



Davide Manca

PSE-Lab, Process Systems Engineering Laboratory

Dipartimento di Chimica, Materiali e Ingegneria Chimica “Giulio Natta”

Politecnico di Milano

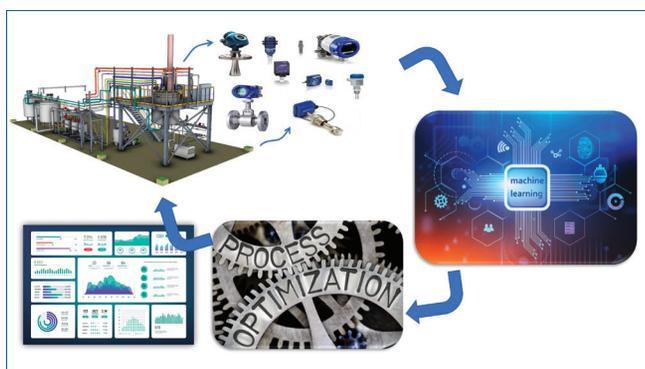
davide.manca@polimi.it

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

<http://dx.medra.org/10.17374/CI.2025.107.2.10>

L'AI RIVOLUZIONA L'INGEGNERIA CHIMICA

L'Intelligenza Artificiale sta rivoluzionando l'ingegneria chimica, ottimizzando processi e accelerando lo sviluppo di prodotti sostenibili. L'articolo esplora le applicazioni del machine learning, dai gemelli digitali alla scoperta autonoma, evidenziando i benefici in efficienza e competitività. La sinergia tra AI e ingegneria chimica è cruciale per affrontare transizione energetica e digitalizzazione.



Introduzione

L'Intelligenza Artificiale (AI) affonda le sue radici negli studi pionieristici degli anni Cinquanta dello scorso secolo sulla possibilità di riprodurre le facoltà cognitive umane nelle macchine [1]. Da allora l'AI ha attraversato fasi alterne di entusiasmi e disillusioni, ma è nell'ultimo decennio che ha visto una crescita veemente, trainata da una combinazione di fattori: la disponibilità di grandi volumi di dati digitali (i cosiddetti *big data*), potenza di calcolo in continua crescita, e algoritmi sempre più sofisticati [2].

Il *machine learning* (ML) è il cuore pulsante dell'AI moderna. Si basa sull'idea di “istruire” i computer ad apprendere dai dati, estraendone *pattern* e relazioni senza essere esplicitamente programmati. Grazie al ML, i sistemi di AI possono migliorare autonomamente le proprie prestazioni, con un approccio radicalmente diverso rispetto ai sistemi basati su regole predefinite.

Oggi l'AI sta ridisegnando i confini di numerosi settori e l'ingegneria chimica non fa eccezione. Dalle operazioni di processo alla ricerca e sviluppo (R&S),

l'AI ha il potenziale per rivoluzionare il modo in cui progettiamo, controlliamo e ottimizziamo processi e prodotti chimici. Il presente articolo esplora le basi del ML e le applicazioni specifiche più promettenti dell'AI nell'ingegneria chimica, con un focus su casi studio pratici che dimostrano il suo potenziale di innovazione e creazione di valore per l'industria.

Fondamenti dell'AI per l'ingegneria chimica

L'espressione “Intelligenza Artificiale” abbraccia un vasto ecosistema di tecniche e algoritmi, che è possibile classificare in tre macro-categorie [3]:

- apprendimento supervisionato (*supervised learning*): il sistema apprende una funzione che mappa *input* ad *output* basandosi su un insieme di esempi dei quali si conosce già l'*output* corretto (dati etichettati). I problemi tipici sono regressione e classificazione;
 - apprendimento non supervisionato (*unsupervised learning*): il sistema cerca *pattern* “nascosti” in un insieme di dati non etichettati, ad esempio raggruppando esempi simili (*clustering*) e/o riducendo la dimensionalità;
 - apprendimento per rinforzo (*reinforcement learning*): il sistema impara una politica d'azione tramite interazione continua con un ambiente, ricevendo ricompense o penalità in funzione delle azioni scelte.
- Nel contesto dell'ingegneria chimica, tra le tecniche di ML più utilizzate troviamo [2, 3]:
- regressione: lineare, polinomiale, non lineare (e.g., Support Vector Regression)
 - reti neurali artificiali (Artificial Neural Networks, ANN)



- macchine a vettori di supporto (Support Vector Machines, SVM)
- alberi di decisione e random forest
- reti bayesiane
- clustering: k-means, gerarchico, basato su densità.

