



Universidade de Vigo



Universidad
Carlos III de Madrid



POLITÉCNICA

Máster en Matemática Industrial

2018 – 2019

Trabajo Fin de Máster

Simulación Numérica del Proceso de Moldeado de Espumas de Poliuretano

Pablo Otero Jorge

Fecha presentación: 17/07/19

Tutor/a académico/a: José Luis Ferrín

Empresa: CTAG - Grupo Copo

Tutor/a empresa: Miguel Herrera

Indice

1	Introducción	3
1.1	Descripción de la empresa	3
1.2	Problema planteado: proceso de espumado	4
2	Estado del arte	7
2.1	Revisión académica	7
2.2	Software comercial	10
3	Modelo seleccionado	11
3.1	Descripción del modelo	11
3.2	Simplificaciones	13
4	Implementación	14
4.1	Condiciones generales	14
4.2	Materiales y propiedades físicas	14
4.2.1	Aire	14
4.2.2	Espuma	15
4.3	UDFs	18
4.3.1	Modelo Termoquímico	18
4.3.2	Propiedades físicas de la espuma	20
4.4	Geometría y mallado	21
4.5	Condiciones iniciales y de contorno	22
4.6	Resolución	23
5	Resultados	24
5.1	Expansión libre en 2D axisimétrico	24
5.1.1	Evolución de la densidad	24
5.1.2	Evolución de la temperatura	25
5.1.3	Evolución de los escalares	27
5.1.4	Evolución del campo de velocidad y de la viscosidad	28
5.2	Conclusiones y trabajo futuro	30
A	Código UDFs	32
A.1	Término fuente de la reacción de gelificación	32
A.2	Término fuente de la reacción de gasificación	32
A.3	Término fuente de la ecuación de energía	33
A.4	Ecuación de densidad	34
A.5	Ecuación de la conductividad térmica	34
A.6	Ecuación de la viscosidad	35

Lista de figuras

1	Estructura molecular de un poliéter [1]	4
2	Estructura molecular del MDI [1]	4
3	Reacción de gelificación [1]	5
4	Reacciones de gasificación y formación de urea [1]	5
5	Estructura de una celdilla de poliuretano [1]	6
6	Esquema de la zona de espumación [1]	6
7	Simulación de la expansión libre en geometría cilíndrica [3]	7
8	Evolución del crecimiento de la espuma en un molde de asiento [6]	8
9	Espumación de un volante en Moldex3D	10
10	Evolución de la densidad de la espuma	16
11	Evolución de la viscosidad de la espuma	17
12	Evolución de la conductividad térmica de la espuma	17
13	Malla de la geometría	21
14	Contornos de densidad a $t=0$ s	22
15	Contornos de densidad para diversos tiempos de flujo	24
16	Evolución de la densidad media	25
17	Contornos de temperatura para diversos tiempos de flujo	26
18	Evolución de la temperatura media	26
19	Contornos del escalar x_w para diversos tiempos de flujo	27
20	Evolución de los escalares	28
21	Vectores de velocidad para diversos tiempos de flujo	29
22	Contornos de viscosidad para diversos tiempos de flujo	29
23	Perfil de evolución de la viscosidad	30

Lista de tablas

1	Propiedades físicas del aire	15
2	Valores numéricos para el cálculo de la densidad	15
3	Valores numéricos para el calculo de la viscosidad	16
4	Valores numéricos para el término fuente de la reacción de gelificación	18
5	Valores numéricos para el término fuente de la reacción de gasificación	19
6	Valores numéricos para el término fuente de la ecuación de energía	20

1 Introducción

1.1 Descripción de la empresa

El presente trabajo de fin de máster se ha realizado por el alumno en situación de contratado primero como becario y posteriormente como responsable de proyecto en el Centro Tecnológico del Grupo Copo. Grupo Copo es un grupo gallego de empresas que desarrollan su actividad en el sector de la automoción, fundamentalmente en la producción de elementos del interior del habitáculo.

Las principales líneas de negocio son la producción de rellenos de espuma de poliuretano y tejidos, con otras líneas de menor facturación como la producción de elementos de poliestireno expandido o EPP y conformados tipo moqueta. Los centros de producción de Grupo Copo se localizan en la península (Vigo, Zaragoza, Santo Tirso y Sao Joao) e internacionalmente en la República Checa, México, Brasil y Cuba.

Desde el Centro Tecnológico y en concreto desde la dirección de I+D+i se coordina la actividad de investigación y desarrollo, tanto en proceso como en producto, de todo el grupo de empresas. Dentro de esta actividad se encuadra el proyecto Smart Factory Auto, subvencionado por la GAIN (Axencia Galega de Innovación), en el que se incluye un paquete de trabajo en simulación numérica en colaboración con el CTAG (Centro Tecnológico de la Automoción de Galicia). En este paquete de trabajo aparece como actividad la simulación numérica del proceso de moldeo de espumas de poliuretano, parte del cual se corresponde con el presente trabajo.

1.2 Problema planteado: proceso de espumado

El proyecto se centra en el moldeado de espumas de poliuretano para la obtención de rellenos de asientos de automoción, frente a otros procesos como la obtención de espuma de bloque o espuma rígida. Como materias primas se tienen, en primer lugar, un poliol o polialcohol, que típicamente será un poliéter. Se trata de moléculas largas de alto peso molecular, con varios grupos funcionales OH. En la figura 1 se puede ver su estructura molecular.

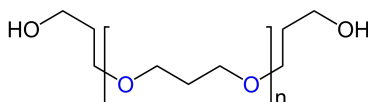


Figura 1: Estructura molecular de un poliéter [1]

Junto con el poliol se incluye una mezcla formulada de aditivos (catalizadores, estabilizantes y agentes del control de tamaño de célula), que generalmente son compuestos como aminas o siliconas.

La otra materia prima indispensable es algún tipo de isocianato. En concreto, se trata de diisocianatos, compuestos aromáticos que tienen 2 grupos NCO. El diisocianato más típico en la producción de asientos para automoción es el difenil-diisocianato, o MDI, cuya estructura molecular para ambos isómeros se presenta en la figura 2.

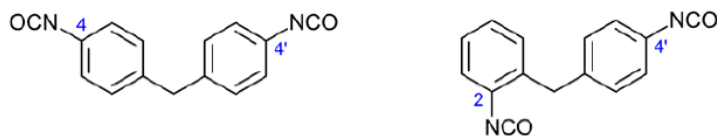


Figura 2: Estructura molecular del MDI [1]

Una vez mezclados, ambos productos comienzan a reaccionar de forma inmediata, mediante dos mecanismos principales, ver [1]:

- Reacción de gel: se trata de la reacción a través de la cual poliol e isocianato, ambos en estado líquido, reaccionan para formar un polímero sólido pasando por un estado intermedio de gel. En ella, el grupo isocianato del MDI y el grupo hidroxilo del poliéter reaccionan para formar un enlace uretano. El enlace uretano es flexible y es el que dota a la espuma final de sus propiedades mecánicas adecuadas para aplicaciones de confort. En la figura 3 se presenta de forma esquemática la reacción de gelificación.

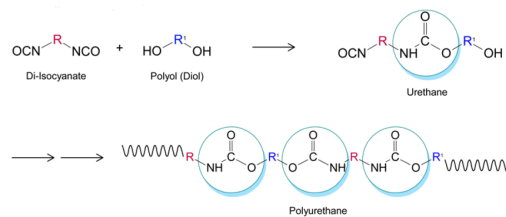


Figura 3: Reacción de gelificación [1]

- Reacción de gasificación: consiste en la reacción de isocianato con agua para formar ácido carbámico como producto intermedio, que se descompone en una amina y dióxido de carbono libre. La amina reacciona de nuevo con isocianato para formar una urea. El enlace urea forma segmentos duros en la estructura de la espuma, por lo que incrementar el nivel de agua en una formulación supone aumentar el nivel de expansión, pero también aumentar la dureza. En la figura 4 se representan ambas reacciones.

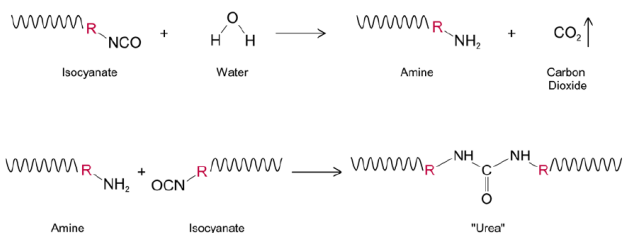


Figura 4: Reacciones de gasificación y formación de urea [1]

Es la combinación de estas reacciones, siempre que estén correctamente compensadas, la que da lugar a la estructura tridimensional de la espuma. Cuando ambos productos se mezclan se generan una serie de puntos de nucleación en los que la reacción de gelificación va a formar una celdilla. Las celdillas, idealmente, acaban alcanzando una estructura dodecahédrica como la que se presenta en la figura 5.

Las caras de las celdillas están formadas por láminas de polímero que van disminuyendo en grosor mientras se produce la expansión de la espuma. Un porcentaje variable de las caras se rompen durante el proceso de expansión, pero una vez que la pieza está formada, es necesario romperlas de forma mecánica para evitar que el gas (que se encuentra caliente por la exotermia de las reacciones) se enfríe y contraiga las celdillas deformando la pieza final.

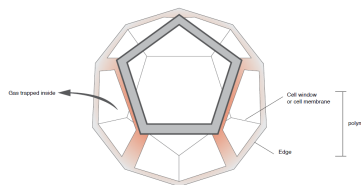


Figura 5: Estructura de una celdilla de poliuretano [1]

En planta, ambos productos se encuentran almacenados en tanques refrigerados, desde los cuales se alimentan a alta presión a un robot industrial, que dispone un cabezal de inyección que realiza la mezcla por impacto. En la figura 6 se puede observar un esquema de una zona de espumación típica en una línea de producción de espuma moldeada.

