

Modellistica Matematica per la Simulazione, la Progettazione e l'Innovazione

Alfio Quarteroni (*)

MOX, Politecnico di Milano

e CMCS (Chaire de Modelisation et Calcul Scientifique), EPFL, Lausanne.

() Testo della lezione tenuta il 19 Febbraio 2004 in occasione della seduta inaugurale del 201° a.a. dell'Istituto Lombardo di Scienze e Lettere*

Modellistica Matematica e Calcolo Scientifico

La modellistica matematica, ovvero il processo che mira a descrivere in termini matematici alcuni aspetti del mondo reale, rappresenta oggi una colonna portante nelle scienze e nell'ingegneria, a completamento dell'analisi teorica e di quella sperimentale.

Come avviene anche in altri settori di ricerca, la modellistica di per sé non è un'attività esclusivamente scientifica, anche se, naturalmente, vi sono concetti universali che essa deve riprodurre, quali ad esempio la conservazione di massa e energia di un fluido, del momento d'inerzia di una struttura, etc. Vi è in effetti anche una componente "artistica" dietro una simulazione di successo, che deriva dal sapere quali domande ha senso porre, quale livello di dettaglio ha senso mettere nelle diverse componenti di un modello, quali semplificazioni apportare in modo da favorire una sua integrazione con modelli diversi.

In molti settori industriali la modellistica matematica è ormai di uso consolidato, in altri il potenziale contributo che la matematica può apportare alla competizione sta venendo alla luce in modo sempre più apparente.

Una ragione di tale successo è da ascrivere allo sviluppo impetuoso del calcolo scientifico, ovvero della disciplina che consente di tradurre un modello matematico (risolubile in forma esplicita solo in rarissime situazioni) in algoritmi che possano essere trattati su calcolatori di potenza straordinariamente elevata.

Il Calcolo Scientifico per l'Innovazione Tecnologica

Le tecnologie industriali diventano sempre più complesse, mentre i cicli di innovazione tendono ad accorciarsi.

I modelli matematici, se accuratamente sviluppati, possono offrire nuove possibilità per dominare la complessità ed esplorare nuove soluzioni.

Essi si ottengono spesso via astrazione. In effetti, l'innovazione richiede flessibilità, la flessibilità richiede astrazione, il linguaggio dell'astrazione è la matematica.

La matematica, tuttavia, non è solo linguaggio, essa aggiunge valore: approfondimento della conoscenza, progettazione di algoritmi efficienti, ricerca di soluzioni ottimali.

Tecnologie chiave e matematica possono dunque dar vita ad un processo di interazione virtuoso.

Sin dall'inizio degli anni '60, l'analisi numerica ha avuto un ruolo guida nella simulazione di problemi derivanti dall'ingegneria fondamentale. Ad esempio, in fluidodinamica, la cosiddetta galleria del vento numerica (o virtuale) è complementare (e talvolta in larga misura addirittura sostitutiva) alle reali gallerie del vento.

Sulla scia di questo successo, nuove discipline si sono aperte all'uso della matematica numerica, quali ad esempio la tecnologia dell'informazione e della comunicazione, la tecnologia medica, l'ingegneria finanziaria.

La straordinaria complessità di queste applicazioni ha spronato i matematici a riconsiderare il loro approccio: non più la scienza e l'ingegneria "vanno verso" l'analisi numerica, ma piuttosto gli analisti numerici vanno verso la scienza e l'ingegneria, ovvero pongono al centro della scena il problema in quanto tale e cercano di sviluppare modelli e algoritmi efficienti ed accurati per trovarne soluzioni.

Questo cambio di paradigma ha determinato l'avvento del calcolo scientifico.

L'obiettivo di lungo termine della ricerca in analisi numerica e nel calcolo scientifico è la costruzione di algoritmi migliori per una simulazione efficace ed accurata (nei limiti della tolleranza prescritta) e per l'ottimizzazione di problemi di interesse reale che si incontrano nelle scienze, nell'ingegneria e nell'economia.

In molte aree applicative, non solo la velocità dei computer, ma anche l'efficienza degli algoritmi costituisce il fattore discriminante fra complessità abordabili e non.

La cosiddetta fluidodinamica computazionale (CFD) è la disciplina che fa uso del calcolo scientifico per risolvere problemi governati da fluidi. Oggi la CFD viene usata per comprendere meglio la fisica dei fluidi ma fornisce anche un contributo irrinunciabile alla progettazione in numerosi ambiti industriali. L'obiettivo è quello di ridurre il ciclo temporale necessario per la concezione di un nuovo prodotto (ad esempio un aereo, un'automobile o, più semplicemente, un nuovo attrezzo o indumento per sport da competizione). Ciò al fine di assicurare un vantaggio potenziale alle aziende, ridurre i costi ricorrendo sempre di meno alle onerosissime prove nella galleria del vento, aumentare l'accuratezza e pertanto ridurre i rischi.

