Rend. Sem. Mat. Univ. Pol. Torino - Vol. 66, 3 (2008)
Lezioni Lagrangiane 2007–2008

A. Quarteroni

MODELLI MATEMATICI, CALCOLO SCIENTIFICO E APPLICAZIONI

Sommario. In questa nota considero il ruolo della modellistica matematica e del calcolo scientifico nelle scienze applicate, la loro rilevanza come strumenti di simulazione, indagine e supporto alle decisioni, il loro contributo all'innovazione. Citerò alcuni risultati conseguiti e le prospettive che si aprono in svariati settori quali l'industria, le scienze della vita e lo sport.

1. Introduzione

La modellistica matematica si propone di descrivere, ovviamente in termini matematici, i molteplici aspetti del mondo reale, la loro interazione e la loro dinamica. Essa oggi rappresenta la terza colonna nelle scienze e nell'ingegneria, accanto alle due più tradizionali costituite dall'analisi teorica e dall'analisi sperimentale. La sua crescente diffusione in svariati settori (l'innovazione tecnologica, l'ambiente, le scienze economiche e sociali, le scienze della vita) è favorita anche dallo sviluppo impetuoso del calcolo scientifico, quella disciplina che consente di tradurre un modello matematico in algoritmi che possono venire trattati e risolti da calcolatori di potenza sempre più elevata. Uno schema illustrativo è riportato in Figura 1. Il passaggio dalla soluzione reale a quella fornita dal calcolatore si estrinseca attraverso diversi processi semplificativi, ognuno dei quali inevitabilmente introduce errori. Basti pensare che un modello matematico, per quanto complesso e raffinato sia, non potrà che basarsi su semplificazioni della realtà. Inoltre, essendo la soluzione esatta del problema matematico quasi mai conosciuta in forma chiusa, si dovrà ricorrere ad una discretizzazione del modello, ovvero ad una sua approssimazione in dimensione finita (ad esempio attraverso processi di proiezione su sottospazi, accompagnati da approssimazioni degli operatori differenziali e/o integrali che intervengono nel modello). Infine, lo stesso calcolatore, dovendo operare in aritmetica finita, introdurrà errori di rappresentazione ed ulteriori errori ogni qualvolta un'operazione algebrica viene effettuata. Uno degli obiettivi dei matematici è assicurare che tutti questi errori siano tenuti sotto controllo, in modo da garantire che la soluzione calcolata fornisca una rappresentazione sufficientemente accurata della soluzione del reale problema da cui si è partiti. I concetti di consistenza, stabilità, convergenza, validazione e verifica, sono i presupposti di questa analisi. Il lettore interessato a saperne di più e ad una definizione precisa di questi concetti può consultare, per esempio, [8], [9], [1], e le referenze ivi contenute. Una descrizione illustrativa del ruolo che questi concetti giocano nel processo globale è riportata in Figura 2.

Sin dall'inizio degli anni '60, l'analisi numerica, ovvero la disciplina che consente la risoluzione di equazioni matematiche (algebriche, funzionali, differenziali ed integrali) attraverso algoritmi, ha avuto un ruolo guida nella risoluzione di problemi

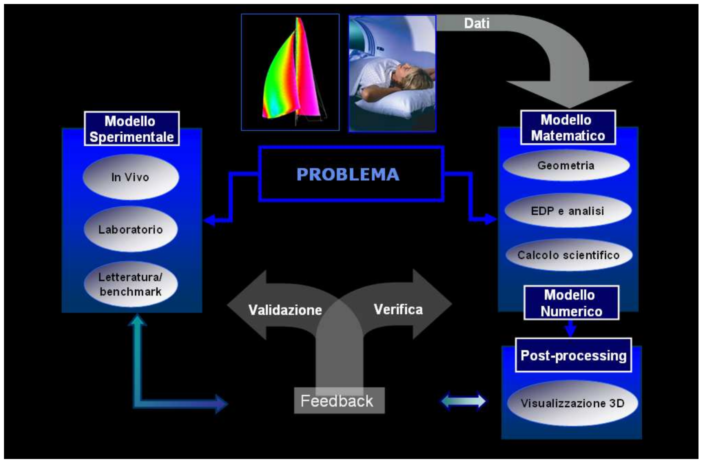

Figura 1: rappresentazione schematica del processo di studio di un problema.

