



UNIVERSIDAD DE LA RIOJA

TESIS DOCTORAL

Título
Estudio mediante DEM de máquinas compresoras
Autor/es
Cristina Ramírez Aragón
Director/es
Fernando Alba Elías y Ana González Marcos
Facultad
Escuela Técnica Superior de Ingeniería Industrial
Titulación
Departamento
Ingeniería Mecánica
Curso Académico

Tesis presentada como compendio de publicaciones. La edición en abierto de la misma NO incluye las partes afectadas por cesión de derechos



Estudio mediante DEM de máquinas compresoras, tesis doctoral de Cristina Ramírez Aragón, dirigida por Fernando Alba Elías y Ana González Marcos (publicada por la Universidad de La Rioja), se difunde bajo una Licencia Creative Commons Reconocimiento-NoComercial-SinObraDerivada 3.0 Unported. Permisos que vayan más allá de lo cubierto por esta licencia pueden solicitarse a los titulares del copyright.

© El autor
© Universidad de La Rioja, Servicio de Publicaciones, 2021
publicaciones.unirioja.es
E-mail: publicaciones@unirioja.es

ANÁLISIS MEDIANTE DEM DE MÁQUINAS COMPRESORAS

TESIS DOCTORAL

Doctorado en Innovación en Ingeniería de Producto y Procesos Industriales

CRISTINA RAMÍREZ ARAGÓN

OCTUBRE 2020

DIRECTORES DE TESIS

Dr. Fernando Alba Elías

Dra. Ana González Marcos



UNIVERSIDAD
DE LA RIOJA

Tesis por compendio de publicaciones

- ✿ C. Ramírez-Aragón, F. Alba-Elías, A. González-Marcos, y J. Ordieres-Meré, «Segregation in the tank of a rotary tablet press machine using experimental and discrete element methods», *Powder Technol.*, vol. 328, pp. 452-469, 2018, doi: 10.1016/j.powtec.2018.01.054.
- ✿ C. Ramírez-Aragón, F. Alba-Elías, A. González-Marcos, y J. Ordieres-Meré, «Improving the feeder shoe design of an eccentric tablet press machine», *Powder Technol.*, vol. 372, pp. 542-562, 2020, doi: 10.1016/j.powtec.2020.05.104.
- ✿ C. Ramírez-Aragón, J. Ordieres-Meré, F. Alba-Elías, y A. González-Marcos, «Comparison of Cohesive Models in EDEM and LIGGGHTS for Simulating Powder Compaction», *Materials.*, vol. 11, 2341, 2018, doi: 10.3390/ma11112341.
- ✿ C. Ramírez-Aragón, J. Ordieres-Meré, F. Alba-Elías, y A. González-Marcos, «Numerical modeling for simulation of compaction of refractory materials for secondary steelmaking», *Materials.*, vol. 13, 224, 2020, doi: 10.3390/ma13010224.

Agradecimientos

En primer lugar, quiero agradecer a mis directores de tesis, Fernando Alba Elías y Ana González Marcos, que me animaran a iniciar este camino y que, una vez en él, me hayan guiado hasta alcanzar su fin. Del mismo modo, quiero agradecer a Joaquín Ordieres Meré que me abriera nuevos horizontes y su buena disposición.

También quiero agradecer a mis compañeros Elisa, Rodolfo y Laura que hayan generado un gran ambiente de trabajo, donde compartir experiencias e intercambiar consejos.

Finalmente, agradezco a mis familiares y amigos que se han armado de paciencia y me han dado su apoyo en todo momento.

Resumen

Las máquinas compresoras se utilizan en gran variedad de industrias, como la farmacéutica, la alimentaria, la metalúrgica, etc., para conformar pastillas o comprimidos a partir de materiales granulares o pulverulentos. Los principales desafíos a los que se enfrentan las industrias que emplean estos equipos son la segregación del material y su compactación. Dada la naturaleza de los materiales granulares, es complicado analizar experimentalmente su comportamiento, por lo que el método de los elementos discretos (DEM, del inglés *Discrete Element Method*) resulta ser una herramienta de gran utilidad. Mediante esta tesis, se pretende emplear la simulación DEM para analizar el comportamiento de los materiales en las máquinas compresoras, incidiendo en el análisis de la segregación del material durante su dosificación, así como en el proceso de compactación.

Con el fin de obtener una visión global de la segregación originada en las máquinas compresoras durante la dosificación del material, se han analizado dos tipos de máquinas compresoras, cuyo funcionamiento difiere por completo. De este modo, se ha estudiado una máquina compresora rotativa y otra alternativa. Tras validar los modelos de simulación DEM generados con datos experimentales, éstos se han utilizado para examinar el comportamiento de las mezclas empleadas. Una vez identificados los mecanismos de segregación que tienen lugar en cada una de las máquinas, se ha propuesto una solución para reducir la segregación producida. Dicha solución consiste en introducir uno o varios injertos en el interior del depósito o zapato para modificar los flujos o velocidades de las partículas y, de este modo, evitar que los mecanismos de segregación identificados se generen o reducir su efecto. Su eficacia ha sido examinada mediante simulaciones DEM.

Respecto al proceso de compactación, se ha examinado la capacidad de las simulaciones DEM para reproducir fielmente el proceso de compactación del material granular. Para comprobar que los resultados obtenidos no son exclusivos de una herramienta de simulación, se han puesto a prueba dos simuladores DEM distintos, uno comercial y otro de código abierto. En primer lugar, se han identificado los modelos de contacto cohesivos equivalentes en cada herramienta, así como los parámetros óptimos de simulación. Una vez establecidos, se han determinado los parámetros más influyentes y, teniendo éstos en cuenta, se han calibrado los modelos DEM mediante un diseño de experimentos (DOE). Finalmente, los modelos DEM se han validado por comparación con datos experimentales. De este modo, se ha observado que es posible conformar comprimidos con buena calidad aplicando una carga muy similar a la alcanzada en los experimentos. Sin embargo, para obtener la porosidad real en las simulaciones es necesario modelar el tamaño real de las partículas, lo cual no es viable debido al coste computacional requerido.

Índice general

Capítulo 1. Introducción.....	1
1.1. Antecedentes	3
1.2. Motivación y objetivos	6
1.3. Contribución.....	6
1.3.1. Publicaciones.....	7
1.3.2. Estructura temática de la tesis	8
1.4. Estructura del documento	9
Capítulo 2. El método de los elementos discretos	11
2.1. Formulación del método de los elementos discretos	12
2.2. Modelos de contacto empleados.....	14
2.2.1. Hertz-Mindlin (No Slip) with RVD Rolling Friction.....	14
2.2.2. Linear cohesion, SJKR y SJKR2.....	14
Capítulo 3. Segregación del material	17
3.1. Introducción.....	18
3.2. Metodología.....	20
3.2.1. Análisis experimental	21
3.2.2. Simulación DEM.....	27
3.2.3. Cálculos.....	29
3.3. Resultados	30
3.3.1. Máquina compresora rotativa	30
3.3.2. Máquina compresora alternativa	48
3.4. Conclusiones	65
Capítulo 4. Compactación del material granular	67
4.1. Introducción.....	68

Índice

4.2. Metodología.....	70
4.2.1. Determinación de los modelos de contacto equivalentes	71
4.2.2. Simulación de un sistema real	73
4.3. Resultados	79
4.3.1. Determinación de los modelos de contacto equivalentes	79
4.3.2. Simulación de un sistema real	84
4.4. Conclusiones	96
Capítulo 5. Conclusiones	99
5.1. Conclusiones	99
5.2. Futuras líneas de investigación.....	101
Referencias.....	103
Publicaciones	109

Índice de figuras

Figura 3.1. Prototipos de las máquinas compresoras analizadas, partes principales y geometrías simuladas. Máquina compresora rotativa (arriba) y máquina compresora alternativa (abajo).....	22
Figura 3.2. Perfiles del depósito (arriba) y del zapato (abajo) utilizados en los trabajos de investigación.....	23
Figura 3.3. Materiales empleados para analizar la segregación. Fino (izquierda) y grueso (derecha).....	24
Figura 3.4. Distribución inicial de la mezcla empleando el llenado por capas (izquierda) y el llenado industrial (derecha).	25
Figura 3.5. Funcionamiento del prototipo de la máquina compresora rotativa.	26
Figura 3.6. Funcionamiento del prototipo de la máquina compresora alternativa.....	26
Figura 3.7. Comparación visual de la evolución de la mezcla en los ensayos y simulaciones de la máquina compresora rotativa [43].	31

Figura 3.8. Resultados obtenidos en las configuraciones empleadas para realizar el ajuste preliminar de los parámetros de simulación con la máquina compresora rotativa [43]. ...	32
Figura 3.9. Resultados obtenidos en las configuraciones empleadas para optimizar los parámetros de simulación con la máquina compresora rotativa [43].	33
Figura 3.10. Resultados obtenidos en las configuraciones empleadas para validar los parámetros de simulación utilizando los depósitos de mayor tamaño de la máquina compresora rotativa [43].....	34
Figura 3.11. Resultados obtenidos en las configuraciones empleadas para validar los parámetros de simulación realizando un llenado continuo de la máquina compresora rotativa [43].	35
Figura 3.12. Comparativa entre los resultados obtenidos en las simulaciones de la máquina compresora rotativa con los depósitos de diferente tamaño [43].....	37
Figura 3.13. Comparativa entre los resultados obtenidos en las simulaciones de la máquina compresora rotativa con llenado único y continuo del depósito [43].	38
Figura 3.14. Índices de segregación obtenidos en los distintos diseños de depósito de la máquina compresora rotativa [43].	39
Figura 3.15. Distribución de la mezcla tras el llenado de los depósitos de la máquina compresora rotativa [43].....	41
Figura 3.16. Evolución de la superficie libre del material en los depósitos de la máquina compresora rotativa [43].....	42
Figura 3.17. Velocidad de las partículas durante el llenado de las matrices en el depósito Corto [43].	42
Figura 3.18. Velocidad de las partículas durante el llenado de las matrices en el depósito Largo [43].	43
Figura 3.19. Velocidad de las partículas durante el llenado de las matrices en el depósito Inclinado [43].	44
Figura 3.20. Velocidad de las partículas en los depósitos de la máquina compresora rotativa durante el movimiento de la platina tras el llenado de las matrices 5 (arriba) y 20 (abajo) [43].	45
Figura 3.21. Distribución de la mezcla en los depósitos de la máquina compresora rotativa durante su funcionamiento [43].	46
Figura 3.22. Comparación visual de la evolución de la mezcla en los ensayos y simulaciones de la máquina compresora alternativa [44].	49
Figura 3.23. Resultados obtenidos en las configuraciones empleadas para validar los modelos de simulación con la máquina compresora alternativa [44].	50

Índice

Figura 3.24. Índices de segregación obtenidos en los distintos diseños de zapato de la máquina compresora alternativa [44].	51
Figura 3.25. Distribución de la mezcla tras el llenado de los zapatos de la máquina compresora alternativa [44].	52
Figura 3.26. Velocidad de las partículas durante el llenado del zapato 4V120 con la mezcla 50f-50G [44].	52
Figura 3.27. Distribución de la mezcla en los zapatos de la máquina compresora alternativa durante su funcionamiento [44].	54
Figura 3.28. Velocidad de las partículas en la dirección del movimiento del zapato durante su avance (previo al llenado de las matrices) y su retroceso (posterior al llenado de las matrices) [44].	56
Figura 3.29. Diseños de injertos introducidos en los zapatos de la máquina compresora alternativa [44].	58
Figura 3.30. Velocidad de las partículas durante el llenado del zapato 4V120 con la mezcla 25f-75G en ausencia de injertos y con el injerto 16 [44].	61
Figura 3.31. Velocidad de las partículas en la dirección y sentido de avance del zapato 4V120 en ausencia de injertos y con el injerto 16 [44].	63
Figura 3.32. Velocidad de las partículas en la dirección y sentido del retroceso del zapato 4V120 en ausencia de injertos y con el injerto 16 [44].	64
Figura 4.1. Materiales empleados en las simulaciones de compactación para determinar los modelos de contacto equivalentes.	72
Figura 4.2. Tolerancias de conversión de las geometrías empleadas en las simulaciones de compactación para determinar los modelos equivalentes.	72
Figura 4.3. Proceso de compactación simulado para determinar los modelos equivalentes.	73
Figura 4.4. Equipo de compactación empleado en los experimentos.	74
Figura 4.5. Proceso de compactación realizado durante el análisis experimental.	74
Figura 4.6. Materiales empleados en el análisis del proceso de compactación.	75
Figura 4.7. Curva granulométrica de la magnesia (izquierda) y equipo vibrador (derecha).	75
Figura 4.8. Proceso simulado para reproducir la compactación de un sistema real.	77
Figura 4.9. Efecto del timestep sobre los resultados y el coste computacional de las simulaciones del proceso de compactación [45].	80
Figura 4.10. Efecto de la tolerancia de conversión sobre los resultados y el coste computacional de las simulaciones del proceso de compactación [45].	81

Figura 4.11. Efecto de la velocidad del punzón sobre los resultados y el coste computacional de las simulaciones del proceso de compactación [45].....	82
Figura 4.12. Comparativa de resultados medios obtenidos empleando los distintos modelos de contacto [45].	83
Figura 4.13. Resultados obtenidos en los ensayos de compactación [46].	84
Figura 4.14. Resultados obtenidos en las simulaciones del proceso de compactación realizadas para calibrar el modelo DEM. Fuerza aplicada por el punzón, altura del comprimido y solape entre partículas [46].	88
Figura 4.15. Resultados obtenidos en las simulaciones del proceso de compactación realizadas para calibrar el modelo DEM. Calidad de los comprimidos (SQC) [46].....	92
Figura 4.16. Efecto del tamaño de partícula de Al ₂ O ₃ sobre la porosidad de los comprimidos y el coste computacional de las simulaciones del proceso de compactación [46].	94
Figura 4.17. Comprimido realizado en los ensayos de compactación y comprimidos obtenidos en las simulaciones del proceso de compactación realizadas para validar el modelo DEM [46].	95

Índice de tablas

Tabla 3.1. Propiedades de los materiales utilizados en las simulaciones DEM y valores medios reales (entre paréntesis).....	27
Tabla 3.2. Parámetros de interacción utilizados en las simulaciones DEM y rango analizado (entre paréntesis).	28
Tabla 3.3. Configuraciones de las pruebas experimentales y simulaciones DEM realizadas para analizar las máquinas compresoras rotativas [43].	30
Tabla 3.4. Configuraciones de las pruebas experimentales y simulaciones DEM realizadas para analizar las máquinas compresoras alternativas [44].	48
Tabla 4.1. Simulaciones del proceso de compactación utilizadas para determinar los modelos de contacto equivalentes [45].	79
Tabla 4.2. Simulaciones utilizadas en el análisis preliminar de los modelos DEM aplicados a la simulación del proceso de compactación de un sistema real [46].	85
Tabla 4.3. Resultados obtenidos en las simulaciones utilizadas en el análisis preliminar de los modelos DEM aplicados a la simulación del proceso de compactación de un sistema real [46].	86

Índice

Tabla 4.4. Simulaciones utilizadas en la calibración de los modelos DEM aplicados a la simulación del proceso de compactación de un sistema real [46].	87
Tabla 4.5. Resultados obtenidos en las simulaciones utilizadas en la calibración de los modelos DEM aplicados a la simulación del proceso de compactación de un sistema real.	89
Tabla 4.6. Simulaciones utilizadas en la validación de los modelos DEM aplicados a la simulación del proceso de compactación de un sistema real [46].	93
Tabla 4.7. Resultados obtenidos en las simulaciones utilizadas en la validación de los modelos DEM aplicados a la simulación del proceso de compactación de un sistema real [46].	93

Capítulo 1

Introducción

Las máquinas compresoras se utilizan en multitud de industrias, como la farmacéutica, alimentaria, metalúrgica, etc., para fabricar comprimidos farmacéuticos, pastillas de aditivos o piezas verdes para sinterizar a partir de material granular.

El funcionamiento de estas máquinas compresoras consiste en llenar una o varias cavidades (matrices) de una platina con el material granular almacenado en un depósito cuya base está abierta para, a continuación, compactarlo y así obtener un comprimido. Las matrices, por lo general, son el resultado de la cavidad que se forma entre la platina y dos punzones cuya sección transversal coincide con la de la cavidad y que se desplazan axialmente por su interior. Dicho movimiento permite regular el volumen de la matriz que se ha de llenar, ejercer la presión necesaria para compactar el material y, por último, extraer el comprimido de la matriz.

Aunque existen distintas variedades de máquinas compresoras, éstas se pueden clasificar en dos grandes grupos: rotativas y alternativas o excéntricas.