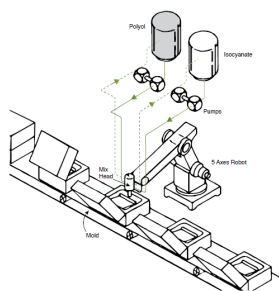


Figura 6: Esquema de la zona de espumación [1]

La mezcla reactiva se deposita sobre el molde, generalmente de aluminio con algún sistema de calefacción, siguiendo una trayectoria determinada denominada colada. Una vez finalizada la colada, el robot se retira y el molde se cierra, comenzando el crecimiento de la espuma. El llenado del molde tarda típicamente unos 30-90 segundos, condicionado por la formulación empleada, la evacuación del aire atrapado en el molde; que se realiza a través de respiraderos en la tapa y por la línea de cierre. La pieza permanece en el molde unos 2-4 minutos más durante los cuales avanza la reacción de gel, hasta obtener la pieza completamente polimerizada.

La colada y el crecimiento del frente de espuma deben ser tales que se garantice un llenado completo del molde, de forma que la pieza final esté libre de imperfecciones. El ajuste del proceso se hace en base a la experiencia, por prueba y error, lo cual conlleva el gasto de material y obliga a crear moldes prototipo. Simular el proceso permitiría realizar el ajuste sin tener que recurrir a pruebas físicas, abaratando y acortando los ciclos de desarrollo de nuevos productos, u optimizando los ya existentes.

2 Estado del arte

2.1 Revisión académica

Las primeras referencias que aparecen con modelos matemáticos para la simulación del proceso de espumado de poliuretano son los artículos de Baser y Khakhar en 1994, ver [2] y de Lefevbre y Keunings en 1995, ver [3]. El primero de ellos sienta las bases del modelado de la dinámica termoquímica del proceso de formación de espumas de poliuretano, detallando el modelo cinético al que se ajustan las dos reacciones, de gelificación y gasificación. Además, proporciona datos experimentales de las constantes cinéticas y los calores de reacción que utilizan de forma genérica las referencias posteriores, y adicionalmente detalla el método experimental para obtener y ajustar los datos.

Dado que no se simula el flujo, no se incorpora descripción de la viscosidad, pero sí se tiene de la densidad de la espuma, que viene dada por una ley empírica que es función del CO_2 generado por la reacción de gasificación, a través de la ley de los gases ideales.

La referencia [3] es la primera que se ha encontrado en la revisión que modela el flujo del polímero incluyendo el modelo termoquímico. Es aquí donde se plantea el modelo estándar que seguirán las referencias posteriores, consistente en resolver un modelo multifásico VOF junto con las ecuaciones de conservación de momento, energía, masa, y las ecuaciones de transporte escalar que realiza el seguimiento de las reacciones químicas incorporando las cinéticas en sus términos fuente. La viscosidad se considera una función del avance de la reacción, la temperatura y la velocidad de cizallamiento. La densidad es proporcional a la suma ponderada de las densidades de los distintos compuestos que aparecen en las reacciones. La referencia incluye la simulación de la expansión libre del poliuretano en un recipiente cilíndrico en 2D, como se muestra en la figura 7.

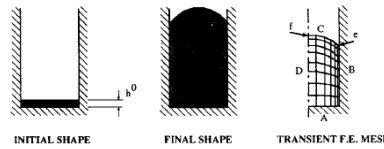


Figura 7: Simulación de la expansión libre en geometría cilíndrica [3]

A continuación aparecen las referencias de Mitani y Hhamada, y de Seo et al. En [4] describe la expansión de la espuma asumiendo que la variación de volumen depende únicamente del tiempo de forma lineal, simplificando los efectos de la reacción de gasificación, y simula el flujo del frente de espumación tanto utilizando la formulación de Hele-Shaw en una simplificación a 2D de una geometría estrecha como con las ecuaciones de Stokes en el caso tridimensional.

En [5] se describe el problema de forma similar a la referencia [3]; pero incorporando las cinéticas descritas en [2]. La descripción de la densidad es análoga a la de la referencia [2], mientras que la descripción de la viscosidad viene dada por un modelo tipo Castro-Macosko: una curva de forma exponencial dependiente de la conversión de la reacción de gelificación y de la temperatura. Se realiza la simulación de la expansión libre de poliuretano en una geometría cilíndrica, así como en un bloque plano y el llenado de un molde tridimensional cuadrado.

El siguiente trabajo en la revisión es el documento presentado por Bikard et al., referencia [6], especialmente interesante porque está directamente financiado por Faurecia, un proveedor Tier 1 muy significativo en el sector de la automoción. El modelado es el que más difiere de las referencias presentadas hasta el momento, determinando un parámetro denominado ratio de gasificación ϕ , que tiene un valor inicial que depende del grado de nucleación, y siguiendo su variación mediante un modelo cinético que se basa en un tiempo característico para la reacción de gasificación. A partir de este ratio de gasificación se deriva una ecuación de conservación de masa, que se resuelve combinada con la conservación de momento y una ecuación cinética para la reacción de gelificación, igualmente basada en el tiempo característico de la reacción. En cuanto a la viscosidad, se tiene una función exponencial tipo Castro-Macosko combinada con una dependencia del ratio de gasificación.

En el documento se presenta una aplicación industrial, realizando la simulación 3D del proceso de inyección de un asiento delantero en una geometría compleja de un molde real, incluyendo algunas simplificaciones con respecto a las condiciones de proceso, como se presenta en la figura 8.

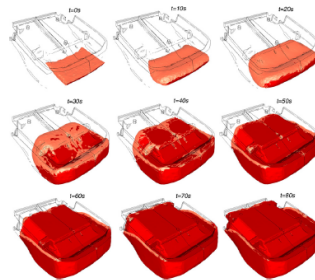


Figura 8: Evolución del crecimiento de la espuma en un molde de asiento [6]

El siguiente trabajo que se reseña es el de Geier et al., [7], que propone la implementación de un modelo análogo al de [5] con los datos cinéticos de [2]. Se realiza la implementación de este modelo en Fluent, pero no se detallan las funcionalidades adicionales integradas como UDFs. El trabajo incluye la simulación de la expansión libre en una geometría cilíndrica.

Por otra parte, en [8], utilizan un modelo a escala microscópica acoplado al

modelo macroscópico para describir la interacción de las burbujas de gas.

Otra referencia interesante es la de Karimi et al., [9], que presenta un solver en forma de extensión en OpenFoam que incorpora una ecuación de balance de población para modelar el comportamiento de las burbujas de gas. Esto permite modelar la distribución de tamaños de celda con lo que se consigue aportar información adicional que tiene un efecto directo sobre las propiedades mecánicas finales de la espuma. El resto del modelo es similar al de las referencias anteriores; con dos ecuaciones de transporte escalar modelar las dos reacciones principales, junto con ecuaciones de conservación de momento, masa y energía y el modelo VOF multifásico. La descripción de la densidad se da a partir del volumen de burbujas de gas por unidad de volumen de la mezcla, y la viscosidad se plantea o bien como un modelo tipo Castro-Macosko como en [5] o bien como un fluido de tipo Bird-Carreau. El trabajo incluye la determinación experimental de los parámetros, y la simulación de la expansión libre en una geometría cilíndrica.

Los últimos artículos que se presentan son los publicados por Ireka, Niezla y colaboradores, investigadores del *Fraunhofer Institute for Industrial Mathematics*. El primero, de 2015, referencia [10], modela la expansión introduciendo un término de expansión S_p en la ecuación de continuidad, cuyo comportamiento y valores se obtienen a posteriori de forma experimental. Se considera que la densidad varía de forma lineal con la fracción volumétrica de gas y que la viscosidad sigue un modelo tipo Castro-Macosko. Únicamente se sigue el avance de la reacción de gelificación, mediante un modelo de cura de Kamal. Se incluye la determinación experimental de los parámetros y la simulación de la expansión libre en una geometría cilíndrica.

En la siguiente referencia, de 2019, [11], los autores continúan con el desarrollo del modelo presentado en la referencia anterior. Dado que se modelaba el crecimiento de la espuma mediante un término de expansión S_p que era homogéneo para todo el dominio y que se obtenía experimentalmente para una geometría dada, el ajuste no era bueno al cambiar la geometría. En esta referencia, extienden la formulación para considerar un ratio de expansión que puede ser anisotrópico.

2.2 Software comercial

Dentro del alcance del trabajo se incluye realizar la revisión de los paquetes de software comerciales disponibles para la simulación de flujos en procesos de inyección de espumas de poliuretano. Se han identificado varios, pero es difícil determinar el tipo de modelo y solver que se están utilizando en cada uno de forma rigurosa.

Los paquetes identificados son:

1. Rem 3D: software del grupo Transvalor, genérico para el moldeo de inyección de polímeros, pero incluye un solver para espumas de poliuretano. Como ejemplos se muestran inyecciones de tipo RIM, como la moqueta inferior de un habitáculo o un volante. Incorpora una malla evolutiva que se modifica con un método de estimación de error a priori.
2. FOAM: solver desarrollado por el *Fraunhofer Institute for Industrial Mathematics*, presumiblemente utilizando un modelo similar al presentado en las publicaciones de los autores que pertenecen al instituto, referencias [10] y [11]. Como ejemplos de aplicación se incluye la espumación de un molde de un asiento de automóvil con geometría simplificada, y de una caja aislada para refrigeración.
3. Moldex 3D: software de simulación de moldeo por inyección de polímeros que incluye un solver para espumas de poliuretano.
4. Moldflow: Software de simulación de inyección de polímeros de Autodesk, comúnmente utilizado en la industria y que incluye un solver para simular procesos RIM de inyección de poliuretano.

