

Badanie właściwości mechanicznych i mikrostruktury zaczynu cementowego z kulkami szklanymi z wykorzystaniem modelu faza – pole i funkcji ścieżki liniowej do opisu pęknięcia

Investigation of mechanical properties and microstructure of cement paste with glass beads using crack phase field model and lineal-path function

1. Wprowadzenie

Materiały cementowe odgrywają niezwykle ważną rolę w budownictwie. Ze względu na losowo rozmieszczone złożone pory, ocena właściwości mechanicznych materiałów cementowych w mikroskali za pomocą metod doświadczalnych nie jest zadaniem łatwym. Jednak dzięki zaawansowanym narzędziom obliczeniowym można numerycznie badać te właściwości, które są ściśle związane z zachowaniem się pęknięć mikrostruktury materiałów cementowych i opisać związek między tymi właściwościami a mikrostrukturą badanych materiałów.

Do obliczeniowego modelowania propagacji pęknięć w oparciu o opis pęknięć, stosuje się dwie klasy metod: jawne i niejawne metody reprezentacji geometrycznej (1). Wśród nich, jedną z niejawnych metod reprezentacji geometrycznej jest model faza - pole dla pęknięć, który ma tę zaletę, że nie wymaga informacji geometrycznych o możliwym uszkodzeniu i pozwala uzyskiwać dobre wyniki w przypadku skomplikowanych powierzchniowych uszkodzeń, na przykład występowanie wielu pęknięć i rozgałęzień. Niemniej model ten wymaga nadmiarowego zagęszczenia siatki w pobliżu pęknięcia, aby uzyskać wiarygodne prognozowanie. Ze względu na przytoczone zalety, model faza - pole został wykorzystany do symulacji propagacji dowolnych pęknięć w różnych zagadnieniach (2 - 4).

Aby opisać złożone mikrostruktury materiałów, można wykorzystać zarówno funkcje prawdopodobieństwa niższego rzędu, takie jak dwupunktowa funkcja korelacji, funkcja ścieżki liniowej i dwupunktowa funkcja klastra jak również funkcje prawdopodobieństwa wyższego rzędu [n – punktowe funkcje prawdopodobieństwa] (5). Wśród funkcji prawdopodobieństwa niższego rzędu, funkcja ścieżki liniowej (6) została szeroko zastosowana do opisu różnorodnych materiałów niejednorodnych. Funkcja ta została z powodzeniem zastosowana do rekonstrukcji wirtualnych próbek poprzez optymalizację stochastyczną (7). Pokazano również, że funkcja ścieżki liniowej wraz z innymi funkcjami prawdopodobieństwa niższego

1. Introduction

Cementitious materials play an extremely important role in the construction industry. Due to randomly distributed complex voids, evaluation of mechanical properties of cementitious materials at the micro-scale with experiments is not a trivial task. However, with advanced computational tools, we can numerically investigate these properties, which are closely related to the fracture behavior of the microstructures of cementitious materials, and characterize the relation between these properties and their microstructures.

To computationally model crack propagation, based on how cracks are described, there exist two classes of approaches: *explicit* and *implicit geometric representation methods* (1). Between them, one of the implicit geometric representation methods, the propagation of cracks phase field model, has the advantage of not requiring the geometric information of possible failure onsets and performing well for complicated failure surfaces, e.g., the presence of multiple cracks and branching, though this model requires the excessive mesh refinement in the vicinity of a crack in order to obtain reliable predictions. With these advantages, the crack phase field model has been used for simulating arbitrary crack propagation in various types of problems (2 - 4).

To characterize the complex microstructures of materials, both low-order probability functions, such as the two-point correlation function, lineal-path function, and two-point cluster function, and higher-order probability functions (n -point probability functions) can be adopted (5). Among the low-order probability functions, the lineal-path function (6) has been widely used to characterize a variety of random heterogeneous materials. This function has been successfully applied to the reconstruction of virtual specimens through a stochastic optimization (7). It is also shown that the lineal-path function along with other low-order probability functions can effectively characterize the pore distribution in sandstone, where properties computed from the reconstructed virtual samples were in good agreement with experimental data

rzędu może skutecznie opisać rozkład porów w piaskowcu, w której właściwości obliczone na podstawie zrekonstruowanych wirtualnych próbek były w dobrej zgodności z danymi doświadczalnymi (8). Probabilistyczna metoda opisu porów powietrznych w stwardniałym betonie przy zastosowaniu funkcji liniowej została przedstawiona w pracach (9, 10).

Aby zwiększyć wiarygodność wyników analitycznych uzyskanych z rzeczywistych lub wirtualnych eksperymentów, należy określić związek między mikrostrukturą a właściwościami materiału. Ze względu na złożone właściwości mikrostruktury zaczynu cementowego, badanie zależności między cechami mikrostrukturalnymi a właściwościami mechanicznymi, takimi jak sztywność i wytrzymałość, jest bardzo trudne i ograniczone. W prezentowanej pracy szczególnie interesują nas te właśnie właściwości próbek zaczynów cementowych stosowanych do betonów izolacyjnych o złożonym rozkładzie pustek wprowadzonych przez dodatek pustych kulek szklanych w celu zmniejszenia przewodności cieplnej (11, 12). Wykorzystujemy zalety modelu faza – pole do opisu pękania i stosujemy go do symulacji wielokrotnego powstawania i propagacji mikropęknięć. Za jego pomocą oceniamy właściwości mechaniczne tego rodzaju zaczynu cementowego, a przede wszystkim sztywność i wytrzymałość na rozciąganie. Wirtualne próbki do symulacji są otrzymywane ze skanera μ -CT, o dużej rozdzielczości. Następnie wykorzystujemy funkcję ścieżki liniowej do opisu spójności fazy stałej w badanym zaczynie cementowym. Celem tego badania jest dobór metodologicznych ram oceny właściwości mechanicznych próbek zaczynu cementowego za pomocą nowego narzędzia do symulacji i do ustalenia ich związku z mikrostrukturami materiałów.

2. Model faza – pole do opisu pękania

W niniejszej pracy do symulacji wielokrotnej propagacji mikropęknięć i do oszacowania sztywności i wytrzymałości zaczynu cementowego zastosowano model faza – pole do opisu pękania.

W tym punkcie przedstawiono krótkie podsumowanie modelu faza – pole do opisu pękania i jego zarys dla nieskończonej małych odkształceń. Pełny opis termodynamicznych założeń tego modelu można znaleźć w pracy Miehe i in. (3). Równania różniczkowe opisujące pole odkształceń i model faza – pole dla pękania są następujące:

$$\operatorname{div}[\sigma] + \rho \mathbf{b} = \mathbf{0} \quad [1]$$

$$\eta \dot{d} - g_c \mathcal{N}^2 d + \left(\frac{g_c}{l} + 2\mathcal{H} \right) d - 2\mathcal{H} = 0 \quad [2]$$

gdzie: ρ jest gęstością materiału, \mathbf{b} jest siłą masową, η jest współczynnikiem lepkości używanym do uzupełnienia danych w modelu, w którym powierzchnie międzyfazowe są rozmyte, $d \in [0, 1]$, gdzie $d = 0$ jest stanem bez spękań, a $d = 1$ oznacza stan całkowicie popękany, g_c jest krytyczną energią pękania, l jest parametrem liniowym opisującym propagację pęknięć, a \mathcal{H} jest zmienną historyczną odpowiadającą maksymalnej dodatniej energii swobodnej,

(8). A probabilistic technique for the characterization of entrained air voids in hardened concrete using lineal-path function was proposed in the papers (9, 10).

To increase the reliability of the analytical results from real or virtual experiments, one must identify the relationship between the microstructures and material properties. Due to the complex microstructural features in the cement paste, the investigation of relationship between microstructural characteristics and mechanical properties such as stiffness and strength is very challenging and is scarce. In this work, we are particularly interested in these properties of cement paste specimens for insulating concrete with complex void distribution, introduced by addition of hollow glass beads to reduce the thermal conductivity (11, 12). We take the advantages of the crack phase field model and apply it to simulate the multiple micro-crack nucleation and propagation and estimate the mechanical properties in this type of cement paste, such as tensile stiffness and strength. The virtual specimens for simulations are obtained from a high resolution μ -CT. We will further use the lineal-path function for the characterization of the solid phase connectivity within the cement paste investigated in this work. This study is intended to provide a methodological framework to evaluate mechanical properties of the cement paste specimens with a new simulation tool and to identify their relation to material microstructures.

2. Crack phase field model

The crack phase field model is applied to simulate the multiple micro-crack propagation and to estimate the tensile stiffness and strength of cement paste in this study.