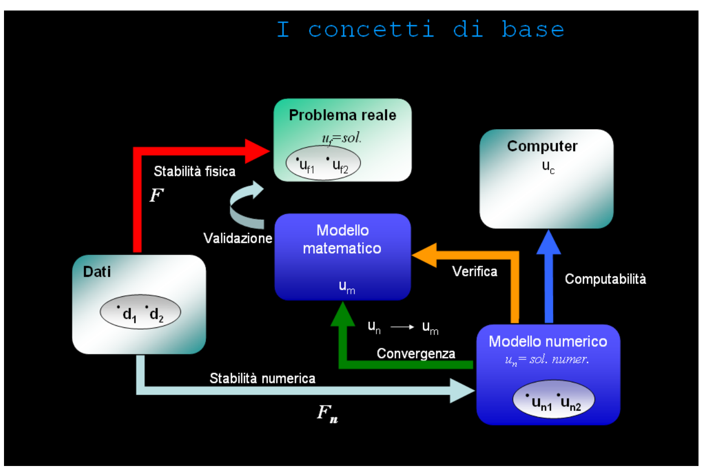

Figura 2: alcuni concetti–chiave della modellistica e del calcolo scientifico.

associati a modelli matematici derivanti dall'ingegneria e dalle scienze applicate.

Sulla scia di questo successo, nuove discipline si sono aperte all'uso della modellistica matematica, quali ad esempio la tecnologia dell'informazione e della comunicazione, la bioingegneria, l'ingegneria finanziaria. Oggi possiamo riferirci più in generale al calcolo scientifico, una disciplina che ricomprende l'analisi numerica e che ha lo scopo di approssimare un modello matematico, costruire algoritmi efficienti di risoluzione, fornire un'analisi degli errori che si introducono, mettere in atto processi di confronto con la soluzione reale e di miglioramento iterativo attraverso processi adattivi. Si veda ad esempio [8]. L'obiettivo ultimo del calcolo scientifico è dunque quello di realizzare modelli versatili e affidabili, accurati entro soglie 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 simulino realtà molto complesse dovrebbero anche tener conto dell'incertezza che deriva da insufficiente disponibilità dei dati che alimentano il modello stesso. Essi saranno usati per prevedere processi naturali, biologici, ambientali, per comprendere meglio la fisica di fenomeni complessi e contribuire alla progettazione di prodotti e tecnologie innovative.

In questa nota mostrerò alcuni esempi di applicazioni in contesti quali l'innovazione tecnologica, la medicina, lo sport da competizione. Non indugerò su alcun dettaglio tecnico, per questi il lettore interessato può consultare le indicazioni in bibliografia. In particolare [4], [5] e [6] per la medicina e [2] per lo sport da competizione. Mi propongo invece di fornire una idea, assai parziale ma spero sufficientemente significativa, del potenziale che oggi i modelli matematici e il calcolo scientifico offrono per trattare le complessità.

2. Calcolo scientifico e innovazione

Un aspetto importante nel calcolo scientifico è rappresentato dalla cosiddetta fluidodinamica computazionale (in inglese CFD), la disciplina che mira a risolvere al calcolatore i problemi governati da fluidi. Oggi la CFD non viene usata solo per comprendere meglio la fisica dei fluidi, ma anche per fornire un contributo irrinunciabile alla progettazione in numerosi ambiti industriali. Lo scopo 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 assicura un vantaggio potenziale alle aziende, consentendo loro di ridurre i costi ricorrendo sempre di meno alle onerose prove nella galleria del vento o nel bacino di carena, ma anche risparmiando tempo prezioso nella fase di sviluppo.

Nel settore aerospaziale, la CFD trova numerosissime applicazioni. Ad esempio si usano modelli numerici basati sulle equazioni del flusso a potenziale, oppure su quelle più sofisticate di Eulero o di Navier-Stokes, per l'analisi aerodinamica dei profili alari o dell'intera fusoliera (un esempio di simulazione è riportato in Figura 3), per migliorare le prestazioni (riducendo la resistenza al moto), ma anche per incrementare la sicurezza, o ridurre l'inquinamento atmosferico e acustico. La simulazione si accompagna spesso al controllo e all'ottimizzazione, con l'obiettivo di progettare dispositivi

