

Materiales de Construcción  
Vol. 60, 297, 7-18  
enero-marzo 2010  
ISSN: 0465-2746  
eISSN: 1988-3226  
doi: 10.3989/mc.2010.55209

## Predicción de las propiedades mecánicas del cemento en la micro-escala

### *Prediction of mechanical properties of cement paste at microscale*

Z. Qian<sup>(\*)</sup>, E. Schlangen<sup>(\*)</sup>, G. Ye<sup>(\*)</sup>, K. van Breugel<sup>(\*)</sup>

Recepción/Received: 29-IX-09  
Aceptación/Accepted: 12-XI-09  
Publicado online/Online publishing: 9-II-10

#### RESUMEN

En el presente trabajo se ha realizado una predicción de las propiedades mecánicas del cemento en la micro-escala, empleando un modelo de fractura reticular 3D.

En primer lugar se simula la micro-estructura del cemento mediante el código HYMOSTRUC3D, representando dicha micro-estructura mediante partículas esféricas. A continuación, la micro-estructura generada se convierte en una imagen basada en "vóxeles", y se construye un sistema reticular basado en esa imagen mediante el código ImgLat (Image to Lattice). Se define un ensayo de tensión uniaxial virtual, y se simula el proceso de fractura usando el código GLAK (Generalized Lattice Analysis Kernel). Los resultados obtenidos de esta simulación del proceso de fractura son diagramas de carga-desplazamiento y propagación de micro-roturas. El diagrama de carga-desplazamiento caracteriza el comportamiento a fractura de la pasta de cemento en la micro-escala, y a partir de éste se puede obtener la resistencia a fractura y el módulo de elasticidad del material.

Con el objetivo de mostrar el funcionamiento de la simulación, se ha realizado un experimento teórico, cuyos resultados sirven para validar el modelo empleado.

**Palabras clave:** modelo reticular 3D, simulación de fractura, pasta de cemento, micro-escala, predicción de propiedades mecánicas.

#### SUMMARY

*Prediction of the mechanical properties of cement paste at microscale has been done in this contribution by making use of 3D lattice fracture model.*

*The microstructure of cement paste is simulated by HYMOSTRUC3D first, which is represented in terms of sphere particles. Then the microstructure is converted into a voxel-based image, and a lattice system is constructed based on the image of the microstructure through ImgLat (Image to Lattice). A virtual uni-axial tensile test is configured and the fracture process is simulated by GLAK (Generalized Lattice Analysis Kernel). The outputs of fracture process simulation are the load-displacement diagram and micro-cracks propagation. The load-displacement diagram reveals the tensile behavior of cement paste at microscale, from which the elastic modulus and tensile strength can be obtained.*

*A numerical experiment is carried out to show how the model works, and the final results also demonstrate the feasibility of the above modeling procedure.*

**Keywords:** 3D Lattice Modeling, Fracture Process Simulation, Cement Paste, Microscale, Mechanical Properties Prediction.

<sup>(\*)</sup> Microlab, Delft University of Technology (Delft, Holanda).

Persona de contacto/Corresponding author: z.qian@tudelft.nl



Trabajo presentado en el 1st CODICE workshop on Multi-scale Modelling and Experiments for Cementitious Materials.  
Paper presented at 1st CODICE workshop on Multi-scale Modelling and Experiments for Cementitious Materials.

## 1. INTRODUCCIÓN

Actualmente, los materiales en base cemento son los materiales de construcción más empleados en el mundo. Algunos ejemplos de materiales en base cemento son la pasta de cemento, los morteros y el hormigón. El estudio de la relación entre la micro-estructura y el rendimiento de los materiales cementicios es muy necesario, ya que si conseguimos entender a nivel fundamental los mecanismos de fallo, podremos diseñar materiales de altas prestaciones.

Para acercarnos ese objetivo, es esencial desarrollar un esquema de modelización multi-escalar, interconectando las diferentes escalas. Como parte de ese esquema, en este trabajo se ha realizado una predicción de las propiedades mecánicas del cemento en la micro-escala empleando el modelo "3D lattice fracture" (1-3). En un trabajo similar Bernard simula la micro-estructura de la pasta de cemento usando el modelo CEMHYD3D, y aplicando elementos sólidos para el análisis por elementos finitos (EF) (4).

En primer lugar se simula la micro-estructura del cemento mediante el código HYMOSTRUC3D (5, 6), representando dicha micro-estructura mediante partículas esféricas. A continuación, la micro-estructura generada se convierte en una imagen basada en "vóxeles" y se construye un sistema reticular basado en esa imagen mediante el código ImgLat (Image to Lattice). Se define un ensayo de tensión uniaxial virtual y se simula el proceso de fractura usando el código GLAK (Generalized Lattice Analysis Kernel). Los resultados obtenidos de esta simulación del proceso de fractura son diagramas de carga-desplazamiento y propagación de micro-roturas. El diagrama de carga-desplazamiento caracteriza el comportamiento a fractura de la pasta de cemento en la micro-escala, y a partir de éste se puede obtener la resistencia a fractura y el módulo de elasticidad del material.

Con el objetivo de mostrar cómo funciona la simulación se ha realizado un experimento teórico, cuyos resultados sirven para validar el modelo empleado.

## 2. SIMULACIÓN DE LA MICRO-ESTRUCTURA

La hidratación y formación de la micro-estructura de la pasta de cemento ha sido simulada usando el modelo HYMOSTRUC3D. Los datos iniciales necesarios en este modelo son el tamaño de la muestra, la composición mineralógica del cemento, la finura del grano de cemento (representada por el valor de Blaine) y la relación agua/cemento. Los resultados incluyen el diagrama de grado de hidratación frente al tiempo y la información de la hidratación de la pasta de cemento a cada tiempo

## 1. INTRODUCTION

*Cement-based materials are the most widely used construction materials in the world at present. Some examples of cement-based materials are hardened cement paste, mortar and concrete. It is necessary to study the relationship between microstructure and performance of these cementitious materials, because if we can understand the failure mechanisms fundamentally, then high performance materials can be designed and engineered.*

*To approach the above objective, it is essential to develop a serial parameter-passing multi-scale modeling scheme. As part of the scheme, prediction of the mechanical properties of cement paste at microscale has been done in this contribution by making use of 3D lattice fracture model (1-3). Similar work has been done by Bernard, in which the microstructure is simulated by CEMHYD3D model and solid elements are applied for the FE analysis (4).*