Nel settore aerospaziale, si usano modelli numerici basati sulle equazioni del potenziale, di Eulero o di Navier-Stokes, per l'analisi aerodinamica dei profili alari o dell'intera fusoliera (si veda ad es. la Fig. 1), al fine di ottimizzare le prestazioni (riducendo la resistenza al moto) ma anche di incrementare la sicurezza, ad esempio riducendo fenomeni di *icing* o aumentando la resistenza strutturale. La simulazione si accompagna spesso al controllo e all'ottimizzazione, con l'obiettivo di progettare dispositivi o aerei che soddisfino criteri prestabiliti. Ad esempio, si progettano aerei per l'aviazione civile con ali che garantiscano la minor resistenza possibile, che abbiano un impatto ambientale minimo grazie alla riduzione di emissioni e rumore, mentre per aerei militari la velocità e la manovrabilità sono i requisiti da massimizzare.

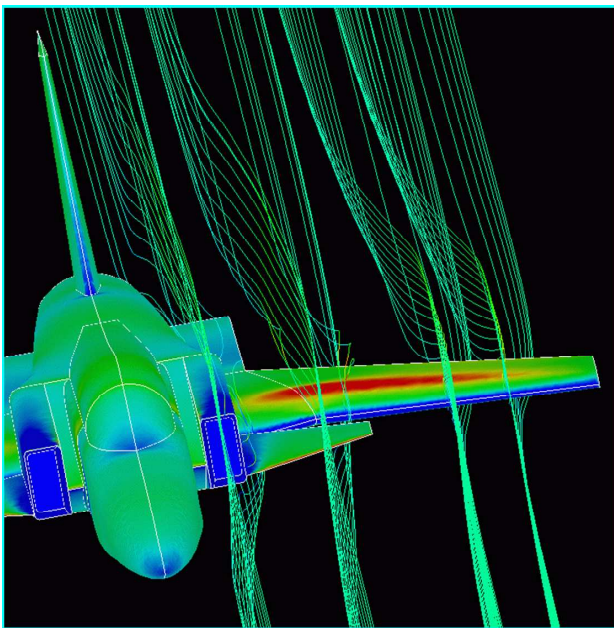


Fig. 1: Simulazione numerica del Numero di Mach e delle linee di flusso per l'aereo Grumman X29

L'americana Boeing sta studiando con la teoria del controllo come modificare le ali del Jumbo747, avendo stimato che una riduzione della resistenza (il cosiddetto coefficiente di *drag*) del 3% rispetto all'attuale appare possibile senza compromettere la portanza, ed avrebbe un potenziale di risparmio di carburante valutabile in diverse migliaia di dollari per ogni singolo volo transoceanico. La francese Dassault sta progettando un piccolo aereo supersonico per l'aviazione commerciale capace di volare a Mach 1.8, quasi come il celebrato Concorde ma il cui ridotto boom sonico ne renderebbe possibile l'uso anche sul teatro continentale (superando una limitazione che è stata la causa più rilevante nel determinare la fine prematura

dell'operatività del Concorde).

La risoluzione di questi problemi richiede algoritmi di ottimizzazione multi-obiettivo (di tipo deterministico, stocastico o genetico) per il problema di Eulero in presenza di onde d'urto, di cui si conosce ancora troppo poco dal punto di vista dell'analisi teorica. Il controllo dell'impatto acustico al suolo richiederebbe inoltre la risoluzione numerica di problemi di controllabilità esatta tridimensionali con funzionali non differenziabili per i quali l'uso di tecniche di minimizzazione con matrici jacobiane ottenute con il calcolo differenziale formale sembrano non essere adeguate.

Sempre nell'ambito aeronautico, modelli di propagazione elettromagnetica servono per simulare campi elettromagnetici esterni al fine di evitare che essi interferiscano in modo dannoso con quelli generati dai numerosissimi circuiti elettronici che fanno parte integrante degli impianti e della strumentazione di bordo. Si impiegano modelli per simulare gli sforzi e le deformazioni di componenti sensibili dell'aereo (per la simulazione dell'analisi dell'affaticamento dei materiali), con l'obiettivo di migliorare la stabilità strutturale e quella dinamica, attraverso la simulazione numerica

dell'interazione fra fluido e struttura.

Analisi simili sono effettuate nell'industria automobilistica, dove la simulazione numerica entra ormai virtualmente in tutti gli aspetti della progettazione e della produzione dei veicoli. Si usano modelli per la simulazione della combustione interna ai motori con l'obiettivo di consumare meno carburante, migliorare la qualità delle emissioni, ridurre il rumore (si veda ad es. la Fig. 2). Inoltre, il miglioramento delle prestazioni, la sicurezza, il comfort richiedono la risoluzione di equazioni della dinamica dei fluidi esterni ed interni, dell'aero-elasticità, della dinamica delle vibrazioni aero-acustiche, dello scambio termico, della cinetica chimica per la combustione, delle onde d'urto (si pensi alla fase di apertura degli air-bags), della meccanica delle strutture in regime di grandi sforzi e grandi deformazioni (per la simulazione delle conseguenze dovute ad impatti).



