

Искусственный интеллект в материаловедении и современных технологиях бетонных материалов: анализ возможностей и перспектив

В. А. Полуэктова, М. А. Полуэктов

Представлен анализ актуальных тенденций и возможностей применения искусственного интеллекта в материаловедении и технологии бетона, включая строительную 3D-печать. Отмечена ключевая роль искусственного интеллекта в прогнозировании свойств материалов, разработке новых материалов и контроле качества. Искусственный интеллект, анализируя большие объемы данных, способен предлагать оптимальные параметры для достижения заданных свойств материалов, что позволяет снизить издержки и повысить производственную эффективность. Существующие реологические модели, описывающие поведение материала на основе определенных уравнений и параметров. Эти модели могут быть полезны при прогнозировании свойств бетона, особенно если имеются данные о его компонентном составе. Однако, эти модели могут быть ограничены в точности прогнозирования, особенно для нестандартных или новых материалов. Машинное обучение способно обеспечить точное прогнозирование реологических и физико-механических свойств бетонных материалов. Алгоритмы машинного обучения, такие как XGBoost, LightGBM, Catboost и NGBoost, демонстрируют высокую точность прогнозирования и становятся мощным инструментом в области проектирования состава и инновационных бетонных технологий, а анализ аддитивных объяснений Шепли (SHAP) позволяет понять, какие параметры бетонной смеси оказывают наибольшее влияние на его характеристики.

Ключевые слова: искусственный интеллект, нейросети, машинное обучение, материаловедение, аддитивные технологии, 3D-печать бетоном, оптимизация, прогнозирование свойств, инновации.

DOI: 10.30791/1028-978X-2024-1-5-19

Введение

Искусственный интеллект (ИИ) является одной из самых быстроразвивающихся технологий. Его широко применяют в различных сферах науки и техники, включая медицину, финансы, транспорт и т.д. Одна из областей применения, это строительное материаловедение, а также печать зданий и сооружений бетоном. ИИ может использоваться для прогнозирования свойств и поведения бетона в различных условиях эксплуатации, что позволит инженерам и строителям предвидеть возможные проблемы и принять соответствующие меры для их предотвращения. ИИ может быть использован для оптимизации процесса печати зданий бетоном, позволяя автоматически регулировать параметры печати для достижения наилучших результатов.

Приведем определение следующих понятий:

Аддитивное материаловедение — наука, изучающая процессы послойного добавления материалов для создания новых изделий.

Искусственный интеллект (ИИ) — область компьютерной науки, связанная разработкой систем и алгоритмов, которые придают компьютерам способность выполнять задачи, требующие интеллектуальных способностей, анализа данных, принятия решений и обучения на основе опыта.

Одним из ключевых элементов ИИ является машинное обучение (machine learning — ML). Этот подход позволяет компьютерам “учиться” на основе данных, без явного программирования. Вместо жестких инструкций, программисты создают модели, которые способны обучаться. Одним из типов алгоритмов машинного обучения, являются ней-

ронные сети. Эти алгоритмы состоят из множества связанных “нейронов”, способных анализировать данные и выявлять закономерности. Нейронные сети позволяют решать сложные задачи, которые ранее представлялись невозможными для автоматизации.

Рассмотрим применение машинного обучения, включая нейронные сети, в контексте материаловедения и инновационных технологий бетонных материалов, а также, как эти методы могут быть использованы для анализа и оптимизации составов бетонных смесей, прогнозирования и контроля механических свойств бетона, и как они способствуют совершенствованию современных строительных технологий.

Анализ коллоидно-химических закономерностей и структурообразования в дисперсных материалах, таких как бетон, может быть проведен с использованием ИИ, который обрабатывает большие объемы данных о составе и свойствах материалов, а также о физических и химических процессах, происходящих в процессе формирования коагуляционной и конденсационно-кристаллизационной структуры.

Исследования в области использования искусственного интеллекта для прогнозирования реологических и физико-механических свойств на базе данных о составе и структуре актуальны и проводятся учеными и исследовательскими группами разных стран мира (рис. 1).

С помощью алгоритмов машинного обучения и статистического анализа, ИИ может выявлять

закономерности и связи между различными параметрами материала и его структурообразованием. Например, ИИ может определить оптимальные соотношения компонентов в бетонной смеси для достижения определенных реологических свойств, таких как вязкость или текучесть. Также ИИ может помочь в анализе влияния различных добавок и примесей на структуру и свойства материала. Например, он может предсказывать, как добавление определенного вещества повлияет на реологические свойства бетона или его прочность.

Цель данного исследования — анализ возможностей и перспектив использования искусственного интеллекта в материаловедении и современных технологиях бетона, включая аддитивное материаловедение, задачей которого является проектирование материалов для строительной 3D-печати бетоном.

Материалы и методика исследования

Для анализа и структурирования научных данных, связанных с использованием ИИ в материаловедении и современных технологиях бетонных материалов была использована систематическая методика, включающая следующие этапы: идентификация ключевых слов, поиск и отбор литературы с использованием мировых баз данных, таких как Scopus, PubMed, IEEE Xplore, Google Scholar и других, систематизация и ранжирование данных с учетом актуальности и релевантности, структурирование материала по тематическим категориям:

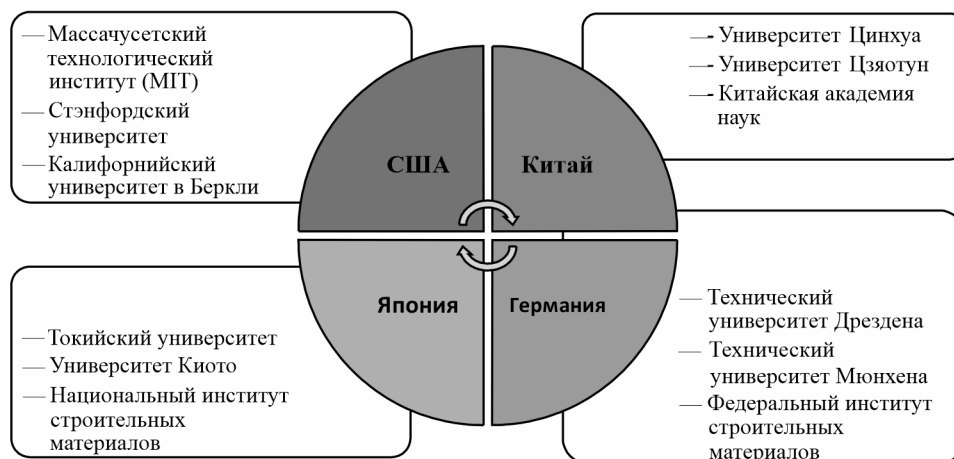


Рис. 1. Мировые центры исследований проблематики использования ИИ для прогнозирования реологических и физико-механических свойств на базе данных о составе и структуре.

Fig. 1. Global research centers in the field of AI-based prediction of rheological and mechanical properties using data on composition and structure.

применение ИИ для анализа и прогнозирования коллоидно-химических (в том числе реологических) свойств дисперсных материалов, применение ИИ в строительном материаловедении и 3D-печати бетоном, применение ИИ для изучения, анализа и прогнозирования физико-механических свойств бетонов, включая оптимизацию производства бетонных материалов, контроль свойств, а также разработку новых дисперсных материалов.

