

The background of the slide features the official seal of the University of Brescia. The seal is circular and rendered in a light blue color. It contains a detailed illustration of a cityscape with various buildings, a central dome, and a tower. The Latin text "UNIVERSITAS · STUDIORUM · BRESCIAE" is inscribed around the perimeter of the seal.

Quando la Fisica Incontra la Chimica: Simulare per Innovare

Prof. Maria Antonietta Vincenti

Dipartimento di Ingegneria dell'Informazione – Università degli Studi di Brescia

25 Febbraio 2025

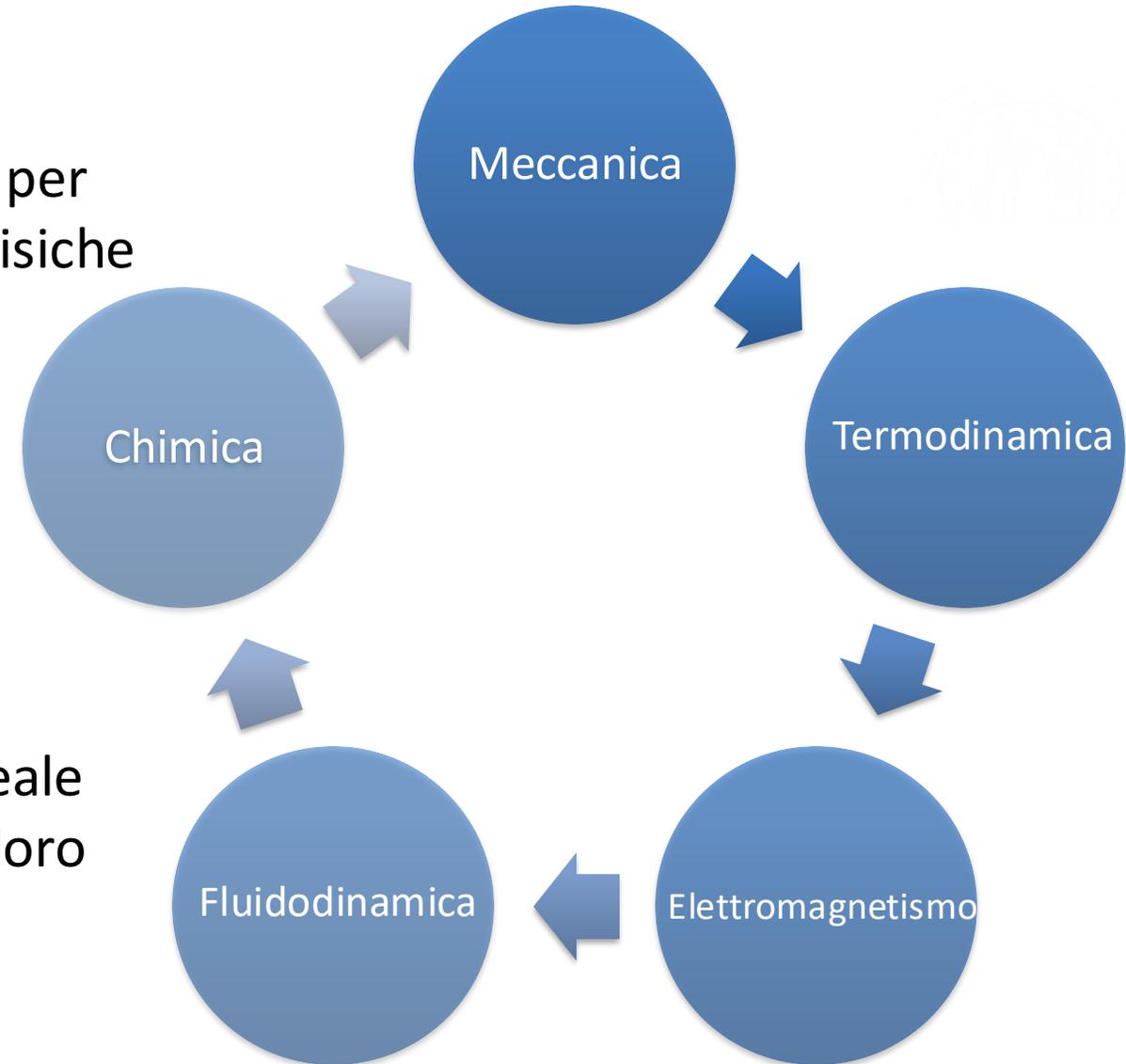
- I modelli multifisici
- Vantaggi e svantaggi
- Esempi di applicazione
- Uso di modelli multifisici per l'ottimizzazione del processo di estrazione di metalli