Applicare l'AI a problemi di ingegneria chimica presenta tuttavia sfide specifiche quali la disponibilità di dati di processo sufficienti, affidabili e di qualità [4]. I dati sono spesso eterogenei (e.g., serie storiche di sensori, dati da laboratori), non strutturati e con valori mancanti o *outlier* (i.e. errori grossolani). Le campagne sperimentali mirate rappresentano una preziosa fonte di dati "puliti" per l'addestramento di modelli. Esiste poi il problema della interpretabilità e trasparenza dei modelli, specie per reti neurali complesse che appaiono all'occhio dell'utente come "scatole nere". La spiegabilità è cruciale per l'accettazione degli utenti e critica in ambiti regolati come quello farmaceutico [5]. Si ha poi la generalizzabilità dei modelli a condizioni operative diverse da quelle dell'addestramento. In tale ambito la modellazione ibrida supportata da principi primi può essere sinergica ed esplicativa [6]. Si ha, infine, l'aspetto della scalabilità e della finalizzazione negli ambienti di produzione per garantire prestazioni in tempo reale, alta disponibilità e sicurezza.

AI per l'ottimizzazione e il controllo di processo

Uno degli ambiti applicativi più promettenti dell'AI nell'ingegneria chimica è l'ottimizzazione delle condizioni operative e della qualità di prodotto. La sfida è identificare i *setpoint* di processo in grado di massimizzare opportuni indici di prestazione (KPI) come resa, consumo energetico, tempo di ciclo, nel rispetto di vincoli operativi di processo e di qualità del prodotto. L'approccio classico si basa su modelli basati su principi primi che descrivono il processo tramite si-

stemi di equazioni algebriche, differenziali (ordinarie o alle derivate parziali), algebrico-differenziali, integro-differenziali o agli elementi finiti. Questi modelli però richiedono una profonda conoscenza della fenomenologia e della termodinamica e cinetica coinvolte, non sempre disponibili per sistemi significativamente complessi o ancora poco studiati.

L'alternativa basata su AI (Fig. 1) prevede di addestrare modelli di ML (es. reti neurali) su dati storici di processo o campagne sperimentali dedicate, per individuare relazioni empiriche tra variabili chiave (temperatura, pressione, composizione ecc.) e KPI. Questi modelli possono poi essere integrati in routine di ricerca euristica che scandagliano lo spazio delle variabili di decisione (i.e. gradi di libertà) per trovare l'ottimo vincolato [7].

I vantaggi dell'approccio ML includono rapidità di sviluppo, capacità di modellare sistemi di tipo *black-box* molto complessi e flessibilità. Allo stesso tempo, la qualità delle soluzioni dipende fortemente dalla rappresentatività e numerosità dei dati di addestramento.

L'AI può anche potenziare le prestazioni dei sistemi di controllo di processo. Da una parte, modelli di ML possono essere utilizzati per predire variabili di qualità difficili o impossibili da misurare in continuo, abilitando schemi di controllo inferenziale [8]. Dall'altra, l'AI può rendere adattivo il sistema di controllo modificandone/aggiustandone i parametri in funzione dei cambiamenti dell'impianto.

Più recentemente, la combinazione di modelli basati su principi primi e modelli ML in soluzioni ibride ha dimostrato una elevata sinergia in grado di migliorare la capacità predittiva del sistema risultante [6]. L'ottimizzazione e il controllo basati su AI stanno già portando benefici concreti all'industria di processo in termini di efficienza e profittabilità.

