

Kauzalni AI model i optimiranje održivosti sastava betonskih mješavina

Ž. Kurtanjek*

Ovo djelo je dano na korištenje pod
Creative Commons Attribution 4.0
International License



Sveučilište u Zagrebu Prehrambeno-biotehnoški fakultet, Pierrotijeva 6, 10 000 Zagreb

Sažetak

U radu je provedena kauzalna analiza učinka ekološki održivih mješavina s cementom na tlačnu čvrstoću betona i smanjenje emisije CO₂. Primijenjen je Bayesov model kauzalnosti, skupova stabala odlučivanja i dubokih neuronskih mreža. Model se zasniva na velikom skupu podataka, broj uzoraka $n = 1030$ i $p = 9$ varijabli sastava (cement, šljaka, lebdeći pepeo, voda, plastifikator, krupni agregat, sitni agregat, vrijeme i tlačna čvrstoća betona). Model je usmjereni aciklički graf (DAG) određen heurističkim postupkom optimiranja Bayesova informacijskog kriterija (BIC). AI model dobiven strojnim učenjem omogućuje predikciju tlačne čvrstoće betona s prosječnom apsolutnom pogreškom 3 MPa (4,3 %) u odnosu na pogrešku od 10 MPa za višestruki linearni model. Za eliminaciju interferirajućih efekata među varijablama primijenjen je kriterij usmjerenog razdvajanja (d -separacija) za određivanje kauzalnih učinaka pojedinih varijabli na tlačnu čvrstoću betona. Pojedini učinci izraženi su kao srednji efekti učinaka (engl. *Average Treatment Effect*, ATE). Rezultat kauzalnog učinka vremena pokazuje dvofaznu dinamiku kinetike nultog stupnja. Najveće vrijednosti ATE (MPa/kg m⁻³) tijekom prve faze procesa pokazuju: krupni agregat 0,53, plastifikator 0,35 i sitni agregat 0,19, dok najveći negativni učinak ima voda -0,3. U drugoj fazi procesa najveći pozitivni ATE od 0,5 pokazuje plastifikator, a najveći negativni je za krupni agregat od -0,23. Zbog kompleksne interakcije varijabli i složene dinamike procesa predložen je genetički algoritam optimiranja sastava smjese. AI model predviđa znatno potencijalno smanjenje emisije CO₂ upotrebom lebdećeg pepela i upotrebom zgure.

Ključne riječi

Umjetna inteligencija, kauzalnost, optimiranje, beton

1. Uvod

Jedan od najvažnijih ciljeva koncepta "Industry 5.0" je razvoj temeljem kružne ekonomije održivih tehnoloških procesa.¹ Kružno gospodarstvo zasniva se na primjeni načela sustavnog povezivanja uporabe obnovljivih prirodnih materijalnih resursa, energije i proizvoda. Sustav kružnog gospodarstva uključuje sinergizam ljudi, tehnoloških procesa, robotike i umjetne inteligencije (AI) funkcionalno povezanih s ciljem globalnog očuvanja prirode i unaprjeđenja života ljudi. Primjena umjetne inteligencije (AI) i znanosti o materijalima ključna su područja kemijskog inženjerstva u razvoju novih održivih tehnoloških procesa. Novi materijali najčešće su kompoziti anorganskih, organskih i bioloških komponenata i uključuju nanočestice. Interakcije komponenata vrlo su složene i teško se mogu odrediti primjenom temeljnih zakonitosti matematičkog modeliranja te često zahtijevaju metode umjetne inteligencije kao što su algoritmi strojnog učenja (engl. *machine learning*, ML) s velikim podatkovnim bazama (engl. *big data*).²⁻⁴ Najčešće se primjenjuju algoritmi "dubokog učenja" s višeslojnim neuronskim mrežama i sustavi stabala odlučivanja. Osnovni cilj je umjetnom inteligencijom otkriti kompleksne i nelinearne zavisnosti (tj. "uzorke ponašanja") u podacima mjerenih značajki sa svrhom otkrića i optimalnog dizajna novih materijala, s ciljanim specifičnim značajkama. Razvijaju se novi materijali za primjenu u energetici (solarne ćelije, baterije), elektronici, zrakoplovnoj i svemirskoj industriji te biomedicini, biorazgradivi materijali za pakiranje preham-