*The microstructure of cement paste is simulated by HYMOSTRUC3D (HYdration, MORphology and STRUCture 3D) (5, 6) first, which is represented in terms of sphere particles. Then the microstructure is converted into a voxel-based image, and a lattice system is constructed based on the image of the microstructure through ImgLat (Image to Lattice). A virtual uni-axial tensile test is configured and the fracture process is simulated by GLAK (Generalized Lattice Analysis Kernel). The outputs of fracture process simulation are the load-displacement diagram and micro-cracks propagation. The load-displacement diagram reveals the tensile behavior of cement paste at microscale, from which the elastic modulus and tensile strength can be obtained.*

*A numerical experiment is carried out to show how the model works, and the final results also demonstrate the feasibility of the above modeling procedure.*

## 2. MICROSTRUCTURE SIMULATION

*The hydration and microstructure formation process of cement paste is simulated using the HYMOSTRUC3D model. The required inputs for this model consist of specimen size, mineralogical composition of the cement, cement fineness represented by Blaine value and water/cement ratio. The outputs include degree of hydration versus hydration time diagram and the corresponding microstructure information of the hydrating cement paste system at every specified time*

deseado. Los parámetros iniciales y los resultados finales obtenidos a partir del modelo HYMOSTRUC3D están resumidos en la Figura 1.

*point. The input and output of the HYMOSTRUC3D model are summarized in Figure 1.*

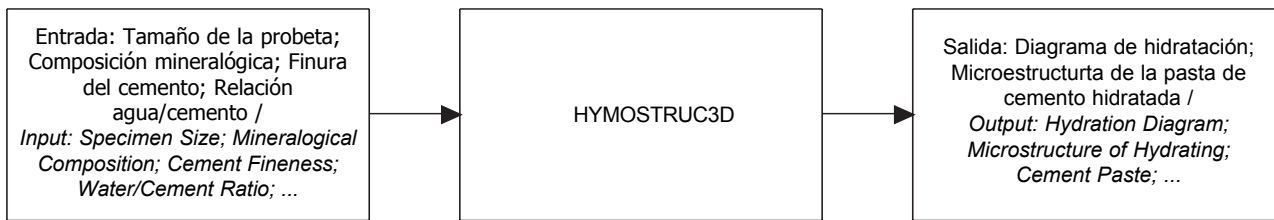


Figura 1. Parámetros iniciales y los resultados finales del modelo HYMOSTRUC3D (7).  
*Figure 1. Input and output of the HYMOSTRUC3D Model after (7).*

En el modelo HYMOSTRUC3D se asume que durante la hidratación se forma un único tipo de gel CSH (Silicato Cálcico Hidratado) y CH (Hidróxido de Calcio), además de convertir el CH en su volumen equivalente de CSH para simplificar la micro-estructura resultante. El gel CSH se divide en producto interno y externo. Por tanto, cada partícula de cemento hidratado puede consistir en tres láminas: cemento sin hidratar, gel CSH interno y gel CSH externo. Como se asume que las partículas de cemento son esféricas, la posición de cada lámina se expresa mediante coordenadas esféricas y su tamaño mediante diámetros.

*In the HYMOSTRUC3D model, it is assumed that only CSH (Calcium Silicate Hydrates) gel and CH (Calcium Hydroxides) gel are produced during the hydration process, furthermore the CH product is transferred to volume equivalent CSH product for simplicity. The CSH product is divided into inner product and outer product. Hence, the hydrating cement particle may consist of three layers in general, namely unhydrated cement, inner product and outer product. As the hydrating cement particle is assumed to be in the shape of sphere, the location of which is expressed by sphere center coordinates and the size by diameters.*

A continuación se da un ejemplo para ilustrar los datos iniciales necesarios para el modelo HYMOSTRUC3D y los correspondientes resultados que muestran la micro-estructura de la pasta de cemento para un determinado grado de hidratación.

*Hereby an example is given to illustrate the necessary input parameters for the HYMOSTRUC3D model and the corresponding outputs which indicate the microstructure of cement paste at a certain degree of hydration.*

En este ejemplo el espécimen de pasta de cemento es un cubo de dimensiones  $100 \times 100 \times 100 \mu\text{m}^3$ . El valor de Blaine del cemento es  $420 \text{ m}^2/\text{kg}$  y la relación agua/cemento es 0,4. La temperatura ambiente es  $20 \text{ }^\circ\text{C}$ . La composición mineralógica empleada, típica del cemento Portland, se da en la Tabla 1.

*In this example, the cement paste is in the shape of a cube with the dimension of  $100 \times 100 \times 100 \mu\text{m}^3$ . The Blaine value of cement is  $420 \text{ m}^2/\text{kg}$  and the water/cement ratio is 0.4. The curing temperature is  $20 \text{ }^\circ\text{C}$ . The mineralogical composition of the Portland cement used in this study is given in percentage of weight content in Table 1.*

Tabla 1 / Table 1  
 Composición mineralógica del cemento Portland CEM I 42.5N (6).  
*Mineralogical composition of the Portland CEM I 42.5N after (6).*

<b>C<sub>3</sub>S</b>	<b>C<sub>2</sub>S</b>	<b>C<sub>3</sub>A</b>	<b>C<sub>4</sub>AF</b>
64%	13%	8%	9%

La Figura 2 muestra uno de los resultados obtenidos del modelo HYMOSTRUC3D, concretamente el diagrama grado de hidratación en función del tiempo.

*Figure 2 shows one of the outputs from HYMOSTRUC3D model, which is the degree of hydration versus hydration time diagram.*

La micro-estructura de la pasta de cemento se obtiene para cada punto del diagrama anterior. La Figura 3 muestra una imagen de esta micro-estructura a las 635 horas de hidratación, correspondientes a un grado de hidratación del 69%.

*At every time point in the above diagram, a microstructure of the hydrating cement paste system is obtained. Figure 3 shows the image of the microstructure of the cement paste at the hydration time 635 hours, and the corresponding degree of hydration is 69%.*

