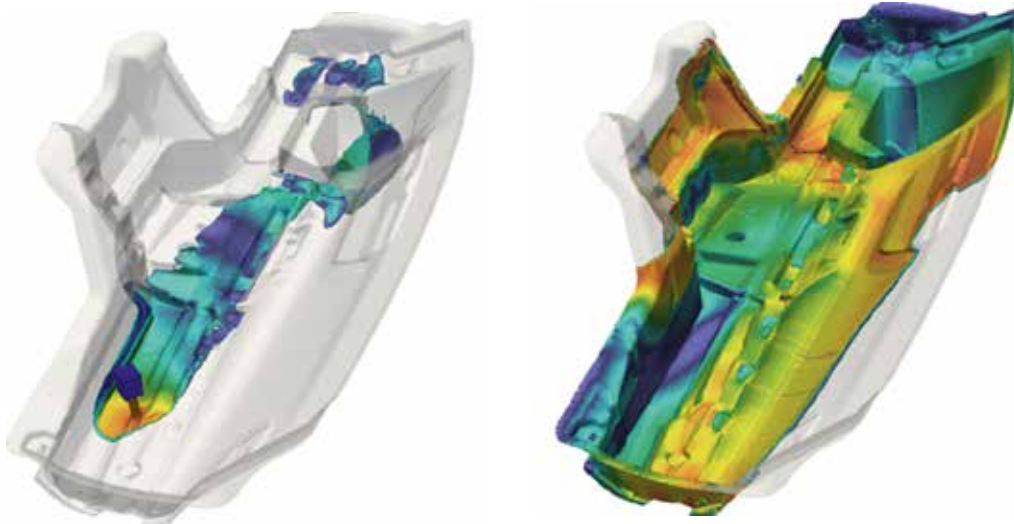


# Von der virtuellen Schaumzelle zum fertigen Bauteil

*Simulationssoftware Ultrasim berechnet die Verarbeitung von Polyurethansystemen*

Die Eigenschaften von Schäumen werden vor allem durch deren reaktive Verarbeitung geprägt. Neue Simulationsmethoden mit weitgehenden Materialmodellen wollen sowohl die Reaktionskinetik abbilden als auch die resultierenden Schaumeigenschaften vorhersagen. Konkrete Beispiele zeigen bereits weitreichende Übereinstimmungen zwischen Simulation und Praxis.



Schäumsimulation: Eintrag eines BASF-Elastoflex-E-Schaums in ein offenes Werkzeug (links) und das resultierende Füllbild 20s später (rechts). Die Schäumsimulation (rot: Bereiche hoher Materialbelastung) hilft, auf Basis von CAD-Daten des späteren Bauteils den bestmöglichen Eintragspfad zu finden, die Schäumlage zu verbessern oder das Entlüftungskonzept zu bewerten (© BASF)

**P**olyurethane (PUR) gelten als äußerst vielseitige Kunststoffe. Nicht nur ihre chemische Zusammensetzung, sondern auch ihre Verarbeitung bestimmen die Eigenschaften des Endprodukts: von weich bis hart, niedrig dicht bis fast kompakt, thermoplastisch ebenso wie duroplastisch. Um die vielseitigen Anforderungen ihres jeweiligen Einsatzzwecks zu erfüllen, müssen Materialentwickler die Wünsche der Anwender im Blick haben. Letztere wollen durch fachgerechte Verarbeitung das bestmögliche Ergebnis erzielen. Auf beiden Seiten bedarfes großer Erfahrung und Fachwissen, um Verarbeitung und Produkteigenschaften kontinuierlich zu verbessern. Die Simulation des Aufschäumvorgangs eines Polyurethansystems im Werkzeug kann hierbei hilfreich sein.