benih proizvoda itd. Posebnu važnost imaju novi materijali, sirovine i proizvodi koji se mogu uključiti u povratni tok kružnog gospodarstva, s ciljem postizanja održivosti i zaštite okoliša. Glavna prednost primjene umjetne inteligencije u odnosu na klasična istraživanja je njezina učinkovitost, široko područje pretraživanja prostora parametara, multiskalarno povezivanje podataka od mikrorazine do makrorazine i fuzija informacija iz različitih eksperimenata i računalnih simulacija. No primjena umjetne inteligencije zahtijeva velik broj pouzdanih, reproducibilnih i statistički značajnih podataka. Poseban problem je interpretacija uzročno posljedičnih veza između varijabli kojima djelujemo na sustav (x , manipulativne varijable) i ciljane veličine (y , izlazna varijabla). Poznavanje kauzalnosti, uzročno posljedične veze $y(x)$, omogućuje kemijskom inženjeru intervenciju u proces dizajna novih materijala na racionalan i optimalan način. Agnostički, nekauzalni modeli umjetne inteligencije imaju samo mogućnost predikcije ograničene na vrijednosti varijabli iz prostora učenja, odnosno nepouzdana su u novim uvjetima i za inovaciju. Za razvoj kauzalne umjetne inteligencije primjenjuju se stohastički strukturalni grafički modeli (engl. *structural causal model*, SCM) temeljem grafičkog prikaza mreže Bayesova statističkog zaključivanja. Kauzalnost se određuje iz gustoće zavisne vjerojatnosti $P(Y|do(x))$ kad se slučajna manipulativna veličina X zamijeni determinističkom vrijednosti $X = x$ uz prilagodbu Bayesove mreže blokiranjem interferirajućih (engl. *confounding*) kovarijabli.⁵⁻⁸

U ovom radu dan je prikaz metodologije i rezultata kauzalnog modela umjetne inteligencije betonske smjese s ciljem smanjenja ugljičnog otiska proizvodnjom cementa i uporbom građevinskog otpada u kružni tok održive proizvodnje

* Prof. dr. sc. Želimir Kurtanjek, u mirovini
E-pošta: zelimir.kurtanjek@gmail.com

u građevinarstvu. Istraživanje znanstvenika Tehničke škole Sveučilišta Britanske Kolumbije (University of British Columbia) iz 2020. pokazalo je da reciklirani beton u nekim slučajevima po svojstvima može nadmašiti konvencionalni. Istraživanja pokazuju da proizvodnja cementa doprinosi 7 % globalnoj emisiji CO₂. Također se procjenjuje da građevinski otpad, nastao građenjem i rušenjem, čini do 40 % svjetskog otpada. Istraživanja na Sveučilištu Britanska Kolumbija nalazi da uporaba građevinskog otpada za cirkularnu proizvodnju betona daje značajan globalni doprinos kvaliteti i održivosti proizvodnje.^{9–10}

2. Materijali i metode

Primijenjeno je modeliranje i kauzalna analiza modela umjetne inteligencije velikog skupa eksperimentalnih podataka različitih mješavina s cementom i tlačne čvrstoće betona.¹¹ Podatci su dostupni u otvorenom pristupu na Sveučilištu u Kaliforniji u bazi podataka UCI Machine Learning Repository.¹² Baza podataka sadrži rezultate 1030 eksperimenata i devet varijabli. Pregled podataka i osnovnih statističkih parametara dan je u tablici 1. Važno je istaknuti da su podatci nestacionarni, mjereni su tijekom širokog raspona vremena, od 1 do 365 dana.

Primijenjeni modeli temelje se na pretpostavci da je proces opisan kontinuiranim slučajnim varijablama s normalnim (Gausovim) gustoćama vjerojatnosti $X_i \in N_i$, $i = 1, \dots, 9$ sa zajedničkom raspodjelom gustoće vjerojatnosti $P = P(\mathbf{X})$. S pretpostavkom da su varijable međusobno nezavisne i linearno zavisne primijenjen je linearni regresijski model

$$X_9 = \beta_0 + \sum_{i=1}^8 \beta_i X_i \quad (1)$$

gdje je indeks $i = 9$ pridružen varijabli tlačna čvrstoća betona. Model, osim linearnog učinka i nezavisnosti varijabli, također pretpostavlja zanemariv učinak djelovanja interakcije između varijabli na tlačnu čvrstoću betona kao izlaznu veličinu, $y = X_9$. Pretpostavka o linearnosti modela je nerealna i određivanje učinka pojedinih varijabli je nerealna i pristrana. Kauzalnost pojedinih varijabli može se prikazati

grafički kao $X_i \rightarrow X_j$, što implicira direktni učinak, odnosno promjena varijable X_i ima posljedicu promjenu varijable X_j uz uvjet da su sve preostale varijable konstantne. Pretpostavljena kauzalna relacija je usmjerena, odnosno nije povratna i promjena X_j nema kao posljedicu promjenu X_i . Grafički model sveukupne kauzalne povezanosti varijabli određuje Bayesov usmjereni aciklički graf (engl. *directed acyclic graph*, DAG). Funkcionalna povezanost između varijabli određena je, linearnom i/ili nelinearnom, uvjetnom razdiobom gustoće vjerojatnosti $P(X_j | X_i)$. Model je graf G , skup određen varijablama X kao čvorovima i E usmjerenim poveznicama ("strelicama"), $G = \{X, E\}$. Primjena lančane kauzalne povezanosti omogućuje dekompoziciju $P(\mathbf{X})$ ukupne razdiobe gustoće vjerojatnosti N varijabli pomoću varijabli s direktnim učinkom $par(X_i)$.