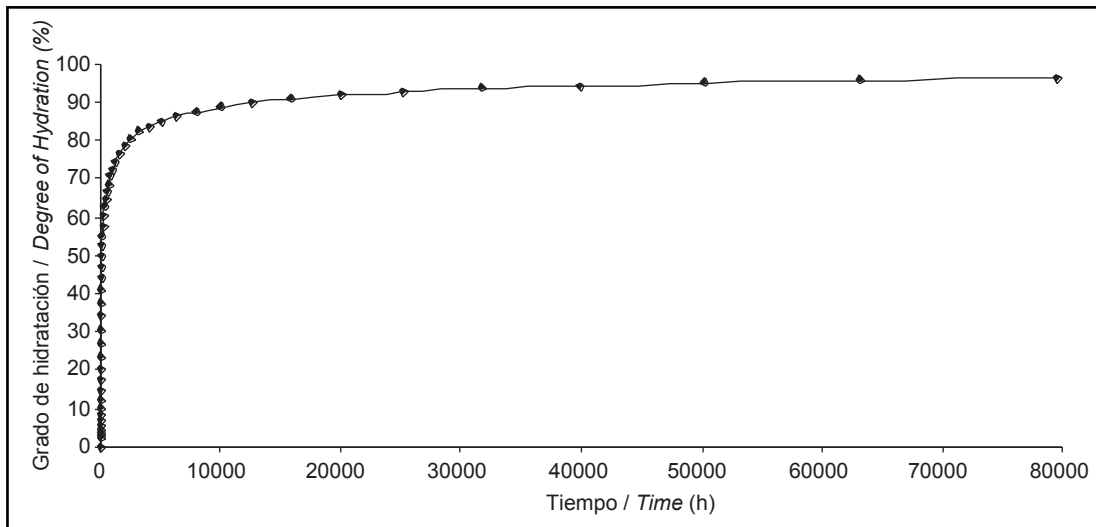


Figura 2. Relación entre grado de hidratación y tiempo.  
 Figure 2. Relationship between the degree of hydration and hydration time.

Esta micro-estructura se puede describir analíticamente mediante el centro de coordenadas de las partículas esféricas y sus diámetros. Para facilitar la construcción de subsiguiente red, es necesario digitalizar esta imagen en "vóxeles", como muestra la Figura 4, con una resolución de 1µm/voxel. En total se pueden identificar cinco fases diferentes, incluyendo una fase vacía y cuatro fases sólidas: cemento sin hidratar, producto interno, producto externo, y una fase mixta. La fase mixta es una combinación de cemento sin hidratar, producto interno y producto externo. Las propiedades elásticas de las fases sólidas pueden medirse o calcularse como se describe en

The above microstructure is described analytically by the sphere particle center coordinates and the diameters. In order to facilitate the following lattice construction, it is necessary to digitize the above microstructure into a voxel-based image as shown in Figure. 4, the resolution of which is 1 µm/voxel. In total, five different phases can be identified, including one void phase and four solid phases which are unhydrated cement, inner product, outer product and mixed phase. The mixed phase is a combination of the unhydrated cement, the inner product and the outer product. The elastic properties of the solid phases can be measured or simulated as

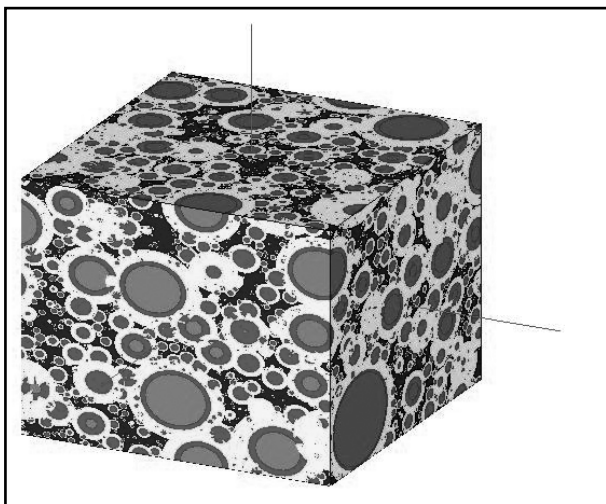


Figura 3. Microestructura de la pasta de cemento (Coeficiente de Blaine = 420 m<sup>2</sup>/kg, agua/cemento = 0,4, grado de hidratación = 69%, tamaño = 100 x 100 x 100 µm<sup>3</sup>).  
 Figure 3. The microstructure of cement paste (Blaine Value = 420 m<sup>2</sup>/kg, water/cement = 0.4, degree of hydration = 69%, size = 100 x 100 x 100 µm<sup>3</sup>).

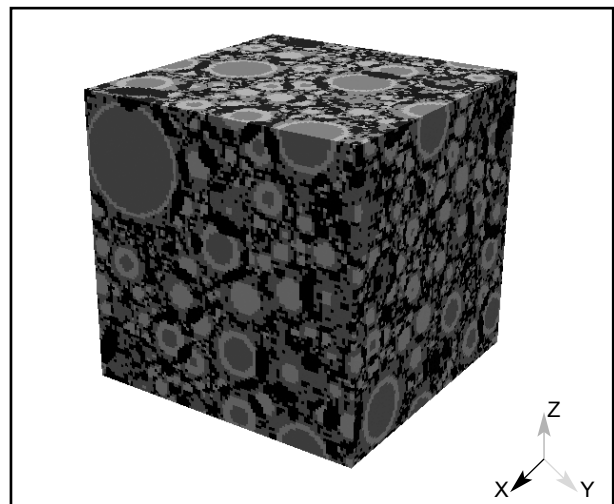


Figura 4. Micro-estructura de la pasta de cemento descrita mediante "vóxeles" (Coeficiente de Blaine = 420 m<sup>2</sup>/kg, agua/cemento = 0,4, grado de hidratación = 69%, tamaño = 100 x 100 x 100 µm<sup>3</sup>, 1 µm/voxel).  
 Figure 4. The voxel-based microstructure of cement paste (Blaine Value = 420 m<sup>2</sup>/kg, water/cement = 0.4, degree of hydration = 69%, size = 100 x 100 x 100 µm<sup>3</sup>, 1 µm/voxel).

las referencias (8-10). La dispersión en los valores de la literatura se debe a los distintos métodos utilizados en cada caso para su cálculo. La Tabla 2 muestra los valores empleados en este trabajo.

presented in (8-10), the values are scattered due to different techniques used. Table 2 shows the elastic properties of solid phases employed in this paper.

Tabla 2 / Table 2  
Propiedades elásticas de las fases sólidas.  
Elastic properties of solid phases.

Fase / Phase	Fase sólida / Solid phase	Módulo de Young E / Young's Modulus E (GPa)	Módulo de cizalla G / Shear Modulus G (GPa)
1	Cemento sin hidratar / Unhydrated cement	130	50
2	Producto interno / Inner product	30	12.1
3	Producto externo / Outer product	22	8.87
4	Fase mixta / Mixed phase	60.7	23.7

### 3. SIMULACIÓN DE LA RED 3D

El modelo de red se ha empleado durante las dos últimas décadas para simular procesos de fractura en materiales en base cemento. En este trabajo, primero se construye una red cuadrangular, para a continuación asignar las propiedades mecánicas de cada elemento de red. Para crear el sistema rectangular se desarrolló un código de pre-procesamiento llamado *ImgLat* (Image to Lattice). El siguiente paso es aplicar un desplazamiento determinado en la parte superior e inferior del espécimen cúbico. La simulación del proceso de fractura comienza y se eliminan los elementos de red rotos gradualmente hasta que el sistema no puede soportar más carga. Se desarrolló el código *GLAK* (Generalized Lattice Analysis Kernel) para completar este análisis. Los resultados de la simulación del proceso de fractura son diagramas de carga-desplazamiento y propagación de micro-roturas. El diagrama de carga-desplazamiento caracteriza el comportamiento a fractura de la pasta de cemento en la micro-escala, y a partir de éste se puede obtener la resistencia a fractura y el módulo de elasticidad del material.