Die Vielfalt an PUR-Schäumen, die Abhängigkeit ihrer Endigenschaften vom Verarbeitungsprozess, die Veränderung des Materials selbst vom flüssigen Polyol-Isocyanatgemisch hin zum expandierten, ausgehärteten Schaum, fordern sowohl Simulationsmodelle als auch die benötigte Materialcharakterisierung heraus. So können die für die Schäumsimulation benötigten Materialmessungen im Labor häufig nicht unter den gleichen Bedingungen durchgeführt werden wie in der späteren Produktion. Daher ist ein weiteres Ziel von Simulationsmodellen, die Eigenschaften des Schaums anhand seiner anfänglichen Zusammensetzung vorherzusagen. Diese Modelle können zum Beispiel herangezogen werden, um unter Laborbedingungen gemessene Kenngrößen auf reale Produktionsprozesse zu

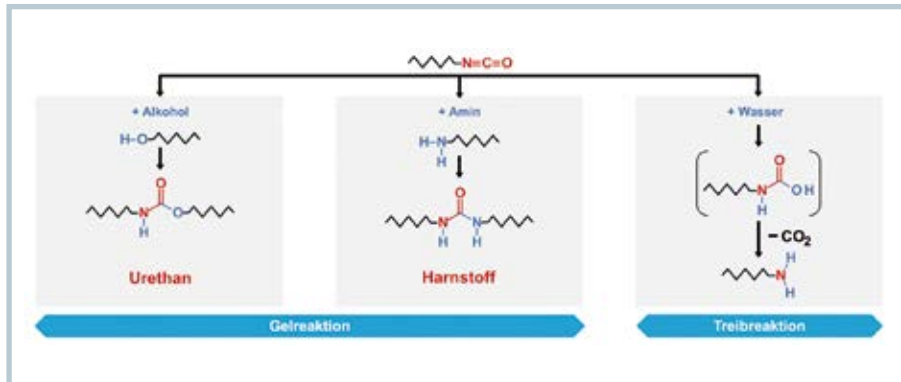
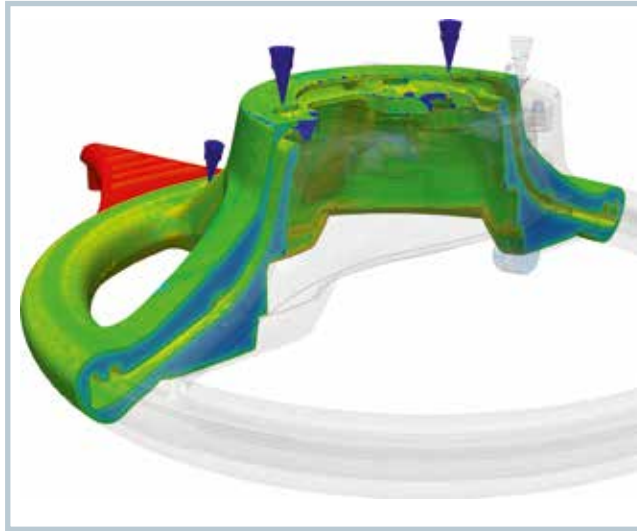
übertragen. Um dies zu erreichen genügt es jedoch nicht, den Schaum makroskopisch zu beschreiben. Vielmehr müssen hierzu Simulationsmodelle auf verschiedenen Skalen, insbesondere auf der Zellebene, berechnet und geeignet miteinander gekoppelt werden [1–7]. Im Folgenden wird erläutert, wie Schaumeigenschaften wie Viskosität, Elastizitätsmodul oder Wärmeleitfähigkeit vorhersagbar sind. Ebenso wird beleuchtet, welche Rolle diese Eigenschaften bei der Bauteilsimulation spielen.

