

# ICME

## Metodología de modelización multi-escala proceso-microestructura-propiedades-desempeño para la agilización del diseño de materiales, procesos y componentes metálicos

Jornada: Tecnologías disruptivas y su aplicación al sector siderúrgico  
PLATEA

- Dra. Eva Anglada
- Sincrotrón ALBA – Cerdanyola del Vallés (Barcelona), 28 Sep. 2022

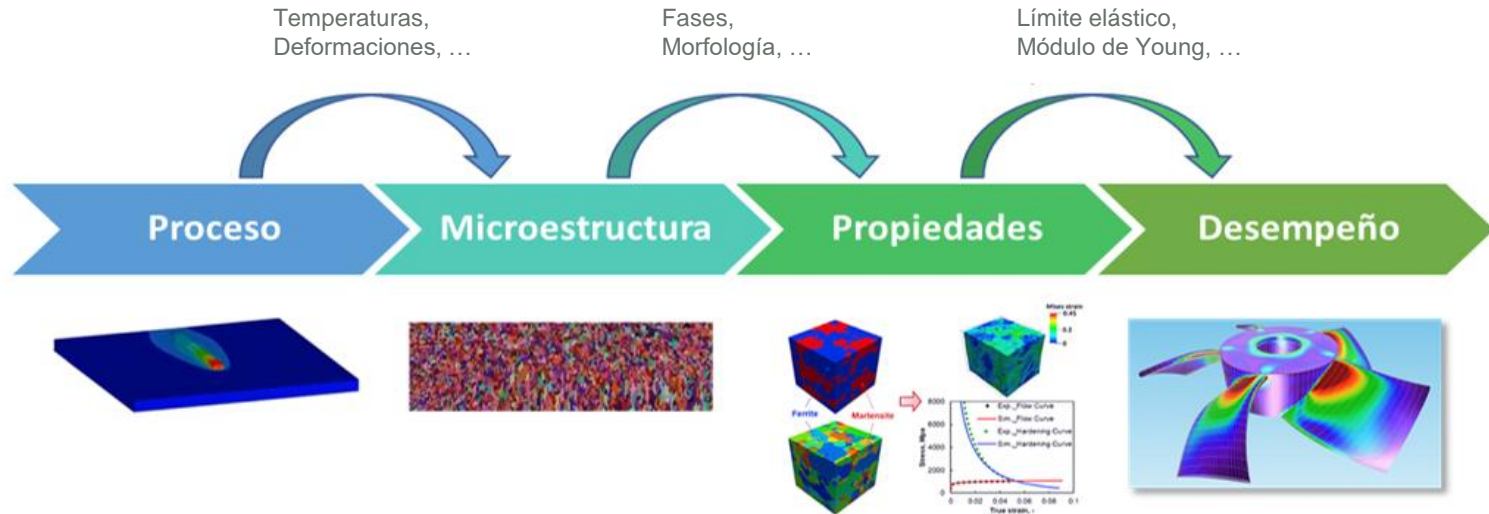
## ICME – Integrated Computational Materials Engineering

La Ingeniería Computacional Integrada de Materiales (ICME) se basa en la integración de distintas herramientas de simulación a través de estrategias de modelización multi-escala capaces de simular los procesos, la microestructura, las propiedades y el desempeño de los materiales.

Este tipo de estrategia permite diseñar, probar y optimizar los nuevos materiales de forma virtual antes de fabricarlos realmente. De este modo, es posible profundizar en el conocimiento de cómo la microestructura de los materiales evoluciona durante el proceso de fabricación, cómo es la relación entre la microestructura y las propiedades del material, y cómo optimizar dichos materiales para la aplicación deseada en cada caso.

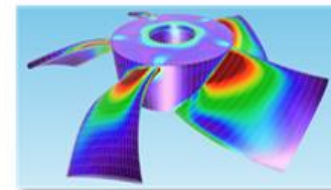
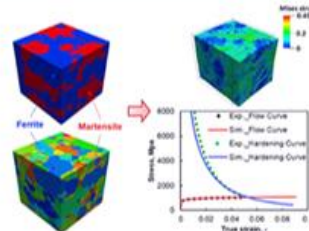
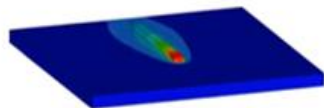
Los experimentos a nivel de laboratorio o planta piloto junto con las técnicas de caracterización son también una parte integral de este tipo de metodología, de cara a poder calibrar y validar los modelos a diferentes escalas.