A brief summary of the crack phase field model and its implementation are presented in this section within the framework of infinitesimal deformation. A full description of the thermodynamic consistency of this model can be found in Miehe et al. (3). The governing differential equations for the deformation field and the crack phase field are given as follows

$$\operatorname{div}[\sigma] + \rho \mathbf{b} = \mathbf{0} \quad [1]$$

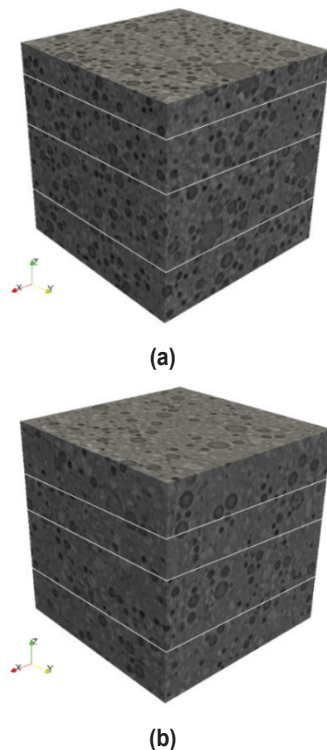
$$\eta \dot{d} - g_c \mathcal{N}^2 d + \left(\frac{g_c}{l} + 2\mathcal{H} \right) d - 2\mathcal{H} = 0 \quad [2]$$

where ρ is the material density, \mathbf{b} is the body force, η is a viscosity parameter used for regularization, d is $\in [0, 1]$, where $d = 0$ is the uncracked state and $d = 1$ denotes the fully cracked state, g_c is critical fracture energy, l is a length parameter that describes crack propagation, and \mathcal{H} is a history variable corresponding to maximum positive free energy to enforce the crack irreversibility condition. The boundary conditions for the deformation field and crack phase field are taken properly referred as in paper (3). Based on the mechanical properties evaluated from crack phase field model, the relationship between the characteristics and mechanical properties can be identified.

niezbędnej do wymuszenia warunku nieodwracalności powstania pęknięcia. Zastosowano warunki brzegowe dla pola odkształceń i modelu faza-pole do opisu pęknięcia zawarte w pracy (3). Na podstawie właściwości mechanicznych oszacowanych przy użyciu modelu faza - pole dla pęknięcia można określić związek między cechami mikrostrukturalnymi a właściwościami mechanicznymi zaczynu cementowego.

3. Wirtualne próbki i parametry modelowania

W niniejszej pracy zbadano dwie próbki zaczynu cementowego, z różnymi frakcjami objętościowymi pustych kulek szklanych, dodanych w celu poprawy właściwości izolacyjnych materiału (11). Próbki przygotowano w postaci walców o średnicy 0,9 mm, tak aby można było uzyskać wystarczająco dużą rozdzielczość dla znalezienia przypadkowych rozkładów porów, w tym wprowadzanych przez szklane kulki. Próbki wykonano z cementu portlandzkiego bez dodatków mineralnych. Stosunek wodno/cementowy wynosił 0,5. Próbki dojrzewały 28 dni w powietrzu. W próbkach 90% kulek szklanych miało średnicę w zakresie od 10 μm do 65 μm , przy medianie średnicy 25 μm . Wirtualne próbki otrzymane w symulacjach i przedstawione na rysunku 1, uzyskano za pomocą skanów $\mu\text{-CT}$ rzeczywistych próbek. Skany CT wykonano za pomocą synchrotronu promieni X w Pohang Accelerator Laboratory [PAL] w Republice Korei. Przetwarzanie obrazu w celu skonstruowania

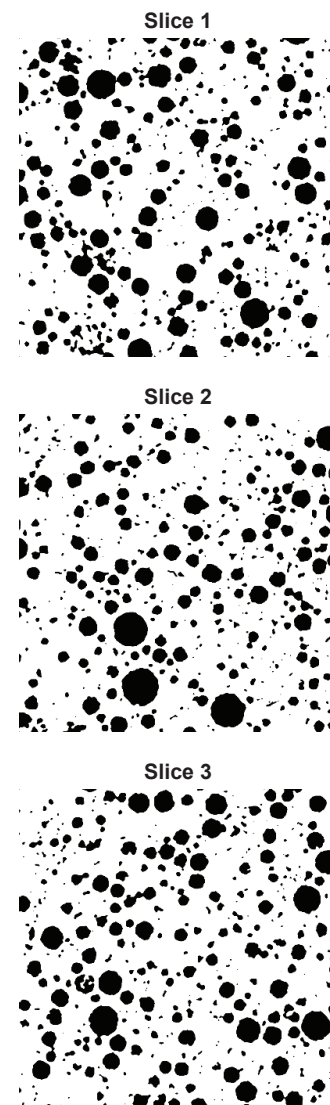


Rys. 1. Obrazy CT [a] próbki 1 [porowatość: 20,15%] i [b] próbki 2 [porowatość: 15,82%]. Uwaga: położenia plastrów 2D [płaszczyzna x-y] losowo pobranych z każdej próbki są oznaczone białymi liniami. Ciemne obszary przedstawiają pory

Fig. 1. CT images for [a] specimen 1 [porosity: 20.15%] and [b] specimen 2 [porosity: 15.82%]. Note: locations of 2D [x-y plane] slices randomly taken from each specimen are indicated by white lines. Darker regions represent voids

3. Virtual specimen and modeling parameters

In this work, two cement paste specimens, which contain hollow glass beads to enhance materials insulation properties (11), with different volume fractions of glass beads, are investigated. The real specimens were prepared as cylinders with a diameter of 0.9 mm so that sufficiently high resolution could be obtained for capturing random voids distributions, including those introduced by glass beads. The cement paste specimens were prepared from the CEM I Portland cement with water cement ratio [w/c] of 0.5. The specimens were cured for 28 days in the air. In the specimens, 90% of glass beads have diameters ranging from 10 μm to 65 μm with a median diameter of 25 μm . The virtual specimens loaded in the simulations, as shown in Fig. 1, are obtained by $\mu\text{-CT}$ scans of real specimens. CT scans were conducted at the X-ray synchrotron facility in Pohang Accelerator Laboratory (PAL) in Republic of Korea. The image processing procedure was executed on raw data to construct virtual specimens to identify the void distribution is described in detail in the papers (13 - 15).



Rys. 2. Mikrostruktura plastrów z próbki 1 [ciemny obszar: pory, jasny obszar: faza stała]

Fig. 2. Microstructure of slices from specimen 1 [dark region: voids, light region: solids]

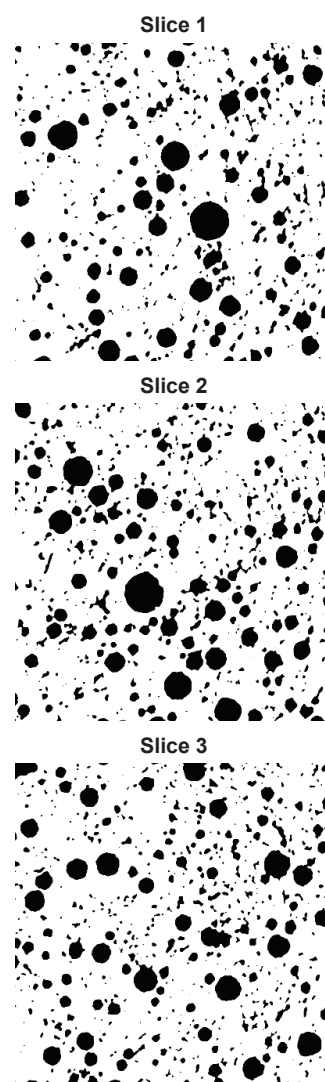
wirtualnych próbek zostało wykonane na nieobrobionych danych umożliwiających określenie rozkładu pustek. Metodę opisano szczegółowo w pracach (13 - 15).

