输入特征影响分析。

1 算法介绍

1.1 数据库建立

建模所用的数据(183组抗压强度数据和152组导热系数数据)来自已有文献^[7,9-10,26-36]和组内实验,如表1所示。输入参数包括水泥、砂、气凝胶、硅灰、水用量及龄期6个变量,输出参数为抗压强度和导热系数。表2和图1分别展示了数据库中各参数的统计结果及分布直方图。为了提高模型的性能及可靠性,对数据进行预处理,剔除掉数据中的异常值,并进行归一化处理,使得数据不同特征均分布在(0,1)之间。

表1 数据来源

Tab. 1 Data distribution

| 数据来源 | 数据类型 | | 数据来源 | 数据类型 | | 数据来源 | 数据类型 | |
|----------------------|------|------|---------------------------|------|------|----------------------|------|------|
| | 抗压强度 | 导热系数 | | 抗压强度 | 导热系数 | | 抗压强度 | 导热系数 |
| Gao等 ^[7] | 7组 | 7组 | 杨玉祥等 ^[28] | 5组 | 5组 | 刘涛等 ^[33] | 28组 | 7组 |
| Ng等 ^[9] | 18组 | 18组 | 朱平等 ^[27,34-35] | 17组 | 17组 | Liu等 ^[36] | 7组 | 7组 |
| 吕洋等 ^[10] | | 35组 | Wang等 ^[30] | 1组 | 1组 | 组内实验 | 36组 | 36组 |
| 王飞等 ^[26] | 24组 | 7组 | 周荣来等 ^[31] | 6组 | 0组 | | | |
| 封金财等 ^[27] | 5组 | 5组 | 韩风雷等 ^[32] | 28组 | 7组 | | | |

表 2 数据库中输入输出变量统计结果

Tab. 2 Statistical information of input and output variables in the database

| 统计指标 | 水泥用量/kg | 砂用量/kg | 硅灰用量/kg | 气凝胶用量/kg | 水用量/kg | 龄期/d | 抗压强度/MPa | 导热系数/(W·m ⁻¹ ·K ⁻¹) |
|------|---------|----------|---------|----------|--------|-------|----------|--|
| 最大值 | 756.00 | 3 000.00 | 272.00 | 144.00 | 380.00 | 28.00 | 69.30 | 1.97 |
| 最小值 | 324.00 | 0 | 0 | 12.80 | 49.76 | 3.00 | 0 | 0.04 |
| 平均值 | 450.54 | 735.36 | 32.76 | 56.57 | 200.13 | 20.90 | 23.30 | 0.71 |
| 标准差 | 78.21 | 636.32 | 37.62 | 27.98 | 84.94 | 9.80 | 16.81 | 0.48 |

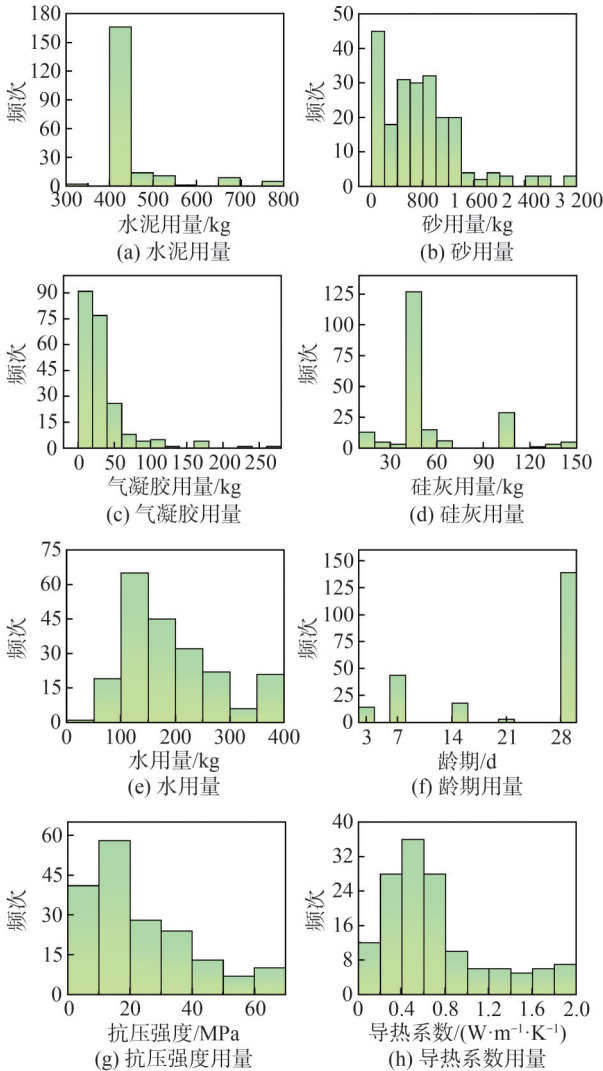


图 1 数据库中输入输出变量分布直方图

Fig. 1 Histogram of input and output variables in the database

对输入输出特征进行皮尔逊相关性分析,结果见表 3。由表 3 可知,部分输入参数,如水泥与硅灰用量、气凝胶与砂用量,水泥与水用量,存在较高的线性关系。为了使模型能更好地捕捉数据间的非线性关系,将部分输入参数(水泥用量、砂用量、气凝胶用量、硅灰用量、水用量)变更为带可解释特征的参数,即水胶比(水与胶凝材料的质量比)、骨料占比(骨料占整体的体积比)、气凝胶掺量(气凝胶占骨料的体积比)、硅

灰掺量(硅灰占胶凝材料的质量比),其余参数不变。表 4 和图 2 分别展示了变更之后的带可解释特征参数的统计结果及分布直方图。

表 3 气凝胶混凝土相关特征的皮尔逊相关系数

Tab. 3 Pearson correlation coefficient of the characteristics related to aerogel concrete

| 特征 | 水泥用量 | 砂用量 | 气凝胶用量 | 硅灰用量 | 水用量 | 龄期 | 抗压强度 | 导热系数 |
|-------|-------|-------|--------|-------|-------|--------|--------|--------|
| 水泥用量 | 1.000 | 0.375 | 0.390 | 0.748 | 0.792 | 0.287 | -0.065 | -0.273 |
| 砂用量 | | 1.000 | -0.348 | 0.082 | 0.285 | -0.033 | 0.398 | 0.335 |
| 气凝胶用量 | | | 1.000 | 0.437 | 0.339 | 0.242 | -0.556 | -0.526 |
| 硅灰用量 | | | | 1.000 | 0.637 | 0.257 | 0.033 | -0.169 |
| 水用量 | | | | | 1.000 | 0.293 | -0.163 | -0.304 |
| 龄期 | | | | | | 1.000 | 0.046 | 0.106 |
| 抗压强度 | | | | | | | 1.000 | 0.001 |
| 导热系数 | | | | | | | | 1.000 |

表 4 数据库中带可解释特征参数输入变量统计信息

Tab. 4 Statistical information of input variables with interpretable features in the database

| 统计指标 | 水胶比 | 骨料占比/% | 气凝胶掺量/% | 硅灰掺量/% |
|------|------|--------|---------|--------|
| 最大值 | 0.60 | 71 | 100 | 16 |
| 最小值 | 0.20 | 11 | 0 | 0 |
| 平均值 | 0.37 | 60 | 33 | 9 |
| 标准差 | 0.09 | 7 | 21 | 3 |

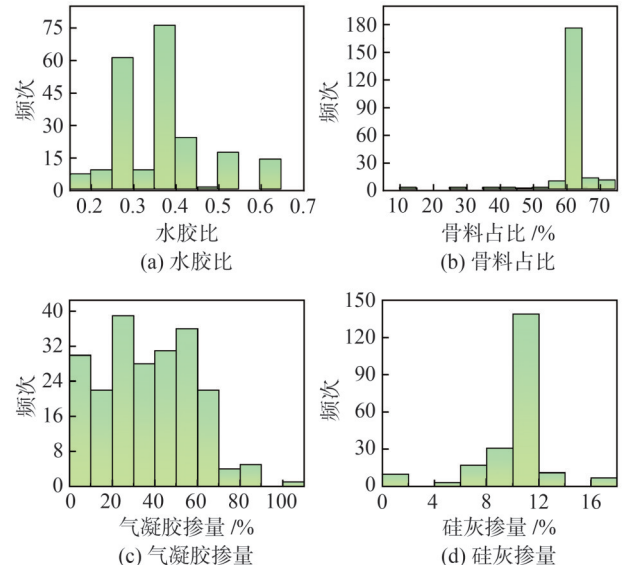


图 2 数据库中带可解释特征参数输入变量分布直方图

Fig. 2 Histogram of input variables with interpretable features in the database

1.2 BO-XGBoost 算法介绍

XGBoost 是一种基于梯度提升树 (GBT) 的高效集成学习算法,被广泛应用于解决分类、回归及排序问

题。它可以不断迭代训练多个弱学习器(一般为决策树),在每一轮迭代时,新模型会重点学习并优化前一轮模型的残差,并通过梯度下降法构造新的决策树,从而逐步提高模型对数据的预测精度。XGBoost算法的预测可由目标函数实现,目标函数的计算如下:

$$\Gamma(\theta) = \sum_{i=1}^n L(y_i, \hat{y}_i) + \sum_{k=1}^K \Omega(f_k) \quad (1)$$