En las máquinas rotativas, el llenado de las matrices se consigue mediante el movimiento de la platina por debajo de un depósito inmóvil que contiene la mezcla. La platina tiene forma de disco y sus matrices se sitúan a lo largo de una circunferencia concéntrica a su diámetro. La platina gira permanentemente alrededor de su eje, de manera que cada una de las matrices atraviesa la parte inferior del depósito y es llenada en cada revolución. Dado que el movimiento de la platina es continuo, los procesos de llenado, compactación y expulsión de cada comprimido deben completarse en cada revolución, dando lugar a la formación de tantos comprimidos como matrices tenga la platina. Por ese motivo, los punzones, además de moverse en dirección vertical, giran solidariamente con la platina. En cada revolución (o ciclo), los punzones inferiores descienden hasta formar la cavidad deseada, de manera que cuando las matrices pasan por debajo del depósito, el material granular cae en su interior y éstas comienzan a llenarse. El llenado de las matrices se completa a lo largo de la trayectoria por debajo del depósito y su contenido queda enrasado cuando abandonan el depósito. A continuación, los punzones superiores descienden y compactan el contenido de las matrices. Tras la compactación, los punzones superiores se retiran y los punzones inferiores se mueven en sentido ascendente para expulsar el material compactado. Finalmente, los punzones inferiores vuelven a su posición inicial.

Sin embargo, en las máquinas alternativas, la platina, generalmente de forma rectangular, se encuentra fija y el depósito, también llamado zapato, se desplaza sobre ella siguiendo una trayectoria lineal y alternando el sentido del movimiento. De este modo, se consigue el llenado de las matrices. En este caso, el movimiento de los punzones es totalmente lineal e independiente del movimiento del depósito, aunque ambos elementos se mueven de forma coordinada de manera que se pueden distinguir los ciclos de funcionamiento de la máquina. Al inicio de cada ciclo, los punzones inferiores se colocan enrasados con la superficie superior de la platina para, a continuación, hacer que el depósito avance hasta colocarse encima de las matrices. Una vez situado el depósito sobre las matrices, los punzones inferiores bajan, permitiendo el llenado de las matrices. Después, el depósito retrocede y, a su paso, enrasa el material contenido en las matrices. A continuación, los punzones superiores descienden y se produce la compresión del material, tras la cual se retiran los punzones superiores y se colocan los punzones inferiores en su posición inicial. De esta manera, se extraen los comprimidos, que quedan situados sobre la superficie de la platina, y, finalmente, son empujados por el movimiento de avance del depósito al inicio del siguiente ciclo.

Dentro de estos grandes grupos de máquina compresora, se pueden distinguir distintas variedades en función de algunos detalles de diseño y/o funcionamiento. Por ejemplo, las hay que realizan la compresión mediante un punzón y una placa o mediante dos punzones. También las hay que utilizan un sistema de alimentación forzada para facilitar el llenado de las matrices, etc.

Independientemente de cuál sea el tipo de máquina compresora, uno de los principales problemas a los que se enfrentan las industrias que las utilizan en sus procesos es la segregación del material, es decir, la separación de sus constituyentes en grupos de partículas con características similares (tamaño, densidad, forma, etc.). Además, cuando se trata de mezclas de distintos materiales, la segregación puede alterar la composición de los comprimidos y, por lo tanto, sus propiedades físicas y químicas. Como consecuencia, los productos finales pueden resultar defectuosos.

Además de tratar de solventar el problema que supone la segregación de los materiales, los usuarios de este tipo de máquinas deben prestar atención al proceso de compactación, dado que son muchos los factores que afectan a la calidad final de los comprimidos, desde las condiciones de operación (máxima fuerza aplicada, velocidad de los punzones, tiempo de permanencia, etc.) hasta las propiedades de los materiales a compactar (tamaño y forma de las partículas, adición de lubricantes o agentes aglutinantes, etc.). Cabe destacar que, cuando se compactan mezclas de materiales, algunos de los problemas que ocurren durante el proceso de compactación están relacionados con la segregación de las mezclas o la variación del peso de los comprimidos, factores que dependen directamente de los procesos previos que tienen lugar durante el funcionamiento de las máquinas compresoras.

1.1. ANTECEDENTES

Los materiales granulares son aquellos que están formados por un conjunto de partículas macroscópicas que interactúan entre sí mediante fuerzas de contacto. Su comportamiento depende de las fuerzas a las que estén sometidos, de manera que se pueden comportar de forma similar a un sólido, un líquido o un gas [1].

Dado el complejo comportamiento de los materiales granulares, su empleo en gran cantidad de industrias y los problemas derivados de su uso, son numerosas las investigaciones sobre la manipulación, procesamiento y almacenamiento de material granular.

Una herramienta que ha favorecido la comprensión del comportamiento de dichos materiales es el método de los elementos discretos (DEM, del inglés *Discrete Element Method*). Desde su propuesta inicial [2], el método de los elementos discretos se ha ido complementando con la aparición de distintas leyes fuerza-desplazamiento, conocidas como modelos de contacto, con los que se pretende hacer una mejor aproximación de los distintos comportamientos que pueden tener los materiales por su propia naturaleza (comportamientos cohesivos, elásticos, plásticos, elasto-plásticos, etc.).

En el ámbito de las máquinas compresoras, inicialmente, las simulaciones DEM se utilizaron para analizar la segregación del material en distintas zonas de la máquina, dado que la capacidad de cálculo de los equipos no permitía simular por completo el funcionamiento de las máquinas. Por ese motivo, numerosos trabajos tratan de aportar luz sobre la segregación que tiene lugar durante el llenado o la descarga de depósitos, mientras que otros se centran en el comportamiento del material durante el llenado de las matrices.

Dentro del análisis de llenado y descarga de depósitos, se ha examinado el efecto de la diferencia del tamaño de las partículas [3] y de su forma [4] sobre el comportamiento de los materiales, así como la influencia de otros parámetros, como la cohesión de los materiales [5] o sus coeficientes de rozamiento [6]. También se han analizado los mecanismos de segregación [7] y los patrones de flujo de las partículas [8] que son generados durante el llenado y la descarga de los depósitos. Estos análisis, en ocasiones, se han utilizado para mejorar los diseños de los depósitos [9]. En todos ellos, el depósito es descargado mediante la caída libre del material a través de un orificio en su cara inferior o mediante la colocación de una cinta transportadora a la salida del mismo [10], mediante la cual, se pretende asemejar los patrones de descarga a los producidos cuando una matriz pasa por debajo del depósito.

Los trabajos que han estudiado el proceso de llenado de las matrices se han centrado en analizar la segregación por tamaño [11], [12] o por densidad [11], [13] durante el llenado de las matrices o el efecto de la fluidez del material [14]. En todos estos casos, el sistema está formado por un depósito y una matriz, donde o bien ambos (matriz y depósito) permanecen estáticos [11], [13], [15], o bien la matriz se desplaza por debajo del depósito [12] o bien el depósito se desplaza sobre una matriz que permanece en reposo [11], [13], [15]. Además de los trabajos anteriores, en los cuales se utilizaron matrices de base circular o cuadrada, el llenado de matrices con otras geometrías más complejas también ha sido estudiado [16], [17]. Mediante el movimiento relativo entre el depósito y la matriz, se pretende simular el proceso de llenado de una matriz en una máquina compresora. En el caso de los estudios en los cuales el depósito se desplaza sobre la matriz, se reproduce el movimiento que tiene lugar en las máquinas compresoras alternativas, mientras que los sistemas en los que la matriz se desplaza por debajo del depósito tratan de simular el funcionamiento de las máquinas compresoras rotativas. No obstante, los últimos no tienen en cuenta la trayectoria circular que siguen las matrices en las máquinas compresoras rotativas, ya que en todos ellos la parte móvil sigue una trayectoria lineal. Además, en todos los casos, se analiza el llenado de una única matriz, por lo que tampoco se tienen en cuenta los efectos de la continuidad del proceso.

En los últimos años, gracias a la mejora de los equipos y sistemas de cálculo, han aparecido investigaciones en las cuales se simula el funcionamiento completo de las máquinas compresoras, desde el llenado del depósito hasta el llenado de las matrices. Aunque también se han analizado máquinas compresoras alternativas [18], los trabajos se han centrado en estudiar el comportamiento de los materiales en las máquinas compresoras rotativas, dado que son las que se utilizan en la industria farmacéutica, donde el problema de la segregación puede suponer riesgos para la salud.

El método de los elementos discretos se ha utilizado para analizar cómo influyen la velocidad de la platina, el tamaño de la matriz o las propiedades de los materiales sobre la cantidad de material contenida en las matrices de una máquina compresora rotativa con alimentación por gravedad [19]. En el mismo tipo de máquina, también se ha examinado la segregación de una mezcla con distintos tamaños de partícula [20]. Del mismo modo, se ha analizado la influencia de las condiciones de funcionamiento y de las propiedades de los materiales sobre la cantidad de material contenido en las matrices de máquinas rotativas con sistema de alimentación forzada [21], [22]. Otros factores, como el desgaste de las partículas, el tiempo de residencia de la mezcla o los flujos de partículas en este tipo de máquinas también se han estudiado [23]–[26]. Además, otros autores han tratado de mejorar el proceso de llenado de las matrices y reducir la variación de la masa de los distintos comprimidos mediante la simulación de una máquina compresora rotativa con distintos diseños del sistema de alimentación forzada bajo diferentes condiciones de funcionamiento [27], [28].

No sólo se han utilizado simulaciones DEM para analizar la segregación del material en las máquinas compresoras, sino que también han servido para examinar el proceso de compactación [29]. El método de los elementos discretos permite simular una gran variedad de materiales granulares gracias al empleo de un modelo de contactos adecuado [30]. De este modo, el proceso completo de compactación que tiene lugar en las máquinas compresoras, incluyendo desde el llenado de la matriz hasta la expulsión del comprimido, tras la propia compactación del material ha sido simulado gracias al uso de un modelo de contactos adhesivo elasto-plástico [31].

Además, en otros trabajos de investigación, mediante el uso de distintos modelos de contactos, se han simulado diferentes ensayos de resistencia de materiales granulares que previamente han sido compactados, entre los que destacan los ensayos de compresión axial. De este modo, utilizando un modelo visco-elasto-plástico friccional adhesivo, se ha analizado el comportamiento de un suelo, previamente compactado, frente a los ensayos de compresión axial y de penetración [32]. También se han utilizado modelos adhesivo elasto-plásticos [33], [34] y modelos que simulan la unión entre partículas [35] para simular el comportamiento de materiales granulares sometidos a un ensayo de compresión axial.

Además de utilizar dichos modelos de contactos, en otras simulaciones se han combinado varios de los modelos anteriores para simular el comportamiento de materiales formados tanto por partículas esféricas [36], [37] como por partículas no esféricas [38], [39]. Los efectos de utilizar partículas no esféricas con distintas formas [40], así como de materiales con distinta distribución de tamaño de partícula [41], [42], también han sido examinados.

1.2. MOTIVACIÓN Y OBJETIVOS

Gracias a la capacidad de las simulaciones DEM para analizar parámetros como la velocidad o la fuerza de las partículas, los cuales son difícilmente cuantificables de forma experimental, su uso se está extendiendo para tratar de dar solución a los problemas planteados por diferentes industrias. En el ámbito de las máquinas compresoras, el potencial que ofrece el método de los elementos discretos resulta muy útil para estudiar tanto la segregación del material como su compactación.

Esta tesis engloba los trabajos de investigación realizados para comprender mejor los procesos que tienen lugar en las máquinas compresoras y, de este modo, tratar de resolver algunos de los problemas derivados de los mismos. Teniendo esto en cuenta, los principales objetivos de esta tesis son los siguientes:

- ❁ Analizar mediante DEM los mecanismos de segregación del material generados en los depósitos de las máquinas compresoras como consecuencia de su funcionamiento con el propósito de buscar soluciones que reduzcan su efecto.
- ❁ Aplicar el método de los elementos discretos al proceso de compactación, con el fin de analizar la influencia de diferentes factores, así como de verificar su capacidad para reproducir fielmente la realidad, consiguiendo un equilibrio entre la bondad de la simulación y el coste computacional necesario para alcanzarla.

1.3. CONTRIBUCIÓN

En las siguientes cuatro publicaciones se ven reflejados los trabajos realizados para alcanzar los objetivos definidos en el apartado 1.2.

- ❁ C. Ramírez-Aragón, F. Alba-Elías, A. González-Marcos, y J. Ordieres-Meré, «Segregation in the tank of a rotary tablet press machine using experimental and discrete element methods», *Powder Technol.*, vol. 328, pp. 452-469, 2018, doi: 10.1016/j.powtec.2018.01.054.
- ❁ C. Ramírez-Aragón, F. Alba-Elías, A. González-Marcos, y J. Ordieres-Meré, «Improving the feeder shoe design of an eccentric tablet press machine», *Powder Technol.*, vol. 372, pp. 542-562, 2020, doi: 10.1016/j.powtec.2020.05.104.
- ❁ C. Ramírez-Aragón, J. Ordieres-Meré, F. Alba-Elías, y A. González-Marcos, «Comparison of Cohesive Models in EDEM and LIGGGHTS for Simulating Powder Compaction», *Materials.*, vol. 11, 2341, 2018, doi: 10.3390/ma11112341.
- ❁ C. Ramírez-Aragón, J. Ordieres-Meré, F. Alba-Elías, y A. González-Marcos, «Numerical modeling for simulation of compaction of refractory materials for secondary steelmaking», *Materials.*, vol. 13, 224, 2020, doi: 10.3390/ma13010224.

1.3.1. PUBLICACIONES

En la primera publicación [43], se utiliza el método de los elementos discretos (DEM) para analizar la segregación originada en el depósito alimentador de una máquina compresora rotativa. Para ello, inicialmente, se genera, ajusta y valida un modelo de simulación DEM mediante la comparación de sus resultados con datos obtenidos experimentalmente. Una vez validado el modelo, éste se utiliza para analizar la segregación generada durante el llenado del depósito y el funcionamiento de la máquina. En concreto, se utilizan tres mezclas binarias formadas por distintas proporciones de dos materiales diferentes y tres diseños de depósito. De este modo, se logra determinar cuál de los depósitos es el que menos segregación genera, independientemente de la mezcla utilizada. Además, también se hacen pruebas con depósitos de mayor tamaño, manteniendo los diseños anteriores y se realizan otras en las que los depósitos son llenados periódicamente, de modo, que el funcionamiento se aproxima más a la realidad. Gracias a estos últimos análisis, se verifica la capacidad de utilizar modelos simplificados para evaluar el comportamiento que tendrían los mismos materiales en el depósito de una máquina real, operando en condiciones normales.

En la segunda publicación [44], se parte del modelo de simulación utilizado en la primera publicación para examinar el comportamiento de los mismos materiales granulares en una máquina compresora alternativa. En este caso, únicamente se utilizan los modelos simplificados cuya capacidad para analizar el comportamiento de las mezclas ha sido demostrada. Al igual que en la publicación anterior, se analizan tres mezclas binarias y tres diseños de depósito (zapato alimentador). En primer lugar, los resultados de dichos modelos son comparados con datos experimentales con el objeto de validar su aplicación para estudiar máquinas alternativas. A continuación, se examinan los mecanismos de segregación que tienen lugar en el zapato y, finalmente, se realiza una serie de simulaciones en las que se incorporan uno o varios injertos en el interior de cada zapato con el propósito de reducir la segregación producida en cada uno de ellos, lográndose una disminución del 51% sobre la segregación generada inicialmente en uno de los casos.

En la tercera publicación [45], se aplica el método de los elementos discretos al proceso de compactación de materiales granulares cohesivos y se comparan los resultados de tres modelos de contacto implementados en dos programas de simulación DEM con el fin de determinar cuáles son los modelos equivalentes en ambos programas de simulación, así como identificar cómo influyen algunos de los parámetros de simulación en los resultados obtenidos y en el coste computacional. Los parámetros analizados son la distribución del tamaño de partícula, la velocidad a la que se desplaza el punzón que aplica la fuerza necesaria para compactar el material, la tolerancia de conversión de las geometrías y el timestep utilizado en las simulaciones. Mediante el análisis de los resultados, se determina que la distribución del tamaño de partícula influye sobre la fuerza que necesita aplicar el punzón para comprimir el material hasta una determinada altura dado que las partículas se estructuran de distinta forma y se establecen los valores óptimos de timestep, tolerancia de conversión y velocidad del punzón para simular el proceso de compactación.

