

# IL MONDO dell'end-user

COMSOL PER PROCTER & GAMBLE

## MODELLAZIONE DEI PROCESSI DI PRODUZIONE E STOCCAGGIO

I prodotti per la pulizia della casa sono costituiti da miscele multicomponente molto complesse che per avere le proprietà chimiche e fisiche richieste devono essere prodotte seguendo processi definiti nei minimi dettagli. Queste miscele esibiscono un comportamento complicato e non intuitivo, la cui comprensione rappresenta una sfida dal punto di vista dell'ingegneria di prodotto.

*Per sviluppare nuovi prodotti velocemente e in modo efficace è essenziale dotarsi di strumenti di modellazione e simulazione semplici da usare e capaci di fornire risultati realistici in tempi brevi. I determinanti sono complessi ed è necessario sviluppare modelli ad hoc che accop-*

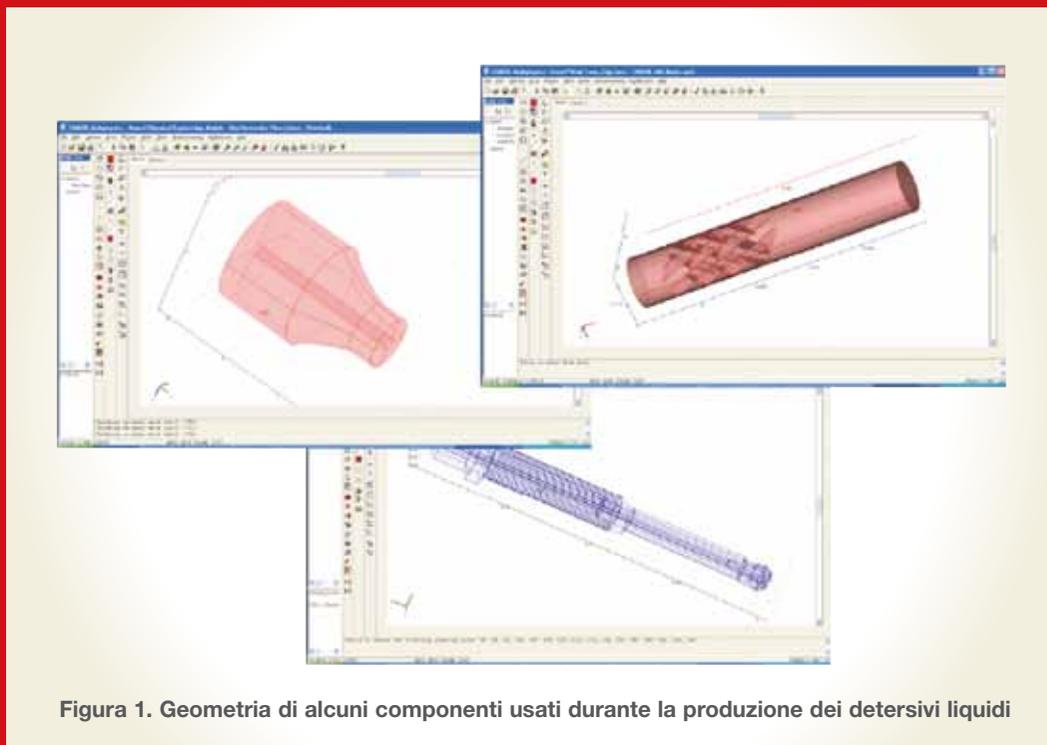
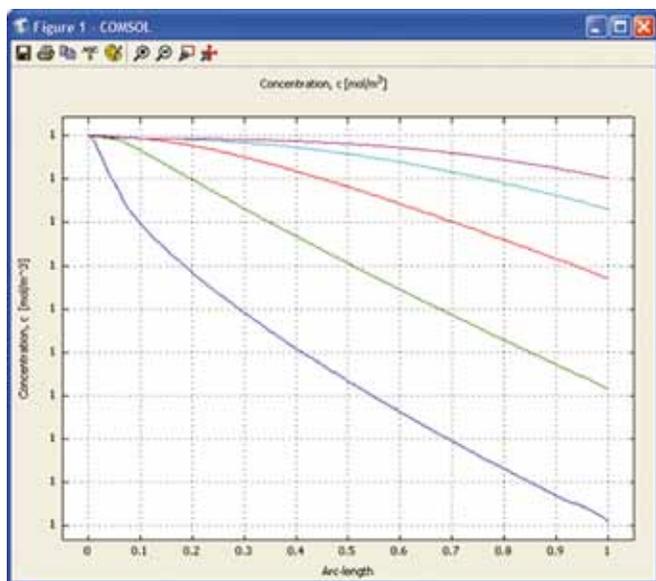


