

## **VIRTCHEM: DALL'ATOMO ALL'IMPIANTO VIRTUALE**

### **Carlo Pirola, Alessandro Pedretti**

**RIASSUNTO:** La realtà virtuale è un nuovo strumento per l'insegnamento nelle scienze chimiche. L'Università di Milano ha infatti proposto il progetto internazionale VIRTCHEM "The VIRTUAL Immersive Education for CHEMistry and Chemical Engineering" promosso dall'Alleanza 4EU+ di alcuni atenei europei. Gli studenti hanno viaggiato dall'atomo e le molecole, alla reazione, fino all'impianto chimico industriale.

**TITOLO INGLESE:** VIRTCHEM: FROM THE ATOM TO THE VIRTUAL PLANT

**ABSTRACT INGLESE:** Virtual reality is a new tool for teaching in chemical sciences. The University of Milan last year proposed the VIRTCHEM international project "The VIRTUAL Immersive Education for CHEMistry and Chemical Engineering" promoted by the 4EU+ Alliance of some European universities. The students traveled from the atom and the molecules, to the reactions, to the industrial chemical plant.

**TESTO** (max 12000 caratteri spazi inclusi)

La realtà virtuale e immersiva (VR) è uno strumento tecnologico che sta trovando un numero di applicazioni sempre maggiore sia per il livello tecnologico raggiunto negli ultimi anni sia per lo sviluppo di software che la utilizzano in un numero di settori via via crescente. Inoltre, la recente emergenza sanitaria ha dato un impulso decisivo nell'affiancare e, in certi casi, sostituire esperienze vissute nella vita reale con le corrispondenti simulate nel mondo virtuale. In questo contesto, si è diffuso il termine di "metaverso" che rappresenta una sorta di universo parallelo sovrapposto al mondo fisico, col quale gli utenti possono interagire tramite dispositivi informatici in modo molto simile a quello reale.

Questi strumenti hanno un grande potenziale anche nel settore della didattica delle scienze chimiche, in quanto la visualizzazione e l'interazione in un ambiente tridimensionale consente di spiegare efficacemente concetti e situazioni che possono essere descritti o schematizzati solo grossolanamente in un approccio didattico tradizionale. Sia in Italia sia all'estero, in molti corsi di laurea di diverse università si stanno sperimentando sempre più frequentemente metodi didattici innovativi basati sull'utilizzo della realtà virtuale e su una proposta di apprendimento attivo (*active learning*), al fine di implementare il tradizionale approccio docente-centrico con un nuovo modello che prevede un ruolo primario e attivo per lo studente. I vantaggi che si possono ottenere si concretizzano in una maggiore partecipazione degli studenti e in una migliore iterazione col docente, permettendo una efficace comprensione dei concetti con conseguente riduzione del tempo necessario allo studio della materia. Un altro aspetto sempre apprezzato da studenti e docenti è l'internazionalizzazione dei percorsi di studio con periodi di permanenza in sedi estere al fine di integrare le nozioni tecniche con quelle linguistiche, di conoscere compagni e culture di altri nazioni e di sperimentare metodi didattici innovativi.

Nello scorso anno accademico, l'Università degli Studi di Milano ha proposto un progetto internazionale di didattica innovativa con un percorso complementare e sinergico con quello delle lezioni tradizionali basato sull'utilizzo della realtà virtuale immersiva. Il programma, dal titolo "VIRTCHEM project: The VIRTUAL Immersive Education for CHEMistry and Chemical Engineering" ha coinvolto l'Università degli Studi di Milano, l'Università "La Sorbonne" di Parigi e l'Università "Charles" di Praga ed è stato finanziato dall'Unione Europea attraverso la 4EU+ Alliance [1]. Questa alleanza riunisce sette università europee (le Università di Heidelberg, Copenhagen, Ginevra e Varsavia, oltre alle tre già citate) per rafforzare la visione europea di cooperazione e di arricchimento reciproco, sviluppando una nuova forma di cooperazione nell'insegnamento, nell'istruzione, nella

ricerca e nell'amministrazione con lo scopo di portare alla creazione di un sistema universitario europeo realmente integrato.