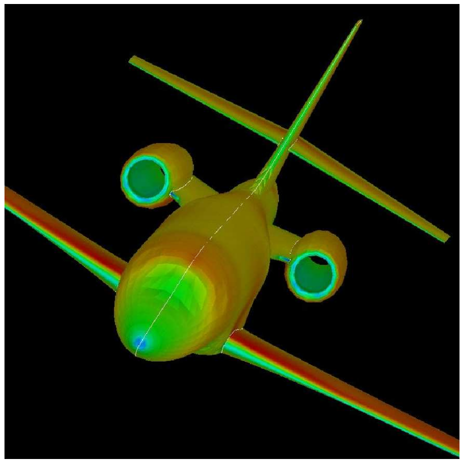

Figura 3: modulo della velocità sulla superficie di un aereo commerciale.

o aerei che soddisfino criteri prestabiliti: maggiore affidabilità strutturale, migliore performance aerodinamica, minor impatto ambientale grazie alla riduzione di emissioni di rumore nel caso di aerei commerciali, massimizzazione della velocità e miglioramento della manovrabilità nel caso di aerei militari. L'EU ha dato come indicazione operativa all'industrie aeronautiche che operano sul teatro europeo di ridurre del 50% entro il 2020 l'emissione di CO2, il rumore e i costi di produzione. L'Airbus dovrebbe incrementare l'uso della CFD per poter effettuare entro il 2020 la simulazione in tempo reale delle manovre per un aereo completo in volo, risolvendo il campo di moto con le equazioni di Navier-Stokes non stazionarie.

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 allo scopo di consumare meno carburante, migliorare la qualità delle emissioni, ridurre il rumore. 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 di un air-bag), della meccanica delle strutture in regime di grandi sforzi e grandi deformazioni (per simulare le conseguenze dovute ad impatti).

Nell'industria elettronica la simulazione delle equazioni di deriva-diffusione, idrodinamiche, di Boltzmann o di Schroedinger, costituisce uno strumento decisivo 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).

3. Modelli per il tempo

Da sempre l'uomo ha coltivato l'ambizione di prevedere il tempo che farà. Il problema della previsione meteorologica a breve scala (giornaliera o settimanale), di enorme rilevanza pratica, negli ultimi decenni si è venuto collegando in modo sempre più stretto ai problemi della previsione su grande scala, ovvero la previsione dell'evoluzione del clima oppure dei livelli di inquinamento atmosferico per i prossimi decenni o, addirittura, per un intero secolo.

Il problema della previsione meteorologica è stato formulato compiutamente come problema matematico solo all'inizio del XX secolo ad opera del matematico norvegese Vilhelm Bjerknes, il quale descrisse il moto dell'atmosfera utilizzando le già ben note (all'epoca) equazioni di Eulero per la dinamica di un gas perfetto, opportunamente modificate per tener conto dell'azione della forza di gravità e del moto di rotazione terrestre.

Purtroppo, i dati relativi allo stato dell'atmosfera erano disponibili in un numero relativamente limitato di punti e si riferivano a variabili spesso eterogenee e ad istanti di tempo diversi. Inoltre, le equazioni di Eulero descrivono una amplissima gamma di moti dell'atmosfera, che possono avere luogo su scale spaziali e temporali diverse tra loro di molti ordini di grandezza (centimetri piuttosto che chilometri, secondi piuttosto che giorni). L'assenza di dati relativi ad alcune di queste scale può portare alla generazione di moti spuri (che non esistono in natura) e al deterioramento della qualità delle previsioni. Infine, una descrizione realistica dei fenomeni meteorologici non può ovviamente prescindere dalla previsione della distribuzione del vapore acqueo, dei suoi cambiamenti di fase (da liquido a gassoso) e delle conseguenti precipitazioni.

