

---

**Titre : Modélisation par Apprentissage Automatique des Propriétés de Fracture et Thermodynamiques des Pâtes de Ciment à l'Échelle Microscopique : Vers une Conception du Ciment Informée par la Microstructure**

**Mots Clés :** Apprentissage automatique, Pâte de ciment, Fissuration, Thermodynamique, Micromécanique, Conception de ciment.

**Résumé :** La pâte de ciment présente une microstructure hétérogène, qui se forme à travers les réactions chimiques des phases cimentaires. Les propriétés de rupture de la pâte de ciment hydratée dépendent des fractions volumiques et de la distribution spatiale des phases anhydres, des produits hydratés et de la porosité. Cette étude propose un cadre de modélisation en deux étapes, basé sur les données, pour prédire les propriétés de rupture dépendantes du temps de la pâte de ciment hydratée à partir de sa composition fondamentale et de son rapport eau-ciment. Une base de données a été générée à l'aide d'un modèle micromécanique, les ensembles de données équivalents n'étant pas disponibles dans la littérature existante. En plus d'établir des capacités prédictives pour les systèmes cimentaires simples, le modèle

développé a été intégré comme fonction objective dans un cadre d'optimisation. Cette intégration a permis de concevoir des compositions de ciment spécifiquement adaptées pour atteindre des valeurs cibles de résistance en traction. Ce modèle a également été utilisé pour explorer la corrélation entre la microstructure des pâtes de ciment et leurs propriétés de rupture à travers des analyses de sensibilité et des études paramétriques. Ces méthodologies ont été conçues pour tenir compte des réactions chimiques qui régissent la composition des pâtes de ciment. Pour étendre le modèle développé aux ciments intégrant des matériaux cimentaires supplémentaires, une étude complète de deux systèmes de ciments ternaires a été réalisée. Cette étude constitue une base pour l'extension future du modèle.

---

**Title : Data-Driven Fracture and Thermodynamic Modelling of Cement Paste at Micro Scale: Towards Microstructure Informed Cement Design**

**Keywords :** Data-driven, Cement paste, Fracture, Thermodynamic, Micromechanics, Cement design.

**Abstract :** Cement paste have a complex and highly heterogeneous microstructure that forms through chemical reactions of cement phases. The fracture properties of the hydrated cement paste at any age depend on the volume fraction and spatial distribution of the anhydrous phases, hydrated products and porosity.

This study presents a two-step, data-driven modeling framework to predict the time-dependent fracture properties of hydrated cement paste from its fundamental composition and water-to-cement ratio. An extensive dataset was generated using an in-house micromechanical framework, as equivalent datasets could not be sourced from existing literature. In addition to establishing predictive capabilities for single cement systems, the

developed data-driven model was integrated as an objective function within an optimization framework. This integration allowed for the design of cement compositions specifically tailored to achieve target tensile strength values. This model was further utilized to investigate the correlation between the microstructure of cement paste and its fracture properties through sensitivity analyses and parametric studies. These methodologies were designed to account for the chemical reactions governing the composition of cement paste.

To extend the developed model to cements incorporating supplementary cementitious materials, a comprehensive study of two ternary cements systems was conducted. This study provides a foundation for model extension.