



INNOVAZIONE
E RICERCA

PROCESS SYSTEMS ENGINEERING LABORATORY (PSE-LAB)

Un riferimento per l'R&D nell'industria di processo

Fondato e diretto dal professor Davide Manca, il PSE-Lab del Politecnico di Milano si distingue per l'intenso legame e l'interazione con l'industria chimica, farmaceutica e di processo, svolgendo importanti attività di consulenza e di ricerca sia in sede che direttamente in campo. Vediamo quali sono le sue principali attività.

A CURA DI GABRIELE MODINI



FOTO ABB

PSE-Lab è l'acronimo di Process Systems Engineering Laboratory. Il PSE-Lab fu fondato presso il Politecnico di Milano nei primi Anni '90 nell'attuale Dipartimento di "Chimica, Materiali e Ingegneria Chimica - Giulio Natta". In oltre 20 anni di vita il PSE-Lab ha visto la partecipazione di numerose persone che hanno contribuito a raggiungere significativi risultati sia in campo scientifico che di soluzione dei problemi applicati all'industria chimica, di processo e farmaceutica.

Il PSE-Lab è costituito da una base fissa di dottorandi di ricerca e post-doc supportati a loro volta da studenti di laurea di primo livello e magistrale. Intense collaborazioni accademiche a livello nazionale ed internazionale permettono di condurre attività scientifiche basate su progetti articolati a più attori. Logo del PSE-Lab è la lettera greca Ψ stilizzata, dato che la pronuncia inglese dell'acronimo PSE ricorda appunto la fonetica della Ψ .

L'iniziale Laboratorio di Calcolo, oggi PSE-Lab, fu creato per affiancare e differenziare le attività di ricerca condotte nei laboratori chimici e di prove sui materiali già presenti in Dipartimento.

Le attività di Process Systems Engineering si basano sull'utilizzo del

computer come strumento di supporto all'ingegneria di processo. L'acronimo inglese CAPE (Computer Aided Process Engineering) indica come un problema fisico/chimico descritto da opportuni modelli matematici possa essere risolto con specifici algoritmi numerici tramite l'uso del computer. Gli elementi di modellazione dei sistemi e definizione/utilizzo degli algoritmi rappresentano il cuore pulsante della ricerca e consulenza condotte presso il PSE-Lab.

In pratica, si tratta di progettare qualcosa che non ancora realizzato o di simulare il comportamento di sistemi già esistenti ma non compresi a fondo. Oggetto dello studio possono essere un'apparecchiatura singola, ma anche un impianto intero, o più in generale un sistema complesso. Si può arrivare a progettare l'intero layout d'impianto, dettagliato per ogni singola apparecchiatura, il che va sotto la definizione di "Conceptual Design". La finalità è quella di identificare i Criteri di Ottimizzazione che rendono al meglio la funzionalità dell'impianto, anche sotto l'aspetto economico.

Vediamo quali sono le principali attività di PSE-Lab, che ci ha raccontato Davide Manca, Direttore del PSE-Lab sin dalla sua fondazione.

INNOVAZIONE E RICERCA

LE ATTIVITÀ DI SIMULAZIONE

Simulare significa calcolare tramite un modello matematico il dipanarsi di un evento, il funzionamento di un'apparecchiatura, la dinamica di un impianto, la distribuzione temporale di un farmaco nel corpo umano. Una volta convalidato il modello matematico descrivente il fenomeno o il sistema, questi può essere utilizzato in un'ottica di ottimizzazione sia in campo progettuale che di conduzione del sistema stesso (e.g. impianto, processo chimico/industriale/biologico).

L'attività di simulazione svolta presso il PSE-Lab ha spaziato negli anni dalla conduzione, controllo e supervisione di impianti di termovalorizzazione alla microincapsulazione di farmaci; dalla raffinazione del greggio in colonne di topping alla distillazione batch; dalla simulazione di eventi incidentali alla formazione degli operatori di campo in ambienti virtuali 3D immersivi; dalla ottimizzazione sonochimica di un processo di idratazione alla progettazione della sperimentazione per prove di incendio in una galleria ferroviaria. Tutti questi argomenti significativamente differenti ed apparentemente scollegati sono in realtà sottesi da un denominatore comune che consiste nel concetto di modello matematico.

La simulazione e l'ottimizzazione si fondano su un opportuno modello matematico che, risolto utilizzando opportuni algoritmi di calcolo, permette di riprodurre la realtà e quindi progettare, rimodulare, correggere, predire, controllare e migliorare sia i fenomeni che i sistemi investigati.

