

Cadre d'optimisation basé sur l'intelligence artificielle pour la conception de ciments résistants à la rupture

Jinane MURR

Nantes Université, Ecole Centrale de Nantes, CNRS, GeM UMR 6183, F-44000 Nantes, France

RESUME La rupture des matériaux à base de ciment se produit à partir de microfissures dans la pâte de ciment ou aux interfaces, lorsque la contrainte de traction dépasse la résistance à la traction. En raison de la nature très hétérogène de la pâte de ciment, la résistance à la propagation des fissures dépend des phases non hydratées, des produits d'hydratation et de la porosité. Cette étude propose un modèle d'intelligence artificielle combinant un LSTM et un DNN pour simuler la composition de la pâte de ciment hydratée et évaluer sa résistance à la traction. Le modèle LSTM est entraîné sur une base de données numériques issue d'un modèle thermodynamique et reproduit l'évolution microstructurale en fonction de l'âge d'hydratation. Le DNN, quant à lui, évalue la résistance à la traction à partir des microstructures simulées. Le DNN a été entraîné sur une base de données obtenue par simulation à l'aide d'une modélisation micromécanique par éléments finis. Ensemble, les modèles LSTM et DNN permettent de prévoir l'évolution temporelle de la résistance à la traction de la pâte de ciment hydratée à partir de la composition du ciment et du rapport E/C comme seules entrées. Le cadre développé sert également d'outil d'optimisation contraint pour la conception de ciments ayant une résistance à la traction cible.

Mots-clés pâte de ciment, intelligence artificielle, résistance à la traction, micromécanique, thermodynamique

I. INTRODUCTION

La pâte de ciment présente une microstructure hétérogène qui évolue à travers les réactions chimiques des phases constitutives du ciment. Les propriétés de rupture de la pâte de ciment hydratée (PCH) à un âge donné dépendent des fractions volumiques et de la distribution spatiale des phases non hydratées, des produits hydratés et de la porosité. Récemment, un intérêt croissant a émergé pour la corrélation entre la composition chimique des pâtes de ciment et leurs propriétés mécaniques (Hu, 2014). Comprendre cette relation pourrait ouvrir la voie à l'optimisation des ciments.

Concernant l'étude de résistance à la traction (f_t) des PCH à l'échelle microscopique, à notre connaissance, aucune étude n'établit de lien direct entre la composition chimique des pâtes de ciment et leur résistance à la traction. En effet, les méthodes expérimentales sont laborieuses (Rößler and Odler, 1985) (Luković et al., 2015), tandis que les méthodes computationnelles sont couteuses en temps de simulation (Zhang et al., 2012) (X. Li et al., 2022) (Zhang et al., 2024). À ces coûts s'ajoute la simplification inévitable de l'hétérogénéité de la microstructure de la PCH, due à la complexité de distinguer les phases hydratées par des méthodes expérimentales, telles que la microtomographie à rayons X (micro-CT), souvent employée pour obtenir les microstructures de la pâte

de ciment servant de base aux modèles computationnels. Par conséquent, des approches alternatives sont nécessaires pour développer des modèles capables de prédire la résistance à la traction des pâtes de ciment.

Le quatrième et plus récent paradigme de la recherche sur les matériaux cimentaires, qui intègre les méthodes d'apprentissage automatique, a considérablement accéléré la conception des matériaux en surmontant des limitations telles que les cycles d'essais-erreurs et les coûts de calcul élevés (Z. Li et al., 2022). Ces méthodologies pourraient également être appliquées à l'optimisation de la composition chimique des pâtes de ciment et de ciments, si les données nécessaires étaient disponibles. Cependant, il existe un manque notable dans la littérature concernant les études explorant la variation de la résistance à la traction des pâtes de ciment en fonction de leur composition chimique. Il est donc nécessaire d'envisager des approches alternatives pour générer de telles bases de données.

Cette étude explore une méthode novatrice qui combine des techniques d'apprentissage automatique avec des aspects chimio-mécaniques fondamentaux du ciment. L'objectif principal est d'améliorer la résistance à la traction des pâtes de ciment en modifiant la composition du ciment et le rapport eau/ciment (E/C). En exploitant des modèles avancés comme les réseaux de mémoire à long et court terme (LSTM) et les réseaux de neurones profonds (DNN), cette étude introduit une approche permettant d'ajuster précisément la composition du ciment pour des propriétés mécaniques optimales.