式中: $\sum_{i=1}^n L(y_i, \hat{y}_i)$ 为损失函数,如均方误差或对数损失,

n 为训练数据集的样本总数; $\sum_{k=1}^K \Omega(f_k)$ 为正则化项,常见的有 L1、L2 正则化,用于控制模型的复杂度, K 为 XGBoost 模型中决策树的总数。

作为一个高效的梯度提升决策树算法, XGBoost 算法有多个超参数,如决策树的最大深度、决策树的数量、学习速率。超参数决定模型的表达能力和泛化能力,不合适的超参数可能导致过拟合(模型过于复杂)或欠拟合(模型能力不足)。手动进行参数优化往往需要大量实验,是一个极其耗时耗力的过程。贝叶斯优化是一种高效的参数优化方法,可以利用概率模型对目标函数进行建模,通过逐步更新模型找到全局最优解,同时尽可能减少函数评估次数。因此,本文采取贝叶斯优化对 XGBoost 模型进行超参数优化,图 3 展示了使用贝叶斯优化的极端梯度提升算法(BO-XGBoost)建立模型的主要流程。

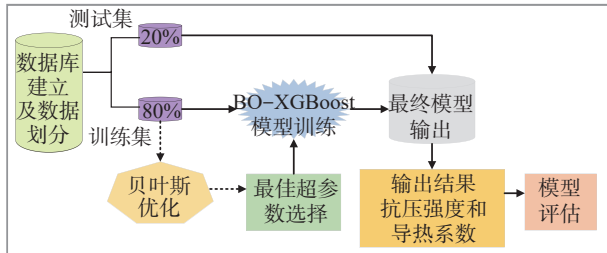


图 3 BO-XGBoost 算法流程图

Fig. 3 Flowchart of the BO-XGBoost algorithm

由于模型存在两种输入方式(材料用量或带可解释特征),以及两个输出结果,为了比较不同输入方式,以及“建立一个模型同时预测两种性能”与“建立两个模型分别预测两种性能”的策略的优劣,本文设计了 3 种对比方案,图 4 为 3 种方案的对比示意图。方案 1 采取可解释特征作为输入端,建立两个模型分别预测抗压强度和导热系数;方案 2 采用材料用量作为输入端,建立两个模型分别预测抗压强度和导热系数;方案 3 采取可解释特征作为输入端,建立一个多任务模型同时预测抗压强度和导热系数,通过 3 个方案的对比结果,评估不同输入方式与模型结构对预测效果的影响,进而选择最优的建模策略。

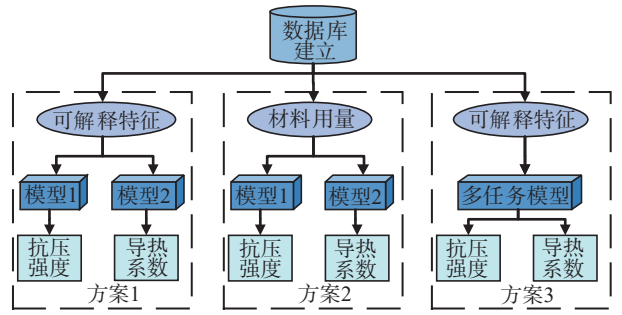


图 4 3 种方案对比示意图

Fig. 4 Schematic diagram of comparison between three schemes

1.3 评价指标

为了评估机器学习模型的性能,本文采用以下 3 个评价指标: R^2 、均方根误差(RMSE, 记为 E_{RMS})、平均绝对百分比误差(MAPE, 记为 E_{MAP}),相关计算公式如下。

$$R^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})(Y_i - \bar{Y})^2}{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2 \sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2} \quad (2)$$

$$E_{\text{RMS}} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (X_i - Y_i)^2}{n}} \quad (3)$$

$$E_{\text{MAP}} = \frac{\sum_{i=1}^n \left| \frac{X_i - Y_i}{X_i} \right|}{n} \quad (4)$$

式(2)~(4)中, X_i 为试验值, \bar{X} 为试验值的平均值, Y_i 为预测值, \bar{Y} 为预测值的平均值。

2 结果分析

2.1 贝叶斯优化结果

XGBoost 模型有多个超参数,对模型的计算精度有着不同程度的影响。本文主要针对决策树数量、决策树的最大深度、学习速率、L1 和 L2 正则化系数等 8 个超参数进行贝叶斯优化,其他超参数采用默认值。以方案 1 为例,当采用可解释特征作为输入变量,使用两个模型分别预测抗压强度和导热系数时,其中涉及的超参数取值范围及最终选定的超参数值如表 5 所示,其中模型 1 和模型 2 分别以抗压强度和导热系数为输出结果。

在使用贝叶斯优化训练 XGBoost 模型时,迭代次数设定为 200 次,以训练集的 R^2 作为优化目标函数,图 5 为两个模型中贝叶斯优化的目标函数与迭代次数的关系。由图 5 可知,以抗压强度为输出的模型的 R^2 最优为 0.999 7,以导热系数为输出的模型的 R^2 最优为 0.991 6。

表 5 贝叶斯优化的超参数的取值范围及最优参数

Tab. 5 Range of hyperparameters for Bayesian optimization and optimal parameters

| 超参数名称 | 取值范围 | 取值结果 | |
|----------|------------|------|------|
| | | 模型 1 | 模型 2 |
| 决策树数量 | 10~1 000 | 574 | 608 |
| 决策树的最大深度 | 3~15 | 11 | 15 |
| 学习率 | 0.001~0.02 | 0.02 | 0.02 |
| L1 正则化系数 | 0.1~10.0 | 5.01 | 0.10 |
| L2 正则化系数 | 0.5~10.0 | 0.86 | 2.68 |
| 最小子节点权重 | 1~10 | 1 | 1 |
| 样本采样率 | 0.5~1.0 | 1 | 1 |
| 列采样率 | 0.1~1.0 | 1 | 1 |

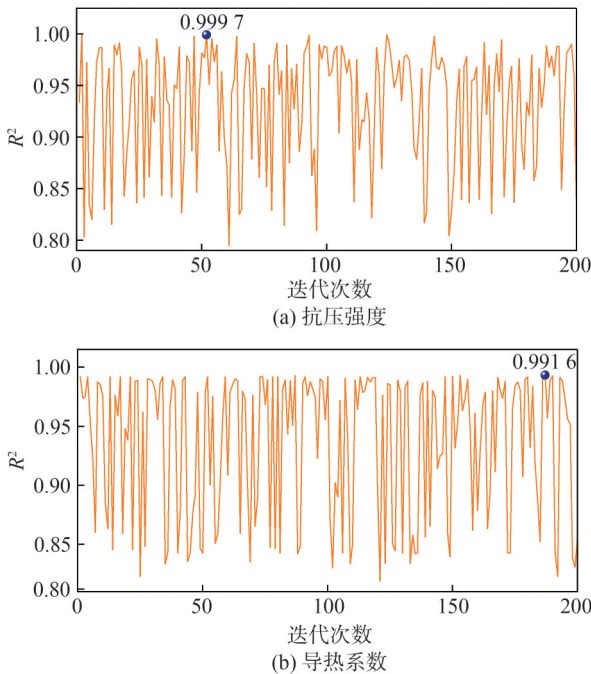


图 5 贝叶斯优化中目标函数与迭代次数关系

Fig. 5 Relationship between objective function and iteration number in Bayesian optimization