## ICME – Integrated Computational Materials Engineering



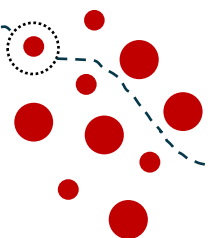
# TECNOLOGÍA

# ICME – Integrated Computational Materials Engineering



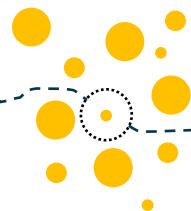
Modelos de simulación de procesos

P



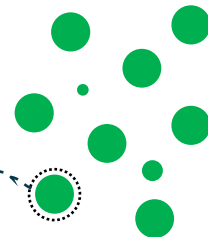
Modelos de predicción de microestructura

S



Modelos de predicción de propiedades

P

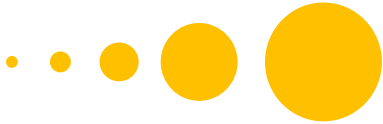


Modelos de simulación del desempeño

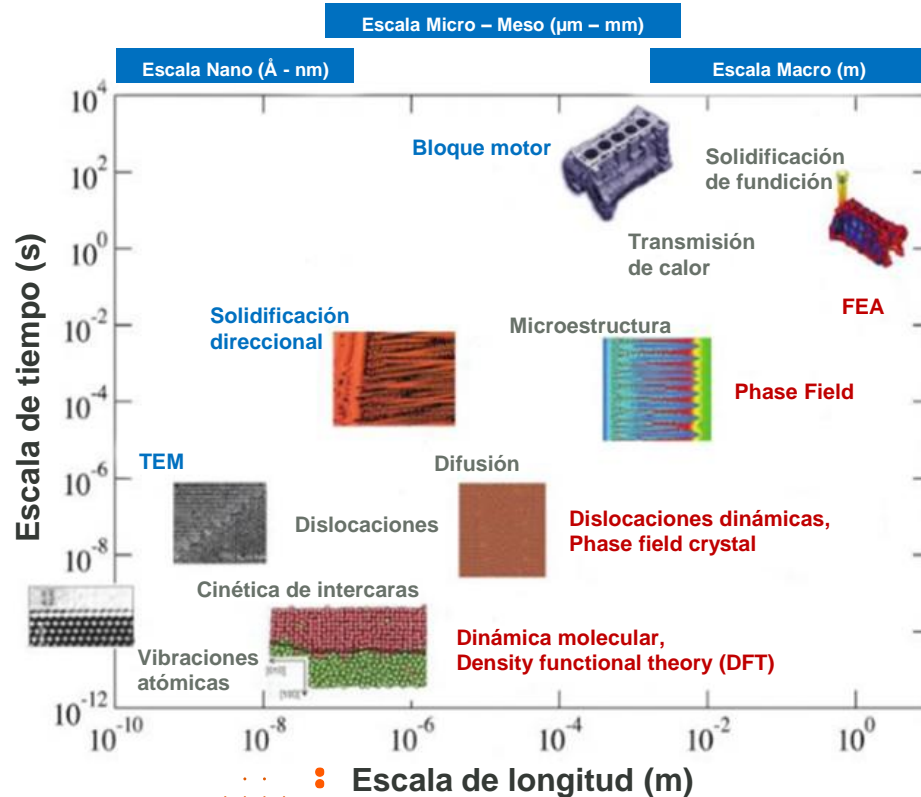
P

# TECNOLOGÍA

## Aproximación multi-escala



# ICME – Integrated Computational Materials Engineering



# APLICACIÓN AL SECTOR SIDERÚRGICO & ACERO

## Fragilización del acero a causa del hidrógeno



# APLICACIÓN

## Fragilización del acero a causa del hidrógeno

Desarrollo de distintos modelos a diferentes escalas que nos permitan profundizar en el conocimiento del fenómeno de la fragilización de los aceros a causa del hidrógeno.

