

INTERNATIONAL CAE CONFERENCE

1222-2022
800
ANNI



UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI
DI PADOVA

HOUSTON
Methodist[™]
LEADING MEDICINE



Meccanica computazionale: breve storia, alcune applicazioni e sviluppi recenti

B. A. SCHREFLER

Institute for Advanced Study –TUM, Munich
The Houston Methodist Research Institute, Houston
University of Padua, Padua

Breve storia

Le scienze e l'ingegneria sono basati su due pilastri:

- 1) l'osservazione sperimentale
- 2) la teoria formulata a partire da ipotesi induttive, generalmente espressa mediante linguaggio matematico.

Oggi esiste un terzo pilastro: la scienza computazionale

Dagli anni 50-60 in poi i metodi computazionali hanno trasformato profondamente l'attività nei campi delle scienze e dell'ingegneria, grazie allo sviluppo impetuoso delle capacità di calcolo

Una delle componenti principali delle scienze computazionali è la meccanica computazionale

Le teorie della meccanica dei solidi e dei fluidi, la biomeccanica, l'elettromagnetismo, il trasferimento del calore, la fisica del plasma, ed altre discipline scientifiche vengono implementate attraverso metodi computazionali nella progettazione ingegneristica, nella produzione e nello studio di larghissime classi di fenomeni fisici.

Teoria-discretizzazione- metodi numerici -
applicazione dei calcolatori digitali - validazione

Analisi delle strutture con matrici

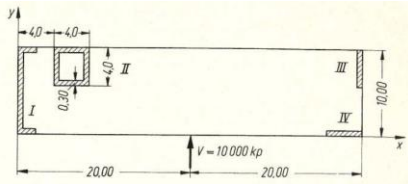


Bild 7. Abmessungen zum Zahlenbeispiel 2

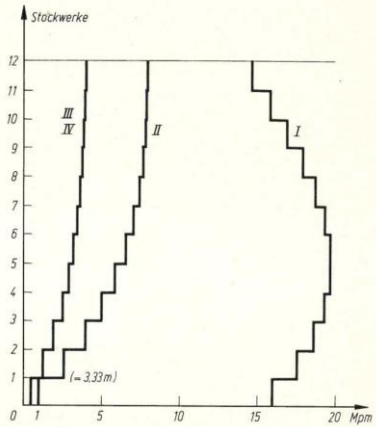
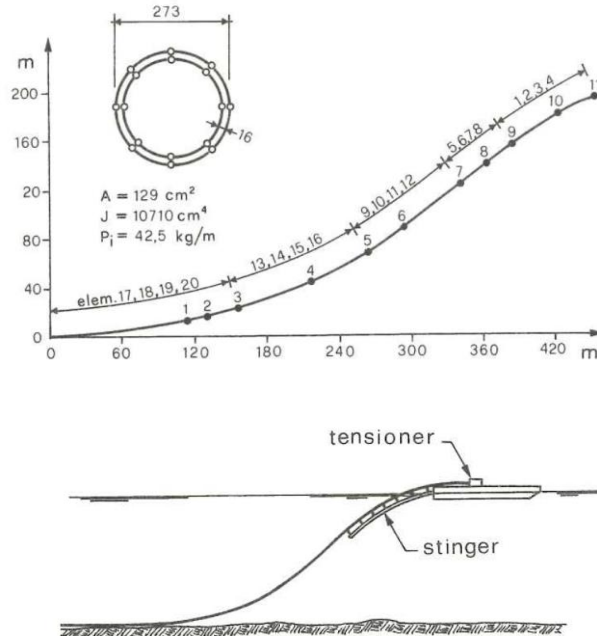
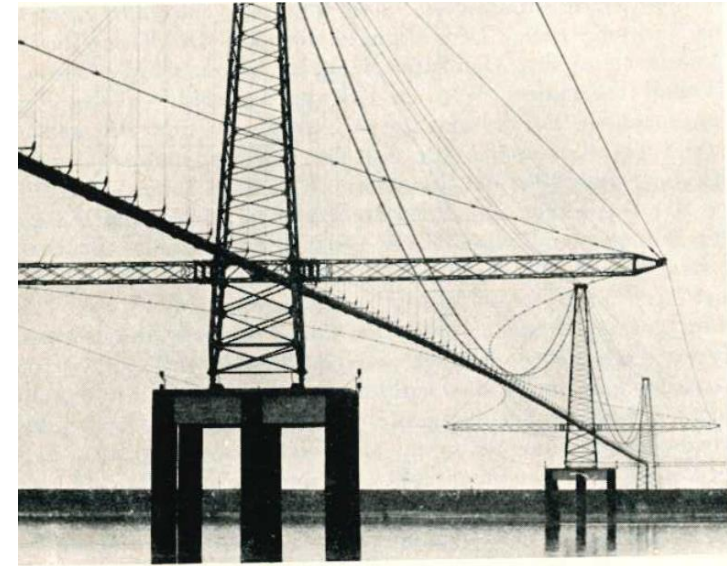


Bild 6. Beispiel 1, Lastfall 2; Verlauf der Eigentorsionsmomente mit der Höhe für Scheiben I bis IV

Schrefler, 1967

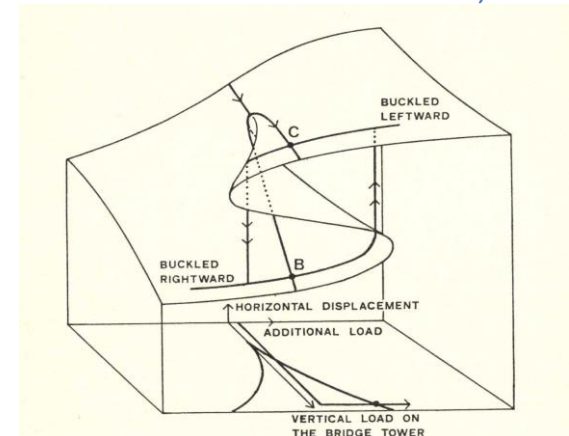


Odorizzi e Schrefler, 1981



Dreifeldrige Hängebrücke über den Po, Feldlänge 255 m. Die verschiedenen Seilsysteme sind deutlich sichtbar

Schrefler, 1978

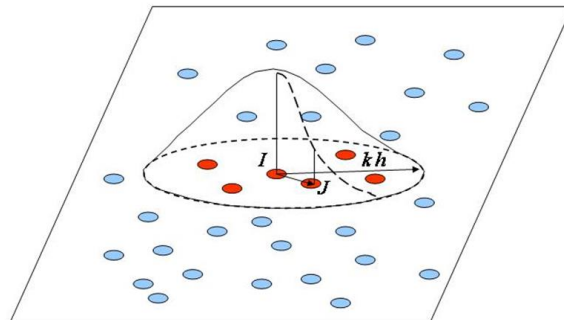
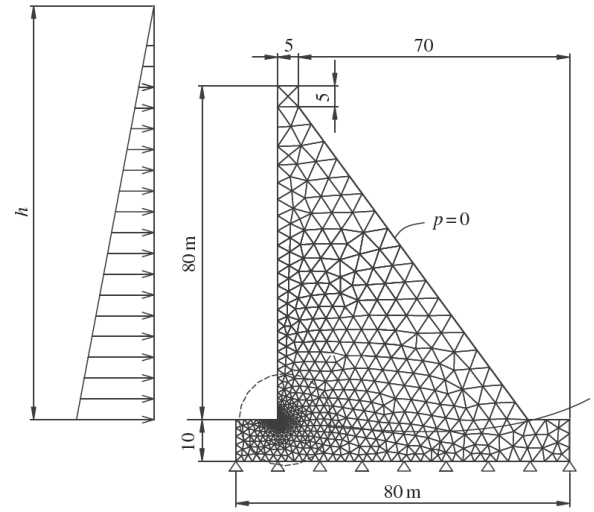


Przemieniecki, Matrix structural analysis, AIAA Journal, 1963

Il continuo

Equazioni alle derivate parziali \rightarrow equazioni algebriche

- Metodo delle differenze finite
- Metodo degli elementi finiti
- Metodo dei volumi finiti
- Elementi al contorno
- Metodi senza mesh



I tre padri del metodo degli elementi finiti

John Argyris
Ray Clough
Olgierd Zienkiewicz



Associazioni

International Association of Computational Mechanics IACM 1981

US Association for Computational Mechanics USACM 1987

European Community on Computational Methods in
Applied Sciences ECCOMAS 1993

Gruppo Italiano di Meccanica Computazionale GIMC-AIMETA 1986

Congressi a Venezia

2nd Int. Conference on Numerical Methods in Thermal Problems, Island of San Giorgio Maggiore, Venice, 1981

2nd Int. Conference on Numerical Methods in Laminar and Turbulent Flow, Island of San Giorgio Maggiore, Venice, 1981

Int. Conference on Engineering Software for Microcomputers, Island of San Giorgio Maggiore, Venice, 1984

2nd Int. Conference on Numerical Methods in Transient and Coupled Problems, Island of San Giorgio Maggiore, Venice, 1984

Int. Conference on Computer Modelling in Ocean Engineering, Venice, Island of San Servolo, 1988

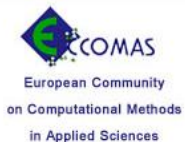
Ninth Int. Conference on Finite Elements in Fluids, Venice, Auditorium Santa Margherita, 1995

8th World Congress for Computational Mechanics WCCM8/ ECCOMAS, Venice, 2008

Conference on Coupled Problems in Science and Engineering. VI, Venice, Island of San Servolo, 2015



- Home
- Introduction
- Location
- Committees
- Supporting Organizations
- Conference Topics
- Minisymposia
- Important Dates
- Submission of Contributions
- Registration
- Accommodation
- Secretariat
- About IACM
- About ECCOMAS



WCCM8 –ECCOMAS VENEZIA 2008



Applicazioni notevoli

Modellazione di incendi in galleria

Reattori per la fusione termonucleare controllata

Meccanica computazionale nel campo della
medicina

GALLERIA DI BASE DEL BRENNERO 64 KM



Brennero

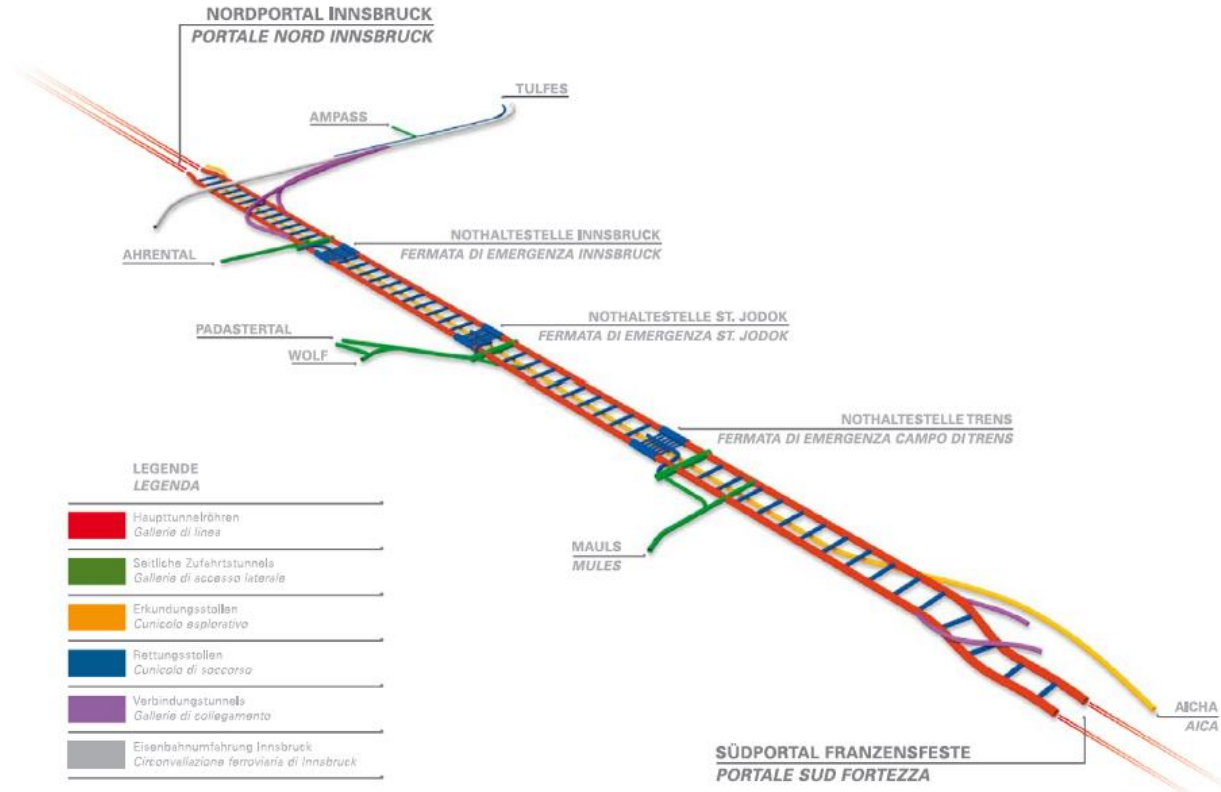
Fortezza/Franzensfeste

Tulfes/Innsbruck

— Galleria di esplorazione

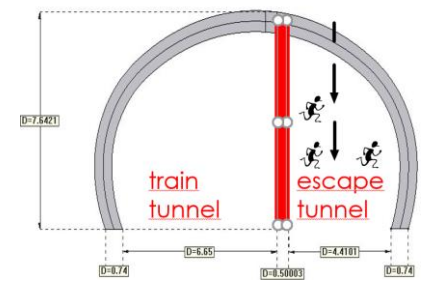
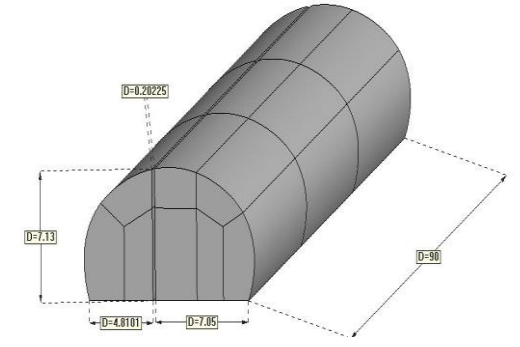
== Galleria principale

Section Fire wall



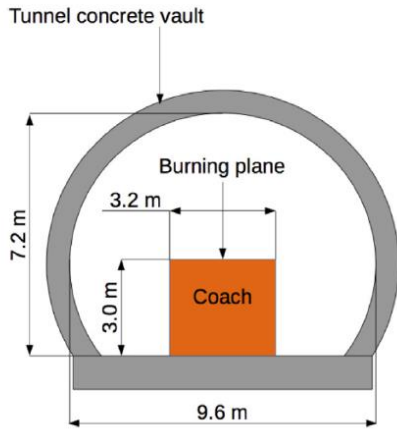
LEGENDE
LEGENDA

█	Haupttunnelröhren <i>Galleria di linea</i>
█	Seitliche Zufahrtstunnels <i>Gallerie di accesso laterale</i>
█	Erkundungsstollen <i>Cunicolo esplorativo</i>
█	Rettungsstollen <i>Cunicolo di soccorso</i>
█	Verbindungstunnels <i>Gallerie di collegamento</i>
█	Eisenbahnumfahrung Innsbruck <i>Circosvalazione ferroviaria di Innsbruck</i>

