



Finanziato
dall'Unione europea
NextGenerationEU



Ministero
dell'Università
e della Ricerca



Italiadomani
PIANO NAZIONALE
DI RIPRESA E RESILIENZA



Presentazione dello stato delle attività dello Spoke 6
“Multiscale Modelling and Engineering Applications”
Mauro Valorani (Sapienza), Sergio Saponara (UniPI)

Kick off meeting 25/26 novembre 2022, Bologna

Obiettivi dello Spoke 6

- Lo spoke "Multiscale modelling & Engineering applications" si occupa da un lato degli aspetti computazionali legati alla "**modellazione multiscala**" e dall'altro dell'utilizzo di strumenti HPC e Big Data per **applicazioni** nei vari **campi** della **scienza** e dell'**ingegneria**.
- Lo Spoke include competenze nello sviluppo di "**gemelli digitali**" e di metodologie di **progettazione basate su modelli**, e l'uso di tecniche di simulazione che fanno ampio uso di modelli numerici avanzati implementati presso i principali centri di ricerca, e attraverso **l'uso intensivo di strutture HPC e Big Data**.
- La caratteristica di questo Spoke è la capacità di affrontare globalmente problemi che abbracciano **diverse discipline**, coinvolgendo **scale multiple** (dalla scala sub-nanoscopica di elettroni e atomi, alla meso-scala e alla macro-scala), insiemi di **dati eterogenei e di grandi dimensioni**, e approcci **interdisciplinari** e **multi-fisici**, combinati con la capacità unica di tradurre le tecnologie numeriche e analitiche in **applicazioni di diretto interesse e utilizzo** per diversi campi **scientifici** e **ingegneristici** a livello nazionale e internazionale.
- Colmare il divario tra le scale e **sviluppare algoritmi e codici** in grado di **estrarre la potenza di calcolo** delle moderne architetture informatiche (ad esempio in **parallelo massivo e con GPU, FPGA o futuri acceleratori di calcolo quantistico**) è una chiave per lo sviluppo di tecnologie abilitanti per **un'enorme varietà di applicazioni ingegneristiche** nell'ottica di promuovere lo sviluppo di una società basata sulla conoscenza.

- Applicazioni di interesse e utilizzo in molte discipline e multi-disciplinari per:
 - Ricerca scientifica (basso TRL)
 - Ricerca tecnologica (medio/alto TRL)
- Applicazioni di calcolo intensive in:
 - HPC (fino a exascale)
 - Servizi cloud per l'ingegneria
 - Big data & Data analytics
- Modellazione Multi-scala e Multi-fisica
- Gemelli digitali
- Calcolo numerico con acceleratori

Università, Enti di Ricerca, e Imprese partecipanti a Spoke 6



Università ed Enti di Ricerca partecipanti

RUOLO	DENOMINAZIONE
Leader	SAPIENZA
Co-Leader	UNIFI
Membro Affiliato	CNR
Membro Affiliato	POLIMI
Membro Affiliato	POLITO
Membro Affiliato	ROMA Tor Vergata
Membro Affiliato	UNIBO
Membro Affiliato	UNICAL
Membro Affiliato	UNIFI
Membro Affiliato	UNIPV

Imprese fondatrici che hanno manifestato il loro interesse a partecipare allo Spoke 6

DENOMINAZIONE
Leonardo
Thales Alenia Space-Italia
Fincantieri
ENI
Terna
Fondazione IFAB

WP1: Complex multiscale and multiphysics modeling (Leaders: CNR, Sapienza)

- T1.1 High-precision simulation via multiscale approach;
- T1.2 Variable fidelity modeling from atom to devices; T1.3 Multifunctional materials;
- T1.4 Multiscale modeling of complex systems.

WP2: Simulation of large systems via multiscale and AI methods (Leaders: PoliMI, Pavia)

- T2.1 Development of multiscale multiphysics theory, numerical methods, modeling strategies;
- T2.2 Tools for orchestration and co-simulation;
- T2.3 AI & Big Data analytics for complex/large systems.