Результаты и их обсуждение

Применение ИИ для анализа и прогнозирования реологических свойств дисперсных материалов

За последние 20 лет были разработаны новые технологии, которые могут повысить производительность строительной отрасли за счет улучшения контроля реологических свойств бетонов, таких как самоуплотняющийся бетон [1], слоистый бетон [2] и бетон, напечатанный на 3D-принтере [3 – 8]. Материалы на основе цемента можно рассматривать как концентрированные коллоидные суспензии с твердыми частицами, диспергированными в водных растворах [9 – 11], которые ведут себя как текучие жидкости [12 – 14]. Эти жидкости деформируются упруго, если приложенное напряжение ниже предельного напряжения сдвига, известного как предел текучести, и текут как жидкость, если приложенное напряжение выше предела текучести. Стоит разграничивать статические и динамические напряжения текучести, которые соответствуют напряжению сдвига, и инициируют течение, и наименьшему напряжению сдвига, необходимому для поддержания потока соответственно [2].

Статический предел текучести в состоянии покоя со временем увеличивается, этот процесс обычно называют структурным наращиванием. Рост статического предела текучести значительно влияет на возводимость обычных бетонных конструкций, бетона, напечатанного на 3D-принтере и самоуплотняющегося бетона. Изучение и прогнозирование роста статического предела текучести очень важно для обеспечения успеха инновационных бетонных технологий.

Рост статического предела текучести с течением времени имеет две стадии: стадию линейного роста, а затем стадию экспоненциального роста. Обычные статистические методы применяли при создании аналитических выражений для прогнозирования влияния свойств вяжущих материалов, состава смеси и температуры на линейный рост статического предела текучести смешанных цемент-

ных паст. Кроме того, разработаны аналитические модели, способные прогнозировать экспоненциальный рост статического предела текучести на основе кинетических параметров гидратации чистых цементных смесей. Тем не менее, из работы [2] можно сделать вывод, что регрессионные модели, способные предсказать влияние свойств материала и параметров конструкции первичной смеси на обе стадии роста статического предела текучести (то есть линейного и экспоненциального) цементного теста с добавками, еще не изучены. Следовательно, использование методов, способных обрабатывать сложные взаимосвязи между входными и выходными переменными, например, предоставляемых машинным обучением, оправдано необходимостью создания точной модели для прогнозирования статического предела текучести.

Реология бетона связана с его деформацией и текучестью. Это включает измерение предельного напряжения и пластической вязкости при разных скоростях сдвига и времени. Поэтому характеристика свойств бетонной смеси в терминах реологии предоставляет эффективный инструмент для контроля требуемой текучести в 3D-печати бетоном [15]. Исследования показали, что реологические свойства могут эффективно характеризовать и контролировать свойства бетонной смеси лучше, чем одноточечные эмпирические тесты, такие как, например, определение усадки. Реологию можно описать в терминах кривых течения, которые связывают касательное напряжение с разными скоростями сдвига для линейного и нелинейного течения [16].

Кривые течения соответствуют различным математическим моделям, связывающим напряжение сдвига τ и градиент скорости сдвига $\dot{\gamma}$. Как правило, вязкоупругие материалы должны преодолеть определенное значение предела текучести τ_0 , чтобы инициировать течение. После начала течения напряжение τ и скорость сдвига, показывают прямую зависимость. Наклон кривой течения (прямолинейного участка) определяет пластическую вязкость η_{melt} . Чаще всего поведение цементных смесей описывают в соответствии с моделью Бингама

$$\begin{aligned} \tau &= \tau_0 + \eta_{melt} \dot{\gamma}, \\ \tau &\geq \tau_0, \end{aligned} \quad (1)$$

где τ — напряжение сдвига (приложенное давление), Па; τ_0 — предельное напряжение сдвига (предел текучести), Па; η_{melt} — пластическая вязкость, Па·с; $\dot{\gamma}$ — скорость деформации (градиент скорости сдвига), s^{-1} [17]. Однако, для сильно псевдопластичных смесей с модифицирующей добав-

кой, изменяющей вязкость, и дополнительными вязкими материалами модель Бингама наименее соответствует экспериментальным данным, и признана некорректной в случае нелинейной части. В [18] также отмечена нелинейная зависимость между крутящим моментом и скоростью вращения для высококонцентрированных дисперсий (густых смесей), и даже модель Бингама давала отрицательные значения для напряжения сдвига, что невозможно. Таким образом, было обнаружено, что модель Бингама не подходит для предсказания свойств потока в случае нелинейности.

Чтобы преодолеть ограничения модели Бингама, в работе [19] Гершель-Балкли представил модель для соответствия реологическим свойствам вязкопластичных жидкостей Бингама в нелинейной части. Модель Гершеля-Балкли, объединяет в себе свойства модели степенного закона Оствальда де Вилля

$$\tau = k\dot{\gamma}^n, \quad (2)$$

и вязкопластической модели Бингама (1).

Математически модель Гершеля-Балкли представлена уравнением

$$\tau = \tau_0 + k\dot{\gamma}^n, \quad (3)$$

где k — показатель консистентности, Па·с ^{n} , а n — показатель псевдопластичности, который показывает отклонение от модели Бингама. Дилатантное поведение — это поведение смеси в виде загустевания, вязкость которой увеличивается с повышением скорости сдвига, в то время как для тиксотропного поведения вязкость уменьшается в случае разжижения при росте скорости сдвига. Модель Гершеля-Балкли эффективно описывает загустение цементного теста при малых скоростях сдвига (рис. 2). Для увеличения вязкости при сдвиге значение n больше 1, тогда как значение $n < 1$

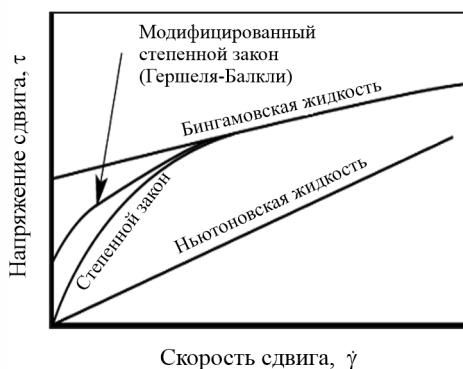


Рис. 2. Сравнение реологических моделей.

Fig. 2. Comparison of Rheological Models.

показывает разжижающее поведение дисперсии при сдвиге. Эта модель хорошо описывает течение самоуплотняющихся бетонов. Согласно исследованию [20] были зарегистрированы самые низкие значения предела текучести по модели Гершель-Балкли при сдвиговом разжижении по сравнению с другими.

Реологические модели для одних и тех же экспериментальных данных [21] показывали несоответствие корреляции с математическим выражением. Завышение предела текучести получается при низких скоростях сдвига в случае загустевания смеси при сдвиге. Эта модель оказывается неадекватной для определения нелинейного поведения кривой течения.

Модифицированная модель Бингама с введённым дополнительным линейным членом математического уравнения для преодоления недостатков модели Гершеля-Балкли представлена уравнением

$$\tau = \tau_0 + \eta_{melt}\dot{\gamma} + c\dot{\gamma}^2, \quad (4)$$

где c — параметр второго порядка. Математический член, представленный скоростью сдвига во второй степени, был введен в модель для учета поведения сдвига при загустевании смеси. Поскольку модифицированная модель Бингама была сформулирована для преодоления расхождений как в модели Бингама, так и в модели Гершеля-Балкли, было обнаружено, что она лучше описывает нелинейную часть кривой течения [22].

По сравнению с моделью Гершеля-Балкли модифицированная модель Бингама не имеет члена, содержащего переменную в степени n и не показывает никаких ограничений в математической формулировке для поведения загустевания или разжижения при малых скоростях сдвига. Ограничением для этой модели является то, что жидкость не должна иметь свойство загустевать при сильном сдвиге (дилатантное поведение). Поэтому аппроксимация данных течения ограничивается полиномом второго порядка [21, 22].

