



Finanziato  
dall'Unione europea  
NextGenerationEU



Ministero  
dell'Università  
e della Ricerca



Italiadomani  
PIANO NAZIONALE  
DI RIPRESA E RESILIENZA



Seminario Online  
25 Giugno 2024 ore 10:30

# Introduzione al Digital Twin: Obiettivi e soluzioni

## Status e avanzamenti futuri Digital Twin nel settore Salute e BioPharma

Caterina Arcangeli e Caterina Merla:

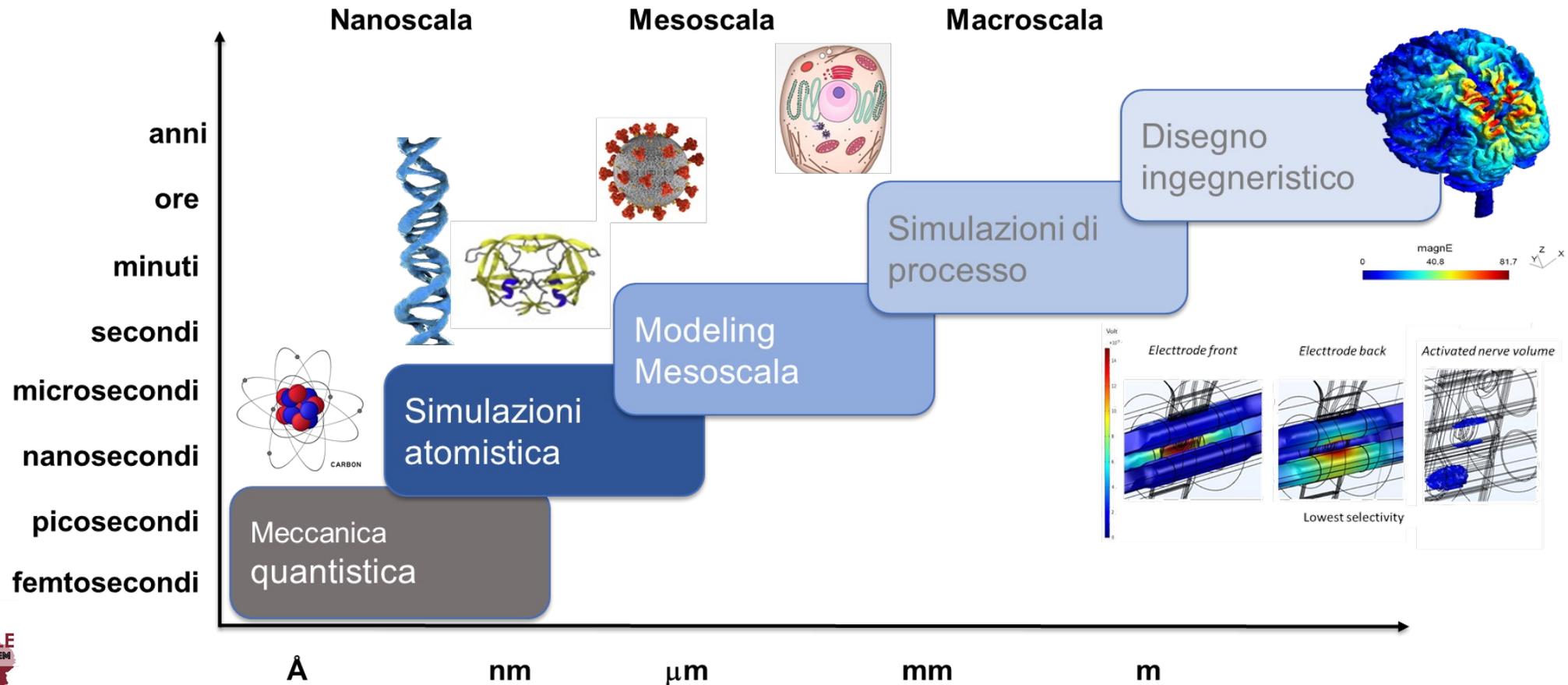
ENEA, SSPT-TECS

[caterina.arcangeli@enea.it](mailto:caterina.arcangeli@enea.it), [caterina.merla@enea.it](mailto:caterina.merla@enea.it)