WP3: Digital twin modeling and tools for engineering disciplines (Leaders: Roma Tor Vergata, Firenze)

- T3.1 Thermo-fluid-dynamics;
- T3.2 Electronics & Photonics;
- T3.3 Electromagnetics & Energy;
- T3.4 Mechanics & Structures;
- T3.5 Bio & Environment,
- T3.6 Industrial production plants

WP4: Engineering applications: verticals and methods/tools integration

(Leaders: PoliTo, Bologna)

- T4.1 Integration of methods and tools developed in WP1/2/3 ;
- T4.2 Engineering verticals in industries (ranging from ground and aerospace vehicles, to green energy, electronics, manufacturing).

WP5: Proof-of-concept (PoC) demonstrators

(Leaders: Pisa, UniCalabria)

- T5.1 PoC activities on modular HPC infrastructures;
- T5.2 Software: licensing and distribution policies (intellectual property, open source);
- T5.3: Specifications and coordination with hub/stakeholders;

WP6: Training, Technology transfer activities and Outreach

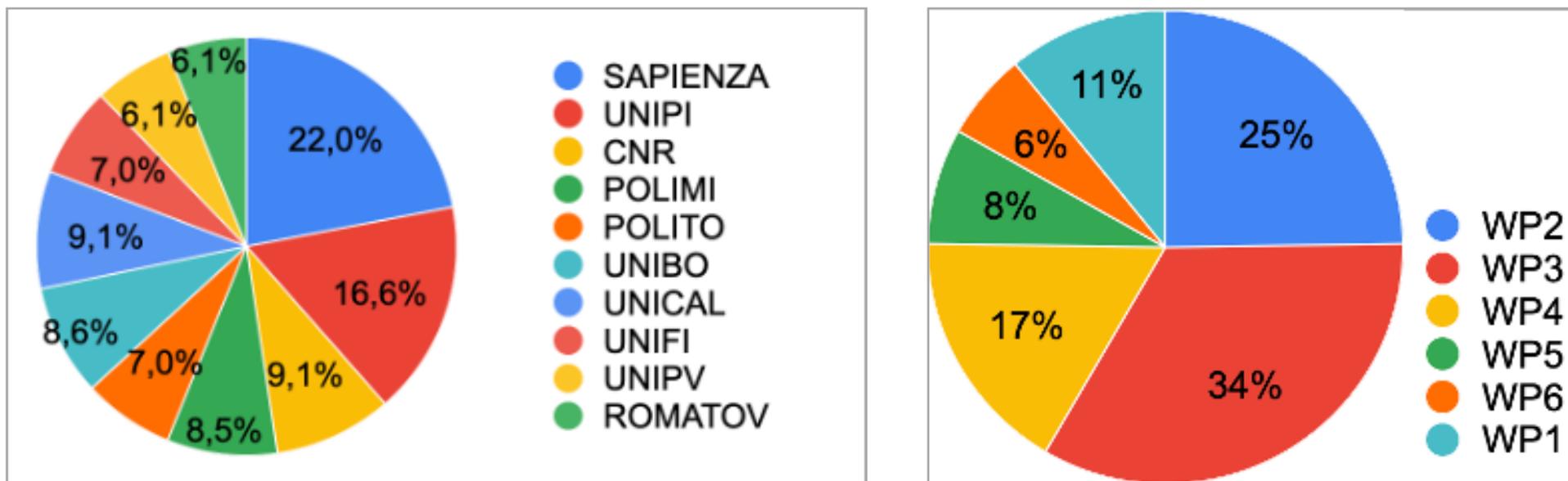
(Leaders: Sapienza, Pisa)

- T6.1 Implementation of education and training activities;
- T6.2 Implementation of knowledge and technology transfer.
- T6.3: Strategies for education/training, technology and knowledge transfer;
- T6.4: Definition of Spoke strategies for dissemination