Del paquete que se ha conseguido obtener más información es de Moldex 3D; al igual que la mayoría de modelos encontrados en la revisión académica, sigue el avance de una reacción de gasificación y otra de gelificación. La expansión o variación de densidad se tiene en cuenta a través de una función dependiente de un ratio de expansión que se obtiene de forma experimental. El software permite al usuario ajustar de forma sencilla las cinéticas a partir de las curvas de crecimiento y temperatura. Incluye además el modelado aproximado de la microestructura, dando información de la distribución del tamaño de celda. Está fundamentalmente orientado a procesos tipo RIM como por ejemplo, la espumación de un volante, como puede ser ver en la figura 9.

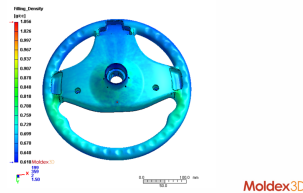


Figura 9: Espumación de un volante en Moldex3D

3 Modelo seleccionado

3.1 Descripción del modelo

Se pretende utilizar un modelo clásico que considere la fase de la espuma como homogénea, siguiendo la interfaz con un método VOF, y trate el efecto de la generación de CO_2 como una variación de la densidad dada por una ley empírica. Este tipo de modelo se pueden encontrar en las referencias [7], [5], y [2]. A continuación se presentan las ecuaciones del modelo. En primer lugar se tiene la condición sobre las fracciones volumétricas:

$$\alpha_f + \alpha_a = 1 \quad (1)$$

donde α indica fracción volumétrica, y los subíndices f y a indican la fase, respectivamente espuma (*foam*) y aire. Gracias a esta condición se resuelven las ecuaciones de Navier-Stokes sobre una sola fase, comenzando por la ecuación de conservación de materia:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_f \alpha_f) + \nabla \cdot (\rho_f \alpha_f \vec{v}_f) = 0 \quad (2)$$

donde ρ es la densidad y \vec{v} la velocidad. La ecuación de conservación de momento:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \otimes \vec{v}) + \nabla p - \nabla [\mu(\nabla \vec{v} + (\nabla \vec{v})^T)] - \rho \vec{g} = 0 \quad (3)$$

donde μ es la viscosidad dinámica, p es la presión y \vec{g} es la aceleración de la gravedad. Por último, la ecuación de conservación de la energía:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \nabla \cdot (\vec{v}(\rho E + p)) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + Q_E \quad (4)$$

donde:

$$E = \frac{w_f \rho_f E_f + w_a \rho_a E_a}{w_f \rho_f + w_a \rho_a}$$

$$E_f = C_{p,f} - \frac{p}{\rho_f} + \frac{\vec{v}^2}{2}$$

$$E_a = C_{p,a} - \frac{p}{\rho_a} + \frac{\vec{v}^2}{2}$$

donde E es la energía por unidad de masa para la mezcla, E_f para la espuma y E_a para el aire, λ es la conductividad térmica y Q_E es la fuente de calor asociado a las reacciones exotérmicas, que toma la forma:

$$Q_E = \alpha_f \frac{\rho_f}{\rho_{f,0}} \left[\Delta H_{OH} C_{OH,0} \frac{dx_{OH}}{dt} + \Delta H_w C_{w,0} \frac{dx_w}{dt} \right] \quad (5)$$

ΔH es el calor de reacción, x es la conversión adimensional que mide el avance de la reacción, y viene dada como:

$$x_i = \frac{C_{i,o} - C_i}{C_{i,0}}$$

donde C_i es la concentración molar, y los subíndices OH y W denotan el grupo hidroxilo del poliol y el agua, respectivamente. Para seguir el progreso de ambas reacciones se van a utilizar dos ecuaciones de transporte aplicadas a dos escalares, las conversiones:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_f \alpha_F x_{OH}) + \nabla \cdot (\rho_f \alpha_f x_{OH} \vec{v}) = \rho_f \alpha_f Q_{OH} \quad (6)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_f \alpha_f x_w) + \nabla \cdot (\rho_f \alpha_f x_w \vec{v}) = \rho_f \alpha_f Q_w \quad (7)$$

dónde Q es el término fuente, dado por la cinética con la que se modelan las reacciones. Para la reacción de polimerización se utiliza una cinética de segundo orden:

$$Q_{OH} = A_{OH} \exp\left(\frac{-E_{OH}}{RT}\right) C_{OH,0} (1 - x_{OH}) \left[\frac{C_{NCO,0}}{C_{OH,0}} - 2 \frac{C_{w,0}}{C_{OH,0}} x_w - x_{OH} \right] \quad (8)$$

y para la reacción de gas, una cinética de primer orden:

$$Q_w = A_w \exp\left(\frac{-E_w}{RT}\right) (1 - x_w) \quad (9)$$

dónde A es el factor preexponencial, E la energía de activación y R la constante universal de los gases. Con ello se modela la dependencia de la cinética con la temperatura siguiendo la ecuación de Arrhenius.

Por último se tienen las dependencias de las propiedades físicas de la espuma. Para la densidad:

$$\rho_f = (1 + X_{w,0}) \left[x_w \frac{RT X_{w,0}}{p M_{H_2O}} + \frac{(1 - x_w) X_{w,0}}{\rho_w} + \frac{1}{\rho_{PUR}} \right] \quad (10)$$

dónde $X_{w,0}$ es la fracción másica de agua a tiempo inicial en la mezcla de poliol y el subíndice PUR denota el poliuretano. Para la viscosidad se sigue un modelo Castro-Macosko, descrito en [5], de la forma:

$$\mu_f = \eta_0 \left(\frac{x_{NCO,g}}{x_{NCO,g} - x_{NCO}} \right)^{a + b x_{NCO} + c x_{NCO}^2} \quad (11)$$

Donde el subíndice NCO denota el isocianato, y el subíndice g denota el punto de gel a partir del cual la viscosidad permanece constante. Además, se tiene:

$$\eta_0 = \eta_{\infty} \exp\left(\frac{E_{\eta}}{RT}\right)$$

dónde η_{∞}, E_{η} , $x_{NCO,g}$, a , b , y c son parámetros determinados de forma experimental, disponibles en [5]. Para la conductividad térmica se tiene:

$$\lambda_f = 8.7006 \times 10^{-8} \rho_f + 8.4674 \times 10^{-5} \rho_f + 1.1598 \times 10^{-2} \quad (12)$$

3.2 Simplificaciones

En el modelo seleccionado que se ha presentado se han tomado una serie de asunciones con respecto al fenómeno real que se pretende simular. En primer lugar se tiene el hecho de considerar la espuma como una fase líquida homogénea, siguiendo la expansión y polimerización de la misma simplemente como la variación de las propiedades físicas, especialmente de la densidad y la viscosidad. En realidad, la formación de la espuma es un proceso mucho más complejo, donde de una fase líquida acaba surgiendo una estructura solida altamente compleja formada por un gran número de celdillas dodecahédricas, donde las aristas son pilares del polímero, y las caras pueden estar abiertas o cerradas por láminas del polímero.

Esto supone que se van a perder ciertos comportamientos de la espuma durante el proceso de crecimiento, especialmente las variaciones de altura debida a la rotura de las paredes de las celdillas por sobrepresión durante el proceso de espumado, y que además los patrones de flujo internos a la fase líquida que aparecerán durante la simulación no serán necesariamente significativos del proceso real. Sin embargo, el modelo si que nos permitirá capturar los dos aspectos más críticos para evaluar el proceso de espumación, que son la distribución de la mezcla en el molde durante los momentos iniciales en los que aún se comporta como un líquido, y el avance del frente de espuma durante la fase de expansión o llenado del molde.

Otros aspectos importantes que se omiten en el modelo tienen que ver con la complejidad del conjunto de reacciones que ocurren en el proceso de espumado y sus cinéticas. Como ya se ha detallado, en el modelo unicamente se realiza el seguimiento de una reacción de polimerización y otra de expansión, con lo cual se está simplificando con respecto al conjunto de reacciones real, mucho más amplio, con más pasos intermedios, y con muchos otros compuestos. Como ejemplo, en la cinética de la reacción de gasificación se asume que el isocianato siempre estará en exceso con el agua, de forma que la ecuación se puede simplificar a primer orden. Además, para simplificar los cálculos, se asume que todos los componentes están en sus correspondientes relaciones estequiométricas con el polioli, mientras que en el proceso real de espumado puede llegar a haber una diferencia del $\pm 10\%$ con respecto a las cantidades estequiométricas.

Una última simplificación que cabe la pena mencionar tiene que ver con la interacción de la espuma con las paredes del molde o recipiente en el que se realice la espumación. En el proceso real, la espuma forma una "piel" o lámina de polímero sin la estructura de celdillas propia de la espuma por efecto de la presión contra una pared sólida, mientras que el modelo no lo tiene en cuenta.

4 Implementación

A continuación se detalla la implementación del modelo descrito. Para la implementación se ha elegido el software Ansys Fluent, fundamentalmente por la familiaridad del alumno con el mismo, y por la facilidad para implementar funcionalidades adicionales mediante UDFs o *User Defined Functions*. Se va a detallar la implementación según sean opciones ya disponibles en el software o funcionalidades adicionales que se han programado.

4.1 Condiciones generales

En primer lugar se selecciona la resolución en estado transitorio, ya que lo que interesa es ver el comportamiento dinámico del proceso de espumado. Además, se va a resolver en precisión simple, que resulta suficiente para el problema descrito. Se incorporan los efectos gravitacionales $g=(0,-9.81)$ m/s² que tendrán un efecto importante en la distribución de la mezcla cuando se encuentra líquida, y en el proceso de expansión.