En la cuarta publicación [46], se generan nuevos modelos de simulación DEM con los que modelar la compactación de materiales refractarios, con el fin de evaluar la capacidad de dos modelos de contacto cohesivos para simular el proceso de compactación de materiales reales. Los dos modelos de contacto utilizados en esta publicación, son aquellos que se consideraron equivalentes en la anterior. Cada uno está implementado en un programa de simulación DEM distinto y, por lo tanto, en este trabajo también se comparan los resultados obtenidos en ambos. En este trabajo, inicialmente, se examina la influencia que tienen el módulo de elasticidad, la densidad de energía de cohesión y el diámetro de las partículas sobre la fuerza aplicada por el punzón, la porosidad del comprimido y su calidad, en cuanto a forma se refiere. De dicho análisis se concluye que el módulo de elasticidad y la densidad de cohesión de las partículas son los parámetros más influyentes, por lo que la calibración de los modelos se realiza teniendo en cuenta únicamente estos dos parámetros. Finalmente, dado que la desviación entre la porosidad alcanzada tras la calibración y la real es demasiado alta, se realiza un reajuste del modelo, variando el tamaño de partícula.

1.3.2. ESTRUCTURA TEMÁTICA DE LA TESIS

Todos los trabajos reflejados en esta tesis se enmarcan en el uso de simulaciones DEM para analizar varios de los procesos que tienen lugar en las máquinas compresoras. En función del proceso específico objeto de estudio, los trabajos se clasifican en dos grandes bloques:

- ❁ Las dos primeras publicaciones indicadas en el apartado 1.3.1 forman parte del primer bloque, cuya finalidad es analizar la segregación generada en el depósito de las máquinas compresoras, así como tratar de reducirla mediante la inclusión de injertos en su interior. En ellos se examinan los fenómenos de segregación que tienen lugar durante el llenado de los depósitos y como consecuencia del propio funcionamiento de las máquinas. En la primera de las dos publicaciones, la máquina objeto de estudio es una máquina compresora rotativa, mientras que, en la segunda, se examina una máquina compresora alternativa y se pone el foco en el uso de injertos para disminuir la segregación generada.
- ❁ El segundo bloque está formado por las dos publicaciones siguientes (véase el apartado 1.3.1). En ellas, se simula el proceso de compactación de los materiales granulares utilizando dos programas de simulación DEM distintos. En la primera de ellas, se realiza una comparación de los resultados obtenidos en distintas simulaciones en las que se utilizan tres modelos de contactos distintos para compactar varios materiales, con el objeto de determinar, por una parte, cuáles son los modelos equivalentes en ambos programas de simulación y, por otra parte, cuáles son las condiciones más favorables para simular la compactación. En la segunda publicación de este bloque, se emplean los modelos de contacto equivalentes de ambos programas de simulación para compactar una mezcla de materiales refractarios. La calibración y validación de dichos modelos se realiza mediante la comparación de los resultados obtenidos de las simulaciones y los generados en ensayos de laboratorio.

1.4. ESTRUCTURA DEL DOCUMENTO

En este primer capítulo, se ha hecho una breve introducción acerca de las máquinas compresoras, se han presentado los antecedentes, la motivación, los objetivos y las contribuciones aportadas con esta tesis. El resto del documento está organizado de la siguiente manera. En el segundo capítulo, se explica qué es el método de los elementos discretos y cómo funciona y se exponen los modelos de contacto empleados en los trabajos de investigación. En el tercer capítulo, se introduce la problemática de la segregación de los materiales granulares y se exponen los trabajos realizados para analizar la segregación generadas en las máquinas compresoras, indicando la metodología seguida, los resultados obtenidos y las principales conclusiones. El cuarto capítulo se centra en el proceso de compactación. Tras una introducción sobre el proceso, se presentan los trabajos realizados con relación a dicho proceso, así como los resultados obtenidos y sus conclusiones. Finalmente, en el quinto capítulo se exponen las conclusiones de la tesis y las futuras líneas de investigación.

Capítulo 2

El método de los elementos discretos

El método de los elementos discretos [2] es un método numérico capaz de simular el comportamiento de un medio granular compuesto por un conjunto de partículas que se desplazan independientemente e interactúan con otras partículas a través de sus puntos de contacto.

Dada la gran cantidad de interacciones que pueden tener lugar en una muestra de material formada por multitud de partículas, resulta imposible resolver las ecuaciones sin la ayuda de un ordenador potente. Por ese motivo, gracias al avance de los equipos, se ha extendido el uso del método de los elementos discretos en los últimos años. Como consecuencia, también han ido apareciendo distintas aplicaciones o programas de simulación DEM, que permiten llevar a cabo dichos cálculos, como EDEM, ROCKY y FPC, que son soluciones comerciales, o LIGGGHTS y YADE, que, por el contrario, son simuladores de código abierto.

2.1. FORMULACIÓN DEL MÉTODO DE LOS ELEMENTOS DISCRETOS

El método de los elementos discretos se basa en la aplicación de la segunda ley de Newton sobre las partículas y en una ley fuerza-desplazamiento aplicada en los contactos. Las propiedades de las partículas (posición, velocidad y fuerzas aplicadas sobre ellas) son actualizadas cada timestep, correspondiente a un ciclo de cálculo completo. Dicho ciclo de cálculo comienza por la detección de los contactos entre partículas. A continuación, para cada par de partículas, se obtiene la posición del punto de contacto y se calcula el solape entre dichas partículas. A partir del solape se obtienen las fuerzas de contacto mediante la ley fuerza-desplazamiento. Una vez que se han calculado las fuerzas y los momentos aplicados a cada partícula, su movimiento es calculado aplicando la segunda ley de Newton. De este modo, la aceleración, velocidad y posición de las partículas se actualiza utilizando un algoritmo de integración de tiempo. Completado el ciclo de cálculo, los valores actualizados son utilizados para detectar los siguientes contactos entre partículas, con los que se inicia un nuevo ciclo de cálculo.

Para conseguir una solución numérica estable, el timestep debe ser muy pequeño debido a que se utiliza un algoritmo de integración explícito para actualizar los valores de aceleración, velocidad y posición de las partículas. El valor máximo de timestep mediante el cual las soluciones son estables se conoce como timestep crítico. Se han definido distintos criterios para calcular el timestep crítico, pero el más utilizado es el timestep crítico de Rayleigh ($\Delta T_{\text{Rayleigh}}$), que se calcula en función del radio (R), densidad (ρ), módulo de elasticidad transversal (G) y coeficiente de Poisson (ν) de las partículas:

$$\Delta T_{\text{Rayleigh}} = \frac{\pi R}{0.163\nu + 0.8766} \sqrt{\frac{\rho}{G}} \quad (2.1)$$

El desplazamiento de cada partícula es obtenido de la integración explícita de las ecuaciones diferenciales de la segunda ley de Newton:

$$m_i \frac{d^2}{dt^2} x_i = \sum_j (F_{n,ij} + F_{t,ij}) + m_i g \quad (2.2)$$

$$I_i \frac{d\omega_i}{dt} = \sum_j T_{ij} \quad (2.3)$$

Donde m_i , I_i , x_i y ω_i son la masa, el momento de inercia, la posición y la velocidad angular de la partícula i , respectivamente; g es la aceleración de la gravedad y $F_{n,ij}$, $F_{t,ij}$ y T_{ij} son la fuerza normal, la fuerza tangencial y el par entre las partículas i y j , respectivamente.

Las fuerzas anteriores son determinadas a nivel de cada contacto entre las distintas partículas mediante la ley fuerza-desplazamiento definida en el modelo de contactos empleado. Con el tiempo, se han ido definiendo nuevos modelos de contacto con el fin de lograr una mayor aproximación de los materiales simulados a los comportamientos reales de distintos materiales. Sin embargo, el modelo de contactos que emplea la mayoría de los simuladores DEM por defecto es el Hertz-Mindlin.

En el modelo de contactos Hertz-Mindlin, el cálculo de la fuerza normal se basa en la teoría de contactos de Hertz [47], mientras que la teoría de Mindlin-Deresiewicz [48] es utilizada para calcular la fuerza tangencial. La fuerza de rozamiento es calculada conforme a la ley de Coulomb del rozamiento. Las fuerzas anteriores se complementan con una componente de amortiguación, relacionada con el coeficiente de restitución conforme a Tsuji, Tanaka e Ishida [49]. Un par calculado según Sakaguchi, Ozaki e Igarashi [50] es aplicado para implementar el efecto de la resistencia a la rodadura de las partículas.

$$F_{n,ij}(\text{HM}) = \frac{4}{3} E_{ij} \delta_{n,ij}^{\frac{3}{2}} \sqrt{R_{ij}} - \sqrt{\frac{20}{3} \frac{(\ln e)}{\sqrt{\ln^2 e + \pi^2}}} \left(m_{ij} E_{ij} \sqrt{R_{ij} \delta_{n,ij}} \right)^{\frac{1}{2}} v_{n,ij} \quad (2.4)$$

$$F_{t,ij}(\text{HM}) = \min \left[\mu_{s,ij} F_{n,ij}(\text{HM}), \left| -8G_{ij} \delta_{t,ij} \sqrt{R_{ij} \delta_{n,ij}} - \sqrt{\frac{80}{3} \frac{(\ln e)}{\sqrt{\ln^2 e + \pi^2}}} \left(m_{ij} G_{ij} \sqrt{R_{ij} \delta_{n,ij}} \right)^{\frac{1}{2}} v_{t,ij} \right| \right] \quad (2.5)$$

$$T_{ij}(\text{HM}) = -\mu_{r,ij} \left(\frac{4}{3} E_{ij} \delta_{n,ij}^{\frac{3}{2}} \sqrt{R_{ij}} \right) R_l \omega_l \quad (2.6)$$

donde $\delta_{n,ij}$ y $\delta_{t,ij}$ son el solape normal y tangencial entre las partículas i y j , respectivamente. $v_{n,ij}$ y $v_{t,ij}$ son las componentes normal y tangencial de la velocidad relativa entre las partículas i y j , respectivamente. $\mu_{s,ij}$ es el coeficiente de rozamiento estático entre las partículas i y j y $\mu_{r,ij}$ es el coeficiente de resistencia a la rodadura. R_l es la distancia entre el centro de masas y el punto de contacto y ω_l es el vector unitario de velocidad angular en el punto de contacto. E_{ij} es el módulo de elasticidad equivalente, G_{ij} es el módulo de elasticidad transversal equivalente, R_{ij} es el radio equivalente y m_{ij} es la masa equivalente, que son calculados de la siguiente forma:

$$\frac{1}{E_{ij}} = \frac{1 - \nu_i^2}{E_i} + \frac{1 - \nu_j^2}{E_j} \quad (2.7)$$

$$\frac{1}{G_{ij}} = \frac{2 - \nu_i}{G_i} + \frac{2 - \nu_j}{G_j} \quad (2.8)$$

$$\frac{1}{R_{ij}} = \frac{1}{R_i} + \frac{1}{R_j} \quad (2.9)$$

$$\frac{1}{m_{ij}} = \frac{1}{m_i} + \frac{1}{m_j} \quad (2.10)$$

Donde E_i y E_j son los módulos de elasticidad de las partículas i y j , respectivamente. ν_i y ν_j son los coeficientes de Poisson de las partículas i y j , respectivamente. G_i y G_j son los módulos de elasticidad transversal de las partículas i y j , respectivamente. R_i y R_j son los radios de las partículas i y j , respectivamente. m_i y m_j son las masas de las partículas i y j , respectivamente.

2.2. MODELOS DE CONTACTO EMPLEADOS

Aunque existen infinidad de modelos de contacto, los que se han empleado en los trabajos realizados para la consecución de los objetivos de esta tesis han sido los siguientes:

- ❁ Hertz-Mindlin (No Slip) with Relative Velocity Dependent (RVD) Rolling Friction (EDEM)
- ❁ Linear cohesion (EDEM)
- ❁ SJKR: Simplified Johnson-Kendall-Roberts (LIGGGHTS)
- ❁ SJKR2: Modified Simplified Johnson-Kendall-Roberts (LIGGGHTS)

2.2.1. HERTZ-MINDLIN (NO SLIP) WITH RVD ROLLING FRICTION

El modelo de contactos Hertz-Mindlin (No Slip) with RVD Rolling Friction, implementado en EDEM, ha sido utilizado para analizar los mecanismos de segregación en las máquinas compresoras.

Este modelo se diferencia del modelo Hertz-Mindlin únicamente en el modo en que se implementa el efecto de la resistencia a la rodadura. En este caso, se siguen las directrices sugeridas en [51].

El modelo de contactos aplica un par constante a las superficies en contacto. El par depende de la velocidad angular relativa (ω_{ij}) de las partículas i y j en contacto, tal y como se indica a continuación:

$$T_{ij \text{ (HM-RVD)}} = -\mu_{r,ij} \left(\frac{4}{3} E_{ij} \delta_{n,ij}^{\frac{3}{2}} \sqrt{R_{ij}} \right) R_{ij} \omega_{ij} \quad (2.11)$$

Tanto la fuerza normal como la tangencial se calculan del mismo modo que en el modelo Hertz-Mindlin

$$F_{n,ij \text{ (HM-RVD)}} = F_{n,ij \text{ (HM)}} \quad (2.12)$$

$$F_{t,ij \text{ (HM-RVD)}} = F_{t,ij \text{ (HM)}} \quad (2.13)$$

2.2.2. LINEAR COHESION, SJKR Y SJKR2

Los modelos de contactos Linear cohesion (implementado en EDEM), SJKR (LIGGGHTS) y SJKR2 (LIGGGHTS) han sido empleados para modelar el proceso de compactación de los comprimidos.

Todos estos modelos aplican una fuerza normal cohesiva adicional a la fuerza normal calculada mediante otro modelo de contactos. Dado que el modelo Linear cohesion está implementado en EDEM como una modificación del modelo Hertz-Mindlin, en las simulaciones de LIGGGHTS, también se combinó con dicho modelo, de manera que las ecuaciones que definen los modelos utilizados son las siguientes.

La fuerza normal se calcula como la suma de la fuerza normal del modelo Hertz-Mindlin y una fuerza de cohesión, tal y como se indica en la Ecuación 2.14.

$$F_{n,ij}(\text{Linear cohesion, SJKR, SJKR2}) = F_{n,ij}(\text{HM}) + F_{n,ij}(\text{cohesion}) \quad (2.14)$$

La fuerza de cohesión se calcula según la Ecuación 2.15.

$$F_{n,ij}(\text{cohesion}) = k_{ij}A_{ij} \quad (2.15)$$

Donde k_{ij} es la densidad de energía de cohesión y A_{ij} es el área de contacto entre las partículas i y j . El área de contacto es calculada mediante las Ecuaciones 2.16 o 2.17, dependiendo del modelo de contactos utilizado:

$$A_{ij}(\text{SJKR2, linear cohesion}) = 2\pi\delta_{n,ij}R_{ij} \quad (2.16)$$

$$A_{ij}(\text{SJKR}) = \frac{\pi}{4} \frac{(-d + R_i + R_j)(d + R_i - R_j)(d - R_i + R_j)(d + R_i + R_j)}{d^2} \quad (2.17)$$

Donde d es la distancia entre los centros de las partículas i y j .

Tanto la fuerza tangencial como el par se calculan del mismo modo que en el modelo Hertz-Mindlin.

$$F_{t,ij}(\text{Linear cohesion, SJKR, SJKR2}) = F_{t,ij}(\text{HM}) \quad (2.18)$$

$$T_{ij}(\text{Linear cohesion, SJKR, SJKR2}) = T_{ij}(\text{HM}) \quad (2.19)$$

Capítulo 3

Segregación del material

En este capítulo se trata la primera unidad temática de la tesis: la segregación del material en las máquinas compresoras.

Inicialmente, se hace una introducción sobre el fenómeno de segregación. A continuación, se explica la metodología seguida para ajustar y validar los modelos de simulación, así como para analizar la segregación generada en los depósitos de las dos máquinas compresoras analizadas y se definen los materiales, equipos y modelos de simulación utilizados para ello. Finalmente, se exponen los resultados obtenidos, tanto en la máquina compresora rotativa como en la alternativa, así como las conclusiones derivadas de los mismos.

3.1. INTRODUCCIÓN

La segregación es un fenómeno mediante el cual una mezcla de distintos materiales granulares (formados por partículas de diferente tamaño, densidad, forma, etc.) tiende a separar cada uno de sus componentes en grupos de partículas con características similares. Como resultado de la segregación, la mezcla queda heterogénea. En el ámbito de las máquinas compresoras, la segregación puede afectar a la calidad de los comprimidos, no sólo modificando su composición, sino también generando heterogeneidades en algunas de sus propiedades, como la porosidad, la densidad, la permeabilidad o la resistencia.

Para que se produzca la segregación de los materiales tienen que ocurrir las siguientes circunstancias [52]:

- ❁ Que las propiedades de los diferentes constituyentes del material o de la mezcla difieran.
- ❁ Que haya fuerzas presentes actuando sobre las partículas y que afecten con distinta intensidad sobre cada uno de los constituyentes del material o mezcla.
- ❁ Que existan espacios libres entre partículas que faciliten el desplazamiento de ciertas partículas frente a otras.