Budget attribuito allo Spoke 6

Spese del personale (mesi uomo + reclutamento, + 15% c.i.)	Costi PhD (+ 15% c.i.)	Innovazione	Open Call	COSTO TOTALE
7943747,34 €	1426250,00 €	1620000,00 €	3200000,00 €	14189997,34 €

Ripartizione dei costi tra affiliati e pacchetti di lavoro (WPs)



Personale partecipante allo Spoke 6

Partecipanti in massa critica	147	75%
Partecipanti NON in massa critica	50	25%
Partecipanti totali	197	100%

Per Genere

M	153	78%
F	44	22%

Per Anno PhD

Prima 2010	141	72%
Dopo 2010	56	28%

Per Qualifica

DR	1
DT	1
PA	81
PO	60
PR	5
R	11
RT	38
	197

Agenda del Kick-Off di Spoke 6 (Roma - Sapienza - 19,20 Ottobre 2022)



Mercoledì 19 ottobre

10.30 -11.00 – Saluti istituzionali e apertura dei lavori

11.00-12.00 - 2 presentazioni di enti affiliati, 30 min a presentazione (25+domande)

11.00-11.30 Mauro Valorani, SAPIENZA (Spoke Leader)

11.30-12.00 Sergio Saponara, Università degli Studi di Pisa (Spoke Co-Leader)

12.00-13.30 - 3 presentazioni di enti affiliati, 30 min a presentazione (25+domande)

12.00-12.30 Massimo Bernaschi, CNR

12.30-13.00 Paola Francesca Antonietti, Politecnico di Milano

13.00-13.30 Stefano Zucca, Politecnico di Torino

13.30-14.45 - light lunch

14.45-16.15 - 3 presentazioni di imprese partner, 30 min a presentazione (25+domande)

14.45-15.15 Alfonso Amendola, ENI

15.15-15.45 Federica Valdenazzi, FINCANTIERI

15.45-16.15 Marco Becca, IFAB

16.15-16.30 - coffee break

16.30-17.30 - 2 presentazioni di imprese partner, 30 min a presentazione (25+domande)

16.30-17.00 Luca Orru, TERNA

17.00-17.30 Michele Marconcini (da remoto), Università degli Studi di Firenze

Giovedì 20 ottobre

09.00 -10.30 3 presentazioni di enti affiliati, 30 min a presentazione (25+domande)

09.00 - 09.30 Pier Paolo Valentini, Università degli Studi di Roma Tor Vergata

09.30 -10.00 Alberto Regattieri, Alma Mater Studiorum Università di Bologna

10.00-10.30 Francesco Longo (da remoto), Università della Calabria

10.30-10.45 - coffee break

10.45 -12.15 - 3 presentazioni di enti affiliati, 30 min a presentazione (25+domande)

10.45 -11.15 Carlo Cavazzoni LEONARDO

11.15 -11.45 Giancarlo Sangalli, Università di Pavia

11.45 – 12.15 Carlo Ciancarelli, Thales Alenia Space

12.15 -12.30 Cineca/Spoke0

12.30 -13.30 - light lunch

13.30-15.30 - tavola rotonda e discussione su possibili collaborazioni.

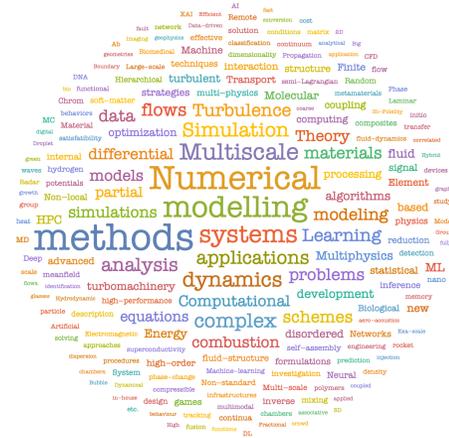
Strumenti/Materiali prodotti

- Repository materiali/documenti dello Spoke 6
- Banca dati per la **mappatura delle competenze/tematiche scientifiche** di tutti i 197 partecipanti allo Spoke 6
- Ricognizione su **proposte delle imprese per casi di uso**