## *Formfüllsimulation des Schäumprozesses*

Die wesentlichen Materialkenngrößen zur Simulation des Aufschäumprozesses sind der zeitliche Dichteverlauf sowie »

**Bild 1.** Die berechnete Dichteverteilung eines BASF-Elastofoam-I-Schaums zeigt den für Integralschäume typischen Dichtegradienten über den Bauteilquerschnitt. Die räumliche Dichteverteilung ist maßgebend für die lokale Steifigkeit und Härte im Lenkrad

(© BASF)



**Bild 2.** Darstellung der vereinfachten Reaktionskinetik zur Beschreibung von Polyurethanschäumen gemäß [13] (© BASF)

der Viskositäts- und Elastizitätsaufbau vom Zeitpunkt der Vermischung bis zum vollständigen Ausschäumen des Bauteils. Sind diese zeitlichen Verläufe bekannt, so ist es beispielsweise möglich Angusspositionen beim Schäumen im geschlossenen Werkzeug, oder Eintragszeilen (**Titelbild**) beim offenen Eintrag anzupassen. Simuliert man neben der Schaum- auch die Luftphase, können mögliche Luft einschüsse vorhergesagt und Gegenmaßnahmen abgeleitet werden. Wird die Schwerkraft berücksichtigt, so kann ebenso der Einfluss der Werkzeuglage oder gar deren Veränderung während des Aufschäumprozesses analysiert werden. Die spezielle Form strömungsmechanischer Gleichungen ist bekannt [8–10]. Aufgrund immer schnellerer Computerhardware und hochmoderner mathematischer Methoden ist es möglich, dies selbst in großen, komplexen Bauteilen wie Instrumententafeln [11] oder Lenkrädern zu berechnen und in der Praxis einzusetzen [12].

Das **Titelbild** zeigt, wie mithilfe der Simulationssoftware Ultrasim der BASF SE, Ludwigshafen, der Schaumeintrag ins offene Werkzeug (links) und der anschließende Aufschäumvorgang (rechts) vorhersagbar sind. Dies basiert auf speziellen Dichte- und Viskositätsmessungen sowie einem Modell, das diese auf den Produktionsprozess überträgt.

### Chemische Reaktion und Schaumexpansion

Der für die Schaumexpansion entscheidende Dichteverlauf hängt unmittelbar von der Freisetzung physikalischer wie chemischer Treibgase ab. Lokale Unterschiede in der Freisetzungsrates, z.B. aufgrund der Temperaturverteilung im Werkzeug, führen zu Dichtegradienten, wie in **Bild 1** zu sehen ist. Im Folgenden werden rein wassergetriebene Schäume mit  $\text{CO}_2$  als Treibgas beschrieben. Um die  $\text{CO}_2$ -Freisetzungsrates zu berechnen, kommen häufig einfache Kinetiken wie die

von Baser [13] zum Einsatz. Sie berechnen die aktuelle Konzentration an OH-Gruppen, den Wasser-Umsatz und die verbleibenden Isocyanatgruppen. Sie basieren auf der Annahme, dass sich die Schäumreaktion im Wesentlichen durch eine Gel- und eine Treibreaktion beschreiben lässt wie in **Bild 2** dargestellt.

Dieser empirische Ansatz liefert zwar den für die Dichtentwicklung wesentlichen Wasserumsatz, die Kinetikparameter für die effektiven Reaktivitäten müssen jedoch für jedes Schaumsystem separat ermittelt werden – bei der Vielzahl an Polyurethansystemen eine Herkulesaufgabe. Sind diese Parameter bekannt, haben sie sich besonders für die Simulation von Hartschäumen bewährt, z.B. beim Ausschäumen von Kühlschränken [14, 9] mit den BASF-Elastocool-Schäumen.

Um die Simulation weiterer Schäume zu ermöglichen, insbesondere der BASF-Halbhart- und Integralschäume Elastoflex E und Elastoflex I für den automobilen Innenraum, wurden diese Kinetiken erweitert und auf die jeweiligen Produkte abgestimmt. Damit gelingt es, abhängig von der lokalen Position im Bauteil sowie der Werkzeug- und der Komponententemperatur, den Reaktionsfortschritt und die Dichtentwicklung vorherzusagen.

