



Title	Optimization of sustainable mix design for alkali-activated materials using machine learning methods [an abstract of dissertation and a summary of dissertation review]
Author(s)	Kong, Yukun
Citation	北海道大学. 博士(工学) 甲第16047号
Issue Date	2024-06-28
Doc URL	http://hdl.handle.net/2115/92801
Rights(URL)	https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/
Type	theses (doctoral - abstract and summary of review)
Additional Information	There are other files related to this item in HUSCAP. Check the above URL.
File Information	Kong_Yukun_review.pdf (審査の要旨)



[Instructions for use](#)

学位論文審査の要旨

博士の専攻分野の名称 博士 (工学) 氏名 Kong Yukun

審査担当者 主査 准教授 胡桃澤 清文
副査 教授 佐藤 努
副査 教授 杉山 隆文
副査 教授 廣吉 直樹

学位論文題名

Optimization of sustainable mix design for alkali-activated materials using machine learning methods
(機械学習を用いたアルカリ活性材料のサステイナブル材料設計)

温室効果ガスの急激な増加は、21世紀における人間活動に起因し、重要な環境上の懸念となっている。NOAAのマウナロア大気基準観測所で行われた測定によると、大気中の二酸化炭素濃度は年々上昇し、2021年5月には420ppmに達し、年間増加率は1.85ppmである。コンクリート製造時に使用される普通ポルトランドセメント(OPC)は、これらの排出に大きく影響しており、世界の人為起源の二酸化炭素排出量の約6から8パーセントを占めている。そのため、建設産業からの二酸化炭素排出を削減するための代替技術の開発が急務である。アルカリ活性材料(AAM)は、他産業から排出される副産物や廃棄物とアルカリ溶液を混合し製造されるためOPCの代替材料として期待されている。しかし、AAMの利用拡大は、次の3つの問題によって制限されている。まず、第1にAAMの流動性などのフレッシュ特性と硬化特性の既存の予測モデルは、限られた範囲の実験結果に基づいていることが多く、汎用性と利便性が欠如している。第2に、既存モデルは材料設計パラメータに基づいて特性を予測するが、特定の性能要件を満たす最適な材料設計を決定するための適切な手法が求められる。しかし、必要とされる特性に基づいてすべての材料設計パラメータを予測する方法が欠如している。第3に、要求性能とサステイナビリティの最良なバランスを実現することは、AAMの材料設計を最適化する際の課題であり、環境影響を最小限に抑えながら、必要性能を達成するために、材料設計を適切に行う必要がある。そこで、これらを解決するために本研究では、(i)材料設計の主要要因の特定と、AAMの流動性、圧縮強度および乾燥収縮量を予測するモデルの構築、(ii)AAMの材料設計を決定するための逆解析手法の開発、および(iii)主要要因を考慮した最適化されたAAMのライフサイクル評価について検討した。

第1章では、本論文の研究背景を述べ、本研究で検討する三つの主要な問題を明確にし、本研究の目的と研究手法を記述している。

第2章では、アルカリ活性材料(AAM)のフレッシュ状態および硬化特性に与える配合の影響、機械学習技術の利用、およびAAMに関連する環境問題についての広範な文献調査結果について記述している。

次の3章では、3つの機械学習方法、すなわち人工ニューラルネットワーク(ANN)、LightGBM(LGBM)、およびXGBoost(XGB)を使用して、AAMのフレッシュ状態と硬化特性の予測モデルについて記述している。第3章では、既往の26の論文から収集した402の配合条件を元に、AAMの流動性の予測モデルについて検討した。AAMの予測モデルを構築するために、データ収

集、データ処理、データ分析、およびモデリングを行った。この手順は、圧縮強度と乾燥収縮の予測モデルの構築にも使用している。AAMの流動性に影響を与える8つの主要要因について検討を行い、粉体の活性度および比表面積、アルカリ活性剤のケイ酸塩モジュラス (Ms)、NaOH濃度、液体/バインダー比 (L/B比)、ジオポリマーペースト容積 (GPC)、および骨材比を選定した。提案したモデルでは、上記の8つの要因が入力データとして設定され、流動性の結果が出力データとして設定されている。その結果、流動性はMsとGPCの増加によって上昇するが、NaOH濃度と骨材含有量の増加によって低下することを明らかにした。3つの機械学習モデルの予測の結果は、ANN、LGBM、XGBそれぞれの決定係数値が0.81、0.96、0.95であり、よい精度で予測できることを示した。

第4章では、23の論文から収集した301個の配合を使用して、AAMの材齢28日における圧縮強度の予測モデルを構築した。データ解析の結果、前駆体の活性、Ms、NaOH濃度が高いほどAAMの強度発現に有利であるが、L/B比とGPCは強度発現を妨げることが明らかになった。ANN、LGBM、およびXGBの予測モデルは、それぞれ0.85、0.96、0.97の非常に高い決定係数値で予測を行えることが示され、特にXGBが最も精度よく予測できることを明らかにした。

第5章では、AAMの乾燥収縮量を予測するためのモデル構築を検討した。モデル構築のために、43の論文から438個のAAMの配合を抽出した。前の2章とは異なり、モデル構築には、前述の8つの要因に加えて、養生温度、相対湿度 (RH) および体積/表面積比 (V/S) の要因を考慮した。その結果、AAMの乾燥収縮量は、NaOH濃度、骨材比、硬化温度、RH、およびV/S比が高いほど増加することが示された。そしてANN、LGBM、およびXGBの予測モデルは、それぞれ0.94、0.99、0.99の高い決定係数値を示し、精度よく推定できることを明らかにした。

第6章では、要求される特性を満たすためのAAMの最適な材料設計を行うための逆解析手法について検討した。提案する逆解析モデルは、データ生成、特性予測、および材料設計のフィルタリングから構成される。データ生成は、事前に収集されたデータベースを基にしたガウス混合モデル及びランダムモデルによって行われ、このモデルは、実際に使用される配合条件を生成することができ、この生成した配合をXGBモデルに導入することによって設定した性能を持つ配合条件を決定することを可能とした。一方、ライフサイクルアセスメントは、CML 2002アプローチを使用し、地球温暖化、オゾン層破壊、酸性化、富栄養化、および生態毒性の5つの環境影響項目を評価した。最終的に機械的特性と環境影響評価を組み合わせ、必要な性能を持つAAMの配合を決定するための設計手法を提案した。

第7章は結論として、本論文で得られた成果をまとめ、AAMの物性予測のための機械学習技術の利用に関する課題や可能性について議論し、今後の研究の方向性について提案を行った。

以上、これを要するに、著者はアルカリ活性材料の流動性、強度および乾燥収縮を予測する機械学習モデルを構築し、このモデルに基づくアルカリ活性材料の新たな設計手法を提案している。この成果は、資源循環材料学およびコンクリート工学の発展に寄与するところ大なるものがある。よって、著者は、北海道大学博士 (工学) の学位を授与される資格あるものと認める。