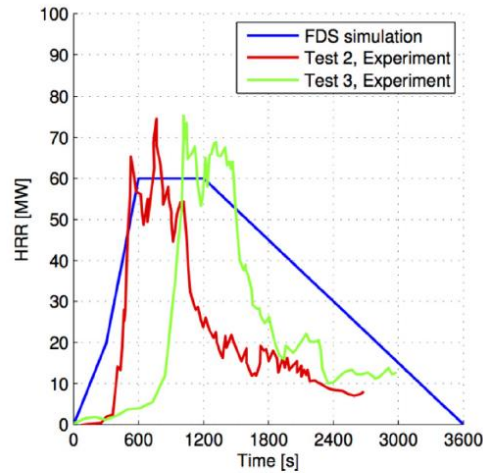


K.Bergmeister, et al: Simulation of fire and structural response in the Brenner Base Tunnel by means of a combined approach: A case study. Engstruct.2020

Modellazione di incendi in galleria

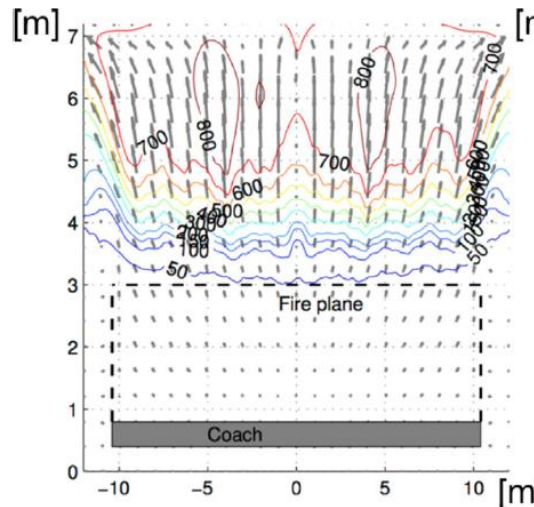


(a) Tunnel's cross section

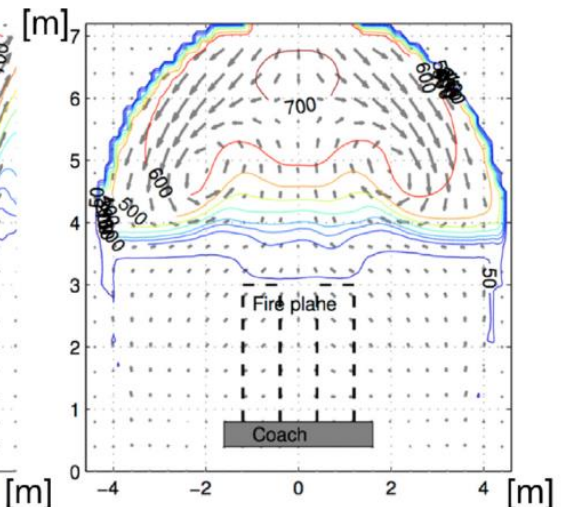


(b) Heat Release rate profile

Distribuzione della temperatura



(a) Longitudinal section



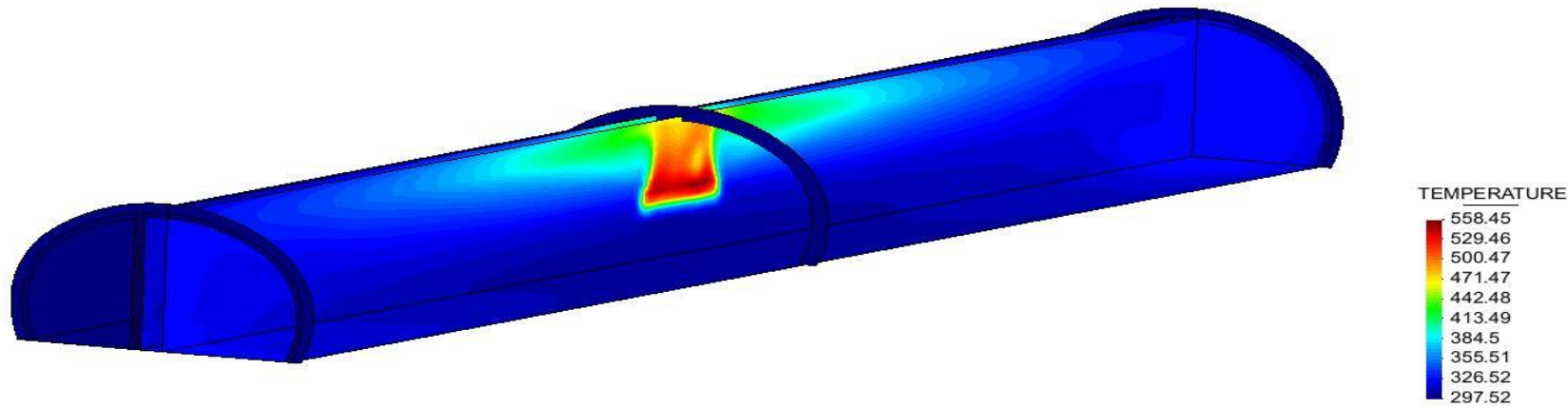
(b) Cross section

Modellazione di incendi in galleria

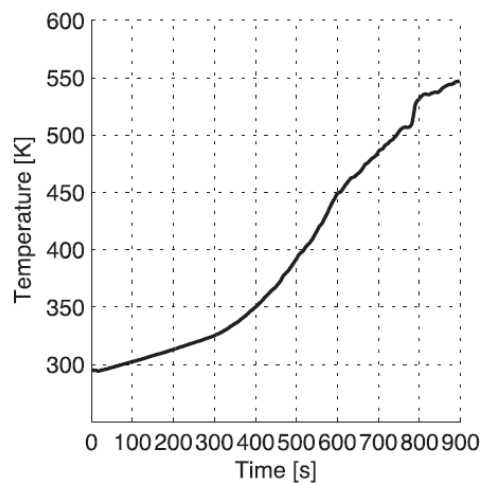
Problema termo-idro-chemo-meccanico accoppiato -

- **Trasferimento del calore:**
 - Radiazione termica con partecipazione del mezzo
 - Presenza di fumo, fuliggine e particelle di polvere
 - Conduzione attraverso la volta del tunnel
 - Convezione per moto del mezzo
 - ...
- **Processi di combustione:**
 - Fonte di calore volumetrica
 - rottura dei vortici
 - ...
- **Termo-fluido-dinamica:**
 - Dinamica computazionale dei fluidi- CFD
 - Flusso turbolento
 - Generazione/dispersione di calore
 - Scambio tra dominio fluido e volta della galleria...
- **Comportamento strutturale del calcestruzzo**
 - Mezzo poroso multifase: modello dei tre fluidi
 - Cambio fase
 - Disidratazione
 - Spalling

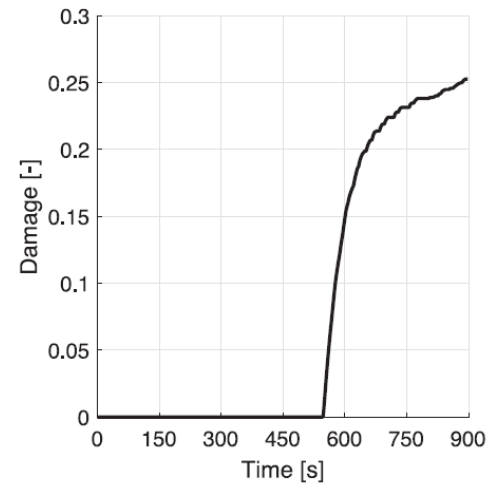
Modellazione di incendi in galleria



Temperatura nel fluido e nella volta e danno dopo 45 min

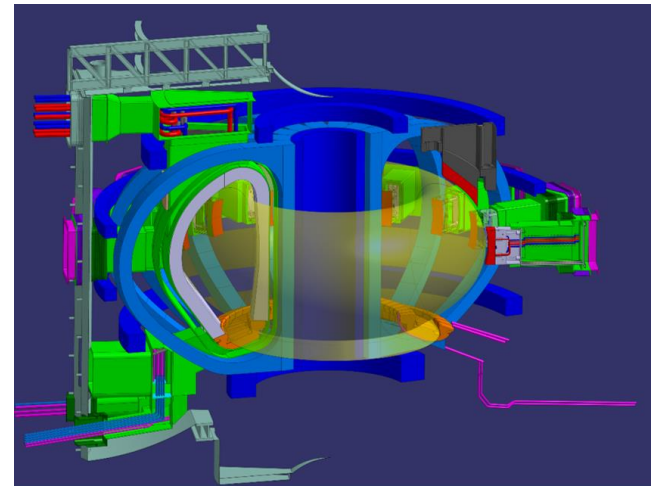
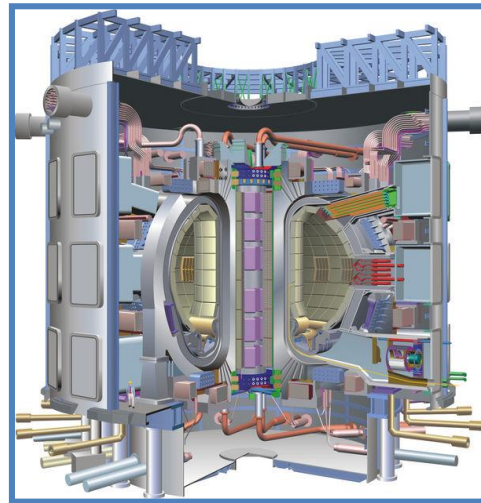