2.2 3种方案评价指标对比

使用 R^2 、RMSE、MAPE 这 3 个统计指标评估 3 种方案建立的模型在训练集和测试集上的性能,结果汇总于表 6,图 6 为对应的柱状对比图。模型性能越好,则 R^2 越大, RMSE 和 MAPE 越小。从表 6 中可以看出, 3 个方案抗压强度的训练集的 R^2 均大于 0.97, RMSE 均小于 3.1 MPa, MAPE 均小于 11%,说明根据 3 个方案建立的模型均得到了较好的训练。由表 6 和图 6 可知,方案 1 在测试集上的表现最佳,抗压强度和导热系数的 R^2 分别为 0.977、0.978, RMSE 分别为 2.366 MPa、0.104 W/(m·K), MAPE 分别为 9.087%、16.334%。方案 2 在测试集上的表现次之,方案 3 最差。

表 6 3种方案下抗压强度和导热系数性能评价指标

Tab. 6 Performance evaluation indicators of compressive strength and thermal conductivity under three schemes

| 方案 | 抗压强度 | | | 导热系数 | | | |
|----|-------|--------------|------------|--------|--|--------|--------|
| | R^2 | RMSE/ MPa | MAPE/ % | R^2 | RMSE/ (W·m ⁻¹ ·K ⁻¹) | MAPE/% | |
| 1 | 训练集 | 1.000 | 0.352 | 1.602 | 0.992 | 0.052 | 7.087 |
| | 测试集 | 0.977 | 2.366 | 9.087 | 0.978 | 0.104 | 16.334 |
| 2 | 训练集 | 0.978 | 3.087 | 4.714 | 0.985 | 0.073 | 10.910 |
| | 测试集 | 0.964 | 3.109 | 10.702 | 0.960 | 0.132 | 11.671 |
| 3 | 训练集 | 1.000 | 0.144 | 0.306 | 0.997 | 0.026 | 3.741 |
| | 测试集 | 0.952 | 3.930 | 23.475 | 0.928 | 0.158 | 34.158 |

值得注意的是,方案 3 采用一个模型同时预测抗压强度和导热系数两个性能,其在训练集上的 3 个指标均最优,如 R^2 分别为 1.000 和 0.997,但是该模型在测试集上的表现较差,其 R^2 仅为 0.952 和 0.928,训练集和测试集的 R^2 差值分别为 0.048 和 0.072,差值较大,均存在较为严重的过拟合现象,说明该模型的泛化和推广能力较差。

图 7 展示了 3 种方案下 XGBoost 模型的回归预测结果的散点图,比较了模型训练和测试阶段的抗压强度和导热系数的实际值与预测值。由图 7 可知,3 个方案的训练集都具有较高的 R^2 值,即由模型训练得到的预测值十分接近真实值。在测试集方面,方案 1 的两个模型,仅有部分数据的预测值与真实值相差较大,其余数据均有较好的拟合效果,而方案 2 和方案 3 中有更多预测值与真实值相差较大的数据。

经综合比较,采取可解释特征作为输入端,建立两个模型分别预测抗压强度和导热系数。因方案 1 的表现最好,下文使用的 XGBoost 模型,均为根据方案 1 建立的模型。

2.3 多种模型性能对比

为了验证 XGBoost 算法在预测气凝胶混凝土性能上的优势,本文选取 RF、ANN、支持向量机算法(SVM)、多层感知机算法(MLP)等几种经典机器学习算法进行模型训练和性能比较。为了保证对比的可靠性,利用贝叶斯优化算法对每个算法的超参数进行了调优。

表 7 对比了不同机器学习模型的性能,图 8 和 9 为各个评价指标对比雷达图。综合比较多个机器学习的评价指标值,可以发现, XGBoost 模型的 R^2 更大, RMSE 和 MAPE 值更小,这表明 XGBoost 模型更适合气凝胶混凝土的性能预测。其余 4 个模型,均存在误差较大、各项评价指标较差、过拟合现象严重等多个问题,拟合效果较差。

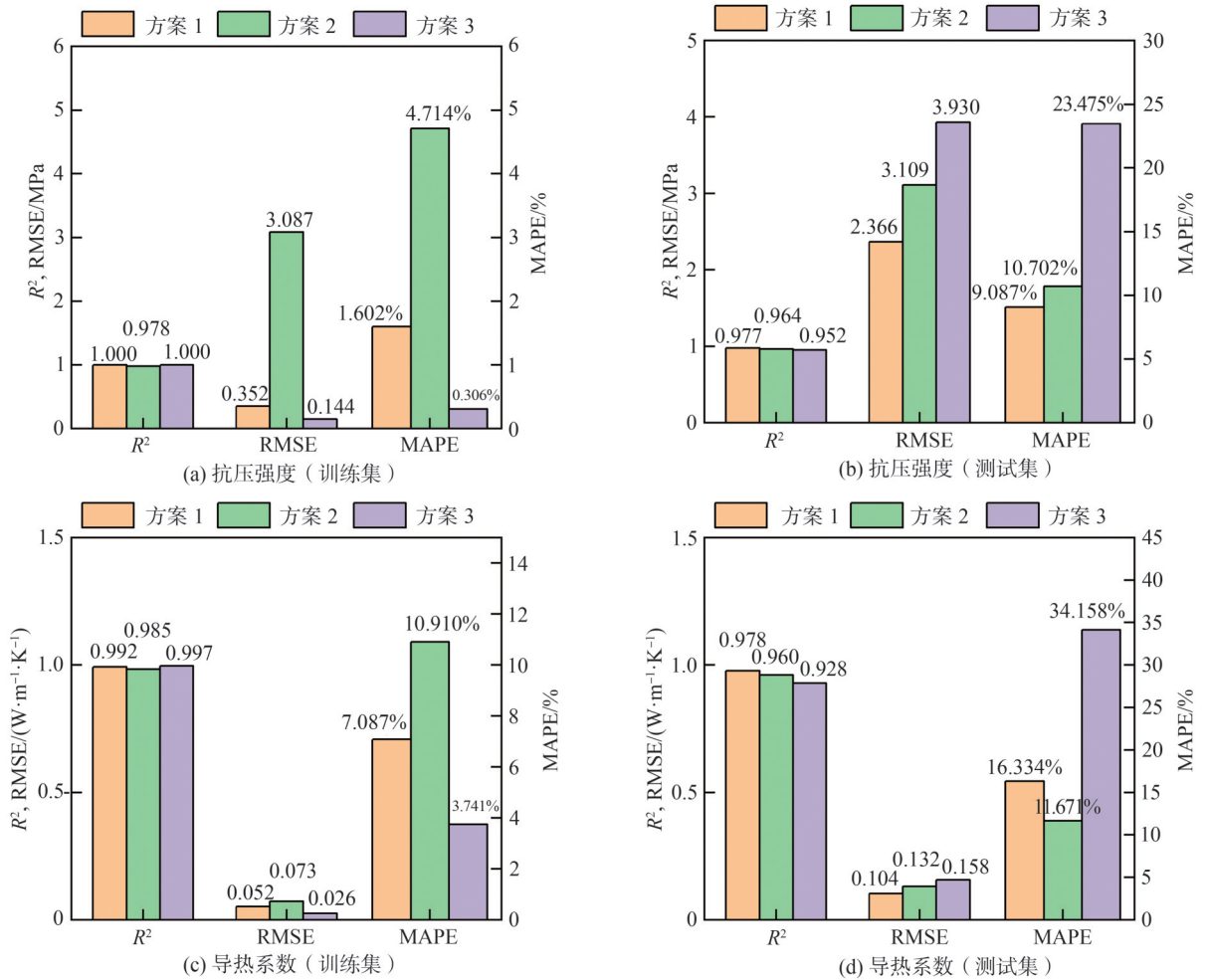


图 6 3 种方案下两种性能预测模型性能指标对比

Fig. 6 Comparison of performance indicators of two performance prediction models under three schemes