#### 3.1. Construcción de la red

La construcción de la red cuadrangular se muestra en la Figura 5 en 2D para una visualización más clara, aunque las simulaciones se realizan en 3D. Primero, se construye una red cúbica para formar celdas y, a continuación, se define una sub-celda dentro de ellas. La relación de tamaño entre las sub-celda y la celda principal es elegida al azar, y puede variar entre 0 y 1. La sub-celda es idéntica a la celda principal cuando la relación es igual a 1 y se reduce al punto central de la celda si es 0. En este trabajo la relación de tamaño se fijó en 0 para las celdas frontera y en 0,5 para el resto de celdas. Esta configuración da lugar a un patrón de fractura realista y a una forma regular para el espécimen. Tras mallar todas las celdas y sub-celdas, se situó al azar un nodo de red dentro de cada

### 3. 3D LATTICE MODELING

The lattice model was used a lot in the last two decades to simulate the fracture process of cement-based materials. In this paper, a quadrangular lattice structure is constructed first, and then the local mechanical properties of lattice elements are mapped on the basis of the microstructure of cement paste. A pre-processing package called *ImgLat* (Image to Lattice) is developed to create the lattice system. The next step is to apply a prescribed displacement on the top and bottom surfaces of the cubic specimen. The fracture process simulation starts and the broken lattice elements are removed from the system gradually until the system cannot sustain any load. The package *GLAK* (Generalized Lattice Analysis Kernel) is built to complete the task. The outputs of fracture process simulation are the load-displacement diagram and micro-cracks propagation. The load-displacement diagram reveals the tensile behavior of cement paste at microscale, from which the elastic modulus and tensile strength can be obtained.

#### 3.1. Lattice construction

The quadrangular lattice construction is shown in Figure 5 in 2D sketch as it is more straightforward, but the simulations are done in 3D space. First of all, a square grid is made to form cells, then a smaller sub-cell is defined within the cell. The length ratio of the sub-cell and the cell is defined as randomness, thus the value range of randomness is between 0 and 1. The sub-cell is identical to the cell when the randomness is 1 and is reduced to the center point of the cell when the randomness is 0. In this paper, the randomness is set to 0 for all the boundary cells and 0.5 for all the rest ones. This configuration would yield to a realistic crack pattern and a regular specimen shape. After all the cells and sub-cells are meshed, a lattice node is positioned within every sub-cell randomly, then all these

sub-celda, y todos estos nodos se conectaron mediante segmentos de red. Si una celda representa espacio vacío no se genera ningún nodo para esa celda. El resultado de la construcción de la red 3D se muestra en la Figura 6.

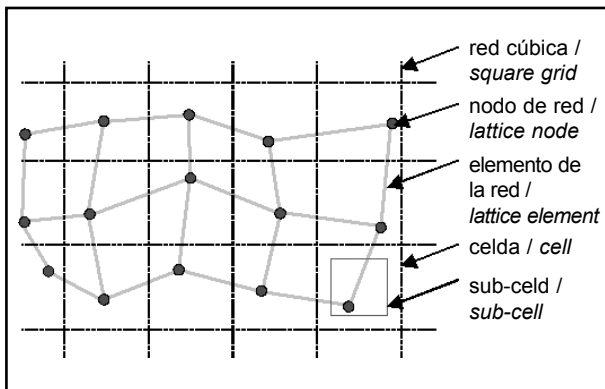


Figura 5. Construcción de la red cuadrangular (11).  
Figure 5. Quadrangular lattice construction after (11).

*lattice nodes are connected by lattice beam elements. However, if the cell represents a void phase, then no lattice node is generated in that cell. The result of 3D lattice construction is given in Figure 6.*

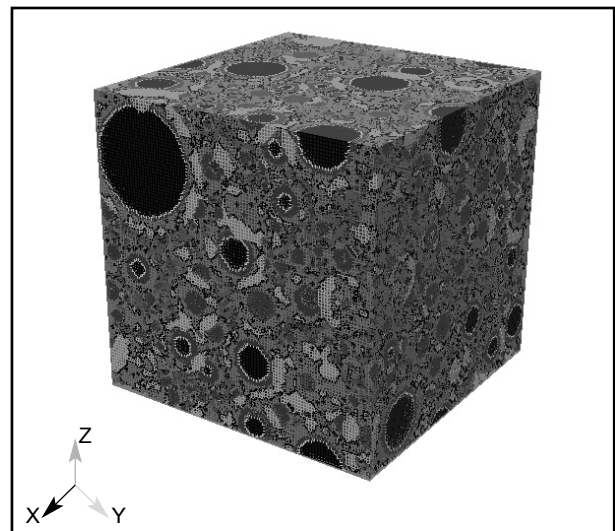


Figura 6. Construcción la red 3D a partir de la micro-estructura de la pasta de cemento basada en "vóxeles".  
Figure 6. 3D lattice construction from the voxel-based microstructure of cement paste.

### 3.2. Determinación de las propiedades de los elementos de red

Se asume que la sección transversal de los elementos de red es circular y su área es igual a de la celda en la configuración 3D,  $1 \mu\text{m}^2$  en el presente trabajo. Una aproximación alternativa para la determinación de la sección transversal de un elemento de red ha sido propuesto por Bolander (12). El módulo de elasticidad de cada elemento de red se determina en función del tipo de elemento. Los tipos de elementos de red se listan en la Tabla 3. Los módulos de Young y de cizalla de cada elemento de la red es una media de las correspondientes fases de los nodos, como se muestra en la Tabla 4.

### 3.2. Determination of lattice element properties

*The cross-section of lattice element is assumed to be circular, and its area is equal to the perpendicular cell surface area in 3D configuration, which is  $1 \mu\text{m}^2$  in this paper. An alternative approach to determine the cross-section area of lattice element is proposed by Bolander in (12). The elastic modulus of lattice element is determined by element type. Ten lattice element types are defined as shown in Table 3. The Young's modulus and shear modulus of each lattice element type is the average of the corresponding node phases as presented in Table 4.*

Tabla 3 / Table 3  
Clasificación de los tipos de elementos de red.  
Classification of lattice element types.

