

## **Predictive models and simulations in nano- and biomolecular mechanics: a multiscale approach**

Les simulacions per ordinador ens permeten realitzar tests virtuals per a analitzar i dissenyar tot tipus de sistemes en l'enginyeria o materials nano-estructurats. Aquests anàlisis poden ser cars o fins i tot impossibles de dur a terme experimentalment. Malauradament, fins i tot en plataformes de supercomputació, és impossible simular directament amb models precisos la complexitat de molts sistemes importants degut a la profunda interacció entre els fenòmens microscòpics i els comportaments macroscòpics observables. En aquest projecte, es desenvoluparan models i tècniques computacionals que permetin predir el comportament de materials nano-estructurats, biomembranes i biomacromolècules. Sent un projecte que integra diverses disciplines científiques, l'objectiu és incorporar l'efecte global dels fenòmens d'escala atòmica en les escales més grolleres, sense tenir en compte detalls irrellevants.