Porowatości próbek 1 i 2, uzyskane z oryginalnych obrazów CT wynoszą odpowiednio 20,51% i 15,82%. Trzy plastry 2D w płaszczyźnie x-y pokazane na rysunkach 2 i 3 są losowo wybrane z każdej mikrostruktury 3D pokazanej na rysunku 1. Zakładając losowy rozkład pustych przestrzeni, mikrostruktury powinny być idealnie podobne w plastrach 2D i próbkach 3D, przyjmując że badany obszar jest wystarczająco duży. W niniejszej pracy dowolnie wybrano obszar 0,65 x 0,65 mm dla każdego z plastrów. Wirtualne próbki 2D i 3D są formalnie związane z cztero-węzłowymi czworobocznymi elementami i ośmiowęzłowymi elementami sześciennymi. Oryginalny μ -CT ma rozmiar pikseli wynoszący 1 μ m, co daje 1000 pikseli dla każdego kierunku skanowania CT. Aby wyniki symulacji były dostatecznie dokładne i gwarantowały przystępny czas obliczeniowy, każdy bok wirtualnych próbek jest złączony z 125 siatkami w obu przypadkach 2D i 3D. Taki proces poszerzania siatki jest przeprowadzany na mikrostrukturach 3D, a plasterki 2D są pobierane z poszerzonych mikrostruktur trójwymiarowych. Podczas procesu poszerzania siatki porowatość jest nieznacznie zmodyfikowana, przy czym porowatość próbek 1 i 2 w próbkach 3D ulega odpowiednio zmianom na 20,66% i 14,90%.

Symetryczne warunki brzegowe są stosowane do krawędzi / powierzchni z ujemnymi wektorami normalnymi, przemieszczenie wywołane obciążeniem jest przyłożone wzdłuż krawędzi / powierzchni z dodatnimi wektorami normalnymi, a dla pozostałych krawędzi / powierzchni nie przypisano zewnętrznych składowych stanu naprężenia. Próbki są obciążane naprężeniem w kierunku x-, y-, lub z-. Właściwości mechaniczne, a mianowicie początkowa sztywność i wytrzymałość graniczna na rozciąganie, oblicza się w prostopadłych kierunkach, w celu zbadania anizotropii tych właściwości i ich związków z mikrostrukturą materiału.

Dla symulacji przyjęto moduł Younga $E = 29$ GPa i współczynnik Poissona $\nu = 0,21$ dla fazy stałej, które są zgodne z właściwościami stwardniałego zaczynu cementowego o zerowej porowatości (16). Zakłada się w przypadku symulacji 2D płaski stan odkształcenia. Dla próbek przyjęto typową wartość energii pęknięcia $= 0,06$ N/m. Mieści się ona w zakresie wartości energii powierzchniowej przedstawionej w pracy (17) i zastosowanej w pracy (18). W badaniach tych założono mikrostrukturę dwufazową ciało stałe-por.

Parametr propagacji [liniowy] $= 0,0104$ mm wybrano dla wirtualnych próbek 2D i 3D. Ten parametr propagacji pęknięć, który normuje szerokość pęknięcia, jest dwukrotnie większy niż rozmiar elementu zgodnie z zaleceniami Miehe i in. (3) i jest tego samego rzędu, co mediana średnicy kulki szklanej wynosząca 25 μ m, jak podano w (11). W równaniu 2 założono lepkość wynoszącą $\eta = 1,0 \times 10^{-8}$ Ns/mm² w celu przeprowadzenia symulacji.



Rys. 3. Mikrostruktura plastrów z próbki 1 [ciemny obszar: pory, jasny obszar: faza stała]

Fig. 3. Microstructure of slices from specimen 2 [dark region: voids, light region: solids]

The porosities of specimen 1 and specimen 2 obtained from original CT images are 20.51% and 15.82%, respectively. Three 2D slices in the x-y plane, as shown in Figs. 2 and 3, are randomly selected from each 3D microstructure in Fig. 1. Given the random nature of the void distribution, the microstructural features should ideally be similar among 2D slices and 3D specimens given that the region of interest is sufficiently large. The region of 0.65x0.65 mm within the raw data of each slice is selected. The 2D and 3D virtual specimens are structurally meshed with four-node quadrilateral elements and eight-node brick elements, respectively. The original μ -CT has a pixel size of m , which results in 1000 pixels for each direction of the CT scan. To keep simulation results being reasonably accurate with affordable computational time, each side of the virtual specimens are meshed with 125 grids for both 2D and 3D cases. Such coarsening process is conducted on 3D microstructures, and 2D slices are taken from the coarsened 3D microstructures. During the coarsening process, the porosity is slightly modified with the porosity of 3D Specimens 1 and 2 being changed to 20.66% and 14.90%, respectively.

4. Analiza pęknięć i ocena właściwości

4.1. Odpowiedź plasterów 2D

Przykładowe kształty propagacji pęknięć w plasterze 2 dla próbki 1 obciążonej w kierunku x i y pokazano na rysunku 4. Całkowicie spękanne obszary są zabarwione na czerwono, a nieuszkodzone obszary są zabarwione na niebiesko. W symulacji, pęknięcia rozpoczynają się w wielu miejscach z dużymi pustkami w kierunku prostopadłym do kierunku obciążenia. Pęknięcia rozprzestrzeniają się i łączą tworząc poprzeczną szczelinę przez plaster, co powoduje zmniejszenie wytrzymałości próbki na przyłożone obciążenie.

Zależność naprężenie - odkształcenie z obciążeniami w kierunku x - i y - z trzech plasterów z próbki 1 przedstawiono na rysunku 5, a ich właściwości mechaniczne podano w tablicy 1. Dla trzech plasterów z próbki 1, chociaż początkowe sztywności są dość podobne, wielkości sztywności w pobliżu wartości maksymalnej różnią się pomiędzy tymi dwoma kierunkami, w przypadku gdy zachodzi inicjacja pęknięcia i propagacja. Dla próbki 1 stosunek sztywności wynosi 1,07 dla plastra 1, 0,97 dla plastra 2 i 1,01 dla plastra 3. Wytrzymałość w kierunku y - jest nieco większa niż w kierunku x - dla plasterów 1 i 2, ale tendencja jest odwrotna dla plastra 3. W przypadku próbki 2 sztywność i wytrzymałość są większe niż dla próbki 1. Jest to zgodne z założeniem, że porowatość wirtualna próbki 2 w próbkach 3D wynosi 14,90%, czyli jest o 5,76 % mniejsza niż w próbce 1. Różnice między przyłożonym naprężeniem w funkcji odpowiadających im odkształceń w kierunkach x - i y -, są podobne jak w przypadku próbki 1, ale właściwości w kierunku y - są na ogół lepsze niż w kierunku x - we wszystkich trzech plastrach w próbce 2.

Warto zauważyć, że plastry i puste przestrzenie w tych plastrach wybrano w pełni losowo. Właściwości anizotropowe znalezione na podstawie wyników symulacji mogą wpłynąć na założone właściwości stwardniałego betonu. Dlatego konieczne jest wcześniejsze rozpoznanie i prognozowanie właściwości materiału w powiązaniu z mikrostrukturalnymi właściwościami zaczynu cementowego.

Symmetric boundary conditions are applied to edges/surfaces with negative normal vectors, a displacement-driven loading condition is applied along an edge/surface with positive normal vectors, and a traction-free condition is assigned to the remaining edge(s)/surface(s). The specimens are loaded under tension in x -, y -, or z -direction. Mechanical properties such as initial stiffness and tensile peak strength will be identified in perpendicular directions with the objective of studying the anisotropy of these properties and their relationships to material microstructures.

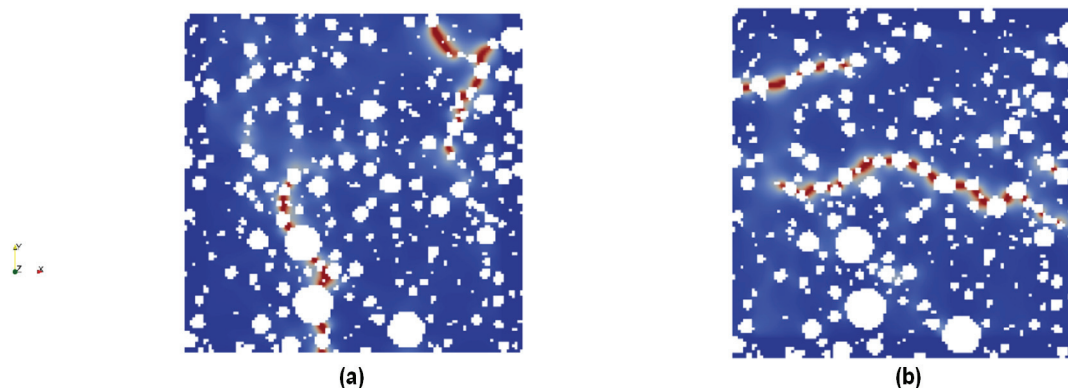
For those virtual tests, a Young's modulus $E = 29$ GPa and a Poisson's ratio $\nu = 0.21$ were selected for the solid phase, which are consistent with material parameters for hardened cement paste with zero porosity (16). Plane strain condition is assumed for 2D simulations. A fracture energy $g_c = 0.06$ N/m was selected as a representative value for the specimens. This value is within the range of the surface energy values presented in the paper (17), as being used in the paper (18). In this study, two-phases (solid-void) microstructure is assumed.