(b) Maximum temperature evolution

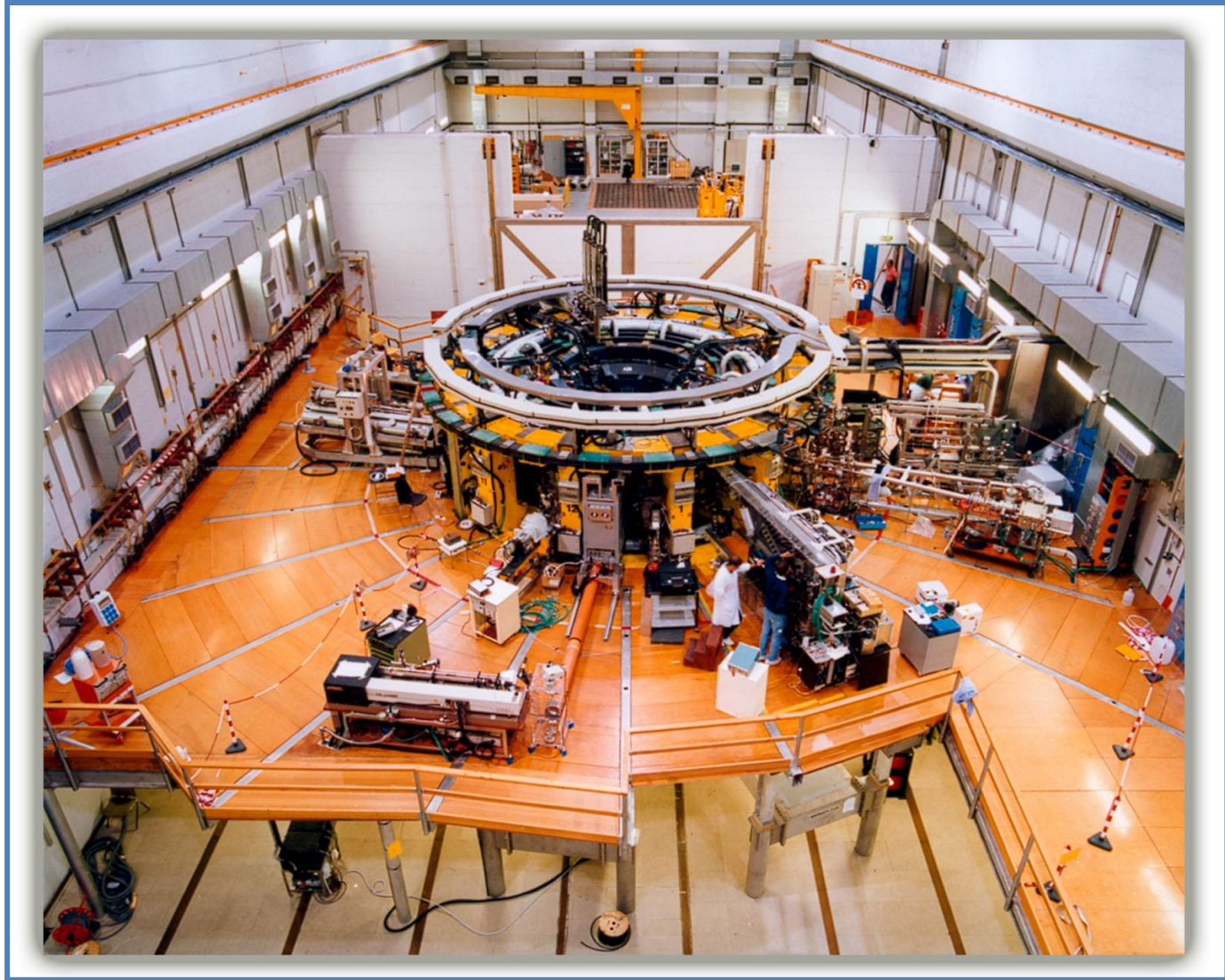


(b) Maximum mechanical damage evolution

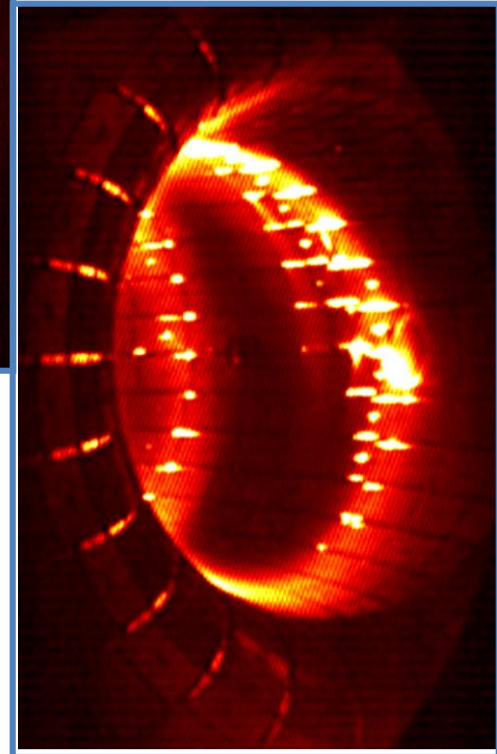
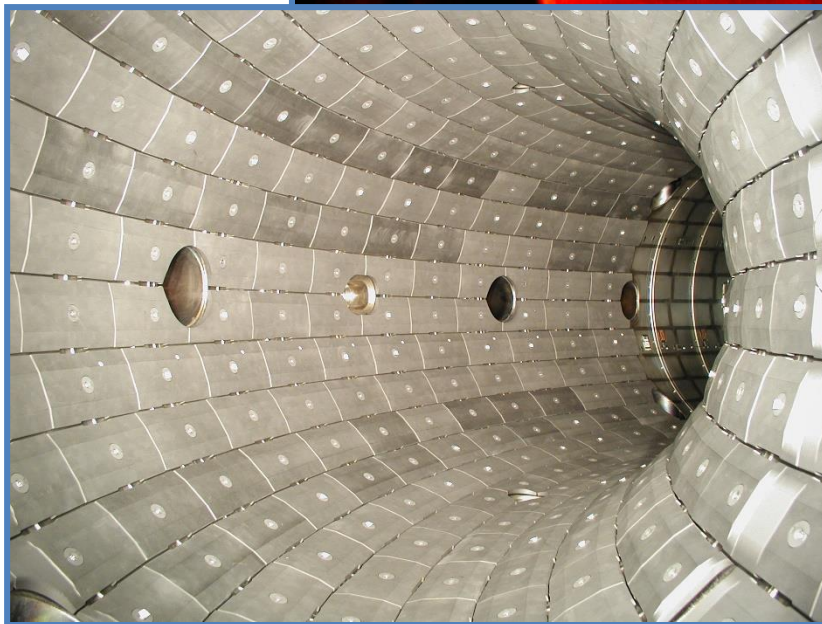
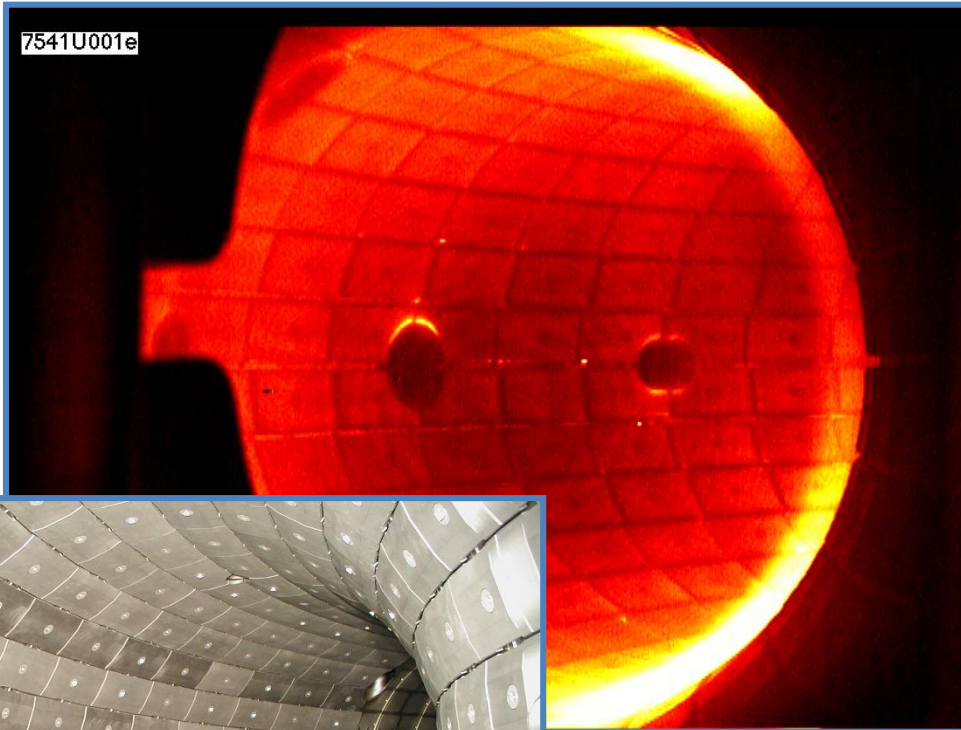
Reattori per la fusione termonucleare controllata



RFX (Reversed Field Pinch Experiment - PADOVA)



RFX (Reversed Field Pinch Experiment - PADUA)

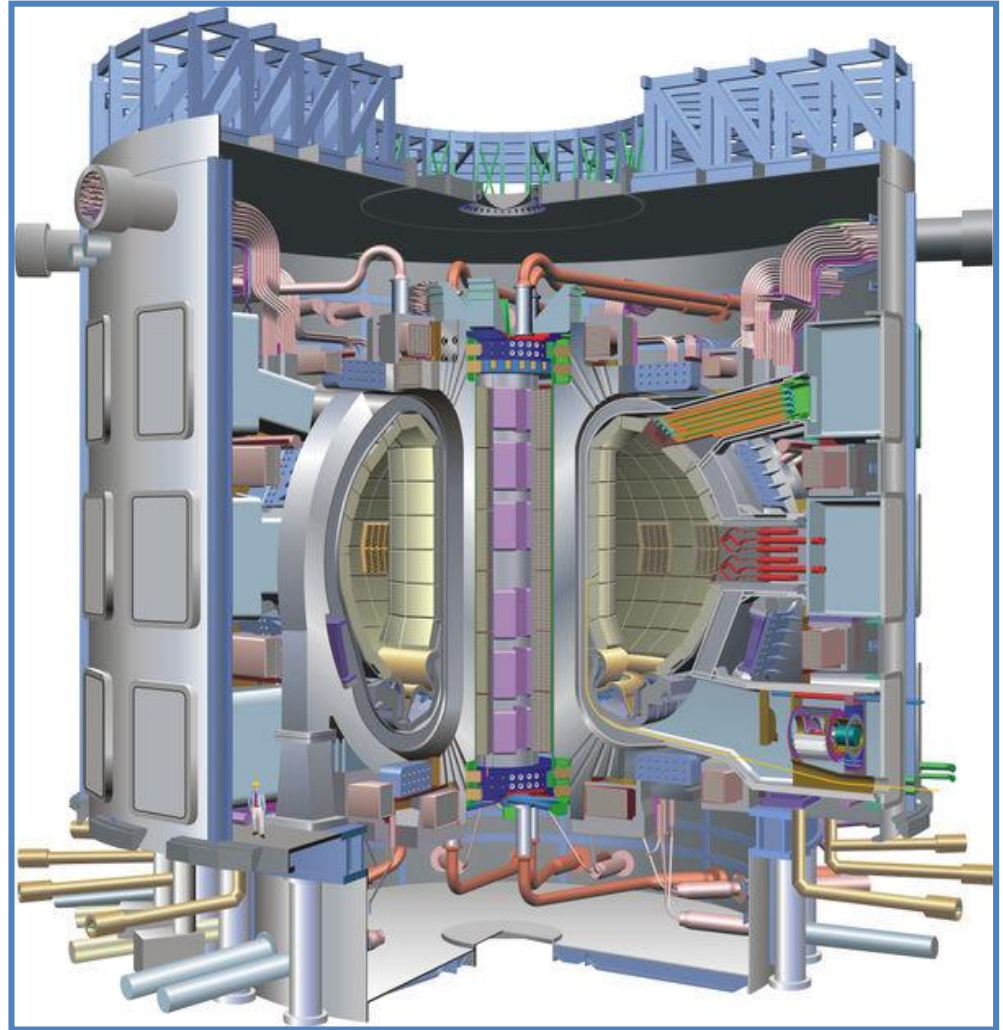


International Thermonuclear Experimental Reactor (ITER)

ITER è in costruzione a Cadarache. Il primo plasma è previsto per il 2025

Costo previsto 10 GEuro:50 % pagato dall'EU, il rimanente 50% è suddiviso tra Cina, India, Giappone, Corea del Sud, Russia, US.

Nel Tokamak ITER un plasma che produce 500 MW da reazioni tra Deuterio e Tritio sarà confinato da un complesso sistema di bobine superconduttrici.



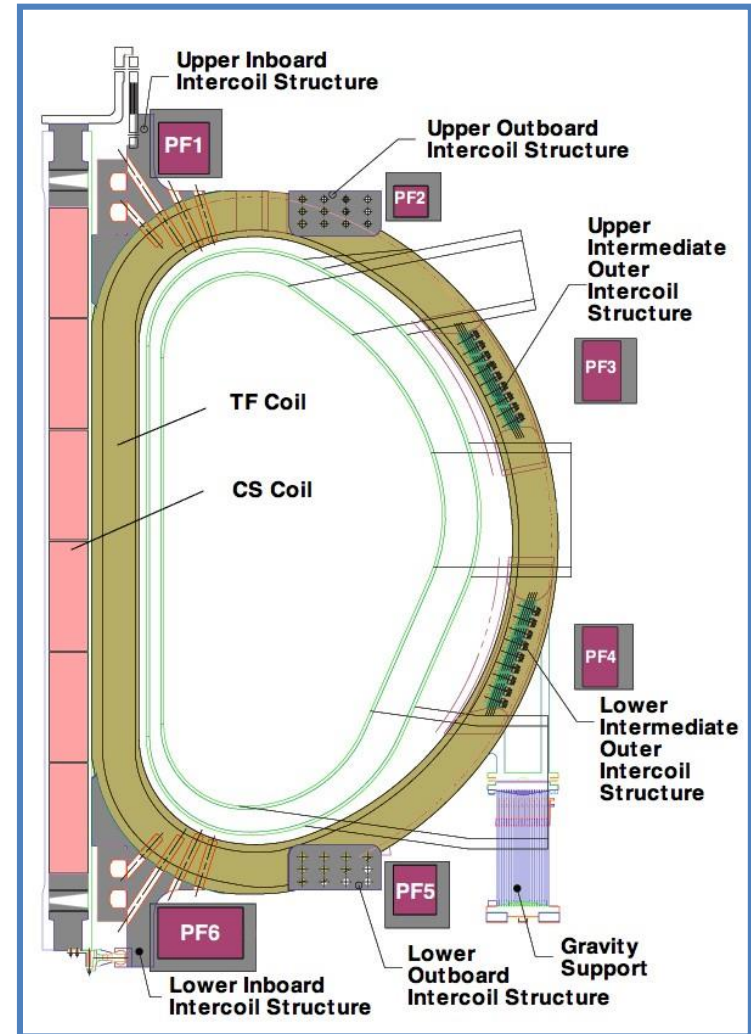
International thermonuclear experimental reactor (ITER)

La struttura dei magneti di ITER consiste di tre sistemi principali: una bobina Solenoide Centrale (CS) composta di sei moduli, 18 bobine per il Campo Toroidale (TF), e 6 bobine per il Campo Poloidale (PF).

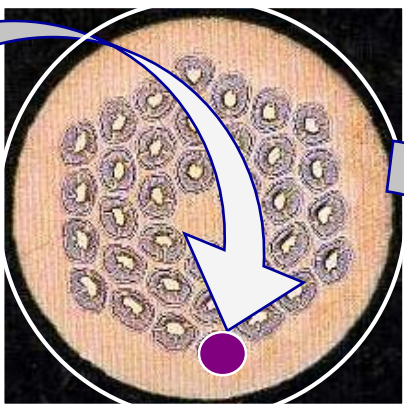
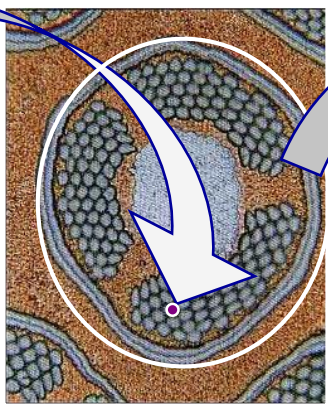
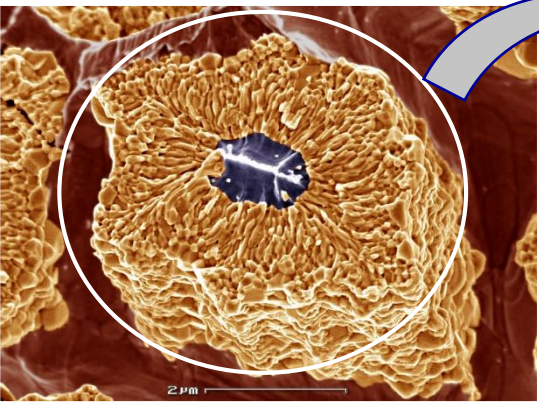
Le bobine CS e TF sono realizzate con cavi basati su Nb_3Sn mentre per le bobine PF coils sarà utilizzato NbTi.

Tutte le bobine sono realizzate con conduttori cable-in-conduit (CICC).

Il sistema di magneti, inclusa la relativa parte criogenica sarà l'elemento più costoso dell'intero budget per ITER: circa il 30 % del costo totale.



Il cavo (TF): modellazione multiscale per compositi, ivi incluso il collegamento tra modello continuo e discreto

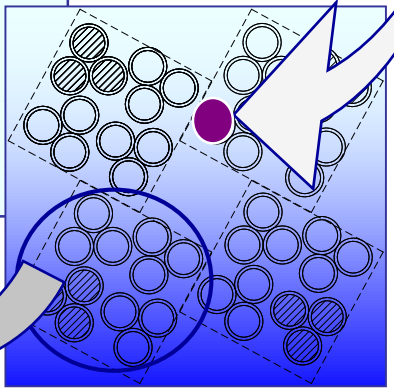
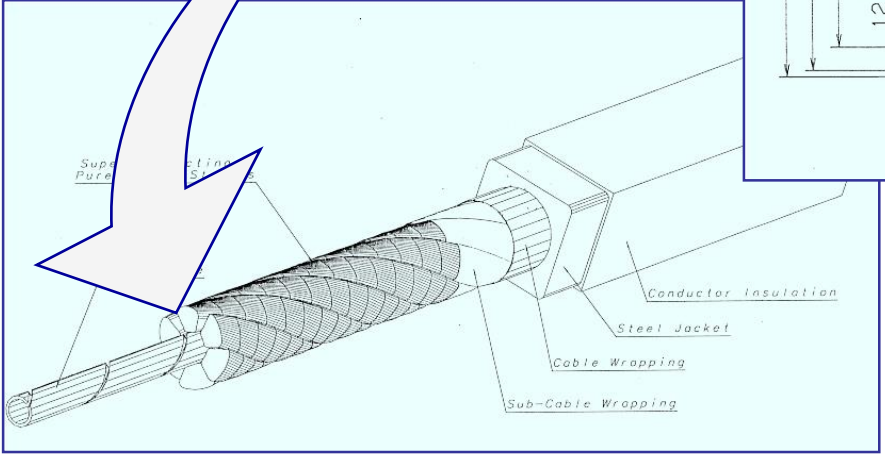
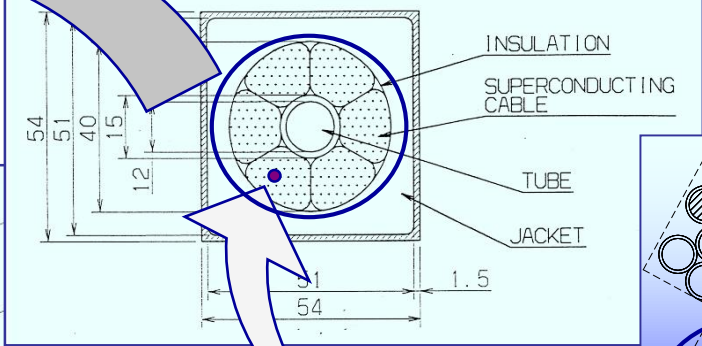