Figura 1. Geometria di alcuni componenti usati durante la produzione dei detersivi liquidi

*piano il trasporto di massa, di quantità di moto ed energia secondo leggi costitutive che devono poter essere definite personalmente in base alla miscela analizzata. Rispetto agli altri software di modellazione disponibili in commercio, COMSOL® permette di sviluppare rapidamente i modelli, sperimentare con diversi materiali e confrontare i risultati delle simulazioni con quelli sperimentali; non occorre più scrivere codici e individuare quali algoritmi daranno una convergenza più veloce, ma è possibile concentrarsi sulla corretta comprensione della fisica del processo.*



**Figura 2. Andamento del fattore pseudo-strutturale lungo una porzione di tubazione in funzione della portata**

liquidi, in questi componenti il flusso viene separato e ricombinato più volte.

Gli stress sono essenziali per incorporare gli ingredienti nel prodotto finito, che alla fine del processo deve riempire il contenitore destinato al mercato, ma un eccesso può anche danneggiare la microstruttura. Stress eccessivi possono infatti distruggere la struttura a gel avendo come effetti indesiderati la scarsa viscosità del detersivo e la separazione dei suoi costituenti prima della scadenza prevista. Inoltre i consumatori non gradiscono l'aspetto e trovano difficile da usare un prodotto che ha subito uno stress eccessivo.

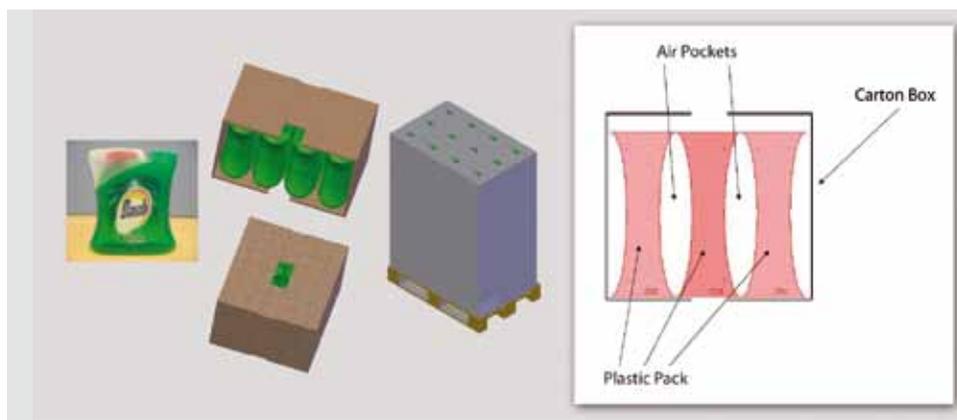
Al fine di evitare che il prodotto sia sottoposto a una deformazione eccessiva è necessario quantificare gli sforzi accumulati durante il processo produttivo. Questo dato sarà usato per stimare il grado di degradazione della microstruttura. Inoltre queste informazioni sono usate da Procter & Gamble sia per dimensionare correttamente miscelatori, pompe e tubazioni sia per calcolare la caduta di pressione in apparati di miscelazione, imballaggio, ugelli, collettori e altri elementi.

Per ottenere questi dati, è stato creato un modello ad hoc che ha richiesto la definizione di un fattore pseudo-strutturale rappresentante la cinetica della degradazione della microstruttura in funzione dello stress. In figura 1 è mostrata la geometria di alcune tipologie di dispositivi che sono stati modellati. In figura 2 è invece rappresentato l'andamento del fattore pseudo-strutturale lungo una porzione di tubazione in funzione della portata. Il grafico mostra che durante il flusso del prodotto attraverso la tubazione il fattore pseudo-strutturale diminuisce: ciò indica che la microstruttura è soggetta a degrado. La stima di tale fenomeno consente di modificare in modo mirato i parametri di progetto e di poter rispondere a domande del tipo "quanto può essere lunga al massimo la porzione di tubazione considerando la degradazione della microstruttura entro il 10%?" Poiché la microstruttura di un prodotto cambia nel tempo, non possiamo lavorare con le equazioni classiche della fluidodinamica come quelle Navier-Stokes.

