

Contenido archivado el 2024-06-18

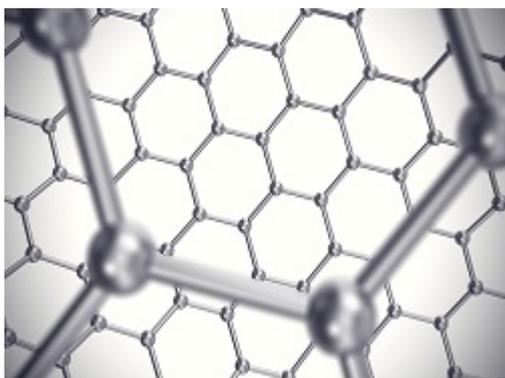


Simulation framework for multi-scale phenomena in micro- and nanosystems

Resultados resumidos

Modelado de sistemas nanohabilitados mediante simulaciones multiescala complejas

El proyecto SIMPHONY, financiado con fondos europeos, sirvió para idear y desarrollar varias herramientas especializadas de diseño de modelado multiescala capaces de reducir el tiempo necesario para descubrir dispositivos nano y microfluídicos innovadores destinados a aplicaciones biomédicas, químicas y energéticas.



© ost9, Shutterstock

El modelado preciso de sistemas nanohabilitados exige el uso de complejas simulaciones multiescala y estrategias multimodelo capaces de asociar los fenómenos pertinentes a las escalas nano, micro, meso y macro. Aunque las herramientas y los modelos de simulación disponibles en la actualidad pueden describir con precisión un material en cada una de estas escalas por separado, la investigación carece de un marco de simulación multiescala

integrado que proporcione vinculación y acoplamiento sin fisuras de los diversos modelos que operan a distintas escalas.

El proyecto SIMPHONY, financiado con fondos europeos, contribuyó a resolver este desequilibrio mediante el desarrollo de un sencillo entorno integrado de modelado

multiescala para materiales nanohabilitados y sistemas mediante diseño. «Uno de los principales objetivos del proyecto era desarrollar una plataforma ampliable y abierta para integrar diversos paquetes existentes de simulación y pre y posprocesamiento, tanto de código abierto como comerciales», explica el coordinador del proyecto, el Dr. Adham Hashibon.

Según Hashibon, esta integración se consiguió reuniendo los paquetes de simulación dentro de una interfaz eficiente e interoperable diseñada e implementada en un lenguaje de alto nivel (Python) con una interfaz de programación de aplicaciones (API) para el mundo exterior. «Puesto que este sistema permite vincular y acoplar códigos, el marco del proyecto SIMPHONY brinda una plataforma para el desarrollo de una nueva ciencia multiescala», afirma. Las herramientas de modelado integrado en el proyecto abarcan todos los modelos en todas las escalas, incluidas la electrónica, atómica, mesoscópica y de continuidad.

Varios resultados importantes

El proyecto SIMPHONY ha producido varios resultados importantes. Por ejemplo, mediante la realización de una taxonomía de comunicaciones inter e intraprocesos, y de requisitos de los datos que exige cada uno de los conjuntos de herramientas y modelos, los investigadores desarrollaron un conjunto inicial de requisitos de diseño de software de alto nivel para los envoltorios (wrappers) de interfaz y las estructuras comunes unificadas de datos (Common Unified Data Structures, CUDS). «CUDS ofrece una capa de interoperabilidad entre todos los modelos y el software de simulación», explica Hashibon.

«Un resultado importante de este trabajo fue el desarrollo de una ontología básica de aplicaciones y modelos computacionales».

Otro resultado relevante fue el desarrollo de los atributos comunes básicos unificados universales (Common Universal-Unified Basic Attributes, CUBA) como una nomenclatura y metadato comunes para el modelado y las aplicaciones multiescala. «Mientras que los CUBA definen esencialmente un metadato para el modelado multiescala, las CUDS definen el esquema pertinente de los metadatos», asegura Hashibon. «Juntos, facilitan el tránsito fluido de información y la representación de modelos y datos en todos los subdominios, permitiendo así que los modelos se acoplen y se vinculen a la perfección».

La eficiencia del marco de modelado

Partiendo de los requisitos generales y de las especificaciones de las CUDS, los investigadores del proyecto desarrollaron dos tipos de envoltorios de interfaz para modelar motores. Esto se tradujo en un conjunto de aplicaciones de simulación que cubren todos los modelos y escalas, incluidos los tres principales dominios

computacionales para sistemas entrelazados, de partículas y en malla.

«El proyecto SIMPHONY consiguió demostrar la eficiencia del marco de modelado en campos pertinentes de la nanotecnología mediante el diseño y desarrollo de varias herramientas especializadas de diseño de modelado multiescala capaces de reducir el tiempo el tiempo necesario para descubrir innovadores dispositivos nano y microfluídicos destinados a aplicaciones biomédicas, químicas y energéticas», concluye Hashibon. «En concreto, aborda los sistemas de nanoimpresión, NEMS (sistemas nanoelectromecánicos), proceso de conformado de espuma y aplicaciones microfluídicas».

Palabras clave

[SIMPHONY](#)

[nanotecnología](#)

[materiales nanohabilitados](#)

[NEMS CUDS](#)

Descubra otros artículos del mismo campo de aplicación



[Un aditivo para lubricantes que reduce el consumo de combustible](#)

27 Marzo 2019 



[Robótica, automatización y 5G bajo tierra](#)

18 Septiembre 2020





El agua ultralimpia causa sensación en la industria de los semiconductores

16 Julio 2021



Tecnologías basadas en modelos para modernizar la fabricación europea

15 Septiembre 2020



Información del proyecto

SIMPHONY

Identificador del acuerdo de subvención:
604005

Proyecto cerrado

Fecha de inicio
1 Enero 2014

Fecha de finalización
31 Mayo 2017

Financiado con arreglo a

Specific Programme "Cooperation": Nanosciences, Nanotechnologies, Materials and new Production Technologies

Coste total

€ 4 218 610,13

Aportación de la UE

€ 3 209 000,00

Coordinado por

**FRAUNHOFER GESELLSCHAFT
ZUR FORDERUNG DER
ANGEWANDTEN FORSCHUNG
EV**



Germany

Este proyecto figura en...



Última actualización: 6 Noviembre 2017

Permalink: <https://cordis.europa.eu/article/id/205953-modelling-nanoenabled-systems-via-intricate-multiscale-simulations/es>

European Union, 2025