Por lo tanto, algunas de las propiedades de los materiales que favorecen la segregación son el tamaño, la densidad, la forma, la rugosidad superficial o los coeficientes de rozamiento de las partículas. Cuanto mayor es la diferencia entre las propiedades de los distintos constituyentes, mayor segregación se produce.

En función de las propiedades de las partículas y las fuerzas que actúen sobre ellas, la segregación de los materiales granulares puede generarse por diferentes causas, denominadas mecanismos de segregación. A continuación, se exponen los principales mecanismos de segregación.

- ❁ **Filtración.** La filtración se produce cuando se realizan vertidos de partículas a gran velocidad. Como consecuencia, las partículas fluyen en forma de avalancha por la superficie libre, de forma que, en las capas de deslizamiento, las partículas pequeñas se cuelan por los huecos que dejan las partículas de mayor tamaño. De este modo, el material fino se introduce en el fondo de la capa de deslizamiento y se deposita alejado de la superficie libre, mientras que el material grueso se concentra en los bordes de la pila.
- ❁ **Percolación.** Al igual que ocurre con la filtración, la segregación por percolación se origina por la introducción de las partículas pequeñas en los huecos que se forman entre las partículas de mayor tamaño, como efecto de la fuerza gravitatoria. Mientras que la filtración se produce en medios granulares que se encuentran en movimiento, la percolación se produce en sistemas estáticos.

- ❁ **Rodadura.** Este mecanismo de segregación se produce cuando se vierte una mezcla de partículas de distintos tamaños sobre una pila o sobre una superficie inclinada a velocidades bajas. Conforme se va vertiendo la mezcla, las partículas se desplazan rodando sobre la superficie hasta que tropiezan con un obstáculo que las detiene. Mientras que las partículas gruesas necesitan obstáculos de gran tamaño para detenerse, el movimiento de las pequeñas cesa cuando éstas entran en contacto con obstáculos menores, por lo que recorren menores distancias. Como resultado, las partículas pequeñas se concentran en la parte central de las pilas, mientras que las partículas de mayor tamaño se sitúan en los extremos.
- ❁ **Condensación.** Este mecanismo de segregación se produce cuando el material granular está formado por una mezcla de partículas de distinta densidad. La condensación consiste en que las partículas más densas impulsan hacia la superficie a las menos densas. Como resultado, en el centro de las pilas de material se concentran las partículas de mayor tamaño, quedando las partículas más pequeñas en los extremos.
- ❁ **Convección.** El mecanismo de convección se presenta en mezclas de partículas de diferentes tamaños situadas en un depósito, que, al someterse a ciertas condiciones de vibración, presentan un movimiento cíclico. Una vez que las partículas de mayor tamaño son transportadas a la superficie de la mezcla no consiguen descender al no poder introducirse en los poros del material. De esta forma, se acumula el material grueso en la parte superior de la mezcla.
- ❁ **Segregación por trayectoria.** La segregación por trayectoria es producida por la diferencia de resistencia que ejerce el aire sobre las partículas de diferentes tamaños, así como su sensibilidad ante fuerzas como la gravitacional. Esta diferencia origina que las partículas que se mueven con una componente horizontal sigan diferentes trayectorias en función de su tamaño. Las partículas pequeñas se desaceleran mucho más rápido que las de mayor tamaño y, por lo tanto, se depositan a menor distancia que las grandes.
- ❁ **Fluidización.** La segregación por fluidización se produce como consecuencia del desalojo de aire de un depósito cuando se vierte en él una mezcla de material granular. La corriente de aire provoca que las partículas de menor tamaño o más ligeras reduzcan su velocidad en mayor medida que las partículas más grandes o pesadas. De esta manera, las partículas de mayor tamaño o más pesadas fluyen hasta el fondo y las pequeñas o ligeras se depositan en la superficie de la mezcla.

3.2. METODOLOGÍA

Los trabajos de investigación relativos al estudio de la segregación se centraron en el análisis de dos máquinas compresoras, una rotativa y otra alternativa. A pesar de que el funcionamiento de ambas es distinto y, por lo tanto, los mecanismos de segregación generados en ellas son diferentes, la metodología seguida para examinar las dos máquinas fue similar. Se utilizaron los mismos materiales granulares y equipos con características similares, los modelos DEM se generaron de igual manera y el cálculo de errores y la cuantificación de la segregación se obtuvieron mediante las mismas fórmulas. Por este motivo, la metodología seguida para analizar ambas máquinas se presenta en un mismo apartado. Sin embargo, los resultados de cada máquina se exponen por separado puesto que los trabajos fueron secuenciales, tal y como se indica a continuación.

En primer lugar, se trabajó con la máquina compresora rotativa. Inicialmente, se hizo un ajuste preliminar de los principales parámetros de simulación siguiendo un proceso iterativo, mediante el cual los parámetros se iban variando en función de los resultados obtenidos y de los comportamientos mostrados en las simulaciones. Para ello, se realizaron cuatro ensayos sencillos en los que se empleó una pequeña cantidad de material y mediante los cuales, el comportamiento del material se podía comparar de forma visual con el mostrado en las simulaciones. Posteriormente, los valores de dichos parámetros de simulación fueron optimizados mediante una serie de ensayos que, si bien eran simplificaciones, se asemejaban más a los sistemas reales. Se decidió emplear simplificaciones dada la cantidad de simulaciones requeridas hasta alcanzar los valores óptimos y el coste computacional de cada iteración. En comparación con los equipos reales, estos ensayos empleaban depósitos de menor capacidad (más estrechos). Además, los depósitos no eran alimentados de forma continua con el material granular, sino que se llenaban una vez al inicio del ensayo. Finalmente, para completar la validación del modelo de simulación, se realizaron varios ensayos en los que las condiciones analizadas eran más próximas a las reales (o bien porque se empleó un depósito de tamaño similar al real o bien porque el depósito se fue rellenando conforme se iba vaciando). De este modo, además de validar los modelos con datos experimentales, se pretendía comprobar si, empleando los modelos simplificados, se podía determinar la segregación generada en los depósitos de las máquinas reales (de mayor tamaño) en condiciones de funcionamiento normal (con alimentación permanente del material granular). Una vez que el modelo de simulación fue validado, se examinaron las simulaciones con el objeto de identificar los mecanismos de segregación.

Tras examinar la máquina compresora rotativa, se generaron nuevos modelos simplificados para analizar los mecanismos de segregación producidos en la máquina alternativa. Al igual que en el caso anterior, inicialmente, se comprobó la validez de los modelos de simulación y, a continuación, se analizó la segregación generada como consecuencia del llenado del zapato, así como de su movimiento. Finalmente, se realizaron varias simulaciones en las que se añadieron injertos en diferentes zonas del zapato alimentador con el fin de reducir la segregación generada.

3.2.1. ANÁLISIS EXPERIMENTAL

3.2.1.1. Máquinas compresoras

Con el propósito de obtener datos para validar los modelos DEM, se utilizaron dos prototipos de máquinas compresoras, una rotativa y otra alternativa, con los cuales se realizaron diferentes ensayos. En ambos casos, los prototipos fueron fabricados en policarbonato transparente para poder visualizar la mezcla durante todo el proceso. En la Figura 3.1 se muestran los prototipos empleados y sus partes principales.

En el caso de la máquina rotativa, el prototipo está formado por un depósito alimentador fijo (1), una tolva que se utiliza para llenar dicho depósito (2) y una platina móvil (3) con 20 matrices (4), que gira alrededor de un eje (5). Además, tres placas horizontales (6, 7 y 8) sirven de apoyo para la platina y evitan que caiga el material contenido en las matrices. Esta máquina no está dotada de los punzones existentes en las máquinas reales y que permiten la compresión del material granular. Esto es debido a que en este estudio no se analiza el grado de compactación de los comprimidos. Dos cámaras situadas enfrente (9) y debajo (10) del prototipo graban la vista frontal y el fondo del depósito, respectivamente. Además, un sensor capacitivo (11) detecta la presencia de las matrices (cavidades dentro de la platina) y contabiliza en un contador digital (12) el número de la matriz que se está llenando en cada momento.

En el caso de la máquina alternativa, el prototipo consiste en un depósito alimentador, también llamado zapato alimentador (1), que se mueve hacia adelante y hacia atrás sobre una platina (2) que tiene una matriz (3) cuya profundidad es regulada mediante la posición de un punzón inferior (4). En este prototipo tampoco se ha incluido el punzón superior, que es necesario para realizar la compactación en las máquinas convencionales. Además de los elementos anteriores, el prototipo incluye una tolva (5) que se utiliza para llenar el zapato alimentador, un cilindro neumático de 100 mm de carrera (6) que sirve para mover el zapato y otro cilindro neumático de 20 mm de carrera (7) se utiliza para mover el punzón inferior. Al igual que en el prototipo de la máquina rotativa, dos cámaras de vídeo colocadas enfrente (8) y debajo (9) del zapato graban el proceso. En este caso, un sensor capacitivo (10) detecta la presencia del zapato y contabiliza el número de la matriz que se está llenando en un contador digital (11).

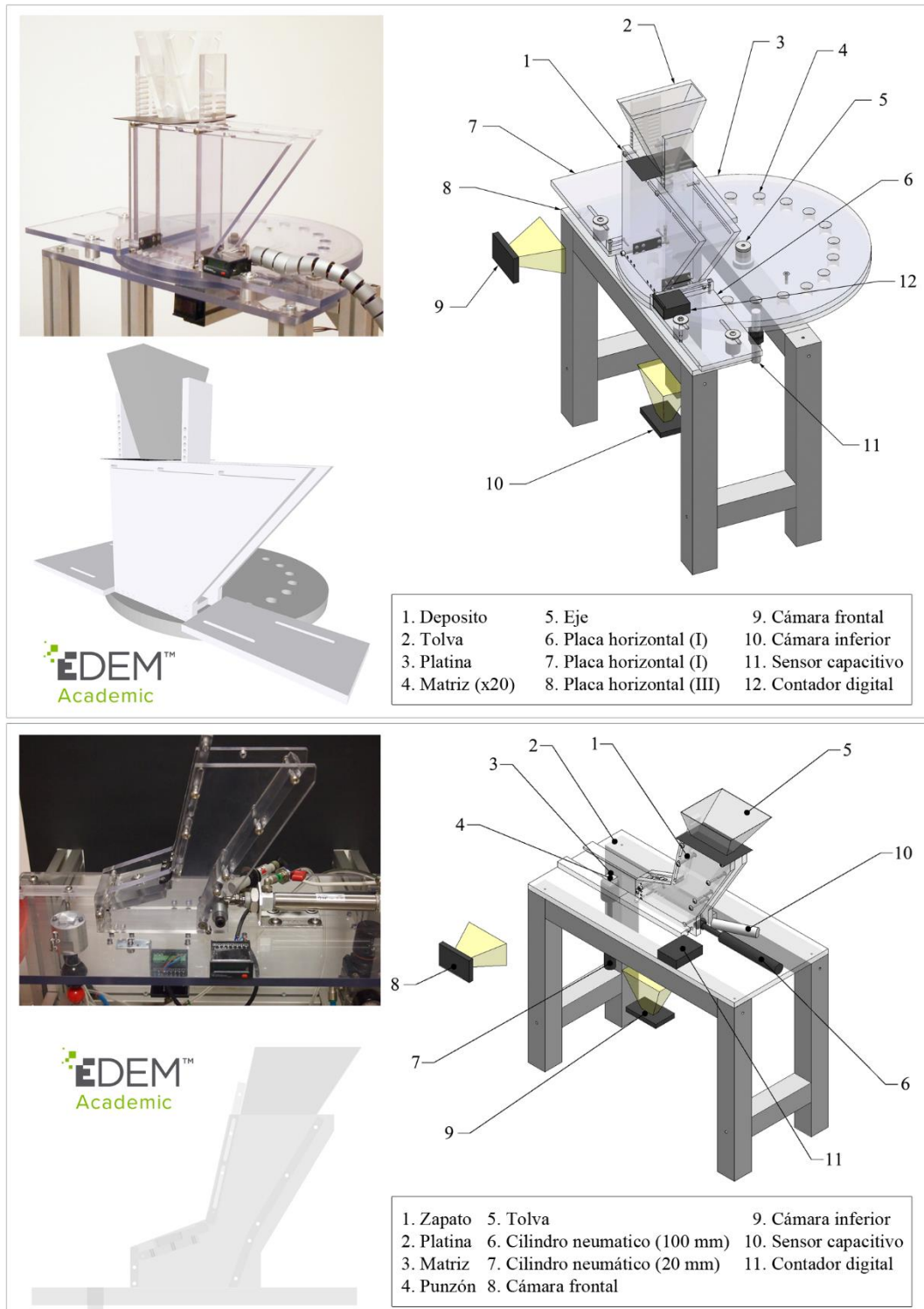


Figura 3.1. Prototipos de las máquinas compresoras analizadas, partes principales y geometrías simuladas. Máquina compresora rotativa (arriba) y máquina compresora alternativa (abajo).

Tanto el depósito de la máquina rotativa como el zapato de la alternativa son configurables, de manera que se puede ajustar la anchura (A) y modificar los perfiles laterales, como se puede apreciar en la Figura 3.2. En el caso de la máquina rotativa, además de la anchura del depósito, es posible cambiar la separación (L) e inclinación de las paredes laterales (θ_1 y θ_2). Los parámetros que se pueden ajustar para modificar el perfil del zapato son la altura de la punta (H) y el ángulo del empeine (α). En la Figura 3.2 se muestran los perfiles laterales de los depósitos y zapatos empleados en los trabajos de investigación. Se emplearon dos anchuras distintas con el fin de determinar si era factible analizar la segregación producida utilizando depósitos o zapatos estrechos. Así, las configuraciones más anchas (denominadas 3D) tuvieron una anchura de 51 mm, mientras que, en las más estrechas (2D), ésta fue de 20 mm.

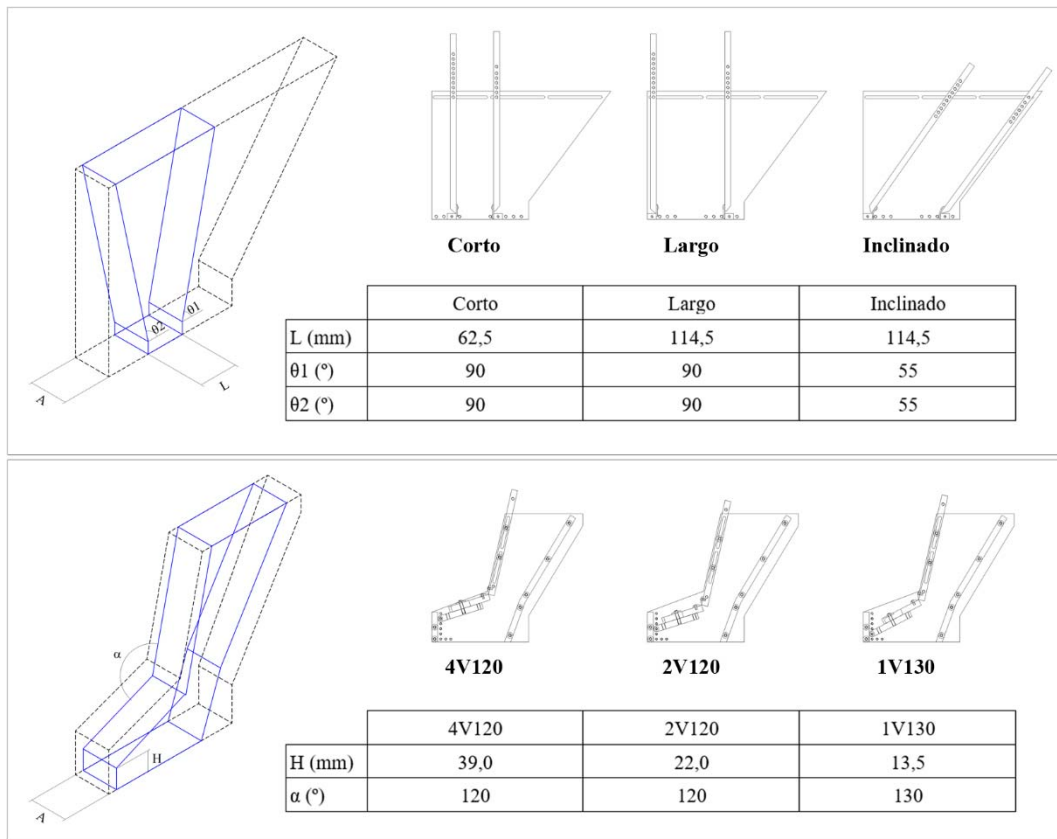


Figura 3.2. Perfiles del depósito (arriba) y del zapato (abajo) utilizados en los trabajos de investigación.