A crack propagation (length) parameter $l = 0.0104$ mm ($10.4 \mu\text{m}$) was selected for both 2D and 3D virtual specimens. This crack propagation parameter, which regularizes the crack width, is twice the element size $l \approx 2h$ as recommended Miehe et al. (3) and is of the same order as the median glass bead diameter $25 \mu\text{m}$ as reported in the paper (11). A viscosity value of $\eta = 1.0 \cdot 10^{-8}$ Ns/mm² in Eq. [2] was used for simulations.

4. Failure analysis and property evaluation

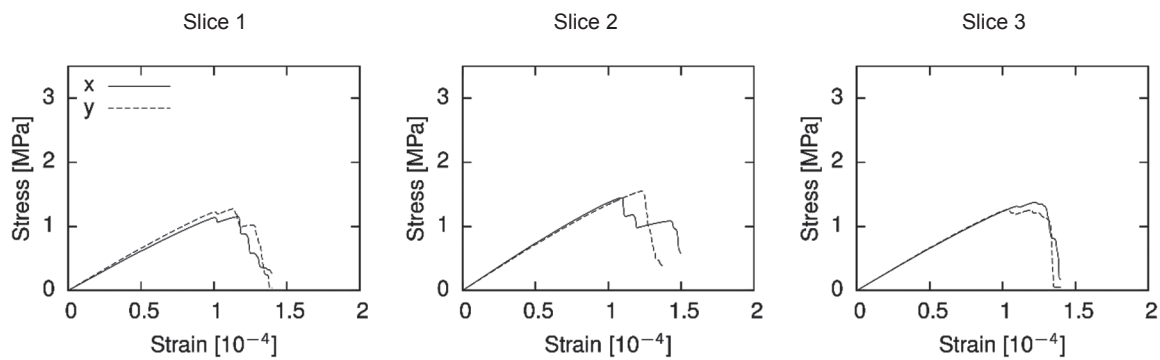
4.1. Response of 2D slices

Crack propagation patterns in slice 2 for specimens 1 loaded in the x - and y -directions are shown in Fig. 4 as examples. Fully cracked regions are colored in red while undamaged regions are colored in blue. In the simulation, cracks start to initiate at multiple locations with large voids in the direction perpendicular to the loading direction. The cracks propagate and coalesce to form



Rys. 4. Pęknięcia w plasterze 2 próbki 1: [a] obciążenie w kierunku osi x , [b] obciążenie w kierunku osi y . Czerwony i niebieski kolor oznaczają kolejno w pełni uszkodzoną i nieuszkodzoną część

Fig. 4. Cracks phase field in slice 2 of specimen 1: [a] loading in the x -direction and [b] loading in the y -direction. Red color and blue color indicate the fully damaged part and the undamaged part, respectively



Rys. 5. Przyłożone naprężenie vs odkształcenie z naprężeniami powodującymi odkształcenie w obu kierunkach x i y w próbce 1

Fig. 5. Applied stress vs. strain with displacement loadings in both x and y directions from specimen 1

4.2. Odpowiedź modeli 3D

Podobnie jak dla symulacji 2D, bezpośrednio obciążeniu rozciągającemu poddawano próbki 3D w trzech prostokątnych kierunkach (x -, y - i z -). W symulacji pęknięcie rozpoczyna się w połowie wolnych powierzchni równoległe do kierunku obciążenia. Dodatkowe pęknięcia powstają później w wielu miejscach podczas symulacji. Ostateczne kształty pęknięć próbek 1 obciążonych w kierunkach x -, y - i z - pokazano na rysunku 6. Wyniki te pokazują, że pełne rysy lub liczne pęknięcia cząstkowe, które zwiększają spodziewaną zarysowaną powierzchnię prostokątną do kierunku obciążenia, rozwijają się wraz ze wzrostem obciążenia. W przypadku obu próbek zakrzywione powierzchnie zarysowań 3D są dobrze wykrywane przez model pola fazy pęknięcia.

Stosowane zależności naprężenia w funkcji odkształcenia dla próbek 1 i 2 są pokazane na rysunku 7. Zgodnie z wynikami dla plastrów 2D sztywność, a także maksymalna wytrzymałość w przypadku próbki 2 są większe w porównaniu z wynikami dla próbki 1, co wynika z mniejszej porowatości próbki 2. Stosunki sztywności i granicznych wytrzymałości w przypadku 3D są zgodne z przypadkami 2D, jak to podsumowano w tabelicy 1. Sztywność i wytrzymałości w kierunku y - są na ogół większe niż w kierunku x - dla symulacji 3D. Właściwości w kierunku z - są konsekwentnie gorsze niż właściwości w płaszczyźnie dla obu próbek.

W porównaniu ze stosunkami uzyskanymi w odpowiedzi 2D anizotropia w próbkach 3D wydaje się mniej znacząca, jak pokazano w tabelicy 1. Sztywność i wytrzymałość w przypadku 2D są znacznie mniejsze niż w modelu 3D, pomimo że wielkość elementu i parametry modelowania dla obu modeli są dokładnie takie same. Wynika to głównie z budowy ich mikrostruktury, w której próbka 2D ma tendencję do grupowania porów, co prowadzi do gorszych właściwości mechanicznych. Wyniki te potwierdzają, że symulacje 2D i 3D mogą dawać różne wyniki. Dlatego też podczas badania właściwości mikrostruktury za pomocą symulacji 2D zarówno badania, a także interpretację wyników należy przeprowadzać bardzo starannie.

To, że kierunek z - jest zgodny z kierunkiem grawitacji ziemskiej podczas procesu dojrzewania próbek może być główną przyczyną mniejszej sztywności i mniejszej granicznej wytrzymałości w kie-

a transverse crack through the slice, which results in the reduction of the load bearing capacity of the specimen.

The applied stress vs. strain responses with loadings in the x - and y -direction for three slices from specimen 1 are presented in Fig. 5 and their mechanical properties are shown in Table 1. For the three slices from specimen 1, although initial stiffness is quite similar, stiffness values near the peak deviate between these two directions when crack initiation and propagation occur. For specimen 1, the stiffness ratio is 1.07 for slice 1, 0.97 for slice 2, and 1.01 for slice 3. The strength in the y -direction is slightly higher than that in the x -direction for slices 1 and 2, but the trend is reversed for slice 3. For specimen 2, stiffness and strength values are larger than those from specimen 1. This is consistent with the result that the porosity for the 3D virtual specimen 2 is 14.90%, which is 5.76% lower than that of specimen 1. The differences between the applied stress vs. strain responses in x - and y -directions are similar with those for specimen 1, but properties in the y -direction are generally higher than those in the x -direction in all three slices of specimen 2.

It is worth to note that the slices and the voids in these slices are randomly selected without preference. The anisotropic property identified from simulation results could affect the desired performance of concrete. Therefore, it is necessary to identify and to predict properties in advance in connection with microstructural features of cement paste.

4.2. Response of 3D models

Consistent with the 2D cases, direct tensile loading is applied on the 3D specimens in three perpendicular directions (x , y and z). In the simulation, a crack starts near the middle of the free surfaces parallel to the loading direction. Additional cracks form later in multiple locations as the simulation proceeds. Final crack patterns of specimens 1 loaded in the x -, y -, and z -directions are shown in Fig. 6. These results reveal that full through cracks or multiple partial cracks that increase the projected cracked surface perpendicular to the loading direction are developed as the loadings increase. For both specimens, the curved 3D crack surfaces are well captured by the crack phase field model.

Tablica 1 / Table 1

WŁAŚCIWOŚCI MECHANICZNE WIRTUALNYCH PRÓBEK [SZTYWNOŚĆ I WYTRZYMAŁOŚĆ]

MECHANICAL PROPERTIES OF VIRTUAL SPECIMENS [STIFFNESS AND STRENGTH] f_x^t

Próbka Specimen	Plaster 3D Slice 3D	Sztywność początkowa/Initial stiffness, E , GPa						Wytrzymałość maksymalna/Peak strength, f , MPa					
		E_x	E_y	E_z	E_y/E_x	E_z/E_x	E_y/E_z	f_x^t	f_y^t	f_z^t	f_y^t/f_x^t	f_z^t/f_x^t	f_y^t/f_z^t
1	1	12.2	13.1	-	1.07	-	-	1.15	0.27		1.10		
	2	14.6	14.2	-	0.97	-	-	1.45	0.55		1.07		
	3	13.1	13.2	-	1.01	-	-	1.37	0.27		0.93		
	3D	18.1	18.2	17.3	1.01	0.96	1.05	2.43	2.51	2.34	1.03	0.96	1.09
2	1	14.8	17.3	-	1.17	-	-	1.28	1.89		1.48		
	2	14.0	14.7	-	1.05	-	-	1.43	1.53		1.07		
	3	16.1	16.7	-	1.04	-	-	1.69	1.76		1.04		
	3D	21.0	21.4	20.4	1.02	0.97	1.04	2.95	3.04	2.89	1.03	0.98	1.05

runku z- zarówno dla próbki 1 jak i próbki 2. Grawitacja mogła wpłynąć na tworzenie rozkładu porów związanych z obecnością kulek szklanych w prawdziwej próbce powodując zmniejszenie spójności matrycy w kierunku działania grawitacji. Zjawisko to jest często spotykane w twardniejącym betonie i określane jest jako „bleeding”, w którym lekki materiał = woda ma skłonność do przesuwania się na powierzchnię matrycy cementowej i gromadzenia się pod ziarnami kruszywa.