NO	Tipo de elemento / Element Type	Fase Nodo 1 / Node 1 Phase	Fase Nodo 2 / Node 2 Phase
1	Cemento sin hidratar / Unhydrated cement	Cemento sin hidratar / Unhydrated cement	Cemento sin hidratar / Unhydrated cement
2	Producto interno / Inner product	Producto interno / Inner product	Producto interno / Inner product
3	Producto externo / Outer product	Producto externo / Outer product	Producto externo / Outer product
4	Fase mixta / Mixed phase	Fase mixta / Mixed phase	Fase mixta / Mixed phase
5	Interfaz 1 / Interface 1	Cemento sin hidratar / Unhydrated cement	Producto interno / Inner product
6	Interfaz 2 / Interface 2	Cemento sin hidratar / Unhydrated cement	Producto externo / Outer product
7	Interfaz 3 / Interface 3	Cemento sin hidratar / Unhydrated cement	Fase mixta / Mixed phase
8	Interfaz 4 / Interface 4	Producto interno / Inner product	Producto externo / Outer product
9	Interfaz 5 / Interface 5	Producto interno / Inner product	Fase mixta / Mixed phase
10	Interfaz 6 / Interface 6	Producto externo / Outer product	Fase mixta / Mixed phase

Tabla 4 / *Table 4*  
 Propiedades de los tipos de elementos de red.  
*Elastic properties of lattice elements.*

NO	Tipo de elemento / <i>Element Type</i>	Módulo de Young E (GPa) / <i>Young's Modulus E (GPa)</i>	Módulo de cizalla G (GPa) / <i>Shear Modulus G (GPa)</i>
1	Cemento sin hidratar / <i>Unhydrated Cement</i>	130	50
2	Producto interno / <i>Inner Product</i>	30	12.1
3	Producto externo / <i>Outer Product</i>	22	8.87
4	Fase mixta / <i>Mixed Phase</i>	60.7	23.7
5	Interfaz 1 / <i>Interface 1</i>	80	31.05
6	Interfaz 2 / <i>Interface 2</i>	76	29.435
7	Interfaz 3 / <i>Interface 3</i>	95.35	36.85
8	Interfaz 4 / <i>Interface 4</i>	26	10.485
9	Interfaz 5 / <i>Interface 5</i>	45.35	17.9
10	Interfaz 6 / <i>Interface 6</i>	41.35	16.285

Para el análisis de la fractura, se requiere también especificar la resistencia local de cada tipo de elemento de red. Aunque este parámetro se debería obtener de resultados experimentales, actualmente no hay suficiente información sobre la resistencia local de cada fase en la micro-escala y, por tanto, la resistencia a tracción de cada elemento de red se asume proporcional a su módulo de Young, con un coeficiente de proporcionalidad de 0.0001 (13). La resistencia local a compresión es infinita, lo que significa que un elemento de red nunca puede fallar bajo compresión.

*For the fracture analysis, it is also required to specify the local strength for every lattice element. This parameter should be obtained from lab experiment, however, there is insufficient information about the local strength of each phase at microscale currently, hence, it is assumed that the local tensile strength of each lattice element is proportional to its Young's modulus and the proportional coefficient is 0.0001 (13), the local compressive strength is infinite which means the lattice element can never fail if it is in compression.*

### 3.3. Test de tracción uniaxial

Se llevó a cabo un test de tracción uniaxial en el sistema, aplicando una carga externa en las superficies superior e inferior en la dirección Z, dejando libertad a las otras superficies para expandirse o contraerse como muestra la Figura 7.

### 3.3. Uni-axial tensile test

*A uni-axial test is carried out on the lattice system, the external load is imposed on the top and bottom surfaces in the z-direction, and all the other surfaces are free to expand and/or shrink as shown in Figure 7.*

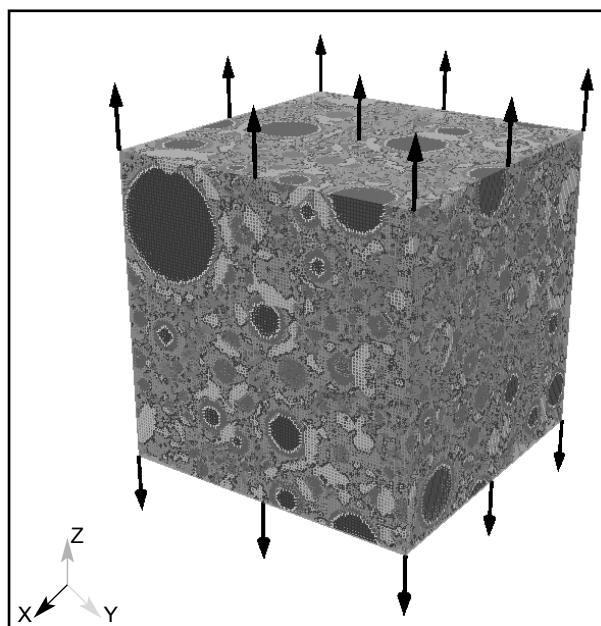


Figura 7. Carga aplicada y condiciones de contorno.  
*Figure 7. Applied load and boundary conditions.*

### 3.4. Simulación del proceso de fractura

La parte central del análisis de fractura es la simulación del proceso de fractura, cuyos resultados son diagramas de carga-desplazamiento y propagación de micro-roturas. El diagrama de carga-desplazamiento caracteriza el comportamiento a fractura de la pasta de cemento en la micro-escala. A partir de éste se puede obtener la resistencia a fractura y el módulo de elasticidad del material.

La idea básica del análisis es que, imponiendo un determinado desplazamiento en la estructura de red, se puede encontrar el elemento crítico del sistema con la mayor relación entre tensión y resistencia, y eliminarlo. Este procedimiento se repite hasta que el sistema falla. Se puede considerar que el análisis del sistema es un grupo de análisis lineales de la estructura empleando el método de elementos finitos. Esto implica que los fundamentos del análisis de red no son más que los de un análisis estructural convencional. Como resultado, los pasos necesarios para el análisis de red son bastante parecidos a un análisis estándar de elementos finitos, con la excepción de que el elemento crítico se elimina y se repite el análisis hasta que el sistema falla, como se muestra en la Figura 8.

El proceso de simulación de fractura mediante GLAK es la parte de la simulación que más tiempo consume. Se están realizando intentos de paralelización de GLAK en (14) para reducir el coste computacional.

### 3.5. Resultados: diagrama carga-desplazamiento y propagación de micro-roturas

Durante el análisis de fractura se monitorizan las fuerzas, el número de elementos rotos y el factor de escala. Los resultados pueden dividirse en dos grupos, uno para la simulación de las propiedades mecánicas y otro para la predicción de la propagación de micro-roturas. Las propiedades mecánicas vienen dadas en términos de la curva de carga-desplazamiento, mientras que la propagación de micro-roturas se describe mediante un método basado en elementos (15).