Como ya se había mencionado en la descripción del modelo, se va a optar por un modelo multifásico VOF con dos fases Eulerianas y modelado de la interfaz *sharp*. También se resuelve la ecuación de la energía, y debido a las bajas velocidades esperadas en el proceso de expansión, se tiene un modelo laminar y resolviendo la energía sin tener en cuenta los aportes por las fuerzas internas. Es importante destacar que en la resolución completa de una geometría 3D donde se tenga en cuenta el venteo del aire del interior del molde podrían aparecer zonas turbulentas en los respiraderos, que evacúan una gran cantidad de aire en unos segundos a través de secciones de paso pequeñas. Sin embargo este aspecto se escapa a la resolución de una geometría sencilla que se aborda en el presente trabajo académico.

4.2 Materiales y propiedades físicas

Se tienen dos fases y por tanto dos materiales. Como fase principal se tiene aire, y como fase secundaria espuma. A continuación se detallan sus propiedades físicas.

4.2.1 Aire

Para el aire se han seleccionado propiedades constantes correspondientes a aire estándar a 20°C. Con ello se desprecian los efectos convectivos en la fase del aire, pero es una asunción razonable ya que se tratará de flujos de calor muy pequeños frente a la fuerte exotermia de las reacciones químicas en la fase de la espuma. Además, el patrón de flujo del aire vendrá condicionado fundamentalmente por la expansión de la espuma frente a los posibles flujos por convección. Como el objetivo es evaluar la expansión de la espuma, parece razonable perder esta información en la fase gas frente a una mayor estabilidad y velocidad de la

resolución. Si se quisiese obtener un mayor detalle, se podría variar la densidad a una ley de gas ideal, con la viscosidad y la conductividad térmicas dadas por la ley de Sutherland u otros modelos.

En la tabla 1 se muestran los valores numéricos de las propiedades físicas del aire.

	ρ (kg/m ³)	μ (Pa s)	Cp (J/Kg K)	k (W/m K)	Pm (kg/mol)
Aire	1.225	1.79×10^{-5}	1006.43	0.0242	28.97

Tabla 1: Propiedades físicas del aire

4.2.2 Espuma

Para la espuma se han utilizado los datos y leyes empíricas dadas en [7], [2] y [5], que se detallan a continuación:

- **Densidad:** como ya se ha descrito en (10) la densidad viene dada como una ley empírica en función de la conversión de la reacción de gasificación y el nivel de agua inicial en la fórmula de espumación. Esto es así debido a que, como ya se ha mencionado, es la reacción del agua con el isocianato la que genera el CO_2 que lleva a cabo la espumación, y por tanto la densidad final de la espuma dependerá fundamentalmente de cuanta agua haya en la formulación. Además, la ley empírica incluye la ley de los gases ideales para tener en cuenta el efecto de la temperatura y la presión sobre el CO_2 que se está generando.

En la tabla 2 se listan las propiedades de los parámetros numéricos que aparecen en (10).

$x_{w,0}$	R (J/K mol)	M_{H_2O} (kg/mol)	ρ_w (kg/m ³)	ρ_{PUR} (kg/m ³)
0.024	8.314	0.01814	1000	1100

Tabla 2: Valores numéricos para el cálculo de la densidad

Por último, se grafican los valores de la densidad en la figura 10 para todo rango de conversiones x_w , a 275 K y 400 K.

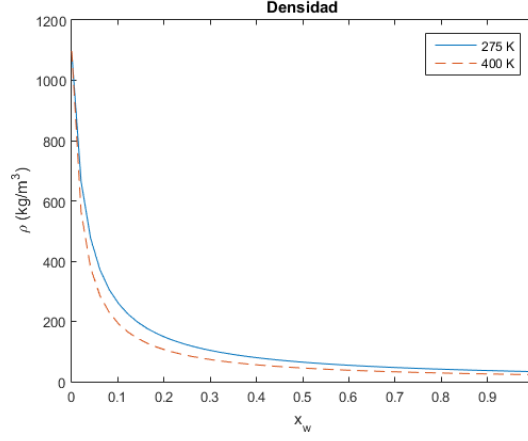


Figura 10: Evolución de la densidad de la espuma

- **Viscosidad:** al igual que para la densidad, para la viscosidad se tienen una ecuación empírica, que en este caso depende del avance de la reacción de la gelificación y de la temperatura. En la bibliografía, la ecuación aparece descrita en función de la conversión del isocianato, o lo que es lo mismo, de los grupos funcionales NCO. Sin embargo, en el presente trabajo se asume una relación estequiométrica entre el isocianato y el polioliol, de forma que la conversión es equivalente para el polioliol (grupos OH) y el isocianato, así la ecuación toma la forma dada por (11). En la tabla 3 se presentan los valores numéricos de los parámetros.

$x_{NCO,g}$	η_{∞} (Pa s)	E_{η}/R (K ⁻¹)	a	b	c
0.65	10.3×10^{-8}	4970	1.5	1	0

Tabla 3: Valores numéricos para el cálculo de la viscosidad

Por último, en la figura 11 se presenta el perfil de variación de la viscosidad para dos temperaturas (275 y 400 K) en función de la conversión x_{OH} de la reacción de gelificación.

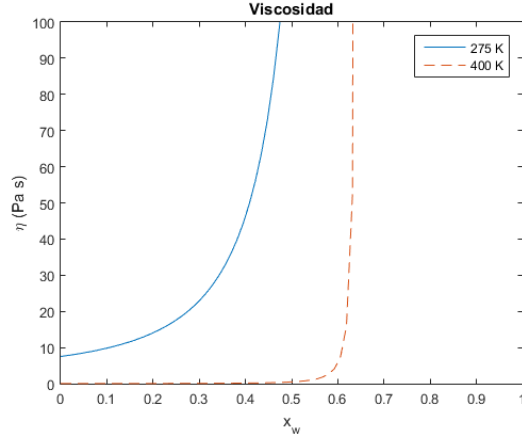


Figura 11: Evolución de la viscosidad de la espuma

- **Calor específico:** el calor específico de la fase espuma se considera constante e igual a 1800 J/kg K, de igual modo que en [2] y [5].
- **Conductividad térmica:** para la conductividad térmica de la espuma se tiene una nueva ley empírica en función de la densidad de la espuma, extraída de [7], dada en (12). En la figura 12 se presenta la variación de la conductividad con la densidad de la espuma.

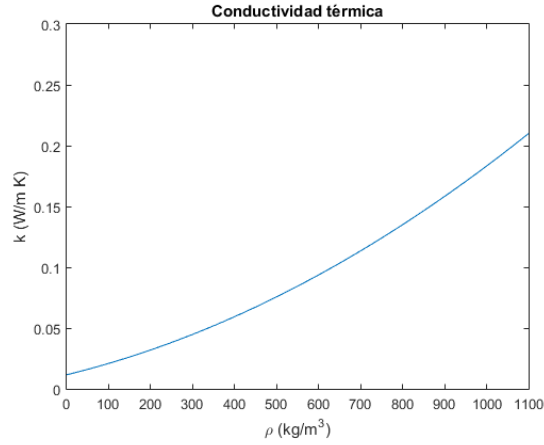


Figura 12: Evolución de la conductividad térmica de la espuma

4.3 UDFs

En la siguiente sección se detalla la implementación en el entorno de programación de Fluent de los terminos fuente del modelo termoquímico y de las propiedades físicas de la espuma detalladas en los apartados anteriores.

4.3.1 Modelo Termoquímico

En primer lugar se presentan los términos fuente dados en (8) y (9) de las ecuaciones de transporte escalar (6, 7) que modelan la cinética química. Las ecuaciones de transporte escalar ya están incorporadas como funcionalidad en Fluent, y tienen la siguiente forma genérica:

$$\frac{\partial \rho \phi_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\rho u_i \phi_k - \Gamma_k \frac{\partial \phi_k}{\partial x_i} \right] = S_{\phi_k} \quad (13)$$

donde se tiene un primer término de acumulación, un término de transporte convectivo, otro difusivo y por último un término fuente. En este caso el coeficiente de difusión Γ_k se considera 0 y por tanto se resuelve únicamente el transporte convectivo. La suposición de eliminar el transporte difusivo viene justificado tanto por la homogeneidad del medio en el inicio del proceso de espumado como por la velocidad de las reacciones que tienen lugar.

Los términos fuentes para la ecuación de transporte escalar se definen a través de la macro *DEFINE_SOURCE(name,c,t,dS,eqn)*, que recibe cinco argumento: el nombre de la función definida, la celda sobre la que se va a calcular y el *thread* al que pertenece, la derivada del término fuente con respecto a la variable dependiente, y por último el número de la ecuación. Es importante destacar que de forma normal la función que calcula el término fuente se llama automáticamente por Fluent durante el bucle de resolución para todas las celdas del dominio sobre el que se este resolviendo la ecuación de transporte escalar, por lo que no es necesario añadir ninguna condición adicional para que los términos fuente se resuelvan de forma correcta únicamente en la fase espuma.

Para el término fuente de la ecuación de transporte escalar de grupos OH (poliol), ecuación (8), se presentan en la tabla 4 los valores numéricos de los parámetros, que se han extraído, bien de la referencia [2] para los parámetros cinéticos, bien de las formulaciones de Grupo Copo para los valores de concentración, que típicamente no vienen descritos en las referencias bibliográficas disponibles. El código de la función está disponible en el apartado A.1 del apéndice.

A_{OH} m ³ /g-equiv s	E_{OH} (J/mol)	$C_{OH,0}$ (mol/m ³)	$C_{w,0}/C_{OH,0}$
1.7348	4.04×10^4	5000	1

Tabla 4: Valores numéricos para el término fuente de la reacción de gelificación

Para el término fuente de la ecuación de transporte escalar del agua (reacción de gasificación), ecuación (9), se utiliza una macro idéntica, con los valores descritos en la tabla 5, también procedentes de la referencia [2]. El código de la función está disponible en el apartado A.2 del anexo.