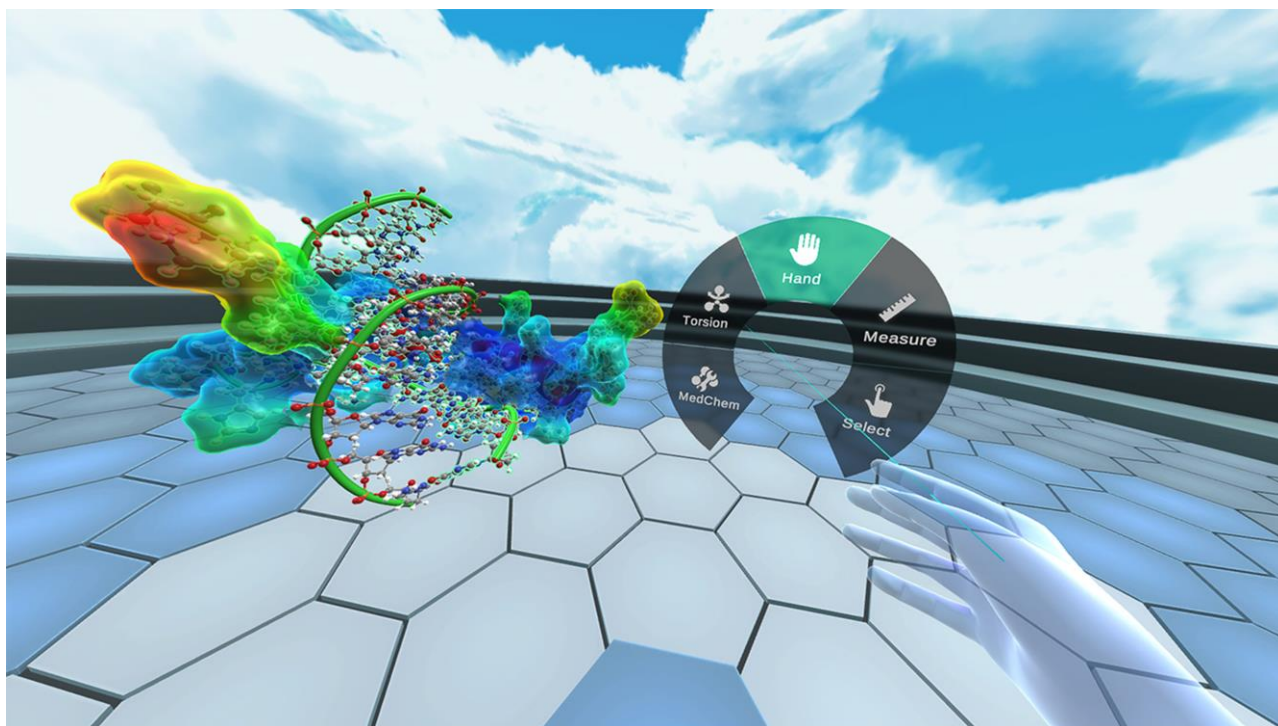
Il corso è stato strutturato con una serie di lezioni preliminari preparatorie erogate in modalità a distanza seguite da esercitazioni in presenza con l'utilizzo di quattro diversi software di realtà virtuale di seguito descritti. Le esercitazioni, della durata complessiva di tre settimane, sono state svolte a Milano, Parigi e Praga con la partecipazione di 10 studenti per ogni sede. Il budget messo a disposizione dall'alleanza 4EU+ ha consentito di rimborsare le spese di viaggio e di permanenza durante le tre settimane di lavoro. Inoltre, l'organizzazione in gruppi di lavoro composti da studenti provenienti dalle tre diverse sedi ha permesso di sviluppare una rete di collaborazione internazionale fra gli studenti stessi.