En este método, un elemento roto representa una micro-rotura en el material. La elongación del elemento roto se define como anchura de la micro-rotura en 2D. En 3D, se asume que la micro-rotura tiene la forma de un cilindro con longitud igual a la elongación del elemento roto y sección transversal igual a la sección transversal del elemento roto. Esta aproximación permite mostrar la posición de las micro-roturas así como su cantidad aproximada.

### 3.4. Fracture process simulation

*The kernel part of lattice fracture analysis is the simulation of fracture process, the results of which are the load-displacement diagram and the micro-cracks propagation. The load-displacement diagram reveals the tensile behavior of cement paste at microscale, from which the elastic modulus and tensile strength can be obtained.*

*The basic idea of lattice analysis is that imposing a prescribed displacement on the lattice structure, finding the critical element that has highest stress/strength ratio, removing it from the system. This procedure is repeated until the system fails. Roughly speaking, lattice analysis is a set of linear analysis on the lattice structure using Finite Element Method. This implies that the fundamental of lattice analysis is nothing else but the conventional structural analysis. As a result, the steps required for lattice analysis are quite similar to the standard finite element analysis for frame structure, except that the critical element is removed and the analysis is repeated until the system fails as shown in Figure 8.*

*The fracture process simulation by GLAK is the most time consuming part through the entire numerical experiment. An attempt is made to parallelize the GLAK implementation in (14) to reduce computational time.*

### 3.5. The results: load-displacement diagram and 3D micro-cracks propagation

*During the lattice fracture analysis, the reaction force, broken element number and scaling factor are recorded. The results can be classified into two groups for different usage, one is for the simulation of mechanical properties and the other is for the prediction of micro-cracks propagation. The mechanical properties is given in terms of load-displacement diagram, while the micro-cracks propagation is described by element based method (15).*

*In element based method, one broken element represents one micro-crack in the material. The elongation of broken element is defined as micro-crack width in 2D configuration. In 3D configuration, the micro-crack is assumed to be in the shape of cylinder, the length of which is the elongation of the broken element and the cross-section area of which is equal to the cross-section area of the broken element. This approach can show the location of micro-cracks and the amount of cracks approximately.*



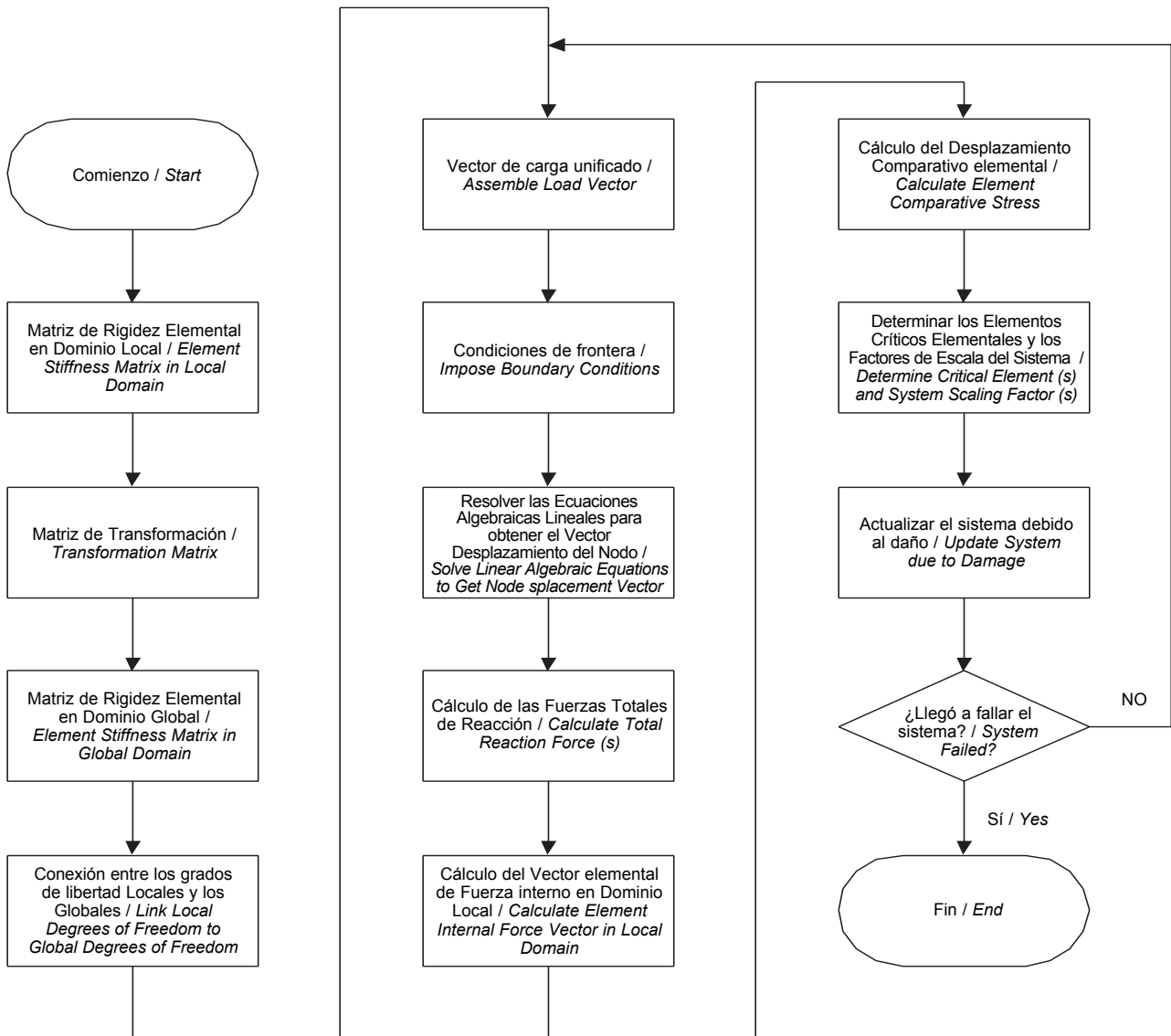


Figura 8. Diagrama de flujo del código GLAK (Generalized Lattice Analysis Kernel) (14).  
 Figure 8. The flowchart of GLAK (Generalized Lattice Analysis Kernel) after (14).

