

基于机器学习预测铁尾矿混凝土抗压强度的模型构建及评价

刘国涛^{1,2} 杨钦² 谢永生²

1. 广东工业大学土木与交通工程学院; 2. 广东广物金属产业集团有限公司

摘要: 随着我国生态环保要求提高,近年天然砂石开采收紧,利用铁尾矿等大宗固废制备混凝土受到关注。但铁尾矿混凝土的抗压强度预测仍然是较大的难题。基于所收集的219组铁尾矿混凝土抗压强度数据,分别利用三种单一学习方法(线性回归、支持向量机、人工神经网络)和三种集成学习方法(随机森林、梯度提升决策树、极致梯度提升树),以原材料特征、配合比等18个参数为输入变量,铁尾矿混凝土7天和28天抗压强度为输出变量,分别构建六组预测模型并对其预测性能进行对比。结果表明,XGBoost模型的误差最小,预测误差分布集中在[-5, 5]MPa范围内,预测结果最好。

关键词: 铁尾矿; 混凝土; 机器学习

【DOI】 10.12254/j.issn.2096-6539.2024.16.056

引言

尾矿是金属非金属矿山开采出的矿石经选矿厂选出有价值的精矿后产生的固体废物,是我国工业固体废弃物中产量最大的部分,其中铁尾矿产量占尾矿总量40%^[1]。尾矿用于机制砂后应用于建筑领域愈发受到重视,近年关于铁尾矿混凝土的研究大多涉及不同替代比例和配方对混凝土抗压强度的影响^[2-12]。Shettima等^[9]利用天然砂、铁尾矿砂、制得混凝土,发现天然砂被铁尾矿砂取代时,抗压强度最大增加幅度为12.9%。王玉雅等^[4]利用铁尾矿砂代替天然砂制得混凝土,发现混凝土抗压强度随铁尾矿粉的掺量的增加其强度先增加后降低。但铁尾矿混凝土的抗压强度受铁尾矿掺量的变化规律未有统一结论,也未见有关于铁尾矿混凝土抗压强度预测模型。

机器学习因具有无须假设预先建立的方程作为模型的优势,在智能决策上有较大应用,特别近年已应用于混凝土性能的预测中^[13-15]。季韬等^[13]基于人工神经网络的混凝土抗压强度预测方法,建立了混凝土28天抗压强度与混凝土等效水灰比、骨料平均浆体厚度和粉煤灰与胶凝材料用量比之间的非线性映射关系。刘德胜等^[14]以水泥、粉煤灰、砂、碎石和水5种原材料的单位用量作为输入,混凝土28天抗压强度作为输出,分别利用决策树、支持向量机、高斯过程回归等算法构建混凝土抗压强度模型,发现高斯过程回归模型最优,预测误差小于8.95%,具有较高的可靠性。

本文基于机器学习研究性能预测问题的一般流程,针对待解决的“用机器学习方法预测尾矿混凝土抗压强度”的核心问题,开展数据选择、数据预处理、模型建立及比对等工作,以期找到适用于预测铁尾矿混凝土的

抗压强度的模型。

一、数据选择

基于现有关于铁尾矿混凝土抗压强度研究的论文中,主要研究铁尾矿混凝土7天和28天的抗压强度及其影响因素,包括混凝土原材料、铁尾矿组成、配合比以及水胶比等。检索到数据较全面的论文有11篇^[2-12],共219组数据,作为机器学习的样本库。

二、数据预处理和分析

根据上述情况,得到机器学习模型的输入参数和输出参数为:

(1) 输入参数(自变量): 水泥类型,碎石类型,粉煤灰级别,矿渣粉级别,细度模数,Fe₂O₃, MgO, Al₂O₃, CaO, 水泥,粉煤灰,矿渣粉,铁尾矿砂(粉),砂,石,水,减水剂,水胶比。