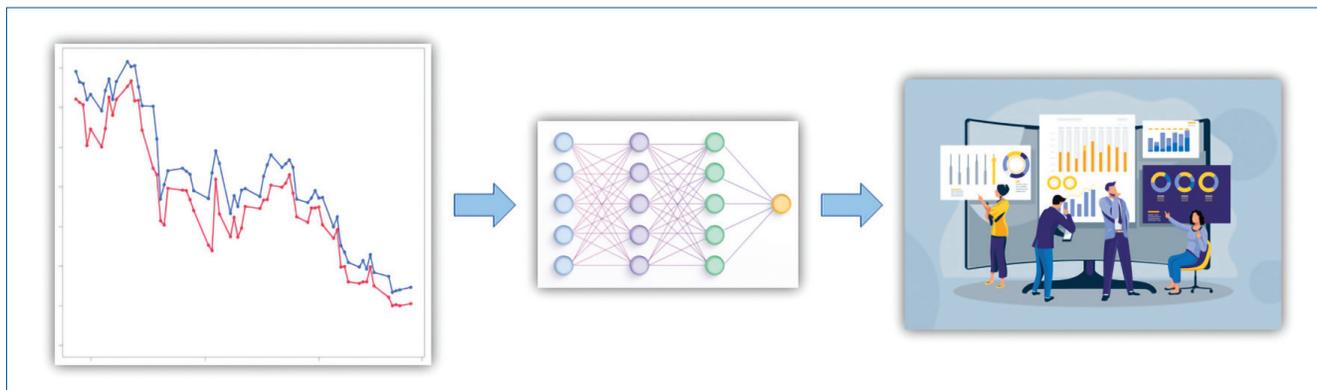


Fig. 1 - Ottimizzazione di processo basata su *machine learning*



Fig. 2 - Schema di principio di un sistema di monitoraggio basato su AI

AI per il monitoraggio e la manutenzione predittiva

Un'altra area in cui l'AI dimostra grande valore è il monitoraggio delle condizioni di processo e delle apparecchiature. Rilevare prontamente anomalie, derive e malfunzionamenti è cruciale per garantire sicurezza, qualità e continuità operativa. I sistemi di AI eccellono nell'individuare *pattern* anomali anche in spazi a molte dimensioni, superando i limiti dei sistemi convenzionali basati su soglie di allarme definite da intervalli operativi nominali [9].

Un approccio comune (Fig. 2) prevede di addestrare modelli di ML sul comportamento regolare di un impianto, utilizzando dati storici opportunamente filtrati. Il modello viene poi applicato in tempo reale ai dati di processo: se il sistema reale si discosta troppo dalle previsioni del modello, viene emesso un avviso/allarme.

Tecniche simili possono essere applicate alla diagnostica predittiva, per stimare lo stato di salute delle apparecchiature e la vita utile residua sulla base dell'analisi dei parametri di funzionamento. Modelli di ML possono imparare a correlare segnali precursori (e.g., vibrazione, temperatura, pressione ecc.) con l'insorgenza di specifiche modalità di guasto [10]. La vita utile residua predetta abilita opportune politiche di manutenzione su condizione, con interventi mirati prima del guasto.

La manutenzione predittiva abilitata dall'AI promette di trasformare l'approccio alla gestione degli asset, con forti impatti su prestazioni, sicurezza e sostenibilità economica. Ma la strada da percorrere è ancora lunga: secondo un recente rapporto di IBM [11], circa il 42% delle organizzazioni con oltre 1.000 dipendenti ha implementato attivamente l'AI nelle proprie attività. Tuttavia, l'adozione tra le piccole e medie imprese (PMI) è meno diffusa: solo il 15% delle medie imprese e il 7% delle piccole imprese hanno avviato progetti di AI.

AI per la modellazione e la simulazione di processo

Lo sviluppo di modelli di processo accurati e predittivi è il cuore di molte attività dell'ingegneria chimica, dalla progettazione, all'ottimizzazione, al controllo. I tradizionali modelli basati su principi primi offrono una rappresentazione fisica, trasparente e interpretabile ma richiedono una profonda conoscenza del sistema e sforzi di sviluppo significativi, soprattutto quando entrano in gioco fenomeni di trasporto e cinetiche complesse.