La Figura 9 muestra el diagrama carga-desplazamiento resultante del test de tracción en la micro-escala. La resistencia a tracción del espécimen puede calcularse a partir del pico de carga, y el módulo de Young a partir de la pendiente de la curva en la zona lineal. En este ejemplo en particular, el módulo de Young resultante es de 17 GPa y la resistencia a tracción de 0,4 MPa. Hay que tener en cuenta que el valor absoluto de la resistencia a tracción esta influenciada por la asunción de que la resistencia a tracción de cada elemento de red es proporcional a su módulo de Young, con un coeficiente de proporcionalidad de 0,0001.

Las Figuras 10-12 muestran los correspondientes patrones de micro-rotura cuando las micro-roturas comienzan (paso 1), cuando se alcanza pico de carga (paso 1443) y cuando el sistema falla (paso 37721). Hay que resaltar que la rotura principal aparece alrededor de la primera micro-rotura.

Figure 9 shows the load-displacement diagram of the uni-axial tensile test at microscale, the tensile strength of the specimen can be calculated on the basis of the peak load and the Young's modulus can be obtained based on the slope of the curve in the linear stage. In this specific example, the resulting Young's modulus is 17 GPa and the tensile strength is 0.4 MPa. Be aware that the absolute value of tensile strength is influenced linearly by the assumption that the local tensile strength of each lattice element is proportional to its Young's modulus and the proportional coefficient is 0.0001.

Figures 10-12 show the corresponding micro-cracks patterns when the first micro-crack is initiated (Step 1), the peak load reached (Step 1443) and the system fails (Step 37721). It is worth mentioning that the final main crack appears around the first micro-crack.

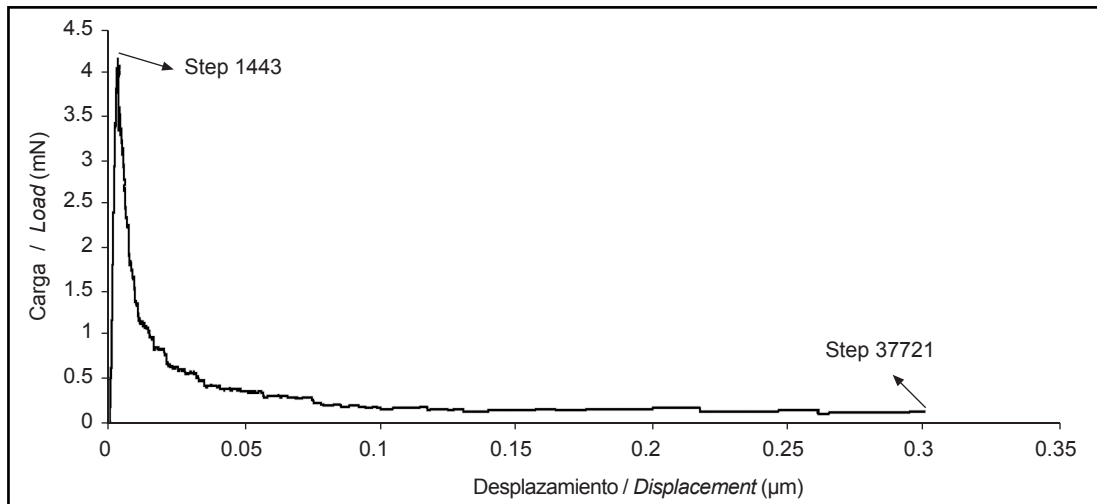


Figura 9. Diagrama de carga-desplazamiento.  
Figure 9. The load-displacement diagram.

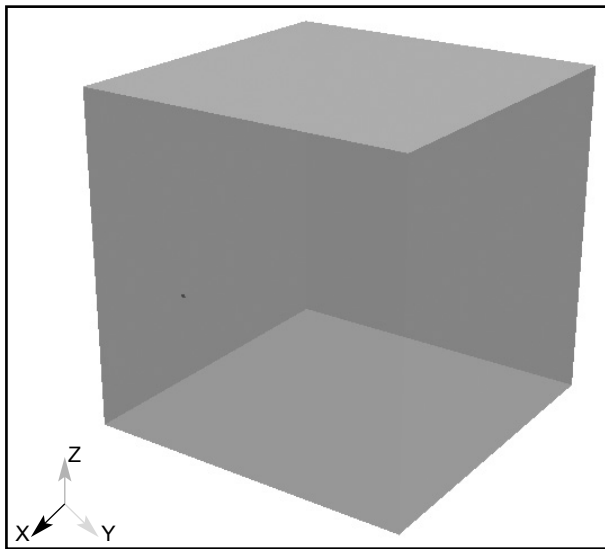


Figura 10. Diagrama de propagación de micro-roturas (paso 1).  
Figure 10. 3D micro-cracks pattern at step 1.

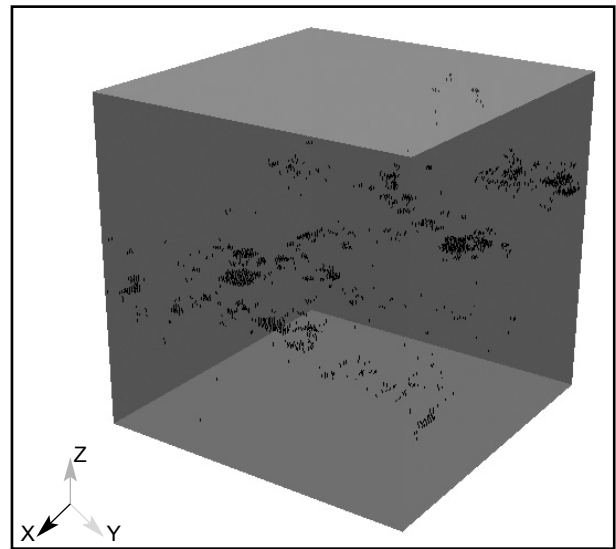


Figura 11. Diagrama de propagación de micro-roturas (paso 1443).  
Figure 11. 3D micro-cracks pattern at step 1443.

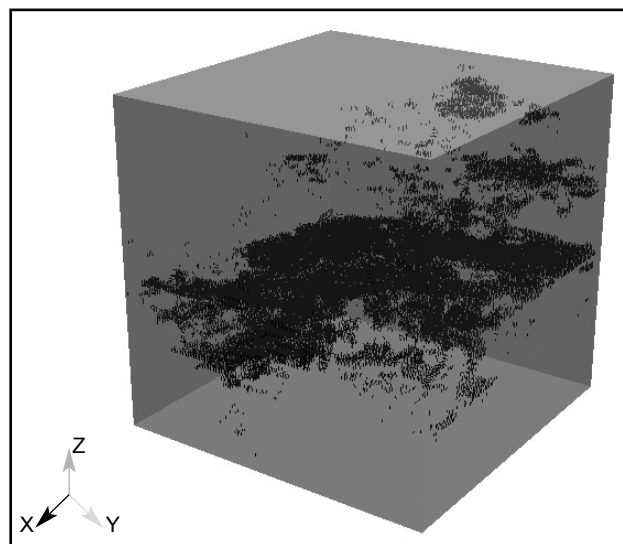


Figura 12. Diagrama de propagación de micro-roturas (paso 37721).  
Figure 12. 3D micro-cracks pattern at step 37721.