Fig 2: Simulazione del flusso turbolento interno ad un motore di automobile (Courtesy: STAR-CD, CFD Technology, CD Adapco Group)

L'industria chimica fa uso di modelli matematici per la simulazione di processi di polimerizzazione, stampaggio o estrusione, per materiali a reologia complessa, dove l'analisi *macro* (tipica della meccanica dei continui) deve coniugarsi a quella *micro*, più adatta a descrivere le delicate e complesse leggi costitutive di materiali polimerici o nanostrutturati. Ciò richiede lo sviluppo di tecniche di indagine e di algoritmi multiscala, capaci cioè di descrivere e catturare lo scambio di processi meccanici, termici e chimici, fra scale spaziali

notevolmente eterogenee.

Nell'industria elettronica la simulazione delle equazioni di deriva-diffusione, idrodinamiche, di Boltzmann o di Schroedinger, è uno strumento consolidato da decenni per progettare circuiti integrati sempre più piccoli e veloci, con funzionalità crescente e con consumi sempre più ridotti (fondamentali ad esempio nelle molteplici applicazioni della telefonia mobile) (si veda la Fig. 3).

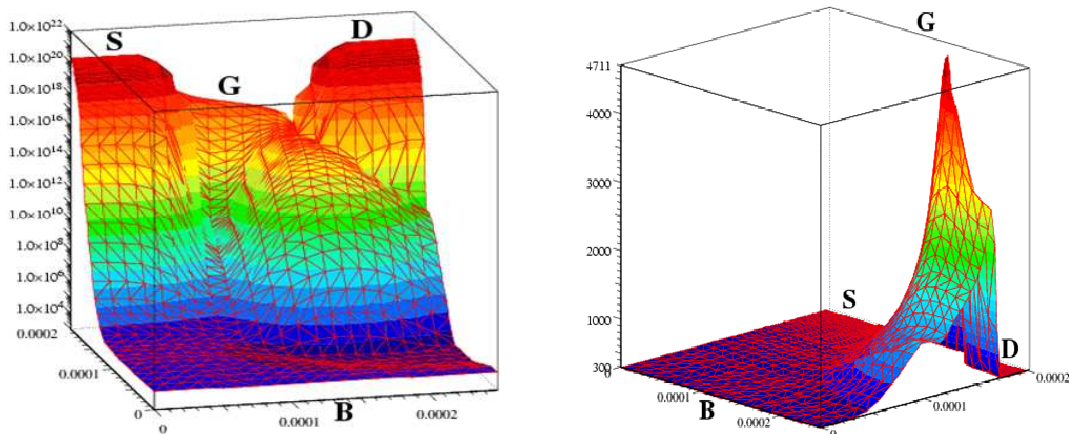


Fig 3: Simulazione della concentrazione di elettroni (a sinistra) e della temperatura (a destra) in un dispositivo semiconduttore di tipo MOS

Algoritmi efficienti servono inoltre per il *coding* e il *decoding* di messaggi fra multi-utenti.

Modelli che simulino realtà molto complesse dovrebbero saper tener conto dell'incertezza che deriva da insufficiente disponibilità dei dati che alimentano il modello stesso. L'analisi del rischio, che deriva dall'incertezza e dall'esposizione alla "sconfitta" (sia essa riduzione del profitto, detrimento all'ambiente, compromissione della salute, o altro) è un'ulteriore capacità che un buon modello dovrebbe possedere.

Come illustrato nel paradigma di figura 4, l'obiettivo ultimo è quello di realizzare modelli versatili e affidabili, accurati entro soglie che sono dettate dalla specifica classe di problemi da trattare, "verificati" su una grande e significativa varietà di casi test, analogici o sperimentali, per i quali si possa disporre di soluzioni di riferimento. Modelli che godano di queste proprietà saranno usati per

possibile se si dispone di modelli matematici integrati, può ad esempio spiegare il comportamento di una nuova medicina su una membrana che funziona da recettore. Nel fornire una comprensione quantitativa del comportamento di un intero organo in termini di funzioni sub-cellulari, i modelli potrebbero stabilire un legame fra struttura molecolare e comportamenti clinicamente osservabili, aiutando in questo modo nell'interpretazione di immagini ottenute da risonanza magnetica, ultrasuoni o mappe di potenziali elettrici.

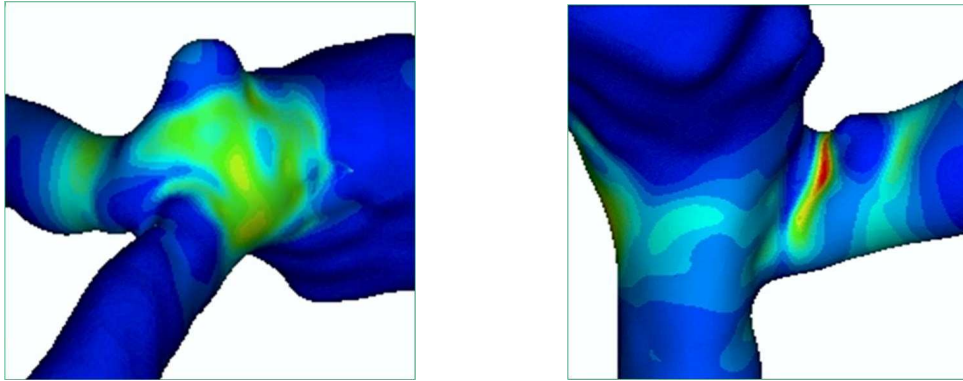


Fig. 5: Simulazione dello shear stress sulla superficie dell'arteria polmonare per malattie cardiache congenite