## Non "stressare" il prodotto

In un primo studio è stata analizzata la storia degli stress (i.e. sforzi di taglio) a cui sono stati sottoposti i detersivi liquidi strutturati durante i processi di produzione. La tipologia di fluidi analizzata deve le sue proprietà reologiche e fisiche alla presenza di particelle cristalline aventi la forma di un piccolissimo bastoncino, nella modellazione ne è stato tenuto conto considerandone anche l'elevato aspect ratio. Per produrre detersivi liquidi di qualità, è essenziale controllarne non solo la composizione chimica ma anche la microstruttura affinché i cristalli siano dispersi omogeneamente nella matrice e, se previsto dai requisiti di prodotto, siano orientati correttamente. I cristalli conferiscono al prodotto la sua struttura a gel responsabile delle proprietà reologiche previste in fase di progettazione; tale struttura consente inoltre un mantenimento adeguato dell'integrità del prodotto durante il suo invecchiamento.

Le microstrutture possono essere controllate durante la produzione sottoponendo il prodotto a un'adeguata storia degli stress. Le sorgenti di stress sono costituite da miscelatori statici e dinamici, pompe, ugelli e tubazioni usate durante le fasi di aggiunta e miscelazione degli ingredienti ai prodotti



**Figura 3. Quando il prodotto viene messo nei cartoni e successivamente imballato e caricato sui pallet (sinistra), si creano delle sacche d'aria che possono contribuire all'innesco del thermal runaway**

# IL MONDO dell'end-user

COMSOL PER PROCTER & GAMBLE

Text(16)=308 Slice: Temperature[K]

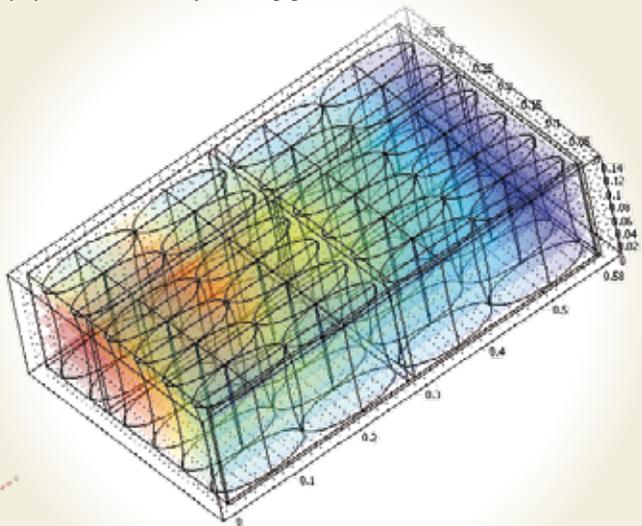


Fig 4. Andamento della temperatura nei prodotti presenti nel pallet

Prima di adottare COMSOL, gli ingegneri di Procter & Gamble si basavano prevalentemente su dati sperimentali e risultati empirici. Talvolta utilizzavano software agli elementi finiti per simulare la fluidodinamica e l'andamento degli sforzi, senza però riuscire ad accoppiare i risultati ottenuti alla degradazione della microstruttura. COMSOL dà la possibilità di lavorare autonomamente anche a chi non è esperto di modellazione, e in tempi relativamente rapidi, su differenti fisiche accoppiate tra di loro. I benefici sono stati significativi. Ad esempio il set up di un impianto pilota per il test di un determinato processo e la determinazione delle sue condizioni operative richiedono solitamente almeno una settimana e una spesa di diverse migliaia di euro. Grazie ai modelli realizzati con COMSOL è possibile verificare le prestazioni di un determinato processo in un'ora - una riduzione notevole del tempo necessario per comprendere un nuovo processo. Le simulazioni sono efficaci anche nel convincere chi è scettico riguardo i benefici che si possono ottenere dall'adottare un determinato processo. È possibile infatti eseguire un numero illimitato di esperimenti e, dimostrando che i risultati ottenuti dalle simulazioni sono realistici, risulta evidente la fattibilità del processo esaminato.