3.2.1.2. Materiales

En los ensayos, se emplearon mezclas binarias formadas por dos materiales granulares de densidad similar, con partículas de forma prácticamente esférica y distinto tamaño (con una relación de diámetros de 2:1). En la Figura 3.3 se muestran los materiales utilizados.

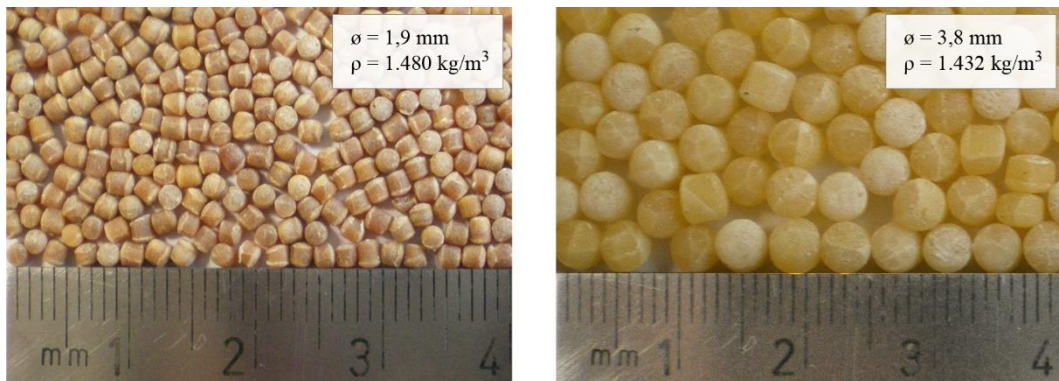


Figura 3.3. Materiales empleados para analizar la segregación. Fino (izquierda) y grueso (derecha).

Se emplearon tres mezclas con distintas proporciones de dichos materiales. La primera, denominada *25f-75G*, consistió en un 25% de material fino y un 75% de material grueso. La segunda estaba formada por la misma cantidad de material fino y grueso (*50f-50G*). La tercera, *75f-25G*, estaba formada por un 75% de material fino y un 25% de material grueso.

3.2.1.3. Métodos de llenado

Se emplearon dos tipos de llenado distintos: llenado por capas e industrial. El llenado por capas consiste en introducir por separado cada uno de los materiales, de manera que el primer material introducido queda en el fondo del depósito, el segundo sobre el primero y los sucesivos sobre los inmediatamente anteriores, formando capas perfectamente identificables. Este método de llenado permite ajustar los parámetros del modelo y eliminar la incertidumbre acerca de la segregación producida durante el llenado del depósito. En el llenado industrial la mezcla perfecta se introduce en una tolva cuya abertura inferior está inicialmente bloqueada con una trampilla. Cuando se inicia el proceso, esta trampilla se abre dejando caer su contenido dentro del depósito o zapato. Para la preparación de la mezcla considerada perfecta, se dividen los ingredientes en diez porciones, se mezclan y finalmente se introducen, una a una, cuidadosamente dentro de la tolva. Este método de llenado pretende reproducir lo más fielmente posible el llenado de una máquina convencional. En el llenado de estas máquinas, una tolva que contiene la mezcla del material granular vierte su contenido de manera continua sobre el depósito o zapato. Después de ajustar el modelo mediante el llenado por capas, se empleó el llenado industrial con el objeto de validar dicho modelo. La Figura 3.4 muestra un esquema de la distribución de los materiales tras cada tipo de llenado.

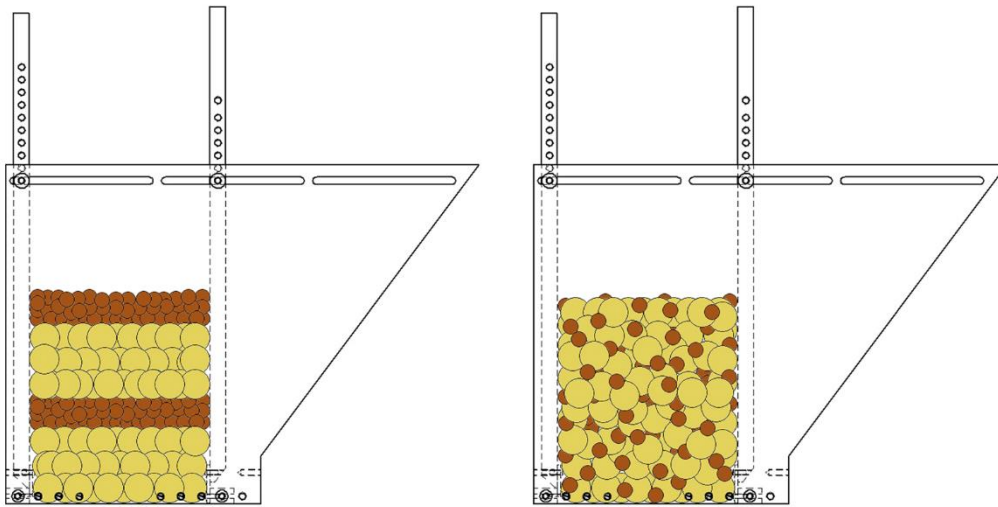


Figura 3.4. Distribución inicial de la mezcla empleando el llenado por capas (izquierda) y el llenado industrial (derecha).

Además, para el llenado industrial se emplearon dos métodos de carga: única y continua. En la primera, se realiza un único llenado industrial al comienzo del ensayo, mientras que en el caso de la carga continua se realiza un primer llenado industrial al comienzo del ensayo y cinco llenados industriales consecutivos posteriormente después de llenar quince matrices. Esta última modalidad pretende reproducir la alimentación continuada de las máquinas convencionales.

3.2.1.4. Procedimiento seguido durante el análisis experimental

El análisis experimental se realizó en ambas máquinas de un modo similar. Inicialmente, se pesaron los materiales necesarios para realizar cada ensayo y se prepararon las mezclas, en el caso del llenado industrial. A continuación, se colocaron los elementos de los prototipos en su posición de inicio y se realizó el llenado del depósito o del zapato mediante uno de los métodos descritos en el apartado 3.2.1.3 Una vez asentado el material, se inició el proceso de llenado de matrices y recolección de muestras, que en cada máquina fue distinto. Finalmente, en cada una de las muestras, se separó el material fino del grueso mediante tamizado y se pesó cada componente. Cada ensayo se repitió tres veces con el fin de atenuar las distorsiones que pudieran producirse puntualmente en alguna de las pruebas.

En el caso de la máquina rotativa, antes de realizar el llenado del depósito, se ajustó la posición de la platina para que una de las matrices quedara totalmente centrada respecto al depósito. Además, se taparon las matrices que quedaron dentro del depósito con uno o varios cilindros. De este modo, al quedar una superficie lisa en el fondo del depósito, se evitó que se produjera una mayor segregación del material durante el llenado. Tras el llenado del depósito, se hizo girar la platina de manera intermitente, de forma que las matrices se iban llenando mientras se encontraban por debajo del depósito y, una vez llenas, se iban desplazando hasta que su contenido era recogido al llegar al extremo de las placas horizontales, tal y como se muestra en la Figura 3.5.

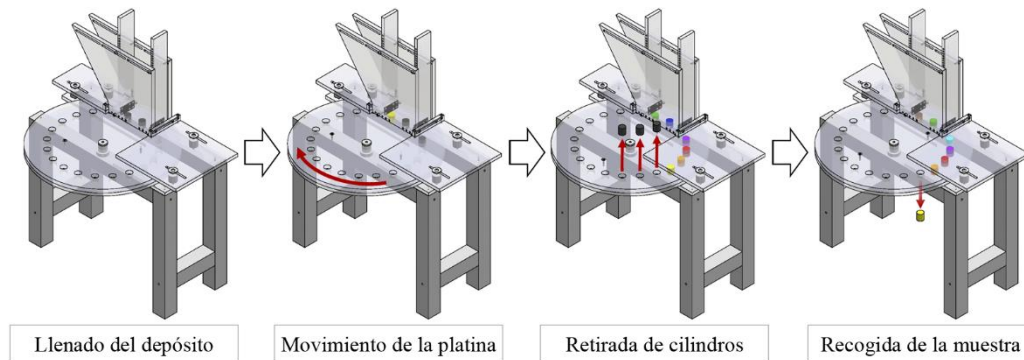


Figura 3.5. Funcionamiento del prototipo de la máquina compresora rotativa.

Al inicio del proceso con la máquina alternativa, el zapato alimentador estaba situado en su posición de retroceso. Tras su llenado, el zapato se movía hacia adelante hasta situarse sobre el punzón. A continuación, el punzón se movía hacia abajo 20 mm para formar la cavidad correspondiente a la matriz y permitir su llenado con el material del zapato. Con el punzón bajado, el zapato se movía hasta su posición inicial, enrasando el material contenido en la matriz. Finalmente, el punzón se movía hacia arriba hasta su posición inicial, permitiendo recoger la muestra (Figura 3.6).

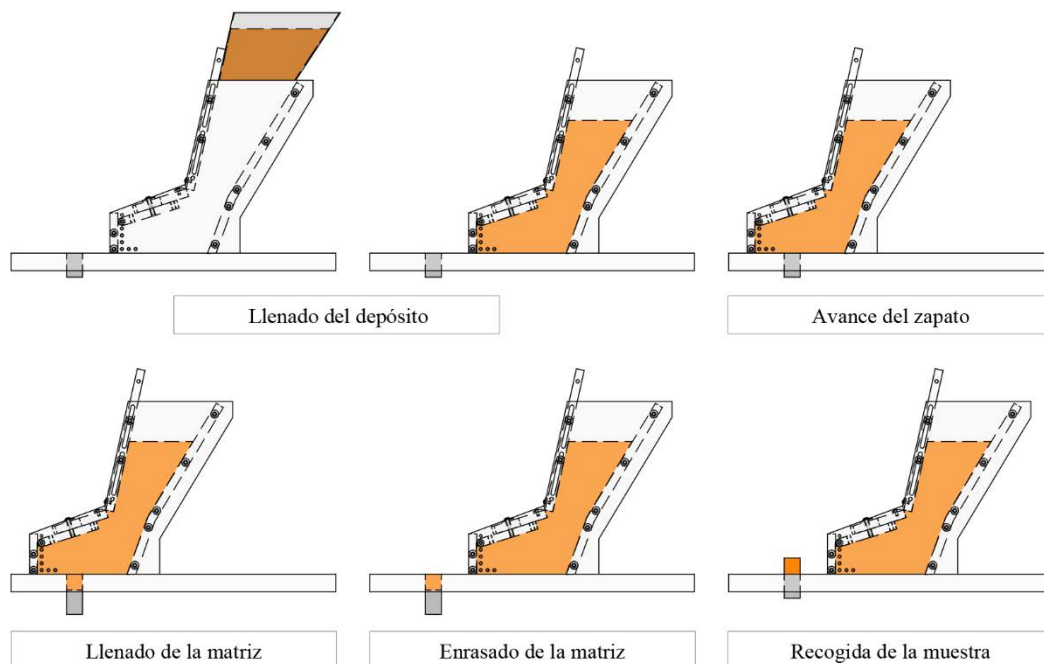


Figura 3.6. Funcionamiento del prototipo de la máquina compresora alternativa.

3.2.2. SIMULACIÓN DEM

Para realizar las simulaciones mediante DEM, se empleó el software EDEM[®] con el modelo de contactos *Hertz-Mindlin (no slip) with RVD Rolling Friction*, tal y como se ha indicado en el apartado 2.2. Las partes principales de cada máquina compresora fueron modeladas mediante un software de CAD, manteniendo la misma geometría de los equipos empleados en el análisis experimental (véase la Figura 3.1). Una vez importadas las geometrías en EDEM[®], se definieron sus dinámicas, las propiedades de las partículas y la manera en la que debían generarse para simular el método de llenado deseado.

3.2.2.1. Generación de partículas

Para modelar el llenado mediante capas, se generaron geometrías virtuales adicionales con tamaño y posición similar a cada una de las capas dentro del depósito. De esta manera, se crearon las partículas de la capa inferior dentro de la geometría virtual inferior. Una vez asentadas las partículas en el depósito, se crearon las partículas de la capa siguiente en la geometría virtual adyacente y así sucesivamente hasta obtener todas las capas. Por el contrario, para modelar el llenado industrial, las partículas fueron creadas en el interior de la tolva, cuya salida estaba inicialmente tapada. Una vez que las partículas fueron creadas de manera aleatoria y guardando la proporción de la mezcla deseada, se destapó la salida de la tolva, dejando caer la mezcla en el interior del depósito o zapato. Las propiedades de las partículas simuladas, así como el número de partículas creadas en cada simulación se muestran en la Tabla 3.1.

Propiedad	Partículas gruesas	Partículas finas	Policarbonato
Número de partículas			
2D, llenado capas simple, mezcla 50f-50G	954	7.576	-
2D, llenado industrial único, mezcla 25f-75G	3.577	9.469	-
2D, llenado industrial único, mezcla 50f-50G	2.385	18.940	-
2D, llenado industrial único, mezcla 75f-25G	1.193	28.421	-
3D, llenado industrial único, mezcla 25f-75G	7.155	18.940	-
2D, llenado industrial contiuo, mezcla 25f-75G	12.521	33.144	-
Diámetro (mm)	3,9 (3,8)	1,95 (1,9)	-
Densidad (kg/m ³)	1.350 (1.432)	1.360 (1.480)	1.000 (1.200)
Módulo de elasticidad transversal (Pa)	3,6×10 ⁶ (1×10 ⁷)	3,6×10 ⁶ (1×10 ⁷)	1,0x10 ⁵ (1×10 ⁹)
Coefficiente de Poisson	0,4 (0,22)	0,4 (0,22)	0,4 (0,36)

Tabla 3.1. Propiedades de los materiales utilizados en las simulaciones DEM y valores medios reales (entre paréntesis).

Capítulo 3. Segregación del material

Como se puede observar, los valores de las propiedades de los materiales empleados en las simulaciones no fueron idénticos a los valores reales. Esto se debió a que se redujo el módulo de elasticidad de las partículas con el fin de reducir el coste computacional de las simulaciones. Al reducir el módulo de elasticidad, el solape entre partículas era mayor y el volumen del depósito que era ocupado por la mezcla era menor que el real, por lo que fue necesario incrementar el tamaño de las partículas para ajustarlo. Del mismo modo, se reajustaron las densidades para igualar el peso de cada partícula con los valores reales. De esta forma, se consiguió que el número de partículas en las simulaciones fuera lo más parecido al utilizado en los ensayos.

Los parámetros de interacción empleados se indican en la Tabla 3.2.

Tipo de interacción	Coefficiente de restitución	Coefficiente de fricción estática	Coefficiente de rodadura
Partículas finas – Policarbonato	0,7 (0,1-0,7)	0,25 (0,1-0,5)	0,3 (0,05-0,5)
Partículas gruesas – Policarbonato	0,4 (0,1-0,6)	0,3 (0,1-0,5)	0,3 (0,05-0,5)
Partículas finas – Partículas gruesas	0,4 (0,2-0,4)	0,2 (0,1-0,4)	0,1 (0,05-0,5)
Partículas finas – Partículas finas	0,4 (0,1-0,6)	0,2 (0,15-0,5)	0,4 (0,2-0,7)
Partículas gruesas – Partículas gruesas	0,4 (0,1-0,6)	0,25 (0,15-0,6)	0,4 (0,3-0,6)

Tabla 3.2. Parámetros de interacción utilizados en las simulaciones DEM y rango analizado (entre paréntesis).

3.2.2.2. Definición de dinámicas

Una vez definida la generación de las partículas, se continuó configurando las dinámicas de las distintas geometrías de cada una de las máquinas.

En las simulaciones de la máquina compresora rotativa, se modelaron la tolva, el depósito, la platina, las placas horizontales y los cilindros que tapaban las matrices durante el llenado del depósito. Tras la generación de las partículas y su asentamiento en el depósito, la platina comenzaba a girar. Al igual que en los ensayos con el prototipo, el movimiento de la platina fue intermitente en las simulaciones. Ésta giraba un ángulo de 18° con una velocidad de 5 rpm (equivalente a 0,6 segundos) y, a continuación, permanecía en reposo durante 0,5 segundos. De este modo, el ciclo de llenado de cada matriz fue de 1,1 s.