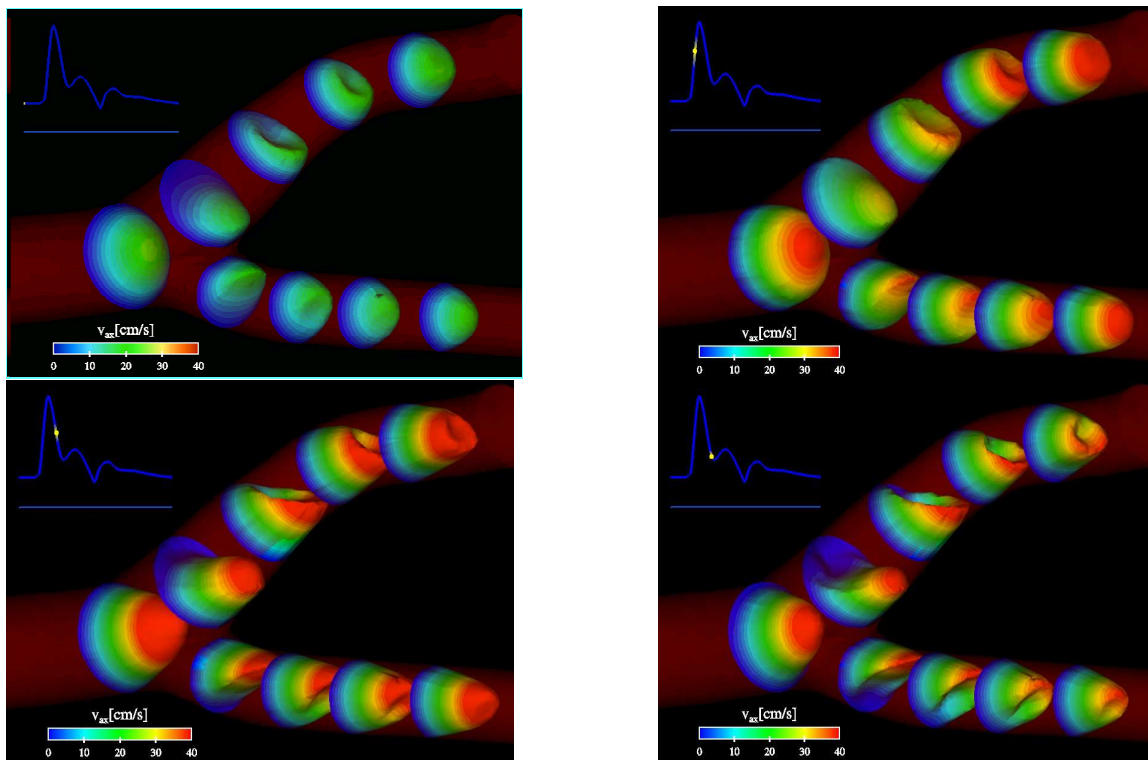


Fig. 6: Simulazione del campo di velocità a valle della biforcazione carotidea in quattro diversi istanti della fase sistolica-diastolica

La strada verso la chirurgia virtuale pone numerose sfide alla matematica. Scorrendo, il sangue interagisce meccanicamente con le pareti dei vasi, dando origine a complessi problemi di interazione fluido-strutturale. In effetti, il fronte dell'onda pressoria trasferisce energia meccanica alle pareti che si dilatano; tale energia viene restituita al flusso sanguigno nella fase di compressione dei vasi stessi. La simulazione matematica dell'interazione fra fluido e parete richiede algoritmi che descrivano sia il trasferimento di energia a livello macroscopico tra il fluido (modellato tipicamente dalle equazioni di Navier-Stokes) e la struttura, sia l'influenza a livello

microscopico dello shear stress sulle pareti sull'orientamento cellulare, con possibili danni alle cellule dell'endotelio. Nel contempo, le equazioni del flusso devono essere abbinate a modelli appropriati per descrivere il trasporto, la diffusione e l'assorbimento delle componenti chimiche in gioco (ad esempio ossigeno, lipidi, farmaci) nei diversi strati che compongono la parete delle arterie (intima, media e avventizia). Simulazioni numeriche di questo tipo possono aiutare a chiarire modificazioni biochimiche prodotte da alterazioni nel campo di flusso, dovute ad esempio alla presenza di una stenosi.

Simulare il flusso in un bypass coronarico, in particolare la ricircolazione che si determina a valle del re-innesto nella coronaria (si veda la Fig. 7), può contribuire alla comprensione degli effetti della morfologia delle arterie sul flusso e quindi all'evoluzione post-chirurgica. In Fig. 8 si mostra come la teoria del controllo ottimale di forma può aiutare a "progettare" un by-pass che minimizzi la vorticità prodotta a valle del re-innesto nella coronaria. Analogamente, lo studio degli effetti delle protesi vascolari e degli impianti di valvole artificiali sull'emodinamica locale e globale può avanzare grazie a simulazioni sufficientemente accurate del campo di flusso del sangue.