Il programma del corso è stato basato sull'utilizzo di programmi che permettono di visualizzare e di interagire in modo immersivo tramite visori per la realtà virtuale (VR) con atomi e molecole (Nanome [2], VEGA ZZ [3]), di effettuare degli esperimenti in un laboratorio di chimica analitica inorganica (LabSim [4]) e di simulare il funzionamento di un impianto industriale di Crude Distillation Unit (AVEVA XR [5]). Le esercitazioni proposte hanno avuto l'obiettivo di consentire agli studenti di svolgere attività non possibili nel mondo reale a causa di fattori quali dimensioni atomiche delle esperienze, disponibilità di apparecchiature, reazioni pericolose o disponibilità di impianti chimici pericolosi, complessi, e generalmente non accessibili dal punto di vista didattico. Il supporto teorico delle nozioni di base fornite nelle lezioni preliminari e durante le stesse attività dai docenti dei tre atenei ha garantito il raggiungimento dell'obiettivo centrale del corso, ovvero il miglioramento delle nozioni e delle conoscenze in materia chimica.

Procedendo in ordine di scala di realtà, è qui di seguito riportata una breve descrizione dei programmi utilizzati.

### **Nanome**

È un programma commerciale sviluppato dall'azienda statunitense Nanome Inc. che è stato progettato espressamente per funzionare con sistemi VR e, pertanto, presenta un'interfaccia utente pensata proprio per l'interazione mediante gli appositi controller. Rispetto ad altri programmi in cui l'esperienza VR è relegata alla sola visualizzazione 3D, Nanome consente un totale controllo della simulazione dall'interno dell'ambiente virtuale, dando la sensazione di essere stati miniaturizzati a livello molecolare e di poter "toccare" gli atomi. Grazie ai menu ben strutturati, è anche possibile eseguire le principali attività che si possono svolgere con un programma di modellistica molecolare convenzionale quali la misura di proprietà geometriche (distanze e angoli di torsione), la minimizzazione energetica, la visualizzazione delle traiettorie di dinamica molecolare, le simulazioni di docking e l'analisi delle proprietà interattive di un ligando.



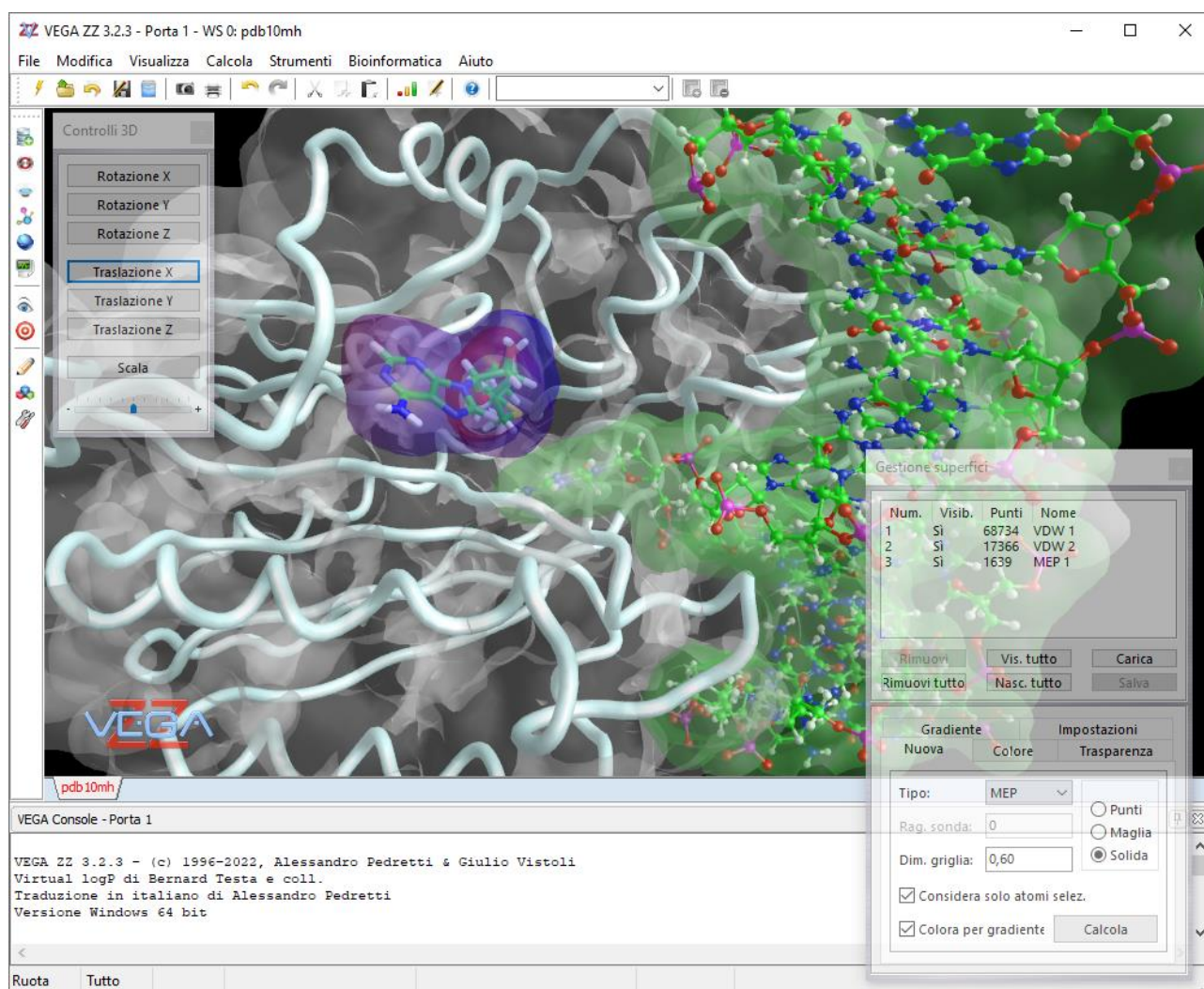
**Figura 1:** Esempio di interazione con una molecola all'interno dell'ambiente virtuale creato da *Nanome*. Immagine gentilmente concessa da Nanome Inc.