Il primo tentativo di affrontare il problema della risoluzione numerica effettiva delle equazioni del moto fu esperito dallo scienziato britannico Lewis Richardson, il cui sforzo pionieristico culminò nel 1922 con il primo esempio di calcolo concreto della soluzione delle equazioni del moto atmosferico su una regione vasta quanto l'intera Europa occidentale. I risultati ottenuti da Richardson portarono in realtà a previsioni totalmente errate, mancando in quegli anni una teoria adatta a dominare le insidie delle equazioni da risolvere. Per condurre a buon fine il progetto di Richardson fu decisivo il contributo del suo allievo Carl-Gustaf Rossby. Grazie ad un modello semplificato che descriveva l'atmosfera come un unico strato di fluido uniforme fu possibile effettuare la prima previsione meteorologica sull'intero Nord-America con un calcolatore elettronico. Ciò ha posto le basi per il moderno approccio alla previsione meteorologica numerica. In effetti, oltre allo spettacolare aumento delle prestazioni dei computer, vi sono stati miglioramenti radicali nell'accuratezza degli strumenti matematici di previsione, lo sviluppo di una teoria della predicibilità dei sistemi dinamici caotici, il miglioramento delle tecniche di assimilazione dati. Inoltre, a partire dagli anni Sessanta alle stazioni di rilevamento a terra si è aggiunto l'uso sistematico dei rilevamenti effettuati dai satelliti, che costituiscono ormai la parte più rilevante dei dati utilizzati per l'inizializzazione di modelli numerici. Da allora, l'impatto dei progressi scientifici e tecnologici è stato notevolissimo. Ad esempio il modello globale IFS dello European Centre for Medium range Weather Forecast (ECMWF) consente di effettuare in

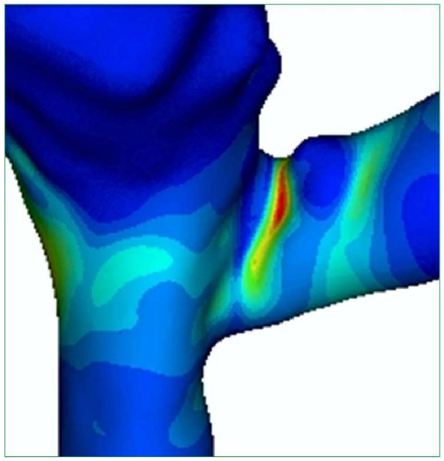

Figura 4: simulazione dello shear stress su un'arteria polmonare di un bambino affetto da Tetralogia di Fallot.

modo affidabile la previsione meteorologica per circa 7.5 giorni su scala continentale europea, assai di più dei 5 giorni che erano possibili nel 1990.

4. Modelli in medicina

Durante gli anni Settanta, gli esperimenti in vitro o quelli su animali rappresentavano la modalità principale degli studi cardiovascolari. Recentemente, il progredire della fluidodinamica computazionale, così come dei netti miglioramenti nelle prestazioni informatiche, hanno prodotto significativi passi in avanti che promettono di rivoluzionare la ricerca vascolare. Grandezze fisiche come lo shear stress (ovvero lo sforzo tangente) sulla membrana endoteliale, assai problematiche da misurarsi in vitro, possono essere calcolate su geometrie reali ottenute con algoritmi di ricostruzione tridimensionale grazie al supporto delle moderne tecniche di acquisizione dei dati (ad esempio, la risonanza magnetica nucleare, l'angiografia digitale, la tomografia computerizzata, l'anemometria doppler). Si veda per un esempio la Figura 4.

Essendo le pareti delle arterie deformabili, la simulazione dell'interazione fra sangue e parete vascolare richiede algoritmi che descrivano sia il trasferimento di energia a livello macroscopico tra il fluido (modellato tipicamente dalle equazioni di Navier-Stokes) e la parete (modellata dalle equazioni della meccanica dei solidi), sia l'influenza a livello microscopico dello shear stress sull'orientamento, la deformazione e il danneggiamento delle cellule endoteliali. Nel contempo, le equazioni del flusso dovrebbero essere abbinate a modelli appropriati per descrivere il trasporto, la diffusione e l'assorbimento delle componenti chimiche presenti nel sangue (come ad esempio ossigeno, lipidi, farmaci) nei diversi strati che compongono la parete delle arterie: l'in-

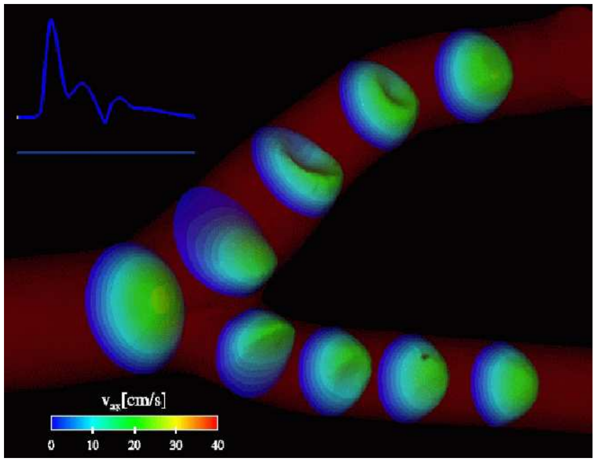

Figura 5: simulazione del campo di velocità in una carotide.

tima, la media e l'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.