- ❑ Definición de las características microestructurales más apropiadas para mejorar su resistencia a la fragilización por H, mediante el desarrollo y uso de modelos de difusión y atrapamiento de hidrógeno.
- ❑ Definición de la composición química y los parámetros de proceso adecuados para obtener las características microestructurales deseadas mediante modelos del proceso de fabricación y la evolución microestructural

# APLICACIÓN

## Fragilización del acero a causa del hidrógeno

### ❖ Modelización del proceso (P)

Conformado  
en caliente

Tratamientos  
térmicos

Modelos  
FEM

Modelos  
CFD

Escala macro

Modelos  
CALPHAD



# APLICACIÓN

## Fragilización del acero a causa del hidrógeno

### ❖ Modelización de la microestructura

Fases y precipitados

Morfología de grano

Modelos FEM

Modelos CALPHAD

### Escala micro

Modelos de Machine Learning

Modelos semi-empíricos

# APLICACIÓN

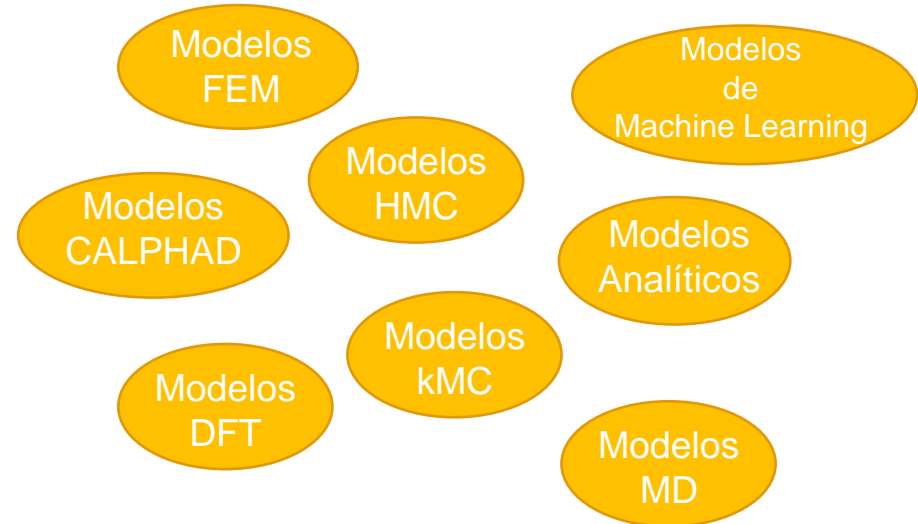
## Fragilización del acero a causa del hidrógeno