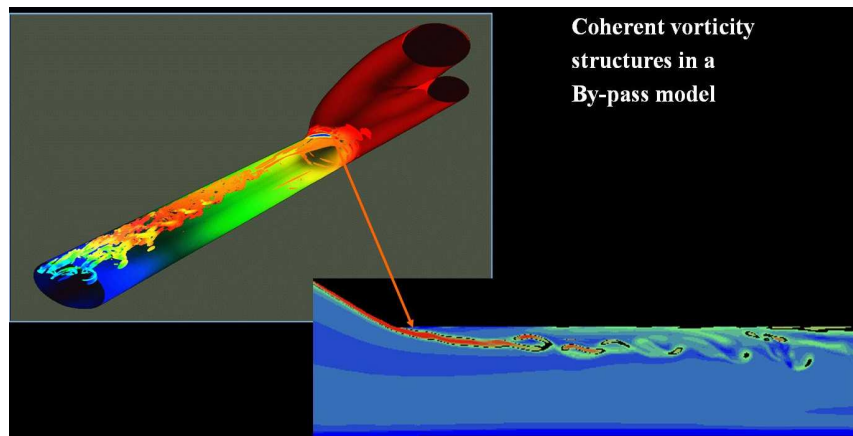


Fig. 7: Simulazione numerica della vorticità creata a valle di un by-pass coronarico

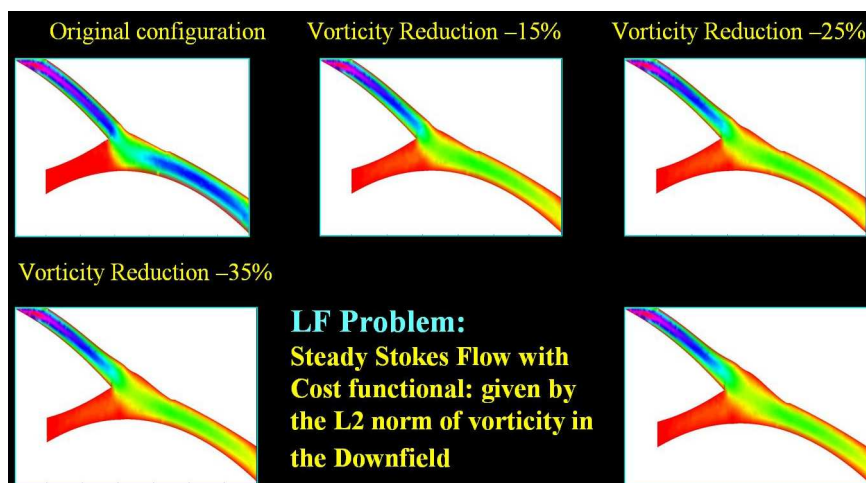


Fig. 8: Processo di ottimizzazione della forma di un by-pass coronarico

Matematica da Competizione

La modellistica matematica sta gradualmente ma inesorabilmente affacciandosi in svariatisimi contesti per proporsi come strumento ausiliare (allorquando non esclusivo) di indagine sia qualitativa sia quantitativa.

Sembra superfluo ricordare il ruolo ormai consolidato assunto dai modelli matematici che governano la fisica dell'atmosfera nel campo delle previsioni meteorologiche su scala planetaria,

regionale o locale. In tale ambito non solo servono algoritmi accurati ed estremamente rapidi per rendere possibile la simulazione in poche ore dell'evoluzione meteorologica per un intervallo temporale di diversi giorni, ma si sono dovute sviluppare tecniche di controllo originali che permettono la cosiddetta "assimilazione di dati" (quelli disponibili da satelliti e sonde di rilevamento). Si usano modelli per l'analisi di rischio sismico (si veda un esempio in Fig. 9), la valutazione d'impatto di inondazioni o esondazioni, la simulazione di processi di inquinamento atmosferico o idrico (un esempio è riportato in Fig. 10).