I modelli multifisici

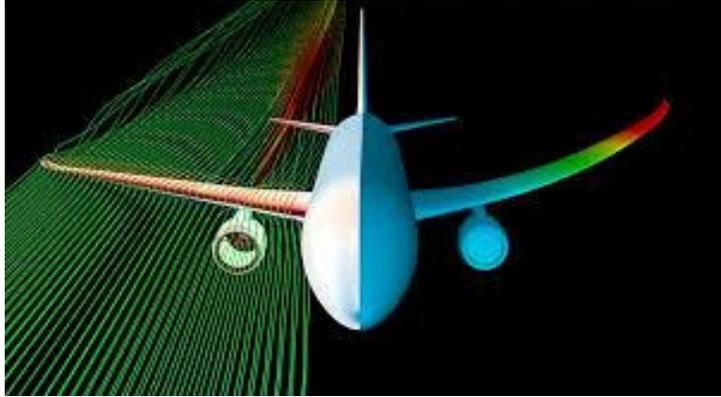
Strumenti matematici e computazionali utilizzati per simulare fenomeni che coinvolgono più discipline fisiche contemporaneamente



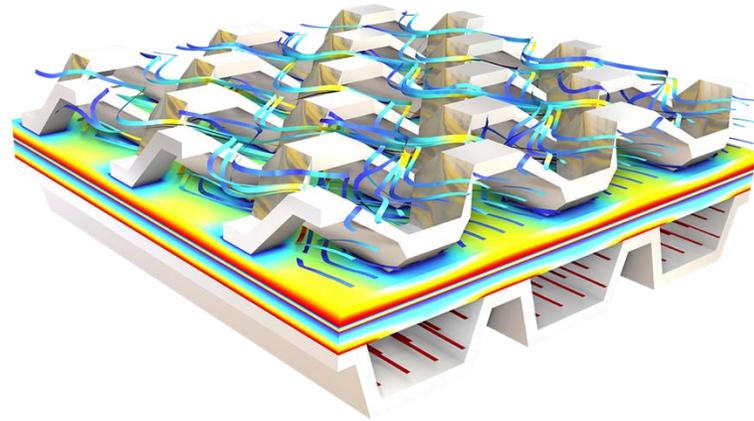
Consentono di descrivere problemi del mondo reale dove diverse forze e fenomeni interagiscono tra loro