A_w (s^{-1})	E_w (J/mol)
1.385×10^3	3.266×10^4

Tabla 5: Valores numéricos para el término fuente de la reacción de gasificación

Por último se tiene el término fuente de la ecuación de conservación de la energía, qué se define igualmente a través de la macro *DEFINE_SOURCE*, pero con una consideración especial. Dado que la ecuación de la energía se resuelve sobre todo el dominio, mientras que el término fuente solo aparece en la fase en la que hay reacciones químicas (la fase espuma), es necesario conocer la estructura de las celdas en el modelo multifásico e indicar en la macro sobre qué fase se desea resolver.

En el modelo multifásico en Fluent, las celdas están estructuradas por dominios, en primer lugar un "superdominio" general bajo el que existe una serie de subdominios específicos para cada fase, y otros subdominios para permitir las interacciones entre fases. Los dominios están estructurados en *threads*, existiendo por tanto *threads* para la mezcla y para cada una de las fases. Ya que el solver, y por tanto la macro para definir el término fuente iteran sobre *threads*, será necesario identificar el *subthread* correspondiente a la fase espuma, e indicar a la macro que solo realice el cálculo del término fuente sobre ese *thread*.

Para ello se va a utilizar la macro, *THREAD_SUB_THREADS(m-t,p-d-i)*, que tiene como argumentos un *thread* de mezcla y un *phase-domain-index* o *pointer* de fase, que tiene valor 0 para la fase definida como principal, e incrementa enteros para las siguientes fases, y que devuelve el array de *subthreads* de la fase especificada.

El término fuente aparece en la ecuación (5), requiere conocer las derivadas temporales de los escalares, que no se pueden acceder directamente desde Fluent, por lo que será necesario aproximarlas de forma simple a partir de su valor en el tiempo anterior. Los valores numéricos que se utilizan aparecen recogidos en la tabla 6, de nuevo procedentes de la referencia [2] y de las formulaciones de Grupo Copo. El código está disponible en el apartado A.3 del apéndice.

$\rho_{f,0}$ (kg/m ³)	ΔH_{OH} (J/g-eq)	ΔH_w (J/g-eq)	$C_{OH,0}$ (mol/m ³)	$C_{w,0}$ (mol/m ³)
1100	-7.075×10^4	-8.6×10^4	5000	2546

Tabla 6: Valores numéricos para el término fuente de la ecuación de energía

Por último se detallan las macros que se han utilizado de forma genérica en todas las UDFs de los términos fuente. En primer lugar la macro para acceder al valor del escalar en el instante de tiempo actual $C_UDSI(c,t,i)$ y en el instante de tiempo previo $C_UDSLM1(c,t,i)$. A continuación las macros para acceder a las propiedades de la celda, como temperatura $C_T(c,t)$, presión $C_P(c,t)$, y densidad $C_R(c,t)$. Finalmente, la macro que permite conocer la fracción volumétrica de la fase de la celda correspondiente al *thread* desde el que se llama, $C_VOF(c,t)$.

Todas ellas reciben como argumento una referencia a una celda y un *thread*, pero adicionalmente la macro para los valores de los escalares incluye un índice que indica el número del escalar, comenzando por 0.

4.3.2 Propiedades físicas de la espuma

Las propiedades físicas se definen con la macro $DEFINE_PROPERTY(name,c,t)$ que recibe como argumentos el nombre de la función, la celda y el *thread* sobre los que se va a modificar la propiedad. Al igual que en las UDFs para las fuentes de las ecuaciones de transporte escalar, las propiedades se definen para una fase en concreto, de forma que las funciones van a ser llamadas por el solver siempre en el *thread* correcto, y no es necesario modificar el bucle por defecto.

En primer lugar se tiene la UDF que define la viscosidad, cuya ecuación y valores numéricos se han detallado en el apartado anterior. La traslación a la UDF es prácticamente directa, y el código se puede encontrar en el apartado A.4 del apéndice. De forma análoga, la ecuación de la conductividad térmica también tiene una traslación directa a la UDF, y el código está disponible en el apartado A.5 del apéndice.

Por último se tiene la ecuación que define la viscosidad, cuyos valores numéricos se han definido en el apartado anterior. En este caso, dado que por las características de la reacción de gelificación la viscosidad se dispara al infinito en torno a un valor concreto de la conversión de los grupos OH, es necesaria alguna modificación para poder implementarla en el método numérico. En concreto, se selecciona un valor típico de la viscosidad cuando la mezcla reactiva alcanza el punto de gel, y se asigna ese valor de forma indiscriminada para todas las celdas cuyo valor de conversión de los grupos OH esté por encima del punto de gel. El código está disponible en el apartado A.6 del apéndice.

4.4 Geometría y mallado

Para una primera validación del modelo se decide resolver un caso bidimensional relativamente sencillo. La geometría del caso viene dada por la prueba estándar definida en la referencia [7], y se trata de un cilindro de diámetro 100 mm, que se va a reducir a resolver una sección 2D del mismo. Así, la geometría resultante es un rectángulo de base 50 mm, con una altura suficiente como para permitir la expansión completa de la espuma, en este caso de 0.5 m.

El mallado de la geometría debe ser lo suficientemente grueso como para permitir una resolución en pasos de tiempo razonables, mientras que permita obtener una resolución suficiente de los fenómenos que se quieren observar. Para el rectángulo con base de 50 mm parece razonable asumir un tamaño de celda de aproximadamente 1 mm. El mallado inicialmente se realiza uniforme ya que no se espera observar fenómenos especiales en las paredes del cilindro, al tratarse de un flujo gobernado por la expansión debida a la variación de densidad por la reacción de gasificación.

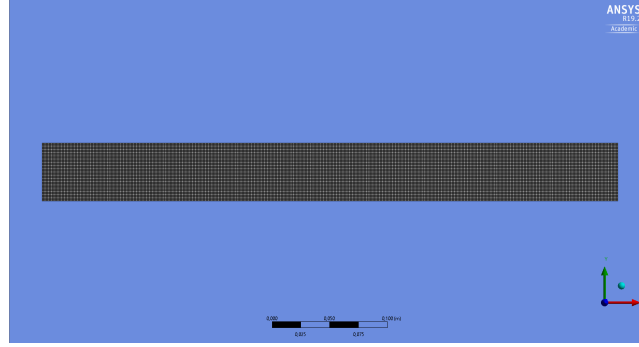


Figura 13: Malla de la geometría

Para este tamaño de celda, se puede estimar a priori el valor del paso de tiempo que permitirá mantener el valor del número de Courant por debajo de la condición CFL seleccionada. En este caso se ha elegido como valor máximo del CFL 2, ya que se trata de un problema 2D con una velocidad de la interfase esperada lenta.

El número de Courant se define como:

$$Co = \frac{\Delta t v}{\Delta x} \leq CFL = 2 \quad (14)$$

dónde Δt es el paso de tiempo, v es la velocidad del fluido, y Δx es la longitud de la celda en la dirección del flujo, genéricos al considerar un mallado uniforme. Se puede obtener una estimación de la velocidad de expansión a priori a partir de las dimensiones de la geometría, el tiempo estimado de expansión de la espuma y el cambio de densidad. Como punto de partida, se estima una variación de densidad desde 1100 a 20 kg/m³ sobre una inyección de 35 g de espuma, según

el caso dado por la referencia [7] que en un área de $7.85 \times 10^{-3} \text{ m}^2$, supone una variación de altura de 4×10^{-3} a 0.22 m. La expansión tiene un tiempo total de unos 90 s, pero no ocurre a velocidad constante, si no que se produce una expansión muy rápida en un periodo de unos 20 s debido a los efectos de la exotermia y la dependencia exponencial de las cinéticas de reacción con la temperatura. Así, la velocidad máxima que podemos esperar a priori será de unos 0.01 m/s.

Así, substituyendo en la ecuación (14), obtenemos un paso de tiempo máximo de 0.2 s, razonable para poder realizar la simulación en un equipo personal.

4.5 Condiciones iniciales y de contorno

En el instante inicial se tiene todo el dominio a una temperatura uniforme de 295 K, con velocidades y presión 0, así como ambos escalares. En cuanto al modelo multifásico, como se menciona en el apartado anterior se sigue el caso tipo definido en la referencia [7], en el que se inyectan en la geometría 35 g de espuma, lo cual supone que en el área de $7.85 \times 10^{-3} \text{ m}^2$ de la geometría cilíndrica tendremos que parchear con fracción volumétrica 1 de la fase espuma una altura de 4 mm desde la base del cilindro. La fase espuma parcheada mantiene el mismo valor de la temperatura, velocidades, presión y escalares. En la figura 14 se muestran los contornos de densidad para tiempo $t=0$ s.

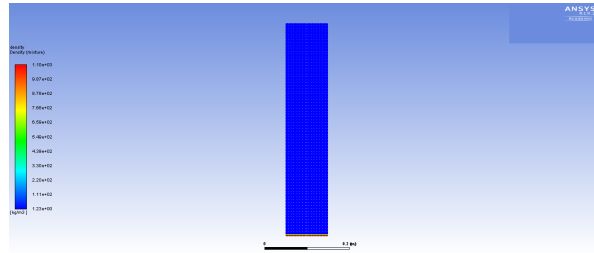


Figura 14: Contornos de densidad a $t=0$ s

En cuanto a las condiciones de contorno, para la pared de la geometría coincidente con el eje X se tiene una condición de eje, como exige el modelo axisimétrico en Fluent.