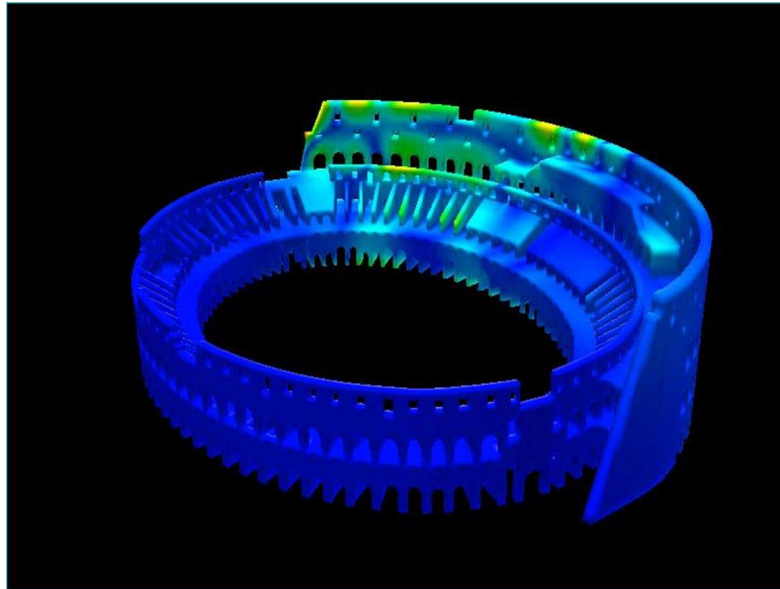


Fig. 9: Propagazione di un impulso elastico nel Colosseo

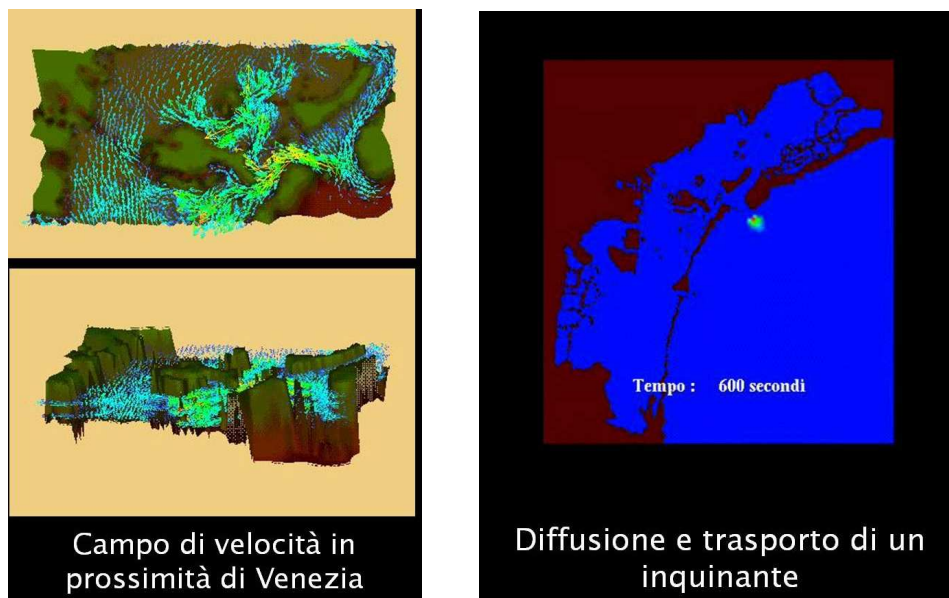


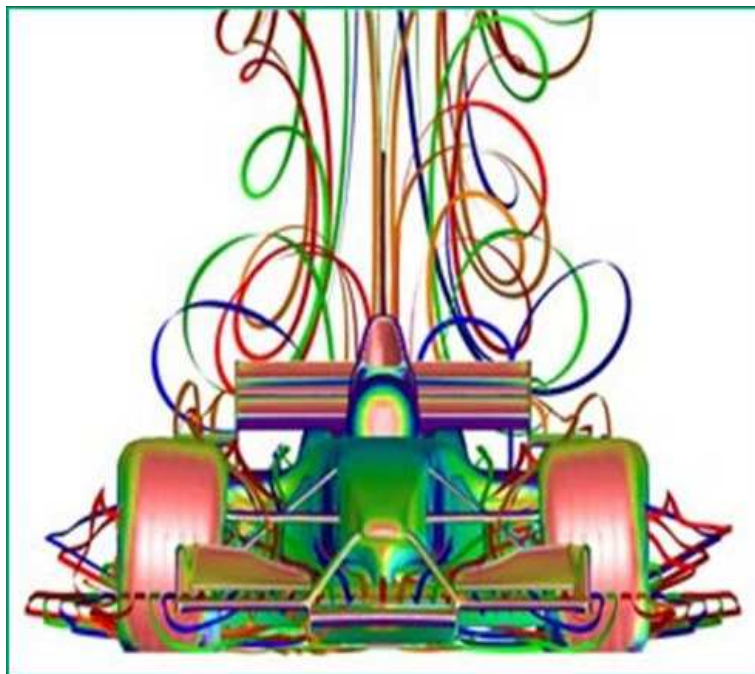
Fig 10: Propagazione dell'onda di marea e di un inquinante nella Laguna di Venezia

Si adottano modelli deterministici e stocastici nell'analisi di rischio di prodotti finanziari, il che ha condotto nell'ultimo decennio alla formazione di una disciplina nota con il nome di ingegneria finanziaria.

Dopo l'innovazione tecnologica, la medicina, l'ambiente e l'economia, i modelli stanno invadendo nuovi spazi, come per un' ideale migrazione fra settori a forte componente tecnico-scientifica ad altri in cui l'elemento umano assume il ruolo preponderante. La nuova frontiera non potrà non riguardare l'architettura (al fine di comprendere una città o un'area metropolitana serve rappresentarla onde rivelarne le geometrie dinamiche e modellare gli effetti nel tempo di una

modifica o di un intervento; gli architetti chiamano questa operazione: estetizzare le complessità), la sociologia, il tempo libero e lo sport.