filo

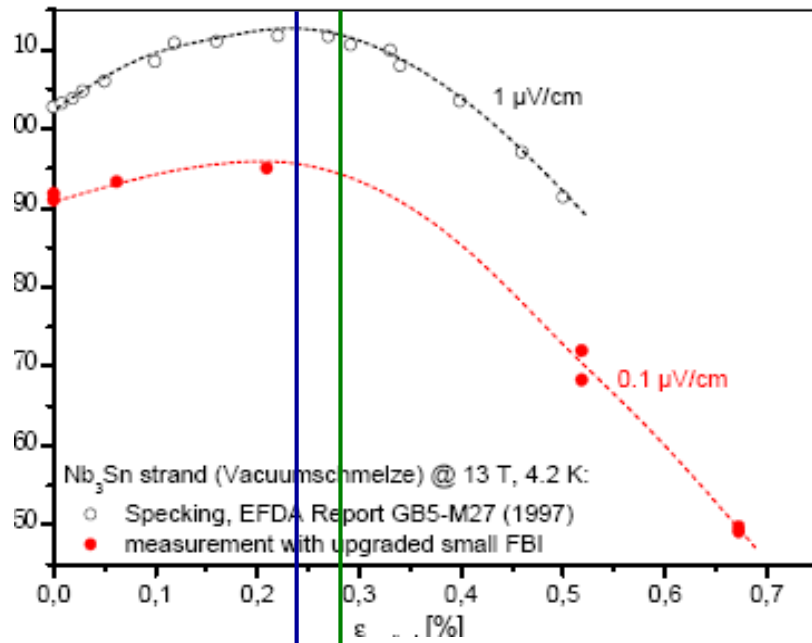
fascio di fili

tripletta

cavo



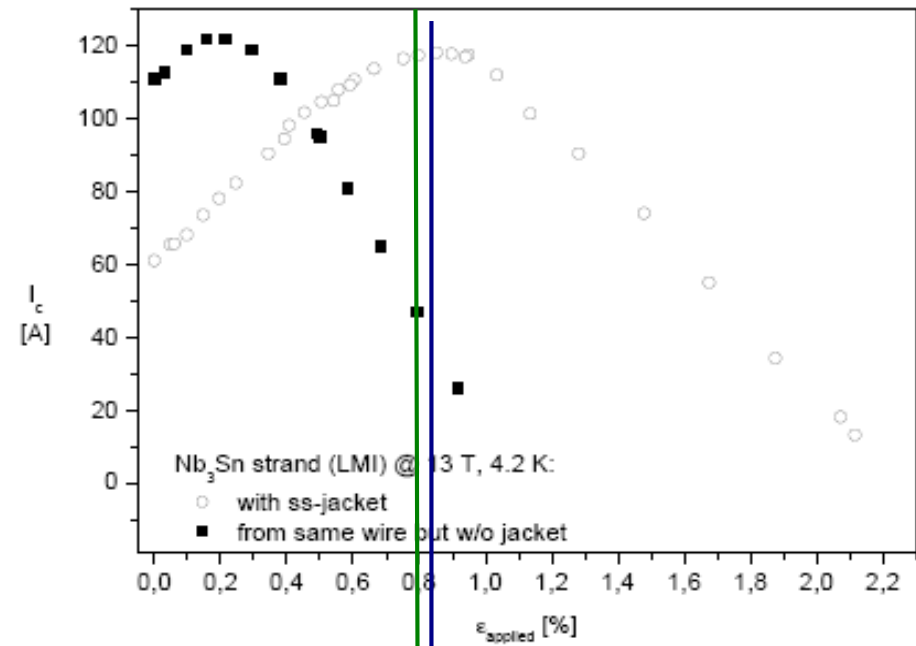
Fascio di fili: confront con dati sperimentali



Measured

Computed

Fascio di fili EAS
(Vacuumschmelze)
senza rivestimento esterno
(jacket)



Computed

Measured

Fascio di fili LMI (Europa
Metalli) con rivestimento
esterno

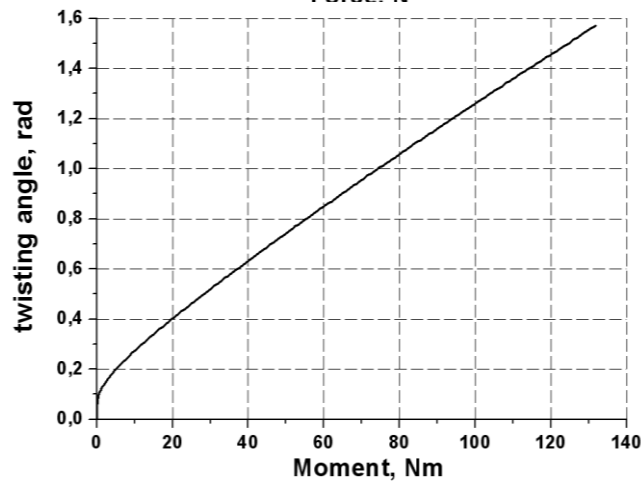
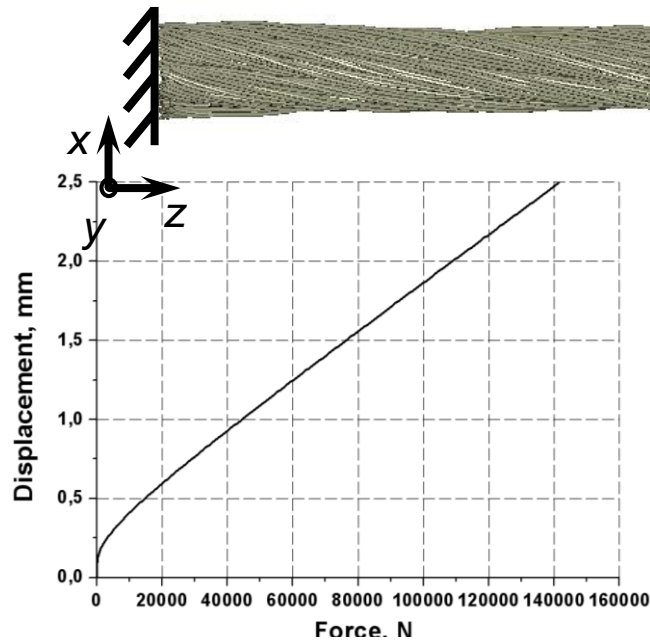
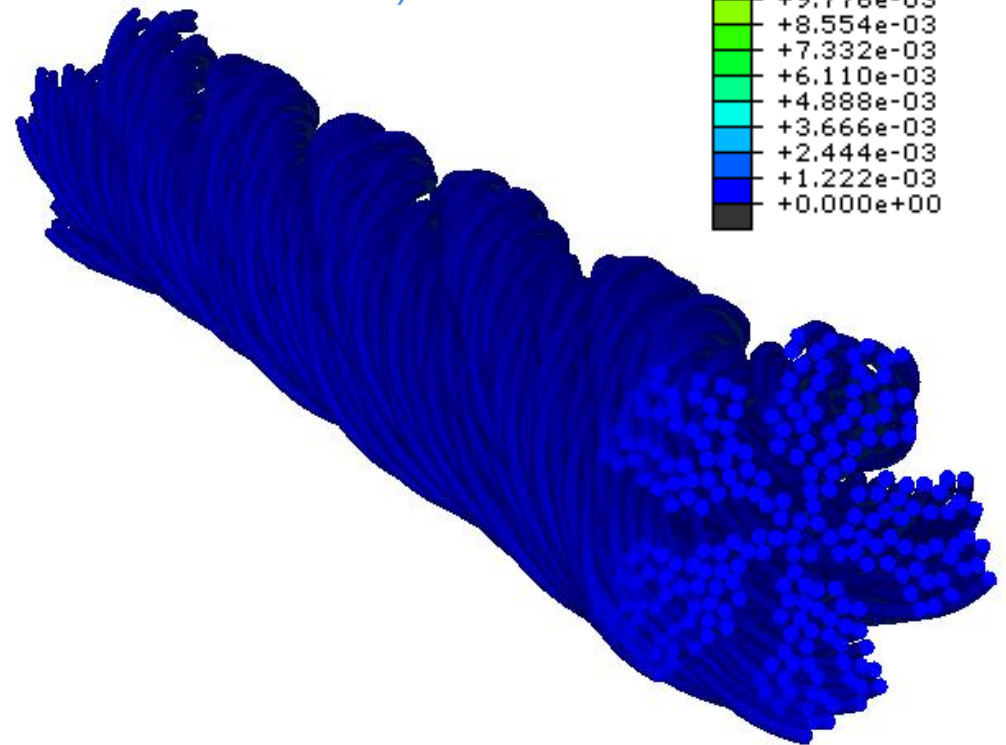
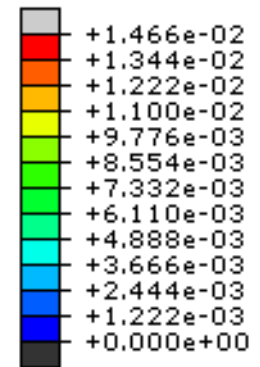
Cable 3x3x5x5+core test con carico combinato

$$U_x, U_y=0$$

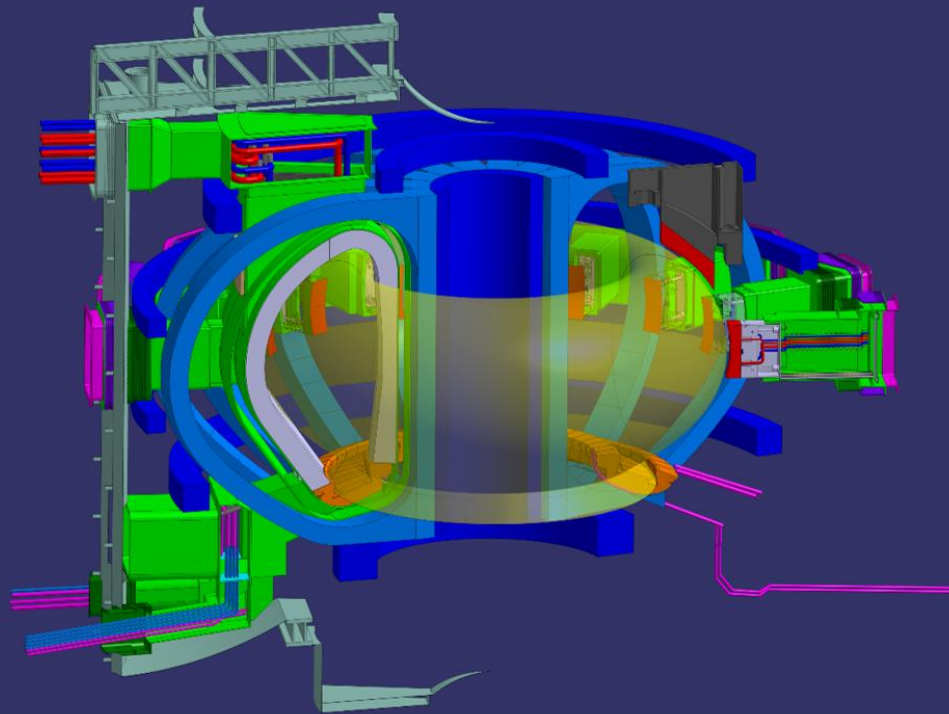


Animazione della
deformazione (resultati delle
simulazioni multiscala con
FEM)

U, Magnitude, m



DEMO FUSION REACTOR



TF CS
PF

Magnet
System

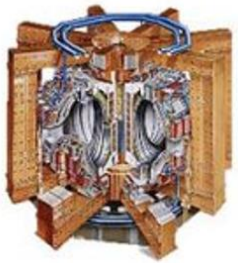
OIS
IIS GS

Mechanical
Structures

CLs
...

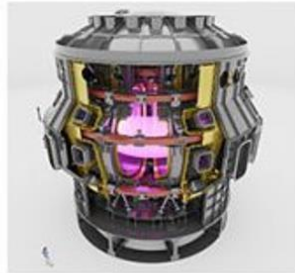
Magnet
Feeders

FOUR MAJOR TOKAMAK PROJECTS



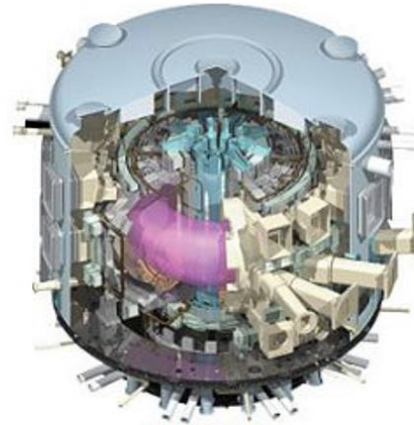
JET

80 m³



JT-60SA

135 m³

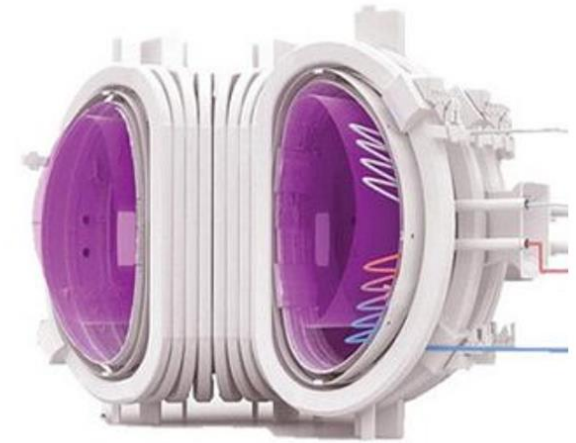


ITER

800 m³

(one-third the size of an Olympic swimming pool)

~ 500 MW_{th}



DEMO

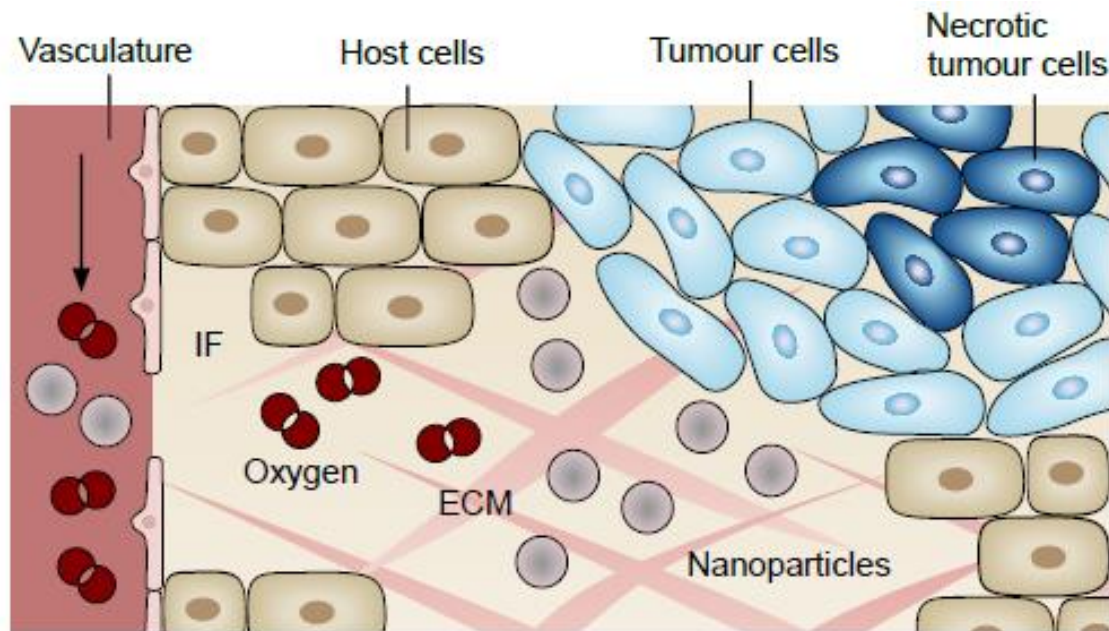
~ 1000 – 3500 m³

(half to one and a half times the size of an Olympic swimming pool)