I modelli basati su ML di tipo *data-driven* apprendono relazioni *input-output* direttamente dai dati di processo o di laboratorio, anche in assenza di equazioni costitutive. Possono così descrivere comportamenti complessi in modalità puramente incentrata sul dato di processo. Il principale vantaggio di tale approccio consiste nella rapidità di sviluppo: una volta acquisiti/preparati/processati i dati, l'addestramento richiede poco sforzo umano ed è altamente automatizzabile. Il rischio consiste però nel generare modelli completamente *black-box*, poco interpretabili e potenzialmente incapaci di estrapolare al di fuori del dominio dei dati di addestramento. Una soluzione molto promettente è data dai modelli ibridi che integrano equazioni di bilancio con modelli ML per proprietà termodinamiche, cinetiche, e coefficienti di trasporto (Fig. 3) [12].

Sul fronte applicativo, modelli basati su reti neurali sono già ampiamente impiegati per la simulazione e l'ottimizzazione di processo, soprattutto in ambito petrolchimico, con risultati promettenti in termini di accuratezza ed efficienza computazionale. Risulta ragionevole prevedere che l'evoluzione delle tecniche di ML porterà progressivamente allo sviluppo di modelli sempre più efficienti, affidabili e consistenti.

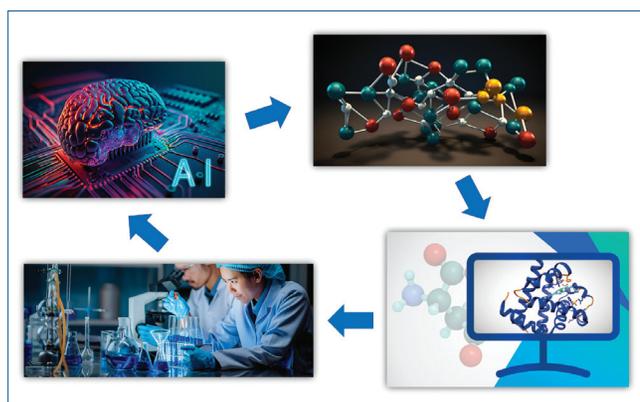


Fig. 3 - Rappresentazione schematica di un modello ibrido che integra moduli a principi primi e moduli basati su *machine learning*



AI nella progettazione di prodotti e materiali

L'ambito probabilmente più dirompente per l'AI nell'industria chimica è quello dell'accelerazione della scoperta di nuovi prodotti e materiali. Sviluppare una nuova molecola o una nuova formulazione con proprietà specifiche risulta essere un processo lungo e costoso, che procede spesso per tentativi ed errori. Gli algoritmi di ML possono rendere questo processo molto più efficiente ed efficace, sia nella generazione di ipotesi promettenti che nella indagine sistematica di vasti spazi chimici.

Un approccio consolidato è dato dai modelli QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationship) che correlano descrittori numerici della struttura molecolare (e.g., *fingerprint*, frammenti) all'attività biologica o ad altre proprietà di interesse [13]. Modelli di ML addestrati su vaste banche dati possono predire le proprietà di composti mai sintetizzati con un buon grado di confidenza, guidando ed ispirando la ricerca sperimentale.

Studi recenti hanno esplorato l'uso di tecniche avanzate come il *deep learning* e il *reinforcement learning* per generare nuove molecole candidate contraddistinte da profili ottimali multiobiettivo [14]. Un algoritmo AI può essere addestrato a costruire molecole valide "atomo per atomo", ricevendo un punteggio che misura quanto le proprietà della configurazione candidata si avvicinino a quelle desiderate/attese. Il sistema apprende così a esplorare lo spazio chimico multidimensionale in modo sempre più mirato ed efficiente.

Nel campo dei materiali (Fig. 4), l'AI sta emergendo come potente alleato per scoprire nuove leghe, polimeri, catalizzatori con proprietà ottimizzate (e.g., resistenza, reattività, selettività).

Prospettive future

Le potenzialità dell'AI per trasformare l'ingegneria chimica sono vaste e in gran parte ancora da esplorare e da valorizzare appieno. In futuro, possiamo aspettarci una crescente sinergia e convergenza dell'AI con altre tecnologie caratterizzate da crescita esponenziale.