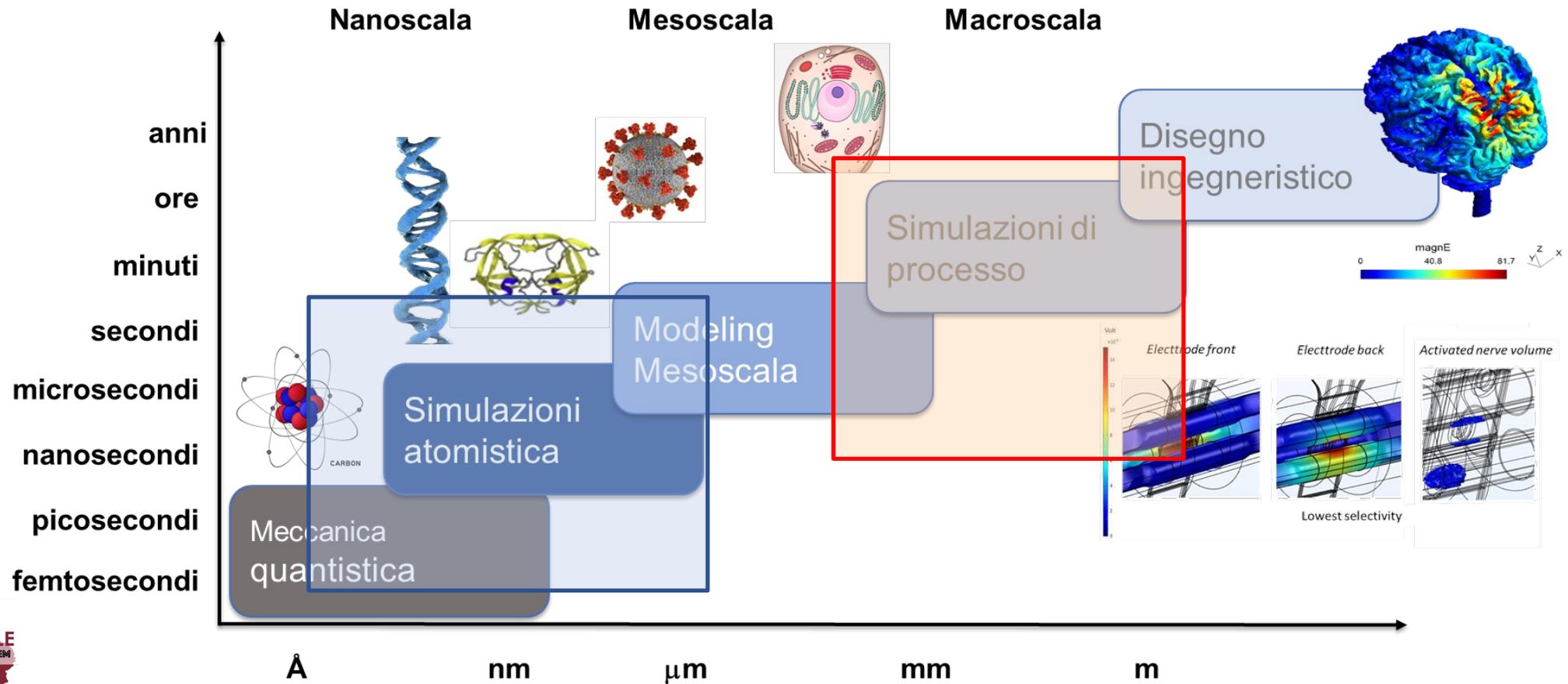


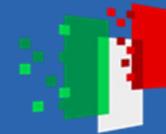
# DT per descrivere la complessa realtà biologica (multiscala)