В исследовании [23] представлена попытка анализа реологических свойств бетона с использованием методов машинного обучения. В работе для прогнозирования пластической вязкости (η_{melt}) и предельного напряжения (τ_0) бетона с различными составами были использованы методы дерева решений (decision tree — DT) и бэггинг-регрессии (bagging regression — BR). Общее количество данных (смешанных составов бетона) составило 140 для запуска выбранных моделей и получения прогнозных результатов как для η_{melt} так и для τ_0 . Для запуска моделей на обоих выходных переменных



Рис. 3. Схема прогнозирования реологических свойств бетонной смеси с применением ML-алгоритмов [23].

Fig. 3. Prediction scheme for rheological properties of concrete mix using ML Algorithms [23].

(η_{melt} и τ_0) использовались шесть входных переменных (рис. 3).

Результаты показали, что BR была более эффективной в прогнозировании обоих свойств — η_{melt} и τ_0 бетонной смеси, указывая на значения коэффициента детерминации R^2 0,90 и 0,95 соответственно. Тем не менее, результаты η_{melt} (0,90) и τ_0 (0,93) от модели DT также были удовлетворительными. Меньшие значения ошибок, такие как среднеквадратичная ошибка, средняя абсолютная ошибка и указание на высокую производительность BR в прогнозировании.

Анализ чувствительности подтвердил важность каждого компонента, при этом вода и гравий оказали более 50 % влияния на значения η_{melt} в то время как для τ_0 средние и мелкие гравийные частицы оказали влияние более 65%. Статистические проверки и метод скользящего контроля k-fold также подтвердили точность моделей.

Статистические параметры рассчитывают следующим образом:

Коэффициент множественной детерминации (R^2) — это мера соответствия между предсказанными значениями и фактическими наблюдаемыми значениями. R^2 рассчитывается как отношение объясненной дисперсии к общей дисперсии. Объясненная дисперсия — это разница между суммой квадратов разностей между предсказанными значениями и средним значением фактических данных, а общая дисперсия — это сумма квадратов разностей между фактическими значениями и их средним значением. R^2 рассчитывают по формуле:

$$R^2 = 1 - \frac{SSE}{SST},$$

где SSE — объясненная дисперсия, SST — общая дисперсия.

Средняя абсолютная ошибка (Mean absolute error — MAE) — это мера средней абсолютной разницы между предсказанными значениями и фактическими значениями. MAE рассчитывается как сумма абсолютных разностей между предсказанными и фактическими значениями, деленная на количество наблюдений n :

$$MAE = \frac{1}{n} \cdot \sum |\text{предсказанные значения} - \text{фактические значения}|.$$

Среднеквадратичная ошибка (Mean square error — MSE) — это мера средней квадратичной разницы между предсказанными значениями и фактическими значениями. MSE рассчитывается как среднее арифметическое квадратов разностей между предсказанными и фактическими значениями:

$$MSE = \frac{1}{n} \cdot \sum (\text{предсказанные значения} - \text{фактические значения})^2.$$

Для оценки точности используют различные варианты скользящего контроля (cross-validation — CV): LOOCV (leave-one-out CV) или k-фолдовый скользящий контроль. Выбор конкретного типа скользящего контроля осуществляется в зависимости от объема выборки:

1. Leave-One-Out Cross-Validation (LOOCV): этот метод подходит, когда есть небольшая выборка для обучения. LOOCV предоставляет наиболее точную оценку эффективности модели, так как он исключает по одному образцу и проверяет модель на каждом образце. Однако он может быть вычислительно затратным, особенно для больших выборок, и может привести в некоторых случаях к переобучению.

2. K-Fold Cross-Validation: этот метод разбивает выборку на k подвыборок (или “фолдов”) и выполняет k итераций, при каждой из которых один из фолдов используется в качестве тестовой выборки, а остальные — для обучения. K-Fold Cross-Validation более вычислительно эффективен, чем LOOCV, и обычно дает хорошую оценку модели. Он также менее подвержен переобучению. Выбор значения k зависит от объема выборки и вычислительных ресурсов.

Прогнозирование реологических характеристик бетона имеет огромное значение при проектировании самоуплотняющегося бетона (СУБ) (self-compacting concrete — SCC) — это высокоподвижный вид бетона, способный свободно протекать через арматуру без использования механической вибрации и полностью заполнять опалубку без

расплаивания. Это требует точной характеристики его поведения в процессе течения. В настоящее время существует несколько эмпирических тестов для оценки свойств SCC, но не было разработано метода, основанного на искусственном интеллекте, для прогнозирования его реологического поведения (пластической вязкости и текучести) на основе реологических параметров, полученных из эмпирических испытаний, таких как диаметр расплава конуса, соотношение размеров H_2/H_1 при прохождении бетона через прямоугольное отверстие (L-Vox) и время истечения через воронку. Ряд исследований нацелено на разработку таких методов с применением искусственного интеллекта [24].

Эффективное прогнозирование предела текучести на границе раздела фаз и пластической вязкости бетонных смесей является критически важным для обеспечения прокачиваемости материала при экструзии. В исследовании [25] представлена попытка разработки и тестирования метода прогнозирования этих двух ключевых параметров, основанная на данных и алгоритмах машинного обучения. Предложенный метод представляет собой комбинацию метода опорных векторов наименьших квадратов (Least squares support vector machine — LSSVM) и алгоритма оптимизации роя частиц (Particle swarm optimization — PSO). LSSVM используется для построения связи между параметрами бетонной смеси и влияющими на них факторами. Для точной настройки гиперпараметров модели LSSVM используется алгоритм оптимизации PSO, который является метаэвристическим алгоритмом на основе роевого интеллекта. Исследование базируется на наборе данных, включающем 142 экспериментальных теста, который используется для разработки и проверки предложенного гибридного метода. Экспериментальные результаты, оцененные с использованием критерия знакового ранга Уилкоксона, подтверждают, что гибридная модель PSO и LSSVM позволяет достичь прогностических результатов, превосходящих результаты эталонных моделей. Следовательно, данная гибридная модель может представлять собой многообещающую альтернативу для инженеров в задачах проектирования и строительства бетонных конструкций.

В [1] использовали генетическое программирование (ГП) для прогнозирования свойств самоуплотняющихся смесей на основе цемента с использованием четвертичных связующих материалов (метакаолин, зола биомассы и гранитный порошок). ГП показало лучшие результаты, чем

дисперсионный анализ. Параметрический анализ выявил, что увеличение гранитного порошка в смесях негативно влияет на свойства сохранения подвижности, особенно при низком уровне влажности и времени измерения. Это исследование подчеркивает значимость ГП и планирования экспериментов для анализа новых материалов в строительстве.

В [26] были рассмотрены различные модели для прогнозирования реологических свойств цементных паст, содержащих песок и микрокремнезем и проведено сравнение моделей суспензии с прогнозами нейронной сети. Сравнивались модели толщины жидкости, относительной концентрации твердых веществ и различные модели вязкости, такие как модели Кригера и Догерти, Муни, Эйлерса, Робинсона, Чонга и Кемады, а также многослойный перцептрон (multilayer perceptron — MLP). Эти модели использовали для прогнозирования реологических параметров цементных паст, таких как предел текучести и пластическая вязкость. Результаты исследования показали, что MLP продемонстрировала лучшую точность прогнозирования для всех исследованных реологических параметров с коэффициентами детерминации R^2 в диапазоне от 0,84 до 0,91. Другие модели, включая модели толщины жидкости и модели вязкости, показали более низкую точность прогнозирования, с коэффициентами детерминации не превышающими 0,60. Кроме того, исследование выявило, что влияние модели на точность прогнозирования может различаться в зависимости от типа цемента, используемого в матрице, а также применения добавок, что связано с их влиянием на реологические свойства.