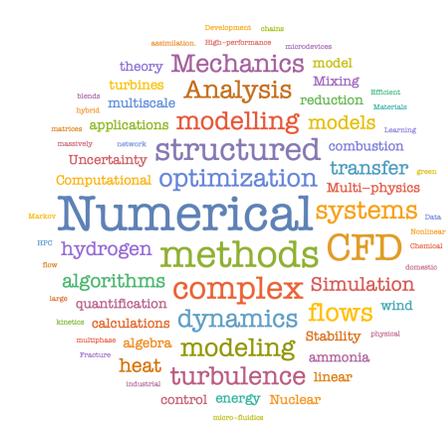
Analisi Keywords Presentazioni Spoke 6 KickOff



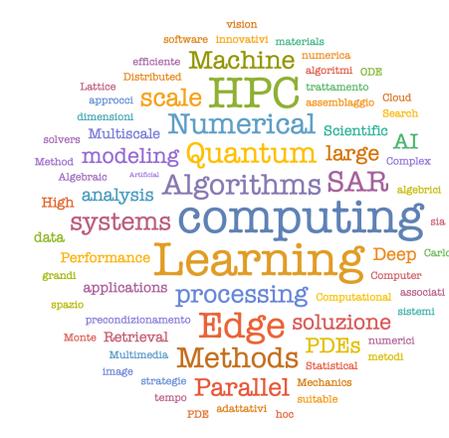
SAPIENZA - keys 663



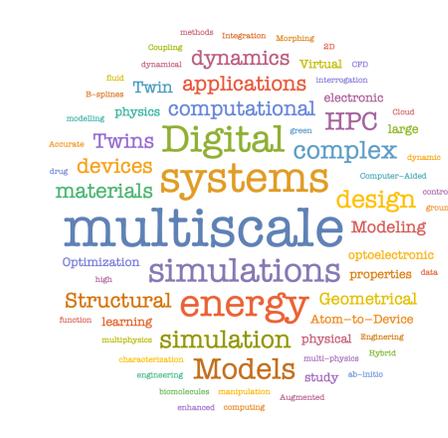
UNIPIISA - keys 230



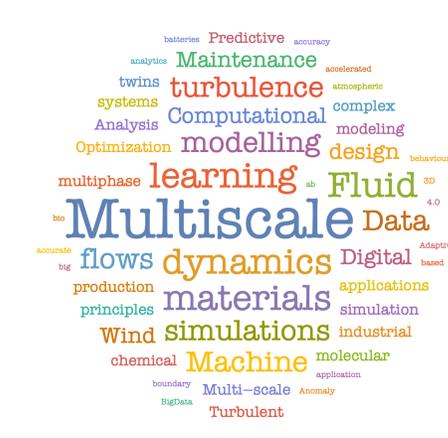
CNR - keys 241



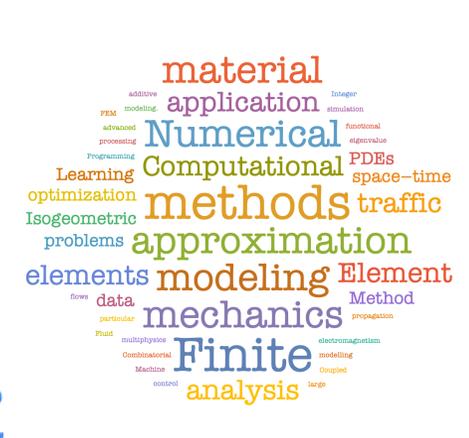
ROMATOR - keys 217



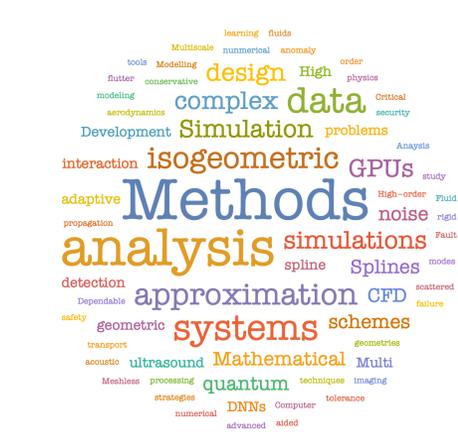
UNIBO - keys 173



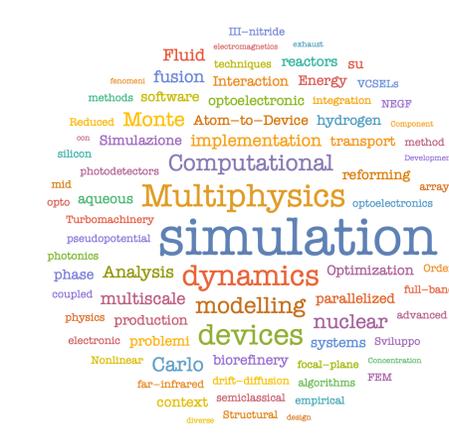
UNIPV - keys 144



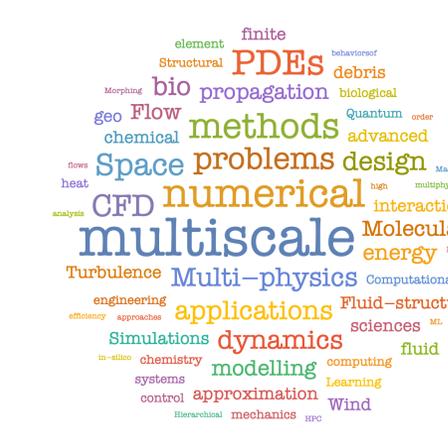