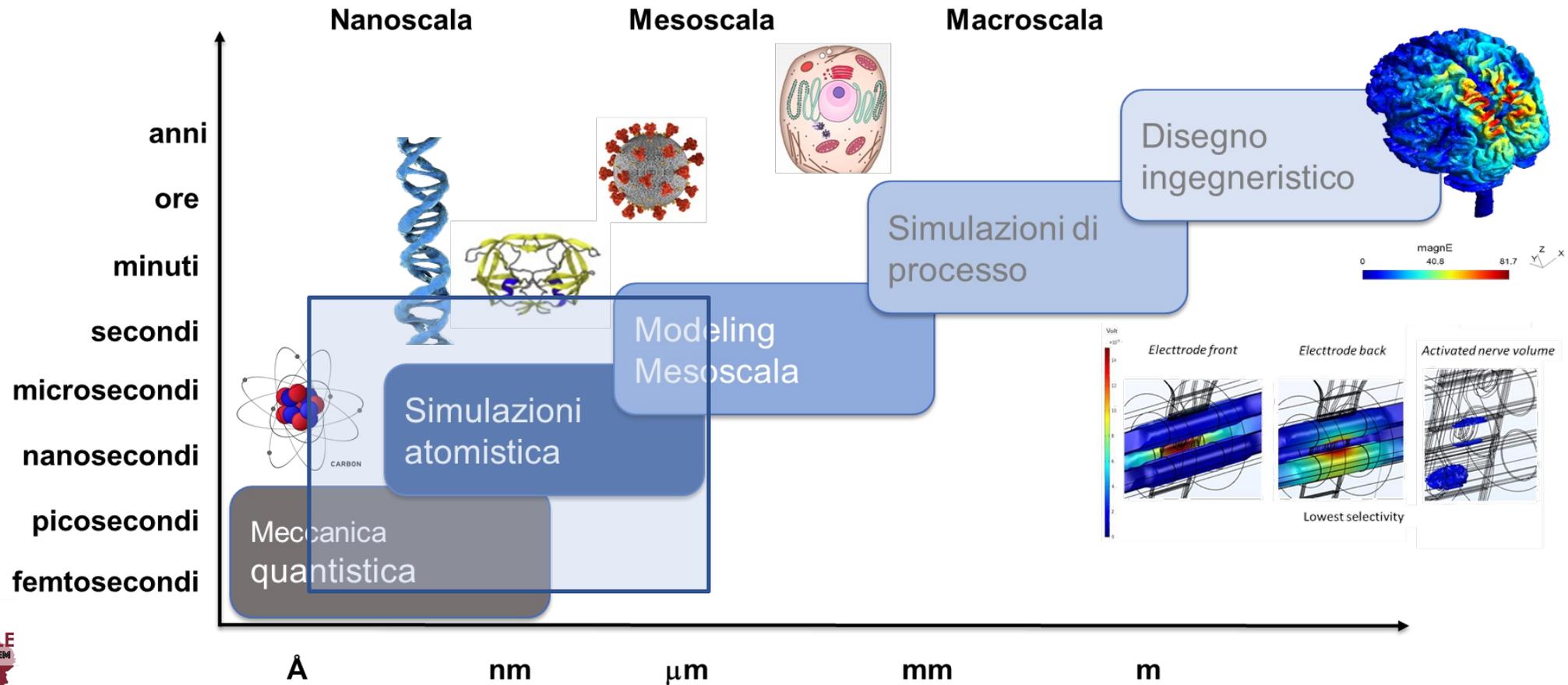


# DT per descrivere la complessa realtà biologica (multiscala)





# DT per descrivere la complessa realtà biologica (multiscala)





Finanziato  
dall'Unione europea  
NextGenerationEU



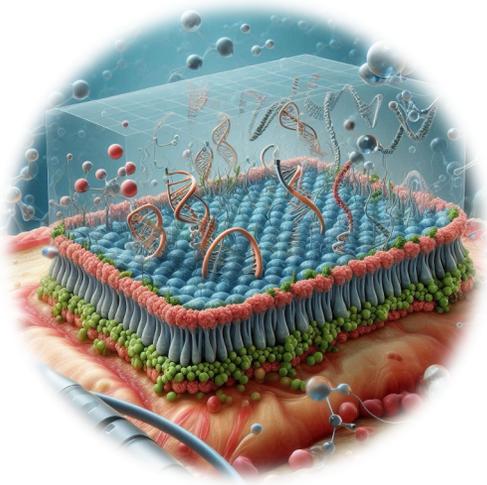
Ministero  
dell'Università  
e della Ricerca



Italiadomani  
PIANO NAZIONALE  
DI RIPRESA E RESILIENZA



## Digital Twin a Livello Nanoscala (Molecolare)



Credit: Al bing creator

Un **nano DT molecolare** è una rappresentazione virtuale di una molecola fisica ma anche dei processi di interazione che avvengono **all'interno di una cellula** fra le **diverse molecole biologiche**



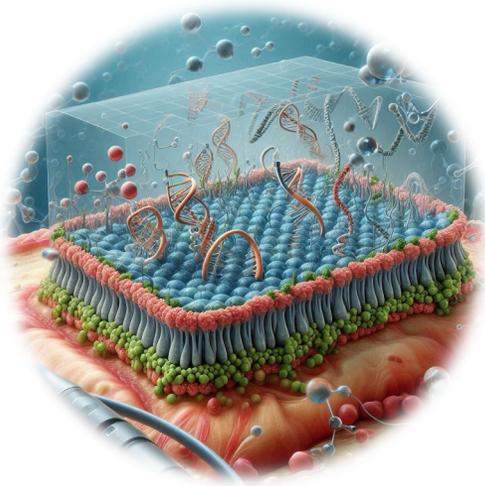
Finanziato dall'Unione europea  
NextGenerationEU