Una funzionalità sicuramente all'avanguardia dal punto di vista didattico è la possibilità di creare delle classi in cui gli studenti dotati ciascuno del proprio dispositivo VR possono partecipare in modo interattivo ad una lezione.

Ulteriori informazioni sono disponibili al sito <https://nanome.ai/>.

### **VEGA ZZ**

È una completa suite per la modellistica molecolare sviluppata da Alessandro Pedretti e coll. Costantemente aggiornato negli anni, è diventato uno strumento molto apprezzato non solo in ambito accademico, ma anche industriale. Infatti, questo programma, completamente gratuito per uso non-commerciale, vanta più di 25.000 utenti registrati ed è utilizzato anche da aziende quali Bayer A.G. e Dompé Farmaceutici S.p.A. Per funzionare, VEGA ZZ richiede un PC con sistema operativo Windows ed è in grado di sfruttare le moderne CPU multi-core come pure le GPU per accelerare i calcoli. L'output grafico può avvenire su un canonico monitor, tuttavia sono supportati diversi dispositivi 3D tra cui tutti i visori VR basati sullo standard OpenVR, mentre l'interazione con le molecole può avvenire tramite mouse, joystick/joypad e mouse 3D.



**Figura 3:** Visualizzazione del complesso fra citosina-C5-metiltransferasi, DNA e *S*-adenosil omocisteina (PDB ID: 10MH) con VEGA ZZ.