Fenomeni come la separazione del flusso, la generazione di moti circolatori secondari a valle di biforcazioni (per esempio quella carotidea nei suoi rami interno ed esterno, si veda per un esempio la Figura 5) ma anche in presenza di vasi a grande curvatura (come l'arco aortico o le coronarie) e a valle di regioni con restrizioni, dovute alla presenza di stenosi, nonché la presenza di aree a shear stress basso o temporalmente oscillante, sono circostanze riconosciute oggi quali potenziali fattori di rischio nello sviluppo di patologie arteriose. Peraltro, una comprensione dettagliata del cambiamento emodinamico locale, degli effetti della modificazione delle pareti vascolari sul flusso ematico, del graduale adattamento nel medio-lungo periodo del sistema globale a seguito di interventi chirurgici, è oggi possibile grazie all'uso di raffinate simulazioni al computer e potrebbe rilevarsi estremamente utile nella fase preliminare alla realizzazione di un trattamento terapeutico e/o chirurgico. Una prospettiva simile potrebbe fornire specifiche indicazioni quanto al design di procedure chirurgiche. Simulare il flusso in un bypass coronarico, in particolare la ricircolazione che si determina a valle del re-innesto nella coronaria, può contribuire alla comprensione degli effetti della morfologia delle arterie sul flusso e quindi all'evoluzione post-chirurgica. 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 progredire grazie a simulazioni sufficientemente accurate del campo di flusso del sangue.

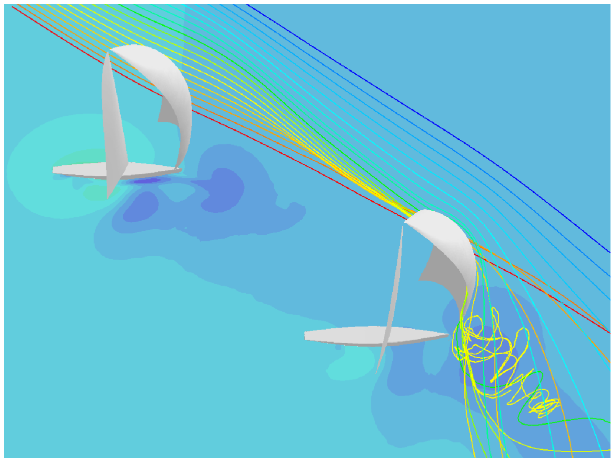

Figura 6: linee di flusso dell'aria tra due barche a vela.

5. Modelli in Coppa America

L'applicazione dei modelli matematici non si limita all'ambito tecnologico, ambientale e a quello medio. Nello sport da competizione, per esempio, la CFD ha assunto da alcuni anni un ruolo determinante nella fase di progettazione ed analisi delle prestazioni delle automobili di Formula Uno, ma anche nella progettazione di scafi per gli sport acquatici o nel design di nuovi costumi per il nuoto. Un altro ambito, sul quale intendo soffermarmi, è quello della Coppa America di Vela, il trofeo sportivo più antico del mondo. La prima edizione, denominata Coppa delle Cento Ghinee, si tenne nel lontano 1851 e venne vinta da un'imbarcazione statunitense di nome "America". Da allora in poi la Coppa ha preso il nome della prima barca vincitrice. Le due ultime edizioni, conclusesi nel marzo 2003 e nel luglio 2007, sono state entrambe vinte dell'imbarcazione svizzera "Alinghi". Sino a una ventina di anni fa, le diverse squadre di progettisti sviluppavano forme assai diversificate di vele, scafi, bulbi e chiglie. Oggi le varie forme geometriche hanno raggiunto una standardizzazione piuttosto uniforme e anche i più piccoli dettagli possono fare la differenza in termini di risultati. Nella speranza di ottimizzarne le prestazioni si devono risolvere le equazioni della dinamica dei fluidi intorno all'intera barca, tenendo conto della variabilità di venti e onde, dei diversi regimi di regata (di poppa piuttosto che di bolina), della posizione e del movimento della barca avversaria. Si veda la Figura 6 per un esempio di simulazione dell'interazione aerodinamica fra due barche in regime di moto di poppa. Ma va considerata anche la dinamica dell'interazione fra i fluidi presenti (aria e acqua) e le componenti strutturali (scafo, appendici immerse, vele e albero). Infine, va modellata con grande accuratezza la forma e il moto della cosiddetta superficie libera, ovvero dell'interfaccia di separazione fra acqua e aria. Si veda la Figura 7 per un esempio di simulazione di superficie libera intorno allo scafo.