Dans un premier temps, un LSTM est développé pour prédire le processus d'hydratation de la pâte de ciment, notamment l'évolution temporelle des phases de clinker non hydratées et des produits d'hydratation, en utilisant la composition minéralogique du ciment et le rapport E/C comme données d'entrée. Ensuite, les données de sortie (phases non hydratées, produits d'hydratation et porosité) du modèle LSTM sont utilisées comme données d'entrée dans un modèle DNN afin de prédire la résistance à la traction de la pâte de ciment hydratée. Par la suite, les deux modèles développés sont exploités dans un schéma d'optimisation pour dériver des compositions optimisées de ciments, spécifiquement conçues pour atteindre une résistance à la traction cible. Une représentation graphique des deux modèles est présentée dans la [FIGURE 1](#).

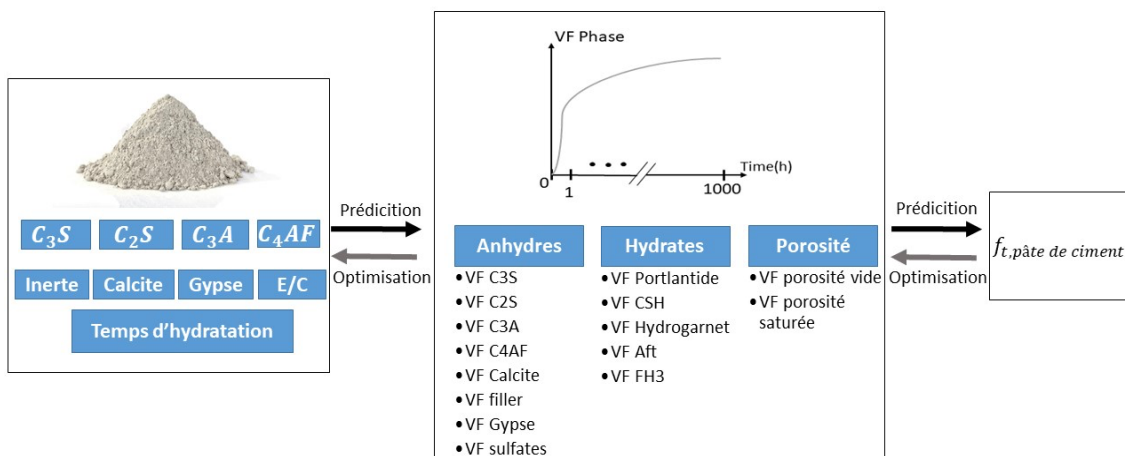


FIGURE 1. Abstract graphique des modèles développés et de la méthodologie d'optimisation. VF représente la fraction volumique.

II. LSTM POUR LA MODELISATION DE L'HYDRATATION DU CIMENT

Un ciment Portland ordinaire est principalement composé de silicate tricalcique (C_3S), silicate dicalcique (C_2S), aluminat tricalcique (C_3A) et aluminoferrite tétracalcique (C_4AF), qui constituent la phase clinker. De plus, le ciment contient du gypse ($Ca_2SO_4 \cdot 2H_2O$) pour réguler l'hydratation des réactifs contenant de l'alumine. De la chaux libre (CaO), de la calcite ($CaCO_3$) et des inertes peuvent également être présentes en faibles pourcentages massiques. Lors du contact avec l'eau, les réactions d'hydratation des réactifs du ciment commencent et plusieurs produits d'hydratation se forment, tels que les silicates de calcium hydratés (C-S-H), la portlandite (CH), l'ettringite et l'hydrogarnet, entre autres (Barnes and Bensted, 2002). Au fur et à mesure de l'hydratation, la fraction volumique de la porosité remplie d'eau diminue, remplacée par des solides, ce qui conduit au développement des propriétés mécaniques de la pâte de ciment hydratée. En conditions de cure endogène, une porosité vide se forme également. Les évolutions des fractions volumiques des phases initiales du ciment, des produits d'hydratation et de la porosité sont des fonctions temporelles interdépendantes. Pour cette raison, un modèle séquentiel de mémoire à long et court terme (LSTM) a été adopté pour modéliser l'évolution temporelle des phases de ciment et des produits d'hydratation d'un ciment.

Les LSTM sont une catégorie de réseaux de neurones récurrents (RNN) dotés de boucles de rétroaction, ce qui leur permet de travailler avec des données séquentielles de différentes longueurs (Hochreiter and Schmidhuber, 1997). Les LSTM remplacent la boucle de rétroaction unique rencontrée dans une unité RNN basique par deux chemins distincts, l'un pour la mémoire à long terme et l'autre pour la mémoire à court terme. Cela leur confère la capacité de ne retenir que les informations importantes des données séquentielles et de les utiliser pour obtenir de meilleures prédictions. Cette caractéristique les rend très populaires pour les applications de séries temporelles longues, mais aussi pour tout autre type de données séquentielles, comme la cinétique d'hydratation du ciment. Dans ce contexte, un LSTM est entraîné et testé pour la prédiction de l'évolution dans le temps des composants d'une pâte de ciment hydratée.