### Ableitung von Bauteileigenschaften aus der Schäumsimulation

Aus der finalen Dichteverteilung (**Bild 1**) können unmittelbar weitere Eigenschaften, wie z.B. die lokale Steifigkeit des Materials, abgeleitet werden. Diese hängt für ein gegebenes Material im Wesentlichen von der Dichte des Schaumes ab [15] und kann mit Standardmessungen bestimmt werden. Alternativ ist dieser Zusammenhang mithilfe mikromechanischer Simulationen bestimmbar und die mechanischen Eigenschaften des Schaums sind aus den Eigenschaften des Matrixmaterials und der Zellmorphologie zu berechnen (**Bild 3**) [16]. Ein detailliertes Kinetikmodell [6] kann hierfür den Aushärtegrad und somit den E-Modul der Matrix ebenso beisteuern wie den Zellgasanteil in der Schaumzelle.

Komplizierter ist die Vorhersage von Materialeigenschaften, die nicht nur vom Zellgasanteil beziehungsweise der Dichte abhängen, sondern von der Zellstruktur des Schaumes selbst. Beispiele für solche Größen sind die Wärmeleitfähig-

higkeit [2] oder Akustikeigenschaften von Schäumen.

Die Evolution der Zellgrößenverteilung während des Schäumvorgangs kann mit sogenannten Populationsbilanzmethoden berechnet werden [17]. Das Ergebnis hängt jedoch stark von der anfänglichen Gasblasenverteilung und weiteren schwer quantifizierbaren Effekten wie z.B. der Blasenkoaleszenz ab. Dennoch können solche Methoden nützlich sein, um den qualitativen Einfluss von Prozessbedingungen auf die Zellgrößenverteilung und deren Einfluss auf finale Produkteigenschaften besser zu verstehen.

### Fließverhalten des Schaums

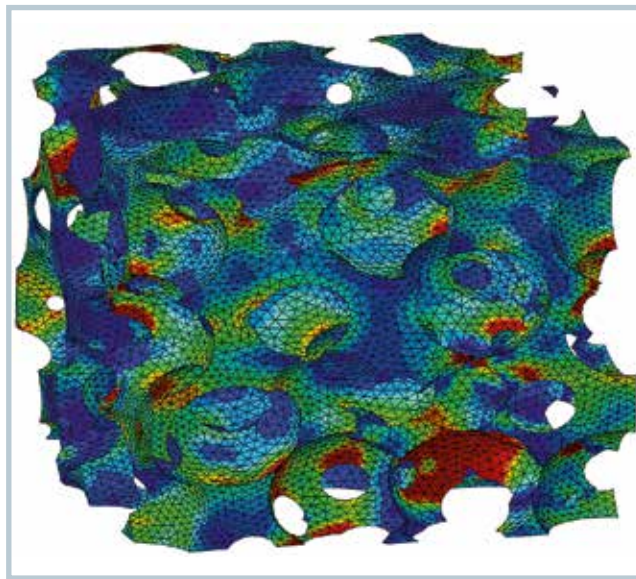
Die zweite wesentliche Eigenschaft während des Schäumens ist das Fließverhalten. Charakteristisch für geschäumte Bauteile sind große Dickensprünge. Hier macht man sich zu Nutze, dass das anfänglich flüssige Material gut durch winzige Schlitze fließen und gleichfalls später große Volumina zuverlässig ausschäumen kann. Dabei erfährt der Schaum anfänglich hohe Scherungen bei Temperaturen nahe der Misch- und Werkzeugtemperatur. Später expandiert der Schaum aufgeheizt durch die eigene Reaktionswärme, darf jedoch nicht mehr zu sehr geschert werden. Bereiche mit zum betreffenden Zeitpunkt hoher Materialbelastung sind im **Titelbild** rot dargestellt. Diese Information kann Prozess- und Materialexperten dazu dienen, Problemstellen in kritischen Bereichen vorzubeugen.