$$P(\mathbf{X}) = \prod_{i=1}^N P(X_i | par(X_i)) \quad (2)$$

U ovom radu struktura grafa određena je optimiranjem Bayesova informacijskog kriterija (engl. *Bayes information criteria*, BIC) definirana vjerodostojnošću L (engl. *likelihood*) hipoteze te broja podataka N i parametara N_p .

$$BIC = N_p \cdot \ln(N) - 2 \cdot \ln(L) \quad (3)$$

Strukture kauzalnog grafa \hat{G} procjenjuje se na osnovi podataka \mathbf{X} optimiranjem Bayesova informacijskog indeksa (BIC), na primjer heurističkim algoritmom

$$\hat{G} = \underset{i}{\min} [BIC(\mathbf{X} | G_i)] \quad (4)$$

Kauzalni učinak varijable X na Y definiran je kao ATE (engl. *average treatment effect*) određen kao prosječna EZ promjena djelovanja $do(X = x)$ uzroka na posljedicu. Prosječna vrijednost učinka određena je s prilagođenim skupom kovarijabli \mathbf{Z} kad se osnovi usmjerene separacije (engl. *d-separation*) grafa uklone interferirajući (engl. *confounding*) utjecaji preostalih varijabli. Blokiranjem interferirajućih varijabli gustoća vjerojatnosti učinka određena je izrazom (engl. *back door criteria*).

Tablica 1 – Komponente betonske smjese, minimalne i maksimalne vrijednosti, srednja vrijednost i standardna devijacija
Table 1 – Components of concrete mixtures: minimum, maximum, mean value, and standard deviations

komponenta	min.	maks.	srednja	s.d.
cement/kg m ⁻³	102	540	281,2	104,5
žgura/kg m ⁻³	0,0	359,4	73,9	86,3
pepeo/kg m ⁻³	0,0	200,1	54,1	64,9
voda/kg m ⁻³	121,8	247,0	181,6	21,3
plastifikator/kg m ⁻³	0,0	32,2	6,2	5,9
krupni agregat/kg m ⁻³	801,0	1145,0	972,9	77,7
sitni agregat/kg m ⁻³	594,0	992,6	773,6	80,2
vrijeme/dani	1	365	45,7	63,2
tlačna čvrstoća/MPa	2,33	82,60	35,82	16,7

$$P(Y | do(X = x)) = \sum_{z \in Z} P(Y | x, z) P(z) \quad (5)$$

Kao numerička vrijednost kauzalnog učinka varijable X na varijablu Y uzima se pozitivna ili negativna vrijednost promjene odnosno numeričke procjene derivacije

$$ATE[y(x)] = \frac{d}{dx} E_z [(Y | do(X = x, Z))] \quad (6)$$

Funkcionalna zavisnost $y(\mathbf{X})$ složena je i nepoznata i procjenjuje se modelima “dubokog učenja” s višeslojnom neuronskim mrežama. Informacija I_i usmjereno se prenosi kroz n slojeva neurona ovisno o funkciji aktivacije σ i težinskih koeficijenata ω_i .

$$\begin{aligned} I_0 &= \mathbf{X} \\ \text{BNN} &= \{ I_i = \sigma(\omega_i \cdot I_{i-1} + \beta_i) \quad i = 1, 2 \dots n \\ y &= I_n \end{aligned} \quad (7)$$

Kad su parametri neurona slučajne veličine, Bayesova neuronska mreža (BNN), postupak “učenja” parametara provodi se primjenom procjene *posteriori* razdiobe gustoće vjerojatnosti temeljem izmjerenih podataka i *a priori* razdiobe gustoća vjerojatnosti parametara neurona

$$P(\omega, \beta | \mathbf{X}) = \frac{P(\mathbf{X} | \omega, \beta) \cdot P(\omega, \beta)}{P(\mathbf{X})} \quad (8)$$

Statistika (matematičko očekivanje i standardna devijacija) parametara (ω, β) BNN mreže i izlazne veličine Y određuje se uzorkovanjem *posteriori* raspodjele iteracijom simulacije algoritmom slučajnog hoda (engl. *Markov chain Monte Carlo*, MCMC).

Bayesova neuronska mreža BNN (\mathbf{X}) modela tlačne čvrstoće betona omogućuje optimiranje betonske smjese s ciljem održivosti građevinarstva smanjenjem ugljičnog otiska proizvodnjom cementa i cirkularnom uporabom otpadnog materijala. Model optimiranja je nelinearan uz ekološka, tehnološka i ekonomska ograničenja. Na primjer, model optimiranja sastava 1 m³ betona minimalne tlačne čvrstoće $\min(x_9)$ dan je funkcijom cilja F (izraz (9)) i ograničenjima raspoloživih količina (izrazi ((9)–(15)).