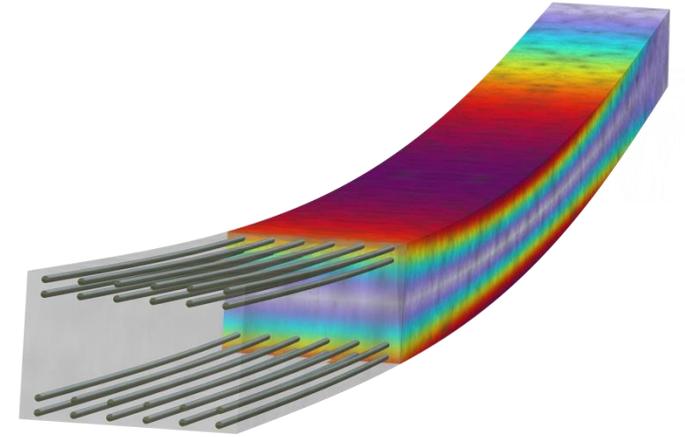
I modelli multifisici



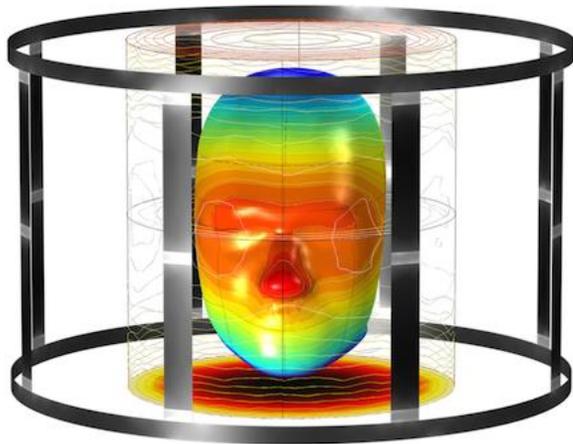
Ingegneria



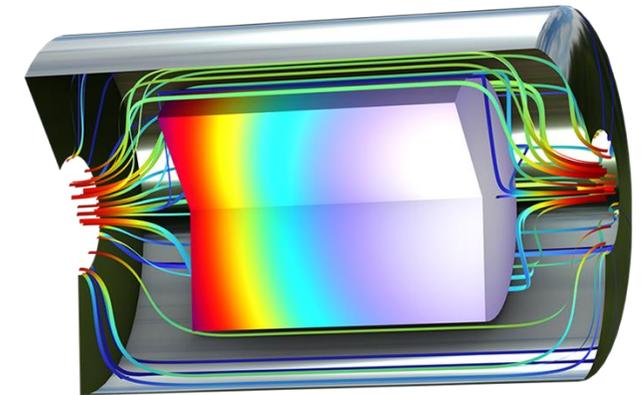
Elettronica



Geomeccanica



Medicina



Scienza dei materiali

1. Definizione del problema

- Identificare le fisiche coinvolte (es. elettromagnetismo, termico, chimico).
- Stabilire i fenomeni di accoppiamento tra le fisiche (es. il calore generato da un campo elettromagnetico).

2. Formulazione matematica

- Ogni fisica è descritta da equazioni differenziali (es. equazioni di Maxwell per l'elettromagnetismo, equazione di Fourier per la conduzione termica).
- Le equazioni sono collegate tra loro da termini di accoppiamento (es. la densità di potenza elettromagnetica diventa sorgente di calore nell'equazione termica).

3. Discretizzazione e Risoluzione Numerica

- Le equazioni differenziali vengono discretizzate con metodi numerici (es. Elementi Finiti o Volumi Finiti) per trasformarle in un sistema risolvibile da un computer.
- Si utilizzano software di simulazione (es. COMSOL, ANSYS,...) per risolvere il sistema.

4. Validazione e Interpretazione dei Risultati

- I risultati della simulazione vengono confrontati con dati sperimentali o teorici per verificarne l'accuratezza.
- Si analizzano i risultati per ottimizzare il sistema o prevedere comportamenti futuri.

Realismo e accuratezza

- Simulazione di sistemi complessi
- Possibilità di analizzare l'interazione tra fenomeni diversi

Riduzione dei costi

- Test virtuali prima della prototipazione

Versatilità

- Applicabili a molteplici settori: ingegneria, biomedicina, energia, aerospazio, elettronica
- Utilizzabili per l'ottimizzazione di processi industriali

Integrazione con software avanzati

- Possibilità di combinare simulazioni con intelligenza artificiale o machine learning per ottimizzazione automatica.

Alta complessità computazionale

- Richiedono molta potenza di calcolo e risorse hardware avanzate.
- Simulazioni complesse possono richiedere ore o giorni per essere eseguite.

Difficoltà di modellazione e validazione

- Richiedono competenze avanzate in più discipline (fisica, matematica, informatica)

Maggiore difficoltà nella calibrazione dei parametri

- Molti parametri fisici devono essere determinati sperimentalmente o tramite approssimazioni.
- Errori nei dati di input possono compromettere la qualità della simulazione.

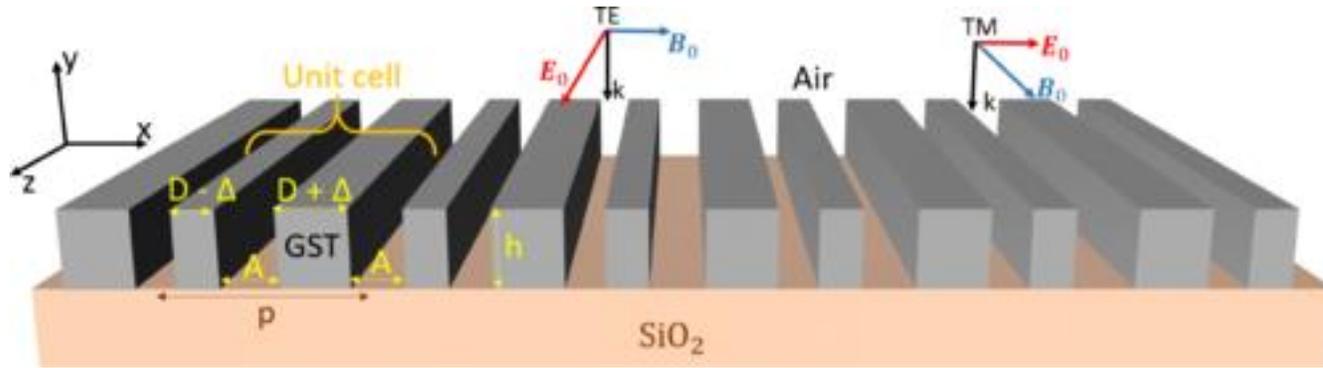
Costo dei software e licenze

- Strumenti avanzati possono essere molto costosi
- L'uso di software open-source richiede competenze di programmazione e più tempo per la configurazione.