Um dieses Verhalten in der Simulation abbilden zu können, werden Viskositätsmodelle benötigt, die den Einfluss von Temperatur, Reaktionsfortschritt und lokaler Scherung berücksichtigen. Hierzu werden meist verschiedene Modelle kombiniert, z.B. ein Carreau-Ansatz für die Scherrate, ein Arrhenius-Gesetz für die Temperaturabhängigkeit, und ein Castro-Macosko-Modell für den Reaktionsfortschritt. Die Auswahl der jeweiligen Modelle muss auf das spezifische Verhalten des jeweiligen PUR-Schaums und die Genauigkeitsanforderungen der zugehörigen Anwendung abgestimmt sein. So ist es etwa für die Schäumsimulation von Lenkrädern essenziell, die Temperatur- und Scherratenabhängigkeit des flüssigen Materials genau zu kennen. Für Instrumententafeln oder Anwendungen

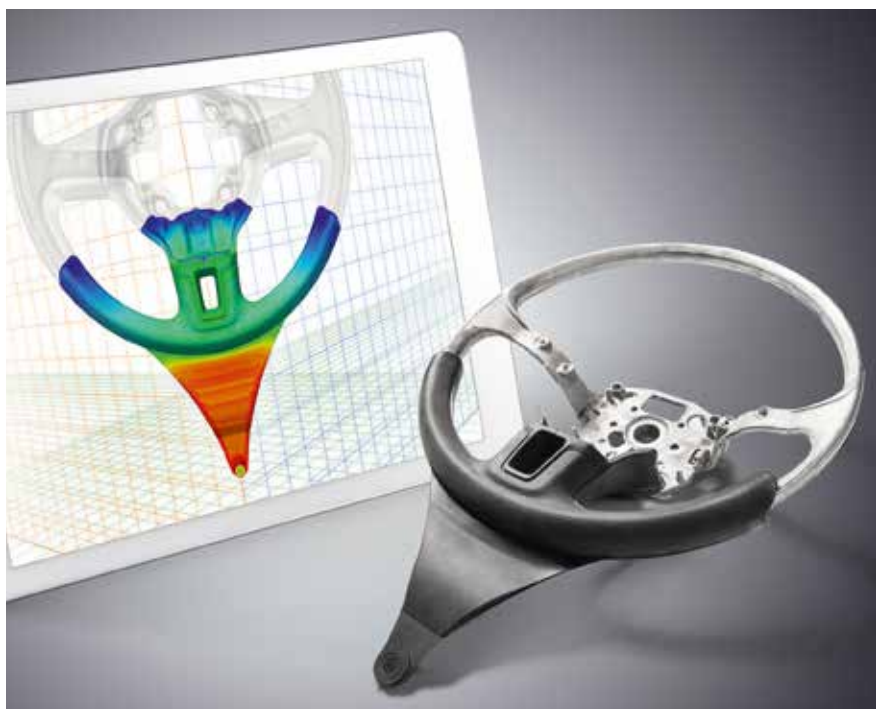
mit niedrigen Dichten und langen Fließwegen ist es meist wichtiger, das zunehmende elastische Verhalten des Materials am Fließwegende richtig einzuschätzen.

All diese empirischen Modelle haben gemeinsam, dass sie eine Vielzahl von Parametern besitzen, die entweder durch eine Messung bestimmt werden müssen [9] oder direkt so angefitzt werden, dass sie das Fließverhalten in einem einfachen Bauteil korrekt vorhersagen [10]. Ein anderer Ansatz ist es, die Viskosi-

tät des Schaumes direkt aus seiner Morphologie abzuleiten [7]. Dies ermöglicht z.B. qualitative Aussagen über den Einfluss der Scherung auf die Schaumviskosität in Abhängigkeit von Zellstruktur und Eigenschaften des Polyurethanmatrixmaterials. Analog zur oben beschriebenen Berechnung der Mikromechanik, müssen diese rheologischen Analysen für eine Vielzahl von mikroskopischen Zellstrukturen durchgeführt werden, um die gewählten Viskositätsmodelle für »