Sul fronte dei dati, l'*Internet of Things* (IoT) industriale metterà a disposizione un'enorme quantità di dati di processo in tempo reale, abilitando analisi predittive e ottimizzazioni sempre più raffinate. Tecnologie come il 5G, l'*edge computing* e il *cloud ibrido* saranno chiavi abilitanti per lo sviluppo di fabbriche sempre più autonome e intelligenti [15].

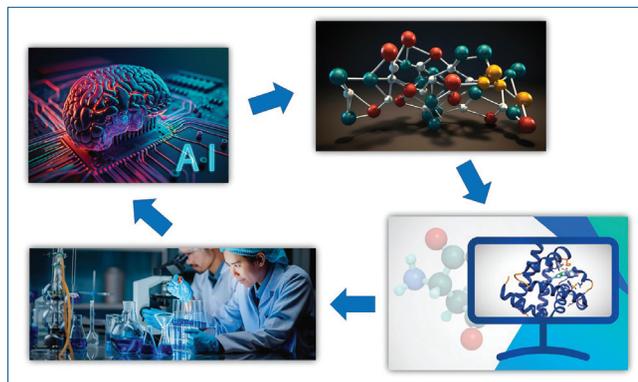


Fig. 4 - AI per accelerare il ciclo di scoperta di nuovi materiali

I modelli di AI incorporati in sensori e attuatori IoT costituiranno il sistema nervoso dei gemelli digitali, permettendo la navigazione in tempo reale dello spazio delle soluzioni ottimali e la pronta reazione a perturbazioni ed eventi inaspettati. La possibile integrazione con la tecnologia blockchain garantirà integrità, tracciabilità e trasparenza dei dati lungo filiere produttive e logistiche sempre più globali e interconnesse [16]. L'avanzamento della robotica e dell'automazione porterà infine allo sviluppo di *cobot* (i.e. robot collaborativi) dotati di AI sempre più sofisticata, in grado di affiancare in sicurezza gli operatori di impianto nello svolgimento di compiti delicati e nel prendere decisioni anche in contesti poco strutturati/usuali [17]. L'interazione uomo-macchina sarà sempre più naturale grazie ai progressi nelle interfacce vocali e gestuali.

Tuttavia per cogliere appieno i benefici di questa rivoluzione "intelligente" sarà fondamentale investire nello sviluppo di competenze e nella riqualificazione del capitale umano. Secondo uno studio del *World Economic Forum* [18], entro l'attuale decennio il 50% dei lavoratori avrà bisogno di nuove capacità e il 40% dei ruoli chiave sarà ricoperto da professionisti con competenze STEM avanzate.

In quest'ottica, sarà cruciale formare una nuova generazione di ingegneri chimici supportati dalla conoscenza di tecnologie digitali e di ML, in grado di sfruttare appieno il potenziale dei dati e dell'automazione per innovare processi e prodotti in un'ottica di sostenibilità. Allo stesso tempo, occorrerà sviluppare interfacce e strumenti di AI trasparenti e usabili, che consentano un'interazione uomo-macchina efficace e sicura. Le aziende dovranno promuovere una cultura del cambiamento e dell'innovazione continua, incoraggiando la sperimentazione e l'adozione progressiva di casi studio di AI, secondo una pianifica-

zione flessibile supportata da metodologie consolidate. Collaborazioni strategiche con università, centri di ricerca e *startup* tecnologiche saranno la chiave per accedere al *know-how* e alle risorse di punta.

In un contesto globale sempre più competitivo e incerto, l'AI sarà un'arma strategica per anticipare i *trend*, ottimizzare le risorse, accelerare l'innovazione e, in sintesi, per creare valore in modo sostenibile. Le aziende che sapranno cogliere per tempo questa sfida avranno un vantaggio decisivo. Il futuro è nelle nostre mani: sta a noi dare forma a un'ingegneria chimica e a un'industria di processo "intelligente", a servizio del progresso e del benessere dell'umanità. La ricerca, la formazione, il dialogo tra tutti gli attori coinvolti costituiranno le fondamenta su cui costruire questa visione. L'AI, da oggetto di studio e sperimentazione, diventerà sempre più una tecnologia pervasiva e matura, pietra angolare di un'industria agile, connessa e sostenibile.