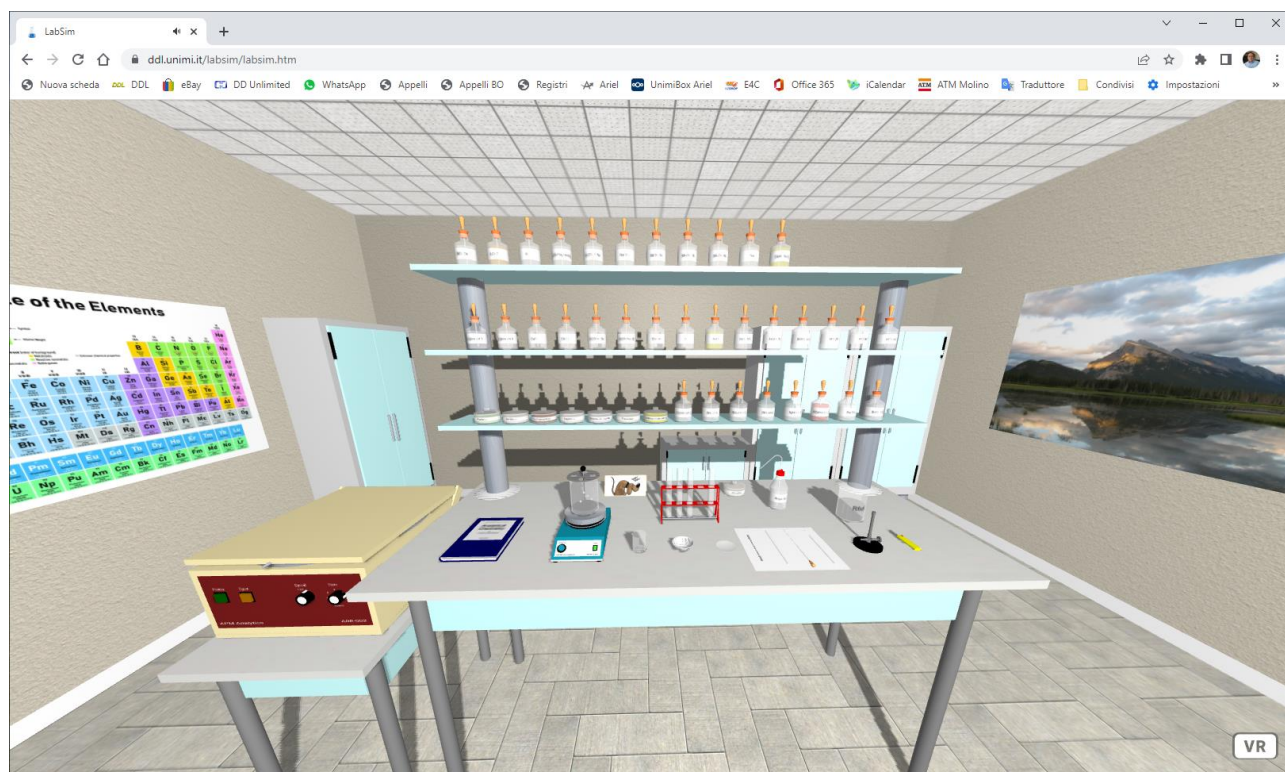
Con VEGA ZZ è possibile visualizzare le molecole con differenti modalità di rappresentazione e schemi colore, selezionare sottoinsiemi di atomi, modificare le molecole, come pure costruirle da zero con diversi strumenti integrati, manipolare librerie di molecole, eseguire calcoli di meccanica molecolare (minimizzazione, ricerca conformazionale e dinamica) e semi-empirici, fare studi di docking molecolare anche di grandi librerie di molecole. Infine, VEGA ZZ mette a disposizione potenti strumenti per il QSAR e per la predizione della tossicità oltre che del metabolismo basati su intelligenza artificiale.

VEGA ZZ può essere scaricato gratuitamente per uso non-commerciale dal sito <http://www.vegazz.net/>.

### LabSim

È un simulatore di laboratorio di analisi inorganica qualitativa che è stato sviluppato da Alessandro Pedretti dell'Università degli Studi di Milano per permettere agli studenti universitari e delle scuole superiori, costretti alla didattica a distanza per il lockdown, di supplire all'impossibilità di svolgere le esercitazioni di laboratorio in presenza. LabSim è un'applicazione Web 3D progettata per essere eseguita all'interno del browser per Internet e, pertanto, non richiede né hardware specifico né un

sistema operativo particolare. Può quindi funzionare con smartphone, tablet, PC e anche con tutti i visori VR supportati dalla tecnologia *A-Frame* [6] su cui si basa.