$$F = \min(\text{cement} = x_1) \quad (9)$$

$$\text{tlačna čvrstoća betona} = \text{BNN}(\mathbf{X}) \geq \min x_9 \quad (10)$$

$$\max(x_2) \geq \text{troska} \geq \min(x_2) \quad (11)$$

$$\max(x_3) \geq \text{pepeo} \geq \min(x_3) \quad (12)$$

$$\max(x_5) \geq \text{krupni šljunak} \geq \min(x_5) \quad (13)$$

$$\max(x_6) \geq \text{sitni šljunak} \geq \min(x_6) \quad (14)$$

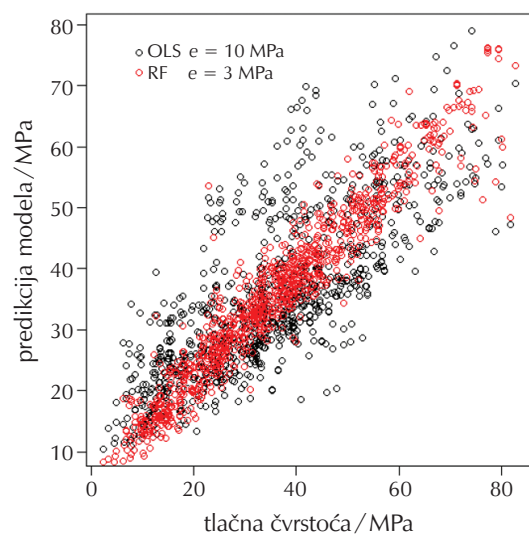
$$x_8 \geq 100 \quad (15)$$

Cilj je da se smanjenjem udjela cementa u betonskoj smjesi smanji emisija CO₂ uz postizanje propisane minimalne

tlačne čvrstoće betona i ograničenjima raspoloživih ugljično neutralnih komponenata. Analitičko optimiranje bilo bi vrlo složeno i praktično nemoguće provesti i stoga je racionalno primijeniti metodu umjetne inteligencije genetičkog algoritma. To je heuristička metoda kojom se emulira proces prirodne selekcije i evolucijske biologije.

3. Rezultati i diskusija

Osnovni razlog za primjenu umjetne inteligencije modeliranja kauzalnosti učinka betonske smjese na tlačnu čvrstoću betona ilustriran je rezultatima prikazanim na slici 1. Uspoređene su predikcije linearnim modelom (OLS, jedn. (1)) i agnostičkim (nekauzalnim) skupom (“šumom”) stabala odlučivanja (RF). Primijenjeni su numerički algoritmi računalnog sustava s otvorenim pristupom R.¹³⁻¹⁴ Velika je razlika u točnosti predviđanja s “novim” podacima koji nisu bili uključeni u postupak razvoja modela (“učenja”). Linearni model objašnjava 61,25 % varijance sa srednjom apsolutnom pogreškom od 10 MPa. Model umjetne inteligencije (RF) objašnjava varijancu novih podataka s udjelom od 90,78 % i srednjom apsolutnom pogreškom od 3 MPa. Razlog neprihvatljivosti linearnog modela su pretpostavke da su zavisnosti čvrstoće betona o pojedinim komponentama smjese linearne te da ne postoji učinak međusobne interakcije (sinergizam). Rezultati nelinearnog modela RF umjetne inteligencije pokazuje da su te pretpostavke nerealne. Oba modela (OLS i RF) su agnostički i podložni su pogreškama interpretacije važnosti pojedinih varijabli. Na primjer, prve tri najvažnije varijable za OLS model su cement s 29,6 % udjela u predikciji tlačne čvrstoće betona, zatim žgura s 21,19 % i voda sa 7,57 %. Nelinearni AI model s RF predviđa da je najvažniji prediktor udio cementa s 22,22 % udjela u predikciji, zatim voda 15,76 % i super-



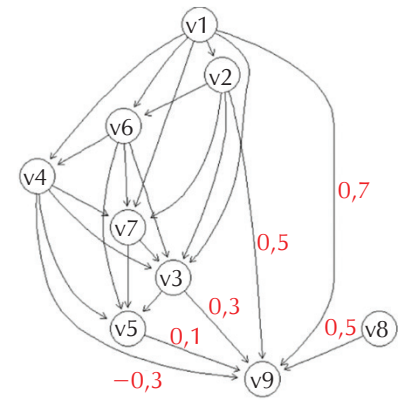
Slika 1 – Usporedba predikcije tlačne čvrstoće betona linearnim modelom (OLS) i umjetne inteligencije skupom (“šumom”) stabala odlučivanja (RF)

Fig. 1 – Comparison of concrete compressive strength predictions by the linear (OLS) model, and by artificial intelligence (AI) with a random forest of decision trees

plastifikator s 10,91 %. Rezultati uvjerljivo pokazuju neprihvatljivost linearnog modela i visoku točnost predikcije modelom RF umjetne inteligencije. Oba modela su agnostička i ne objašnjavaju dinamiku procesa koja je ključna pojava. Unatoč visokoj točnosti predikcije zasnovanoj na interpolaciji RF modela, interpretacija važnosti pojedinih varijabli je nepouzdana zbog interferencije utjecaja.