En el caso de la máquina alternativa, se modelaron la tolva, el zapato, la platina y el punzón. Una vez asentadas las partículas en zapato, éste se movía hacia adelante a una velocidad constante de 0,32 m/s durante 0,3125 s. Trascorridos 0,08 s, el punzón descendía a una velocidad constante de 0,2 m/s durante 0,01 para formar una matriz de 20 mm de profundidad. Una vez llenada la matriz, 0,25 s después del cese del movimiento del punzón, el zapato volvía a su posición inicial a la misma velocidad a la que se había movido hacia adelante. Finalmente, el punzón volvía a su posición inicial a una velocidad de 0,25 m/s (en 0,08 s). En este caso, el ciclo de llenado de cada matriz también fue de 1,1 s.

3.2.3. CÁLCULOS

3.2.3.1. Validación de los modelos DEM

Con el fin de determinar la bondad de los modelos de simulación DEM, se calculó el error cuadrático medio (RMSE) entre el porcentaje de material fino contenido en cada matriz durante las pruebas experimentales y el obtenido en las simulaciones, tal y como se indica a continuación:

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (p_{exp,i} - p_{sim,i})^2}{n}} \quad (3.1)$$

donde n es el número de matrices analizadas, $p_{exp,i}$ y $p_{sim,i}$ son el porcentaje de material fino de la matriz i -ésima obtenido del análisis experimental y de la simulación DEM, respectivamente.

Se consideró que los modelos DEM con RMSE inferior al 6% eran válidos para simular el comportamiento de los materiales granulares.

3.2.3.2. Cuantificación de la segregación

Una vez que los modelos DEM fueron validados, se estudiaron las simulaciones de aquellas configuraciones en las que se empleó el llenado industrial con el fin de identificar y analizar los mecanismos de segregación.

Para cuantificar el índice de segregación (IS) producido durante el funcionamiento de los prototipos, se comparó la composición del material contenido en cada matriz con la composición teórica de la mezcla. El índice de segregación fue determinado como la desviación cuadrática media (RMSD) entre el porcentaje de material fino obtenido en cada matriz con el porcentaje teórico del material fino introducido en el depósito o zapato al inicio del proceso:

$$IS = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (p_0 - p_i)^2}{n}} \quad (3.2)$$

donde n es el número de matrices analizadas, p_0 es el porcentaje de material fino inicial y p_i es el porcentaje de material fino de la i -ésima matriz.

3.3. RESULTADOS

En este apartado se exponen los resultados relativos al análisis de la segregación generada en las máquinas compresoras.

3.3.1. MÁQUINA COMPRESORA ROTATIVA

3.3.1.1. Ajuste de parámetros y validación de los modelos DEM

En la Tabla 3.3 se muestran las configuraciones realizadas con el prototipo de la máquina compresora rotativa, tanto para obtener el ajuste preliminar de los parámetros de simulación como para validar los modelos DEM.

Config.	Nomenclatura	Tipo depósito	Diseño depósito	Composición mezcla [% peso]	Método de llenado (nº de capas)	Método de carga	Masa total [g] (masa 1 ^{er} llenado / siguientes cargas)
1	2D-C-50f-50G-2C-U	2D	Corto	50% fino/50% grueso	Por capas (2)	Única	80 (80/0)
2	2D-L-50f-50G-2C-U	2D	Largo	50% fino/50% grueso	Por capas (2)	Única	80 (80/0)
3	2D-C-50f-50G-4C-U	2D	Corto	50% fino/50% grueso	Por capas(4)	Única	80 (80/0)
4	2D-L-50f-50G-4C-U	2D	Largo	50% fino/50% grueso	Por capas (4)	Única	80 (80/0)
5	2D-C-25f-75G-I-U	2D	Corto	25% fino/75% grueso	Industrial	Única	200 (200/0)
6	2D-C-50f-50G-I-U	2D	Corto	50% fino/50% grueso	Industrial	Única	200 (200/0)
7	2D-C-75f-25G-I-U	2D	Corto	75% fino/25% grueso	Industrial	Única	200 (200/0)
8	2D-L-25f-75G-I-U	2D	Largo	25% fino/75% grueso	Industrial	Única	200 (200/0)
9	2D-L-50f-50G-I-U	2D	Largo	50% fino/50% grueso	Industrial	Única	200 (200/0)
10	2D-L-75f-25G-I-U	2D	Largo	75% fino/25% grueso	Industrial	Única	200 (200/0)
11	2D-I-25f-75G-I-U	2D	Inclinado	25% fino/75% grueso	Industrial	Única	200 (200/0)
12	2D-I-50f-50G-I-U	2D	Inclinado	50% fino/50% grueso	Industrial	Única	200 (200/0)
13	2D-I-75f-25G-I-U	2D	Inclinado	75% fino/25% grueso	Industrial	Única	200 (200/0)
14	3D-C-25f-75G-I-U	3D	Corto	25% fino/75% grueso	Industrial	Única	400 (400/0)
15	3D-L-25f-75G-I-U	3D	Largo	25% fino/75% grueso	Industrial	Única	400 (400/0)
16	3D-I-25f-75G-I-U	3D	Inclinado	25% fino/75% grueso	Industrial	Única	400 (400/0)
17	2D-C-25f-75G-I-C	2D	Corto	25% fino/75% grueso	Industrial	Continua	700 (200/100)
18	2D-L-25f-75G-I-C	2D	Largo	25% fino/75% grueso	Industrial	Continua	700 (200/100)
19	2D-I-25f-75G-I-C	2D	Inclinado	25% fino/75% grueso	Industrial	Continua	700 (200/100)

Tabla 3.3. Configuraciones de las pruebas experimentales y simulaciones DEM realizadas para analizar las máquinas compresoras rotativas [43].

El ajuste preliminar de los parámetros de simulación se realizó mediante las configuraciones 1-4 de la Tabla 3.3. Como se puede apreciar en la Figura 3.7, al llenar el depósito por capas, se pudo visualizar fácilmente el movimiento de los materiales durante el funcionamiento de la máquina, y, por lo tanto, percibir las diferencias entre los comportamientos obtenidos en cada iteración.

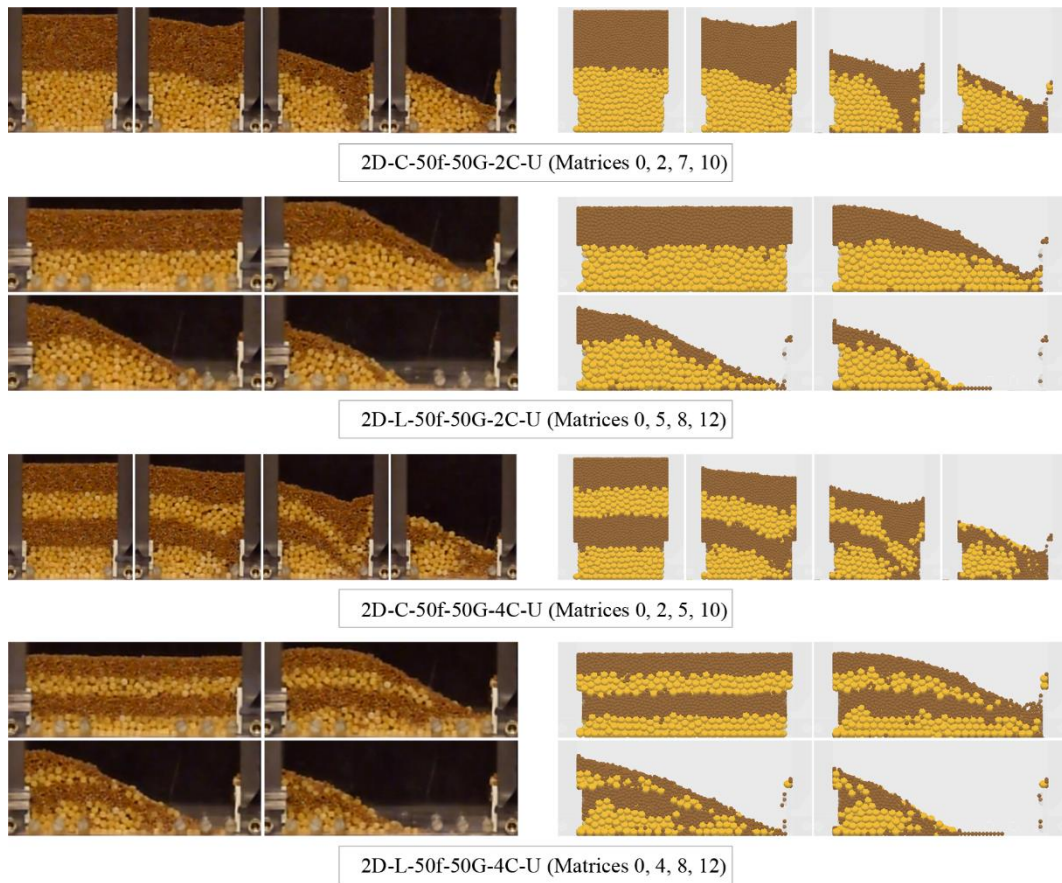


Figura 3.7. Comparación visual de la evolución de la mezcla en los ensayos y simulaciones de la máquina compresora rotativa [43].

De forma complementaria, se compararon los resultados obtenidos en las simulaciones con los datos experimentales en cada una de las iteraciones. En la Figura 3.8, se muestran los resultados correspondientes a cada una de las pruebas empleando los parámetros finales, obtenidos una vez completado el proceso iterativo. A la vista de esta información, se consideró satisfactorio el ajuste obtenido, tanto en los valores del peso del contenido de las matrices como en las curvas que representan el porcentaje de masa de material fino contenido en cada matriz. Atendiendo al RMSE entre los datos experimentales y los resultados de las simulaciones se confirmó que el ajuste era satisfactorio, con valores próximos al 5%. Sin embargo, no fue posible relacionar el diseño del depósito o el número de capas con la bondad del modelo.

Capítulo 3. Segregación del material

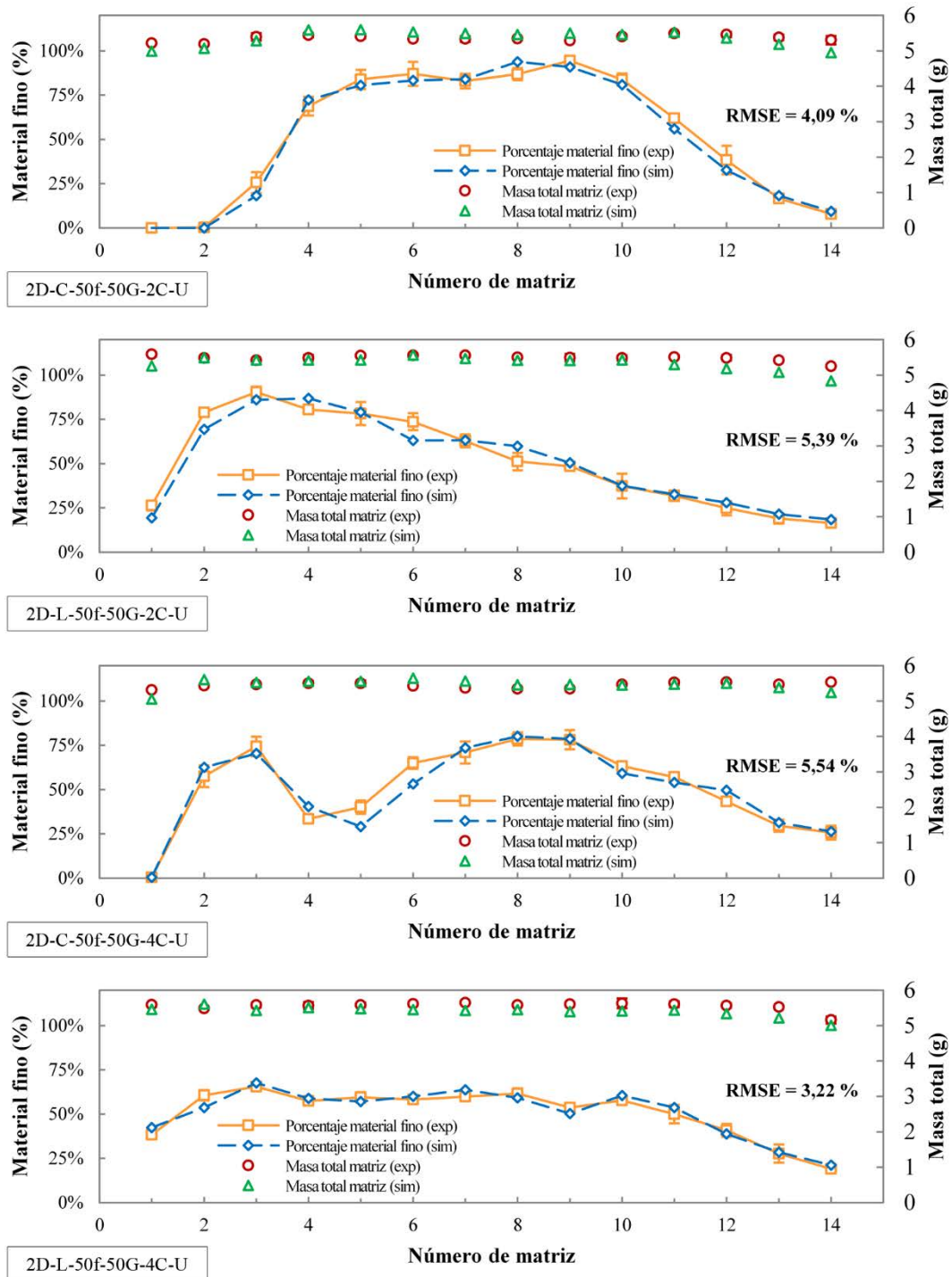


Figura 3.8. Resultados obtenidos en las configuraciones empleadas para realizar el ajuste preliminar de los parámetros de simulación con la máquina compresora rotativa [43].

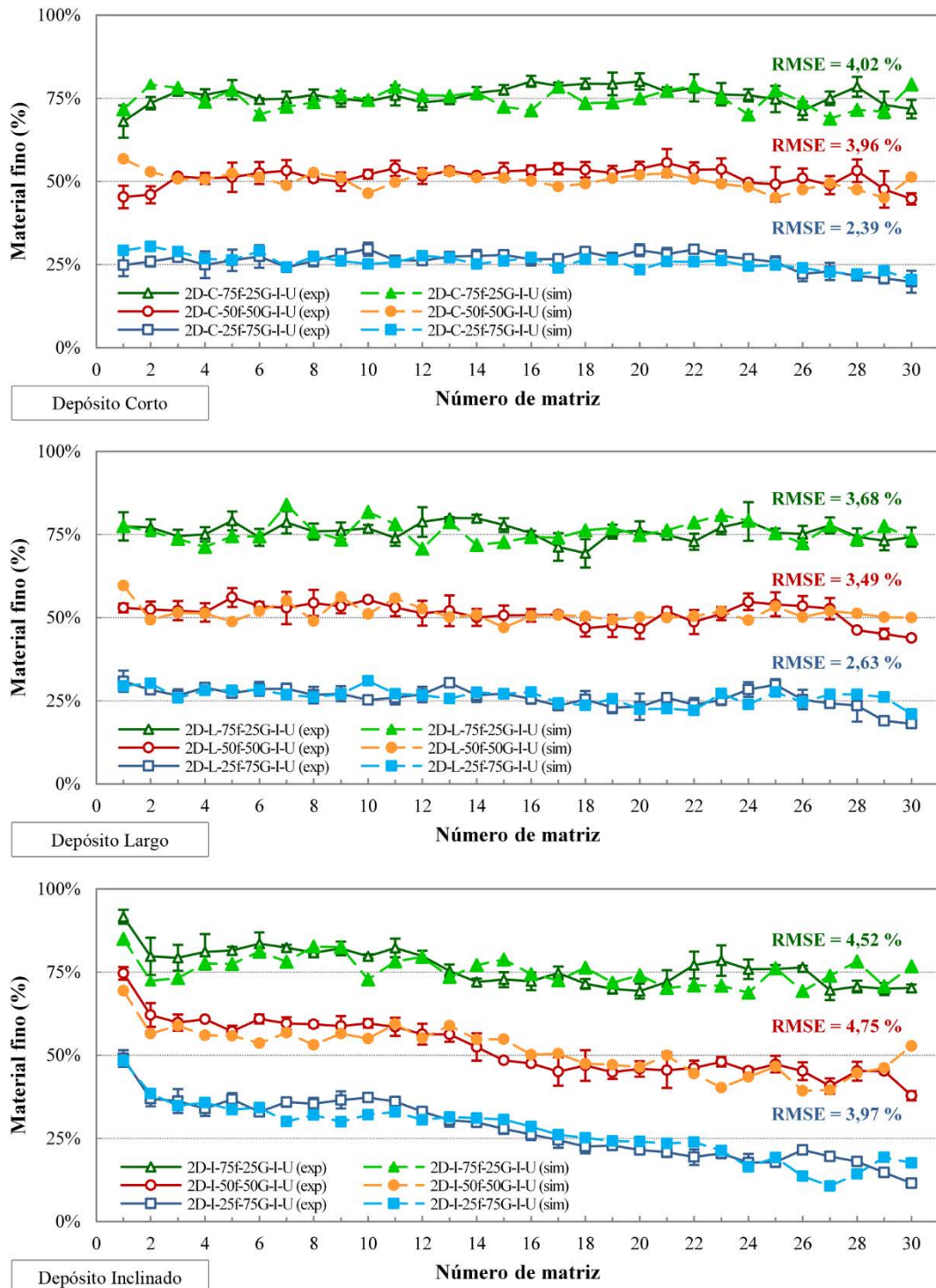


Figura 3.9. Resultados obtenidos en las configuraciones empleadas para optimizar los parámetros de simulación con la máquina compresora rotativa [43].