5. Charakterystyka mikrostruktury i jej związek z właściwościami

5.1. Funkcja ścieżki liniowej

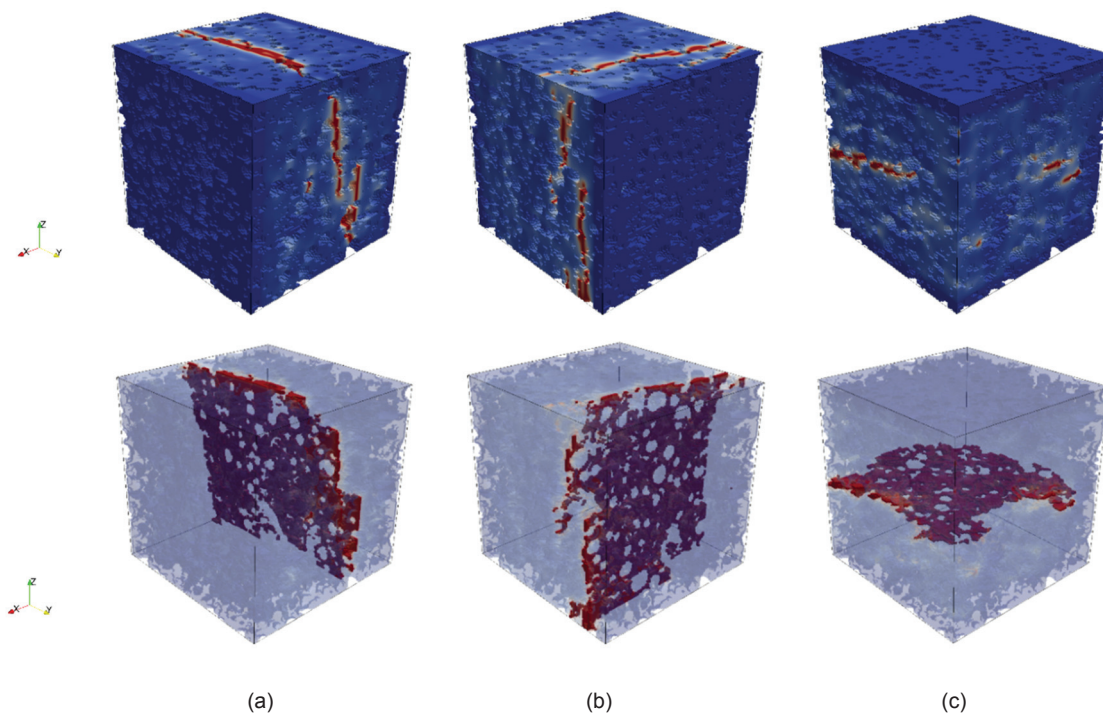
Losowa niejednorodność mikrostruktury z powodu pustek w zaczynie może być scharakteryzowana przez funkcje prawdopodobieństwa niższego rzędu, takie jak korelacja dwupunktowa, ścieżka liniowa i dwupunktowe funkcje skupień (5). Te funkcje prawdopodobieństwa niższego rzędu opisują dobrze mikrostrukturę, o losowych właściwościach (6–8). Uzupełniają się nawzajem, aby lepiej opisać mikrostrukturę. Chociaż dwupunktowa korelacja i dwupunktowe funkcje klastra mogą dobrze opisywać losowe rozkłady faz w mikrostrukturach, funkcja ścieżki liniowej dostarcza dodatkowych informacji o spójności fazy będącej przedmiotem zainteresowania. W tym badaniu stwierdzono, że funkcja ścieżki liniowej jest odpowiedniejsza do opisu anizotropii połączeń w fazie stałej lub rozkładu pustek, co jest związane z właściwościami mechanicznymi materiałów. Z tego powodu opiszemy krótko funkcję ścieżki liniowej.

Funkcja ścieżki liniowej dla fazy stałej L_s jest prawdopodobieństwem zmieszczenia się całego odcinka o długości r w fazie stałej, jak to pokazano na rysunku 8. Wartość L_s jest udziałem objętościowym fazy stałej, gdy długość odcinka wynosi zero, ale asymptotycznie zbliża się do zera, gdy długość odcinka zbliża się do nieskończoności,

The applied stress vs. strain responses for specimens 1 and 2 are illustrated in Fig. 7. Consistent with the 2D results, stiffness and peak strength for specimen 2 are higher than those for specimen 1 owing to lower porosity in specimen 2. The ratios of stiffnesses and peak strengths in 3D cases are consistent with the 2D cases, as summarized in Table 1. The stiffness and the strengths in y-direction are generally higher than those in the x-direction for 3D simulations. The properties in the z-direction are consistently lower than the in-plane properties for both specimens.

Compared with the ratios of 2D responses, the anisotropy in 3D specimens seems to be less significant, as shown in Table 1. The stiffness and strength in the 2D case are significantly lower than those of the 3D model, though the element size and modeling parameters for both are exactly the same. This is mainly due to the layout of their microstructures, where the 2D specimen tends to have more clustering voids leading to weaker mechanical properties. These results confirm the fact that the 2D and 3D simulations can be different. Therefore, 2D simulations should be conducted and interpreted carefully when investigating properties of microstructures.

The result that the z-direction is aligned with the direction of gravity (global direction) during the specimens curing process can be a major cause for the lower stiffness and peak strength in the -direction for both specimens 1 and 2. Gravity might have influenced the formation of the void distribution coupled with the glass beads in the real specimen, leading to the reduction of solid matrix connectivity in the gravity direction. This phenomenon is often observed in curing concrete and termed “bleeding”, in which the water tends to be located on the surface of cement paste and to accumulate under aggregate grains.



Rys. 6. Pęknięcia 3D w próbce 1 na koniec symulacji: (a) obciążenie w kierunku x, (b) kierunku y i (c) kierunku z. Górny rząd rysunków przedstawia pęknięcia na powierzchni. W dolnym rzędzie pęknięcia powyżej 0,9 według modelu faza – pole są odwzorowane na przezroczystą mikrostrukturę

Fig. 6. Crack phase field of 3D specimen 1 at the end of the simulation: loading in the [a] x-direction, [b] y-direction, and [c] z-direction. Note that top row figures represent the crack phase field on the surface. In the bottom row figures, crack phase field over 0.9 is mapped onto the transparent microstructure

$$\lim_{r \rightarrow 0} L_s = f_s \quad \text{and} \quad \lim_{r \rightarrow \infty} L_s = 0 \quad [3]$$

gdzie f_s jest udziałem objętościowym fazy stałej.