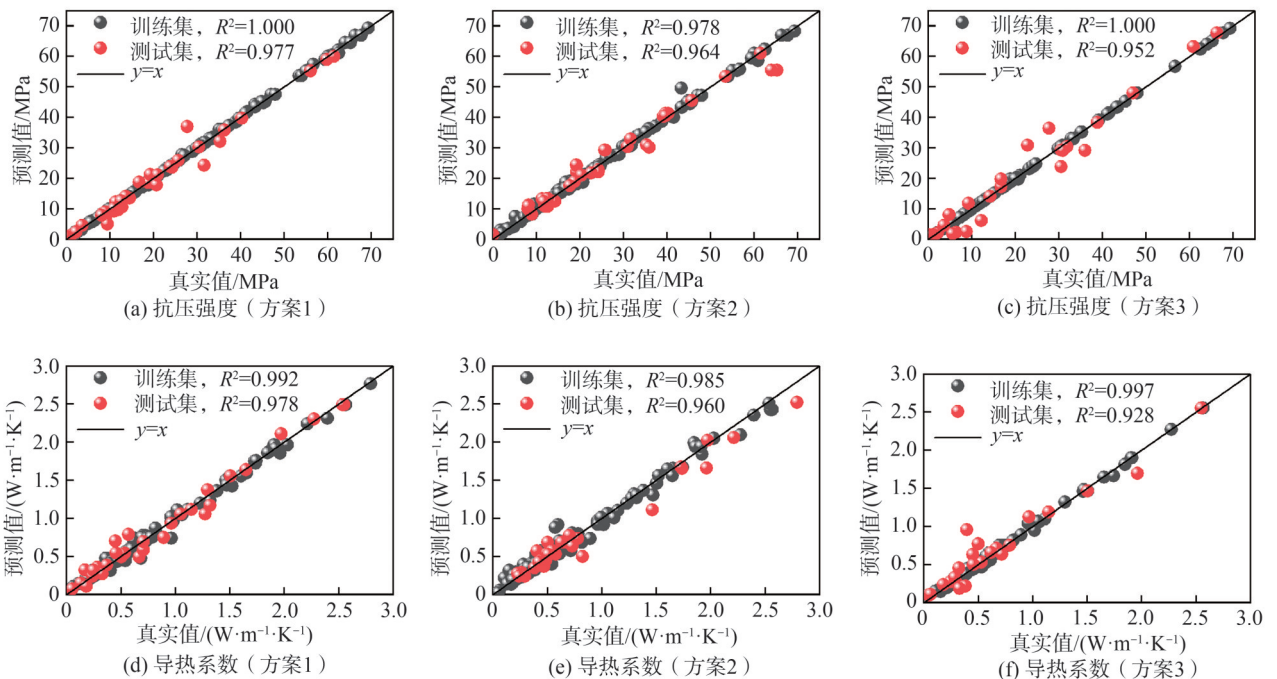


图 7 3 种方案的 XGBoost 模型性能预测拟合结果

Fig. 7 XGBoost model performance prediction fitting results under three schemes

表 7 不同机器学习模型性能汇总

Tab. 7 Summary of performance of different machine learning models

| 模型 | 数据集 | 抗压强度 | | | 导热系数 | | |
|---------|-----|-------|----------|--------|-------|--|--------|
| | | R^2 | RMSE/MPa | MAPE/% | R^2 | RMSE/(W·m ⁻¹ ·K ⁻¹) | MAPE/% |
| XGBoost | 训练集 | 1.000 | 0.352 | 1.602 | 0.992 | 0.052 | 7.087 |
| | 测试集 | 0.977 | 2.366 | 9.087 | 0.978 | 0.104 | 16.334 |
| RF | 训练集 | 0.993 | 1.646 | 7.714 | 0.962 | 0.117 | 17.273 |
| | 测试集 | 0.963 | 3.553 | 25.334 | 0.919 | 0.174 | 15.985 |
| ANN | 训练集 | 0.867 | 7.357 | 39.031 | 0.693 | 0.333 | 51.532 |
| | 测试集 | 0.814 | 7.967 | 57.359 | 0.672 | 0.349 | 31.884 |
| SVM | 训练集 | 0.796 | 9.096 | 30.473 | 0.707 | 0.325 | 35.920 |
| | 测试集 | 0.785 | 8.566 | 40.062 | 0.654 | 0.358 | 36.464 |
| MLP | 训练集 | 0.925 | 5.516 | 26.557 | 0.696 | 0.331 | 49.049 |
| | 测试集 | 0.886 | 6.233 | 34.091 | 0.679 | 0.345 | 31.645 |

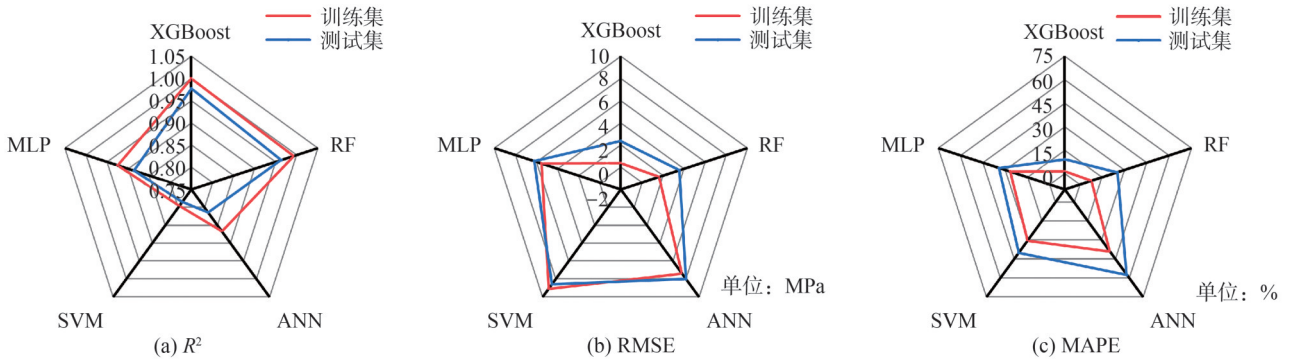


图 8 不同机器学习模型的抗压强度性能预测对比

Fig. 8 Comparison of compressive strength performance of different machine learning models

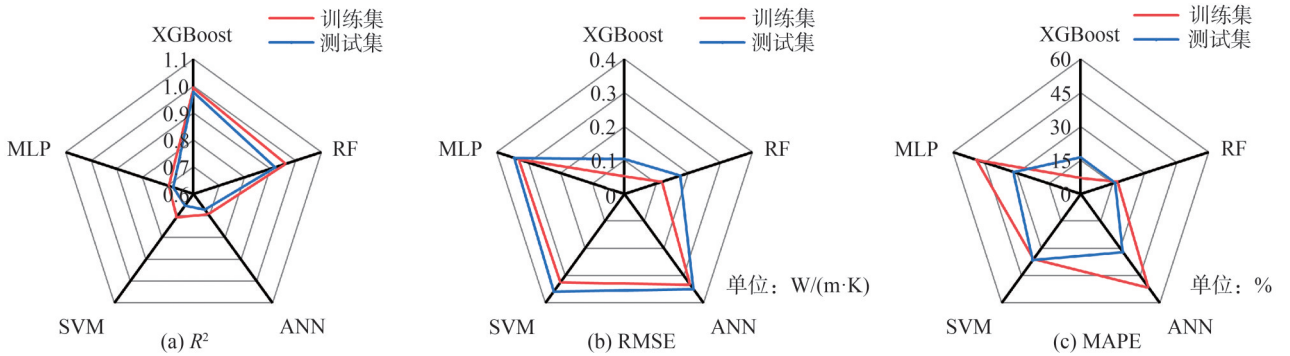


图 9 不同机器学习模型的导热系数性能对比

Fig. 9 Comparison of thermal conductivity performance of different machine learning models

2.4 XGBoost模型的泛化能力验证

为了验证 XGBoost 模型的泛化能力,将模型应用到全新的数据上。本文从两篇气凝胶混凝土文献中获取全新的 12 组配合比数据进行验证分析^[37-38],这些数据未出现在模型训练的训练集和测试集之中。表 8 为用 XGBoost 模型预测 12 组全新数据的性能评价指标。从表 8 中可以看出:在预测抗压强度时, R^2 值为 0.986、RMSE 值为 1.539 MPa;在预测导热系数时, R^2 值为

0.895, RMSE 值为 0.128 W/(m·K)。说明该模型的预测性能较为优秀。

表 8 XGBoost 模型预测全新数据的性能评价指标
Tab.8 Performance evaluation indicators of the XGBoost model for predicting new data

| 评价指标 | R^2 | RMSE |
|------|-------|---------------|
| 抗压强度 | 0.986 | 1.539 MPa |
| 导热系数 | 0.895 | 0.128 W/(m·K) |

图 10 为 12 组数据的真实值和预测值及预测的

误差分布图。

由图 10 可知, XGBoost 模型在全新数据上的预测值与真实值相差较小, 抗压强度和导热系数的最大绝对误差值分别为 4.35 MPa 和 0.246 9 W/(m·K)。抗压强度和导热系数的相对误差普遍在 10% 以下,