Таким образом, реология относится к важному инструменту контроля за свойствами бетонных смесей в случае самоуплотняющегося бетона и бетона для 3D-печати. Путем правильного управления реологическими свойствами можно достичь желаемой прочности бетона на стадии формирования структуры и избежать появления пустот, выделения и сегрегации в самоуплотняющемся бетоне.

Однако существующие методы интеллектуального анализа данных по анализу структуры, например, с применением метода извлечения морфологических признаков с использованием машины опорных векторов по данным сканирующих электронных и оптических микрофотографий, хоть и способны дать достаточно надежные результаты, но на данный момент точность при анализе микроструктур составляет только 50 % (рис. 4 [27]).

Это связано с высокой сложностью субструктур, что требует дальнейших исследований, на-

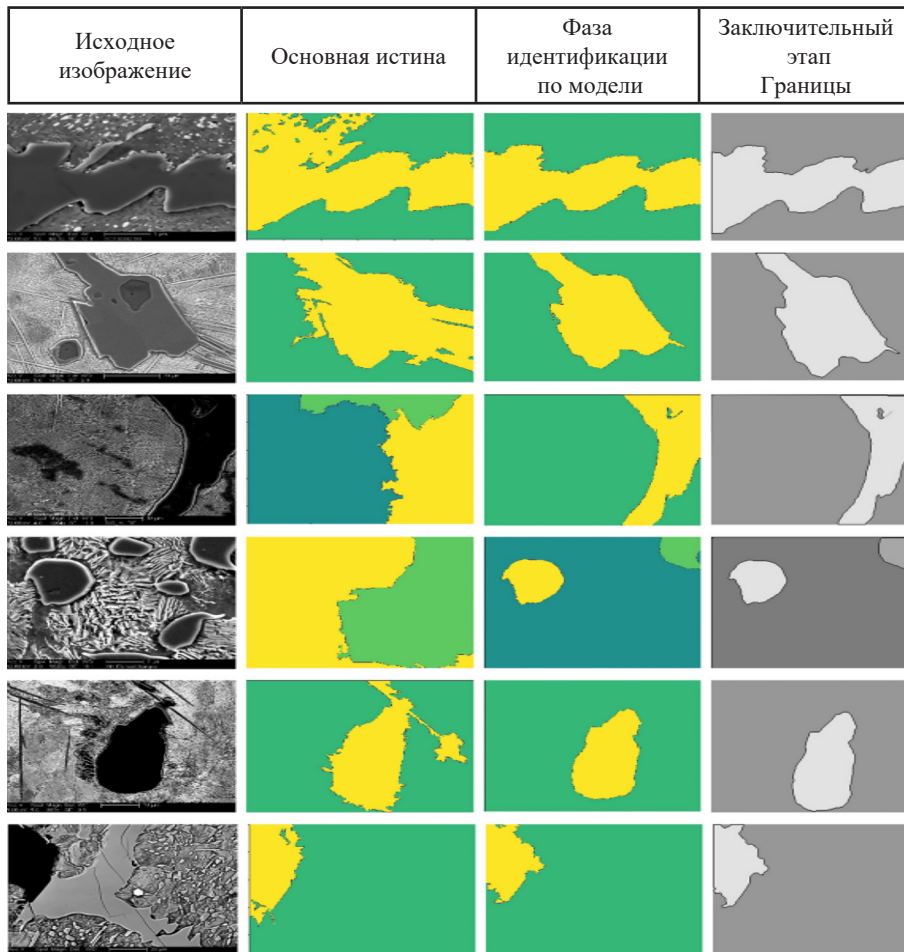


Рис. 4. Идентификация границ микроструктуры с использованием различных методов обработки изображений [27].

Fig. 4. Microstructure boundary identification using various image processing methods [27].

правленных на разработку способов расширения и приближения к более высоким критериям сегментации изображений, так как используемая в данном случае свёрточная нейронная сеть (convolutional neural network — CNN) являются популярной.

Применение ИИ в строительном материаловедении и 3D-печати бетоном

3D-печать бетоном (3D printing with concrete — 3DCP) в гражданском строительстве представляет собой перспективную область развития, а машинное обучение играет важную роль в ее развитии. В случае 3D-печати бетоном возможность перекачки, экструзии и формовки зависит от характеристик текучести бетона [28]. Все эти процедуры 3DCP могут быть контролируемы путем достижения

желаемой вязкости и предельного напряжения в разные моменты времени. Свойства бетонных смесей измеряются с учетом набора прочности бетона со временем и зависят как от качества, так и от количества используемых компонентов.

Для анализа текущего состояния исследований и потенциальные направления применения ML в строительной 3D-печати был изучен ряд исследовательских работ [29 – 32].

На основе геометрии элемента печати алгоритм машинного обучения предсказывает области концентрации напряжений под определенными нагрузками [29]. Это позволяет определить лучший метод усиления межслойного связывания для разных областей печати и создать стратегию печати. Например, применение нейронных сетей (application of neural networks — ANN) для

оптимизации усиления межслойного связывания различных частей элемента печати приводит к наиболее экономичному подходу. Метод кластеризации k-средних (k-means clustering — КМС) классифицирует части элемента печати по статусу печати и применяет соответствующий метод усиления межслойного связывания. В будущем ML позволит улучшить этот процесс научным, эффективным и автоматизированным способом, избегая затрат времени, ресурсов и труда.

В работе [30] изучено влияние различных условий отверждения паром на механические характеристики бетона, используемого в 3D-печати. В рамках исследования были проведены эксперименты и анализ как на макроскопическом, так и на микроскопическом уровне. Также была изучена анизотропия механических свойств бетона в зависимости от различных условий отверждения. Результаты экспериментов были использованы для создания двух моделей машинного обучения и метода поиска оптимальных гиперпараметров. Эти модели могут быть использованы для прогнозирования механических свойств бетона, отверждаемого паром. В исследовании используется алгоритм поиска “усиков жука” (beetle antennae search — BAS) для автоматического поиска оптимальных параметров моделей машинного обучения. BAS представляет собой эффективный метод для оптимизации гиперпараметров моделей, что позволяет быстро и надежно находить наилучшие настройки для прогнозирования механических характеристик бетона.

Исследование [31] направлено на определение роли добавок в цементной пасте и их влиянии на разработку материала для 3D-печати. Особое внимание уделяется использованию нейронных сетей для прогнозирования свойств материала. Смешивая цементную пасту с пятью различными добавками, включая суперпластификатор, затравки гидрата силиката кальция, наноглину, модификатор вязкости и ускоритель, проводили факторный план эксперимента. Эксперименты включали измерение предела текучести цементной пасты и мини-осадка с использованием реометра. Исследование выявило эмпирическую связь между динамическим пределом текучести и формоустойчивостью, что имеет важное значение для процесса 3D-печати. Однако ключевым аспектом работы стала примененная методика, включающая использование нейронных сетей. Они обучались на основе экспериментальных данных и использовались для прогнозирования свойств материала на основе заданных пропорций добавок в смеси (рис. 5).

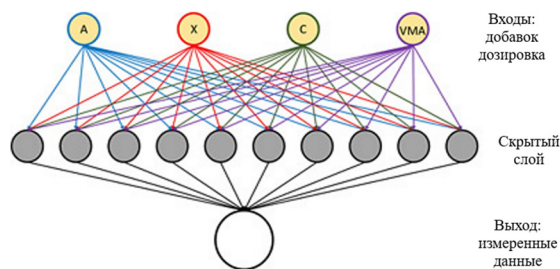


Рис. 5. Схема моделирования эксперимента [31]. A, X, C и VMA — ускоритель твердения, добавка для повышения прочности, наноглина и модификатор вязкости.