### ❖ Modelización de las propiedades

Difusión del hidrógeno

Propiedades  
termo-mecánicas

### Escala micro & escala atómica



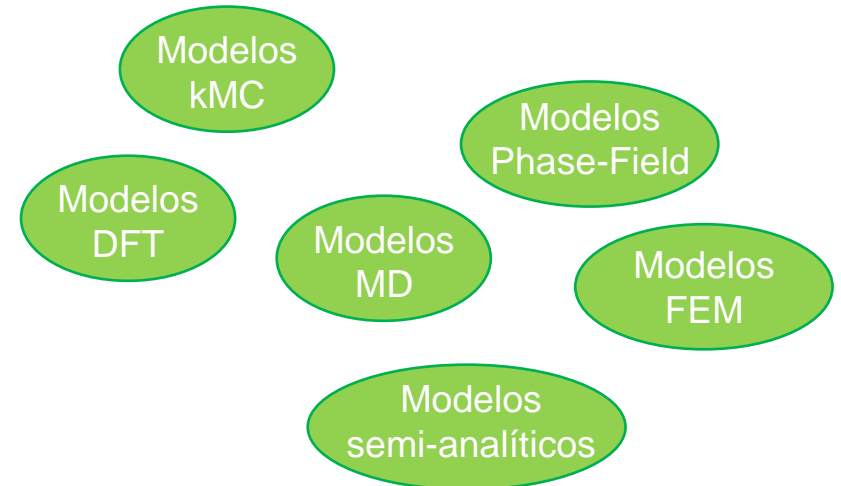
# APLICACIÓN

## Fragilización del acero a causa del hidrógeno

### ❖ Modelización del desempeño

Comportamiento  
mecánico en función  
de la presencia de  
hidrógeno

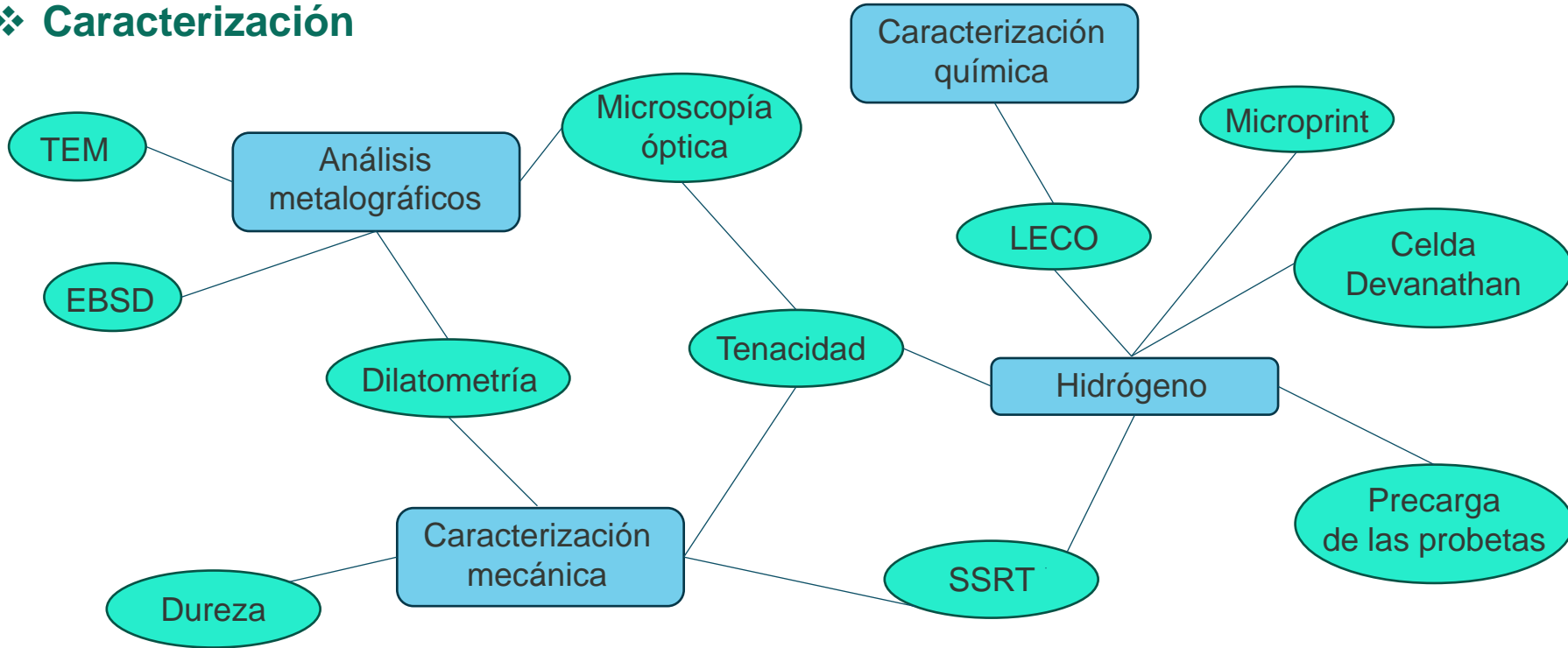
### Escala macro & micro & atómica



# APLICACIÓN

## Fragilización del acero a causa del hidrógeno

### ❖ Caracterización



# OTRAS APLICACIONES AL SECTOR SIDERÚRGICO & ACERO

## **Aceros relacionados con la Economía del hidrógeno**

Extensible a otros grados de acero relacionados con la economía del hidrógeno como por ejemplo aceros para el transporte, el almacenamiento o el uso del hidrógeno.