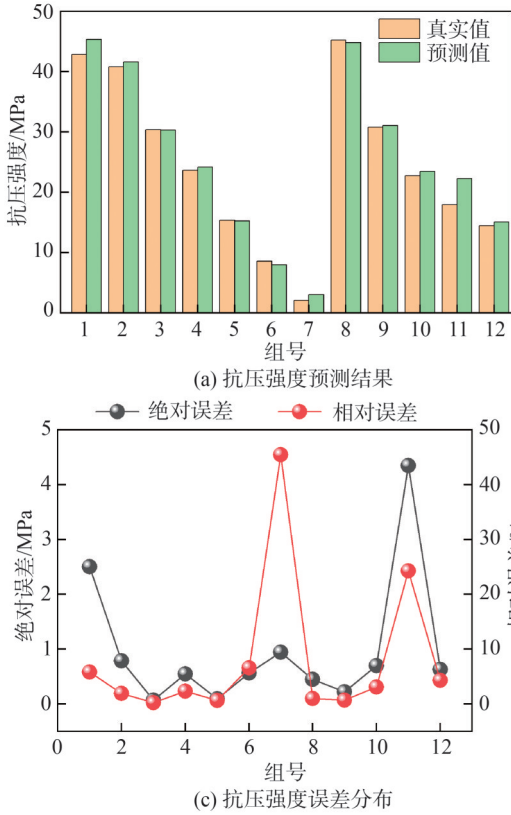


图 10 模型在全新数据上的预测结果及误差分布

Fig. 10 Prediction results and error distribution of the model on new data

3 基于 SHAP 模型的可解释分析

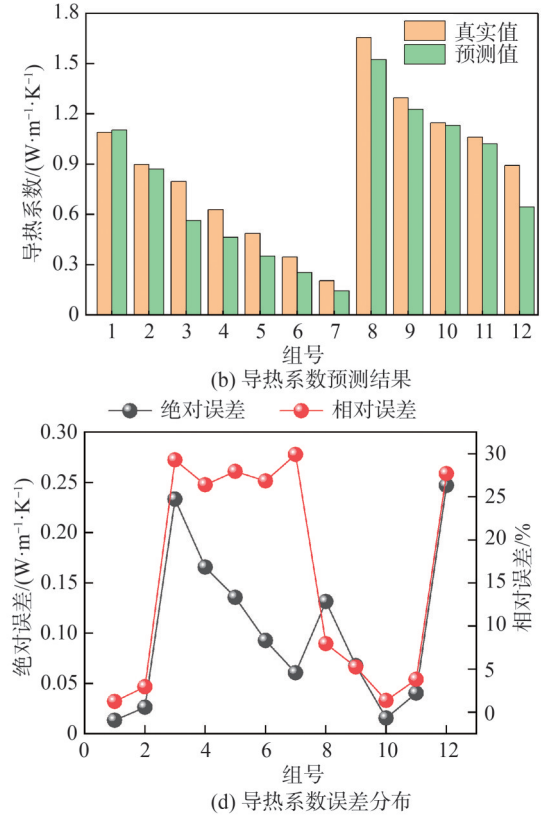
3.1 SHAP 可解释模型介绍

尽管 XGBoost 模型对气凝胶混凝土抗压强度和导热系数有较高的预测精度, 但由于机器学习模型是一个“黑匣子”, 其内部的工作机制难以解释。SHAP 模型是一种基于博弈论方法来描述机器学习模型性能的加法解释模型, 使用了可添加的特征属性方法, 通过计算每个特征加入模型中的贡献值来解释输入特征与输出结果之间的关系。与传统机器学习输出特征重要性排序和实际影响值, 还能分析特征对预测结果的影响规律, 甚至可详细分析单独样本的特征影响力和影响的正负性, 用于全局解释和局部解释。SHAP 模型的最终预测值是所有特征贡献值之和:

$$g(x) = \varphi_0 + \sum_{j=1}^M \varphi_j = f(x) \quad (5)$$

式中, $g(x)$ 为 SHAP 事后解释模型预测值, $f(x)$ 为机器

但部分组别(如 3~7 组)的导热系数相对误差却高达 30%, 这主要是因为导热系数的数值较小, 即使预测值与真实值之间的差距不大, 相对误差仍会较大。综上所述, 本文建立的 BO-XGBoost 模型在面对全新数据时保持着较高的准确性, 泛化能力较好。



学习算法预测值, φ_0 为该机器学习算法在训练集上预测值的均值, φ_j 为特征 x_j 对最终预测值的贡献值, M 为输入特征的个数。

图 11 为 SHAP 模型示意图, 基准值代表了所有样本输出结果的平均值, 若特征贡献值为红色(如特征 1, 2), 表明该特征对输出结果有正向增加作用; 若特征贡献值为蓝色(如特征 3), 表明该特征对输出结果有逆向降低作用。多个特征的影响相互叠加, 获得最终的预测结果。

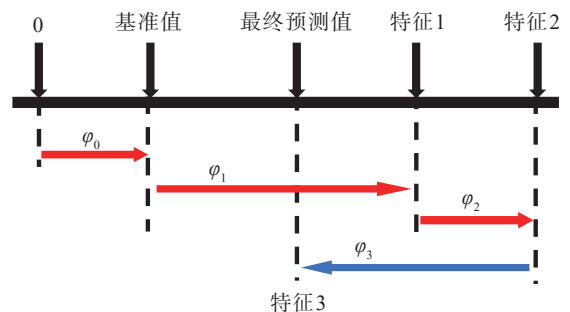


图 11 SHAP 模型示意图

Fig. 11 Schematic diagram of the SHAP model

3.2 SHAP 模型全局分析

利用SHAP对精度最高的XGBoost模型做事后解释分析,计算并记录每一个样本的SHAP值与特征的贡献值,就可以得到SHAP摘要图,从全局角度分析特征对预测结果的影响。

图 12 为气凝胶混凝土的抗压强度全局分析结果,展示了基于XGBoost模型的气凝胶混凝土抗压强度性能预测的SHAP值。图 12 的横坐标代表各个特征的SHAP值,即特征对模型输出的影响,值越大说明该特征对该样本的预测贡献越大。从图 12 可知,气凝胶掺量对结果值的贡献最大,水胶比的贡献次之,而龄期、骨料占比、骨灰占比的影响较小。

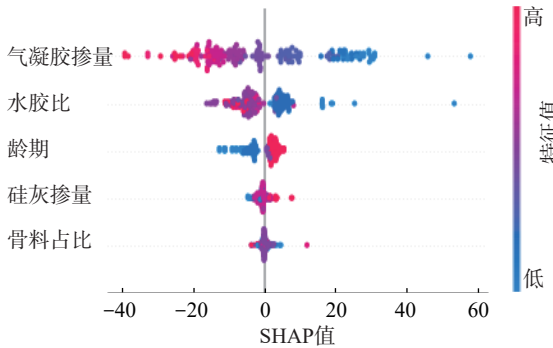


图 12 气凝胶混凝土的抗压强度全局分析

Fig. 12 Global analysis of compressive strength of aerogel concrete

图 12 左侧纵坐标对各个特征值进行排序,排列顺序从上到下表示特征重要性的大小。由图 12 可知,影响气凝胶混凝土抗压强度的特征从大到小依次为气凝胶掺量、水胶比、龄期、硅灰掺量和骨料占比。

图 12 中点的颜色表示特征值的大小,红色表示特征值较高,蓝色表示特征值较低。由图 12 可知,气凝胶混凝土的抗压强度与气凝胶掺量、水胶比呈负相关,即气凝胶掺量和水胶比越小,抗压强度越大;而气凝胶混凝土的抗压强度与龄期、硅灰掺量呈正相关。