S ciljem određivanja modela koji omogućuje predikciju učinaka intervencije sastava smjese izvan područja interpolacije određena je struktura kauzalnih veza pomoću Bayesove mreže (BN, jedn. (2)–(4)). Mreža je određena heurističkim optimiranjem algoritmom "Hill climbing" Bayesova informacijskog kriterija, BIC. Kauzalna BN mreža je DAG, dobivena primjenom računalne podrške dostupne u otvorenom statističkom računalnom sustavu R, prikazana je na slici 2.¹⁵ Na slici 2 naznačene su vrijednosti "jakosti" kauzalnih veza određene standardnih vrijednosti linearnih koeficijenata (β). Značajke mreže su: prosječni Markov pokrov (engl. *blanket*) je 7,11; prosječan broj raskrižja je 2,67, a prosječan broj susjednih čvorova je 5,33. Iz DAG modela vidljivo je da su cement i vrijeme egzogene varijable. Cement ima neposredni uvjetni kauzalni učinak na sve varijable izuzevši plastifikator. Vrijeme ima jedino direktni kauzalni utjecaj na tlačnu čvrstoću betona. Preostale varijable su endogene, što je uvjetovano planom i izborom mjerenih eksperimentalnih parametara. DAG pokazuje da je kauzalna veza između cementa i plastifikatora posredna, uvjetovana je medijacijom šljunka i lebdećeg pepela. Neposredni kauzalni učinak vode na tlačnu čvrstoću betona je negativan, ali je pozitivan posrednom medijacijom plastifikatora. Negativni direktni kauzalni efekt vode je posljedica odabranog područja količine vode u eksperimentima. Zbog složenih interakcija varijabli dolazi do interferencija i pristranosti analizom korelacije. Da bi se blokirao utjecaj interferencije, primijenjen je algoritam d -separacije. Za određivanje prilagođenih skupova d -separacijom primijenjena je računalna podrška R.¹⁶ Čvorovi mreže minimalnih prilagođenih skupova Z varijabli dani su u tablici 2. Prilagođeni skupovi Z varijabli omogućuju eliminaciju interferencije preostalih varijabli i nepristrano određivanje funkcionalne kauzalne zavisnosti. Zbog izrazitih nestacionarnih nelinearnih interakcija za modeliranje funkcionalne kauzalnosti primijenjene su stohastičke BNN.

- v1: cement
- v2: žgura
- v3: lebdeći pepeo
- v4: voda
- v5: superplastifikator
- v6: krupni agregat
- v7: sitni agregat
- v8: vrijeme
- v9: tlačna čvrstoća betona



Slika 2 – Bayesova kauzalna DAG mreža s naznakama "jakosti" kauzalnih veza

Fig. 2 – Bayes causal DAG network with "strength" of causal relations

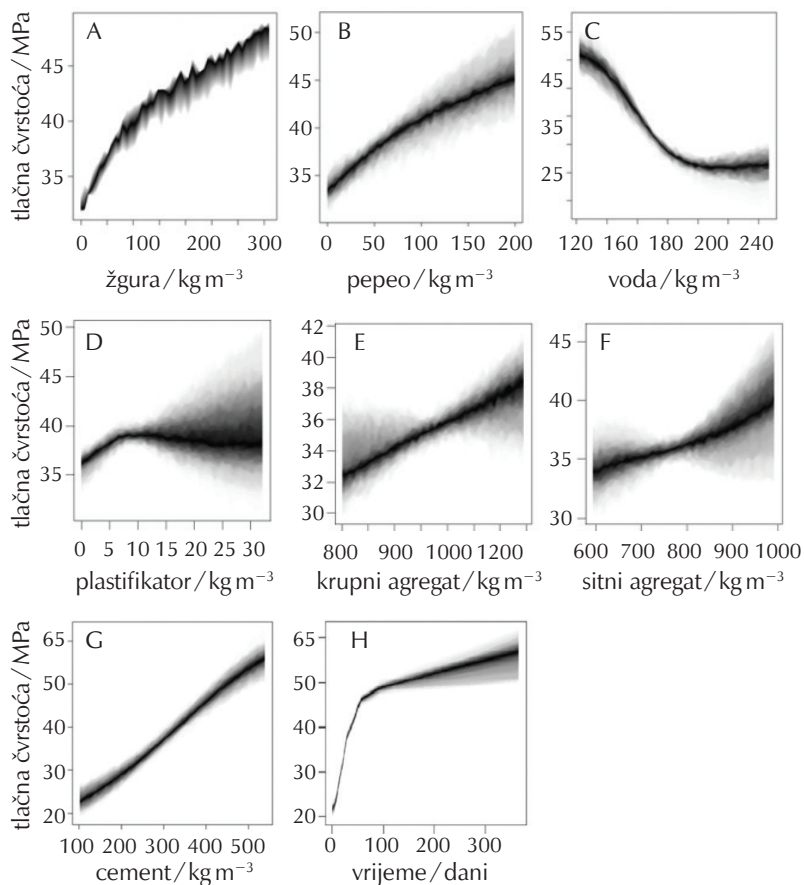
Bayesove neuronske mreže sa skupovima prilagođenih ulaznih varijabli. Na slici 3 dani su prikazi pojedinih funkcija kauzalnih zavisnosti predikcije promjene tlačne čvrstoće betona zavisno o količinama pojedinih komponenata betonske smjese.