Fig. 5. Experimental modeling scheme [31]. A, X, C and VMA — hardening accelerator, strength additive, nanoclay and viscosity modifier.

Нейронные сети были настроены так, чтобы оптимально управлять компонентами смеси, учитывая критический предел текучести, необходимый для поддержания формы материала под собственным весом. Этот подход с использованием нейронных сетей предоставляет средство для более точного управления и прогнозирования свойств материала, что в свою очередь способствует улучшению качества и надежности 3D-печатных конструкций.

Такой подход имеет большое значение для разработки оптимальных составов материалов для 3D-печати, так как позволяет более точно управлять и прогнозировать их свойства, что в свою очередь способствует улучшению качества и надежности 3D-печатных конструкций [32 – 37].

Применение ИИ для анализа и прогнозирования физико-механических свойств бетонов

Механические свойства бетона, особенно его прочность на сжатие, имеют важное значение для безопасности конструкций. В [38] использованы методы машинного обучения для прогнозирования прочности бетона с добавлением летучей золы. Собраны данные о химических и физических характеристиках материалов, применяемых в эксперименте. Акцент сделан на алгоритмах контролируемого машинного обучения, таких как программирование экспрессии генов (gene expression programming — GEP), ANN и DT, для прогнозирования прочности. Использовано 7 входных параметров, включая цемент, летучую золу и другие компоненты, для прогнозирования прочности. Полученные данные проверены статистически с

использованием различных метрик. Алгоритм пакетирования показывает высокую точность прогнозирования результата, о чем свидетельствует значение его высокого коэффициента корреляции (R^2), равное 0,95, тогда как значение R^2 для GEP, ANN и DT составляет 0,86, 0,81 и 0,75 соответственно.

Сравнение двух методологий, примененных к двум различным наборам данных самоуплотняющихся бетонных смесей (SCC), полученных с использованием нейронной сети [39], показало, что обе методологии направлены на достижение максимальной точности в прогнозировании состава SCC, используя данные о 28-дневной прочности на сжатие и характеристики потока в качестве входных данных для нейронной сети. Первая методология включает в себя построение модели с несколькими входами и несколькими выходами, где шесть компонентов состава являются выходами. Вторая методология предполагает создание модели с несколькими входами и одним выходом, где каждый из шести компонентов прогнозируется отдельно с использованием разных нейронных сетей. Кроме того, второй набор данных исследует влияние однородности составов на точность прогнозов. Результаты исследования подтверждают преимущество второй методологии с точки зрения точности прогнозов. Однако единообразие обучающих данных также играет важную роль в обеспечении точности прогнозов компонентов SCC.

Новый метод прогнозирования прочности бетона с использованием алгоритма BAS, основанного на методе случайного леса (random forest — RF) предложен при исследовании прочности легкого самоуплотняющегося бетона (lightweight self-compacting concrete — LWSCC), который сочетает преимущества самоуплотняющегося бетона (SCC) и легкого бетона (LWC), [40]. Модель BAS-RF была успешно проверена на лабораторных данных LWSCC и продемонстрировала высокую точность прогнозирования с высоким коэффициентом корреляции (0,97). Исследование также выявило, что температура, содержание шлака и соотношение воды и связующего вещества оказывают наибольшее влияние на прочность, в то время как содержание волокон менее чувствительно к этому параметру.

В работе [41] представлена эффективная реализация моделей машинного обучения для прогнозирования прочности на сжатие и растяжение высокопроизводительного бетона (high performance concrete — HPC). В работе использованы четыре

алгоритма прогнозирования: регрессия опорных векторов (support vector regression — SVR), многослойный перцептрон (MLP), градиентный бустинг (gradient boosting — GBR) и XGBoost. Процесс настройки гиперпараметров моделей основан на случайном поиске, что позволяет получить обученные модели с наилучшими характеристиками прогнозирования. Кроме того, для обработки недостающих данных применяется метод заполнения средним значением имеющихся данных, что способствует более эффективному использованию существующей информации в процессе обучения. Результаты, полученные на двух популярных наборах данных по прочности на сжатие и растяжение высокопроизводительного бетона, демонстрируют значительное улучшение текущего подхода как с точки зрения точности прогнозирования, так и с точки зрения вычислительных ресурсов. Особенно выделяются алгоритмы GBR и XGBoost, которые продемонстрировали лучшие результаты по сравнению с SVR и MLP.

Модели на основе программирования экспрессии генов (GEP) использовали для прогнозирования свойств бетона и оценки влияния добавления природного цеолита в бетон в качестве дополнительного вяжущего материала на его свойства [42]. Создано 54 смеси с разными соотношениями воды и связующего, содержанием цеолита и проведены эксперименты по измерению прочности и электросопротивления бетона. Включение цеолита улучшило прочность бетона на 7,5 – 10 % с течением времени, и на 20 % увеличило электросопротивление, особенно при старении образцов. Модели GEP успешно прогнозировали оба свойства бетона с природным цеолитом.

Попытка применения глубоких нейронных сетей (deep neural networks — DNN) искусственного интеллекта для прогнозирования механической прочности геополлимерного бетона, созданного из золы кукурузных початков и измельченного гранулированного доменного шлака представлена в работе [43]. Для активации смесей использовали растворы щелочей в течение разного времени воздействия. Применяли алгоритмы обратного распространения ошибки для прогнозирования механической прочности геополлимерного бетона на основе состава бетонной смеси. Результаты подтвердили, что при использовании машинного обучения для прогнозирования механической прочности марка смеси, сроки отверждения и количество щелочи являются переменными, и определяющими механическую прочность. Применение DNN для прогнозирования механических свойств

геополимерного бетона позволило достичь высокой точности, особенно с использованием определенной топологии сети. Исследование подчеркивает эффективность методов DNN в предсказании механической прочности геополимерного бетона на основе состава смеси, что может существенно улучшить качество бетона.

В [44] синтезировали однокомпонентный активированный щелочью материал с использованием летучей золы и гидравлической извести в качестве прекурсоров. Моделирование экспрессии генов на основе машинного обучения (GEP) было использовано для оптимизации материала. Эксперименты показали улучшение прочности на сжатие и реологических свойств у образцов с повышенным содержанием гидравлической извести. Модель GEP продемонстрировала высокую точность прогнозирования для прочности на сжатие, пластической вязкости и предела текучести. Анализ SHapely Additive ExPlanations (SHAP) показал, что гидравлическая известь оказывает положительное влияние на предел текучести и пластическую вязкость, но отрицательное — на прочность на сжатие, в то время как летучая зола оказывает негативное влияние на эти параметры. Добавление гидравлической извести и активатора приводит к раннему структурному наращиванию за счет ускоренных реакций геополимеризации.

Эффективность добавления порошка стеклянных отходов на прочность на сжатие цементного раствора с использованием экспериментальных испытаний и методов машинного обучения оценена в [45]. В экспериментах использовали цементный раствор с соотношением цемента и песка 1:1 и соотношением воды и цемента 0,25. Добавляли суперпластификатор и различное количество порошка стеклянных отходов. Первоначально рассчитывали прочность цементного раствора с порошком стеклянных отходов на 28-й день. Затем использовали ML (дерево решений и AdaBoost) для прогнозирования прочности на основе данных экспериментов. Результаты показали, что порошок стеклянных отходов улучшил прочность цементного раствора, особенно при замене цемента и песка на порошок стеклянных отходов на 10 % и 15 % соответственно. Дерево решений и AdaBoost показали хорошие результаты в прогнозировании прочности.