图 13 为气凝胶混凝土的导热系数全局分析结果。由图 13 可知,与气凝胶混凝土的抗压强度类似,气凝

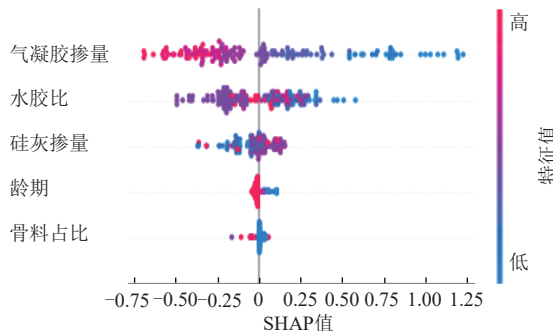


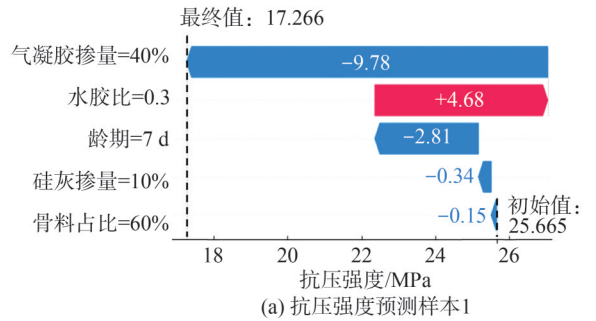
图 13 气凝胶混凝土的导热系数全局分析

Fig. 13 Global analysis of thermal conductivity of aerogel concrete

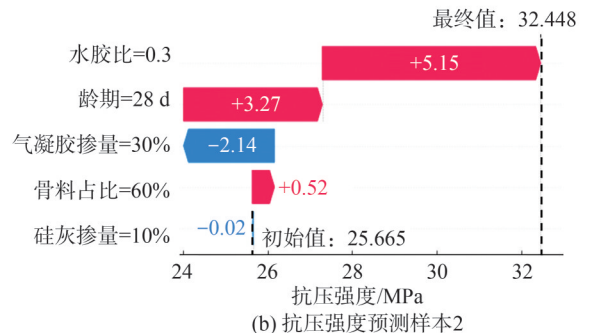
胶掺量对气凝胶混凝土的导热系数的贡献最大,水胶比的贡献次之,而龄期、骨料占比、骨灰占比的影响较小。影响气凝胶混凝土导热系数的特征从大到小依次为气凝胶掺量、水胶比、硅灰掺量、龄期和骨料占比。气凝胶混凝土的导热系数与气凝胶掺量、水胶比和龄期呈负相关,即气凝胶掺量、水胶比和龄期越小,导热系数越大。

3.3 SHAP 模型局部分析

图 14 为基于XGBoost模型,利用SHAP模型可解释分析得到的气凝胶混凝土抗压强度单样本解释图。该数据集的抗压强度基准值为 25.665 MPa,经过不同特征值的贡献加成,得到多个不同的最终值。如图 14(a)所示,当气凝胶掺量为 40%,水胶比为 0.3,龄期为 7 d,硅灰占比为 10%,骨料占比为 60%时,抗压强度由最初的 25.665 MPa,变为最终值 17.266 MPa,除去水胶比为 0.3 时对抗压强度有正向的贡献,其余特征均是负向贡献。其中,气凝胶掺量的影响最大,掺量为 40% 时,可以让抗压强度基准值降低 9.78 MPa。如图 14(b)所示,当气凝胶掺量为 30%,水胶比为 0.3,龄期为 28 d,硅灰占比为 10%,骨料占比为 60%时,抗压强度由最初的 25.665 MPa,变为最终值 32.448 MPa,最终值比基准值更高,这是因为当气凝胶掺量变为 30% 时,对抗压强度基准值的负向影响变小,仅有 2.14 MPa,而 0.3 的水胶比和 28 d 的龄期对抗压强度的正向影响很大,分别为 5.15 MPa 和 3.27 MPa。



(a) 抗压强度预测样本 1



(b) 抗压强度预测样本 2

图 14 气凝胶混凝土的抗压强度单一样本解释

Fig. 14 Single sample explanation of compressive strength of aerogel concrete

图 15 为基于 XGBoost 模型,利用 SHAP 可解释分析得到的气凝胶混凝土导热系数单一样本解释图。该数据集的导热系数基准值为 $0.78 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$,经过不同特征值的贡献加成,得到多个不同的最终值。

由图 15(a)可知,当水胶比为 0.384,硅灰掺量为 8.2%,龄期为 14 d,气凝胶掺量为 30%,骨料占比为 60%时,最终的导热系数值下降至 $0.618 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$ 。水胶比为 0.384 时,导热系数降低了 $0.17 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$,是影响最大的因素;气凝胶掺量为 30%时,相较于基准值,反而会略微增加导热系数。由图 15(b)可知,当气凝胶掺量为 50%,水胶比为 0.2,硅灰掺量为 12.8%,骨料占比为 60%,龄期为 28 d 时,导热系数的最终值降低至 $0.679 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$ 。较高的气凝胶掺量,会大幅降低导热系数,当掺量为 50%时,导热系数下降了 $0.44 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$;水胶比较低时,会导致导热系数上升,水胶比为 0.2 时,导热系数上升了 $0.24 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$ 。

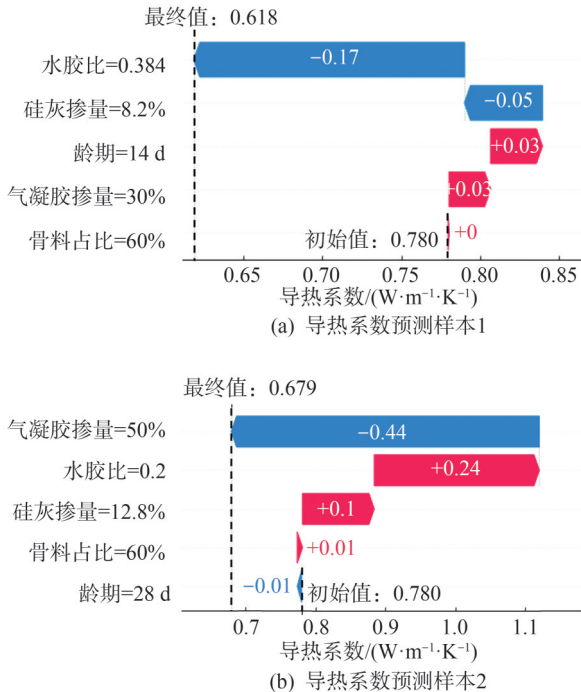


图 15 气凝胶混凝土的导热系数单一样本解释
Fig.15 Single sample explanation of thermal conductivity of aerogel concrete

4 结论

本文利用 BO-XGBoost 算法建立了气凝胶混凝土抗压强度和导热系数性能预测模型,根据输入特征不同以及建立的模型数量不同设计了 3 种模型建立方案,并进行了预测性能比较,之后将最优的方案与其他 4 种传统机器学习算法(RF、ANN、SVM、MLP)进行性能对比,并利用全新数据评估模型的泛化能力,最后根据 SHAP 可解释模型得到气凝胶混凝土性能的特

征性分析,得出如下结论:

1)对比 3 种方案发现,使用可解释特征作为输入变量,分别以抗压强度和导热系数作为输出建立的两个预测模型具有更高的预测精度,两个模型在测试集上的 R^2 分别为 0.977、0.978, RMSE 分别为 2.366 MPa、0.104 $\text{W}/(\text{m}\cdot\text{K})$, MAPE 分别为 9.087%、16.334%。

2)与其他 4 种传统机器学习算法相比较, XGBoost 模型更适合气凝胶混凝土的性能预测。基于 XGBoost 算法的抗压强度和导热系数模型,其训练集的 R^2 分别为 1.000 和 0.992,测试集的 R^2 分别为 0.977 和 0.978。相比之下, RF、ANN 等模型的拟合精度差、存在较严重的过拟合现象,不适用于气凝胶混凝土的性能预测。

3)使用 12 组全新气凝胶混凝土配合比数据验证发现,在预测抗压强度时,决定系数 R^2 为 0.986,最大绝对误差值为 4.35 MPa;在预测导热系数时,决定系数 R^2 为 0.895,最大绝对误差值为 0.246 9 $\text{W}/(\text{m}\cdot\text{K})$,说明建立的 XGBoost 模型具有较强的泛化能力。

4)使用 SHAP 可解释模型可以得到,气凝胶掺量、水胶比是影响气凝胶混凝土抗压强度和导热系数最重要的两个因素。

5 展望

本文建立的模型适用于仅使用硅酸盐水泥、砂、 SiO_2 气凝胶、硅灰和水的用量等材料制备的气凝胶混凝土的性能预测,不适用于气凝胶泡沫混凝土或其他含有外加材料的气凝胶混凝土的性能预测。因此,需要进一步对数据库进行扩充,以增大模型的适用范围。

本文仅使用了较为经典的几种机器学习算法预测气凝胶混凝土的性能,并未涉及目前更为先进的机器学习算法,在后续工作中可使用先进的算法进一步提升气凝胶混凝土模型的预测性能。

参考文献:

- [1] Cai Weiguang, Wu Yong, Ni Jiangbo, et al. Research report on carbon emissions from urban infrastructure in China (2023)[J]. Urban and Rural Construction, 2024(6): 52–61. [蔡伟光,武涌,倪江波,等.中国城市基础设施碳排放研究报告(2023)[J].城乡建设,2024(6):52–61.]
- [2] Vytchikov Y, Saparev M, Chulkov A. Analyzing screen heat insulation and its effect on energy consumption while heating building envelopes in conditions of intermittent heating[J]. MATEC Web of Conferences, 2016, 86: 04019.
- [3] Hu Xiaojun, Wang Yue. Feasibility analysis of applying thermal insulation composite wall in residential buildings [J]. Advanced Materials Research, 2012, 461: 293–296.