## **Aceros relacionados con otras aplicaciones de alta exigencia**

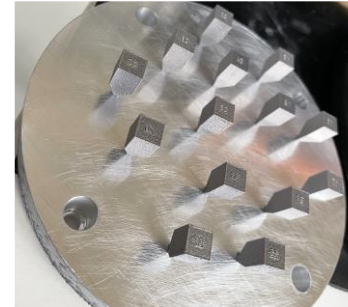
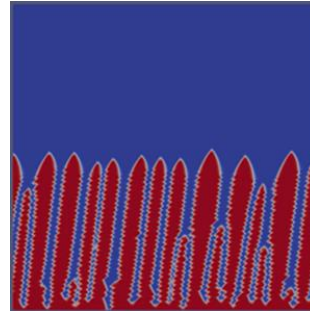
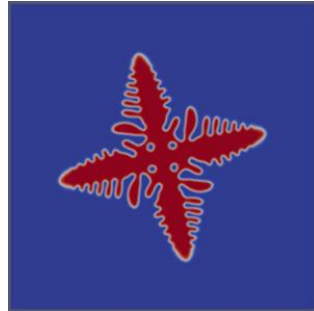
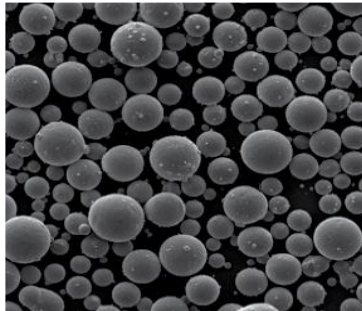
Extensible a otros grados de acero relacionados con aplicaciones de alta exigencia como por ejemplo aplicaciones a alta temperatura, aplicaciones offshore, aligeramiento, etc.

# OTRAS APLICACIONES AL SECTOR SIDERÚRGICO & ACERO

## Fabricación aditiva

Actualmente estamos trabajando en modelos para la fabricación aditiva de aleaciones de aluminio siguiendo la metodología ICME (modelos multi-escala del proceso, de predicción de microestructura y propiedades, etc.)

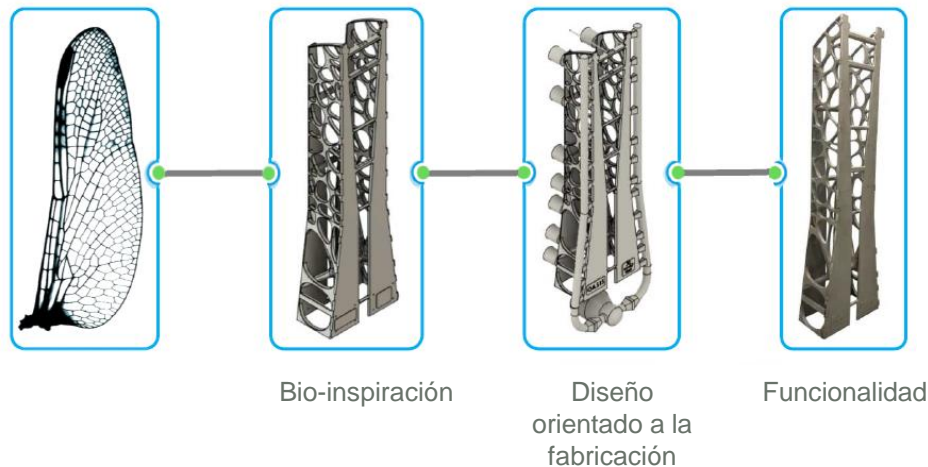
La aplicación de parte de estos modelos pueden extenderse en un futuro a la fabricación aditiva de acero.



# OTRAS APLICACIONES AL SECTOR SIDERÚRGICO & ACERO

## Ingeniería generativa

- ❑ Diseño más eficiente
  - Diseño paramétrico
  - Reusabilidad de algoritmos de diseño
- ❑ Diseño más automatizado
  - Procesos reutilizables en distintas geometrías
  - Modificación del CAD automatizada
- ❑ Nuevos horizontes de diseño
  - Bio-inspirado
  - Diseños orientados a la funcionalidad
  - Diseños orientados a la fabricación



# FUTUROS DESARROLLOS

## ❖ Quantum

Exploración de las posibilidades que brinda la computación cuántica para la resolución de este tipo de modelos predictivos.

## ❖ Optimización

Combinación de la modelización con técnicas de optimización procedentes de la IA

## ❖ Desarrollo de nuevos modelos

Modelos enfocados en otros tipos de aleaciones, otros tipos de microestructura, otros tipos de propiedades, etc.





**tecnalia**

MEMBER OF BASQUE RESEARCH  
& TECHNOLOGY ALLIANCE

---

MUCHAS GRACIAS  
POR SU ATENCIÓN !!!

Eva Anglada  
[eva.anglada@tecnalia.com](mailto:eva.anglada@tecnalia.com)

Borja Peña  
[borja.pena@tecnalia.com](mailto:borja.pena@tecnalia.com)



[tecnalia.com](http://tecnalia.com)