Применение методов машинного обучения для прогнозирования механических свойств армированного фибробетона для 3D-печати (3D printing fiber reinforced concrete — 3DP-FRC) представлено в [45]. Проанализированы результаты исследования в сравнении при использовании различных мо-

делей машинного обучения, таких как случайный лес, метод опорных векторов и алгоритмы градиентного бустинга (XGBoost, LightGBM, Catboost и NGBoost). Эти модели были оценены по эффективности в прогнозировании прочности на сжатие и прочности на изгиб фибробетона на основе имеющихся данных. Также был проведен анализ аддитивных объяснений Шепли (SHAP), который помог определить, какие параметры смеси фибробетона оказывают наибольшее влияние на его механические свойства. Это дало ценную информацию для проектирования оптимальных пропорций смеси 3DP-FRC с учетом требуемых механических характеристик.

В [46] предложены методы, основанные на применении нейронных сетей для создания эффективной модели прогнозирования диффузии хлоридов в бетоне. Проникновение хлоридов — главная угроза для долговечности железобетонных конструкций. Для разработки этой модели использована обширная база данных, включающая 653 уникальных определения коэффициента диффузии из литературных источников. В разработанных моделях учтены 13 ключевых параметров, включая состав компонентов, механические свойства и характеристики эксперимента, которые использовали как входные данные для учета сложных физических процессов, влияющих на диффузию хлоридов. Важность нормализации переменных подтверждается сравнительным анализом. Эффективность разработанной модели оценивается с помощью глубоких статистических анализов. Полученные результаты подтверждают, что модели нейронных сетей обладают высокой надежностью и большим потенциалом для точного прогнозирования. Это исследование также подчеркивает, что нейронные сети могут стать ценным инструментом для выявления отклонений в экспериментальных данных и особенно будет полезным для оценки долговечности железобетонных конструкций в сложных или экстремальных условиях эксплуатации.

Проанализировав научные данные по теме исследования, учитывая обзоры других авторов, например [47], было выделено четыре основных направления использования ИИ в материаловедении (табл. 1).

Использование ИИ в анализе большого объема экспериментальных данных, прогнозировании закономерностей в свойствах дисперсных материалов может значительно улучшить понимание процессов, происходящих в материалах, и способствовать разработке новых материалов с уникальными свойствами.

Основные направления использования ИИ в материаловедении

Table 1

Key directions of AI applications in materials science			
1. Оптимизация процесса производства	2. Прогнозирование свойств материалов	3. Разработка новых материалов	4. Контроль качества материалов
С помощью алгоритмов машинного обучения и нейронных сетей, ИИ может анализировать большие объемы данных, собранных в процессе производства, и предлагать оптимальные параметры для достижения желаемых свойств материала.	Используя методы глубокого обучения, ИИ может предсказывать свойства материалов на основе их состава и структуры, что позволяет исследователям более точно предсказывать поведение материалов в различных условиях и оптимизировать их свойства.	Алгоритмы генетического программирования позволяют создавать новые комбинации материалов с уникальными свойствами и оптимизировать их свойства для конкретных приложений.	С помощью методов компьютерного зрения и анализа изображений, ИИ может автоматически обнаруживать дефекты в процессе производства и предлагать меры по их устранению.

Этапы исследования, необходимые для изучения, анализа и прогнозирования коллоидно-химических и физико-механических свойств дисперсных материалов, таких как бетон, с использованием искусственного интеллекта, могут представлять собой следующую последовательность (рис. 6).

На первом этапе исследований необходимо собрать большие объемы данных о составе и свойствах материалов, а также о физических и химических процессах, происходящих при структурообразовании. Это может включать данные о компонентах бетона, их соотношениях, свойствах добавок и примесей, а также результаты физико-химических испытаний. Перед тем как приступить к анализу, данные необходимо предварительно обработать: провести удаление выбросов, заполнение пропущенных значений, нормализацию данных и другие операции для обеспечения качества данных. Затем можно использовать алгоритмы машинного обучения для выявления закономерностей и связей между различными параметрами материала и его структурообразованием. Например, можно

применить методы кластеризации для выделения групп материалов с похожими свойствами или методы регрессии для предсказания определенных характеристик материала на основе его состава. Дополнительно можно провести статистический анализ данных для выявления статистически значимых связей и зависимостей между параметрами материала и его свойствами. Это может включать расчет корреляций, проведение t-тестов или анализ дисперсии. После построения модели на основе данных и применения алгоритмов машинного обучения, необходимо провести валидацию модели. Это может включать разделение данных на обучающую и тестовую выборки, оценку точности и надежности модели на тестовой выборке, а также сравнение результатов с известными экспериментальными данными.

Полученные результаты могут быть использованы для оптимизации процесса разработки и тестирования новых материалов, а также для предсказания и улучшения свойств существующих материалов. Это может помочь сократить время и затраты на создание и улучшение материалов,



Рис. 6. Схема этапов прогнозирования свойств материалов с применением ML

Fig. 6. Scheme of material properties prediction stages using machine learning.

а также повысить эффективность и надежность строительных проектов.

Выводы

Машинное обучение играет ключевую роль в оптимизации и предсказании механических свойств бетонных материалов, используя данные о составе смеси, типе цемента, пропорциях компонентов, а также применении добавок и модификаторов. При этом ИИ способен учесть множество различных дополнительных параметров, которые влияют на реологические и физико-механические характеристики бетона. Применение машинного обучения позволяет существенно улучшить точность прогнозирования и оптимизации состава бетонных смесей для инновационных бетонных технологий SSC и 3DCP.

Экспериментальные данные и машинное обучение могут успешно сочетаться. Выбор подходящего алгоритма играет ключевую роль в разработке систем машинного обучения, влияя на точность прогнозирования и обобщения.

Алгоритмы машинного обучения, такие как XGBoost, LightGBM, Catboost и NGBoost, показывают высокую точность в прогнозировании физико-механических свойств бетона. Для оценки эффективности прогнозирования используют статистические параметры: коэффициент детерминации (R^2), среднюю абсолютную ошибку и среднеквадратичную ошибку. R^2 рассчитывают как отношение дисперсии, объясненной моделью, к общей дисперсии. Средняя абсолютная ошибка и среднеквадратичная ошибка позволяют оценить точность предсказаний модели по сравнению с фактическими данными.

Анализ аддитивных объяснений Шепли (SHAP) помогает понять, какие параметры смеси бетона наиболее сильно влияют на его характеристики, что может быть полезно в процессе разработки технологических решений.

В материаловедении выборки для обучения имеют ограниченный размер, состоящий от нескольких десятков до нескольких сотен примеров. Для оценки точности прогнозирования стоит использовать различные варианты скользящего контроля (cross-validation (CV)): LOOCV (leave-one-out CV) или к-фолдовый скользящий контроль. LOOCV обеспечивает более точную оценку эффективности прогнозирования, так как он использует все доступные данные для проверки модели на каждом этапе обучения. Однако к-фолдовый скользящий контроль может давать более высокие

значения R^2 и более низкие значения ошибок, что не всегда полностью отражает действительность, особенно при ограниченных объемах обучающей выборки. Выбор конкретного типа скользящего контроля следует рассматривать в зависимости от объема доступных данных и конкретных задач прогнозирования.

Статья подготовлена с использованием оборудования на базе Центра коллективного пользования БГТУ им. В.Г. Шухова в рамках государственного задания Минобрнауки России № FZWN-2021-0015.