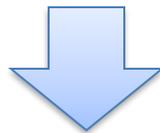
Esempi di Applicazione

Elettromagnetismo + Termico

→ Studio del riscaldamento indotto da campi elettromagnetici ed impatto sulle proprietà ottiche della struttura.

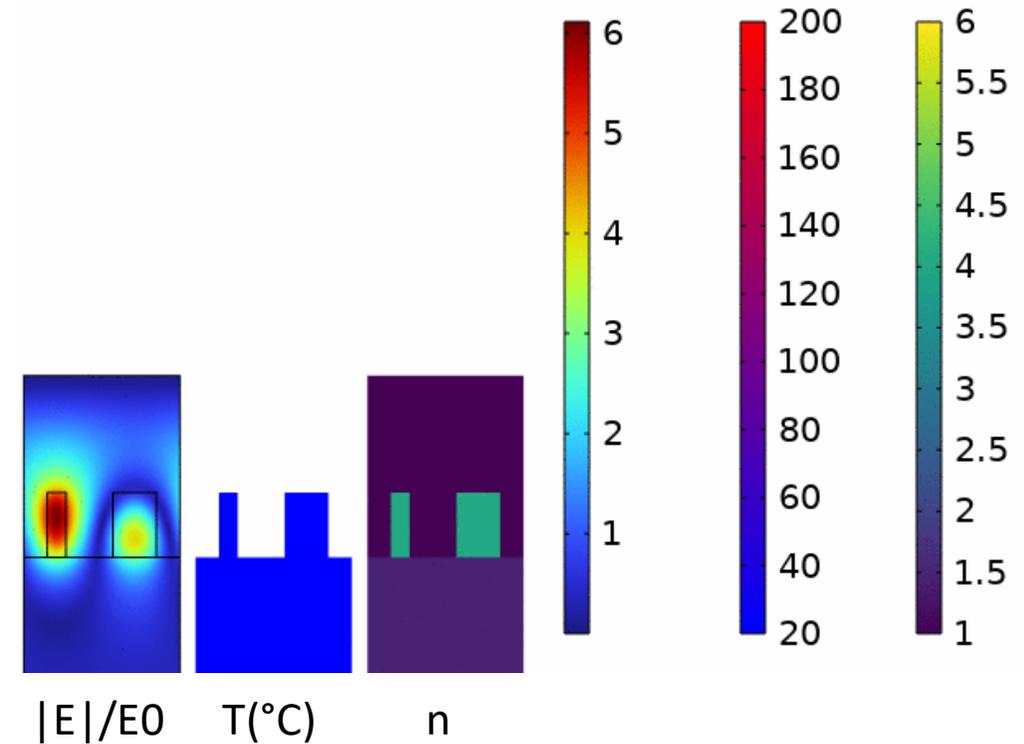


Nanostruttura composta da GST, un materiale che cambia fase (da amorfo a cristallino) quando la temperatura supera 160°C .