## Stabilità termica

Un secondo esempio di utilizzo di COMSOL è il controllo dell'innescò della decomposizione termica degli additivi usati per il lavaggio a secco. Questo fenomeno si può verificare durante lo stoccaggio e la spedizione del prodotto; il suo innescò non è possibile quando è esposto in negozio. Se un prodotto è soggetto a thermal runaway (i.e. reazione chimica esotermica e incontrollata) perde la sua efficacia e non può più essere venduto. Ciò risulta in una potenziale perdita di milioni di euro poiché la merce non può più essere commercializzata. Consideriamo il caso del prodotto Ariel Stain Remover (venduto negli Stati Uniti sotto il marchio Tide). Questo additivo per il bucato contiene un candeggiante, noto come percarbonato di sodio, che si decompone nel tempo secondo una reazione esotermica spontanea. Se questo prodotto è immagazzinato in grandi quantità e a una temperatura troppo alta, il calore generato dalla sua decomposizione determina un ulteriore aumento di temperatura che a sua volta risulta in un incremento esponenziale del suo tasso di decomposizione. Questo processo porta all'instabilità termica ed è noto come thermal runaway. Il calore generato è proporzionale al volume mentre il calore dissipato è proporzionale alla superficie. La soluzione ottimale per conservare il materiale in magazzino è quella in cui è raggiunto l'equilibrio termico. Tuttavia se il volume del materiale immagazzinato aumenta nel tempo - sia che si trovi in un grande container sia che si trovi distribuito in contenitori più piccoli ma vicini - il rapporto superficie/volume diminuisce, aumentano quindi le possibilità di innescò del thermal runaway. Durante la produzione e in condizioni di ventilazione inadeguata il thermal runaway può causare un incendio. Ciò non accade quando il prodotto è esposto in negozio, tuttavia c'è un altro rischio, che è quello di incrementare la naturale decomposizione del candeggiante. Il prodotto diviene così inefficace e inutilizzabile prima della scadenza dichiarata. A causa del possibile verificarsi del thermal runaway, la quantità massima di prodotto che può essere caricata su un pallet è limitata, lo è ancora di più se i prodotti vengono stoccati in un magazzino non ventilato o sono trasferiti in luoghi con un clima molto caldo.

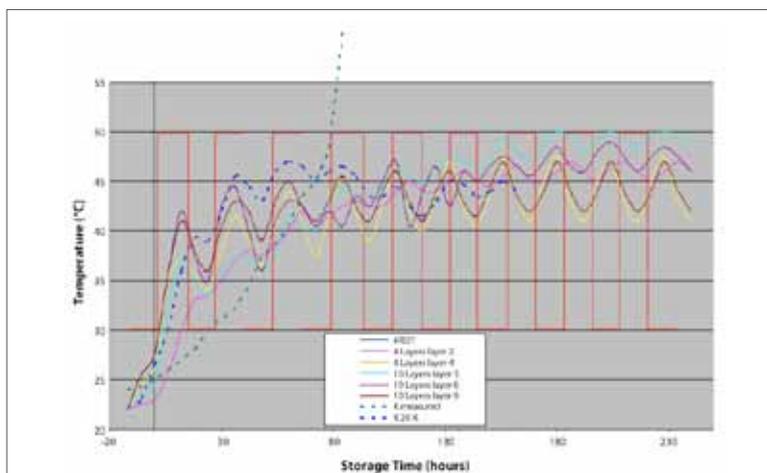


Figura 5. Confronto della temperatura misurata (linee continue) con i risultati della simulazione (linea blu tratteggiata). La curva rossa indica l'andamento ciclico della temperatura mantenuta nel forno

Con una casistica così ampia, non è fattibile condurre prove sperimentali per studiare ogni configurazione possibile. Per analizzare il rischio di thermal runaway per differenti scenari è stato creato un modello con COMSOL Multiphysics che, oltre al surriscaldamento, tiene conto anche della fluidodinamica relativa alla convezione naturale dell'aria presente negli interstizi dell'imballaggio (figura 3).

È stato sviluppato un modello per la stima del rischio di thermal runaway in collaborazione con l'Università di Napoli. Questo modello include il bilancio termico del pallet considerando anche la convezione naturale nelle sacche d'aria. Nel modello, risolto su una geometria 3D complessa, sono accoppiate le fisiche relative alla fluidodinamica non isoterma e al trasporto di calore.