Les entrées du modèle incluent la composition du ciment en terme des fractions volumiques initiales (VF0) de C_3S , C_2S , C_3A , C_4AF , gypse, calcite et inertes, ainsi que les rapports E/C et ciment/liant (C/L). La dernière entrée est le temps d'hydratation, exprimé en heures. Le modèle a été entraîné pour fournir en sortie l'évolution dans le temps des fractions volumiques des réactifs et produits d'hydratation (C_3S , C_2S , C_3A , C_4AF , gypse, CH, C-S-H, ettringite, hydrogarnet, hydroxyde de fer) ainsi que l'évolution de la fraction volumique des porosités vide et saturée. Le modèle final possède 10 entrées et 13 séquences de sorties.

Les données utilisées pour l'entraînement et le test proviennent de simulations thermodynamiques réalisées avec le modèle d'hydratation CEMHYD3D (Bullard, 2014). La base de donnée a été simulée avec 16 ciments de compositions minéralogiques différentes. Pour chaque ciment, quatre rapports E/C ont été pris en compte : 0,3, 0,4, 0,45 et 0,5. Les temps d'hydratation considérés s'étendent du début de l'hydratation à 40 jours, avec des pas de temps variables. En conséquence, la base de données comprend 36392 points de données uniques issus de 57 systèmes.

Ces systèmes ont été répartis entre les ensembles d'entraînement et de test. La base de données test comprenant sept systèmes soigneusement sélectionnés pour évaluer la capacité de généralisation du modèle entraîné. Deux de ces systèmes sont des ciments inclus dans le jeu de données

d'entraînement mais avec des rapports E/C différents, exemple Ciment_1. Les quatre autres systèmes proviennent d'un ciment, désigné Ciment_2, non observé lors de l'entraînement, avec les quatre rapports E/C précités. Cela laisse 50 systèmes pour la base de données d'entraînement.

Pour évaluer la performance du modèle, trois variables statistiques sont utilisées : l'erreur quadratique moyenne (MSE), l'erreur absolue moyenne (MAE) et l'erreur en pourcentage absolue moyenne (MAPE). Les descriptions mathématiques de ces variables peuvent être trouvées dans (Shah et al., 2022) (Cook et al., 2021).