Prikazana su raspršenja predviđanja (predikcija) $do(Y | X = x)$ za svaki od pojedinih $n = 1030$ eksperimenata. Rezultati pokazuju izrazite nelinearnosti (slike 3.C–F) i bifaznost vremenskog procesa hidratacije i očvršćivanje betona (slika 3.H). Učinak troske i lebdećeg pepela je linearno pozitivno proporcionalan u ukupnom mjernom području (slike 3.A i 3.B). Učinak vode je izrazito nelinearan i proporcionalno se smanjuje u području količina od 120 do 180 kg m⁻³ i zatim za veće količine postaje stalan (slika 3.C). Izostanak dijela pozitivnog učinka vode je posljedica izbora područja mjernog opsega eksperimenta. Učinak plastifikatora je pozitivan i proporcionalan u području 6 – 10 kg m⁻³, a zatim slijedi pad uz veliko raspršenje predikcije (slika 3.D). Raspršenje predikcije čvrstoće za veće udjele posljedica je nesigurnosti zbog manjeg broja eksperimenata u tom području. Kauzalna zavisnost čvrstoće betona o udjelima šljunka i cementa je linearno pozitivna (slike 3.E–G). Zavisnost čvrstoće o vremenu (slika 3.H) izrazito

Tablica 2 – Prilagođeni skupovi d -separacijom varijabli Z kauzalnih učinaka čvrstoće betona

Table 2 – Adjusted sets of d -separated variables Z of causal effects on concrete strength

Prilagođeni skup varijabli								
	cement	žgura	lebdeći pepeo	voda	plastifikator	krupni agregat	sitni agregat	starost betona
cement	X							X
žgura	X	X						X
lebdeći pepeo	X	X	X		X	X		X
voda	X			X		X		X
plastifikator			X	X	X	X	X	X
krupni agregat	X	X				X		X
sitni agregat	X	X		X		X	X	X



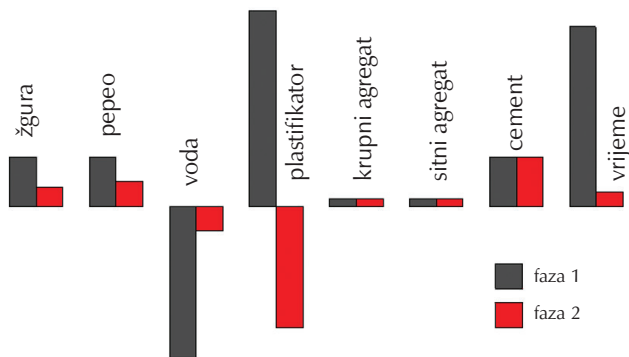
Slika 3 – Grafički prikazi kauzalnih učinaka $do(Y | X = x)$ komponenta betonske smjese na tlačnu čvrstoću betona određenih stohastičkim Bayesovim neuronskim mrežama

Fig. 3 – Graphical presentations of the causal effects $do(Y | X = x)$ of the concrete mixture components on the compressive strength of concrete determined by stochastic Bayesian neural networks

pokazuje dvofazni karakter, brzo skrućivanje tijekom prvih 100 dana nakon čega slijedi usporeni proces. Prva faza je kinetički limitirana kao posljedica kemijske reakcije nultog reda uz suvišak reaktanta, a u drugoj fazi dolazi do limitirano difuzijom. Iz grafičkih prikaza $do(Y | X = x)$ na slici 3 mogu se aproksimativno odrediti nagibi segmenata linearnih zavisnosti kao prosječne vrijednosti ATE (jedn. (6)).

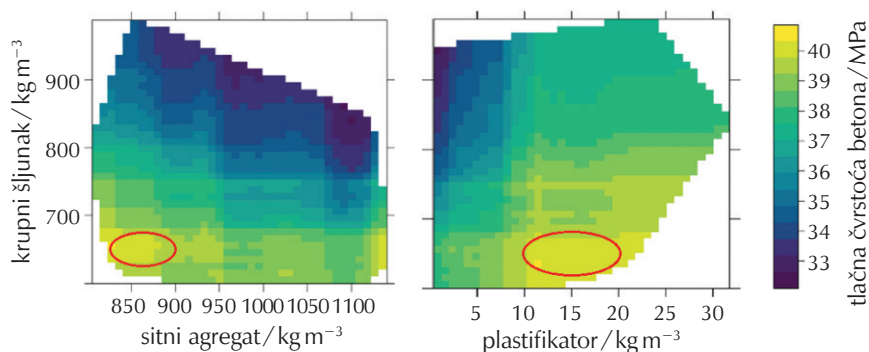
Vrijednosti ATE određene za pojedine faze procesa prikazane su na slici 4. Procijenjeni relativno visoko izraženi negativni ATE za plastifikator treba smatrati nepouzdanim zbog velikog raspršenja predikcije modela (slika 3.D). Numeričke vrijednosti ATE parametara, formalno promjene tlačne čvrstoće betona za jedinične promjene sastava smjese, nisu direktno usporedive zbog različitih mjernih jedinica pojedinih komponentata.