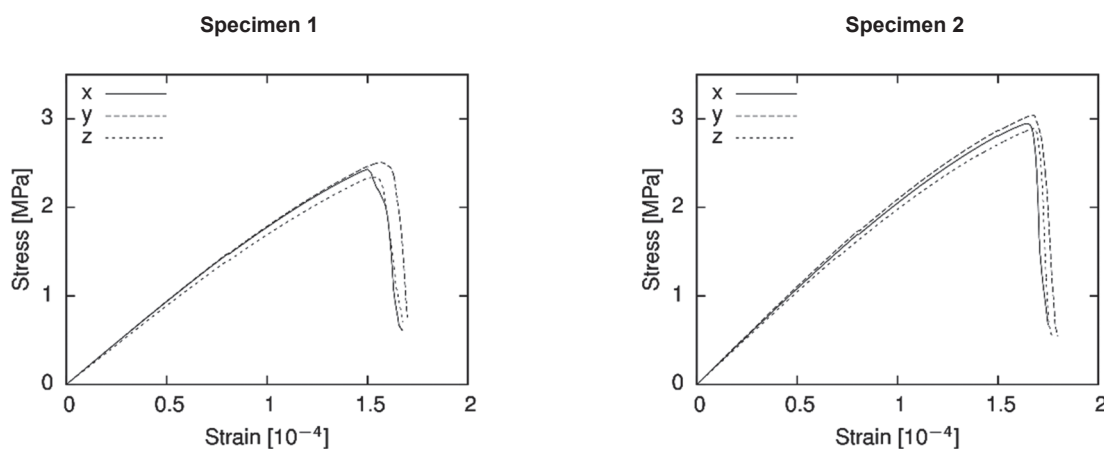
5.2. Charakterystyka funkcji L_s

Mikrostruktury materiałów badanych w pracy są upraszczane do układu dwufazowego: faza stała - pory. Spójność mikrostruktur opisywana jest funkcją ścieżki liniowej przez badanie różnych reprezentatywnych elementów objętości [RVEs]. Funkcje ścieżki liniowej fazy stałej [L_s] z poszerzoną siatką, stosowane w różnych symulacjach plastra 2D są pokazane na rysunku 9. L_s jest szacowane zarówno w kierunku x-, jak i y- dla każdego plastra, aby określić anizotropowość rozkładu fazy stałej.

5. Microstructure characterization and relation to properties

5.1. The lineal-path function

Random heterogeneity of the microstructures due to voids can be characterized by low-order probability functions such as two-point correlation, lineal-path, and two-point cluster functions (5). These low-order probability functions were shown to be effective in characterizing microstructures with random attributes (6 - 8). They compensate one another to better characterize microstructures. Though the two-point correlation and two-point cluster functions can efficiently describe corresponding characteristics of random phase distributions within microstructures, the lineal-path



Rys. 7. Przyłożone naprężenie w funkcji odkształcenia w trzech kierunkach obciążenia w 3D w próbce 1 i 2

Fig. 7. Applied stress vs. strain in the three loading directions in 3D for specimen 1 and 2

Krzywe L_s mikrostruktur 3D zastosowanych w symulacjach przedstawiono na rysunku 10. Podobnie jak w przypadku plastrów 2D, L_s rozpoczyna się od wartości równej udziałowi objętościowemu fazy stałej i zmierza do zera. Jednak zbieżność L_s jest wolniejsza w porównaniu z przypadkami 2D. Ta rozbieżność powstaje, ze względu na właściwości spójności fazy stałej w próbkach 3D, na którą mają wpływ losowe pory kuliste, a plastry 2D niedokładnie przedstawiają spójność tej samej fazy stałej w porównaniu z ich odpowiednikami 3D.

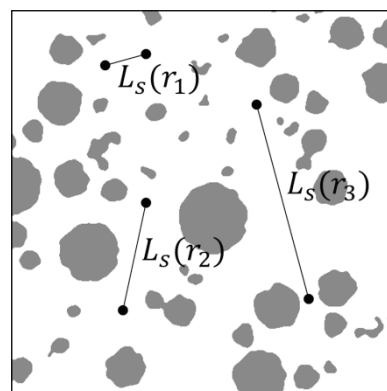
Na rysunkach 9 i 10 kierunek, dla którego funkcja L_s leży nad innymi funkcjami wskazuje na większą ciągłość fazy stałej. Funkcje L_s dla różnych kierunków są zgodne pomiędzy plastrami 2D i modelami 3D, w których L_s w jednym kierunku leży powyżej lub poniżej innych kierunków. Anizotropowe odpowiedzi mechaniczne przedstawione w Tabeli 1 można ogólnie odzwierciedlić różnicą funkcji L_s w przypadku różnych kierunków.

5.3. Zależność mikrostruktura-właściwości

Powierzchnia L_s jako całka funkcji L_s , jest wykorzystywana jako prosty wskaźnik do oszacowania ciągłości fazy stałej dla każdej mikrostruktury. Wartości powierzchni L_s i porowatości dla różnych próbek 2D i 3D pokazano w tablicy 2. Dla trzech plastrów 2D z próbki 1, stosunki powierzchni L_s plastrów 2 i 3 różnią się tylko o 5%, podczas gdy ich początkowa anizotropia sztywności i ich anizotropia maksymalnej wytrzymałości mają różnicę mniejszą lub równą odpowiednio 3% i 7%, jak przedstawiono w tablicy 1. Powyższe porównania pokazują, że powierzchnia L_s może być stosowana do przewidywania tendencji różnic właściwości mechanicznych lub anizotropowych właściwości mechanicznych, chociaż wartości różnic dla powierzchni L_s i właściwości mechanicznych nie są dokładnie takie same. W przypadkach 3D korelację między polem L_s a anizotropową właściwością mechaniczną można również zauważyć w tablicach 1 i 2.

Porównanie symulacji 3D z symulacjami 2D pokazuje, że anizotropia w płaszczyźnie w próbkach 3D jest mniejsza niż przypadku 2D, zarówno pod względem właściwości mikrostruktury, jak i wyników ich oceny. Taka różnica wynika z różnej metody przedstawiania spójności fazy stałej w próbkach 2D i 3D. W przypadku próbek 3D 1 i 2 zarówno charakterystyka, jak i właściwości w kierunku z, są zgodnie mniejsze niż wartości anizotropii w płaszczyźnie. Jak już opisano w punkcie 4.2, wpływ grawitacji w kierunku z- w rzeczywistych próbkach może pogorszyć ich właściwości i wpłynąć na ich mikrostrukturę. Dalsze porównanie właściwości między kierunkami x- i z- również ujawnia dodatnią korelację.

Pokazano, że wyższa wielkość L_s oznacza większą spójność fazy stałej, co prowadzi do większej sztywności i wytrzymałości. Zależność tę potwierdzają wyniki symulacji i właściwości próbek 2D i 3D. Z tych badań wynika, że różnica właściwości nie jest wprost proporcjonalna do różnicy ich charakterystyk, co może wynikać ze zmienności losowej na przykład grupowania porów. Zjawisko to czasami nie mogło być znalezione przy użyciu funkcji prawdopodobieństwa niższego rzędu, w tym funkcji ścieżki liniowej. Wykazano



Rys. 8: Przykład L_s w funkcji r . Trzy możliwe linie L_s są pokazane dla dowolnej długości r , o dowolnym kierunku. Można uzyskać dane statystyczne dla określonego kierunku w celu określenia anizotropii [ciemny obszar: pustki, jasny obszar: faza stała]

Fig. 8: Example of L_s as a function of r . Three possible L_s lines are shown for an arbitrary length r with an arbitrary direction, but statistics can be obtained for a specific direction to determine anisotropy [dark region: void, light region: solid]

function provides additional information about the connectivity of the phase of interest. It is found in this study that the lineal-path function is more suitable for describing the anisotropy of solid phase connectivity or void phase distribution which is related to mechanical properties of materials. For this reason, only the lineal-path function is presented here for brevity.

The lineal-path function for a solid phase, L_s , is the probability of placing an entire line of length r within the solid phase, as shown in Fig. 8. The value of L_s is the volume fraction of the solid phase when the line length is zero, but asymptotically approaches zero as the length approaches infinity,

$$\lim_{r \rightarrow 0} L_s = f_s \quad \text{and} \quad \lim_{r \rightarrow \infty} L_s = 0 \quad [3]$$

where f_s is the volume fraction of the solid phase.

5.2. function characteristics

The microstructures investigated in this study are idealized as a two-phase system, a solid phase and a void phase. Connectivities of the microstructures are characterized with the lineal-path function by studying different representative volume elements (RVEs). The lineal-path functions of the solid phase (L_s) from the coarsened meshed using in different 2D slice simulation are illustrated in Fig. 9. L_s is evaluated in both - and + directions for each slice to identify anisotropic characteristics of solid phase distribution.

For 3D microstructures used in these simulations, L_s plots are presented in Fig. 10. Similar as in the 2D slices, L_s starts with the solid phase volume fraction value and converges to zero. However, L_s convergence rate is slower compared with 2D cases. This discrepancy arises because the characteristics of the 3D solid phase connectivity is influenced by the random spherical voids, and the 2D slices does not exactly portray the same solid phase connectivity as their 3D counterpart.