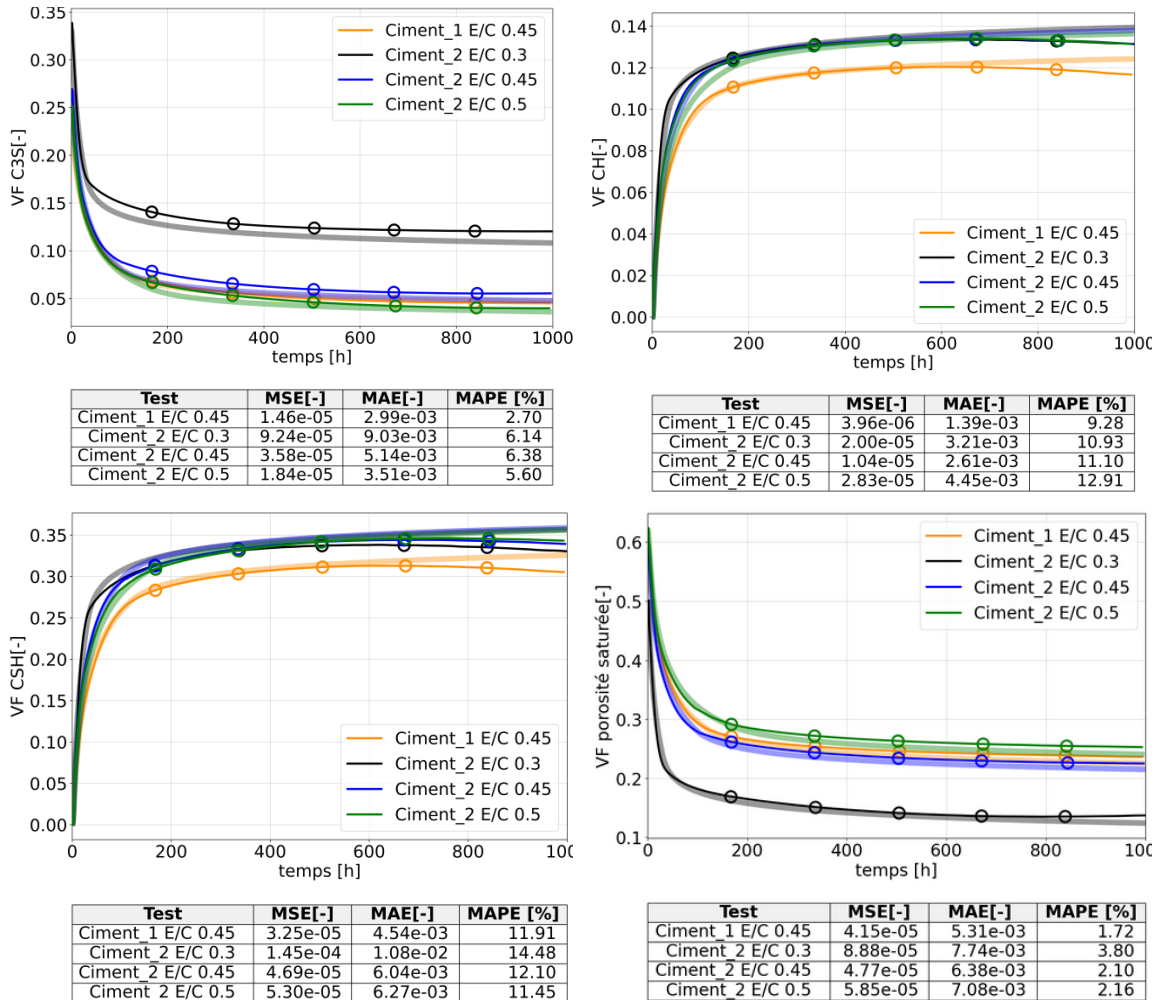


FIGURE 2. Prédiction du modèle LSTM de l'évolution de la fraction volumique en fonction du temps en heures (h) pour C_3S , CH, C-S-H et porosité remplie. Le tableau sous chaque graphique présente les valeurs de MSE, MAE et MAPE pour la sortie correspondante. La ligne fine représente l'évolution prédite, tandis que la ligne épaisse indique l'évolution réelle simulée par CEMHYD3D.

Les résultats de la validation du modèle LSTM sur deux ciments (Ciment_1 et Ciment_2) sont présentés dans la FIGURE 2. Pour des raisons de concision, seules quatre séquences de sortie sont représentées. Le modèle LSTM a capturé avec succès les tendances thermodynamiques de l'hydratation du ciment, démontrant son efficacité dans la prédiction de l'évolution temporelle des réactifs et des produits d'hydratation. En effet, la MSE pour l'entraînement est de $2,12 \times 10^{-3}$ et

augmente à $7,11 \times 10^{-3}$ pour la validation. Les erreurs pour les deux ciments de validation, Ciment_1 et Ciment_2, varient entre les séquences de sorties mais restent satisfaisantes. Le MAPE varie entre 2,53 % et 20,86 % et la tendance des évolutions prédites est en accord avec celle des évolutions de la base de donnée.

III. DNN POUR LA PREDICTION DE LA RESISTANCE À LA TRACTION DES PÂTES DE CIMENT À PARTIR DE LEUR COMPOSITION

Cette section présente le développement d'un modèle DNN pour la prédiction de la résistance à la traction d'une PCH à partir de sa composition en terme de fractions volumiques des phases et de la porosité. Le développement du modèle est détaillé dans une étude précédente (Murr et al., 2024). Les DNN sont parmi les modèles d'apprentissage automatique les plus couramment utilisés pour les applications de régression supervisée et de conception des matériaux cimentaires. Leur utilisation a connu une croissance constante au cours de la dernière décennie (Ben Chaabene et al., 2020). L'architecture et les fondements mathématiques de l'algorithme DNN ne seront pas discutés ici, mais peuvent être consultés dans (Shrestha and Mahmood, 2019).

Comme tout algorithme de régression supervisée, un ensemble de données représentatif est nécessaire. Étant donné que la recherche sur la résistance à la traction des pâtes de ciment est rare dans la littérature, un modèle micromécanique a été adopté pour générer la base de données. Le modèle micromécanique, développé par (Rhardane et al., 2020), modélise une section $2D$ d'un volume élémentaire représentatif tridimensionnel (VER) d'une pâte de ciment hydratée à l'aide d'un code d'éléments finis. Le VER est simulé à l'aide de CEMHYD3D, puis importé dans le code CAST3M (Dureisseix, 1997). Chaque phase de ciment se voit attribuer ses propriétés élastiques (module de Young et coefficient de Poisson) et de rupture (résistance à la traction et énergie de fracture). Cependant, toutes les phases suivent la version isotrope du modèle d'endommagement de Fichant (Fichant et al., 1999). Un test de traction unidirectionnel direct est simulé pour obtenir la courbe contrainte-ouverture de fissure, à partir de laquelle la résistance à la traction de la pâte hydratée est déduite. Ce modèle est validé expérimentalement sur des ciments de différentes compositions et des rapports de E/C compris entre 0.3 et 0.5. Le lecteur est invité à se référer à (Murr et al., 2024) pour plus de détails.