Литература/References

1. Rojo-López G., González-Fontebao B., Luis Pérez-Ordóñez J. et al. Parametric analysis in sustainable self-compacting mortars using genetic programming. *Constr. Build. Mater.*, 2023, v. 404, art. 133189.
2. Qian Y., Kawashima S. Distinguishing dynamic and static yield stress of fresh cement mortars through thixotropy. *Cem. Concr. Compos.*, 2018, v. 86, pp. 288 – 296.
3. Lesovik V., Tolstoy A., Fediuk R. et al. Improving the performances of a mortar for 3D printing by mineral modifiers. *Buildings*, 2022, v. 12, no. 8, art. 1181.
4. Khalil N. Aouad G., El Cheikh K. et al. Use of calcium sulfoaluminate cements for setting control of 3D-printing mortars. *Constr. Build. Mater.*, 2017, v. 157, pp. 382 – 391.
5. Hambach M., Volkmer D. Properties of 3D-printed fiber-reinforced Portland cement paste. *Cem. Concr. Compos.*, 2017, v. 79, pp. 62 – 70.
6. Panda B., Paul S.C., Tan M.J. Anisotropic mechanical performance of 3D printed fiber reinforced sustainable construction material. *Mater. Lett.*, 2017, v. 209, pp. 146 – 149.
7. Wolfs R.J.M., Bos F.P., Salet T.A.M. Early age mechanical behaviour of 3D printed concrete: Numerical modelling and experimental testing. *Cem. Concr. Res.*, 2018, v. 106, pp. 103 – 116.
8. Лесовик В.С. Елистраткин М., Глаголев Е. и др. Формирование свойств композиций для строительной печати. *Вестник БГТУ им. В.Г. Шухова*, 2017, № 10, с. 6 – 14.
- Lesovik V.S., Elistratkin M.Ju., Glagolev E.S., Shatalova S.V., Starikov M.S. Formirovanie svojstv kompozicij dlja stroitel'noj pechati [Formation of properties of compositions for construction 3D printing]. *Vestnik BGTU im. V.G. Shuhova* [Bulletin of Belgorod state technological university named after V. G. Shukhov], 2017, no. 10, pp. 6 – 14. (In Russ.).
9. Atzeni C., Massidda L., Sanna U. Comparison between rheological models for portland cement pastes. *Cem. Concr. Res.*, 1985, v. 15, no. 3, pp. 511 – 519.

10. Papo A. Rheological models for cement pastes. *Mater. Struct.*, 1988, v. 21, no. 1, pp. 41 – 46.
11. Vom Berg W. Influence of specific surface and concentration of solids upon the flow behaviour of cement pastes. *Mag. Concr. Res.*, 1979, v. 31, no. 109, pp. 211 – 216.
12. Шаповалов, Н.А. Полуэктова В.А. Пластифицирующие добавки в бетоны: монография. Белгород: Изд-во БГТУ, 2016, 128 с.
- Shapovalov, N.A., Poluektova V.A. *Plastificiruyushchie dobavki v betony: monografiya* [Plasticizing additives in concrete: a monograph]. Belgorod: Publishing house of Belgorod State Technological University, 2016, 128 p. (In Russ.).
13. Шаповалов Н.А., Полуэктова В.А. Наномодификатор для цементных смесей и бетона. *Вестник БГТУ им. В.Г. Шухова*, 2015, № 5, с. 72 – 76.
- Shapovalov N.A., Poluektova V.A. *Nanomodifikator dlya cementnyh smesey i betona* [Nanomodifier for cement mixtures and concrete]. *Vestnik BG TU im. V.G. Shukhov* [Bulletin of Belgorod State Technological University named after V.G. Shukhov], 2015, no. 5, pp. 72 – 76. (In Russ.).
14. Полуэктова В.А., Кожанова Е.П., Шаповалов Н.А. Агрегативная устойчивость высокопроникающей суспензии при кондиционировании твердых радиационно-активных отходов методом цементирования. *Вестник технологического университета*, 2022, т. 25, № 1, с. 45 – 48.
- Poluektova V.A., Kozhanova E.P., Shapovalov N.A. *Agregativnaja ustojchivost' vysokopronikajushhej suspenzii pri kondicionirovanii tverdyh radiacionno-aktivnyh othodov metodom cementirovanija* [Aggregative stability of a highly penetrating suspension during conditioning of solid radiation-active waste by cementation method]. *Vestnik tekhnologicheskogo universiteta* [Bulletin of the Technological University], 2022, v. 25, no. 1, pp. 45 – 48. (In Russ.).
15. Güneýisi E., Gesoğlu M., Naji N. et al. Evaluation of the rheological behavior of fresh self-compacting rubberized concrete by using the Herschel–Bulkley and modified Bingham models. *Arch. Civ. Mech. Eng.*, 2016, v. 16, no. 1, pp. 9 – 19.
16. Полуэктова В.А., Шаповалов Н.А., Бредихина В.Б. Реология поливинилацетатцементных дисперсий: моделирование, исследование, применение для строительной печати. *Вестник технологического университета*, 2021, т. 24, № 11, с. 85 – 92.
- Poluektova V.A., Shapovalov N.A., Bredikhina V.B. *Reologija polivinilacetatcementnyh dispersij: modelirovanie, issledovanie, primenenie dlja stroitel'noj pechati*. [Rheology of polyvinyl acetate cement dispersions: modeling, research, application for construction printing]. *Vestnik tekhnologicheskogo universiteta* [Bulletin of the Technological University], 2021, v. 24, no. 11, pp. 85 – 92. (In Russ.).
17. Wallevik O.H., Wallevik J.E. Rheology as a tool in concrete science: The use of rheographs and workability boxes. *Cem. Concr. Res.* Pergamon, 2011, v. 41, no. 12, pp. 1279 – 1288.
18. De Larrard F., Ferraris C.F., Sedran T. Fresh concrete: A Herschel-Bulkley material. *Mater. Struct.* Springer Science and Business Media LLC, 1998, v. 31, no. 7, pp. 494 – 498.
19. Gershel W. Consistency of rubber-benzene solutions. *Industrial and Engineering Chemistry*, 1924, p. 927.
20. Yahia A., Khayat K.H. Applicability of rheological models to high-performance grouts containing supplementary cementitious materials and viscosity enhancing admixture. *Mater. Struct.*, 2003, v. 36, no. 6, pp. 402 – 412.
21. Feys D., Verhoeven R., De Schutter G. Evaluation of time independent rheological models applicable to fresh self-compacting concrete. *Appl. Rheol.*, 2007, v. 17, no. 5, pp. 56241 – 56244.
22. Feys D., Wallevik J., Yahia A. et al. Extension of the Reiner–Riwlin equation to determine modified Bingham parameters measured in coaxial cylinders rheometers. *Mater. Struct.*, 2013, v. 46, no. 1–2, pp. 289–311.
23. Nazar S., Yang J., Ahmad A. et al. Comparative study of evolutionary artificial intelligence approaches to predict the rheological properties of fresh concrete. *Mater. Today Commun.*, 2022, v. 32, art. 103964.
24. El Asri Y., Ben Aicha M., Zaher M. et al. Modelization of the rheological behavior of self-compacting concrete using artificial neural networks. *Mater. Today Proc.*, 2022, v. 58, pp. 1114 – 1121.
25. Nguyen T.-D., Tran T.-H., Hoang N.-D. Prediction of interface yield stress and plastic viscosity of fresh concrete using a hybrid machine learning approach. *Adv. Eng. Informatics.*, 2020, v. 44, art. 101057.
26. Skare E., Sheiati S., Cepuritis R. et al. Rheology modelling of cement paste with manufactured sand and silica fume: Comparing suspension models with artificial neural network predictions. *Constr. Build. Mater.*, 2022, v. 317, art. 126114.
27. Choudhury A. The Role of machine learning algorithms in materials science: A state of srt review on industry 4.0. *Arch. Comput. Methods Eng.*, 2021, v. 28, no. 5, pp. 3361 – 3381.
28. Nazar S., Yang J., Thomas B. et al. Rheological properties of cementitious composites with and without nano-materials: A comprehensive review. *J. Clean. Prod.*, 2020, v. 272, art. 122701.
29. Geng S., Luo Q., Liu K. et al. Research status and prospect of machine learning in construction 3D printing. *Case Stud. Constr. Mater.*, 2023, v. 18, art. e01952.
30. Yao X., Lyu X., Sun J. et al. AI-based performance prediction for 3D-printed concrete considering anisotropy and steam curing condition. *Constr. Build. Mater.*, 2023, v. 375, art. 130898.
31. Charrier M., Ouellet-Plamondon C.M. Artificial neural network for the prediction of the fresh properties of cementitious materials. *Cem. Concr. Res.*, 2022, v. 156, art. 106761.