- [4] Qian Feng. Insulation and energy-saving technology for the external wall of residential building[J]. *Advanced Materials Research*, 2014, 1073/1074/1075/1076: 1263–1270.
- [5] Berardi U, Sprengard C. An overview of and introduction to current researches on super insulating materials for high-performance buildings[J]. *Energy and Buildings*, 2020, 214: 109890.
- [6] Pan Yuelei, Cheng Xudong, Yan Mingyuan, et al. Silica aerogel and its application in the field of thermal insulation[J]. *Chemical Industry and Engineering Progress*, 2023, 42(1): 297–309. [潘月磊, 程旭东, 闫明远, 等. 二氧化硅气凝胶及其在保温隔热领域应用进展[J]. *化工进展*, 2023, 42(1): 297–309.]
- [7] Gao Tao, Jelle B P, Gustavsen A, et al. Aerogel-incorporated concrete: An experimental study[J]. *Construction and Building Materials*, 2014, 52: 130–136.
- [8] Liu Zhaohui, Ding Yidong, Wang Fei, et al. Thermal insulation material based on SiO₂ aerogel[J]. *Construction and Building Materials*, 2016, 122: 548–555.
- [9] Ng S, Jelle B P, Sandberg L I C, et al. Experimental investigations of aerogel-incorporated ultra-high performance concrete[J]. *Construction and Building Materials*, 2015, 77: 307–316.
- [10] Lv Yang. Analysis of thermal conductivity and influence factor of aerogel-incorporated concrete based on multi-scale[D]. Chongqing: Chongqing Jiaotong University, 2024. [吕洋. 基于多尺度的气凝胶混凝土导热系数及其影响因素研究[D]. 重庆: 重庆交通大学, 2024.]
- [11] Gamil Y. Machine learning in concrete technology: A review of current researches, trends, and applications[J]. *Frontiers in Built Environment*, 2023, 9: 1145591.
- [12] Khambra G, Shukla P. Novel machine learning applications on fly ash based concrete: An overview[J]. *Materials Today: Proceedings*, 2023, 80: 3411–3417.
- [13] Khan K, Ahmad W, Amin M N, et al. A systematic review of the research development on the application of machine learning for concrete[J]. *Materials*, 2022, 15(13): 4512.
- [14] Ladygina P, Samochadin A, Voinov N, et al. Predicting concrete compressive strength using machine learning[C]// *Advanced Manufacturing and Automation XI*. Singapore: Springer, 2022: 450–457.
- [15] Xu Xiaohang, Hu Zhangli, Liu Jiaping, et al. Concrete strength prediction of the three gorges dam based on machine learning regression model[J]. *Materials Reports*, 2023, 37(2): 45–53. [徐潇航, 胡张莉, 刘加平, 等. 基于机器学习回归模型的三峡大坝混凝土强度预测[J]. *材料导报*, 2023, 37(2): 45–53.]
- [16] Zhang Wei, Lee D, Lee J, et al. Residual strength of concrete subjected to fatigue based on machine learning technique[J]. *Structural Concrete*, 2022, 23(4): 2274–2287.
- [17] Ukwaththa U J, Liyanarachchi T S D, Kulasooriya W K V J B, et al. Use of interpretable machine learning methods to predict the fundamental period of masonry infilled reinforced concrete frame structures[C]// *Proceedings of the 2024 Moratuwa Engineering Research Conference (MER-Con)*. Moratuwa: IEEE, 2024: 127–132.
- [18] Dai Lichao, Wang Chong, Yuan Ping, et al. Prediction model for shear capacity of corroded RC beams based on interpretable machine learning[J]. *Journal of Jilin University (Engineering and Technology Edition)*, 2024, 54(11): 3231–3243. [戴理朝, 王冲, 袁平, 等. 基于可解释机器学习的锈蚀RC构件抗剪承载力预测模型[J]. *吉林大学学报(工学版)*, 2024, 54(11): 3231–3243.]
- [19] Zhou Shuai, Jia Yue, Li Kai, et al. Mix proportion optimization of Ultra-high performance concrete based on machine learning[J]. *Journal of Tongji University (Natural Science)*, 2024, 52(7): 1018–1023. [周帅, 贾跃, 李凯, 等. 基于机器学习的超高性能混凝土成本优化[J]. *同济大学学报(自然科学版)*, 2024, 52(7): 1018–1023.]
- [20] Liu Yanning. High-performance concrete strength prediction based on machine learning[J]. *Computational Intelligence and Neuroscience*, 2022, 2022: 5802217.
- [21] Wang Wenhui, Zhong Yihui, Liao Gang, et al. Prediction of compressive strength of concrete specimens based on interpretable machine learning[J]. *Materials*, 2024, 17(15): 3661.
- [22] Nguyen M H, Nguyen T A, Ly H B. Ensemble XGBoost schemes for improved compressive strength prediction of UHPC[J]. *Structures*, 2023, 57: 105062.
- [23] Han Fenglei, Lv Yang, Liu Yan, et al. Exploring interpretable ensemble learning to predict mechanical strength and thermal conductivity of aerogel-incorporated concrete[J]. *Construction and Building Materials*, 2023, 392: 131781.
- [24] Lyngdoh G A, Zaki M, Anoop Krishnan N M, et al. Prediction of concrete strengths enabled by missing data imputation and interpretable machine learning[J]. *Cement and Concrete Composites*, 2022, 128: 104414.
- [25] Liu Tingbin, Huang Tao, Ou Jiayang, et al. Prediction method of bond strength of corroded reinforced concrete at high temperature based on ANN and XGB algorithm[J]. *Engineering Mechanics*, 2024, 41(Supp1): 300–309. [刘廷滨, 黄滔, 欧嘉祥, 等. 基于ANN和XGB算法的锈蚀钢筋混凝土高温粘结强度预测方法[J]. *工程力学*, 2024, 41(增刊1): 300–309.]
- [26] Wang Fei, Liu Zhaohui, Deng Zhiping, et al. Effect on the performance of mortar using different volume content of SiO₂ aerogel[J]. *Journal of Functional Materials*, 2016, 47(4): 4064–4069. [王飞, 刘朝辉, 邓智平, 等. 不同体积掺量的