Ministero dell'Università e della Ricerca



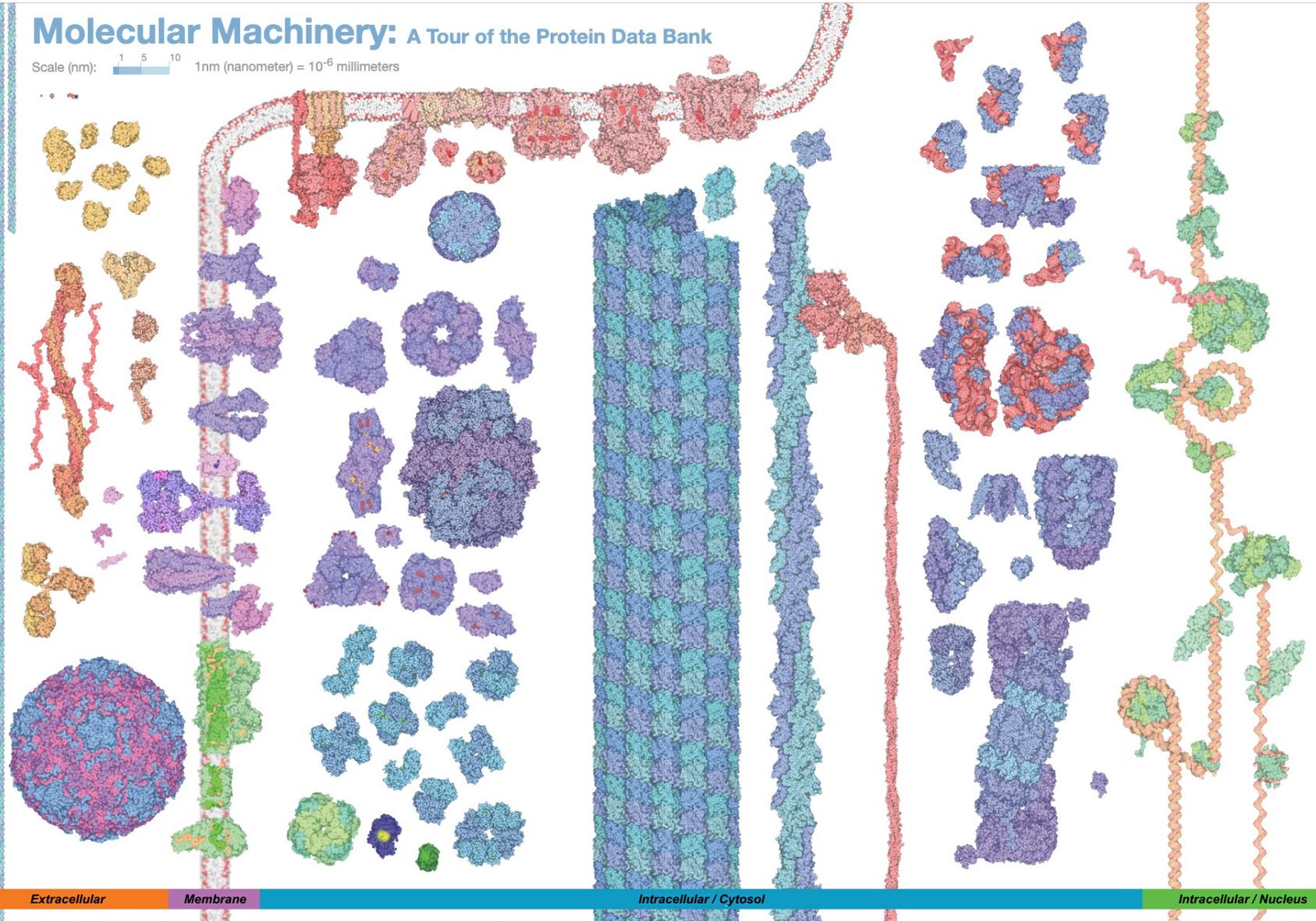
Italiadomani  
PIANO NAZIONALE DI RIPRESA E RESILIENZA



Credit: Al bing creator

## Molecular Machinery: A Tour of the Protein Data Bank

Scale (nm): 1 5 10 1nm (nanometer) = 10<sup>-6</sup> millimeters



Structure Function

- Small molecules
- Digestive Enzymes
- Blood Plasma
- Viruses and Antibodies
- Hormones
- Channels, Pumps and Receptors
- Photosynthesis
- Energy Production
- Storage
- Enzymes
- Infrastructure
- Protein Synthesis
- DNA

Fullscreen

Auto

About



Cellular Location

Fondazione Ro

Extracellular

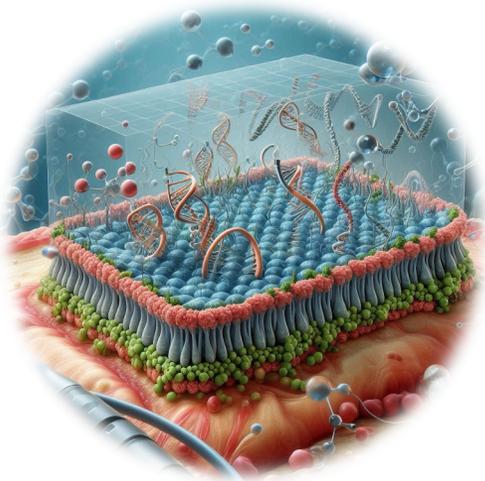
Membrane

Intracellular / Cytosol

Intracellular / Nucleus

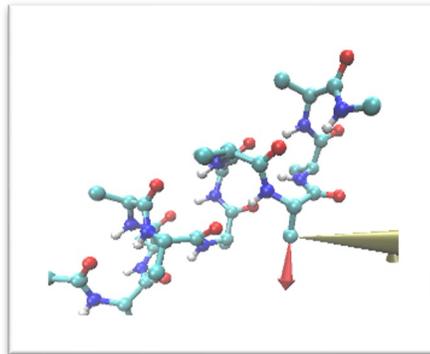


# Digital Twin a Livello Nanoscala (Molecolare)



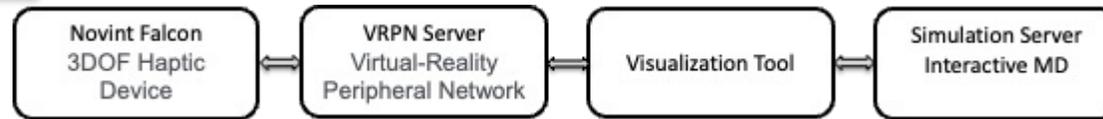
Credit: Al bing creator

Un nano DT molecolare è una rappresentazione virtuale di una molecola fisica ma anche dei **processi di interazione** che avvengono all'interno di una cellula **fra le diverse molecole biologiche**