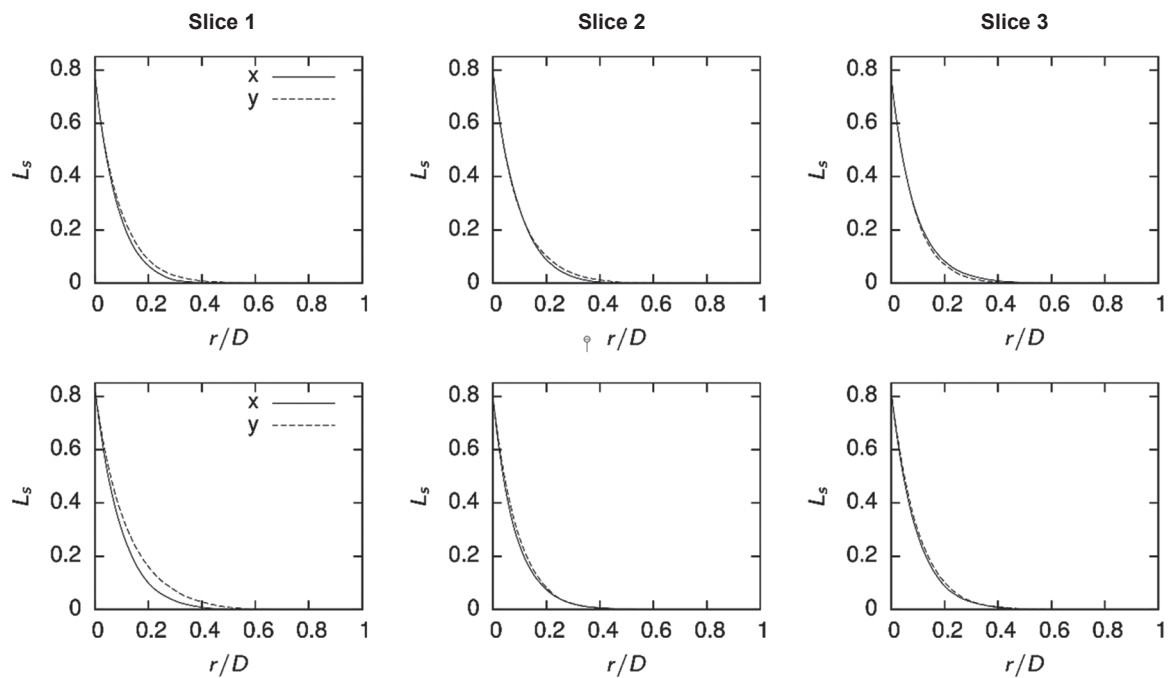


Fig. 9. L_s for three slices of specimens 1 and 2 [r/D line length to RVE side length ratio]. The anisotropic mechanical responses are reflected by the difference of L_s functions between different directions

Fig. 9. L_s trzech plastrów próbek 1 i 2 [r/D : stosunek długości odcinka do RVE długości boku]. Anizotropowe odpowiedzi mechaniczne są odzwierciedlane przez różnicę funkcji L_s między różnymi kierunkami

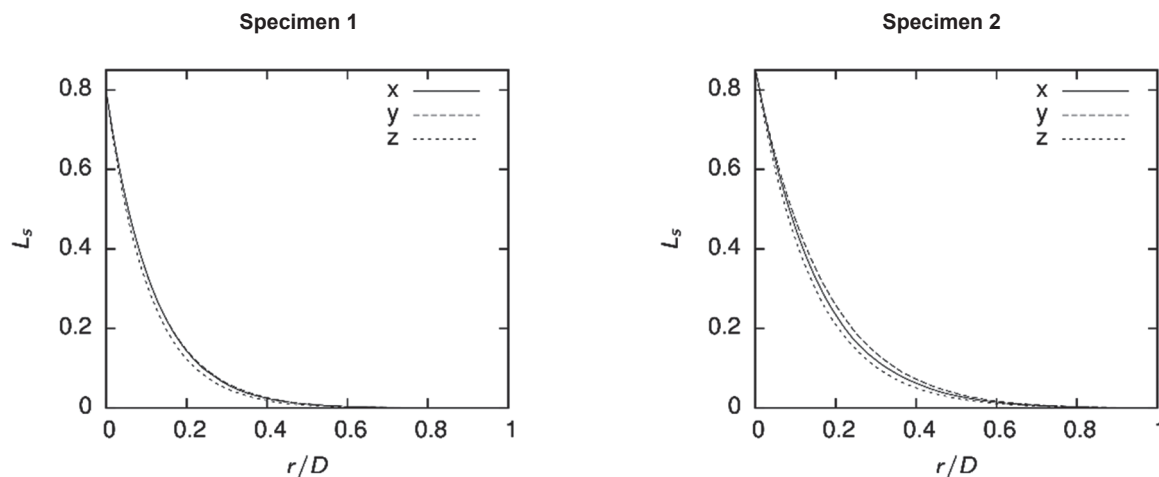


Fig. 10. L_s w 3D dla próbki 1 i 2 [r/D : stosunek długości odcinka do RVE długości boku]. Anizotropowe odpowiedzi mechaniczne są odzwierciedlane przez różnicę funkcji L_s między różnymi kierunkami

Fig. 10. L_s in 3D for specimens 1 and 2 [r/D line length to RVE side length ratio]. The anisotropic mechanical responses are reflected by the difference of L_s functions between different directions

jednak, że występuje silna korelacja między funkcją ścieżki liniowej a właściwościami mechanicznymi [sztywność i wytrzymałość] dla badanych mikrostruktur. Bardziej szczegółową analizę tego tematu można znaleźć w pracy (19).

6. Wnioski

W pracy zastosowano model faza - pole dla opisu pęknięcia w celu oceny kierunkowych właściwości mechanicznych to jest sztywność i wytrzymałość próbek zaczynu cementowego z mikrostrukturami o losowych rozkładach porów kulistych, w których materiał jest

In Figs. 9 and 10, the direction, whose L_s function lies above the other L_s functions, indicates higher solid phase connectivity. The L_s functions for different directions are consistent between 2D slices and 3D models, where L_s function in one direction lies either above or below other directions. The anisotropic mechanical responses reported in Table 1 can generally be reflected by the difference of L_s functions between different directions.

5.3. Structure-property relationships

The L_s area, the integral of the L_s function, is used as a simple index to quantify the solid phase connectivity for each microstructure.

Tablica 2 / Table 2

POLA ROZKŁADÓW L_s

AREAS OF DISTRIBUTIONS

Próbka Speci-men	Plaster3D Slice 3D	Porowatość Porosity, %	Powierzchnia L_s / L_s Area					
			<i>x-dir.</i>	<i>y-dir.</i>	<i>z-dir.</i>	<i>y-dir x-dir.</i>	<i>z-dir. x-dir.</i>	<i>y-dir z-dir.</i>
1	1	22.5	0.0639	0.0713	-	1.12	-	-
	2	20.79	0.0722	0.0757	-	1.05	-	-
	3	22.66	0.0685	0.0651	-	0.95	-	-
	3D	20.66	0.0924	0.0931	0.0850	1.01	0.92	1.10
2	1	17.36	0.0790	0.0983	-	1.24	-	-
	2	20.33	0.0665	0.0703	-	1.06	-	-
	3	17.88	0.0746	0.0790	-	1.06	-	-
	3D	14.90	0.1306	0.1392	0.1207	1.07	0.93	1.15

uproszczonej sprowadzony do dwufazowej mikrostruktury z fazą stałą i porami. Wirtualne próbki w symulacjach otrzymano na podstawie obrazów μ -CT z synchrotronu. Nasze badania pokazują, że zastosowanie modelu faza – pole do opisu pęknięcia można wykorzystać do modelowania powstawania wielokrotnego spękania, propagacji porów i degradacji właściwości zarówno w zaczynach cementowych w obrazach 2D jak i 3D, ze złożonymi mikrostrukturami poddanymi bezpośredniemu naprężeniu.

Ponadto funkcję ścieżki liniowej można stosować do opisu spójności fazy stałej. Opisy mikrostruktury są skorelowane z anizotropowymi właściwościami mechanicznymi, uzyskanymi z symulacji. Stwierdzono przydatność funkcji ścieżki liniowej do wykrywania perkolacji fazy stałej w odniesieniu do właściwości mechanicznych mikrostruktur z losowymi porami kulistymi. Tendencje wynikające z badania właściwości materiału dobrze zgadzają się z właściwościami ocenianymi za pomocą modelu faza – pole spękań.

Metody oceny właściwości zarówno doświadczeń, jak i symulacji w celu zrozumienia właściwości mikrostruktury w materiałach cementowych są skąpe dla skali liniowej użytej w badaniu. Wykazano, że model faza – pole, na którym powstają spękania i funkcje prawdopodobieństwa niższego rzędu mogą być stosowane równocześnie jako zespolone narzędzie do oceny tradycyjnych materiałów lub opracowania nowych materiałów cementowych.