UNIFI - keys 228



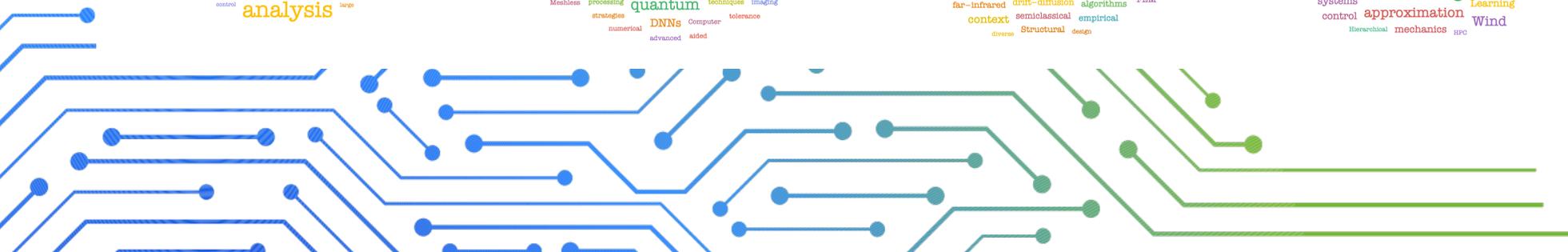
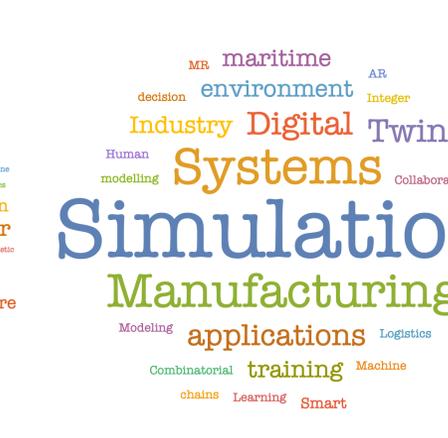
POLITO - keys 255



POLIMI - keys 196



UNICAL - keys 83



M.Valorani, S.Saponara

Bologna, 25/26 novembre 2022

6 Possibili Linee aggreganti (Flagship)

Matrice di linee aggreganti multi livello: da ricerche di base su metodologie/algoritmi/codici fino a livello implementativo-applicativo dalle quali potranno essere individuati i casi di uso delle imprese.