Le **dinamiche molecolari interattive** permettono di simulare in tempo reale i movimenti e le interazioni delle molecole, offrendo un'analisi dettagliata del comportamento molecolare

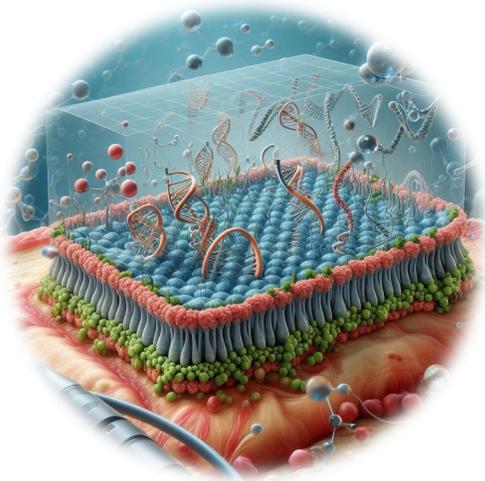
*Courtesy of S. Marchio, C. Arcangeli ENEA*



Credit: Image by freepick

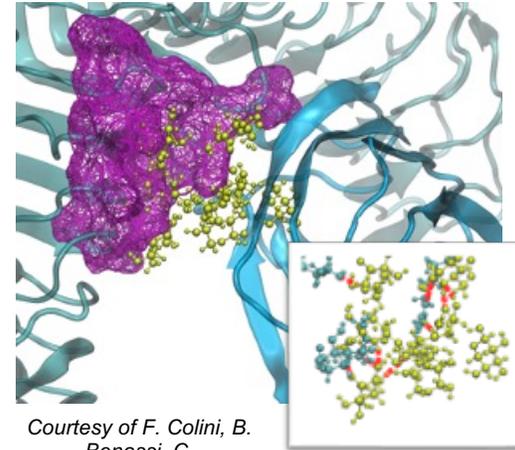
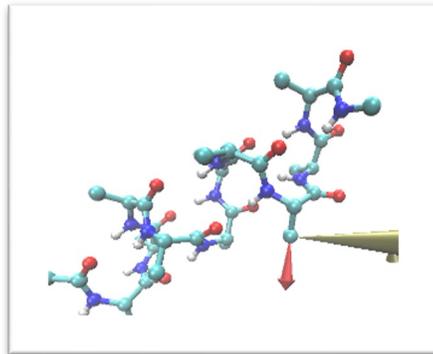


# Digital Twin a Livello Nanoscala (Molecolare)



Credit: Al bing creator

Un nano DT molecolare è una rappresentazione virtuale di una molecola fisica ma anche dei **processi di interazione** che avvengono all'interno di una cellula **fra le diverse molecole biologiche**



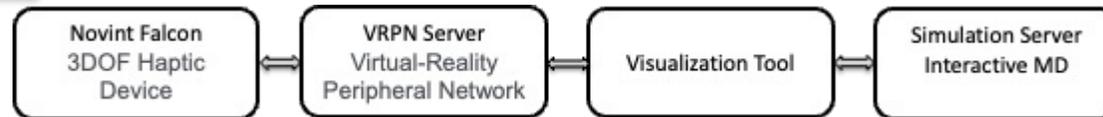
Courtesy of F. Colini, B. Benassi, C. Arcangeli ENEA

Le interazioni molecolari sono alla base del riconoscimento recettore-farmaco .

DT per predire e migliorare la formulazione di un farmaco terapeutico

Le **dinamiche molecolari interattive** permettono di simulare in tempo reale i movimenti e le interazioni delle molecole, offrendo un'analisi dettagliata del comportamento molecolare