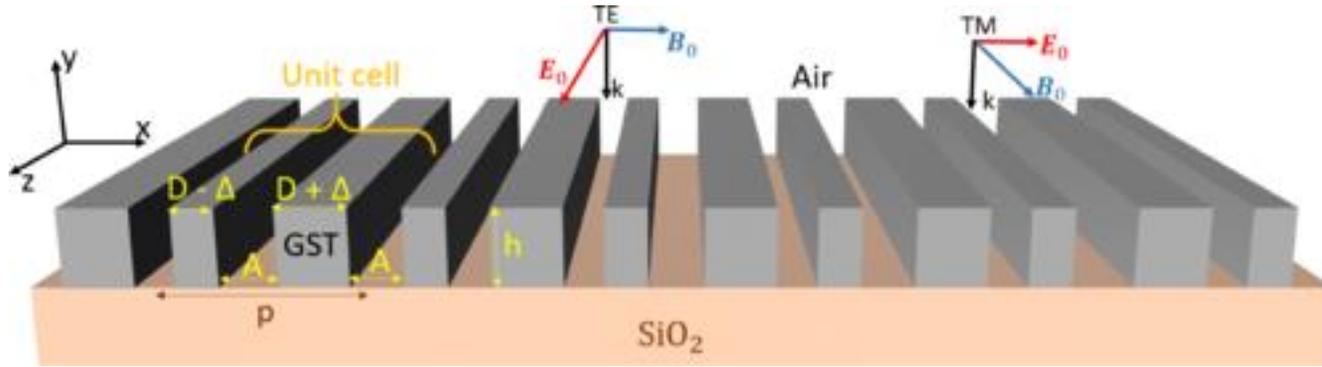


Il cambio di fase del materiale causa una variazione sostanziale nelle proprietà ottiche della struttura

Time=0 s



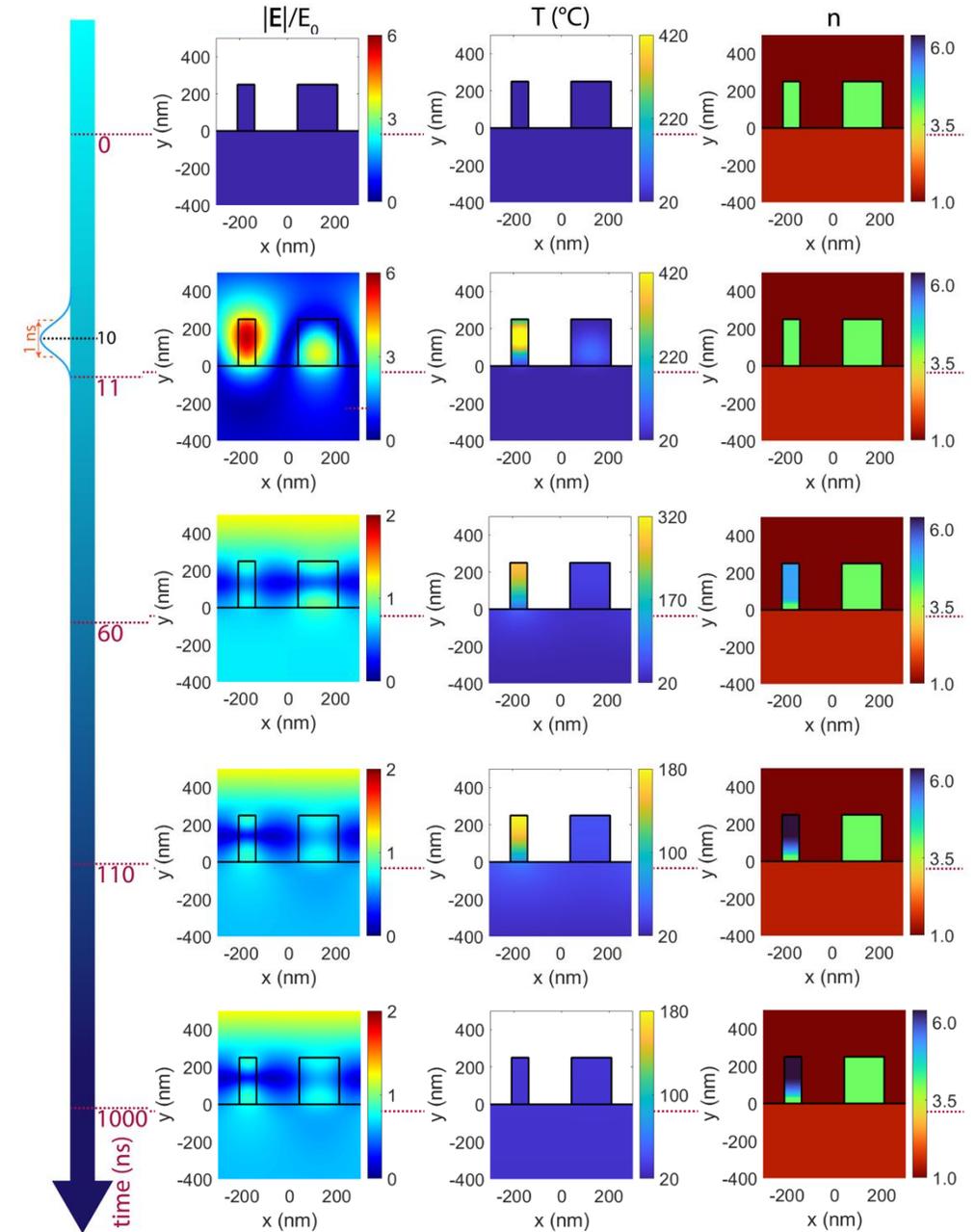
Esempi di Applicazione



Nanostruttura composta da GST, un materiale che cambia fase (da amorfo a cristallino) quando la temperatura supera 160°C .