(2) 输出参数(因变量): 7天抗压强度和28天抗压强度。

分析输入输出参数的特征,汇总各参数的最大值,最小值,平均值,中位数,标准差指标如表1所示。

表1 输入输出参数统计学分析

输入、输出参数	代号	均值	中位数	最大值	最小值	标准差
水泥类型	T-cement	41.632	42.500	42.500	32.500	2.821
碎石类型	T-CA	23.509	20.000	31.500	20.000	4.697
粉煤灰级别	T-ash	0.704	1.000	1.000	0.000	0.434
矿渣粉级别	T-slag	0.808	1.000	1.000	0.000	0.395
细度模数	FM	2.163	2.520	3.300	0.940	0.779
Fe ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	0.135	0.129	0.198	0.024	0.050
MgO	MgO	0.052	0.048	0.080	0.000	0.022
Al ₂ O ₃	Al ₂ O ₃	0.096	0.112	0.170	0.041	0.031
CaO	CaO	0.082	0.043	0.174	0.016	0.053
水泥	cement	298.300	291.000	550.000	176.000	96.454
粉煤灰	ash	55.265	72.000	144.000	0.000	42.318
矿渣粉	slag	73.119	94.000	200.000	0.000	47.252
铁尾矿砂(粉)	tailings	501.449	674.000	920.000	0.000	312.603
砂	FA	250.441	0.000	838.000	0.000	300.342
石	CA	1076.361	1058.000	1324.400	906.000	71.235
水	Water	172.141	173.000	205.000	131.000	15.124
减水剂	WR	4.742	2.560	30.000	0.000	5.412
水胶比	w/b	0.405	0.400	0.610	0.300	0.067
7d 抗压强度	cs-7d	35.756	33.700	67.800	17.000	9.721
28d 抗压强度	cs-28d	51.460	49.900	73.700	26.400	10.217

三、模型建立及评价指标

(一) 模型超参数确定及构建

本文选择三种常规的单一学习方法（线性回归LR、支持向量机回归SVR和人工神经网络ANN）和三种集成学习方法（随机森林RF、梯度提升决策树GBDT、极致梯度提升树XGBoost）用于分别构建铁尾矿砂混凝土7天和28天抗压强度的预测模型。通过网格搜索法^[16]，利用5折交叉验证对上述5种模型进行训练，以模型的预测值相关系数 R^2 最大情况下的参数为最终最优超参数组合。按训练集和测试集以3：1的比例划分，得到含165组数据的训练集，54组数据的测试集，分别构建预测混凝土7天和28天抗压强度的机器学习模型。

(二) 模型评价指标

利用不同的算法以训练集得到模型后对测试集进行测试，会得到模型输出值 \hat{y} 与测试集实际值 y 之间的统计学关系，考虑到本论文研究回归问题，评价指标采用相关系数（ R^2 ）、平均绝对误差（MAE）、均方根误差（MSE）以及误差分布。

四、模型对比

(一) 7天抗压强度预测情况对比

利用上述六种模型得到预测7天抗压强度的结果与真实值的差异（见图1）。经对比，集成学习方法的预测结果比单一学习方法的预测结果要更贴近真实值，其中XGBoost和GBDT的要稍优于RF，特别在于抗压强度在50MPa以下的尾矿混凝土的预测效果均较好，与真实值的误差较小，基本在 ± 4 MPa以内。且从预测误差分布可