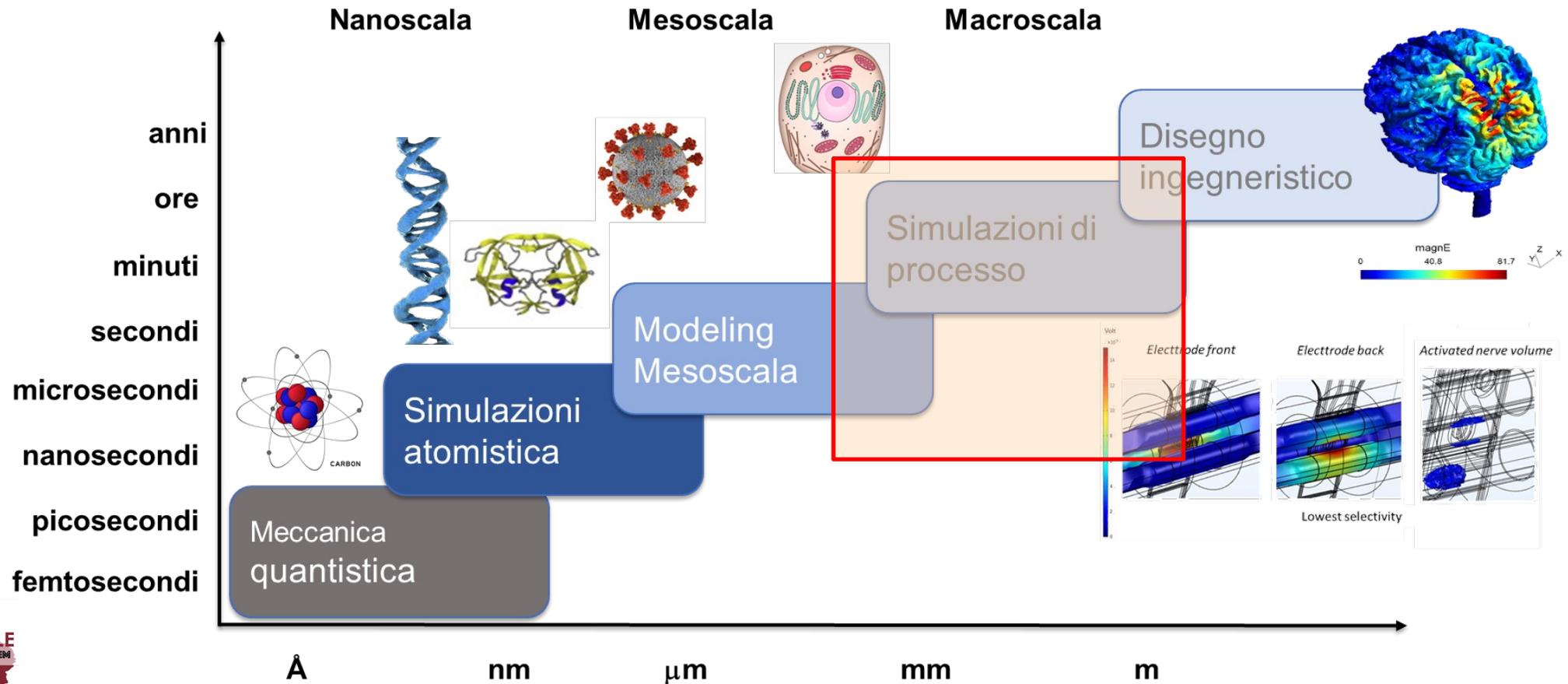
Courtesy of S. Marchio, C. Arcangeli ENEA



Credit: Image by freepick



# DT per descrivere la complessa realtà biologica (multiscala)





Finanziato  
dall'Unione europea  
NextGenerationEU



Ministero  
dell'Università  
e della Ricerca



Italiadomani  
PIANO NAZIONALE  
DI RIPRESA E RESILIENZA



## Per costruire un DT: passi standard di simulazione

Geometria  
della struttura  
(disegno CAD,  
immagini)

Caratteristiche  
fisiche

Condizioni al  
contorno e  
mesh

Risolutori

- Tempo
- Frequenza
- Statico, Quasi-statico

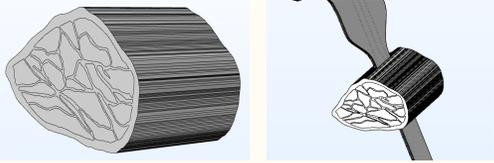
Integrazione  
del sistema  
con la realtà  
virtuale





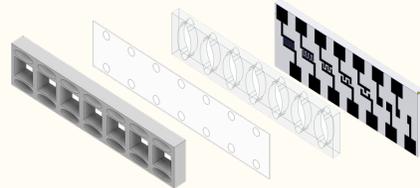
# Per costruire un DT: passi standard di simulazione

Implants for nerve stimulation



Courtesy of C. Merla, S. Bossi, M. Del Brocco, ENEA

Microfluidic Lab-On-Chip



Courtesy of G. Antonelli, E. Martinelli, F. Camera, C. Merla, Tor Vergata Univ., ENEA

Geometria della struttura (disegno CAD, immagini)

Caratteristiche fisiche

Condizioni al contorno e mesh

Risolutori

- Tempo
- Frequenza
- Statico-quasi statico

Costruzione della realtà immersiva per il sistema

MRI images of a specific patient

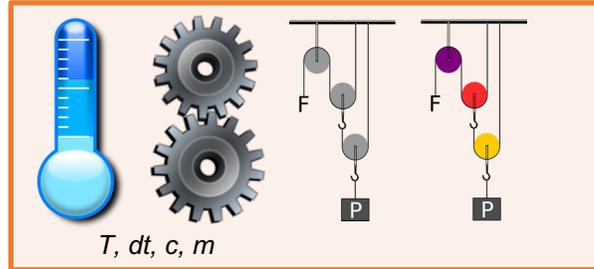
TMS treatments (by SimNIBS)