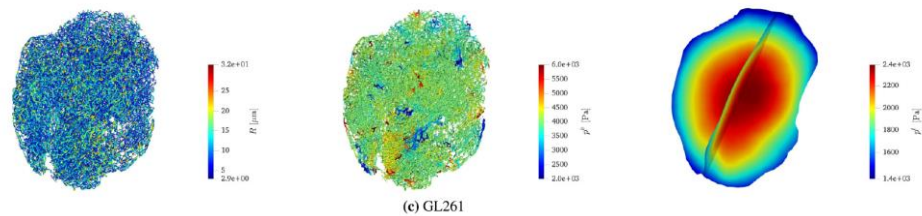
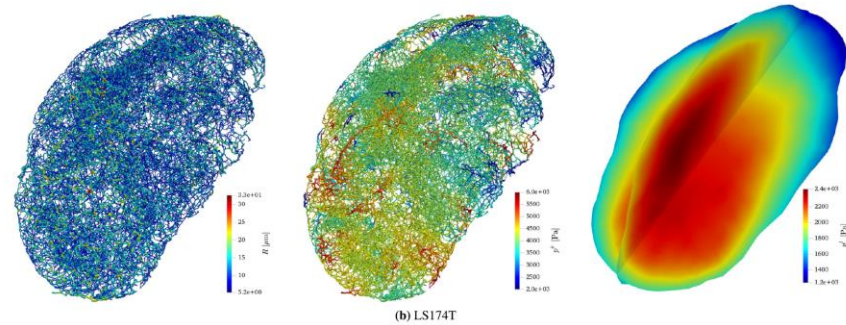
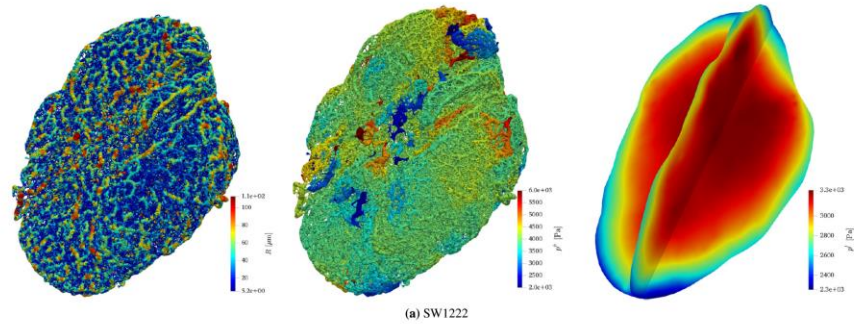
~ 2000-4000 MW_{th}

Meccanica computazionale nel campo della medicina

Crescita dei tumori e trasporto di farmaci
(nanoparticelle) per combattere i tumori stessi



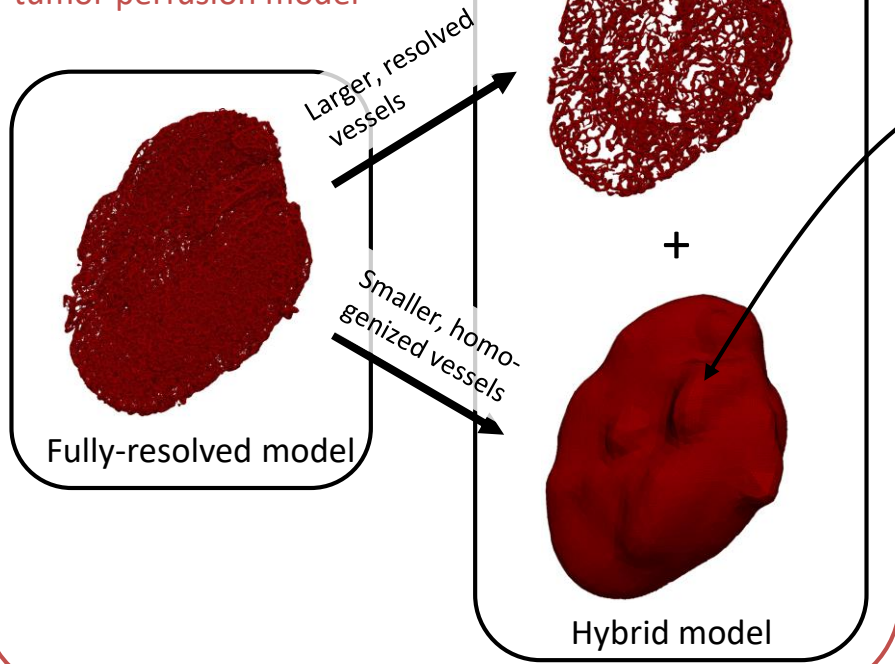
Come trattare la vascolarizzazione?



Vascularizzazione in tre tumori murini provenienti da diverse linee cellulari (sinistra), pressione sanguigna (centro, simulazione su modello completo) e pressione interstiziale (destra, simulazione su modello completo)

Validazione del modello di angiogenesi

I) Development of a hybrid embedded/homogenized solid tumor perfusion model

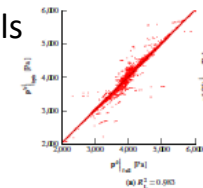


II) Validation and parameter optimization

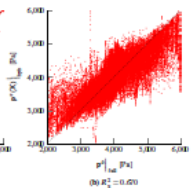
Additional parameters:

