ポリウレタン樹脂の3次元発泡流動解析

武 久 悟 之*・齊 藤 展*・市 田 真 巳*・佐 伯 準 一*

1. 諸 言

発泡ポリウレタンは衝撃吸収、クッション性、断熱性、遮音性、接着性などに優れた機能を有しており、自動車、靴、冷蔵庫、建築材料など多くの製品に使用されている。これはポリオール、イソシアネートの主原料に触媒、発泡剤、整泡剤などを混合することで、泡化反応と樹脂化反応が同時に行われる発泡体である。製品メーカーでは通常、発泡後にちょうど金型キャビティサイズになるように混合液を注入する型発泡という手法を用いている。少ない注入量で最大発泡倍率が得られることや、空気の巻き込みなどの副作用のない最適注入条件の合理的な選定が強く望まれている。これまでに、このような材料とプロセスを対象としたシミュレーション手法が開発されてきた^{1)~4)}。これらの手法は基礎理論に忠実ではあるが、材料メーカーでなければ測定できない物性値の情報が必要になる。ここでは、製品メーカーでも可能な実験で測定できる物性値の情報を使って、温度変化を解かず発泡流動過程の予測ができるシステムの検討を行った。

2. 計算モデル

透明な容器で発泡の様子を観察すると、発泡速度が最も大きくなるのは、発泡開始から流動停止の中頃となる²⁾。これは反応発熱による温度上昇のピークとほぼ重なる²⁾。このことから、発泡過程は発熱反応を伴い、発熱して高温になるほど反応速度が大きくなることを示している。すなわち実際は非等温の発泡現象である。しかし、温度変化を計算する場合、発泡による熱伝導率や比熱の変化も考慮した複雑な定式化が必要となる。そこで、温度の情報を係数に組み込んだ発泡挙動の予測式を構築した。成形時と同じ温度条件下で係数を算出する実験を行うことで、温度変化

を直接計算せずに、発泡解析が可能となる。

一様な容器径及び、一定温度の条件下であれば、見かけの発泡速度とその積分値である流動先端位置の変化は同じ挙動を示すことになるため、これらの特性はKamalモデル⁵⁾の形を利用した等温反応速度式で表現できる。発泡反応速度式を次式(1)に示す。

$$\frac{d\alpha}{dt} = (K_1 + K_2\alpha^M)(1-\alpha)^N \quad (1)$$

ここで、 α ：発泡反応率、 t ：時間、 $d\alpha/dt$ ：発泡反応速度、 K_1 、 K_2 ：温度情報を含む係数、 M 、 N ：材料固有の係数である。比容積（密度の逆数）の計算式は次式(2)を用いた。

$$\frac{1}{\rho} = \alpha \left(\frac{1}{\rho_{min}} - \frac{1}{\rho_0} \right) + \frac{1}{\rho_0} \quad (2)$$

ここで、 ρ ：密度、 ρ_{min} ：発泡終了時の密度、 ρ_0 ：初期密度、 α ：発泡反応率である。 ρ_{min} は気泡の発生しやすさと大気中への逃げにくさを表わす指標となっている。粘度式は次式(3)を用いた⁵⁾。

$$\eta = \eta_0 \left(\frac{1+\alpha}{1-\alpha} \right)^C \quad (3)$$

ここで、 η ：粘度、 η_0 ：初期粘度、 α ：発泡反応率、 C ：温度の上昇しやすさに依存する係数である。(3)式の η は $\alpha=0$ で η_0 となり、 α が1に近づくにつれて急激に増加し、 $\alpha=1$ で $\eta=\infty$ となる特性を示す。なお、ポリウレタン材料の粘度はせん断速度の依存性が極めて小さいとの報告がなされており⁶⁾、粘度式にはせん断速度項は使用していない。

3. 実 験

発泡ポリウレタンは大きく分けて、硬質ウレタンと軟質ウレタンの2種類がある。硬質ウレタンは1つ1つが独立した気泡になっており、軽く、優れた断熱性を示す。このため、断熱材などに利用される。一方、軟質ウレタンは連続した気泡から形成されており、クッション性が高い。このため、乗り物の座席や梱包材などに利用されている。硬質ウレタン、軟質ウレタン両方について適応できる定式化のため、実験を行い、再現できることを確認した。

Three-dimensional Flow Analysis of Polyurethane Foaming Process

* Takehisa, Satoshi/Saito, Hiromu/Ichida, Masami/Saeki, Jun-ichi

(株)テラバイト 技術部熱流体系グループ

東京都文京区湯島 3-10-7 NOV ビル 3 F (〒113-0034)

satosi.takehisa@terabyte.co.jp

2019.4.19 受理

表1 実験を行った発泡ウレタンの特性と容器

No.	1	2	3
発泡倍率	約 18 倍	約 6 倍	約 6 倍
発泡時間	約 180 秒	約 150 秒	約 50 秒
硬質 or 軟質	硬質	軟質	軟質
容器形状	カップ	矩形	矩形