Podziękowania

Autorzy pragną podziękować Dr Xiaoxuan Zhang i Prof. Christiaanowi Linderowi za wskazówki i dyskusje na temat modelu faza – pole, na którym powstają spękania. Badania te zostały wsparte przez National Research Foundation Grant, finansowane przez rząd koreański i wsparte przez Niemieckie Federalne Ministerstwo Edukacji i Badań w ramach projektu KONNECT Joint Call (NRF-2015K1A3A1A59073929/BMBF Numer projektu: 01DR16007). Prace te były również wspierane przez Koreański Instytut Technologii i Planowania Technologii Energetycznych (KETEP) oraz Ministerstwo Handlu, Przemysłu i Energii (MOTIE) Republiki Korei (nr 20174030201480). Równoległe obliczenia w tej pracy zostały

Values of L_s area and porosities for different 2D and 3D specimens are presented in Table 2. For the three 2D slices of specimen 1, L_s area ratios of slices 2 and 3 only differ by 5%, whereas their initial stiffness anisotropy and their peak strength anisotropy have a difference lower or equal to 3% and 7%, respectively, as presented in Table 1. The above comparisons show that L_s area can be used to predict trends of the difference of mechanical properties or the anisotropic mechanical property, though the values of the differences for L_s area and mechanical properties does not exactly match each other. For 3D cases, the correlation between the L_s area and the anisotropic mechanical property can be also observed in Table 1 and Table 2.

A comparison between 3D cases and 2D cases shows that the in-plane anisotropy in 3D specimens is lower than 2D cases in terms of both microstructure characteristics and property evaluation results. Such difference is caused by the different connectivity representations in the 2D and 3D specimens. For 3D specimens 1 and 2, both the characteristics and the property values in the z-direction are consistently lower than in-plane values. As already described in Section 4.2, the effect of gravity in the z-direction in real specimens can degrade their properties and affecting their microstructures. A further comparison of properties and characteristics between x-dir. and y-dir. also reveals a positive correlation.

It is shown that a higher L_s indicates a higher connectivity of solid phases, which leads to higher stiffness and strength. This trend is confirmed by the simulation results and characteristics from both 2D and 3D specimens. One observes from this study that the property difference is not directly proportional to the characteristics difference, which might be due to the variability of the randomness, e.g., void clustering. This phenomenon sometimes could not be captured effectively with low-order probability functions including the lineal-path function. Nevertheless, it is shown that there exists a strong correlation between the lineal-path function and mechanical properties (stiffness and strength) for the microstructures investigated in this study. More detailed analysis on the subject can be found in (19).

wsparte przez zasoby superkomputerowe PLSI w Koreańskim Instytucie Naukowo-Technicznym oraz zasoby Centrum Superkomputerowego UNIST. Obrazy μ -CT uzyskano z synchrotronu obsługiwane przez Pohang Accelerator Laboratory (PAL) w Korei.

Literatura / References

1. A. Ingraffea, Computational Fracture Mechanics: Encyclopedia of Computational Mechanics, John Wiley & Sons Ltd., 2007.
2. M. Borden, C. Verhoosel, M. Scott, T. Hughes, C. Landis, A phase-field description of dynamic brittle fracture, *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, **217**, 77-95 (2012).
3. C. Miehe, M. Hofacker, F. Welschinger, A phase field model for rate-independent crack propagation: Robust algorithmic implementation based on operator splits, *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, **199**, 2765-2778 (2010).
4. X. Zhang, A. Krischok, C. Linder, A variational framework to model diffusion induced large plastic deformation and phase field fracture during initial two-phase lithiation of silicon electrodes, *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, **312**, 51-77 (2016).
5. S. Torquato, Random heterogeneous materials: Microstructure and macroscopic properties, Springer-Verlag, 2002.
6. B. Lu, S. Torquato, Lineal-path function for random heterogeneous materials, *Phys. Rev. A*, **45**, 922-929 (1992).
7. C. Yeong, S. Torquato, Reconstructing random media, *Phys. Rev. E*, **57**, 495-506 (1998).
8. P. Øren, S. Bakke, Reconstruction of Berea sandstone and pore-scale modelling of wettability effects, *J. Petrol. Sci. Eng.*, **39**, 117-199 (2003).
9. N. Mayercsik, R. Felice, M. Ley, K. Kurtis, A probabilistic technique for entrained air void analysis in hardened concrete, *Cem. Concr. Res.*, **59**, 16-23 (2014).
10. R. Zhong, K. Wille, Linking pore system characteristics to the compressive behavior of pervious concrete, *Cem. Concr. Compos.*, **70**, 130-138 (2016).
11. S.-Y. Chung, T.-S. Han, S.-Y. Kim, J.-H. Kim, K. Youm, J.-H. Lim, Evaluation of effect of glass beads on thermal conductivity of insulating concrete using micro CT images and probability functions, *Cem. Concr. Compos.*, **65**, 150-162 (2016).
12. N. Bossa, P. Chaurand, J. Vicente, D. Borschneck, C. Levard, O. Aguerre-Chariol, J. Rose, Micro-and nano-X-ray computed-tomography: A step forward in the characterization of the pore network of a leached cement paste, *Cement Concrete Res.* **67** (2015) 138-147.
13. S.-Y. Chung, T.-S. Han, T. Yun, K. Youm, Evaluation of the anisotropy of the void distribution and the stiffness of lightweight aggregates using CT imaging, *Constr. Build. Mater.*, **48**, 998-1008 (2013).
14. S.-Y. Chung, T.-S. Han, S.-Y. Kim, T.-H. Lee, Investigation of the permeability of porous concrete reconstructed using probabilistic description methods, *Constr. Build. Mater.*, **66**, 760-770 (2014).
15. S.-Y. Chung, T.-S. Han, S.-Y. Kim, Reconstruction and evaluation of the air permeability of a cement paste specimen with a void distribution gradient using CT images and numerical methods, *Constr. Build. Mater.*, **87**, 45-53 (2015).
16. S. Mindess, J. Young, D. Darwin, Concrete, Prentice Hall, 2003.
17. F. Djouani, M. Chehimi, K. Benzarti, Interactions of fully formulated epoxy with model cement hydrates, *J. Adhes. Sci. Technol.*, **27**, 469-489 (2013).
18. M. Zhang, A. Jivkov, Micromechanical modelling of deformation and fracture of hydrating cement paste using X-ray computed tomography characterisation, *Compos. Part B-Eng.* **88**, 64-72 (2016).
19. S.-Y. Chung, T.-S. Han, X. Zhang, J.-S. Kim, S.-Y. Chung, J.-H. Lim, C. Linder, Area of lineal-path function for describing the pore microstructures of cement paste and their relations to the mechanical properties simulated from μ -CT microstructures, *Cem. Concr. Compos.*, In print.

6. Conclusion

In this work, the crack phase field model is applied to evaluate directional mechanical properties (i.e., stiffness and strength) of cement paste specimens with microstructures containing random spherical void distributions, where the material is idealized as a two-phase microstructure with solid and void phases. The virtual specimens in the simulations are obtained from μ -CT images from a synchrotron. Our study shows that the crack phase field approach can be used to model multiple crack initiations, propagations, and the property degradation in both 2D and 3D cement paste with complex microstructures under direct tension.

In addition, lineal-path function is used to characterize solid phase connectivity. The microstructure characteristics are correlated with anisotropic mechanical properties obtained from simulations. The lineal-path function shows the possibility for identifying the solid phase percolation in relation to the mechanical properties of microstructures with random spherical voids. The trends from characterization results generally agree well with properties evaluated using the crack phase field model.

Property evaluation methodologies for both experiments and simulations to understand microstructure features in cementitious materials are scarce at the length scale investigated in this study. It was shown that the crack phase field model and low-order probability functions could be used together as a synergistic tool for evaluating conventional materials or developing new cementitious materials.

Acknowledgement

Authors would like to thank Dr. Xiaoxuan Zhang and Prof. Christian Linder for guidance and discussions on the crack phase field model. This research was supported by the National Research Foundation Grant, funded by the Korean Government and was supported by the German Federal Ministry of Education and Research for KONNECT Joint Call project (NRF-2015K1A3A1A59073929/BMBF Project number: 01DR16007). This work was also supported by the Korea Institute of Energy Technology Evaluation and Planning (KETEP) and the Ministry of Trade, Industry & Energy (MOTIE) of the Republic of Korea (No. 20174030201480). Parallel computation in this work was supported by the PLSI supercomputing resources of the Korea Institute of Science and Technology Information and the resources of the UNIST Supercomputing Center. μ -CT images were obtained from the synchrotron operated by the Pohang Accelerator Laboratory (PAL) in Korea.