Capítulo 3. Segregación del material

Tras el ajuste preliminar, los parámetros de simulación fueron optimizados mediante las configuraciones 5-13 mostradas en la Tabla 3.3. En la Figura 3.9 se muestra el porcentaje de material fino obtenido en las configuraciones empleadas para la optimización. A simple vista, se observó que las curvas correspondientes a las simulaciones fueron muy similares a las de las pruebas experimentales, especialmente en las configuraciones que utilizaron la mezcla 25f-75G. Comparando los valores de RMSE de las distintas configuraciones, se observó que el error de las simulaciones generalmente aumentaba conforme se incrementaba el porcentaje de material fino de la mezcla en cada uno de los diseños del depósito.

En la Tabla 3.3 (configuraciones 14-19) se detallan las pruebas que se utilizaron tanto para validar los modelos de simulación como para comprobar si los modelos simplificados eran representativos de las máquinas convencionales (configuraciones 14-16) en condiciones normales de funcionamiento (configuraciones 17-19). Las curvas de porcentaje de material fino correspondientes a las configuraciones en las que se utilizaron los depósitos de mayor tamaño se muestran en la Figura 3.10, mientras que las curvas correspondientes a las configuraciones en las que se empleó el método de carga continua se muestran en la Figura 3.11.

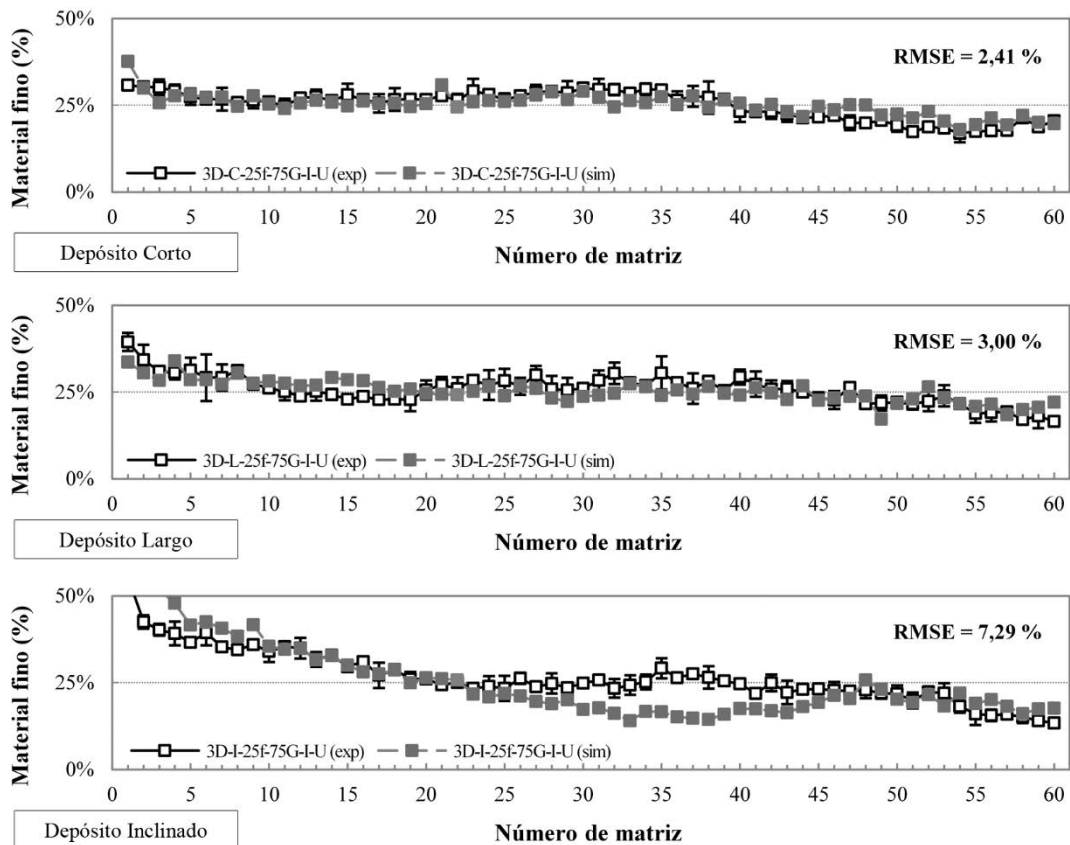


Figura 3.10. Resultados obtenidos en las configuraciones empleadas para validar los parámetros de simulación utilizando los depósitos de mayor tamaño de la máquina compresora rotativa [43].

En la Figura 3.10, se observa que las curvas correspondientes a las simulaciones fueron muy similares a las de las pruebas experimentales, especialmente en las pruebas correspondientes a los depósitos *Corto* y *Largo*, como indican los valores de RMSE. Por el contrario, en la Figura 3.11, se puede apreciar que las curvas correspondientes a los resultados experimentales mostraron una oscilación armónica con ciclos repetidos entre 18 y 20 matrices, que únicamente eran reproducidas en la configuración correspondiente al depósito *Inclinado*. En este caso, el menor RMSE se obtuvo para el diseño *Inclinado*, seguido del *Largo* y el *Corto*.

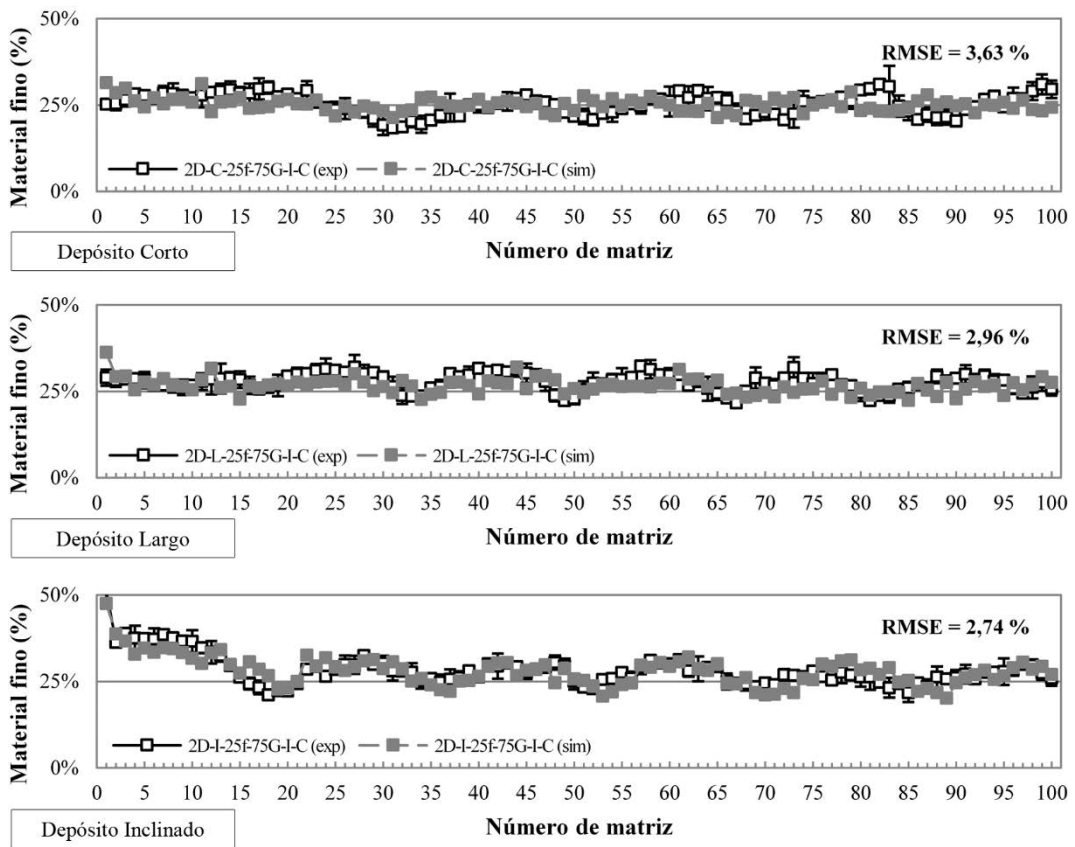


Figura 3.11. Resultados obtenidos en las configuraciones empleadas para validar los parámetros de simulación realizando un llenado continuo de la máquina compresora rotativa [43].

3.3.1.2. Validación de los modelos simplificados

Con el fin de examinar la influencia del tamaño del depósito, los resultados obtenidos en las configuraciones 5, 8 y 11 (Tabla 3.3) fueron comparados con los obtenidos en las configuraciones 14, 15 y 16 (Tabla 3.3), respectivamente. También se compararon con los resultados de las configuraciones 17, 18 y 19 (Tabla 3.3) con el propósito de analizar el efecto del método de carga. Para ello, se calcularon los índices de segregación obtenidos en las distintas simulaciones y se compararon las curvas de porcentaje de material fino.

En la Figura 3.12 se muestran las curvas de porcentaje de material fino obtenidas en las simulaciones con los depósitos 2D y 3D para cada uno de los 3 diseños (*Corto*, *Largo* e *Inclinado*) empleando una mezcla 25f-75G. En las gráficas correspondientes a los tres diseños (*Corto*, *Largo* e *Inclinado*), se puede identificar que, conforme se iba descargando el depósito, los porcentajes de los materiales de la mezcla evolucionaban del mismo modo, independientemente de cuál fuera la anchura del depósito (2D o 3D). Este comportamiento coincide con el descrito por Ketterhagen [6], que concluyó que la distancia entre las paredes transversales de un depósito no afecta a la segregación del mismo durante su descarga. Del mismo modo, Guo [15] afirmó que es posible estudiar la segregación en la descarga de silos mediante configuraciones simplificadas pues los resultados son muy similares a los obtenidos en los sistemas de dimensiones reales. Atendiendo a los ISs, se observó que, tanto con el depósito 2D como con el depósito 3D, el diseño *Corto* fue el que menor IS produjo, seguido por el diseño *Largo*, que produjo un IS ligeramente superior al *Corto*. Finalmente, con el diseño *Inclinado* se obtuvieron ISs significativamente superiores a los obtenidos con los depósitos anteriores. El diseño *Inclinado* produjo un 30% más de segregación que el generado en los otros diseños (*Corto* y *Largo*) de depósitos 2D y casi cuatro veces más en el caso de los depósitos 3D.

En la Figura 3.13 se muestran las curvas de porcentaje de material fino obtenidas en las simulaciones en las que los depósitos se llenaron con la mezcla 25f-75G una única vez y de forma continua. En el caso del depósito *Corto*, las curvas relativas al llenado único y continuo fueron muy similares, probablemente debido a que las sucesivas cargas de material no modificaron sustancialmente el flujo másico de descarga. Sin embargo, las curvas de los depósitos *Largo* e *Inclinado* fueron similares hasta las matrices 17^a-18^a, aproximadamente, y, a partir de ese momento, las curvas correspondientes a los ensayos con carga continua comenzaron a oscilar armónicamente debido a las cargas de material. Como resultado, en las simulaciones de llenado continuo no se alcanzaron valores tan bajos como en las de llenado único (véase la curva de la configuración 2D-I-25f-75G-I-U) y, por lo tanto, el IS fue menor. Atendiendo a los valores de IS también se observó que, al igual que los casos anteriores, las configuraciones relativas a los depósitos *Corto* y *Largo* generaron los menores ISs.

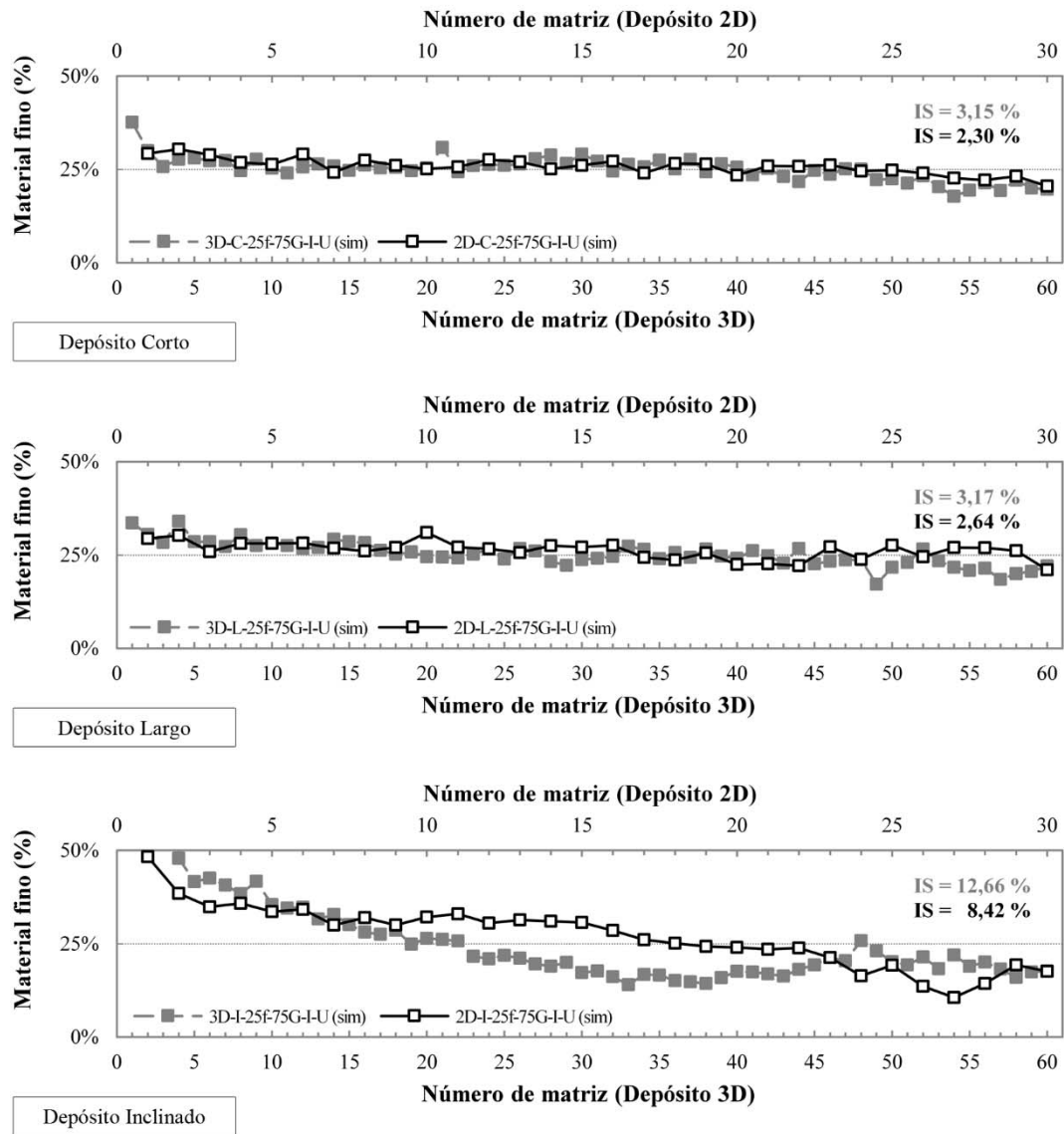


Figura 3.12. Comparativa entre los resultados obtenidos en las simulaciones de la máquina compresora rotativa con los depósitos de diferente tamaño [43].