Kamal モデルの反応速度式(1)式における係数 K_1 , K_2 , M , N を算出するため、発泡体の高さの時間変化を測定する実験をそれぞれの樹脂について行った。実験では、簡易な形状の容器に発泡材を注ぎこみ、発泡する様子をビデオカメラで撮影した。高さの時間変化から比容積、反応率を逆算し、Kamal モデルの係数を算出した。

一方、発泡が進行中の粘度変化については今のところ実測が困難なので、ここでは材料と空氣の界面の形状変化が実際に近くなるように(3)式中の係数を定めた。

容器はカップ状のプラスチック容器（容量：1000 mL，最小径：96 mm，最大径：123 mm，高さ：138 mm）と矩形の亚克力容器（容量：2000 mL，横幅：100 mm，奥行：100 mm，高さ：200 mm）を使用した。発泡ポリウレタンは硬質，軟質ともに市販の2液性の発泡材（日新レジ社製）を使用した（表1）。

4. シミュレーション

解析ソフトはオープンソースコードである OpenFOAM を使用した。支配方程式は以下の3式となる。

質量保存式

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} = 0 \quad (4)$$

運動量保存式

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial u_j u_i}{\partial x_j} = & -\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_i} p \\ & + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \nu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right\} \\ & + g_i + Su \end{aligned} \quad (5)$$

流体率輸送式

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \frac{\partial F u_j}{\partial x_j} = Su \quad (6)$$

ここで、 ρ ：密度， t ：時間， u_j ：流速， x_j ：座標， p ：圧力， ν ：動粘性係数， g_i ：重力， F ：流体率， Su ：発泡によるソース項を示す。

(2)式で表される発泡過程特有の体積膨張をソース項 Su ，(3)式で表される硬化を粘性に組み込んでいる。(6)式で自由界面を解き，樹脂と空氣両方の移流を計算するため，空氣の巻き込みも考慮できる。

矩形容器の場合の解析モデル・初期の樹脂配置を図1に示す。この状態から，実験で算出した係数に従って膨張する過程の計算を行った。

比容積の時間変化を計算結果と実験値で比較したグラフ

図1 矩形容器の場合の解析モデル

図2 No.1 比容積変化の比較

図3 No.2 比容積変化の比較

を図2～図4に示す。計算結果は実験値をよく再現する結果が得られた。硬質ウレタンや軟質ウレタンなど発泡材の種類に依らず，再現できていることも確認できた。

発泡の様子を実験と比較した結果を図5～図7に示す。およその膨張の様子は再現できていると考えられる。

なお，粘度については粘性成分と弾性成分の両者の寄与を合成した複素粘度，せん断変形を受けない箇所での伸長粘度，樹脂単体と樹脂/気泡複合体の見掛け粘度などの定義があり，測定法を含めて今後取り扱い方を鋭意検討していく予定である。

図4 No.3 比容積変化の比較

図5 No.1 発泡の様子の比較

5. 結 言

1. 温度変化を解かない簡略化した計算モデルによるシミュレーションにより、比容積の時間変化を再現することができた。
2. 硬質ウレタン、軟質ウレタン両方について再現できることを確認した。
3. 粘度式係数の実験に合わせた調整等を考慮することによって、より詳細な流動を再現可能となる。

図6 No.2 発泡の様子の比較

図7 No.3 発泡の様子の比較

参 考 文 献

- 1) Chang, L-Y., Chang, Y-J. and Hsu, C-H. : *Seikei-Kakou* '17, 139 (2017)
- 2) Rao, R., Monday, L., Noble, D., Brunini, V., Tinsley, J., Roberts, C., Long, K., Soehnel, M., Celina, M., Wyatt, N. and Thompson, K. : *Sandia National Laboratories*, 3 (2015)
- 3) Ferkl, P., Karimi, M., Marchisio, D. L. and Kosek, J. : *Che. Eng. Sci.*, **148**, 55 (2016)
- 4) Baser, S. and Khakhar, D. : *Polym. Eng. Sci.*, **34**, 642 (1994)
- 5) 佐伯準一, 河野務, 寺前俊哉 : 成形加工, **16** (5), 309 (2004)
- 6) Lipshits, S. D. and Macosko, C. W. : *Polym. Eng. Sci.*, **16**, 803 (1976)