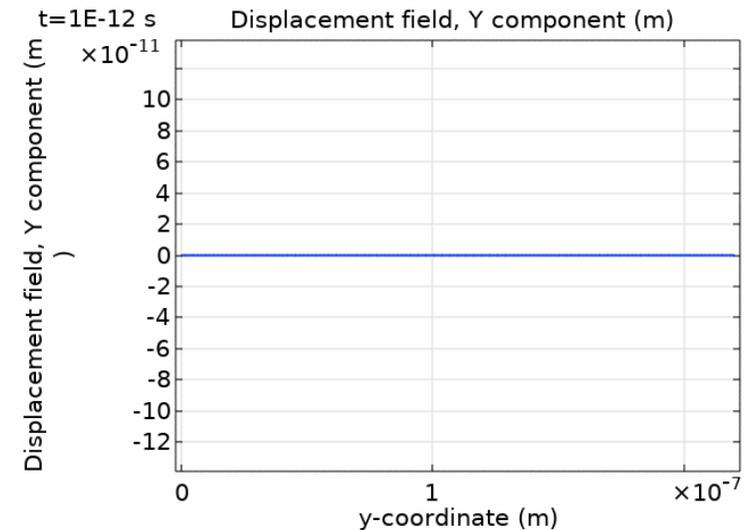
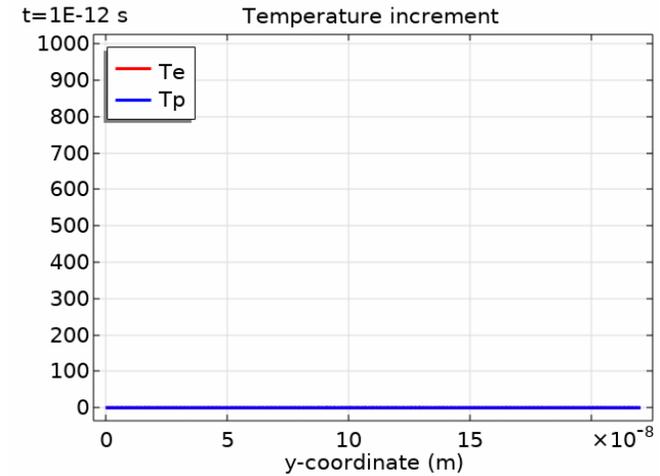
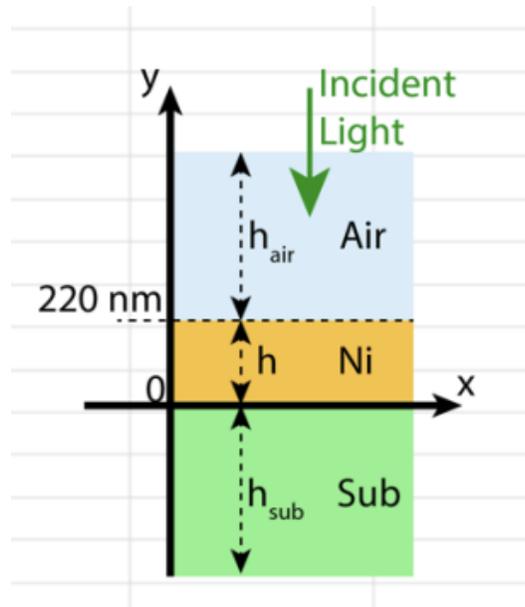
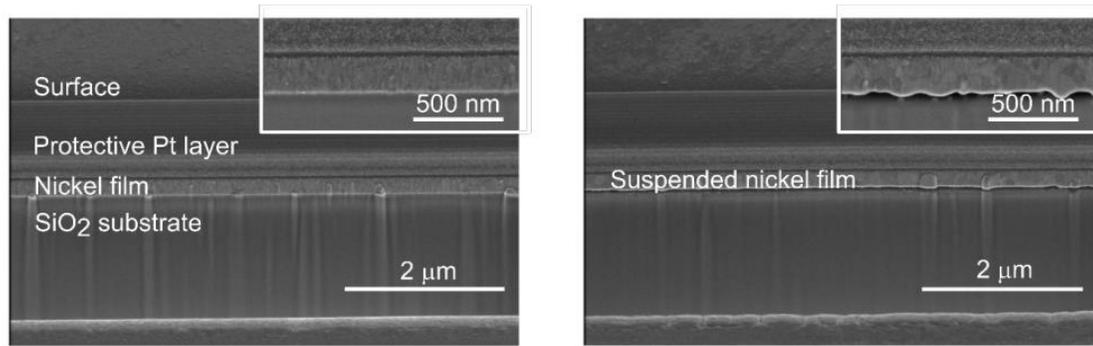
Il cambio di fase del materiale causa una variazione sostanziale nelle proprietà ottiche della struttura