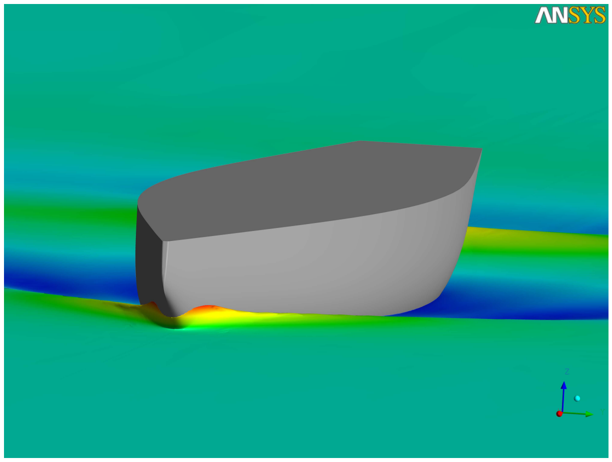

Figura 7: simulazione della superficie libera intorno allo scafo.

Idealmente, un modello completo dovrebbe essere in grado di riprodurre diversi aspetti fisici del problema in oggetto. Da un lato, dovrebbe tenere conto degli effetti dovuti alla viscosità dell'acqua, della transizione tra flusso laminare e flusso turbolento, delle scie turbolente generate dall'interazione del flusso con le parti immerse, della forma dell'onda che si genera sullo scafo. D'altro lato, dovrebbe saper calcolare le deformazioni strutturali che sono assai significative per via dei carichi estremi agenti sullo scafo, sull'albero e, soprattutto, sulle vele. L'obbiettivo è quello di sviluppare con i progettisti le forme "ottimali" per lo scafo, la chiglia, il bulbo e le alette. Occorre minimizzare la resistenza sott'acqua e massimizzare la spinta indotta dalle vele. La matematica consente di simulare in laboratorio le diverse situazioni, abbattendo drasticamente costi e tempi necessari a costruire un numero elevato di prototipi da provare in bacini artificiali o nella galleria del vento. Per ogni nuova configurazione proposta dai progettisti (alla fine sarebbero state diverse centinaia) 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 zone di flusso laminare e quelle di flusso turbolento; generare di conseguenza quella volumetrica nel dominio esterno. Si veda per un particolare la Figura 8. A questo punto si devono risolvere le equazioni di Navier-Stokes che modellano l'accoppiamento fra moto dell'aria, quello dell'acqua e la conseguente superficie libera, a loro volta completate da equazioni addizionali costituenti i modelli per il calcolo dell'energia turbolenta e del suo tasso di dissipazione. La discretizzazione di tali equazioni è basato su tecniche ibride a elementi finiti e volumi finiti. Il calcolo tipico ha richiesto la risoluzione di problemi non lineari con diverse decine di milioni di incognite. Facendo massiccio ricorso ad algoritmi paralleli (si veda ad esempio [10]), servono fino a 24 ore di tempo dedicato su piattaforme di calcolo parallele a 64 processori per effettuare la simulazione di

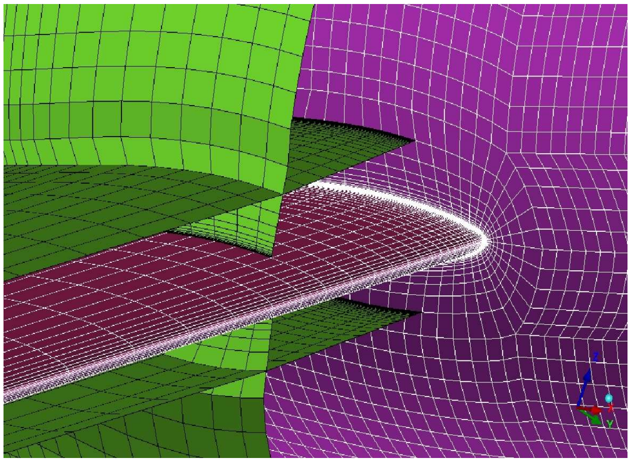

Figura 8: Un particolare della griglia di calcolo in prossimità della giunzione fra bulbo e alette

punta caratterizzata da oltre 160 milioni di incognite. Le immagini delle figure 9 e 10 mostrano un particolare delle simulazioni idrodinamiche e aerodinamiche.