Pour la création de la base de données du DNN, 6 ciments différents ont été sélectionnés, avec des rapports E/C de 0,3, 0,4, 0,45 et 0,5 et un âge d'hydratation variant entre 14 et 40 jours. La résistance à la traction de ces ciments a été calculée à l'aide du modèle micromécanique, générant une base de données de 149 exemples uniques, avec la composition chimique de la pâte hydratée comme entrée et la résistance à la traction comme sortie. Le jeu de données est divisé en ensembles d'entraînement et de validation avec un ratio de 80-20. La régularisation L2 et un arrêt précoce (early stopping) ont été intégrés pour éviter le sur-apprentissage. L'erreur quadratique moyenne (RMSE) et l'erreur absolue moyenne (MAE) ont été utilisées pour évaluer les performances du modèle sur les bases de données d'entraînement et de validation.

Les performances d'entraînement sont présentées dans la **FIGURE 3**. Pour l'entraînement, un MAE de 0,14 MPa pour des valeurs de résistance à la traction entre 2 MPa et 11 MPa est atteint, et un RMSE de 0,20 MPa. Une légère augmentation du MAE et du RMSE est observée lors de la

validation, avec des valeurs respectives de 0,32 MPa et 0,43 MPa. Ces résultats montrent l'absence de sur-apprentissage dans le modèle et le potentiel de prédiction de la résistance à la traction d'une pâte de ciment en fonction des fractions volumiques de ses phases constitutives.

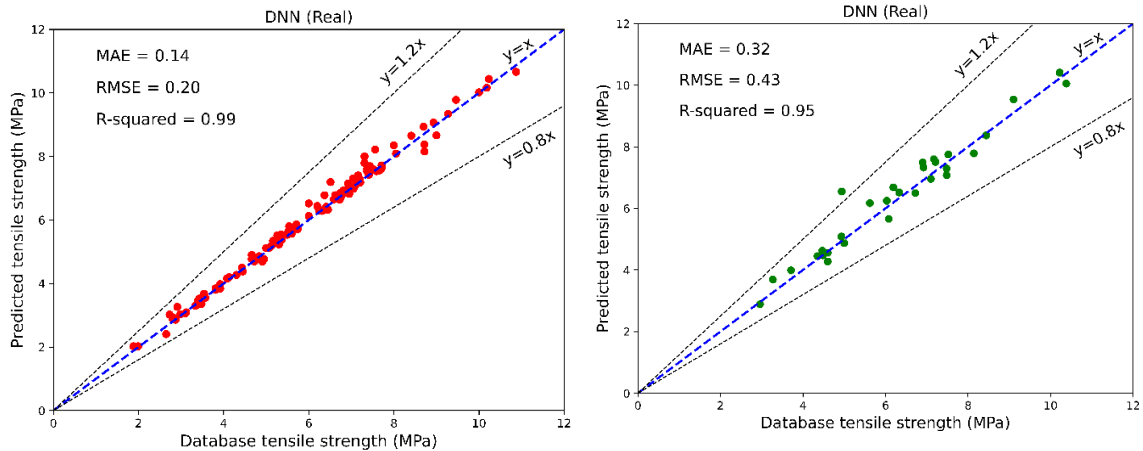


FIGURE 3. Valeur prédite versus valeur attendue de la résistance à la traction (MPa) obtenue à partir du modèle DNN. À gauche, les résultats pour l'entraînement, et à droite, les résultats de la validation.

IV. CONCEPTION INVERSE DE LA COMPOSITION DU CIMENT POUR UNE RESISTANCE A LA TRACTION CIBLE

La conception inverse est une méthode utilisée pour déterminer les compositions optimales des matériaux afin d'atteindre une propriété cible (Wang et al., 2022). Étant donné que la résistance à la traction d'une PCH dépend de sa composition, qui est elle-même influencée par la composition initiale du ciment et du rapport E/C, un schéma de conception inverse est proposé pour optimiser les compositions de ciment et atteindre une résistance à la traction cible de la pâte hydratée. L'approche, détaillée dans ce qui suit, consiste à intégrer les modèles LSTM et DNN développés comme fonction objective dans un algorithme d'optimisation de la composition minéralogique du ciment pour une résistance à la traction cible. L'algorithme d'optimisation est schématisé dans la **FIGURE 4 (a)**.