- ✻ Fluidodinamica
- ✻ Computational Electronics/Electromagnetics
- ✻ Green Energy
- ✻ Reti e sistemi distribuiti
- ✻ Big Data analytics & AI per diagnostica/monitoraggio (PHM)
- ✻ Life Science

Livello ricerca di base:

metodi e codici per risoluzione problemi lattice-boltzmann, stokes, calcolo numerico di matrici-PDE- linear algebra, analisi di incertezza, model order reduction, metodi (anche ML/AI, statistici, etc.) per problemi dinamici e a forte variabilità, da calcoli atomistici a componenti/sistemi ...

Livello ricerca applicativa/prototipo:

sviluppo e uso modelli e codici (commerciali e/o custom) per analisi fluidi a vari numeri di Reynolds, vari livelli di compressibilità, a singola o a multi fase, inclusi legami tra fluidodinamica e aspetti termici e/o vibrazioni...per digital twin in es. elicotteristica e droni (Leonardo) in aria, per navi (Fincantieri) in acqua, per eolico/cavi (Terna, ENI, IFAB). Modelli su piattaforme HPC (multi-GPU), una parte diventerà il o i PoC in funzione degli use-case da imprese

Livello ricerca di base:

metodi e codici per analisi nuovi materiali: metamateriali, materiali a cambiamento di fase, grafene, SiC, ..., materiali per shielding, materiali per visibilità/invisibilità EM, sensori, film per foto-voltaico next-gen et al., ...codici per analisi EMI-EMC-elettrica-termica, Montecarlo, da calcoli atomistici a componenti/sistemi,

Livello ricerca applicativa/prototipo:

sviluppo e uso modelli e codici (commerciali e/o custom) per design nuove antenne, antenne array, firma elettromagnetica oggetti e shielding (Fincantieri), visibilità/invisibilità EM (Fincantieri, Leonardo), nuovi dispositivi (es. memorie PCM, dispositivi per quantum, sensori, dispositivi flessibili, RFID, film per foto-voltaico next-gen....), digital twin per validazione/verifica EMI/EMC by simulation di apparati (TASI) ... una parte diventerà il o i PoC in funzione degli use-case da imprese

Livello ricerca di base:

metodi e codici per analisi nuovi vettore energetici (es. idrogeno), design nuove turbine, sistemi ibridi propulsione combustione-elettrico, problemi di ottimizzazione installazione e operatività di impianti rinnovabili, modelli dinamici e statistici di RES, model order reduction,...

Livello ricerca applicativa/prototipo:

sviluppo e uso modelli e codici (commerciali e/o custom) per design nuove turbine eoliche e/o marine o fotovoltaico next-gen, problemi di ottimizzazione installazione impianti e di operatività di impianti rinnovabili, sistemi ibridi propulsione combustione-elettrico, modelli dinamici e statistici di RES (Terna, ENI,...) una parte diventerà il o i PoC in funzione degli use-case da imprese

Livello ricerca di base:

modelli dinamici e statistici di reti di distribuzione, graph models, teoria delle code, model order reduction, security e resiliency delle reti, agenti cooperanti/non-cooperanti,...

Livello ricerca applicativa/prototipo:

sviluppo e uso modelli e codici (commerciali e/o custom) per design reti e sistemi distribuiti, modelli dinamici e statistici di reti di distribuzione (smart grids) o reti di controllo/monitoraggio, wireless power transfer e charging, networked control systems, autonomous e SW-defined control systems, network security, network resilience, anomaly/intrusion detection nelle reti, (Terna, TAS, ENI, IFAB, ...) una parte diventerà il o i PoC in funzione degli use-case da imprese