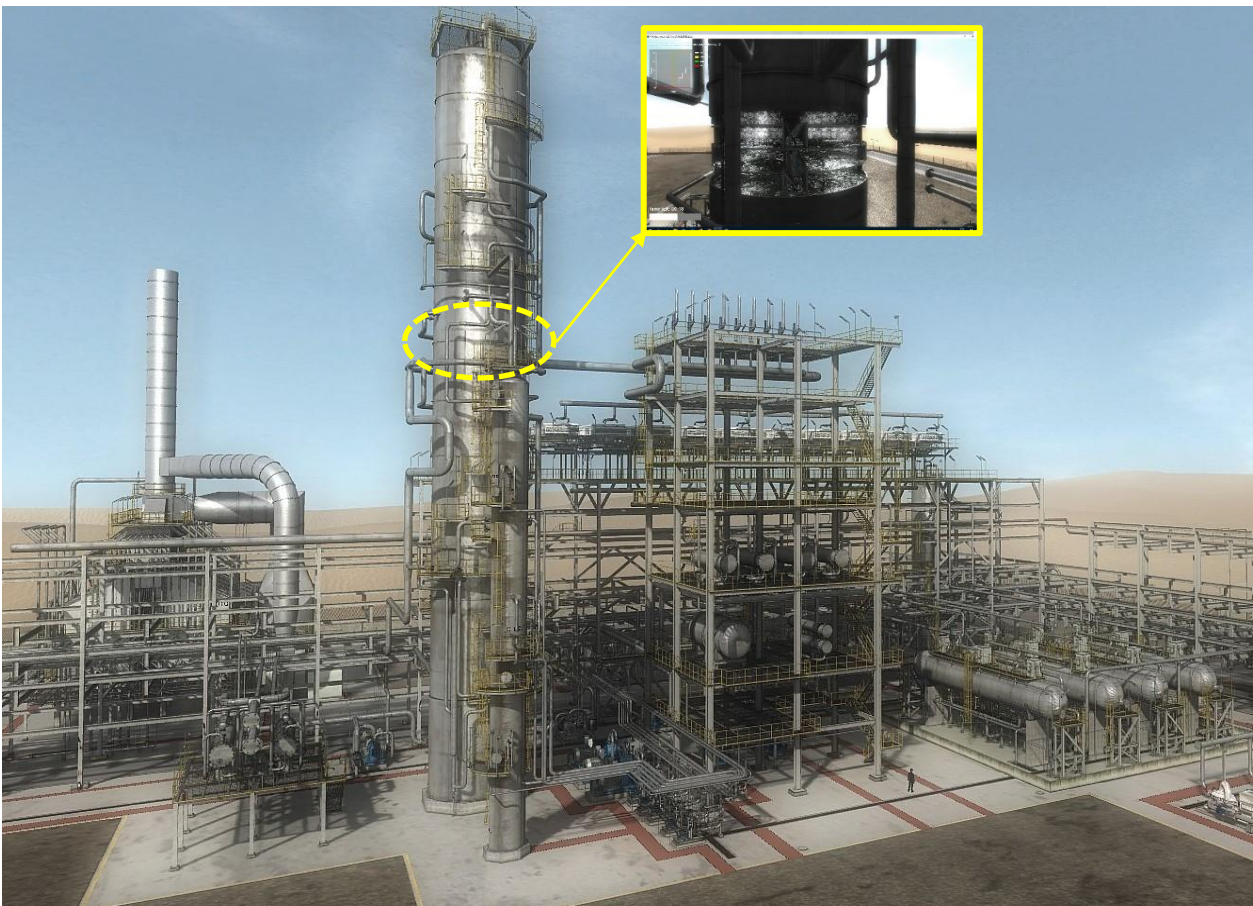
**Figura 2:** Il banco di lavoro riprodotto all'interno di *LabSim* dove è possibile interagire con reattivi, vetreria, e vari dispositivi (centrifuga, piastra elettrica e becco Bunsen).