$$\frac{k^v}{\mu^v}, \left(\frac{S}{V}\right)_{\Lambda_S}$$

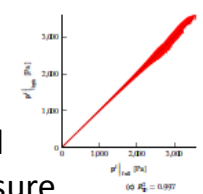
Blood pressure in larger vessels



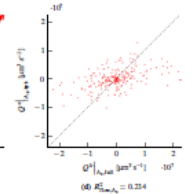
Blood pressure in smaller vessels

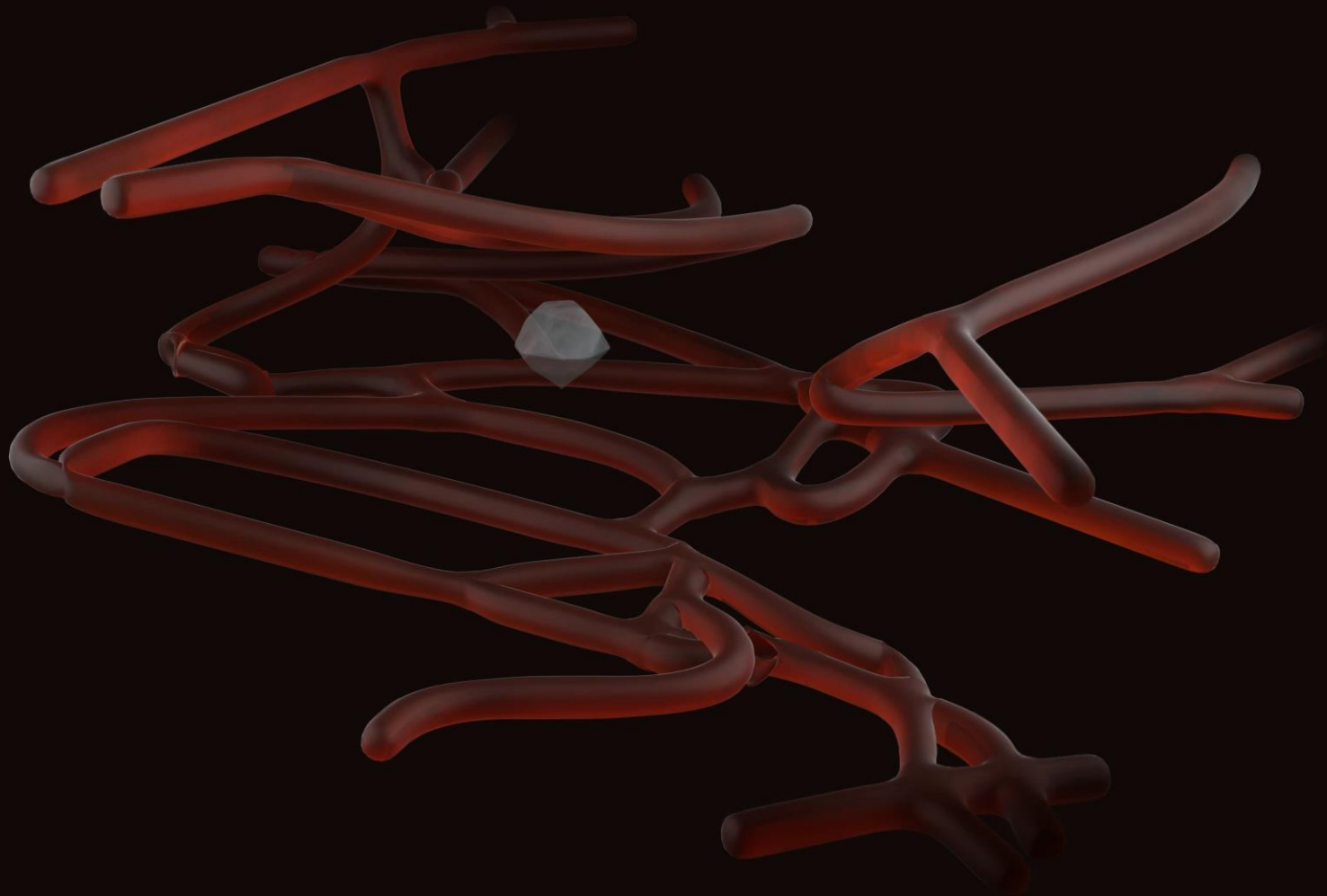


Interstitial fluid pressure

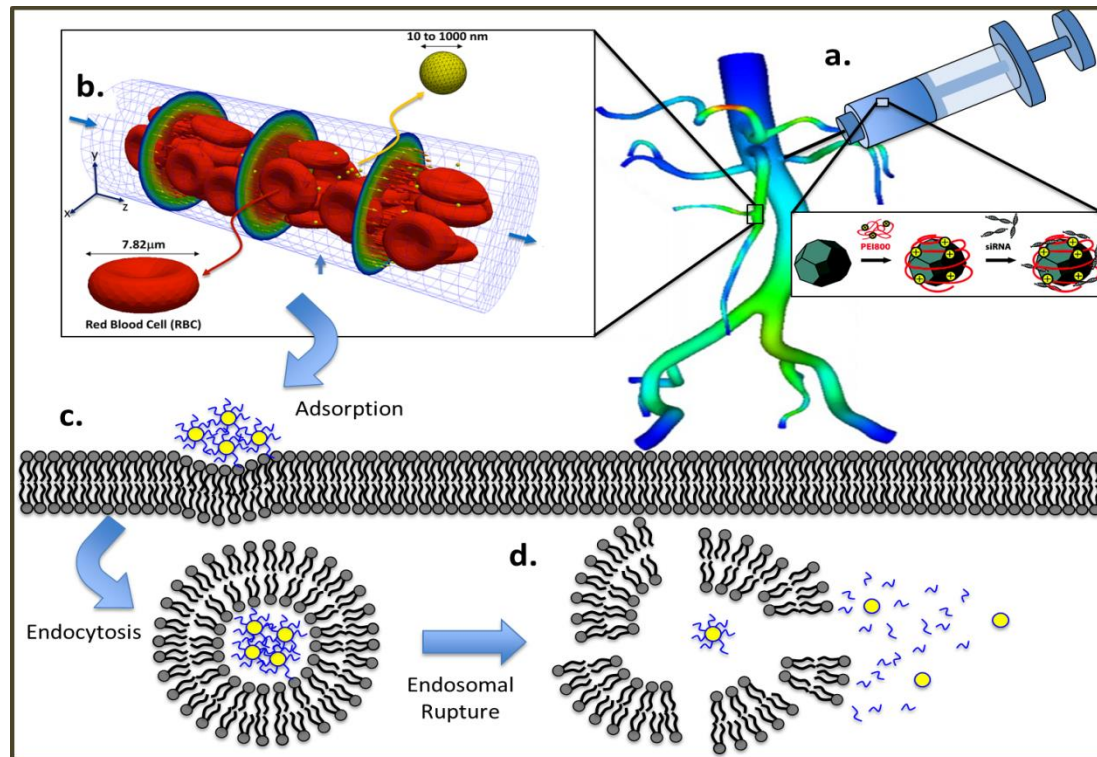


Blood flow in smaller vessels



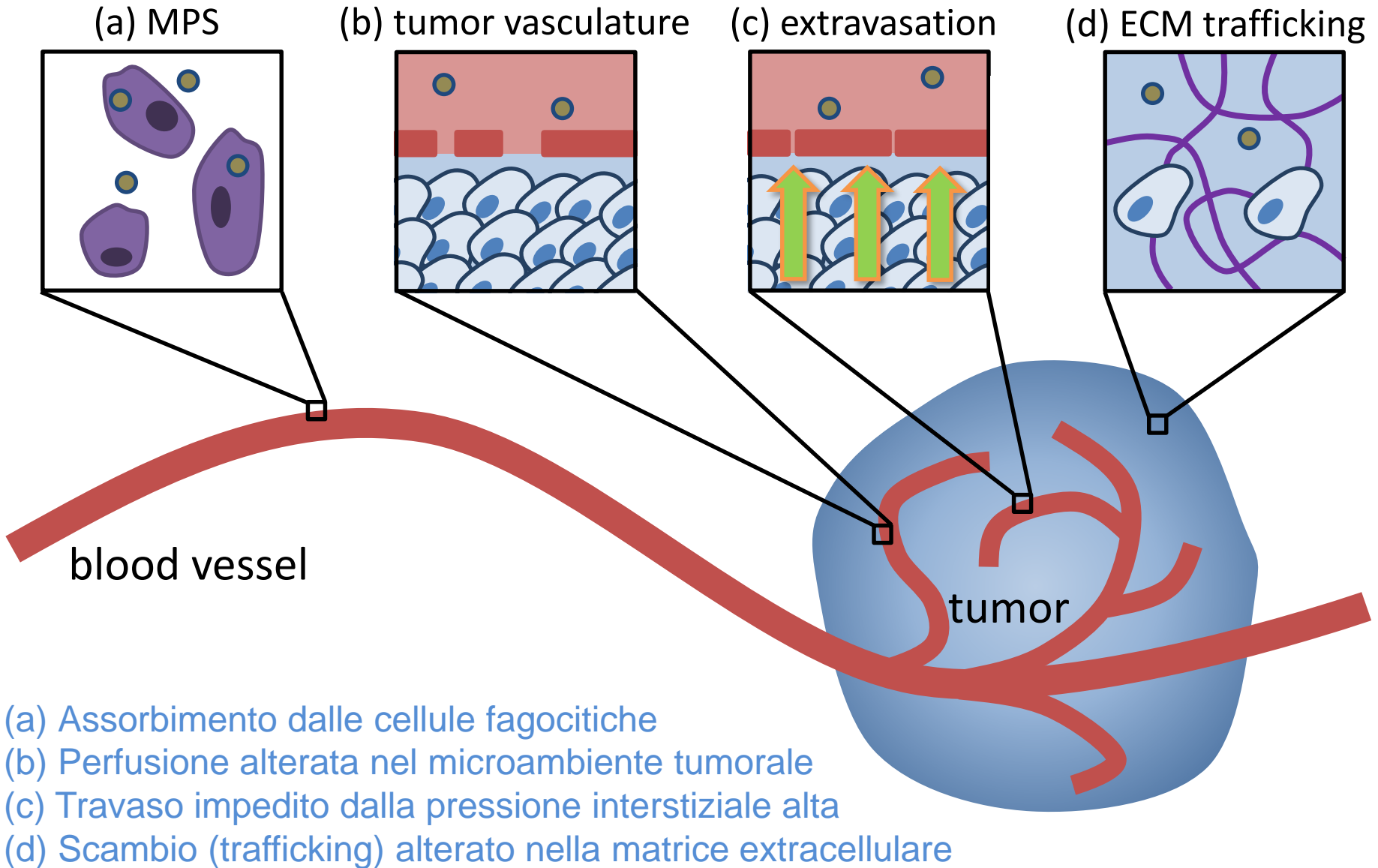


Somministrazione di farmaci con Nanoparticelle

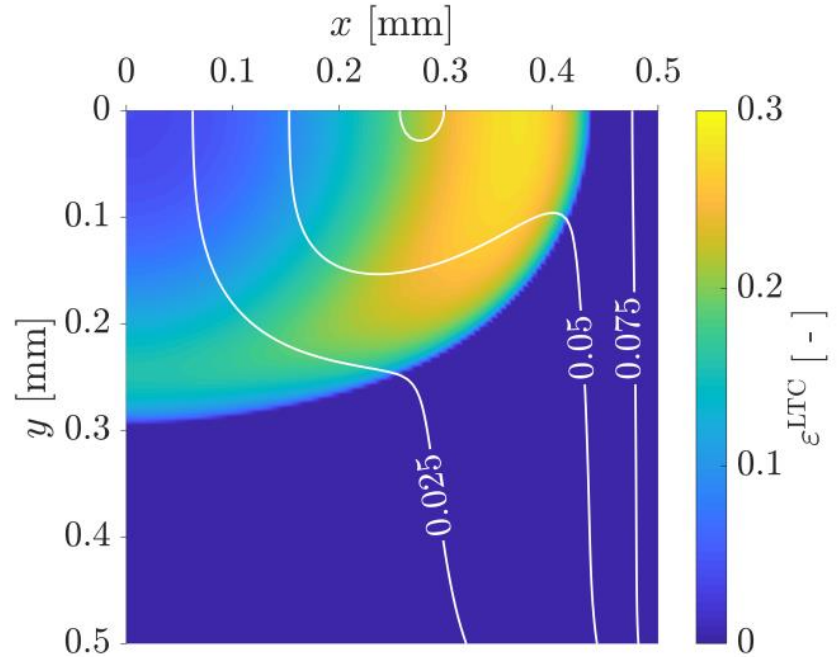
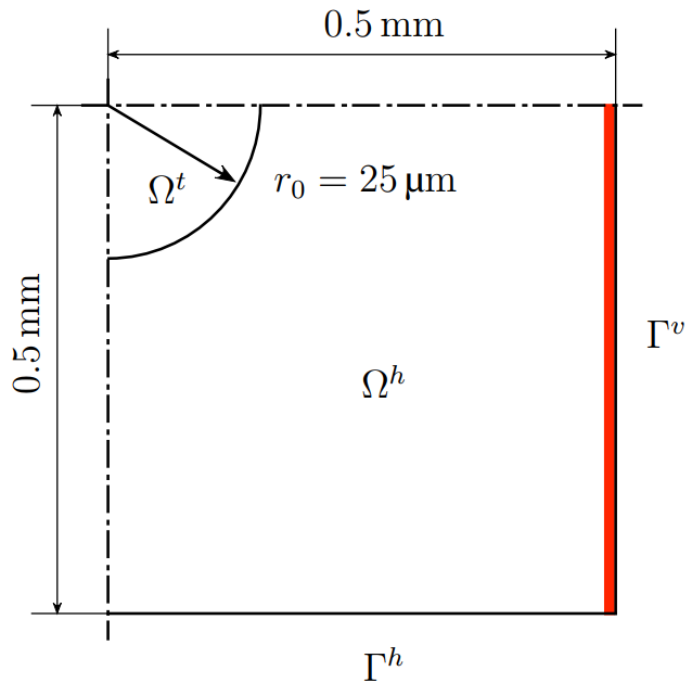


RILASCIO CONTROLLATO DI FARMACI

Barriere biologiche alla somministrazione di Nanoparticelle

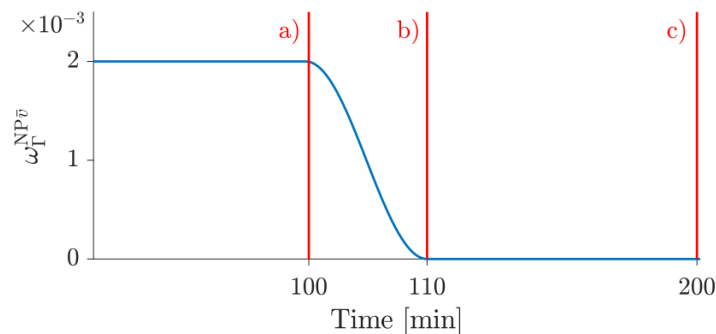


Somministrazione di sostanze terapeutiche nel microambiente tumorale

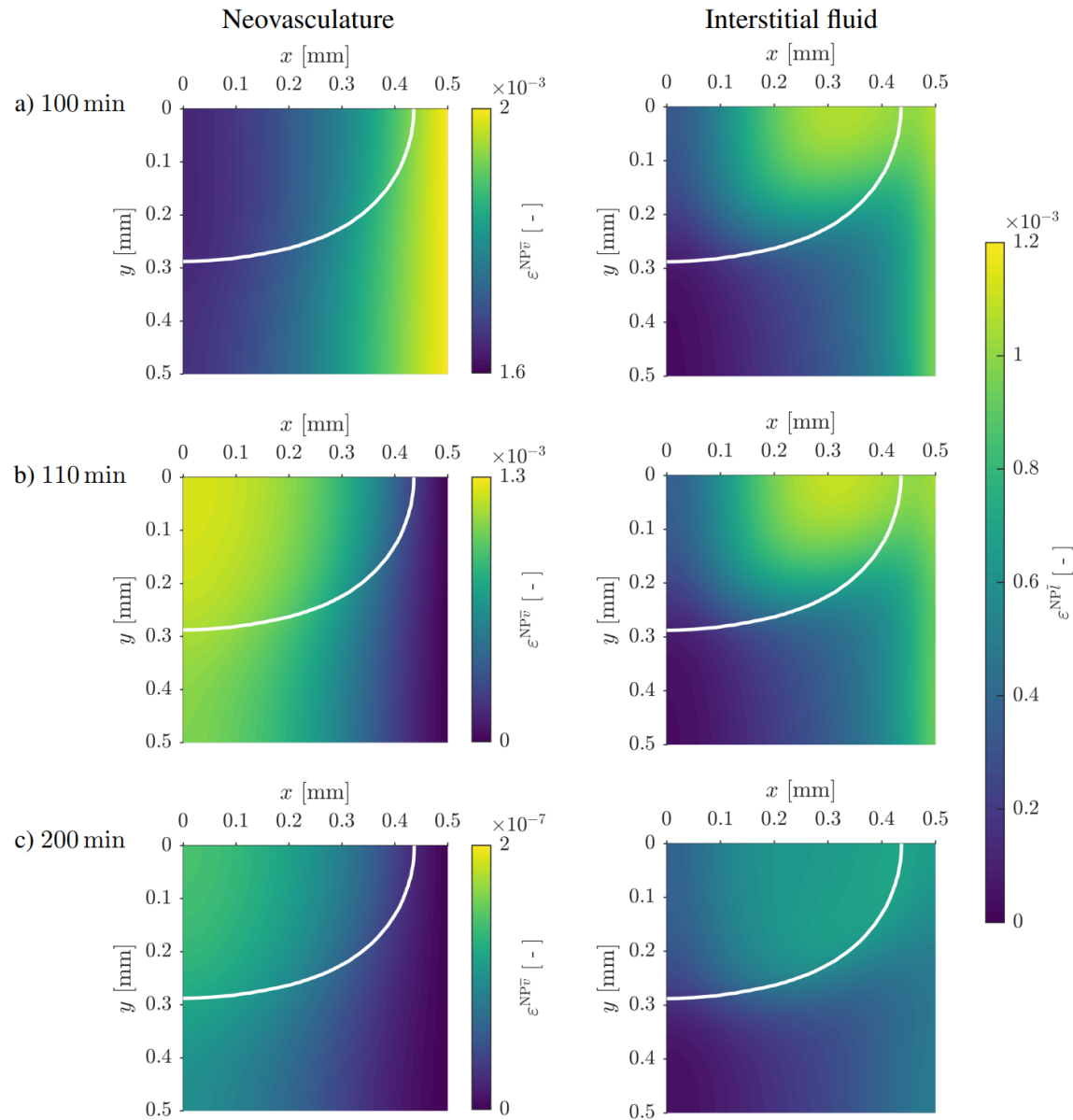


(b) $t = 24 \text{ d}$

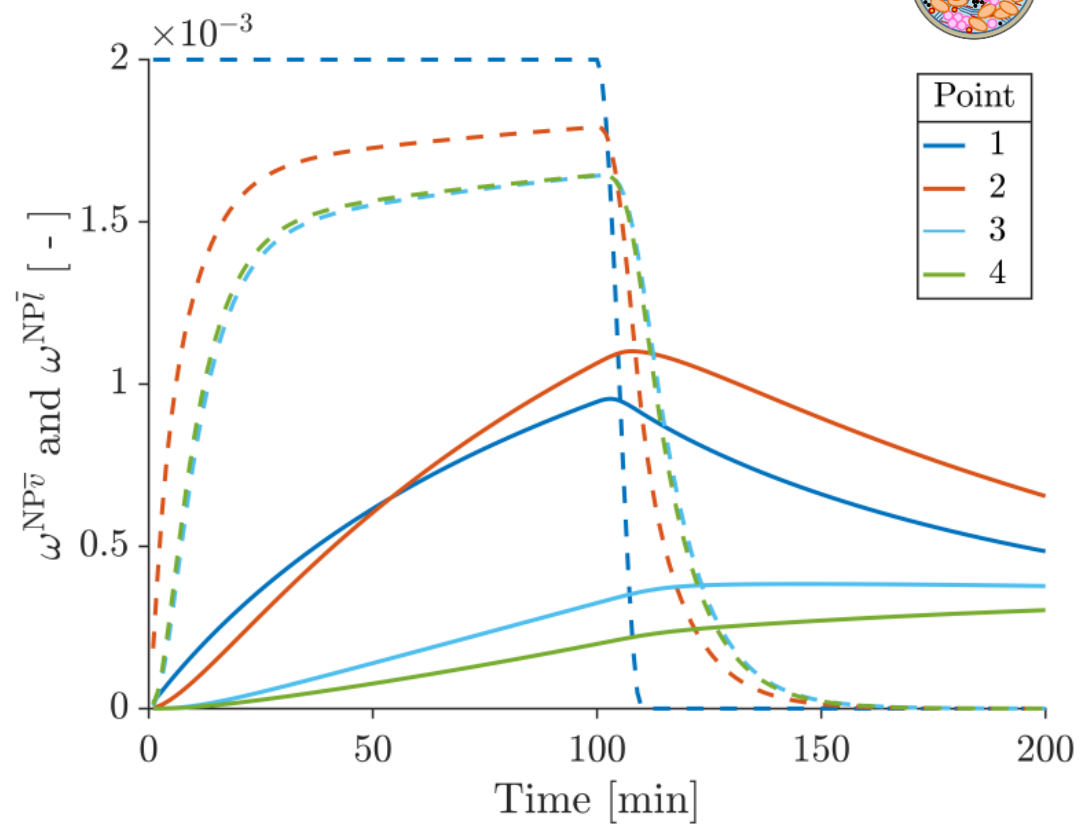
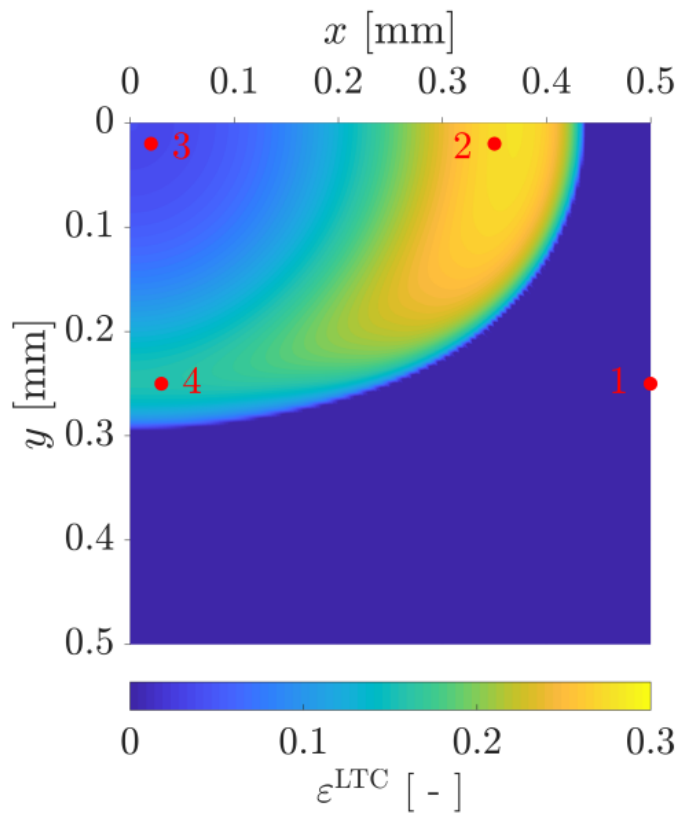
Sviluppo del tumour e neo-vascularizzazione



Protocollo di iniezione delle Nanoparticelle



Distribuzione delle Nanoparticelle nella neo-vascularizzazione e nel fluido interstiziale dopo 100 min, 110 min e 200 min dal loro rilascio