Para el fondo de la geometría sobre el que descansa la espuma, y la pared opuesta al eje, se tiene una condición de contorno de pared con condición de no deslizamiento ($v = 0 \text{ m/s}$) sobre la pared, y flujo nulo de calor al resolver el caso adiabático. Es razonable suponer una condición de contorno adiabática ya que en un cilindro plástico o de cartón los fuertes efectos exotérmicos de la reacción dominan completamente la temperatura en el dominio durante al menos el tiempo de expansión y curado de la mezcla frente a posibles pérdidas por convección o conducción.

4.6 Resolución

Dado que se va a resolver el modelo multifásico VOF se tiene que utilizar el solver basado en presión. Como método para el acople presión velocidad se va a utilizar el algoritmo PISO, recomendado para los casos evolutivos. Para el problema evolutivo se utiliza una discretización de primer orden (implícito).

Como paso de tiempo inicial se tiene 1×10^{-3} s, con un paso de tiempo máximo de 0.1 s, dejando un margen razonable hasta los 0.2 s máximos que habíamos obtenido para la condición CFL en el apartado anterior. El paso de tiempo mínimo es de 1×10^{-5} s, resolviendo 30 iteraciones máximas por paso de tiempo, suficientes para alcanzar la convergencia con un valor de los residuales de 1×10^{-3} para la continuidad, los escalares y la velocidad en ambos ejes, y 1×10^{-6} para la energía.

5 Resultados

5.1 Expansión libre en 2D axisimétrico

A continuación se muestran los resultados para la simulación 2D axisimétrica que se ha descrito en los apartados anteriores.

5.1.1 Evolución de la densidad

En la figura 15 se presentan los contornos de densidad para distintos tiempos de flujo, y en la figura 16 se muestra el perfil del valor promedio de la densidad en la fase espuma para el intervalo de tiempos de flujo.

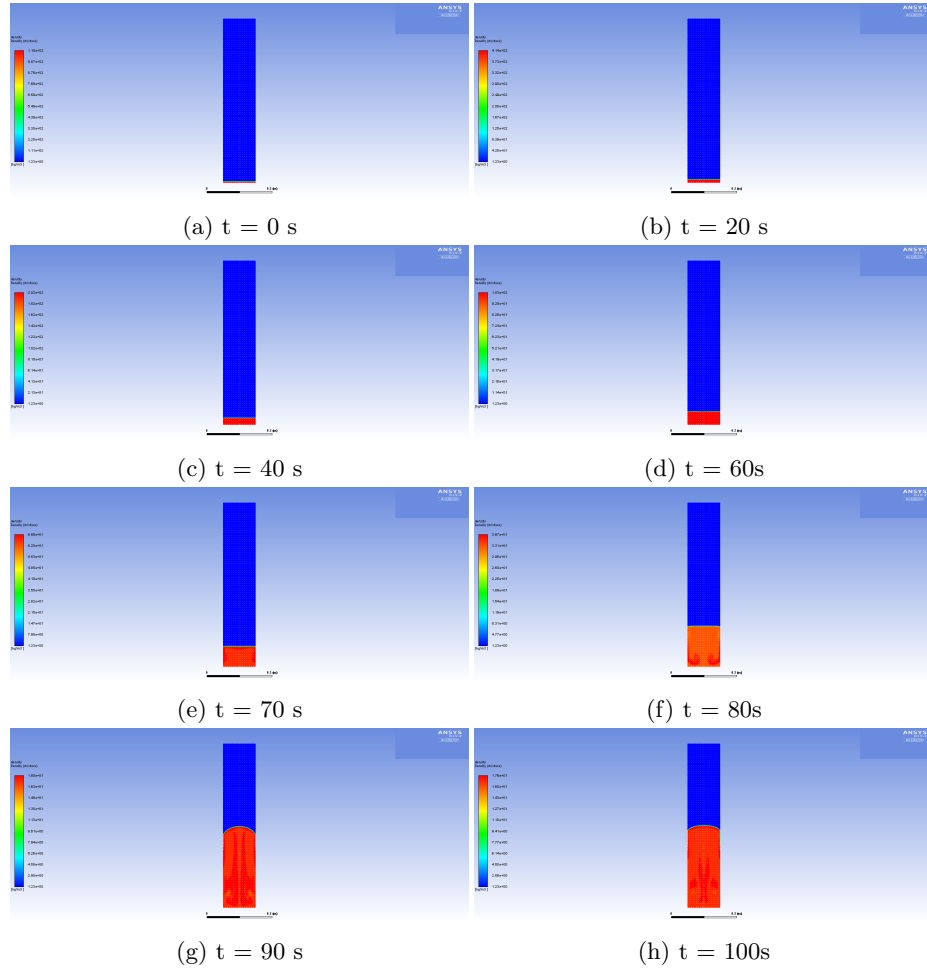


Figura 15: Contornos de densidad para diversos tiempos de flujo

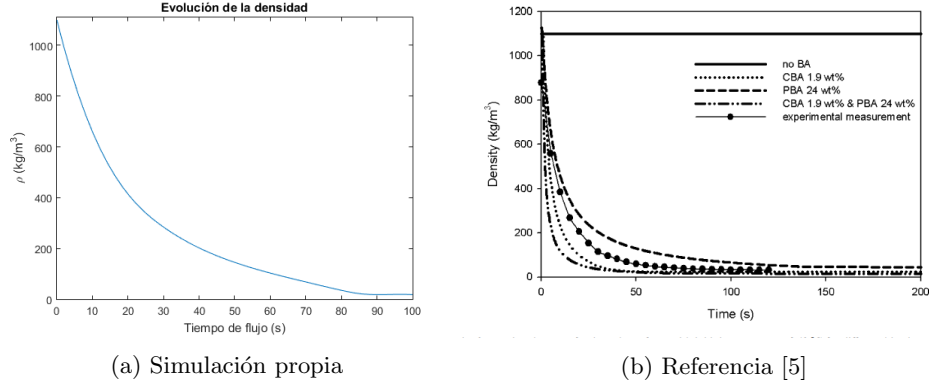


Figura 16: Evolución de la densidad media

La evolución de la densidad muestra una buena semejanza a la que se presenta en la referencia [5], en concreto para la curva con un 1.9% de CBA (*Chemical Blowing Agent, o agua*), aunque en este caso la temperatura inicial es superior, de 50 °C, y por lo tanto la variación es más rápida.

En el mapa de contorno de densidades, figura 15, podemos observar por primera vez como se comporta el avance del frente de espumación. La expansión es lenta al principio pero comienza a acelerarse en torno a los 70-80 s por efecto de la exotermia sobre la cinética química, que se detallará y será observable al evaluar la variación temporal y espacial de la temperatura y los escalares. Se observa además la aparición de la forma característica de la espuma en expansión libre, donde por efectos viscosos se forma una superficie convexa en la parte superior de la espuma hacia el final del proceso de expansión.

5.1.2 Evolución de la temperatura

En la figura 17 se presentan los contornos de temperatura para varios tiempos de flujo, y en la figura 18 se muestra el perfil de evolución de la temperatura media para el mismo intervalo de tiempos.

En la temperatura podemos observar el mismo comportamiento de aceleración de las reacciones, y por tanto de la generación del calor en el dominio por los efectos de las cinéticas de Arrhenius. Con respecto a la referencia [5] se tiene una buena similitud en la forma de la curva, pero la temperatura tarda mucho más en comenzar a cambiar debido al efecto de la temperatura inicial, que retrasa mucho la aceleración de las cinéticas.