Livello ricerca di base:

metodi e codici per foundational AI, explainable AI/ML, ottimizzatori, statistical signal processing, linear algebra kernels, modelli di guasto, metodi per resiliency, codici per security, computer graphics e video/image processing, metodi x implementazioni efficienti su GPU/multi-GPU, distributed training/learning, risc-V, Fpga, edge, cloud

Livello ricerca applicativa/prototipo:

applicazione di big data analytics e AI/ML o Statistical DSP a sistemi di anomaly detection, intrusion detection, sorveglianza/monitoraggio/osservazione (tutte imprese), diagnostica predittiva per satelliti (TAS), per elicotteri/navi/droni (Leonardo, Fincantieri), per reti di distribuzione e impiantistica (ENI, Terna); porting codici su piattaforme eterogenee (RISC-V, acceleratori FPGA e/o GPU); edge vs cloud (IFAB-E4/seco/axellera); autonomous HPC e HPC in the loop (tutte imprese) una parte diventerà il o i PoC in funzione degli use-case da imprese

Livello ricerca di base:

metodi e codici per materiali soft e bio, computational chemistry, analisi meccanica strutturale, molecular dynamics, interazioni chimico-fisiche, etc. da molecola a organoidi/tessuti/..., model order reduction, metodi MI/AI per problemi bio

Livello ricerca applicativa/prototipo:

sviluppo e uso modelli e codici (commerciali e/o custom) per materiali soft e bio, analisi strutturale, interazioni chimico-fisiche, etc. da molecola a organoidi/tessuti/..., digital twin modelli sistemi biologici, analisi inquinamento ambientale, spread di virus, medicina di precisione (IFAB-Chiesi, IFAB-Alfasigma) una parte diventerà il o i PoC in funzione degli use-case da imprese

Idee per casi di uso:
ENI

- ✱ Gravity and magnetic data inversion
- ✱ Physics-informed Machine learning for reservoir applications
- ✱ LNG portfolio optimization and pricing
- ✱ Advanced Analytics for fotovoltaic plants
- ✱ Anomaly detection and predictive maintenance
- ✱ Vehicle2Grid
- ✱ Energy system optimization
- ✱ CFD for wind modelling
- ✱ Sviluppo di additivi lubrificanti mediante simulazioni atomistiche e multiscale

Idee per casi di uso

Thales Alenia Space Italia

Arete Tematiche

- ☀ Spacecraft health management: ML-based on-board models for failures detection and prognostics (PHM)
- ☀ Cognitive radar: adaptive SAR sensing, real-time closed-loop radar, data compression
- ☀ Enhanced data inference for EO missions: scalable AI/ML-based on board EO data processing
- ☀ Satellite on board dynamic configuration for automatic constellation scheduling, autonomous navigation
- ☀ Distributed optimization control and learning for formation flying and space robotics
- ☀ AI-based data processing for security monitoring on EO systems, to analyse, detect and predict intrusions
- ☀ Digital-twin modelling, data-driven simulation tools for space system design

Casi di uso

- ☀ SPACECRAFT DIGITAL TWIN FOR HEALTH MANAGEMENT & PERTURBATION SIMULATION
 - ❑ Satellite Prognostics and Health Management: telemetry data analysis for on board autonomy, failure prognostic/early detection through ML-based models for satellite const. management
 - ❑ Computational Satellite Perturbative Models: simulation for satellite design, digital representation and analysis of interaction phenomena (EMC, propulsion, etc.)
- ☀ SATELLITES CONSTELLATION DYNAMIC CONFIGURATION AND CONTROL
 - ❑ Onboard dynamic configuration and control, automatic optimal control, scheduling and autonomous navigation. Optimal control methods for satellite constellation management

Idee per casi di uso: **Leonardo**

- ☀ High fidelity/high computational efficiency
- ☀ Software certification
- ☀ Data lake, data maintenance, data standard, data protection, data sharing: GAIA-X
- ☀ Living labs
- ☀ Outer loops: optimization, low fidelity modelling, UQ,
- ☀ LBM (Lattice Boltzmann Methods)
- ☀ Computational electronics/electromagnetics for radar
- ☀ Computational fluid dynamics for helicopters, aerial vehicles and drones

Idee per casi di uso: **FINCANTIERI**



Digital twin of marine vehicles: operation, maintenance, Life Cycle for CO2 reduction

Digital twin of infrastructures (bridges, ports, ...)