# Per costruire un DT: passi standard di simulazione

Parametri termici,  
chimici, elettrici,  
meccanici,  
microfluidici



Geometria  
della struttura  
(disegno CAD,  
immagini)

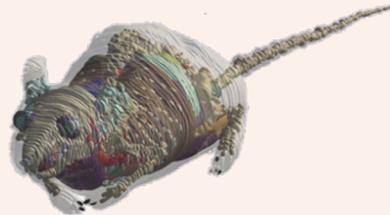
Caratteristiche  
fisiche

Condizioni al  
contorno e  
mesh

Risolutori

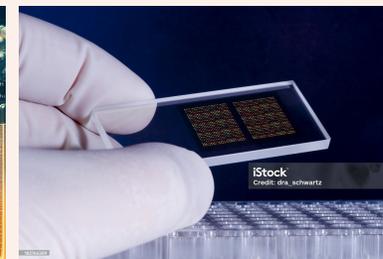
- Tempo
- Frequenza
- Statico-quasi statico

Costruzione  
della realtà  
immersiva per  
il sistema



Caratterizzazione of tissue parameters: example in an in vivo

model  $\epsilon, \sigma$  (by Sim4Life)



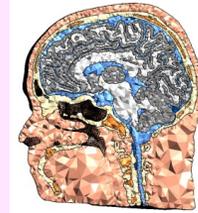
$K, \eta, \rho$





## Per costruire un DT: passi standard di simulazione

Human Head  
(by SimNIBS)



Geometria  
della struttura  
(disegno CAD,  
immagini)

Caratteristiche  
fisiche

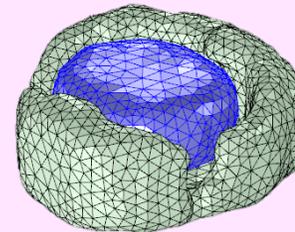
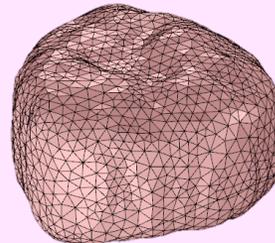
Condizioni al  
contorno e  
mesh