Al contempo l'AI non è una bacchetta magica: per dispiegare appieno il suo potenziale, richiede un profondo ripensamento dei processi, delle competenze, della cultura aziendale. Servono infrastrutture digitali robuste, metodi sistematici per la raccolta e la gestione dei dati, una stretta collaborazione tra esperti di dominio e di *data science*. L'introduzione dell'AI deve essere guidata da una visione strategica chiara e da un piano di sviluppo progressivo, partendo da casi studio ad alto impatto e basso rischio. La trasparenza, l'etica e la sicurezza devono essere prerequisiti imprescindibili, per costruire sistemi affidabili e accettati. È opportuno sottolineare che l'AI non sostituirà il ruolo dell'ingegnere chimico, ma lo amplierà e lo trasformerà. In un mondo sempre più "aumentato" dalla tecnologia, saranno decisive specifiche competenze quali il pensiero critico, il *problem solving* creativo, la comunicazione e l'apprendimento continuo. L'ingegnere del futuro dovrà essere in grado di sfruttare al meglio la sinergia tra intelligenza umana e artificiale. La strada è ancora lunga e non priva di ostacoli, ma il traguardo è a portata di mano e consiste in un'industria chimica e di processo più innovativa, efficiente, sostenibile e resiliente.

BIBLIOGRAFIA

- [1] J. McCarthy, "Programs with Common Sense", Proceedings of the Teddington Conference on the Mechanization of Thought Processes, 1959, 301.
- [2] Z. Ge *et al.*, "Data mining and analytics in

the process industry: The role of machine learning", IEEE Access, 2017, **5**, 20590.

- [3] M. Kubat, "An Introduction to Machine Learning. Second Edition", Springer, 2017.
- [4] L.H. Chiang *et al.*, *Meas. Sci. Technol.*, 2001, **12**, 1745.
- [5] U. Kamath, J. Liu, "Explainable Artificial Intelligence: An Introduction to Interpretable Machine Learning", Springer, 2021.
- [6] S. Pahari *et al.*, *Chemical Engineering Research and Design*, 2024, **204**, 292.
- [7] D. Zhang *et al.*, *Biotechnology and Bioengineering*, 2019, **116**, 2919.
- [8] L. Chiang *et al.*, *Annual Review of Chemical and Biomolecular Engineering*, 2017, **8**.
- [9] R. Chalapathy, S. Chawla, "Deep Learning for Anomaly Detection: A Survey", arXiv:1901.03407, 2019.
- [10] M.K. Menon, *Maintenance, Reliability and Condition Monitoring*, 2024, **4**, 44.
- [11] IBM, "Cresce l'adozione dell'AI da parte delle aziende", <https://it.newsroom.ibm.com/aiadoption2023>, 2024.
- [12] P. Shah *et al.*, *Computers & Chemical Engineering*, 2025, **194**, 108926.
- [13] Y.C. Lo *et al.*, *Drug Discovery Today*, 2018, **23**(8), 1538.
- [14] Z. Zhou *et al.*, *Scientific Reports*, 2019, **9**, 10752.
- [15] J. Wang *et al.*, *Journal of Manufacturing Systems*, 2018, **48**, 144.
- [16] S. Mane *et al.*, *Digital Twins and Applications*, 2024, **1**, 118.
- [17] A. Baratta *et al.*, *Procedia Computer Science*, 2023, **217**, 1887.
- [18] "The Future of Jobs Report 2020", World Economic Forum, 2020.

AI Revolutionizes Chemical Engineering

Artificial Intelligence is revolutionizing chemical engineering by optimizing processes and accelerating sustainable product development. This article explores machine learning applications, from digital twins to autonomous discovery, highlighting benefits in efficiency and competitiveness. The synergy between AI and chemical engineering is crucial for addressing the energy transition and digitalization challenges.