Étape 1 : Optimisation de la composition de la pâte de ciment

Dans un premier temps, la composition de la pâte de ciment est conçue pour optimiser sa résistance à la traction. Le modèle de régression DNN entraîné dans la section III permet de prédire la résistance à la traction d'une PCH en utilisant sa composition comme entrée. Pour la conception inverse de la composition de la pâte, une résistance à la traction cible est choisie. Le problème est formulé comme suit : à partir d'une composition initiale aléatoire de pâte de ciment, la résistance à la traction est prédite à l'aide du modèle DNN, et la RMSE est calculée entre la résistance cible et celle prédite. Ensuite, à l'aide de l'algorithme d'optimisation COBYLA (Powell, 2007), la composition de la pâte de ciment est mise à jour pour minimiser la RMSE.

Les contraintes sur la composition de la pâte de ciment incluent le respect des valeurs minimales et maximales des fractions volumiques des phases de la pâte, validées par le modèle DNN. De plus, une contrainte est imposée pour maintenir la somme des fractions volumiques des phases entre

0,98 et 1, établissant ainsi le domaine validé du modèle DNN. À cette étape, aucune contrainte n'est imposée sur la faisabilité chimique des compositions de la pâte.

Étape 2 : Optimisation de la composition du ciment

La composition optimisée de la pâte de ciment obtenue à la première étape est prise comme composition cible, et le temps d'hydratation souhaité, le rapport E/C, le rapport C/B, la fraction volumique de calcite et la fraction volumique d'inertes sont fixés. Ensuite, en partant d'une composition initiale de ciment, la composition de la pâte de ciment est prédite à l'aide du modèle LSTM entraîné dans la section II. La composition du ciment est ensuite mise à jour pour minimiser la somme des RMSE entre les composants de la pâte cible et ceux prédits à l'aide de l'algorithme COBYLA.

Les contraintes sur la composition du ciment incluent le respect des valeurs minimales et maximales des fractions volumiques des composants du ciment, telles que présentes dans la base de données d'entraînement du LSTM, notée $VF0_{j,min}$ et $VF0_{j,max}$, respectivement. L'expression de la contrainte est la suivante :

$$VF0_{j,min} < VF0_j \leq VF0_{j,max} \quad (1)$$

Dans cette équation, $VF0_j$ représente la fraction volumique initiale de la composante j du ciment avec $j \in \{C_3S, C_2S, C_3A, C_4AF, gypse, inertes, calcite\}$.

Une contrainte d'égalité est ajoutée pour garantir que les fractions volumiques initiales des composants du ciment dans la pâte respectent le rapport E/C souhaité :

$$V_{ciment} = \frac{1000}{\rho_{ciment} \times \frac{E}{C} + 1000} \quad (2)$$

avec

$$V_{ciment} = \sum_j VF0_j \quad (3)$$

et

$$\rho_{ciment} = \frac{\sum_j \rho_j \times VF0_j}{V_{ciment}} \quad (4)$$

Où ρ_{ciment} et ρ_j en $[Kg/m^3]$ représentent les masses volumiques du ciment et de la phase j , respectivement.

Étape 3 : Recherche de la résistance à la traction optimisée du ciment

La composition optimisée du ciment dépend des valeurs initiales choisies au début des deux étapes précédentes. Par conséquent, les étapes 1 et 2 sont répétées pour différentes hypothèses initiales. Ensuite, la résistance à la traction des différents ciments optimisés est prédite, et les résultats sont comparés à la résistance à la traction cible. Le résultat le plus proche est retenu. Selon l'application prévue du ciment, des contraintes supplémentaires peuvent guider le choix final, que ce soit

concernant la composition de la pâte de ciment hydratée ou la composition initiale du ciment. Ces contraintes peuvent être liées à la durabilité de la pâte de ciment ou à l'environnement d'exposition. La **FIGURE 4 (b)** montre les résultats d'optimisation obtenus pour une f_t cible de 6 MPa et un E/C de 0,45. Trois différentes compositions de ciment pourraient être considérées avec des résistances à la traction qui varient entre 5,5 MPa et 6,3 MPa.