Esempi di Applicazione

Elettromagnetismo + Termico + Meccanico/Acustico

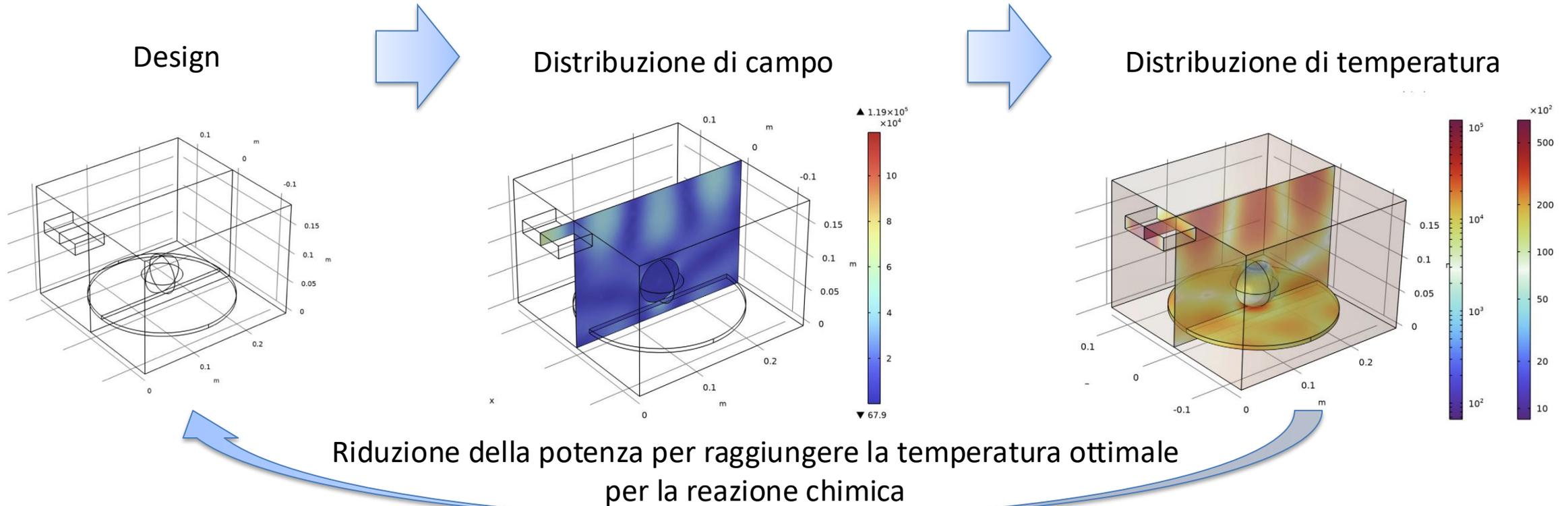
→ Studio della generazione di modi acustici generati dalla dilatazione termica causata da riscaldamento dovuto a campi elettromagnetici.



Ottimizzazione del processo di recupero metalli

Per modellare il recupero dei metalli con riscaldamento a microonde, è necessario un modello multifisico che includa:

- **Elettromagnetismo:** per simulare la propagazione delle microonde e la loro interazione con i materiali.
- **Termico:** per modellare l'aumento di temperatura dovuto all'assorbimento delle microonde.
- **Chimico:** per descrivere le reazioni che avvengono a determinate temperature.





Thank you for your attention!

Prof. Maria Antonietta Vincenti

maria.vincenti@unibs.it