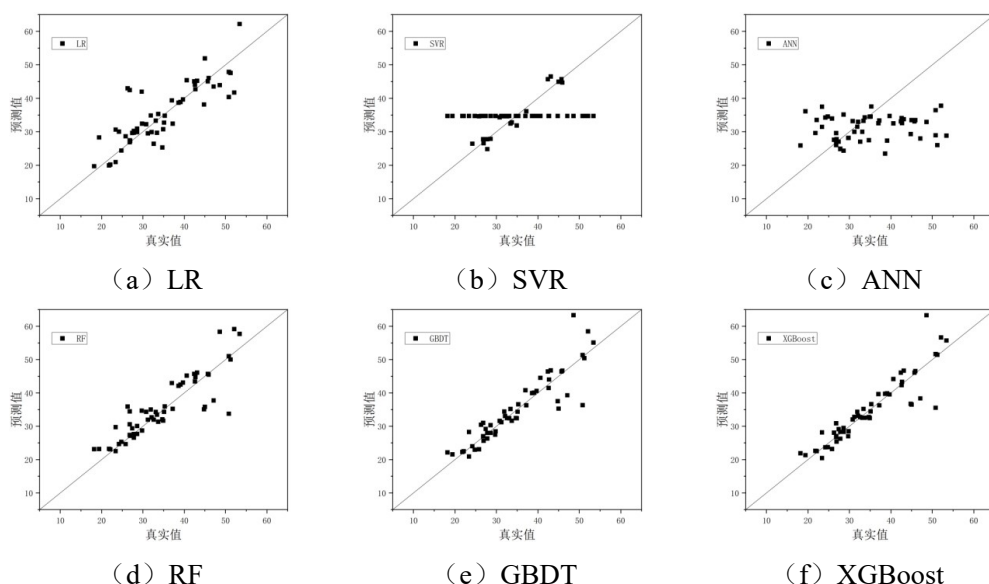


图1 7天抗压强度各模型预测情况（测试集）

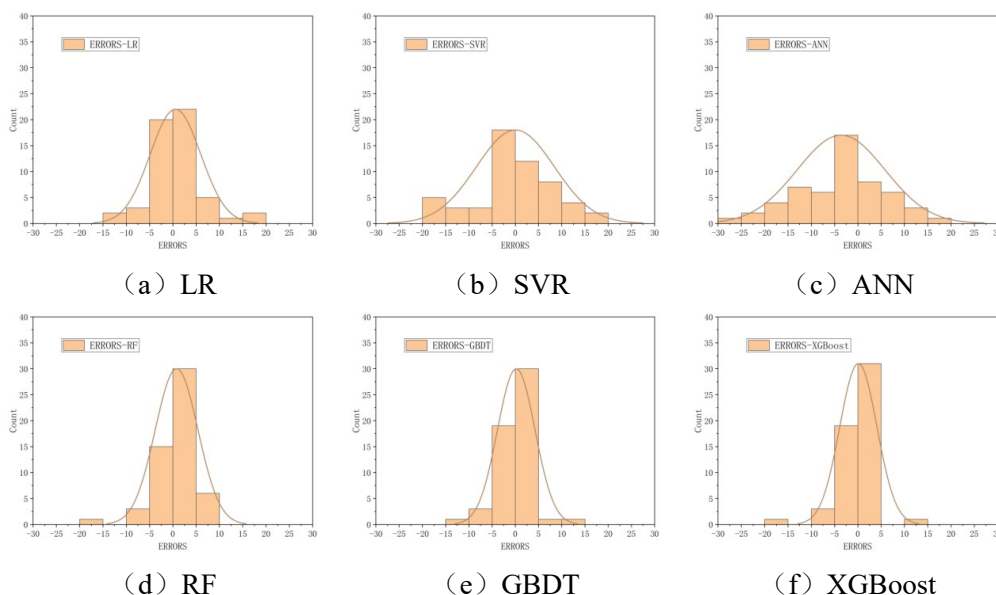


图2 各模型预测7天抗压强度的误差分布（测试集）

可以看出，XGBoost的误差分布最窄（见图2）。

（二）28天抗压强度预测情况对比

与预测7天抗压强度相比，XGBoost和GBDT模型预测28天抗压强度在50MPa以上有一定的改善，表现出模型对于预测尾矿混凝土抗压强度在7天和28天两个龄期都有不错的效果。而RF的误差相对XGBoost和GBDT仍较大，误差的出现较为随机。而单一学习模型并未有所改善，甚至出现更大的预测误差，如ANN的预测误差值甚至超过真实值。

（三）结果对比

从相关系数、误差大小（表2）以及置信区间大小可以得到机器学习模型在预测尾矿混凝土7天和28天抗压强度时，模型优劣存在以下特征：XGBoost>GBDT>RF>LR>SVR>ANN。

表2 各模型评价指标对比情况

	模型	R ²	MSE	MAE	RSE
7天抗压强度	LR	65.3%	29.235	3.822	5.407
	ANN	-19.6%	100.683	7.654	10.034
	SVR	17.6%	69.34	6.254	8.327
	RF	74.6%	21.42	3.196	4.628
	GBDT	80.8%	16.184	2.58	4.023
	XGBOOST	81.4%	15.699	2.437	3.962
28天抗压强度	LR	71.46%	28.732	3.859	5.36
	ANN	-1669.14%	1780.893	38.508	42.201
	SVR	17.85%	82.697	7.006	9.094
	RF	77.29%	22.863	3.199	4.782
	GBDT	84.03%	16.077	2.775	4.01
	XGBOOST	84.82%	15.276	2.733	3.908