MODELLI ECONOMETRICI NEL PETROLCHIMICO

La novità dell'approccio del PSE-Lab, diretto dal Prof. Manca, è stato di prendere in considerazione anche l'aspetto economico che riguarda la previsione (fino a 5/10 anni) del costo delle materie prime e delle utilities sulla base di modelli econometrici. In tal modo è possibile ipotizzare scenari futuri, legati alla storia pregressa, sulla cui base costruire il layout ottimale di un impianto, che non è, ovviamente, del tutto rigido, poiché occorre determinare alcuni gradi di libertà. Comunque, alla fine - restando nell'ambito dei processi della petrol-



**DAVIDE MANCA, DIRETTORE
DEL PSE-LAB**

chimica - tutto è ricondotto al prezzo del petrolio, che, almeno per i prossimi 30 anni, resterà la materia prima fondamentale.

Occorre anche considerare la dicotomia tra economia propriamente detta e finanza. Ad esempio, negli USA i prezzi dello shale gas seguono, con qualche mese di ritardo, le quotazioni europee. Si tratta di quotazioni decisamente superiori a quelle dei loro costi reali. Su tali premesse si basano le contrattazioni tra società di ingegneria e clienti finali. Infatti, le società di ingegneria non si possono limitare a fare offerte che tengano in considerazione solo i costi di costruzione di un impianto, ma devono anche essere in grado di fornire ai possibili clienti una previsione dei flussi di cassa relativi alla gestione dell'impianto stesso. Tale calcolo diventa assai complesso, poiché la variabilità dei prezzi dei vari prodotti chimici può essere assai elevata.

Si può anche verificare il caso in cui - per effetto di una volatilità dei mercati particolarmente elevata - il costo della materia prima sia superiore a quello del prodotto finale. In tal caso, è ovvio che non conviene produrre.

Un esempio concreto di tale situazione si è verificato negli impianti a tecnologia BASF, in cui si produce benzene da toluene, come intermedio per la produzione di stirene. Allo stato attuale, tale impianto viene esercito solo circa il 40% del tempo totale. La conclusione è che anche il miglior impianto del mondo sotto l'aspetto tecnico può diventare antieconomico in conseguenza della variabilità dei prezzi di mercato dei vari prodotti.



IL GRUPPO DI LAVORO DEL PSE-LAB



PSE-LAB SI OCCUPA DI STUDI DI FATTIBILITÀ IN CAMPO PETROLCHIMICO

Il PSE-Lab del prof. Manca ha lavorato sulle correlazioni tra un indice base, dipendente dal prezzo del petrolio, e l'economicità delle specifiche produzioni petrolchimiche, un utile strumento per le società di ingegneria, che se ne possono servire per i loro studi di fattibilità. Per quanto concerne le fonti di finanziamento del PSE-Lab, occorre dire che sono di provenienza del mondo industriale, attraverso lavori di consulenza o contratti di ricerca.

RICOSTRUIRE LA DINAMICA DI EVENTI INCIDENTALI

Lo studio degli eventi incidentali occorsi nell'industria di processo o nel settore dei trasporti permette di comprendere più approfonditamente quanto realmente accaduto e predisporre per il futuro quelle azioni, dispositivi e metodologie volte a ridurre l'incidenza delle conseguenze nel caso in cui eventi analoghi dovessero ripetersi.

Oggi come non mai, anche a fronte di incidenti avvenuti nel recente passato per errori di valutazione o gravi negligenze, si avverte la necessità di dotarsi di strumenti di simulazione e, ancora prima, di modelli matematici in grado di descrivere la variazione delle grandezze coinvolte nel fenomeno in atto.

L'esplosione e l'incendio della sezione di isomerizzazione delle paraffine presso la raffineria BP di Texas City, USA, nel marzo 2005 costò la morte di 15 persone e il ferimento di altre 180 con danni economici pari a 1.5 miliardi di dollari e la fermata d'impianto per 12 mesi.

L'evento incidentale di Viareggio del giugno 2009 vide il deragliamento di un convoglio di 14 ferrocisterne cariche di 630 ton di GPL e l'impatto della prima con un ostacolo posto sulla massicciata della stazione con conseguente incisione della virola metallica e rilascio di 45 ton di GPL. Lo spargimento di una pozza e la formazione di una nube di gas denso verso il quartiere circostante furono all'origine delle esplosioni ed incendi distribuiti che portarono alla morte di 32 persone, al ferimento di altre 30 e alla evacuazione di 1100 abitanti. I danni ammontarono a 32 ME.