Evoluzione temporale delle frazioni di massa delle nanoparticelle nella neo-vascularizzazione ω_{NPv} (linee tratteggiate) e nel fluido interstiziale ω_{NPi} (linee continue) in quattro punti caratteristici indicati sul grafico di sinistra. Punto 1 si trova sul contorno del rilascio delle nanoparticelle

Sviluppi più recenti

- Riduzione dei modelli
- Utilizzo dell'intelligenza artificiale, reti neurali ANN
- Identificazione dei parametri e quantificazione dell'incertezza

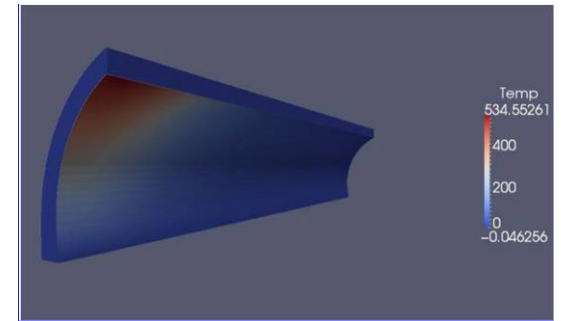
Riduzione dei modelli

allenare un modello semplificato su dati di simulazione del modello completo

POD

PGD

$$u(\mathbf{x}, t, k) \approx \sum_{i=1}^N X_i(\mathbf{x}) \cdot T_i(t) \cdot K_i(k).$$



Reduced Basis Models

-
-

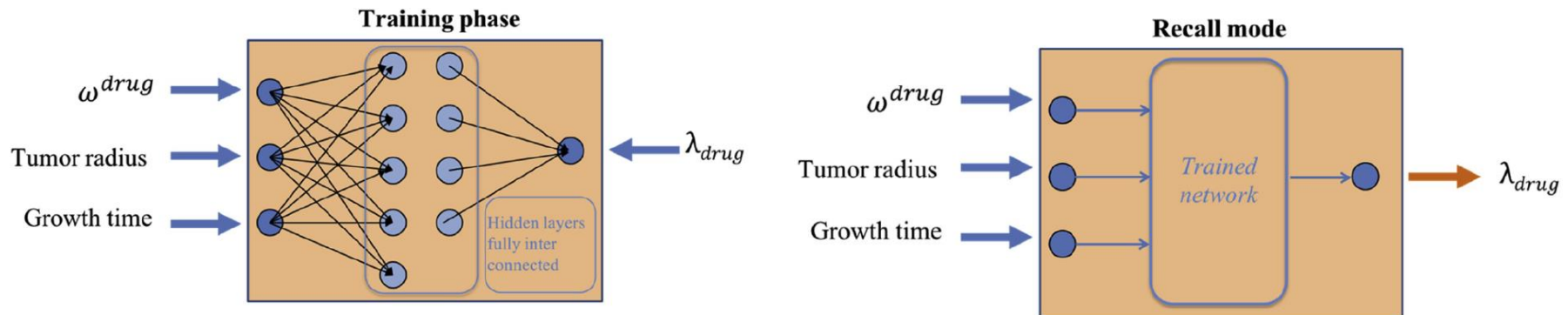
Chinesta et al. (2013)

Utilizzo dell'intelligenza artificiale, reti neurali

Le reti neurali artificiali (ANN) sono modelli computazionali che utilizzano algoritmi di apprendimento che imitano l'attività cerebrale di un cervello semplificato per elaborare e memorizzare informazioni

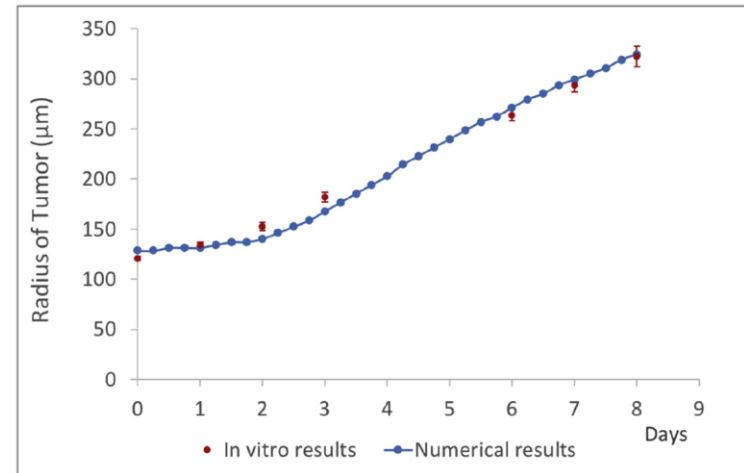
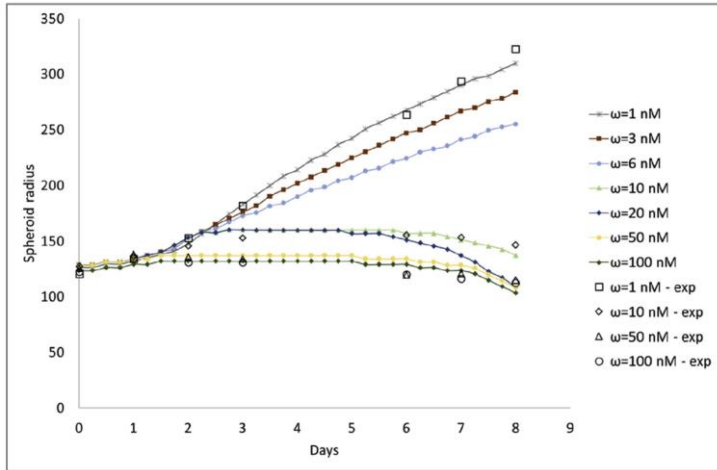
Sono ottimali per interpolare all'interno del campo del loro apprendimento; per previsioni ci vogliono almeno le PINN

Utilizzo dell'intelligenza artificiale, reti neurali

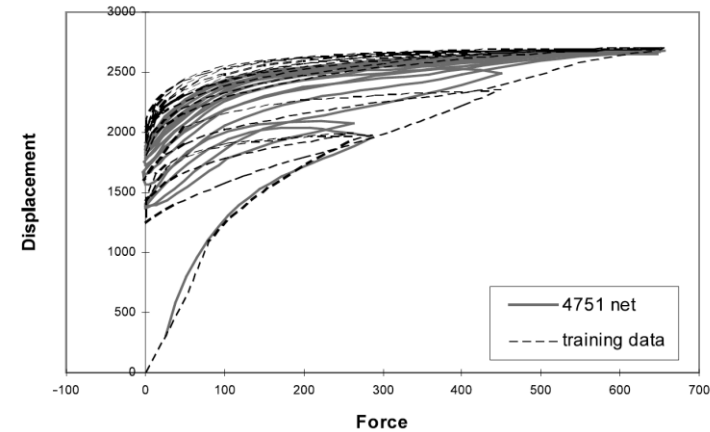
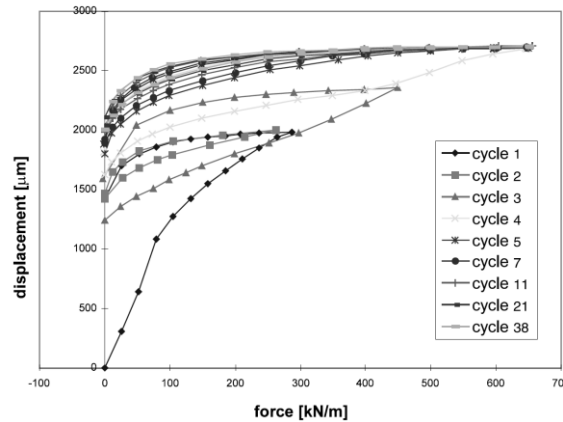
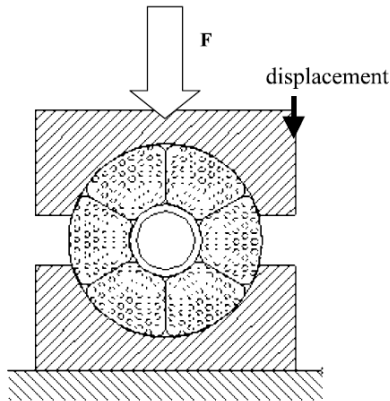


Deep learning; PINN

Relazioni costitutive.



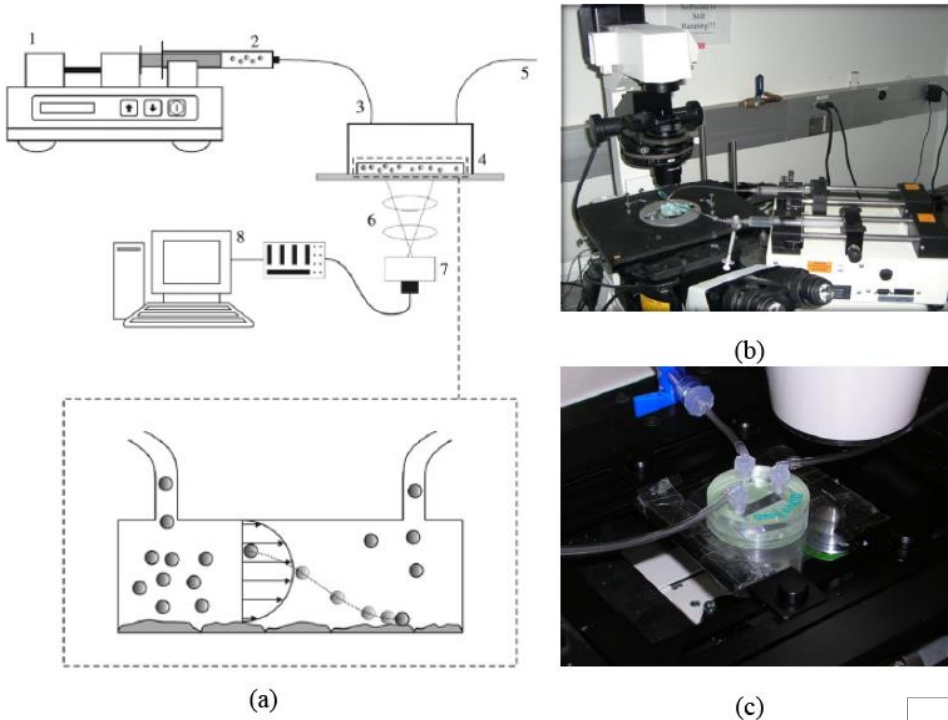
Uccisione delle cellule tumorali con il farmaco DOCETAXEL Boso et al. (2020)



relazione costitutiva per cavo superconduttore sotto carico ciclico trasversale (black box).

Lefik and Schrefler, 2001

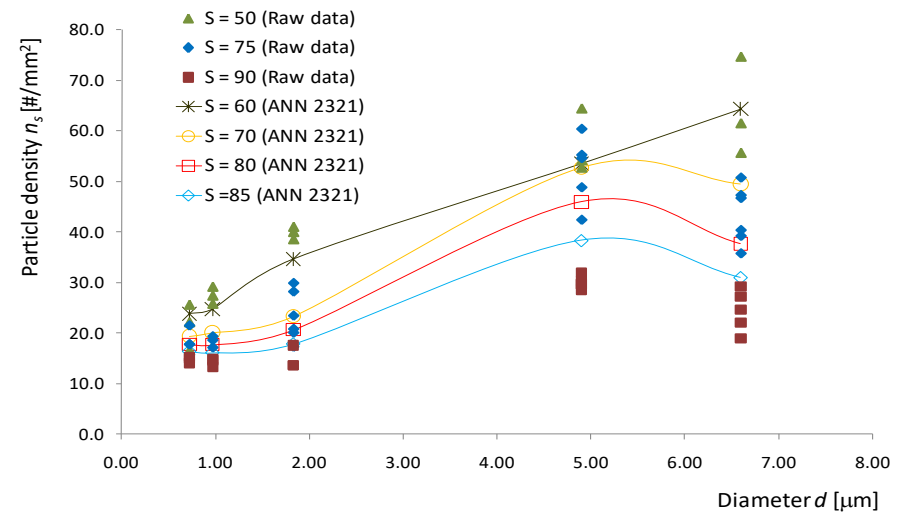
Diametro ottimale delle NP per l'adesione all'endotelio



camera di flusso a piastre parallele, utilizzata per gli esperimenti di adesione in vitro

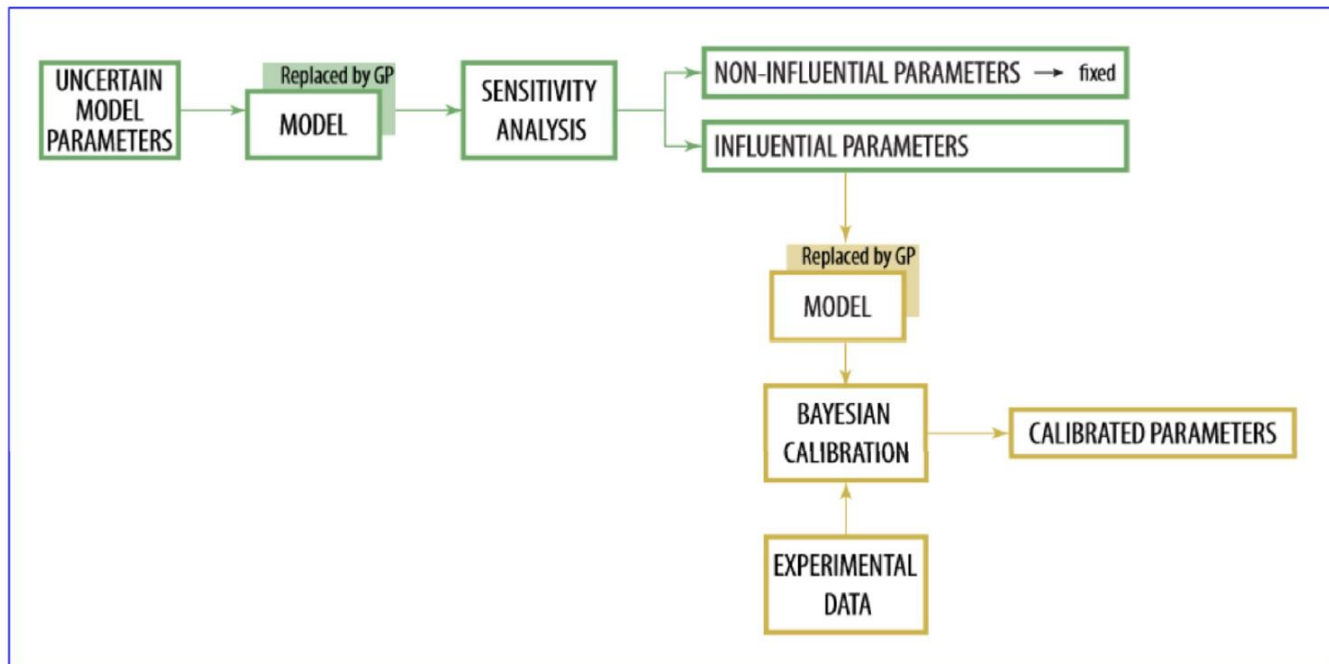
relazione $n_s(d)$ come prevista da ANN2321 per velocità di taglio S non testata negli esperimenti.