Dobiveni kauzalni model omogućuje predikcije posljedica planiranih intervencija u sastav betonske smjese kao i optimiranje. Model optimiranja (izrazi (9)–(15)) može se definirati s ciljem minimizacije potrošnje cementa, optimalnog iskorištenja prirodne sirovine i građevinskog otpada, i s time smanjenjem ugljičnog otiska doprinijeti održivosti



Slika 4 – Prosječni učinci (ATE) komponentata betonske smjese na tlačnu čvrstoću betona tijekom dviju faza, (1) stvrdnjavanja i (2) zrenja betona

Fig. 4 – Average treatment effects (ATE) of the concrete mixture components on the compressive strength of concrete during two stages: (1) curing, and (2) maturation of the concrete



Slika 5 – Područja optimalnih sastava smjese (sitni i krupni agregat, plastifikator) dobivenih minimizacijom udjela cementa

Fig. 5 – Regions of optimal composition of the mixture (fine and coarse gravel, plasticiser) obtained by minimising the cement content

građevinarstva. Na slici 5 prikazana su područja optimalnih udjela šljunka i plastifikatora. Minimiziranjem udjela cementa moguće je smanjiti ugljični otisak do 30 % za tlačnu čvrstoću betona iznad 45 MPa. Primjena genetičkog algoritma izrazito je učinkovita i fleksibilna s obzirom na širok raspon mogućih specifičnih ciljeva i ograničenja.¹⁸

4. Zaključak

Primijenjena je metodologija kauzalne umjetne inteligencije za analizu i optimiranje sastava cementne smjese s ciljem doprinosa održivosti u građevinarstvu. Nelinearna interakcija komponenata smjese modelirana je stohastičkom Bayesovom neuronskom mrežom i modelom sustava stabala odlučivanja. Neuronska mreža uključuje vrijeme, jer je složena interakcija komponenata smjese dinamički proces skrućivanja i zrenja betona tijekom kojeg dolazi do promjena kauzalnih povezanosti. Provjera točnosti modela provedena je s podacima izvan skupa učenja. Prosječna apsolutna pogreška modela predikcije tlačne čvrstoće betona je 3 MPa (3,75 % mjernog opsega) s 90,7 % modelom objašnjenja varijance. Struktura kauzalnih povezanosti određena je heurističkom minimiziranjem Bayesova informacijskog indeksa (BIC). Dobiveni model je SCM nestacionarni usmjereni aciklički graf (DAG) na osnovi kojega su *d*-separacijom određeni prilagođeni skupovi *Z* varijabli kojima se blokiraju interferencije i pristranosti kauzalnih zavisnosti. SCM modelom identificirani su cement i vrijeme kao egzogene varijable, a komponente smjese su endogene. Grafički prikazi kauzalnosti pokazuju, osim linearnih, i nelinearne zavisnosti učinaka plastifikatora i vode na čvrstoće betona. Grafički prikaz kauzalne zavisnosti tlačne čvrstoće betona o vremenu pokazuje kinetičko i difuzijsko ograničenje kinetike nultog reda.

Praktična vrijednost predloženog kauzalnog modela umjetne inteligencije učinaka sastava betonske smjese je u njegovoj primjeni optimiranja u sustavu održivog gospodarstva u građevinarstvu. Kauzalnost modela umjetne inteligencije čvrstoće betona o sastavu omogućuje *do(x)* analizu učinaka i optimiranje sastava za ekonomska ograničenja i raspoloživosti alternativnih sirovina i otpadnog građevin-

skog materijala. Model umjetne inteligencije uključen je u vrlo učinkovit genetički model optimiranja. Rezultati pokazuju da je moguće potencijalno smanjiti ugljični otisak proizvodnjom cementa i za 30 % za beton tlačne čvrstoće iznad 45 MPa.

Literatura References

1. European Commission: Industry 5.0, url: https://research-and-innovation.ec.europa.eu/research-area/industrial-research-and-innovation/industry-50_en (pristup 1. 8. 2024.).
2. S. Hrehova, L. Knapcikova, The Study of Machine Learning Assisted the Design of Selected Composites Properties, *Appl. Sci.* **12** (2022) 10863, doi: <https://doi.org/10.3390/app122110863>.
3. C.-T. Chen, G. X. Gu, Machine learning for composite materials, *MRS Communications* **9** (2019) 556–566, doi: <https://doi.org/10.1557/mrc.2019.32>.
4. Y. Cheng, T. Wang, G. Zhang (Eds.), *Artificial intelligence for material science*, 1st Ed., Springer Cham, Švicarska, 2021, str. I–VII, 1–228, doi: <https://doi.org/10.1007/978-3-030-68310-8>.
5. J. Pearl, D. Mackenzie, *The Book of Why: The New Science of Cause and Effect*, Penguin Books, Harlow, UK, 2019.
6. N. Ganguly, D. Fazlija, M. Badar, M. Fisichella, S. Sikdar, J. Schrader, J. Wallat, K. Rudra, M. Koubarakis, G. K. Patro, W. Zai El Amri, W. Nejdl, A Review of the Role of Causality in Developing Trustworthy AI Systems, arXiv:2302.06975v1, doi: <https://doi.org/10.48550/arXiv.2302.06975>.
7. Ž. Kurtanjek, Važnost analize kauzalnosti za studije kemije i kemijskog inženjerstva, *Osvrti, Kem. Ind.* **70** (7-8) (2021) 467–471.
8. Ž. Kurtanjek, Kad zaključivanje matematičkim modelom može biti pogrešno: Primjer protočnog kemijskog reaktora PKR, *Osvježimo znanje, Kem. Ind.* **70** (11-12) (2021) 739–741.
9. T. Dokonal, Održivo gospodarstvo u građevinarstvu, url: <https://www.mineral.com.hr/6462/odrzivo-gospodarstvo-u-gradjevinarstvu> (pristup 1. 8. 2024.).
10. Canadian study finds recycled concrete often outperforms conventional concrete, url: <https://imsirl.ie/blog/canadi>