Per validare il modello è stata eseguita una campagna di prove sperimentali su diverse configurazioni di pallet usando prodotti aventi diverse cinetiche chimiche e proprietà fisiche. I pallet sono stati sottoposti a un ciclo di riscaldamento in forno della durata di 13 giorni, le temperature raggiunte variavano tra i 30 e i 50°C (figura 5). Successivamente alla validazione del modello è stata stabilita la temperatura massima per un immagazzinamento sicuro e il tempo di innesco del thermal runaway in funzione della configurazione del pallet, del carico totale e della cinetica chimica del prodotto. Il modello è stato poi perfezionato al punto tale che è stato possibile stimare il numero massimo di pallet sovrapponibili. L'ottimizzazione della configurazione dei pallet ha consentito un risparmio di costi logistici dell'ordine dei milioni di euro e ha anche permesso di ridurre l'impatto ambientale. Inoltre i risultati ottenuti hanno aiutato nel prendere velocemente decisioni importanti, come la scelta della temperatura da mantenere nella catena di fornitura.

Procter & Gamble è così riuscita a garantire ai consumatori l'immissione in commercio di prodotti efficaci e di qualità. COMSOL si è dimostrato essere lo strumento ideale per eseguire queste analisi. Il modello COMSOL ha una robustezza tale da permettere di simulare diverse fisiche e condizioni operative (analisi stazionarie e transitorie, proprietà materiali fortemente dipendenti dalla temperatura, non linearità, elevati gradienti di temperatura ecc.) e nonostante questo può lavorare su una workstation con quattro processori e 8 GB di RAM.

Grazie alla sua velocità di calcolo, COMSOL può fornire risultati in tempo reale, mediamente in meno di un'ora, e la sua interfaccia, grazie alla sua semplicità di utilizzo ed estrema usabilità, è stata usata come base per la creazione di uno strumento messo a disposizione dei safety manager di ogni stabilimento produttivo. In questo modo ciascuno di loro può lanciare la propria simulazione e verificare se la soluzione scelta rappresenta un rischio dal punto di vista del thermal runaway.

## Workshop COMSOL

COMSOL organizza nelle principali città italiane workshop gratuiti rivolti a quanti desiderano saperne di più sulla modellazione multifisica e analizzare la propria applicazione insieme agli specialisti COMSOL. Durante i seminari i partecipanti saranno introdotti all'uso di COMSOL Multiphysics e potranno porre le proprie domande. Riceveranno inoltre una licenza temporanea del software, che potranno installare e usare durante le esercitazioni pratiche.

Tra le tematiche presentate durante la parte introduttiva: acustica, chimica, elettrochimica, elettromagnetismo, fluidodinamica e microfluidica, flussi in mezzi porosi, MEMS, accoppiamenti multifisici, ottimizzazione, plasmi, meccanica strutturale, geomeccanica e analisi termica.

I workshop in programma per il mese di aprile sono:

- 09 aprile - Torino - Multifisica ed Elettromagnetismo
- 10 aprile - Torino - Fluidodinamica e Meccanica Strutturale
- 10 aprile - Bari - Multifisica ed Elettromagnetismo
- 11 aprile - Bari - Fluidodinamica e Meccanica Strutturale
- 16 aprile - Bologna - Multifisica ed Elettromagnetismo
- 17 aprile - Bologna - Fluidodinamica e Meccanica Strutturale
- 17 aprile - Salerno - Introduzione alla Multifisica
- 18 aprile - Dalmine - Introduzione alla Multifisica
- 23 aprile - Palermo - Introduzione alla Multifisica

Per verificare le altre date in programma e registrarsi:  
[www.comsol.it/events/workshops](http://www.comsol.it/events/workshops)



**Vincenzo Guida** è un ingegnere chimico e lavora alla Fabric Care Division di Procter & Gamble di Pomezia. Ha conseguito una laurea all'Università di Napoli.

I suoi campi di ricerca includono la reologia dei fluidi strutturati, la chimica dei candeg-gianti e la modellazione di stabilità chimica e fisica. Guida è responsabile per la progettazione e la produzione di detersivi liquidi e di additivi per il bucato.