Predictive maintenance and Health monitoring using data from distributed sensors

Smart Building: Design, Progress estimation based on observables

Hybrid diesel-electric propulsion: smart grid for optimal power balancing in variable absorption conditions

Cryogenic hydrogen propulsion

Manoeuvring optimization and automation in port

Optimal port design

Radar signature calibration (to maximize visibility)

Applied Electromagnetics and Metamaterials

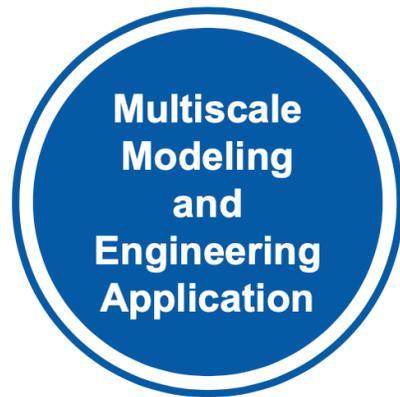
Noise reduction

4D drones

Unmanned and green ships for regional transport, Autonomous driving

L'Innovazione in Terna

Use case di interesse di potenziale interesse del CN HPC – Spoke 6



Main streams

Pianificare il sistema al minimo costo

Mantenere la stabilità e la sicurezza

Possibili use cases

- Nuovi sistemi, processi e strumenti per la **pianificazione delle infrastrutture energetiche** integrate (sector-coupling)
- Simulazioni (sia per la pianificazione che per l'esercizio) di **nuove reti ibride AC/DC** e supporto all'analisi costi-benefici
- **Modellazione esplicita (nodale) ed equivalente (aggregata)** delle reti AAT/AT utilizzando approcci open-source (i.e. Modelica language)
- Nuovi approcci per **aumentare l'efficienza dei calcoli di OPF (optimal power flow)** e nella valutazione della sicurezza di rete (security assessment)
- Sviluppo di nuovi metodi di simulazione e strumenti per **analisi semplificate «in dinamica»**

- Bandi completati per il 38 ciclo di una parte delle borse di dottorato
- Bandi per posizioni RTD-A in corso
- Creazione Struttura di Governance di Spoke a valle della ratifica degli accordi Spoke/Affiliati
- Selezione di progetti flagship
 - Dimostratori PoC a TRL medio/alto proposti da imprese “affiliate” allo Spoke 6 da finanziare prevalentemente con “innovation funds”
 - Progetti “scientifici” a basso TRL, da finanziare prevalentemente con budget di massa critica, reclutamento, e borse PhD
- Individuazione di una policy di Spoke per i bandi a cascata

Foto di Gruppo al Kick-Off di Spoke 6



M.Valorani, S.Saponara

Bologna, 25/26 novembre 2022

Referenti Scientifici Università ed Enti Affiliati

Sapienza	Mauro Valorani	mauro.valorani@uniroma1.it
UniPI	Sergio Saponara	sergio.saponara@unipi.it
CNR	Massimo Bernaschi	massimo.bernaschi@cnr.it
POLIMI	Paola Francesca Antonietti	paola.antonietti@polimi.it
POLITO	Stefano Zucca	stefano.zucca@polito.it
ROMA Tor Vergata	Pier Paolo Valentini	valentini@ing.uniroma2.it
UNIBO	Alberto Regattieri	alberto.regattieri@unibo.it
UNICAL	Francesco Longo	francesco.longo@unical.it
UNIFI	Michele Marconcini	michele.marconcini@unifi.it
UNIMoRe	Luca Selmi	luca.selmi@unimore.it
UNIPV	Giancarlo Sangalli	giancarlo.sangalli@unipv.it

Grazie per l'attenzione