Ricostruire la sequenza temporale e quantificare dettagliatamente i fenomeni collegati a tali eventi incidentali ha permesso di determinare le conseguenze e comprendere se azioni alternative, dispositivi aggiuntivi di sicurezza e procedure specifiche di intervento permettano di mitigare gli effetti di analoghi eventi futuri (magari di magnitudo differente) e correggere pratiche operative deficitarie o errate.

La simulazione di eventi incidentali trova inoltre applicazione nella redazione dei Rapporti di Sicurezza richiesti alle ditte a rischio di incidente rilevante (secondo quanto stabilito dalla Direttiva Seveso in ambito comunitario). Ciò conduce all'identificazione dei top events e alla quantificazione delle possibili conseguenze, sia per le lesioni alle persone che per i danni alle strutture. Questi dati permettono di determinare le distanze di sicurezza e quindi da una parte la pianificazione del territorio e delle attività ad esso connesse e dall'altra la modulazione dei quantitativi stoccati e lavorati per rientrare nelle soglie di sicurezza dettate dalla Legge.



FOTO AIR TESTING

PROGETTAZIONE DI PROCESSO E STUDI DI FATTIBILITÀ

Lo studio di fattibilità è uno strumento conoscitivo applicato in ambito progettuale o per l'ampliamento e rimodulazione dell'operatività di impianto o di processo. I risultati dello studio di fattibilità consentono di effettuare una prima verifica tecnica di realizzabilità organizzativo-gestionale ed economica. Gli studi di fattibilità economica relativa agli impianti chimici sono effettuati stimando la remuneratività di un determinato processo produttivo sulla base dei profitti derivati dalla vendita dei prodotti e dei costi associati all'acquisto delle materie prime ed esercizio dell'impianto. La risoluzione di problemi di scheduling, planning e, più in generale, di progettazione concettuale degli impianti e processi chimici, deve necessariamente recepire la continua sfida relativa alla incertezza di mercato e alle fluttuazioni delle quotazioni delle materie prime, dei prodotti finali e delle utilities.

La fluttuazione di tali quotazioni, dovuta alla volatilità dei mercati, rende necessaria l'applicazione di metodologie innovative per con-

durre stime più affidabili e valutare la fattibilità operativa di impianto a fronte di scenari economici differenti (e.g., rialzisti, ribassisti). I prezzi dei composti e delle utilities costituiscono infatti la base per la stima dei costi operativi (OPEX) e, di conseguenza, per gli studi di fattibilità dei corrispondenti impianti.

Il PSE-Lab ha sviluppato appositi modelli economici ed econometrici per la stima futura dei costi delle materie prime, prodotti ed utilities e per la previsione dei loro scenari, subordinati ad un composto di riferimento, quale il greggio, applicandoli alla supply chain dell'industria (petrol)chimica e del settore Oil & Gas.

ANALISI DI PROCESSI DI TERMOVALORIZZAZIONE

Attualmente, il Centro sta lavorando sull'ottimizzazione di impianti di termovalorizzazione. Ciò riguarda sia il miglioramento della combustione e della produzione di vapore che il controllo delle emissioni. Per abbattere l'acidità dei fumi viene usata calce viva. La produzione di tale sostanza da ossido di calcio ed acqua veniva fatta con una tecnologia obsoleta tramite una coclea; al Centro ne è stata messa a punto una innovativa, in cui il miscelamento viene ottenuto semplicemente applicando ultrasuoni su un tubo di reazione. Altro campo studiato dal Centro è stato quello della produzione di poliuretani per calzature. Qui vengono usati dei precursori, sciolti in solventi aromatici o cicloalifatici.

Tali solventi potrebbero essere utilizzati per la produzione di droghe, nei cosiddetti "Paesi canaglia". Colà, i produttori di droghe acquisterebbero tali precursori solo per poter avere a disposizione il solvente, difficile da reperire nei loro mercati. Gli esportatori dei precursori devono dimostrare di aver venduto i loro materiali a dei clienti certificati. Non solo: devono anche poter dimostrare che nei loro prodotti la quantità di solvente è la minima necessaria e che la separazione dal prodotto base è difficile. Questa documentazione, integrata con uno studio che dimostri l'ottimizzazione del processo può essere prodotta dal Centro.