五、结语

本文在明确输入输出参数和特征分布规律基础上，分别利用三种单一机器学习方法（LR、SVR和ANN）和三种集成学习方法（RF、GBDT和XGBoost）构建预测铁尾矿混凝土7天和28天抗压强度的机器学习模型，并且利用五折交叉网络搜索对各模型的超参数进行了优化。利用模型预测值与真实值对比，结合相关系数指标、误差指标大小、误差值分布情况等分析，得到模型在20-50MPa抗压强度范围内，集成学习方法构建的模型能够较好的预测结果，其中XGBoost模型是效果最优的方法（R²=84.82%，MAE为2.73MPa，预测误差集中分布在[-5, 5]MPa范围内）。

参考文献

[1] 易龙生, 米宏成, 吴倩, 等. 中国尾矿资源综合利用现状[J]. 矿产保护与利用, 2020 (3): 79-84.

[2] 侯云芬, 赵思儒. 铁尾矿粉对混凝土性能的影响研究[J]. 粉煤灰综合利用, 2015 (3): 17-20.

[3] 田景松. 铁尾矿砂混凝土的配制与应用研究[D]. 清华大学, 2010.

[4] 王玉雅, 韩守杰, 韩欣, 等. 铁尾矿砂对C50混凝土力学性能的影响[J]. 新型建筑材料, 2018, 45 (8): 108-110.

[5] 蔡基伟, 张少波, 侯桂香, 等. 铁尾矿砂对混凝土工作性和强度的影响[J]. 武汉理工大学学报, 2009, 31 (7): 104-107.

[6] 李涛, 党斌. 不同取代类型铁尾矿混凝土抗压性能试验研究[J]. 河北工业科技, 2016, 33 (3): 240-245.

[7] 王艳艳, 陈瑛, 廖琳等. 铁尾矿砂配制混凝土的应用探析[J]. 安徽建筑, 2022, 29 (8): 79-81.

[8] 徐国强, 于庆坤, 杨小杰. 尾矿砂掺量对C30路用混凝土性能的影响[J]. 华北理工大学学报, 2016, 38 (3): 120-123.

[9] A. U. Shettima, M. W. Hussin, Y. Ahmad, J. Mirza. Evaluation of iron ore tailings as replacement for fine aggregate in concrete. Construction and Building Materials. 120 (2016): 72 - 79.

[10] 贺鑫鑫. 铁尾矿机制砂混凝土配合比设计及性能研究[D]. 北京建筑大学, 2023.

[11] 赵鹏. 铁尾矿用于水泥混凝土路面的性能研究[J]. 黑龙江交通科技. 2021 (1): 3-7.

[12] 李涛, 党斌, 李传博, 等. 性能增强铁尾矿砂混凝土抗压性能试验研究[J]. 建筑技术, 2017, 48 (1): 58-61.

[13] 季韬, 林挺伟, 林旭健. 基于人工神经网络的混凝土抗压强度预测方法[J]. 建筑材料学报, 2005, 8 (6): 677-681.

[14] 刘德胜. 基于机器学习算法的混凝土28天抗压强度预测[J]. 混凝土与水泥制品, 2022, 22 (9): 20-24.

[15] 郭园园, 原慧敏, 冯飞, 等. 基于PSO-GBDT模型的再生混凝土抗压强度预测[J]. 科技创新与应用, 2023, 13 (30): 64-67.

[16] 陈曦泽, 贾俊峰, 白玉磊, 等. 基于XGBoost-SHAP的钢管混凝土柱轴向承载力预测模型[J]. 浙江大学学报, 2023, 57 (6): 1061-1070.

作者简介: 刘国涛, 1988年7月4日, 男, 汉族, 广东省, 博士研究生, 广东工业大学土木与交通工程学院, 博士后, 研究方向: 绿色建材制备。