Con *LabSim* ci si può esercitare come in un vero laboratorio di analisi chimica qualitativa inorganica, potendo svolgere attività quali: la verifica della solubilità, la misura del pH, la separazione di fase mediante centrifugazione, il riscaldamento su piastra o a bagnomaria, il riconoscimento degli anioni e dei cationi, il saggio alla fiamma e, più in generale, l'analisi completa di una sostanza inorganica idrosolubile o non idrosolubile. L'interazione con l'ambiente virtuale può avvenire con il mouse, i controller VR e anche mediante il riconoscimento vocale. È quindi possibile impartire comandi del tipo "prendi la provetta" e "aggiungi l'acido cloridrico diluito", dando la possibilità di avere un'esperienza di laboratorio anche a studenti con ridotte capacità motorie. Inoltre, lo studente viene guidato nelle varie esperienze dalla sintesi vocale che lo istruisce sulle corrette procedure da svolgere e da 70 tutorial video accessibili direttamente all'interno dell'ambiente 3D mediante una TV simulata. *LabSim* è disponibile gratuitamente al sito <https://www.ddl.unimi.it/labsim/>.

## **AVEVA XR**

*AVEVA XR* è un software prodotto dalla società *Aveva* (<https://www.aveva.com/>) che riproduce un intero impianto industriale di Crude Distillation Unit (CDU) in una spettacolare e molto realistica visione tridimensionale. Il programma consente non solo di visitare l'impianto, ma anche di interagire con esso in una maniera molto fedele al mondo reale sia per quanto riguarda la dettagliata visualizzazione 3D sia per la simulazione della chimica, della fisica e dei fenomeni di trasporto coinvolti. Se, per esempio, si prova ad aprire o chiudere una valvola, questa azione viene sottoposta a calcoli di simulazione dinamica che trasmettono all'operatore il risultante assetto di impianto. *AVEVA XR* è stato progettato per il settore di *operator training*, ma, dalla collaborazione con il gruppo di ricerca dell'Università degli Studi di Milano, è stata sviluppata una versione appositamente

scopo didattico. Infatti, sono state sviluppate delle esercitazioni basate sulla visita dell'impianto e comprensione dei processi tramite lettura dei documenti tecnici a disposizione, ovvero il *Process Flow Diagram* (PFD) e il *Pipe & Instrumentation Diagram* (PID). Gli studenti sono chiamati a consultare e ad interpretare correttamente questi documenti non solo per comprendere il processo simulato nell'ambiente virtuale ma anche per capire come sono stati stilati sulla base della struttura dell'impianto. Infine, il software prevede delle esercitazioni atte a spiegare le corrette procedure operative previste all'interno del CDU. La simulazione prevede un elevato grado di realismo anche per quanto riguarda gli aspetti relativi alla sicurezza. Infatti, gli studenti possono accedere all'impianto solo dopo avere dotato il proprio avatar dei corretti Dispositivi di Protezione Individuale (DPI), selezionati in base al tipo di esercitazione da svolgere. Infine, dopo questa operazione, è possibile scegliere tra la modalità "visita all'impianto" o "esercitazioni sul campo" sia in condizioni diurne sia in quelle notturne. Il processo CDU è organizzato nella simulazione secondo la classica struttura con serbatoi di dissalaggio (desalters), treni di scambiatori di calore, colonna di pre-fresh, fornace, colonna a piatti di distillazione principale, colonne ausiliarie di stripper, condensatori di vapore ad aria e serbatoi di stoccaggio. Sono inoltre presenti pompe di diverso tipo, motori elettrici, strumenti per la lettura di portate, pressioni, temperature, livelli.



**Figura 4:** Esempio di Crude Distillation Unit (CDU) simulato da AVEVA XR.



**Figura 5:** I partecipanti al progetto VIRTChem edizione 2021/2022.

## Note Bibliografiche

---

[1] 4EU+ European University Alliance, <https://4euplus.eu/>

[2] Nanome Inc., San Diego, CA, USA.

[3] A. Pedretti, A. Mazzolari, S. Gervasoni, L. Fumagalli, G. Vistoli, *Bioinformatics*, 2021, **37(8)**, 1174, 10.1093/bioinformatics/btaa774.

[4] Università degli Studi di Milano, Dipartimento di Scienze Farmaceutiche, Milano, IT.

[5] AVEVA Group Plc., Cambridge, UK.

[6] A-Frame, <https://aframe.io/>