Nello sport da competizione, la CFD assume da qualche anno un ruolo determinante nella fase di progettazione ed analisi delle prestazioni delle automobili di Formula 1 (si veda un esempio in Fig. 11).



**Fig. 11: Simulazione del flusso esterno ad un'automobile da competizione
(Courtesy: Fluent Inc.© Arrows F1 Team)**

Tuttavia, quello automobilistico non è il solo settore in cui la modellistica matematico-numerica ha fatto il suo ingresso. A questo proposito, un'esperienza piuttosto singolare è quella che ci ha visti impegnati nella campagna di Coppa America di Vela conclusasi con la vittoria dell'imbarcazione svizzera "Alinghi" nel marzo 2003. Dal settembre 2001 abbiamo iniziato a cooperare in stretto contatto con il design team di Alinghi. Il nostro scopo era di simulare ogni possibile dettaglio del flusso intorno all'intera barca: quello aerodinamico intorno alle vele e all'albero, quello idrodinamico intorno allo scafo e agli elementi in acqua (chiglia, bulbo, timone e alette), le scie turbolente che si generano in acqua e in aria, le interazioni con la deformazione delle vele, la simulazione della superficie d'onda (la "superficie libera", si veda la Fig. 12)).

Per ogni nuova configurazione proposta dai progettisti (alla fine sarebbero state più di cento diverse fra loro), è stato necessario costruire il modello geometrico (servono circa trecento superfici, di tipo splines, per ricoprire il solo scafo), generare la griglia di calcolo sulla superficie di tutti gli elementi della barca (di qualità sufficiente per permettere di catturare la transizione fra le zone di flusso laminare e quelle di flusso turbolento) e da lì quella volumetrica nel dominio esterno, infine risolvere le equazioni accoppiate aria-acqua-superficie libera di Navier-Stokes, completate di equazioni addizionali costituenti i modelli per il calcolo dell'energia turbolenta e del suo tasso di dissipazione.

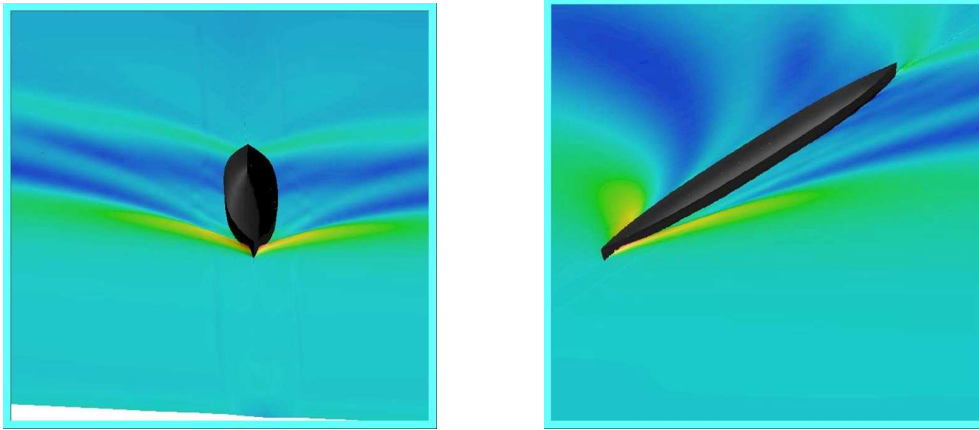


Fig. 12: Superficie libera intorno ad uno scafo

Il calcolo tipico (basato su schemi ai volumi finiti) ha richiesto la risoluzione di problemi non lineari con 20-30 milioni di incognite. Facendo massiccio ricorso ad algoritmi paralleli, sono richieste dalle 8 alle 10 ore di tempo dedicato su piattaforme parallele a 64 processori. Un esempio di simulazione è riportato in Fig. 13.

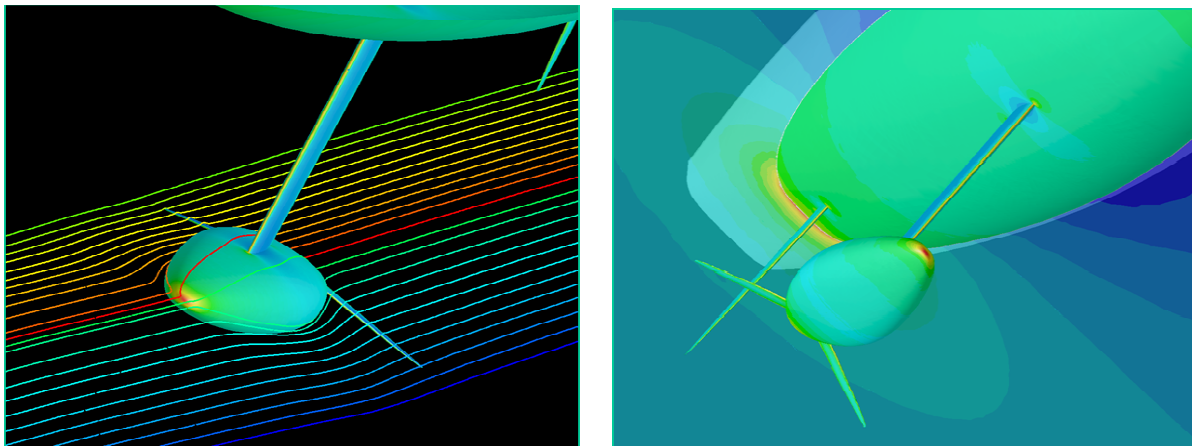


Fig. 13: Linee di flusso e campodi pressione e intorno alle appendici di uno scafo di Coppa America