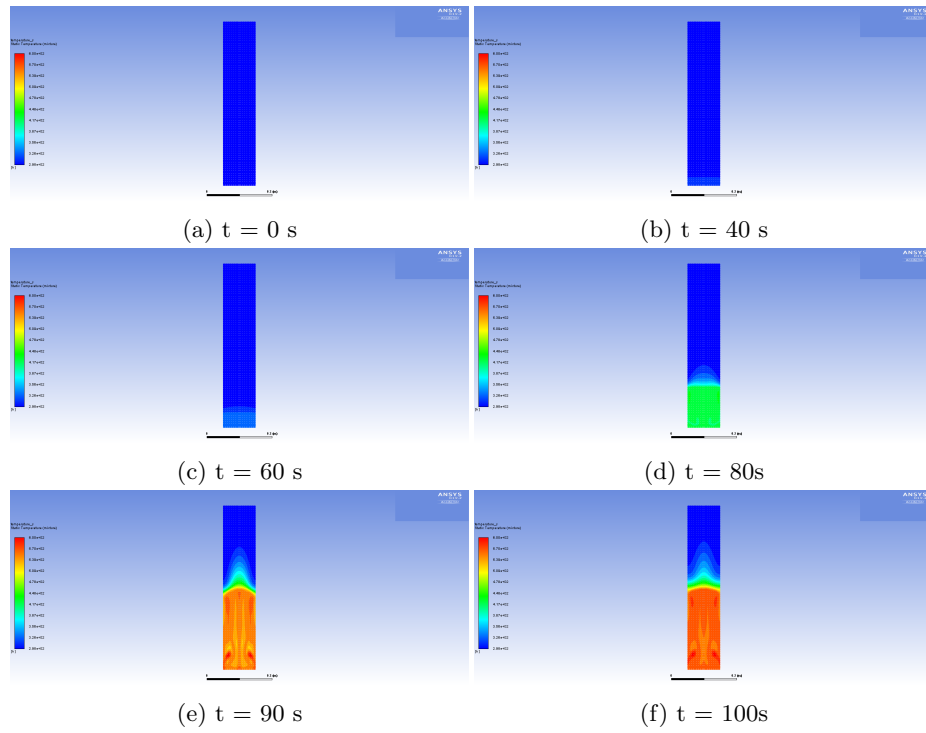


Figura 17: Contornos de temperatura para diversos tiempos de flujo

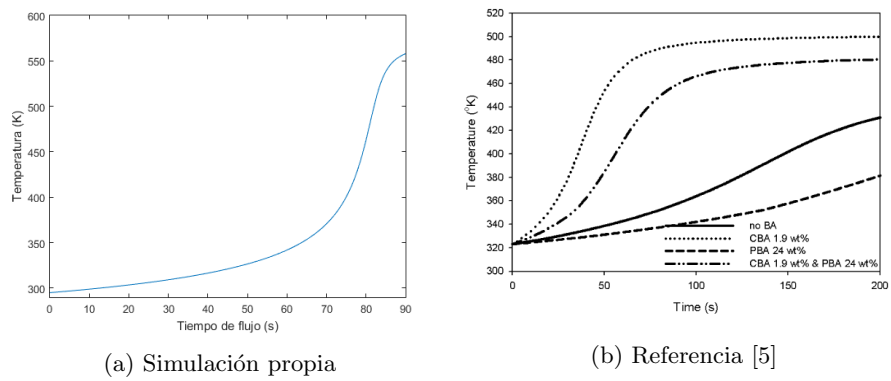


Figura 18: Evolución de la temperatura media

5.1.3 Evolución de los escalares

En la figura 19 se presentan los contornos del escalar x_w para diversos tiempos de flujo y en la figura 20 se representa la evolución temporal de la media de los dos escalares simulados. Se puede observar que tal y como se describe en la descripción del problema la reacción de gasificación es más rápida que la reacción de gelificación, que se ralentiza significativamente al alcanzar un valor en torno a 0.9. Comparativamente con la referencia [2], se tiene un comportamiento general similar, pero las reacciones son significativamente más rápidas, fundamentalmente por las diferencias en las formulaciones, aunque en la referencia no se especifican los valores numéricos correspondientes a la formulación.

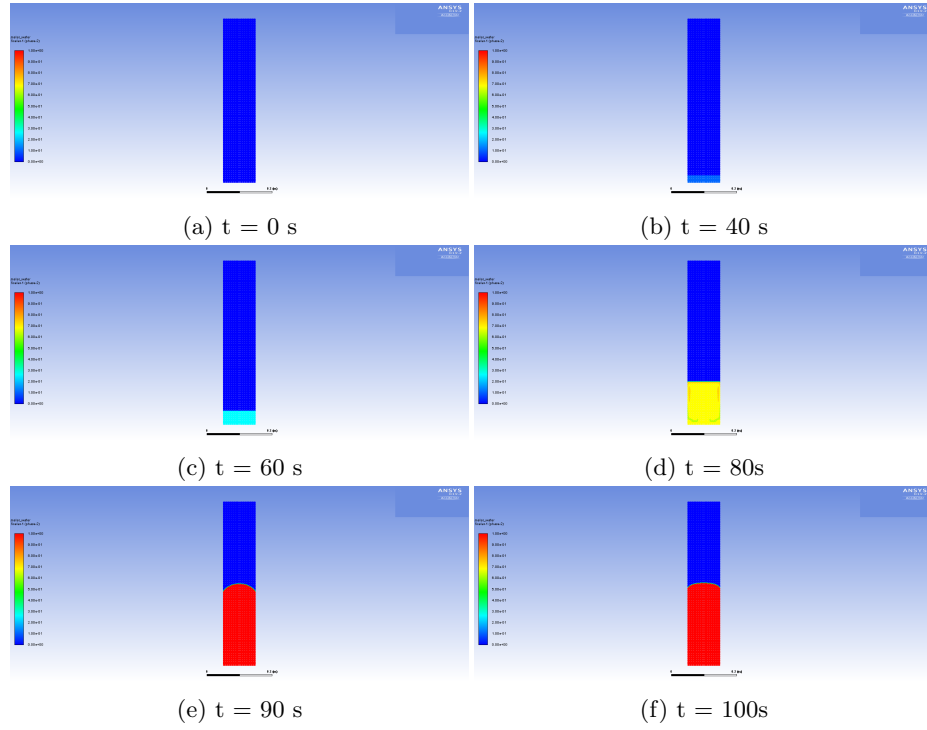


Figura 19: Contornos del escalar x_w para diversos tiempos de flujo

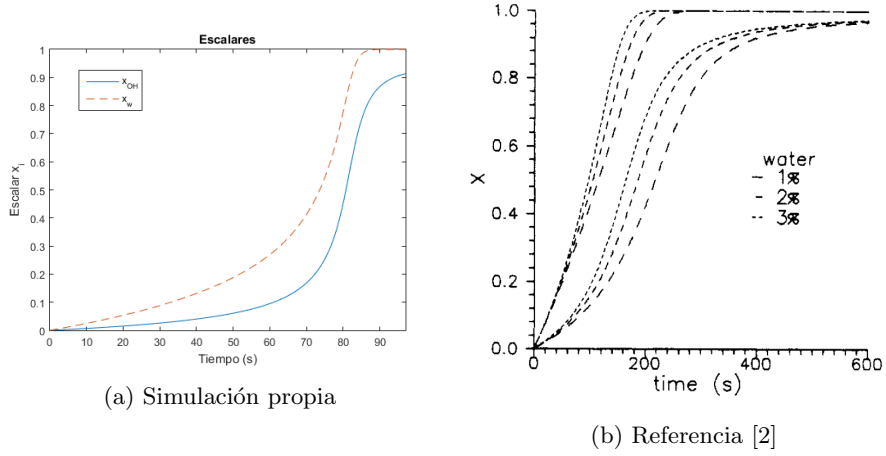


Figura 20: Evolución de los escalares

5.1.4 Evolución del campo de velocidad y de la viscosidad

En la figura 21 se presentan los vectores del campo de velocidades para diferentes tiempos de flujo. El patrón de flujo dominante es una expansión desde el centro de la espuma, que sube a la vez que se expande, mientras que adyacentes a las paredes las velocidades son menores e incluso se produce la subducción de la espuma en algunos puntos, apareciendo patrones en forma de remolino.

La aparición de estos patrones de flujo parece explicarse si se observa en conjunto los mapas de velocidad con los contornos de temperatura y densidad. La capa superior de la espuma se enfría al contacto con el aire (el resto del recipiente es adiabático), y esa capa fría ralentiza sus cinéticas y por tanto su variación de densidad, de forma que es apartada hacia los laterales por la capa inferior de la espuma, que esta más caliente y por tanto se expande a mayor velocidad.

En la figura 22 se presenta la evolución de la viscosidad. Como se observa en la figura 11 la viscosidad esta dominada por la temperatura cuando la conversión de la reacción de gelificación x_{OH} es inferior al punto de gel. Por tanto, la viscosidad disminuye rápidamente al aumentar la temperatura, permanece relativamente constante, y se dispara en el entorno del punto de gel. Este mismo comportamiento se puede observar en el perfil de la media de viscosidad en la fase espuma, figura 23, dónde se observa la adecuación del valor seleccionado para la viscosidad a partir del punto de gel en la UDF, de 15 Pa s, de forma que se evita una gran discontinuidad de la viscosidad en un instante de tiempo dado que lleva a problemas de estabilidad en la solución.