STUDI DA FARMACOCINETICA

Una delle attività di ricerca condotte presso il PSE-Lab è la modellazione farmacocinetica. L'obiettivo è quello di sviluppare un modello matematico capace di descrivere il percorso dei farmaci nel corpo umano, a partire dalla somministrazione fino alla loro eliminazione, quantificandone gli effetti. Ciò è reso possibile accoppiando due modelli: il primo, denominato farmacocinetico, mira a simulare l'evoluzione temporale della concentrazione del farmaco nel sangue e in specifici organi/tessuti di interesse. Il secondo, detto farmacodinamico, riconduce la con-

centrazione del farmaco agli effetti prodotti sull'organismo. Si tratta in un progetto di grande interesse nazionale che coinvolge un folto gruppo di università e centri di ricerca italiani, sponsorizzato dal Ministero dell'Università, dell'Istruzione e della Ricerca (MIUR). In particolare il progetto è focalizzato su una specifica categoria di farmaci antitumorali, detti siRNA. Tali farmaci promettono di rivoluzionare il mondo della medicina dato che possono essere progettati per contrastare vari tipi di malattie. Questa terapia innovativa ha però un punto critico, consistente nella difficoltà di veicolare il farmaco sul sito bersaglio.

Centri di ricerca di tutto il mondo stanno studiando soluzioni differenziate per risolvere tale limitazione. Presso il PSELab, applichiamo conoscenze tipiche dell'ingegneria chimica, relativamente ai fenomeni di trasporto delle specie chimiche, per quantificare la veicolazione dei farmaci alle masse tumorali, cercando di determinare dove risiedano i principali limiti di tale fenomeno. Il tutto è reso possibile applicando sofisticati metodi numerici come il calcolo agli elementi finiti, comunemente usato in altri campi della ricerca quali la fluidodinamica computazionale e la meccanica strutturale.

Parallelamente il laboratorio sta conducendo ulteriori progetti di interesse clinico, come lo sviluppo di modelli matematici applicati alla perfusione controllata di anestetici in sala operatoria. Una nuova frontiera della medicina è la cosiddetta anestesia robotizzata, che consiste nella somministrazione automatizzata di molecole capaci di indurre stati di incoscienza, necessari in caso di operazioni chirurgiche. Opportuni modelli farmacocinetici possono essere applicati per controllare in modo automatizzato il rateo di infusione del farmaco, allo scopo di garantire un ottimale mantenimento della sedazione.

Nel campo del controllo della somministrazione di farmaci a rischio di elevata tossicità, stiamo sviluppando delle metodologie capaci di produrre dei modelli farmacocinetici personalizzati che si adattino come un abito su misura ad ogni specifico paziente. Dato che ciascun individuo ha caratteristiche anatomiche e fisiologiche uniche, risulta di estrema importanza disporre di un modello farmacocinetico personalizzato da utilizzare nella assegnazione di una terapia customizzata. Questi studi risultano di interesse per numerose aziende farmaceutiche, dato che permettono di espandere le conoscenze di base richieste nello studio di nuovi farmaci e di garantire la sicurezza delle applicazioni cliniche.

Per saperne di più:

<http://pselab.chem.polimi.it/>

davide.manca@polimi.it



LE ATTIVITÀ DI CONSULENZA E RICERCA DI PSE-LAB

- Progettazione e simulazione di impianti di termovalorizzazione: forni, recupero termico, trattamento gas, abbattimento polveri
- Controllo basato su modello e ottimizzazione di conduzione di impianti di termovalorizzazione
- Controllo termografico della combustione di rifiuti solidi urbani e speciali
- Operator Training Simulator per addestramento operatori di impianti di trattamento rifiuti tossici
- Simulazione dinamica del processo di microincapsulazione di principi attivi
- Simulazione dinamica del processo di rilascio di farmaci microincapsulati
- Studio e conduzione ottimale del processo di attivazione mecano-chimica di farmaci
- Identificazione delle condizioni operative ottimali di apparecchiature farmaceutiche: bassine, granulatori, essiccatori
- Traiettoria ottimale di conduzione di processi discontinui della chimica fine e farmaceutica
- Pianificazione della produzione in processi discontinui
- Simulazione dinamica di processi polimerici, PET-SSP
- Conduzione ottimale di avviamento e fermata di impianto
- Progettazione concettuale di un processo di produzione di fibre tessili da scarti/sottoprodotti/rifiuti biologici
- Quantificazione delle conseguenze a valle di detonazione di esplosivi civili e militari
- Supporto nella redazione di rapporti di sicurezza per ditte a rischio di incidente rilevante
- Manuale operativo comunale per la gestione dell'emergenza a valle di eventi incidentali industriali e da trasporto
- Progettazione della sperimentazione di incendi reali in gallerie stradali e ferroviarie
- Progettazione sonochimica di una nuova apparecchiatura per l'idratazione della calce
- Progettazione sonochimica di processi innovativi in campo Demil
- Supporto alla presa di decisione nel campo della sicurezza ed ope-