Risolutori

- Tempo
- Frequenza
- Statico-quasi statico

Costruzione  
della realtà  
immersiva per  
il sistema

Cell



Courtesy of A. Denzi, C. Merla,  
Sapienza Univ, ENEA

ER+Nucleus





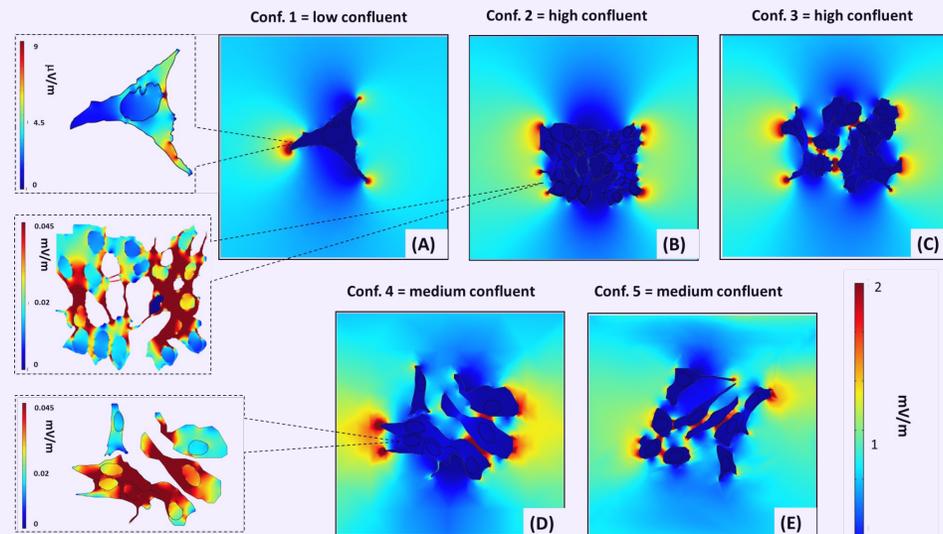
### Risolutori

- Tempo
- Frequenza
- Statico-quasi statico

Valutazione di specifiche quantità fisiche

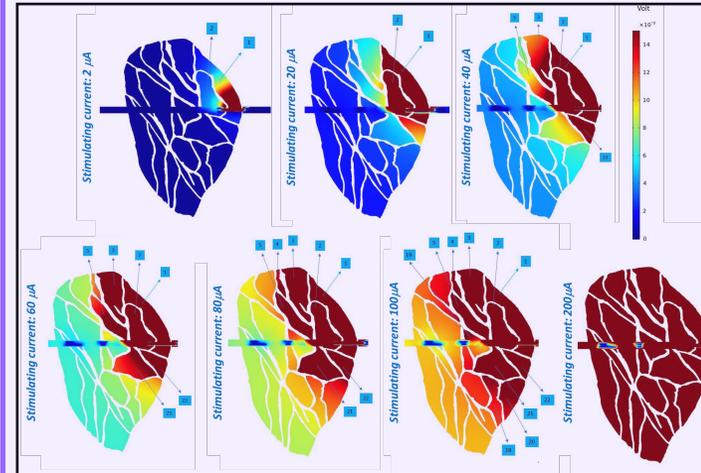
### Mesoscala

Single cell, cell aggregates

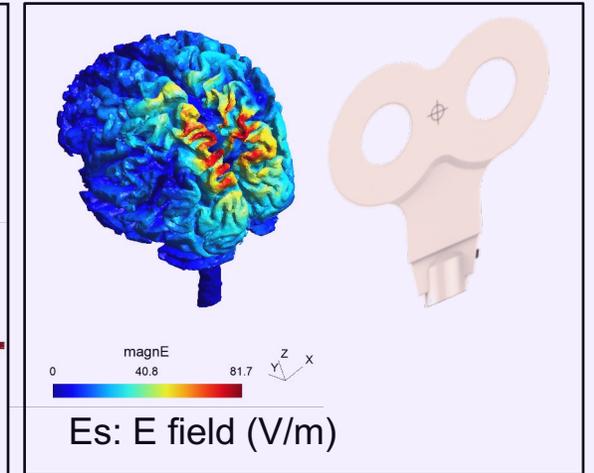


### Macrosala

Vagus nerve stimulation

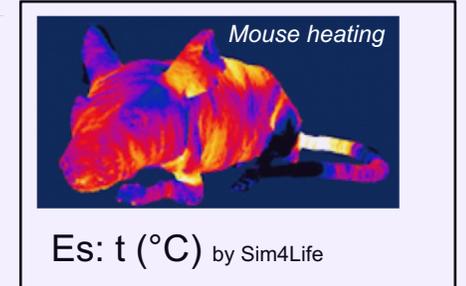
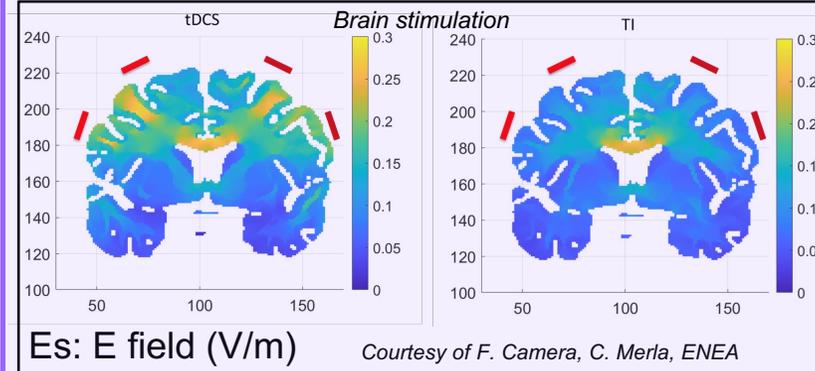


Brain stimulation (TMS)



Es: J (A/m<sup>2</sup>)

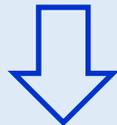
Courtesy of F. Camera, C. Merla, ENEA





## Conclusione e sfide future

- I **DT** permettono un approccio **multiscala e multifisico** per affrontare **problemi complessi** che coinvolgono diversi fenomeni fisici su varie scale temporali tipici delle biotecnologie, bio-farmaceutica e biomedicina.
- I **DT** hanno la capacità di modellare grandezze non direttamente misurabili e questo consente di fare **predizioni accurate**, migliorando la comprensione e la gestione dei sistemi analizzati a più livelli.
- L'**utilizzo di DT** accelera i processi lunghi e complessi, rendendoli più **efficienti e contribuendo significativamente alla riduzione dei costi operativi**.
- La potenza di calcolo avanzata a disposizione permette l'implementazione di DT sempre più articolati e la scalabilità delle soluzioni adottate garantendo la capacità di **gestire grandi quantità di dati e di risolvere problemi complessi in modo efficiente**.



- L'integrazione con **tecnologie di realtà immersiva** offre nuove modalità di visualizzazione e interazione con i dati, migliorando l'analisi e la comprensione dei fenomeni studiati.





Finanziato  
dall'Unione europea  
NextGenerationEU



Ministero  
dell'Università  
e della Ricerca



Italiadomani  
PIANO NAZIONALE  
DI RIPRESA E RESILIENZA



Caterina Arcangeli e Caterina Merla

ENEA, SSPT-TECS

Email: [caterina.arcangeli@enea.it](mailto:caterina.arcangeli@enea.it), [caterina.merla@enea.it](mailto:caterina.merla@enea.it)

Progetto ECS 0000024 Rome Technopole, – CUP B83C22002820006, PNRR Missione 4 Componente 2 Investimento 1.5, finanziato dall'Unione europea – NextGenerationEU”.