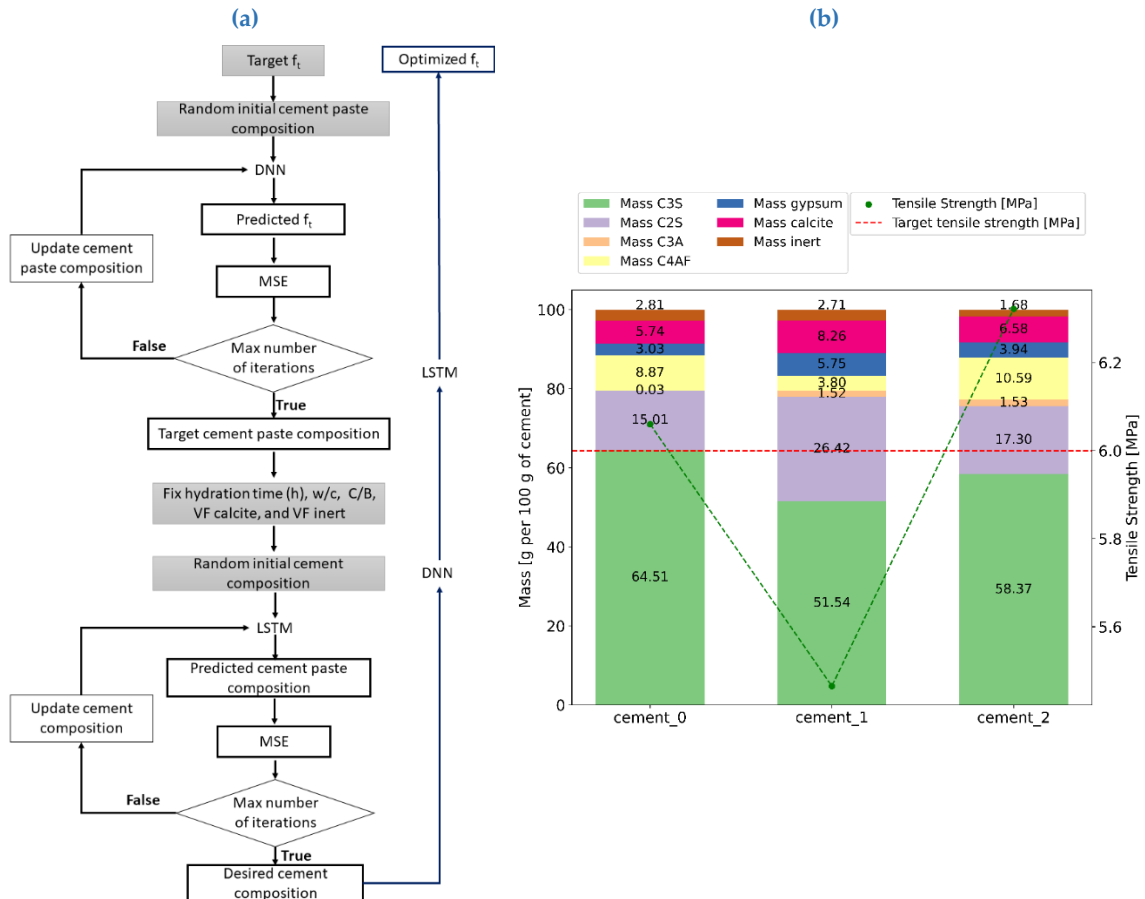


FIGURE 4. (a) Algorithme d'optimisation de la composition minéralogique du ciment pour une résistance à la traction de pâte cible, (b) Résultats de l'optimisation pour une f_t cible de 6 MPa. Les diagrammes en barres empilées montrent la répartition massique des composants du ciment. La f_t cible est représentée sur le graphique par une ligne rouge en pointillés, tandis que la ligne verte trace les résistances à la traction optimisées réellement atteintes.

IV. CONCLUSION

Cette étude a pour objectif le développement d'un modèle de conception de ciments avec une résistance à la traction cible. Pour cela, un algorithme d'optimisation contraint est employé. Concernant la fonction objective, celle-ci doit établir un lien entre la composition minéralogique du ciment, le rapport E/C de la pâte de ciment et la résistance à la traction de la pâte. Dans un premier temps, le développement de cette fonction objective est présenté. Le modèle final repose sur la

concaténation de deux modèles distincts : un LSTM pour prédire la composition de la pâte de ciment à partir de la composition du ciment et du rapport E/C, suivi d'un DNN pour prédire la résistance à la traction de la pâte de ciment en fonction de sa composition. Concernant le modèle LSTM, plusieurs pistes d'amélioration sont identifiées, notamment pour affiner la prédiction de la tendance de variation des composantes de la PCH. L'une des approches envisagées consiste à intégrer les fonctions analytiques de la cinétique d'hydratation du ciment dans la fonction de perte lors de l'entraînement du modèle. Quant au modèle DNN, sa performance en prédiction de la résistance à la traction de la PCH met en évidence l'importance de la composition chimique de la pâte en termes de fractions volumiques des phases. Ces informations se sont révélées suffisantes pour assurer une bonne précision et une bonne généralisation du modèle. Enfin, la dernière partie présente l'algorithme d'optimisation ainsi que les différentes contraintes associées. Un exemple concret pour une résistance à la traction de 6 MPa est également détaillé. Comme suggéré par l'un des relecteurs, le rapport E/C pourrait alternativement être considéré comme le paramètre à optimiser pour une composition de ciment donnée.

Pour la suite, une optimisation multi-objectifs est envisagée en intégrant l'énergie de fissuration comme seconde cible d'optimisation. L'objectif final de cette approche est d'étendre le modèle afin de prendre en compte les ciments substitués, en suivant la même méthodologie que celle appliquée au ciment Portland.