Boso et al, 2011

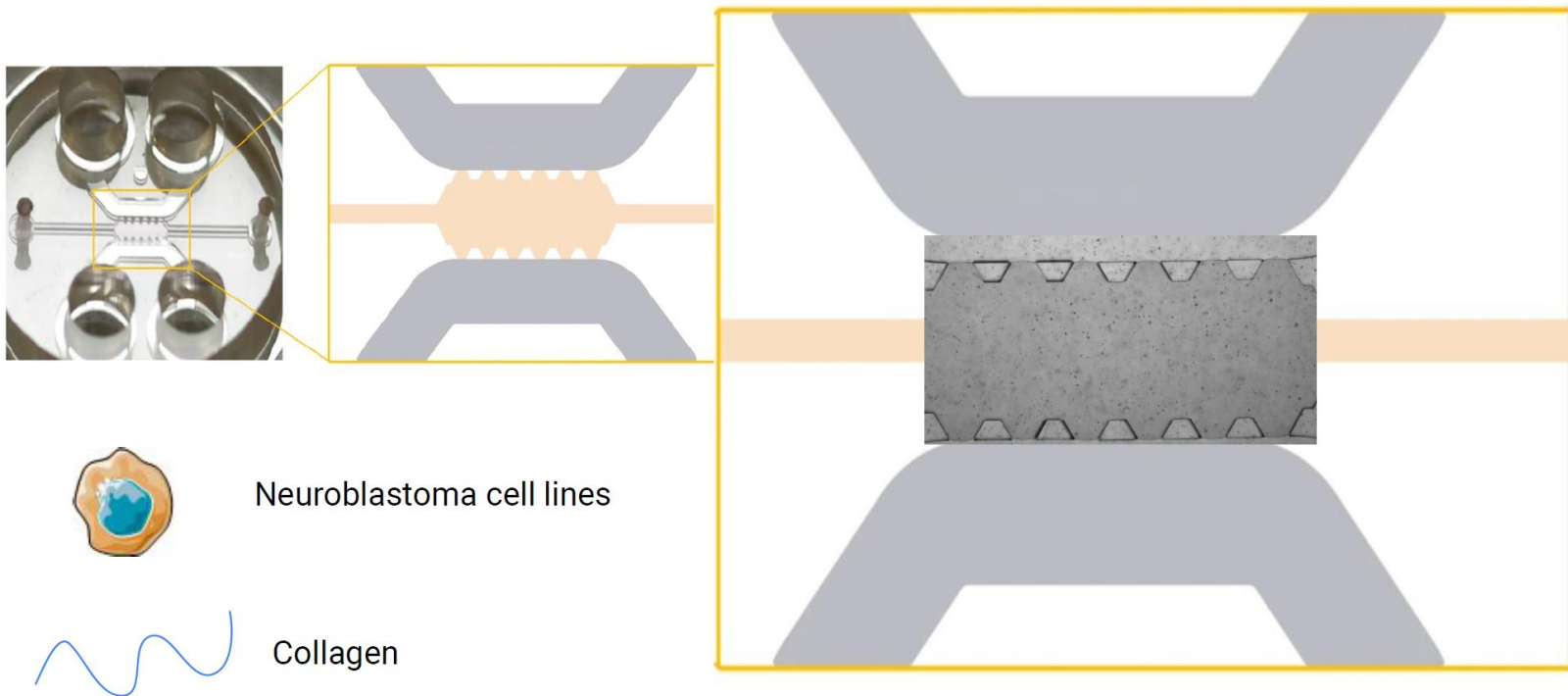


Simulazioni predittive o scenari

- Modelli basati su leggi della fisica
- Analisi della sensitività
- Quantificazione dell'incertezza

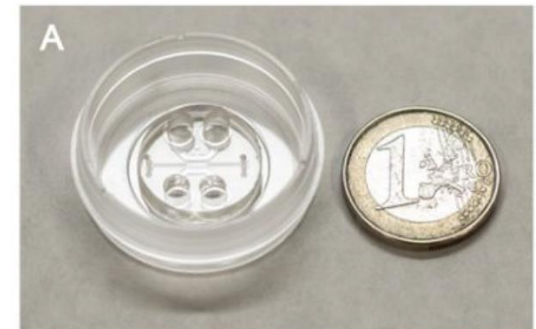


Esperimenti - microfluidica



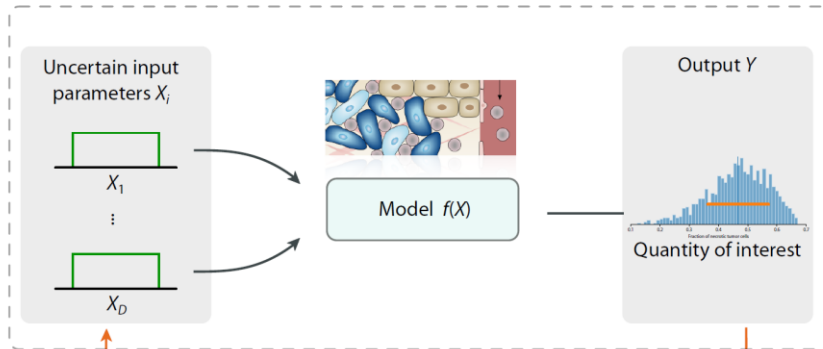
Calibrazione del modello numerico
con approccio Bayesiano

21 parametri per il modello



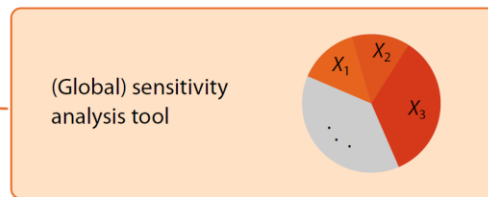
Analisi della sensitività

Uncertainty quantification (UQ)



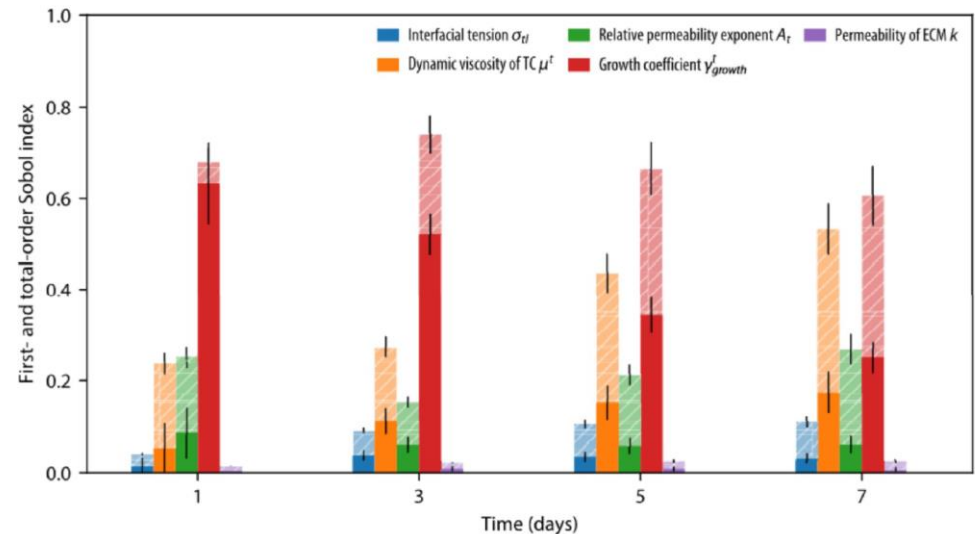
L'analisi della sensitività indica quali dati dell'input meritano la maggior attenzione

Sensitivity analysis (SA)

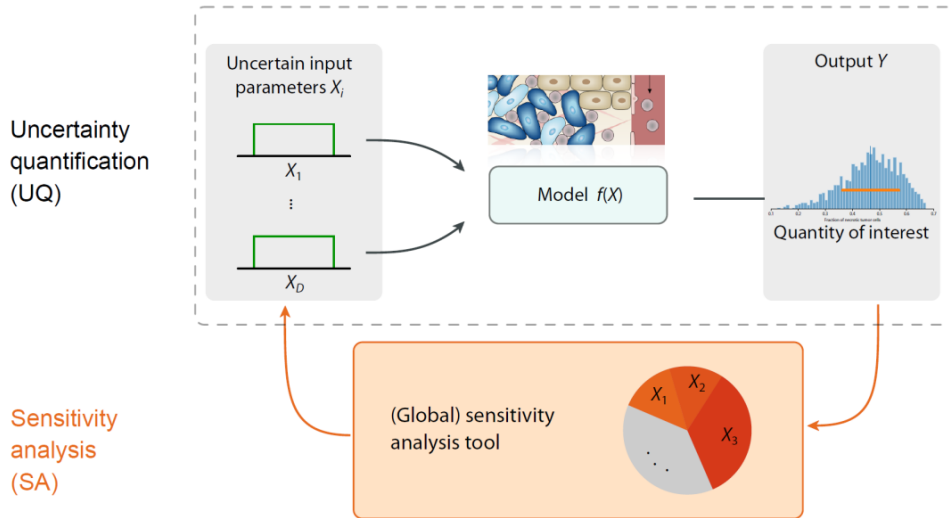


Indici di Sobol
Analisi globale, esplora l'intero spazio di input dei parametri incerti

13 parametri -> 5



Quantificazione dell'incertezza

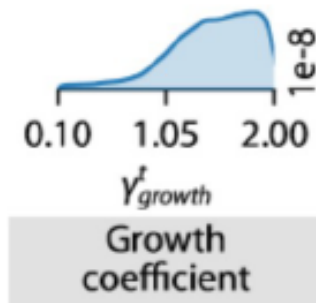


La quantificazione dell'incertezza permette di attribuire l'incertezza dell'output alle diverse fonti di incertezza dell'input

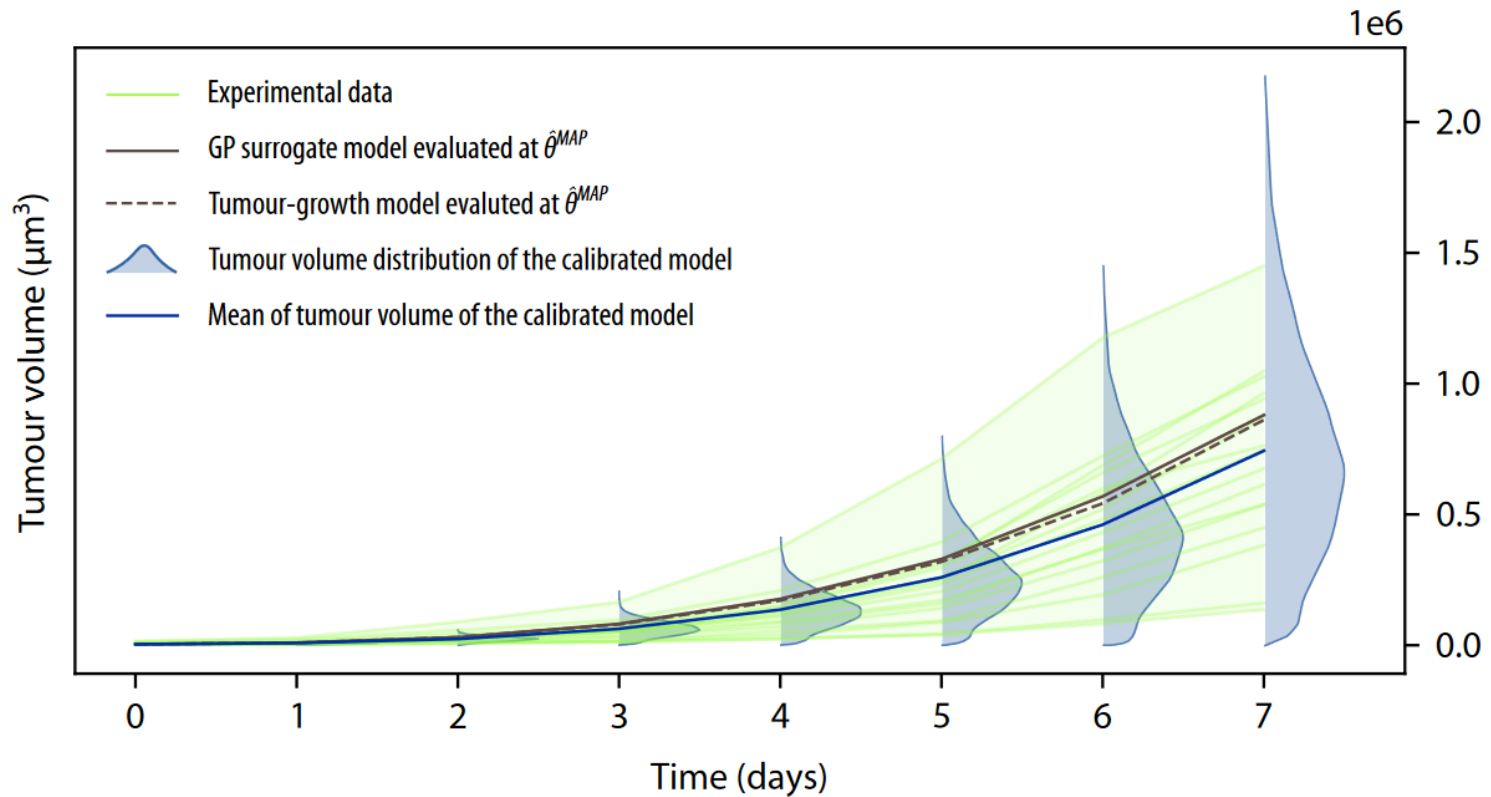
Approccio Bayesiano

$$p(\boldsymbol{\theta} | \mathbf{y}_{\text{obs}}) \propto p(\mathbf{y}_{\text{obs}} | \mathbf{f}(\boldsymbol{\theta}))p(\boldsymbol{\theta})$$

Analisi inversa riesce a dedurre i parametri dell'input dalla risposta osservata



Quantificazione dell'incertezza



$$\hat{\theta}^{MAP} = \begin{bmatrix} \sigma_{tl} \\ \mu^t \\ A_t \\ k \\ \gamma_{\text{growth}}^t \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 49.898 \text{ mN/m} \\ 706.56 \text{ Pa s} \\ 2.5259 \\ 0.8201 \times 10^{-9} \text{ mm}^2 \\ 1.7919 \times 10^{-8} \text{ g}/(\text{mm}^3 \text{ s}) \end{bmatrix}.$$

Conclusioni

- Il progresso delle scienze computazionali negli ultimi 60 anni è stato impressionante ed ha avuto un enorme impatto sull'evoluzione degli studi scientifici
- Interesse prevalente, oggi, è poter fare previsioni (scenari) attendibili; per questo concetti e principi della scienza computazionale predittiva sono elementi imprescindibili
- L'approccio Bayesiano, basato su analisi della sensibilità e quantificazione dell'incertezza è da ritenersi via prioritaria per il raggiungimento di questi obiettivi