Questo ha consentito al *design team* di scartare tante soluzioni che parevano più innovative (come la “hula” o il bulbo affusolato, entrambi adottati dai neozelandesi di Black-Magic) e di adottarne altre che garantissero migliori prestazioni.

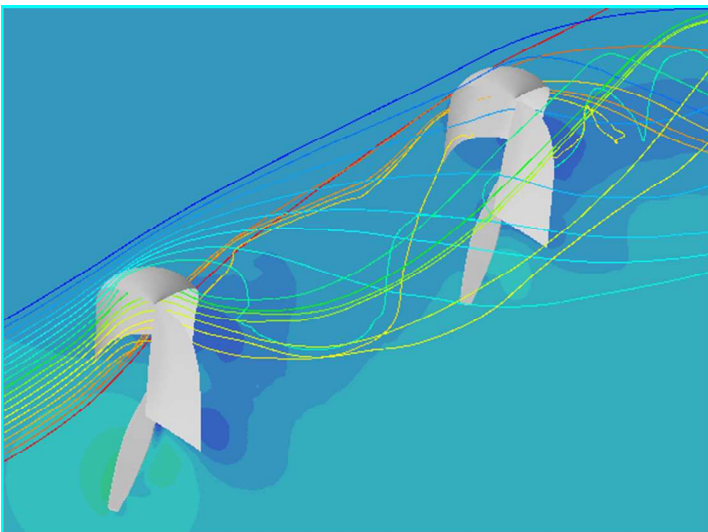


Fig.14: Simulazione del campo aerodinamico nel lato di poppa

Inoltre, simulando gli effetti dell'interazione aerodinamica fra due barche (un esempio è riportato in Fig. 13), abbiamo determinato la consistenza delle zone d'ombra, la perturbazione del flusso e la vorticità della scia turbolenta che si genera per l'interazione dell'aria con le vele, e fornire allo skipper informazioni preziose per la tattica di gara.

L'obiettivo è stato quello di progettare

un'imbarcazione leggera e resistente, aerodinamicamente molto veloce nel moto di bolina e con una forma che « minimizzi » la resistenza d'onda, infine molto manovrabile, dunque in grado di cambiare assetto rapidamente senza comprometterne la performance e la stabilità.

La modellistica matematica, la simulazione numerica e il calcolo scientifico si sono rivelati preziosi alleati del design team di Alinghi nel raggiungimento di questo obiettivo.

Ringraziamenti.

Le simulazioni numeriche presentate in questa nota sono state realizzate da M.Sala (Fig. 1), S.Micheletti e R.Sacco (Fig.3), J.Wynne (Fig.5), M.Prosi (Fig.6), P.Fischer (Fig.7), G.Rozza (Fig.8), F.Maggio (Fig. 9), E.Miglio (Fig.10), N.Parolini e M.Sawley (Figg. 12,13 e 14).

Bibliografia

F.Casadei G.Fotia, E.Gabellini, F.Maggio e A.Quarteroni, A mortar spectral/finite element method for complex 2D and 3D elastodynamic problems', **Comp. Methods Appl. Mech. Engrng.** 191 (2002), pp.5119-5148

A. Quarteroni, A.Veneziani e P.Zunino, Mathematical and numerical modelling of solute dynamics in blood flow and arterial walls, **SIAM J. Numer. Anal.** Vol 39, No 5, (2001), pp. 1488-1511

A.Quarteroni, Modeling the Cardiovascular System – A Mathematical Adventure, in **SIAM News 34 (5), 2001** (Part I) and **SIAM News 34 (6),2001** (Part II)

A. Quarteroni e L. Formaggia, Mathematical Modelling and Numerical Simulation of the Cardiovascular System, Chapter 1 in **Modelling of Living Systems, Handbook of Numerical Analysis Series**, pp. 1-101, P.G Ciarlet et J.L. Lions Eds., Elsevier, Amsterdam, 2004.

A.Quarteroni e G.Rozza. Optimal Control and Shape Optimization in Aorto-Coronaric Bypass Anastomoses, **Mathematical Models and Methods in Applied Sciences**, Vol.13 (12), pp.1801-1823, 2003.

N.Parolini e A.Quarteroni, Mathematical Models and Simulation for the Americàs Cup, to appear in **Comp.Meth.Appl.Mech.Eng**, 2004

M.Prosi, P.Zunino, K.Perktold e A.Quarteroni, Mathematical and numerical models for transfer of low density lipoproteins through the arterial walls : a new methodology for the model set up with applications to the study of disturbed luminal flow, to appear in **Journal of Biomechanics**, 2004.