In conclusione è interessante osservare come quello della competizione sportiva rappresenti un teatro ideale capace di fare apprezzare il grande potenziale che la modellistica matematica e la simulazione numerica offrono per vincere le sfide che la vita di ogni giorno pone in svariati ambiti delle scienze applicate e dell'innovazione tecnologica.

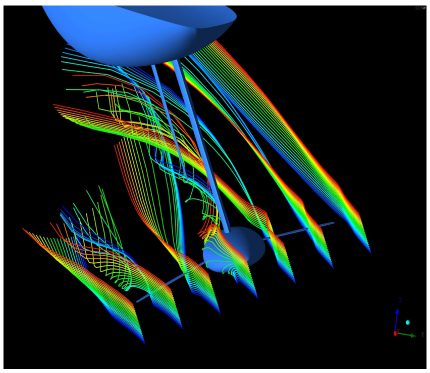

Figura 9: simulazione delle linee di flusso e della velocità del fluido intorno alle appendici.

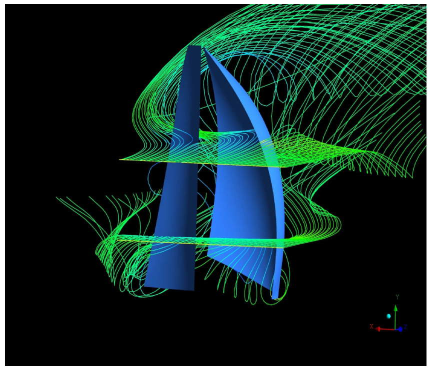

Figura 10: simulazione del campo di moto intorno alle vele nel moto di poppa.

Ringraziamenti. Si ringraziano M.Sala, J.Wynne, M.Prosi, D. Detomi, N.Parolini e M.Sawley per le simulazioni numeriche usate in questo articolo.

Riferimenti bibliografici

[1] BABUSKA I., NOBILE F. AND TEMPONE R., *Reliability of computational science*, Num. Methods for PDEs **23/4** (2007), 753–784.

[2] PAROLINI N. AND QUARTERONI A., *Mathematical models and numerical simulations for the America's Cup*, Comp. Meth. Appl. Mech. Engng. **194** (9-11) (2005), 1001–1026.

[3] QUARTERONI A., *Modellistica numerica per problemi differenziali*, terza edizione, Springer-Verlag Italia, Milano 2006.

[4] QUARTERONI A., *Modeling the cardiovascular system – A mathematical adventure*, SIAM News **34** (5) (2001) (prima parte) e SIAM News **34** (6) (2001) (seconda parte).

[5] QUARTERONI A. AND FORMAGGIA L., *Mathematical modelling and numerical simulation of the cardiovascular system*, in: "Modelling of Living Systems", Handbook of Numerical Analysis Series, (Eds. Ciarlet P.G and Lions J.L.), Elsevier, Amsterdam 2004, 1–101.

[6] *Complex systems in biomedicine*, (Eds. Quarteroni A., Formaggia L. and Veneziani A.), Springer, Milano 2006.

[7] QUARTERONI A. AND SALERI F., *Scientific computing with MATLAB and Octave*, Springer-Verlag, Heidelberg 2006

[8] QUARTERONI A. AND SALERI F., *Introduzione al calcolo scientifico*, terza edizione, Springer-Verlag Italia, Milano 2006.

[9] QUARTERONI A., SACCO R. AND SALERI F., *Matematica numerica*, terza edizione, Springer-Verlag Italia, Milano 2008.

[10] QUARTERONI A. AND VALLI A., *Domain decomposition methods for partial differential equations*, Oxford University Press, Oxford 1999.

AMS Subject Classification: 35Q30, 65M50, 65M60, 76D05, 76T10.

Alfio QUARTERONI MOX, Politecnico di Milano via Bonardi 9, 20133 Milano, ITALIA
e Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne CMCS, Av. Piccard, Bat. MA, Sec. C2, Station 8, CH-1015 Lausanne, SVIZZERA
e-mail: `alfio.quarteroni@polimi.it, Alfio.Quarteroni@epfl.ch`