32. Goh G.D., Sing S.L., Yeong W.Y. A review on machine learning in 3D printing: applications, potential, and challenges. *Artif. Intell. Rev.*, 2021, v. 54, no. 1, pp. 63 – 94.
33. Baumann F.W., Sekulla A., Hassler M. et al. Trends of machine learning in additive manufacturing. *Int. J. Rapid Manuf.*, 2018, v. 7, no. 4. art. 310.
34. Jordan M.I., Mitchell T.M. Machine learning: Trends, perspectives, and prospects. *Science*. 2015, v. 349, no. 6245, pp. 255–260.
35. An J., Lee D.H., Cho H.H. et al. Indoor positioning system using smartphone and 360° camera. Jeju, Republic of Korea, 13-15 August 2021, Proceedings 5th IEEE International Conference on Smart Internet of Things, SmartIoT, IEEE, 2021. pp. 342–343.
36. Xames M.D., Torsha F.K., Sarwar F. A systematic literature review on recent trends of machine learning applications in additive manufacturing. *J. Intell. Manuf.*, 2023, v. 34, no. 6, pp. 2529 – 2555.
37. Ciccone F., Bacciaglia A., Ceruti A. Optimization with artificial intelligence in additive manufacturing: a systematic review. *J. Brazilian Soc. Mech. Sci. Eng.*, 2023, v. 45, art. 303.
38. Song H., Ahmad A., Farooq F. et al. Predicting the compressive strength of concrete with fly ash admixture using machine learning algorithms. *Constr. Build. Mater.*, 2021, v. 308, art. 125021.
39. Abu Yaman M., Abd Elaty M., Taman M. Predicting the ingredients of self compacting concrete using artificial neural network. *Alexandria Eng. J.*, 2017, v. 56, no. 4, pp. 523 – 532.
40. Zhang J., Ma G., Huang Y. et al. Modelling uniaxial compressive strength of lightweight self-compacting concrete using random forest regression. *Constr. Build. Mater.*, 2019, v. 210, pp. 713 – 719.
41. Nguyen H., Vu T., Vo T.P. et al. Efficient machine learning models for prediction of concrete strengths. *Constr. Build. Mater.*, 2021, v. 266, art. 120950.
42. Shahmansouri A.A., Akbarzadeh Bengar H., Jahani E. Predicting compressive strength and electrical resistivity of eco-friendly concrete containing natural zeolite via GEP algorithm. *Constr. Build. Mater.*, 2019, v. 229, art. 116883.
43. Oyebisi S., Alomayri T. Artificial intelligence-based prediction of strengths of slag-ash-based geopolymer concrete using deep neural networks. *Constr. Build. Mater.*, 2023, v. 400, art. 132606.
44. Nazar S., Yang J., Wang X.-E. et al. Estimation of strength, rheological parameters, and impact of raw constituents of alkali-activated mortar using machine learning and SHapely Additive exPlanations (SHAP). *Constr. Build. Mater.*, 2023, v. 377, art. 131014.
45. Abellan-García J., García-Castaño E., Fernández-Gómez J. et al. Modeling the ductility characteristics of ultrahigh-performance fiber-reinforced concrete using a precise, computation-efficient, and comprehensive data-driven random forests-based approach. *Mater. Today Commun.*, 2023, v. 37, art. 106953.
46. Liu Q., Iqbal M.F., Yang J. et al. Prediction of chloride diffusivity in concrete using artificial neural network: Modelling and performance evaluation. *Constr. Build. Mater.*, 2021, v. 268, art. 121082.
47. Stergiou K., Ntakolia C., Varytis P. et al. Enhancing property prediction and process optimization in building materials through machine learning: A review. *Comput. Mater. Sci.*, 2023, v. 220, art. 112031.

*Статья поступила в редакцию — 26.09.2023 г.
после доработки — 11.10.2023 г.
принята к публикации — 12.10.2023 г.*

Полуэктова Валентина Анатольевна — Белгородский государственный технологический университет им. В.Г. Шухова (308012 Белгород, ул. Костюкова, 46), доктор технических наук, доцент, профессор, специалист в области химического модифицирования дисперсных материалов и строительных композиций. E-mail: val.po@bk.ru.

Полуэктов Максим Алексеевич — Белгородский государственный технологический университет им. В.Г. Шухова (308012 Белгород, ул. Костюкова, 46), студент института информационных технологий и управляющих систем.

Artificial intelligence in materials science and modern concrete technologies: analysis of possibilities and prospects

V. A. Poluektova, M. A. Poluektov

An analysis of current trends and opportunities for the application of artificial intelligence (AI) in materials science and concrete technology, including 3D printing in construction, is presented. The key role of AI in predicting material properties, developing new materials, and quality control is highlighted. By analyzing large volumes of data collected from numerous studies, AI can suggest optimal parameters to achieve desired material properties, thereby reducing costs and increasing production efficiency. Existing rheological models, such as the Bingham-Shvedov model or the Herschel-Bulkley model, describe material behavior based on specific equations and parameters. These models can be useful in predicting concrete properties, especially when data on its component composition is available. However, these models may be limited in their predictive accuracy, particularly for non-standard or novel materials. It has been found that machine learning and neural networks have the potential to provide accurate predictions of rheological and physico-mechanical properties of concrete materials, considering multiple parameters that influence material characteristics, including chemical and mineralogical composition, as well as structural features. The combination of experimental data and AI can successfully optimize compositions and properties during production, reducing costs and research/testing time, and opening new opportunities for researchers and engineers in the field of materials science. Machine learning algorithms such as XGBoost, LightGBM, Catboost, and NGBoost demonstrate high predictive accuracy and have become powerful tools in the design of concrete compositions and innovative technologies. The analysis of Shapley additive explanations (SHAP) allows us to understand which parameters of a concrete mixture have the greatest influence on its characteristics.

Keywords: artificial intelligence, neural networks, machine learning, materials science, additive technologies, 3D concrete printing, optimization, property prediction, innovation.

***Poluektova Valentina** — BGTU named after V.G. Shukhov (308012 Belgorod, Kostyukov st, 46), Doctor of Sciences (Eng), associate professor, specialist in the field of chemical modification of dispersed materials and construction compositions. E-mail: val.po@bk.ru.*

***Poluektov Maxim** — BGTU named after V.G. Shukhov (308012 Belgorod, Kostyukov st, 46), student of the Institute of Information Technologies and Control Systems.*