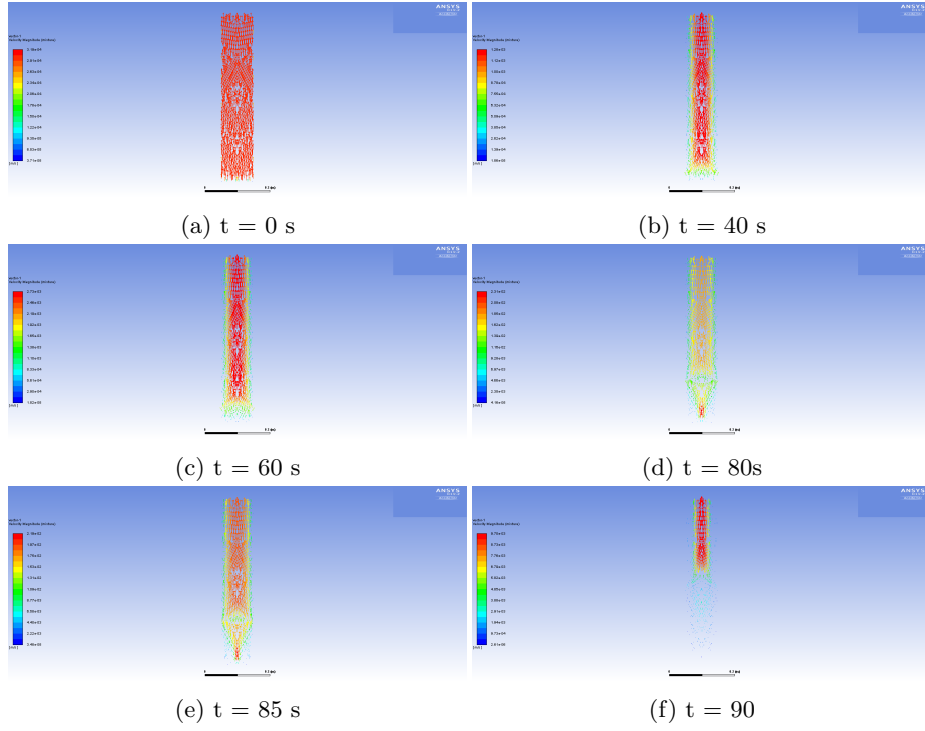


Figura 21: Vectores de velocidad para diversos tiempos de flujo

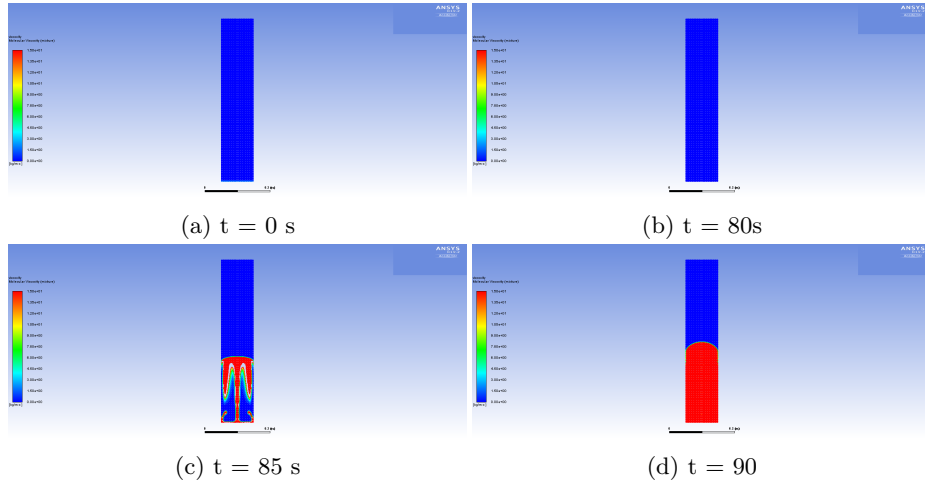


Figura 22: Contornos de viscosidad para diversos tiempos de flujo

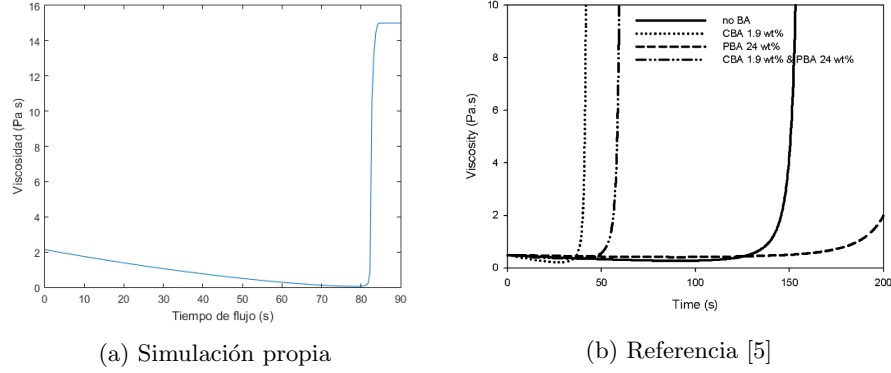


Figura 23: Perfil de evolución de la viscosidad

5.2 Conclusiones y trabajo futuro

Con el presente trabajo se ha conseguido la evaluación del estado del arte de los modelos disponibles para la simulación del proceso de moldeo de espumas de poliuretano, principalmente en el ámbito académico. Adicionalmente se han descrito una relación de los paquetes de software comerciales disponibles y de los modelos utilizados por algunos de ellos.

También se ha realizado la implementación en Fluent de un modelo clásico que describe de forma adecuada el proceso de expansión de la espuma, con la capacidad de evaluar los fuertes cambios en las propiedades físicas de la espuma, fundamentalmente de la densidad y la viscosidad, como función de las cinéticas de reacción; incorporando además los efectos térmicos asociados.

Sin embargo, el modelo ha sido implementado en base a las cinéticas y propiedades descritas por la bibliografía, y solo para el caso más sencillo de expansión libre. No obstante el modelo implementado supone un primer paso sobre el que continuar los trabajos de desarrollo, incorporando datos cinéticos y reológicos de las formulaciones de Grupo Copo, y extendiendo la resolución a otras geometrías complejas. Estos trabajos continuarán en el marco del proyecto de I+D entre CTAG y Grupo Copo.

References

- [1] European Association of Manufacturers of Moulded Polyurethane Parts for the Automotive Industry. Euromolders polyurethane seating guide. *Euromolders*, pages 1–56, 2016.
- [2] S.A. Baser and D.V. Khakhar. Modelling the dynamics of water and r-11 blow polyurethane foam formation. *Polymer engineering and science*, 34:642–649, 1994.
- [3] L. Lefebvre and R. Keunings. Finite element modelling of the flow of chemically reactive polymeric liquids. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 20:319–334, 1995.
- [4] T. Mitani and H. Hamada. Prediction of flow patterns in the polyurethane foaming process by numerical simulation considering foam expansion. *Polymer engineering and science*, 43(9):1603–1612, 2003.
- [5] D. Seo and J.R. Youn. Numerical analysis of reaction injection molding of polyurethane foam by using a finite volume method. *Polymer*, 46:6482–6493, 2005.
- [6] J. Bikard, J. Bruchon, T. Coupez, and L. Silva. Numerical simulation of 3d polyurethane expansion during manufacturing process. *Colloids and Surfaces A*, 309:49–63, 2007.
- [7] S. Geier and M. Piesche. Numerical simulation of mold filling processes with polyurethane foams. *Chemical Engineering Technology*, 32:1438–1447, 2009.
- [8] S. Geier, C. Winkler, and M. Piesche. Coupled macro and micro-scale modeling of polyurethane foaming processes. *Journal of Computational Multiphase Flows*, 6:377–390, 2014.
- [9] M. Karimi, H. Droghetti, and D.L. Marchisio. Pufoam: a novel open-source cfd solver for the simulation of polyurethane foams. *Computer Physics Communications*, 2017.
- [10] I.E. Ireka, D. Niedziela, D.K. Schäfer, J. Tröltzsch, K. Steiner, F. Helbig, T. Chinyoka, and L. Kroll. Computational modelling of the complex dynamics of chemically blown polyurethane foams. *Physics of Fluids*, 27:1–16, 2015.
- [11] D. Niezdla, I.E. Ireka, and K. Steiner. Computational analysis of nonuniform expansion in polyurethane foams. *Polymers*, 11(100):1–17, 2019.

A Código UDFs

A.1 Término fuente de la reacción de gelificación

```
#define aoh 1.7348
#define eoh 4.04E4
#define snco 1
#define sw 0.03
#define coh0 5000

DEFINE_SOURCE(oh_source ,c ,t ,dS ,eqn)
{

    real koh , source ;
    koh = aoh*exp(-eoh/(R*C_T(c ,t)));
    source = C_VOF(c ,t)*C_R(c ,t)*koh*coh0*(1-C_UDSI(c ,t ,0))
    *(snco-2*sw*C_UDSI(c ,t ,1)-C_UDSI(c ,t ,0));
    dS[eqn] = C_VOF(c ,t)*C_R(c ,t)*koh*coh0*(-1-snco+2*sw*C_UDSI(c ,t ,1)
    +2*C_UDSI(c ,t ,0));
    return source ;

}
```

A.2 Término fuente de la reacción de gasificación

```
#include "udf.h"
#define aw 1.385E3
#define ew 3.266E4
#define R 8.314

DEFINE_SOURCE(w_source ,c ,t ,dS ,eqn)
{

    real kw , source ;
    kw = aw*exp(-ew/(R*C_T(c ,t)));
    source = C_VOF(c ,t)*C_R(c ,t)*kw*(1-C_UDSI(c ,t ,1));
    dS[eqn] = -C_VOF(c ,t)*C_R(c ,t)*kw;
    return source ;

}
```

A.3 Término fuente de la ecuación de energía

```
#include "udf.h"

#define AH_oh 7.075E4
#define AH_w 8.6E4
#define c_oh0 5000
#define c_w0 2546

DEFINE_SOURCE(therm_source,c,t,dS,eqn)
{
    int phase_domain_index = 1; /* foam phase index is 1 */
    Thread *subthread = THREAD_SUB_THREAD(t,phase_domain_index);

    real source,physical_dt,dxoh,dxw,physical_time;
    physical_dt = CURRENT_TIMESTEP;
    physical_time = CURRENT_TIME;

    if (physical_time == 0){

        source = 0;
        dS[eqn] = 0;

    } else {

        dxoh = (C_UDSI(c,subthread,0)
                - C_UDSI_M1(c,subthread,0))/physical_dt;
        dxw = (C_UDSI(c,subthread,1)
                - C_UDSI_M1(c,subthread,1))/physical_dt;

        source = C_VOF(c,subthread)*C_R(c,subthread)
                /1100*(AH_oh*c_oh0*dxoh+AH_w*c_w0*dxw);
        dS[eqn] = 0;

    }

    return source;
}
```

A.4 Ecuación de densidad

```
#include "udf.h"
#define x_w0 0.024
#define pmh2o 0.01814

DEFINE_PROPERTY( rho , c , t )
{
    real calc = (1+x_w0)*1
    /((C_UDSI(c,t,1)*R*C_T(c,t)*x_w0
    /((C_P(c,t)+101325)*pmh2o)
    +(1-C_UDSI(c,t,1))*x_w0/1000+9.09E-4);
    return calc;
}
```

A.5 Ecuación de la conductividad térmica

```
#include "udf.h"

DEFINE_PROPERTY( keff , c , t )
{
    real calc = 8.7006E-8*pow(C_R(c,t),2)
    +8.4674E-5*C_R(c,t)+1.16E-2;
    return calc;
}
```

A.6 Ecuación de la viscosidad

```
#include "udf.h"
#define eta_inf 10.3E-8
#define E_eta 4970
#define a 1.5
#define b 1
#define cp 0
#define x_gel 0.65

DEFINE_PROPERTY( mu_eff, c, t)
{
    real mu;
    if (C_UDSI(c,t,0)<0.645){

        real eta_0 = eta_inf*exp(E_eta/C-T(c,t));
        real base = (x_gel/(x_gel-C_UDSI(c,t,0)));
        real exponent = (a+b*C_UDSI(c,t,0)
        -cp*pow(C_UDSI(c,t,0),2.0));
        mu = eta_0*pow(base, exponent);

    } else {

        mu = 15;

    }

    return mu;
}
```