- an-study-finds-recycled-concrete-can-outperform-conventional-concrete/ (pristup 1. 8. 2024.).
11. S. A. R. Shah, M. Azab, H. M. Seif Eldin, O. Barakat, M. K. Anwar, Y. Bashir, Predicting Compressive Strength of Blast Furnace Slag and Fly Ash Based Sustainable Concrete Using Machine Learning Techniques: An Application of Advanced Decision-Making Approaches, *Buildings* **12** (2022) 914, doi: <https://doi.org/10.3390/buildings12070914>.
 12. I.-C. Yeh, Concrete Compressive Strength, UCI Machine Learning Repository (2007), doi: <https://doi.org/10.24432/C5PK67>.
 13. R Core Team, R: A language and environment for statistical computing. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, 2023, Austria, url: <https://www.R-project.org> (pristup 1. 8. 2024.).
 14. A. Liaw, M. Wiener, Classification and Regression by randomForest, *R News* **2** (3) (2002) 18–22.
 15. M. Scutari, Learning Bayesian Networks with the bnlearn R Package, 2020. url: <http://www.jstatsoft.org/v35/i03/> (pristup 1. 8. 2024.).
 16. J. Textor, B. van der Zander, M. S Gilthorpe, M. Liškiewicz, G. T. H. Ellison, Robust causal inference using directed acyclic graphs: the R package 'dagitty', *Int. J. Epidemiol.* **45** (6) (2016), 1887–1894, doi: <https://doi.org/10.1093/ije/dyw341>.
 17. L. Scrucca, On some extensions to GA package: hybrid optimisation, parallelisation and islands evolution, *R J.* **9** (1) (2017) 187–206, doi: <https://doi.org/10.32614/RJ-2017-008>.
 18. B. A. Le, B. V. Tran, T. S. Vu, N. Van-Hung, V.-H. Nguyen, Predicting the Compressive Strength of Pervious Cement Concrete based on Fast Genetic Programming Method, *Arab. J. Sci. Eng.* **48** (7) (2023) 8287–8305, doi: <https://doi.org/10.1007/s13369-023-08396-2>.

SUMMARY

AI-supported Causal Analysis and Optimisation of Sustainable Concrete Mixture Compositions

Želimir Kurtanjek

A causal analysis of the effects of environmentally sustainable cement mixtures on the compressive strength of concrete and the reduction of CO₂ emissions was conducted in this study. A Bayesian causal model, decision tree sets, and deep neural networks were applied. The model is based on a large dataset with a sample size of $n = 1030$, and $p = 9$ composition variables: Portland cement, slag, fly ash, water, plasticiser, coarse gravel, fine gravel, time, and compressive strength of concrete. The model is a directed acyclic graph (DAG) determined by a heuristic procedure for optimising the Bayesian Information Criterion (BIC). The resulting AI model, using machine learning, enables the prediction of the compressive strength of concrete with an average absolute error of 3 MPa (4.3 %) compared to an error of 10 MPa of the multiple linear model. To eliminate interfering effects among variables, a criterion of directed separation (*d*-separation) was applied to determine the causal effects of individual variables on the compressive strength of concrete. These effects are expressed as average treatment effects (ATE). The analysis of the causal effect of time reveals a two-phase, zero-order kinetics dynamics. The highest ATE values (MPa/kg m⁻³) during the first phase of the process were: coarse gravel 0.53, plasticiser 0.35, and fine gravel 0.19, while the largest negative effect was water -0.3. In the second phase of the process, the highest positive ATE of 0.5 was shown by the plasticiser, and the largest negative was for coarse gravel -0.23. Given the complex interactions between variables and the dynamic nature of the process, a genetic algorithm is proposed for optimising the mixture composition. The AI model predicts potential CO₂ emission reductions of up to 30 % when using fly ash, and up to 50 % when using slag.

Keywords

Artificial intelligence, causality, optimisation, concrete

University of Zagreb Faculty of Food
Technology and Biotechnology, Pierrotijeva
6, 10 000 Zagreb, Croatia

Original scientific paper
Received December 21, 2023
Accepted August 19, 2024