REFERENCES

- Barnes, P., Bensted, J., 2002. Structure and Performance of Cements, Second Edition. CRC Press.
- Ben Chaabene, W., Flah, M., Nehdi, M.L., 2020. Machine learning prediction of mechanical properties of concrete: Critical review. Construction and Building Materials 260, 119889. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2020.119889>
- Bullard, J.W., 2014. Virtual Cement and Concrete Testing Laboratory : version 9.5 user guide (No. NIST SP 1173). National Institute of Standards and Technology. <https://doi.org/10.6028/NIST.SP.1173>
- Cook, R., Han, T., Childers, A., Ryckman, C., Khayat, K., Ma, H., Huang, J., Kumar, A., 2021. Machine learning for high-fidelity prediction of cement hydration kinetics in blended systems. Materials & Design 208, 109920. <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2021.109920>
- Dureisseix, D., 1997. Une Approche Multi-échelles pour des Calculs de Structures sur Ordinateurs à Architecture Parallèle.
- Fichant, S., Borderie, C.L., Pijaudier-Cabot, G., 1999. Isotropic and anisotropic descriptions of damage in concrete structures.
- Hochreiter, S., Schmidhuber, J., 1997. Long Short-Term Memory. Neural Computation 9, 1735–1780. <https://doi.org/10.1162/neco.1997.9.8.1735>
- Hu, C., 2014. Microstructure and mechanical properties of fly ash blended cement pastes. Construction and Building Materials 73, 618–625. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2014.10.009>
- Li, X., Gu, X., Xia, X., Madenci, E., Chen, X., Zhang, Q., 2022. Effect of water-cement ratio and size on tensile damage in hardened cement paste: Insight from peridynamic simulations. Construction and Building Materials 356, 129256. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2022.129256>

- Li, Z., Yoon, J., Zhang, R., Rajabipour, F., Srubar III, W.V., Dabo, I., Radlińska, A., 2022. Machine learning in concrete science: applications, challenges, and best practices. *npj Comput Mater* 8, 1–17. <https://doi.org/10.1038/s41524-022-00810-x>
- Luković, M., Schlangen, E., Ye, G., 2015. Combined experimental and numerical study of fracture behaviour of cement paste at the microlevel. *Cement and Concrete Research* 73, 123–135. <https://doi.org/10.1016/j.cemconres.2015.03.008>
- Murr, J., Alam, S.Y., Grondin, F., 2024. Micromechanics and microstructure based machine learning approach: Unveiling the role of porosity and hydrated phases on the tensile behaviour of cement pastes. *Engineering Fracture Mechanics* 312, 110613. <https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2024.110613>
- Powell, M.J.D., 2007. A view of algorithms for optimization without derivatives.
- Rhardane, A., Grondin, F., Alam, S.Y., 2020. Development of a micro-mechanical model for the determination of damage properties of cement pastes. *Construction and Building Materials* 261. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2020.120514>
- Rößler, M., Odler, I., 1985. Investigations on the relationship between porosity, structure and strength of hydrated portland cement pastes I. Effect of porosity. *Cement and Concrete Research* 15, 320–330. [https://doi.org/10.1016/0008-8846\(85\)90044-4](https://doi.org/10.1016/0008-8846(85)90044-4)
- Shah, H.A., Nehdi, M.L., Khan, M.I., Akmal, U., Alabduljabbar, H., Mohamed, A., Sheraz, M., 2022. Predicting Compressive and Splitting Tensile Strengths of Silica Fume Concrete Using M5P Model Tree Algorithm. *Materials* 15, 5436. <https://doi.org/10.3390/ma15155436>
- Shrestha, A., Mahmood, A., 2019. Review of Deep Learning Algorithms and Architectures. *IEEE Access* 7, 53040–53065. <https://doi.org/10.1109/ACCESS.2019.2912200>
- Wang, J., Wang, Y., Chen, Y., 2022. Inverse Design of Materials by Machine Learning. *Materials* 15, 1811. <https://doi.org/10.3390/ma15051811>
- Zhang, J., Wang, J., Li, W., Yuan, Q., Gao, Y., 2024. A micromechanical investigation of cement paste through a combination of the X-ray computed tomography and the phase field method. *Journal of Building Engineering* 84, 108449. <https://doi.org/10.1016/j.jobbe.2024.108449>
- Zhang, M., He, Y., Ye, G., Lange, D.A., Breugel, K. van, 2012. Computational investigation on mass diffusivity in Portland cement paste based on X-ray computed microtomography (μ CT) image. *Construction and Building Materials* 27, 472–481. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2011.07.017>