#### 4. CONCLUSIONES

Se ha construido un modelo micro-mecánico tridimensional para simular los procesos de fractura de la pasta de cemento en la micro-escala. Las propiedades mecánicas pueden predecirse si se conoce la micro-estructura y las propiedades mecánicas locales.

En primer lugar se simula la micro-estructura del cemento mediante el código HYMOSTRUC3D, representando dicha micro-estructura mediante partículas esféricas. A continuación, la micro-estructura generada se convierte en una imagen basada en "vóxeles" y se construye un sistema reticular basado en esa imagen mediante el código ImgLat (Image to Lattice). Se define un ensayo de tensión uniaxial virtual, y se simula el proceso de fractura usando el código GLAK (Generalized Lattice Analysis Kernel). Los resultados obtenidos de esta simulación del proceso de fractura son diagramas de carga-desplazamiento y propagación de micro-roturas. El diagrama de carga-desplazamiento caracteriza el comportamiento a fractura de la pasta de cemento en la micro-escala, y a partir de éste se puede obtener la resistencia a fractura y el módulo de elasticidad del material.

Con el objetivo de mostrar el funcionamiento de la simulación, se ha realizado un experimento teórico cuyos resultados sirven para validar el modelo empleado. A priori, el procedimiento debería funcionar para escalas mayores, así como para morteros y hormigones. Por tanto, se puede alcanzar el esquema de modelización multi-escalar interconectando repetidamente el presente modelo para las diferentes escalas.

#### 4. CONCLUSIONS

*A 3D micromechanical model is built up for the fracture process simulation of cement paste at microscale. The global mechanical properties can be predicted provided that the microstructure and local mechanical properties are known.*

*In this paper, the microstructure of cement paste is simulated by the hydration and microstructure formation model HYMOSTRUC3D, the output of which is then converted into a voxel-based image. A 3D quadrangular lattice system is constructed based on the microstructure using the package ImgLat (Image to Lattice) and the fracture process is simulated for a uni-axial tensile test using the package GLAK (Generalized Lattice Analysis Kernel). The final simulation results are reported in terms of load-displacement diagram and micro-cracks propagation, from which the elastic modulus and tensile strength can be obtained.*

*A numerical experiment is carried out to illustrate the modeling procedures and to show how the model works. In principle, the procedures should also work for higher scale modeling for mortar and concrete. Hence, the parameter-passing multi-scale modeling scheme for mechanical properties can be addressed by recursively applying the proposed model.*

#### BIBLIOGRAFÍA / BIBLIOGRAPHY

- (1) Schlangen, E.: "Experimental and Numerical Analysis of Fracture Processes in Concrete", PhD Thesis, Delft University of Technology, Delft (1993).
- (2) Qian, Z.: "3D Lattice Analysis of Cement Paste", MSc Thesis, Delft University of Technology, Delft (2008).
- (3) Lilliu, G.: "3D Analysis of Fracture Processes in Concrete", PhD Thesis, Delft University of Technology, Delft (2007).
- (4) Bernard, F.; Kamali-Bernard, S.; Prince, W.: "3D Multi-scale Modelling of Mechanical Behaviour of Sound and Leached Mortar", *Cem. Concr. Res.*, vol. 38 (2008), pp. 449-458. doi:10.1016/j.cemconres.2007.11.015
- (5) Van Breugel, K.: "Simulation of Hydration and Formation of Structure in Hardening Cement-Based Materials", PhD Thesis (2nd Edition), Delft University of Technology, Delft (1997).
- (6) Ye, G.: "The Microstructure and Permeability of Cementitious Materials", PhD Thesis, Delft University of Technology, Delft (2003).
- (7) Qian, Z.; Ye, G.; Schlangen, E.; van Breugel, K.: "Tensile Behavior Prediction of Cement Paste using 3D Lattice Model", in *Proceedings of the 12<sup>th</sup> International Conference on Fracture*, Ottawa, Canada (2009).
- (8) Sanahuja, J.; Dormieux, L.; Chanvillard, G.: "Modelling Elasticity of a Hydrating Cement Paste", *Cem. Concr. Res.*, vol. 37 (2007), pp. 1427-1439. doi:10.1016/j.cemconres.2007.07.003
- (9) Manzano, H.; Dolado, J. S.; Ayuela, A.: "Elastic Properties of the Main Species present in Portland Cement Pastes", *Acta Materialia*, vol. 57 (2009), pp. 1666-1674. doi:10.1016/j.actamat.2008.12.007
- (10) Manzano, H.; Dolado, J. S.; Guerrero, A.; Ayuela, A.: "Mechanical Properties of Crystalline Calcium-Silicate-Hydrates: Comparison with Cementitious C-S-H Gels", *Phys. Stat. Sol.*, vol. 204 (2007), pp. 1775-1780. doi:10.1002/pssa.200675359
- (11) Schlangen, E.; Qian, Z.; Sierra-Beltran, M. G.; Zhou, J.: "Simulation of Fracture in Fibre Cement based Materials with a micro-mechanical lattice model", in *Proceedings of the 12<sup>th</sup> International Conference on Fracture*, Ottawa, Canada (2009).

- (12) Bolander, J. E.; Sukumar, N.: "Irregular Lattice Model for Quasistatic Crack Propagation", *Physical Review B*, vol. 71 (2005), 094106. doi:10.1103/PhysRevB.71.094106
- (13) Schlangen, E.; Garboczi, E.: "Fracture Simulations of Concrete using Lattice Models: Computational Aspects", *Engineering Fracture Mechanics*, vol. 57, nº 2/3 (1997), pp. 319-332. doi:10.1016/S0013-7944(97)00010-6
- (14) Qian, Z.; Schlangen, E.; Ye, G.; van Breugel, K.: "Parallel Implementation of Three-dimensional Lattice Fracture Analysis on a Distributed Memory Architecture", *In Proceedings of the First International Conference on Parallel, Distributed and Grid Computing for Engineering*, Topping, B. H. V.; Iványi, P. (Editors), Civil-Comp Press, Stirlingshire, United Kingdom, paper 34 (2009), doi:10.4203/ccp.90.34.
- (15) Qian, Z.; Ye, G.; Schlangen, E.: "Simulation of 3D Cracks Propagation in Cement Paste", in Proceedings of the ConMod08, Delft, the Netherlands (2008).

\* \* \*