- SiO₂气凝胶对砂浆性能的影响[J]. 功能材料,2016,47(4):4064–4069.]
- [27] Feng Jincai, Li Tao, Liu Wengying. Experimental study on influence of aggregate contents on properties of silica aerogel thermal insulation mortar[J]. Journal of Changzhou University(Natural Science Edition), 2019, 31(2): 88–92. [封金财, 李涛, 刘文影. 骨料掺量对硅气凝胶砂浆性能的实验研究[J]. 常州大学学报(自然科学版), 2019, 31(2): 88–92.]
- [28] Yang Yuxiang. Preparation and performance study of nanoparticles aerogel-cement-based materials[D]. Lanzhou: Lanzhou Jiaotong University, 2023. [杨玉祥. 纳米气凝胶水泥基材料制备及性能研究[D]. 兰州: 兰州交通大学, 2023.]
- [29] Zhu Pinghua, Yu Shuqi, Cheng Cheng, et al. Durability of silica aerogel cementitious composites—freeze–thaw resistance, water resistance and drying shrinkage[J]. Advances in Cement Research, 2020, 32(12): 527–536.
- [30] Wang Xinjie, Xu Donghang, Zhu Pinghua, et al. Effect of curing temperature on tunnel fire insulation of aerogel cement paste coatings[J]. Journal of Wuhan University of Technology—Mater Science, 2021, 36(1): 93–102.
- [31] Zhou Ronglai, Chen Hao, Zhang Mei, et al. Study on SiO₂ aerogel insulation mortar and its mechanical properties[J]. Jiangsu Construction, 2018, (Suppl): 62–65. [周荣来, 陈浩, 张梅, 等. SiO₂气凝胶保温砂浆及力学性能的研究[J]. 江苏建筑, 2018, (增刊 1): 62–65.]
- [32] Han Fenglei, Liu Yan, Liu Tao, et al. Experimental study on the influence of silica aerogel on the properties of superfine-cement composites[J]. Materials Reports, 2023, 37(15): 97–103. [韩风雷, 刘艳, 刘涛, 等. SiO₂气凝胶对超细水泥基材料性能影响的试验研究[J]. 材料导报, 2023, 37(15): 97–103.]
- [33] Liu Tao. Study on prediction model of physical and mechanical properties and thermal conductivity of SiO₂ aerogel-incorporated concrete[D]. Chongqing: Chongqing Jiaotong University, 2022. [刘涛. SiO₂气凝胶混凝土物理力学性能及导热系数预测模型研究[D]. 重庆: 重庆交通大学, 2022.]
- [34] Zhu Pinghua, Sun Yuanqian, Feng Jincai, et al. Experimental study on the influence of particle size of the SiO₂ aerogel on properties of silica aerogel tunnel fireproof mortar[J]. Concrete, 2017(12): 132–135. [朱平华, 孙远乾, 封金财, 等. SiO₂气凝胶粒径对隧道防火砂浆性能影响的试验研究[J]. 混凝土, 2017(12): 132–135.]
- [35] Zhu Pinghua, Brunner S, Zhao Shanyu, et al. Study of physical properties and microstructure of aerogel-cement mortars for improving the fire safety of high-performance concrete linings in tunnels[J]. Cement and Concrete Composites, 2019, 104: 103414.
- [36] Liu Zhaohui, Ding Yidong, Wang Fei, et al. Thermal insulation material based on SiO₂ aerogel[J]. Construction and Building Materials, 2016, 122: 548–555.
- [37] Liu Zhaohui, Ding Yidong, Wang Fei, et al. Influences of KH550 Modified SiO₂ Aerogel on Mortar Property[J]. Equipment Environmental Engineering, 2017, 14(1): 71–77. [刘朝辉, 丁逸栋, 王飞, 等. KH550 改性 SiO₂ 气凝胶及其掺杂对砂浆性能的研究[J]. 装备环境工程, 2017, 14(1): 71–77.]
- [38] Yu Bentian, Yang Yuxiang, Liu Jiang, et al. Study on properties and freeze-thaw deterioration of modified SiO₂ aerogel cement-based composite mortar[J]. Materials Reports, 2023, 37(23): 41–46. [于本田, 杨玉祥, 刘江, 等. 改性 SiO₂ 气凝胶水泥基复合砂浆性能及冻融损伤研究[J]. 材料导报, 2023, 37(23): 41–46.]

Prediction Method for the Mechanical and Thermal Insulation Properties of Aerogel Concrete Based on the BO–XGBoost Algorithm

XIONG Feng^{1,2,3}, CHEN Tengsheng³, DENG Chubing³, LI Yunfei³, ZENG Yi^{1,3*}

(1. Key Laboratory of Deep Earth Science and Engineering (Sichuan University), Ministry of Education, Chengdu 610065, China;

2. Sichuan Provincial Key Laboratory of Damage Mechanics and Engineering Disaster Prevention and Mitigation, Sichuan University, Chengdu 610065, China;

3. College of Architecture and Environment, Sichuan University, Chengdu 610065, China)

Abstract:

Objective Accurately predicting the compressive strength and thermal conductivity of aerogel concrete with different mix ratios is essential. Conventional performance prediction methods involve repeatedly designing mix ratios and measuring performance in the laboratory, which requires substantial manpower and time. Alternatively, formula-based or statistical methods are employed to obtain optimal performance; however, the empirical formulas derived from these methods demonstrate low accuracy, remain highly dependent on specific experiments, and cannot be generalized or applied to other cases. This study proposes an aerogel concrete performance prediction model based on the Extreme Gradient Boosting (XGBoost) algorithm, which enables a clearer understanding of the nonlinear relationships between the components and the performance of aerogel concrete.

Methods First, relevant data were collected from research literature to construct a database containing 183 sets of compressive strength data and 152 sets of thermal conductivity data. The input features primarily consisted of mix ratios of materials such as cement, while the output features

represented the performance of aerogel concrete, specifically compressive strength and thermal conductivity. Second, the XGBoost algorithm was employed for model training and performance prediction, and evaluation metrics such as the coefficient of determination (R^2) and root mean square error (RMSE) were utilized to assess the model's accuracy. The Bayesian optimization algorithm was applied to determine the optimal hyperparameters of the XGBoost model to enhance prediction reliability and reduce overfitting. Third, since the model contained two types of input methods, one approach used the amounts of materials such as aerogel, cement, silica fume, sand, and water as input variables, while the other used interpretable features such as the water-to-binder ratio, aggregate ratio, aerogel content, silica fume content, and curing age as input variables. The model also generated two output results, compressive strength and thermal conductivity. Three comparison schemes were designed, and their prediction accuracy and performance were assessed using the same database to compare the two input methods and to evaluate the strategies of "building one model to predict both performances" versus "building two models to predict the performances separately". Fourth, to demonstrate the advantages of the BO-XGBoost algorithm in predicting aerogel concrete performance, comparisons were conducted with multiple classical machine learning algorithms, including Random Forest (RF) and Artificial Neural Networks (ANN). For objectivity, all algorithms used the same unified database and underwent Bayesian optimization for hyperparameter tuning. Fifth, to investigate the generalization capability of the BO-XGBoost model, it was applied to predict the performance of 12 new sets of aerogel concrete data, and the prediction accuracy of the model was observed. Finally, since machine learning models were inherently "black boxes," making it challenging to characterize complex non-linear relationships between input and output variables, the Shapley Additive Explanations (SHAP) model was employed for feature interpretability analysis, calculating the contribution of each feature to the model's predictions and explaining the relationships between input features and output results.

Results and Discussions 1) The analysis of the prediction accuracy of models established under the three schemes revealed that all three schemes achieved high accuracy in predicting the performance of aerogel concrete, with R^2 values greater than 0.92 for the test set. The model under Scheme 1 yielded the best results, with R^2 values of 0.977 and 0.978 for compressive strength and thermal conductivity, respectively, and RMSE values of 2.366 MPa and 0.104 0.128 W/(m·K). 2) When compared to four other traditional machine learning algorithms, the XGBoost model was shown to be more suitable for predicting the performance of aerogel concrete. The compressive strength and thermal conductivity models based on the XGBoost algorithm achieved R^2 values of 1.000 and 0.992 for the training set, and R^2 values of 0.977 and 0.978 for the test set. In contrast, the R^2 values of the test set for RF, ANN, and other classical algorithms were all below 0.963, indicating poor fitting accuracy and significant overfitting, which rendered them unsuitable for predicting aerogel concrete performance. 3) The generalization ability of the model was verified using 12 new sets of aerogel concrete mix ratio data. The R^2 values for compressive strength and thermal conductivity prediction were 0.986 and 0.895, respectively, with RMSE values of 1.539 MPa and 0.128 W/(m·K), demonstrating the model's strong generalization capability. 4) The SHAP model analysis revealed that the primary factors influencing the compressive strength of aerogel concrete are aerogel content and water-to-binder ratio. As the aerogel content and water-to-binder ratio increase, the compressive strength decreases. The primary factors influencing the thermal conductivity of aerogel concrete are also aerogel content and water-to-binder ratio, with higher values leading to reduced thermal conductivity. The results obtained from SHAP analysis are consistent with conclusions drawn from laboratory experiments.

Conclusions This study proposes an XGBoost-based performance prediction model for aerogel concrete, designed to predict both the compressive strength and the thermal conductivity of ordinary aerogel concrete. Compared to conventional empirical fitting formulas, the prediction model exhibited higher accuracy and stronger generalization capacity, presenting a novel approach for predicting performance and designing mix ratios of aerogel concrete.

Key words: aerogel concrete; performance prediction; bayesian optimization; XGBoost algorithm; SHAP interpretability analysis

(编辑 陈 雪)

引用格式: Xiong Feng, Chen Tengsheng, Deng Chubing, et al. Prediction method for the mechanical and thermal insulation properties of aerogel concrete based on the BO-XGBoost algorithm[J]. Advanced Engineering Sciences, 2025, 57(5): 1-13. [熊峰, 陈腾盛, 邓楚兵, 等. 基于BO-XGBoost算法的气凝胶混凝土力学和保温性能预测方法[J]. 工程科学与技术, 2025, 57(5): 1-13.]