**Bild 3.** Lokale Spannungen resultierend aus einer mikromechanischen Simulation auf einer Schaumeinheit. Diese verwendet eine statistische Verteilung von Gasblasen für eine gegebene Dichte, anhand derer sich der E-Modul des Schaums vorhersagen lässt (© BASF)



**Bild 4.** Füllstudie zur Validierung der verwendeten Ultrasim-Simulationsmodelle für ein Lenkrad aus einem Elastofam-I-Schaum. Sowohl Fließfronten als auch die winzigen Lufteinschlüsse über der mittleren Speiche stimmen gut in Simulation und Versuch überein und bestätigen die verwendeten Materialmodelle und -parameter (© BASF)

## Die Autoren

**Dr. Matthias Wohlmuth** und **Bruno Schiebler** sind im Bereich Simulation Engineering & Ultrasim bei Performance Materials Europe der BASF SE, Ludwigshafen, tätig; [matthias.wohlmuth@basf.com](mailto:matthias.wohlmuth@basf.com); [bruno.schiebler@basf.com](mailto:bruno.schiebler@basf.com)

## Service

### Literatur & Digitalversion

- › Das Literaturverzeichnis und ein PDF des Artikels finden Sie unter [www.kunststoffe.de/6326604](http://www.kunststoffe.de/6326604)

### English Version

- › Read the English version of the article in our magazine *Kunststoffe international* or at [www.kunststoffe-international.com](http://www.kunststoffe-international.com)

die Bauteilsimulation parametrisieren zu können [4].

### *Simulation des Formfüllverhaltens im realen Bauteil*

Wenn es gelingt, für den jeweiligen Schaum geeignete Materialmodelle zu finden und belastbare Materialparameter zu ermitteln, ist es möglich das komplexe Schäumverhalten im Werkzeug detailliert nachzustellen. Die Füllstudie in **Bild 4** vergleicht die mithilfe des BASF-Simulationswerkzeugs Ultrasim berechnete Schaumexpansion eines Elastofoam-I-Schaums in einer Lenkradgeometrie mit einer realen Teilfüllung. Die gute Übereinstimmung der Fließfronten zeigt, dass sowohl die Reaktionskinetik als auch der daraus resultierende Viskositätsanstieg exakt abgebildet wurden. Bei genauerem Hinsehen ist zu erkennen, dass es sowohl in der Simulation als auch bei der realen Bauteilfüllung zu winzigen Lufteinschlüssen beim Zusammenfließen hinter den unteren beiden Speichen kommt. Diese resultieren aus der spezifischen Kombination von Bauteilgeometrie, Prozessparametern und Materialeigenschaften. Die Übereinstimmung zeigt, dass sowohl die

Prozesseinflüsse als auch das Fließverhalten des Schaumes unmittelbar nach dem Eintrag genau genug modelliert wurden, einschließlich der Abhängigkeit von Verarbeitungstemperatur und Scherung des Materials.

### *Fazit*

Die hier beschriebenen Modelle zeigen, dass es bereits möglich ist, verschiedene Eigenschaften von Polyurethanschäumen sowie deren Verarbeitung realitätsnah zu simulieren und vorherzusagen. Hierzu benötigt es jedoch eine tiefe Integration von Materialmodellen auf unterschiedlichen Skalen, effiziente numerische Methoden und leistungsstarke Computerressourcen sowie eine kontinuierliche Weiterentwicklung der Simulationsmethoden. Ziel der Simulationssoftware Ultrasim für Polyurethansysteme ist es, dies gebündelt den globalen Anwendern anzubieten, um gemeinsam neue Lösungen zu finden. Insbesondere bei den hochkomplexen Schaumsystemen Elastoflex E und Elastofoam I für den automobilen Innenraum hat sich dieses Angebot bereits im Praxiseinsatz bewährt. ■