Capítulo 3. Segregación del material

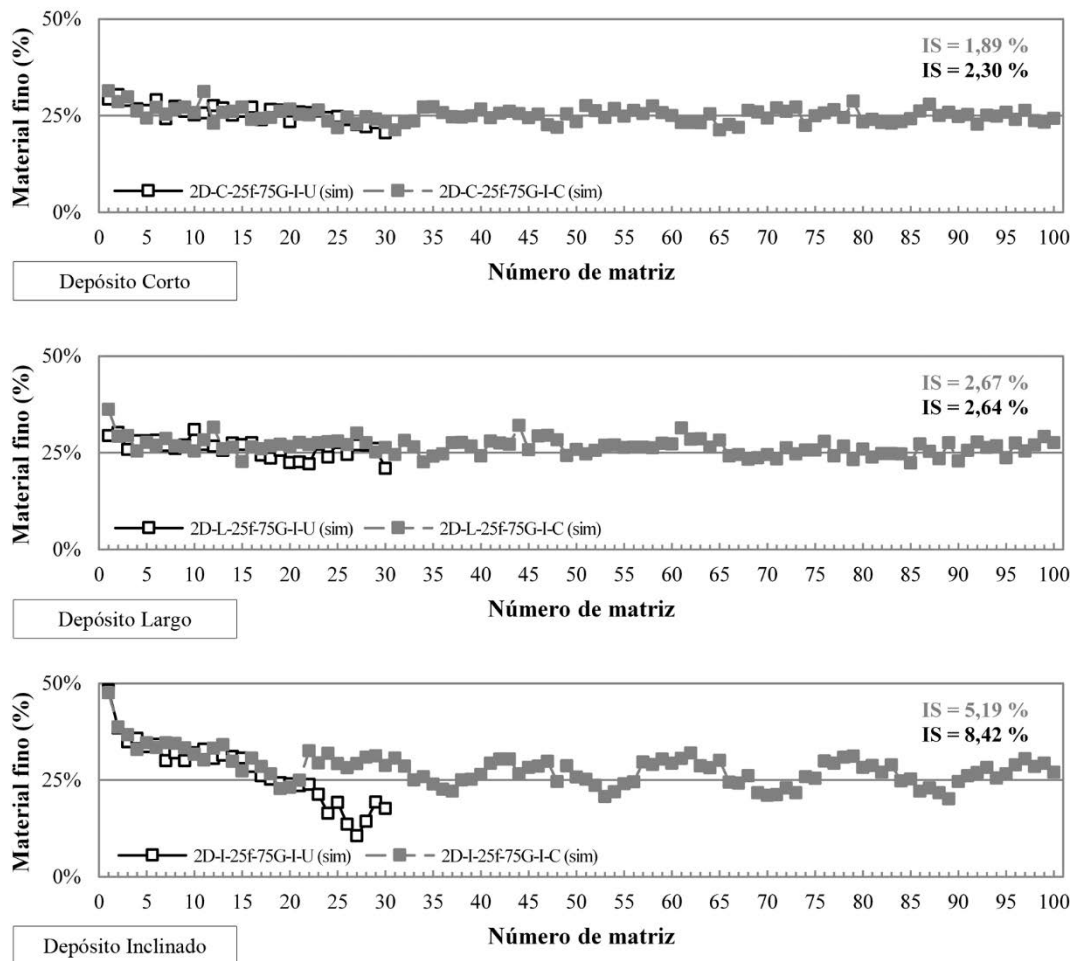


Figura 3.13. Comparativa entre los resultados obtenidos en las simulaciones de la máquina compresora rotativa con llenado único y continuo del depósito [43].

3.3.1.3. Análisis de los mecanismos de segregación

Una vez validados los modelos de simulación y comprobada la capacidad de los modelos simplificados para analizar la segregación en los depósitos, se emplearon las simulaciones de los modelos simplificados (configuraciones 5-13, en la Tabla 3.3) para analizar los mecanismos de segregación. En la Figura 3.14 se muestra el IS obtenido en cada una de las simulaciones.

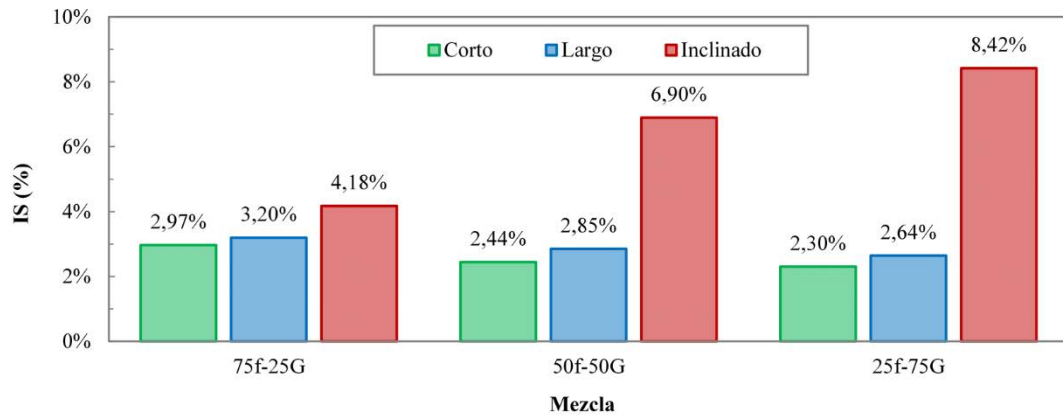


Figura 3.14. Índices de segregación obtenidos en los distintos diseños de depósito de la máquina compresora rotativa [43].

Los ISs relativos a los depósitos *Corto* y *Largo* fueron muy similares, siendo ligeramente superior el IS de las configuraciones con depósito *Largo*. Dada la poca variación entre los ISs en estos depósitos no se obtuvo ninguna conclusión al respecto, aunque sí se apreció que el IS aumentaba conforme aumentaba el porcentaje de material fino. Por el contrario, en el caso del depósito *Inclinado*, cuyos ISs fueron considerablemente superiores a los obtenidos en los depósitos *Corto* y *Largo* para todas las mezclas, el IS aumentaba a medida que se reducía el porcentaje de partículas gruesas. Este hecho pudo deberse a la reducción de la percolación de las partículas finas [6], ya que, cuanto mayor es el porcentaje de material fino, menor es la cantidad de vacíos de la mezcla, lo que provoca que las partículas finas tengan menos posibilidades de desplazarse entre las gruesas para rellenar los vacíos.

Los valores de IS obtenidos se pudieron explicar mediante las curvas mostradas en la Figura 3.9. Las curvas del porcentaje de material fino de los diseños *Corto* y *Largo* se mantuvieron próximas al porcentaje teórico de material fino a lo largo de todo el proceso. Este comportamiento se tradujo en valores bajos de IS. Por el contrario, en el caso del depósito *Inclinado*, fue posible identificar que, durante la primera parte del proceso, se consumió gran cantidad de material fino y, consecuentemente, en la segunda mitad, la mezcla remanente en el depósito tuvo un porcentaje de material fino inferior al teórico, por lo que la curva se mantuvo por debajo del porcentaje teórico de la mezcla. Por ese motivo, los valores de IS del diseño *Inclinado* fueron superiores al doble de los ISs obtenidos en los diseños *Corto* y *Largo* con las mezclas *50f-50G* y *25f-75G*.

Tanto los índices de segregación como las curvas de porcentaje de material fino fueron indicadores de la intensidad de la segregación generada, pero no mostraron las causas que generaban dicha segregación. Por ello, se analizaron algunos factores, como el porcentaje de material fino contenido en distintas regiones de los depósitos, la forma de la superficie libre del material o los valores de velocidad de las partículas en diferentes momentos.

Con el fin de determinar los mecanismos de segregación producidos durante el llenado de los distintos depósitos, se calculó el porcentaje de material fino contenido en 30 regiones (celdas) de cada depósito una vez concluido el proceso de llenado, en un momento previo al inicio del funcionamiento de la máquina. En la Figura 3.15 se muestra el estado de la mezcla tras el llenado de cada depósito con la mezcla 25f-75G. Para una mejor visualización de los resultados, se asignó una escala de color desde amarillo hasta azul en función de la concentración de material fino, como se observa en la Figura 3.15. De este modo, se observó que, en el caso de los depósitos *Corto* (izquierda) y *Largo* (centro), el color verde fue mayoritario, lo que indicó que se produjo poca segregación durante el llenado. No obstante, en las celdas superiores (fila 10ª del *Corto* y 6ª del *Largo*) fue posible identificar celdas de color amarillo, es decir, una mayor presencia de partículas gruesas en las celdas superiores, lo que indicó que se había producido segregación por filtración. Este mecanismo de segregación se produce cuando las partículas finas se cuelan en los vacíos que dejan las partículas gruesas durante el llenado del depósito [53]. Sin embargo, el comportamiento mostrado en el depósito *Inclinado* fue diferente. Tras el llenado del depósito *Inclinado* (derecha), las celdas de la columna E poseían un color mayoritariamente azul lo que indicaba una mayor presencia de partículas finas. Por el contrario, el color amarillo de la columna A, mostraba una acumulación de partículas gruesas. Esta distribución parecía indicar que se había producido una segregación por rodadura. Este mecanismo de segregación es habitual en la formación de pilas y durante el llenado de silos y se debe al distinto comportamiento de los materiales de una mezcla cuando éstos impactan sobre una superficie inclinada (la pared lateral del depósito). En este caso, las partículas gruesas recorren mayores distancias que las finas ya que éstas se ven bloqueadas más fácilmente ante cualquier obstáculo [53]. Teniendo en cuenta que, tras el llenado del depósito, había una acumulación de material fino en la zona de alimentación de las matrices, se consideró que este fenómeno justificaba el mayor consumo de partículas finas durante la primera mitad del ensayo con el depósito *Inclinado* (Figura 3.9). Finalmente, las celdas correspondientes a la superficie libre poseían un color amarillo, lo que sugirió que se había producido una segregación por filtración similar a la identificada en los depósitos *Corto* y *Largo*.

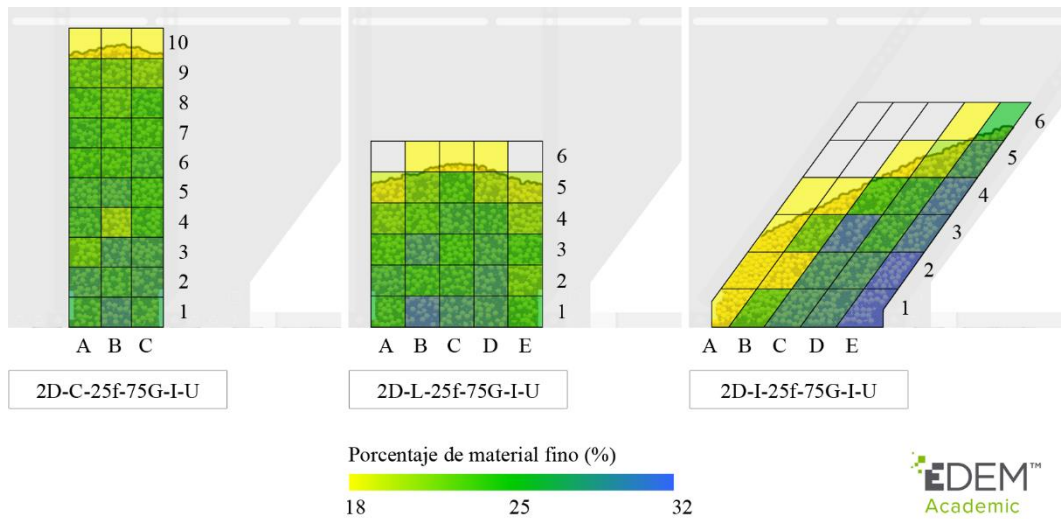


Figura 3.15. Distribución de la mezcla tras el llenado de los depósitos de la máquina compresora rotativa [43].

Aunque la segregación producida durante el llenado del depósito determinó, en gran medida, el IS obtenido en cada diseño de depósito, resultó necesario examinar el comportamiento del material durante el funcionamiento de la máquina para explicar las pequeñas diferencias entre el IS de los depósitos *Corto* y *Largo*. Para ello, en primer lugar, se analizó la evolución de la superficie libre del material conforme se iba vaciando cada uno de los depósitos como consecuencia del llenado de las matrices con el fin de determinar el tipo de flujo de descarga producido (flujo en masa o flujo de conducto). Con el fin de confirmar los flujos de descarga, también se examinó la velocidad de las partículas durante el llenado de las matrices. Dado que las partículas no sólo se desplazan durante el llenado de las matrices, también se analizó la velocidad de las partículas durante el movimiento de la platina. Finalmente, se examinó la variación del porcentaje de material fino contenido en las 30 celdas de cada depósito con el fin de obtener una visión global de lo que ocurre durante la operación de la máquina.

Examinando las superficies libres en cada depósito (véase la Figura 3.16), se apreció que, durante la descarga del depósito *Corto* (izquierda), se produjo un flujo en masa mientras que un flujo de conducto tuvo lugar en los depósitos *Largo* (centro) e *Inclinado* (derecha).

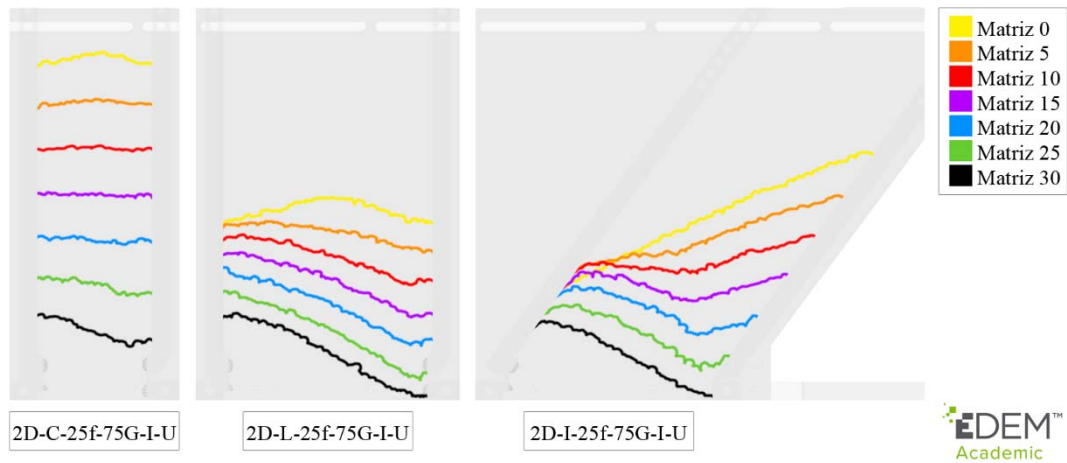


Figura 3.16. Evolución de la superficie libre del material en los depósitos de la máquina compresora rotativa [43].

Atendiendo a la evolución de la superficie libre en el depósito *Corto* (Figura 3.16, izquierda) se observó que ésta permaneció prácticamente horizontal durante casi todo el proceso de descarga. Únicamente durante el llenado de las últimas matrices se produjo una pequeña inclinación de la superficie libre. Analizando los vectores de velocidad de las partículas cuando la matriz comenzaba a llenarse (Figura 3.17), se observó cómo la dirección de la velocidad predominante en la zona superior del depósito fue la vertical con sentido descendente y, en la zona más próxima a la base del depósito, los vectores de las velocidades apuntaban a la zona de alimentación de las matrices. Además, fue posible identificar en la zona intermedia del depósito cómo algunas partículas finas se movían con mayor velocidad que las gruesas que se encontraban alrededor, lo que sugirió la existencia de un fenómeno de segregación por percolación. No obstante, este mecanismo de segregación no tuvo un impacto significativo en el IS, ya que el flujo másico de descarga fue predominante.

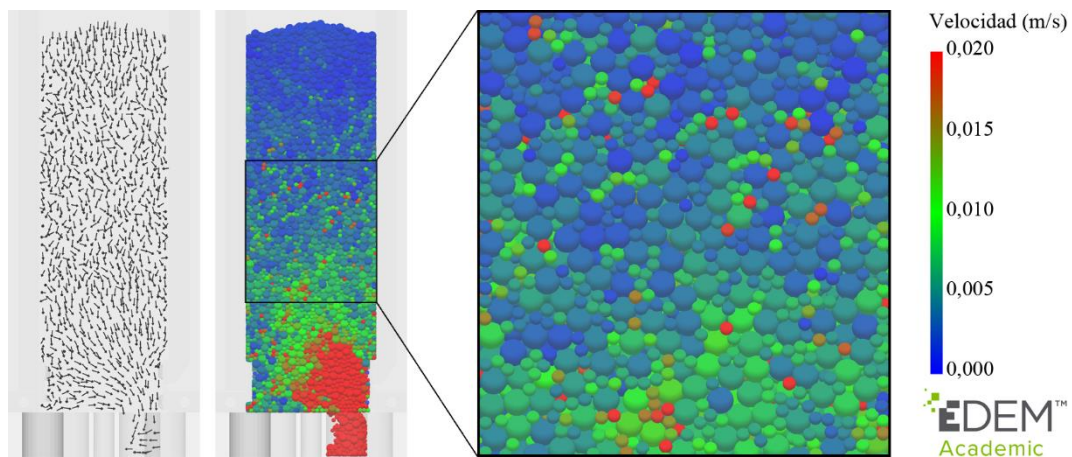


Figura 3.17. Velocidad de las partículas durante el llenado de las matrices en el depósito Corto [43].

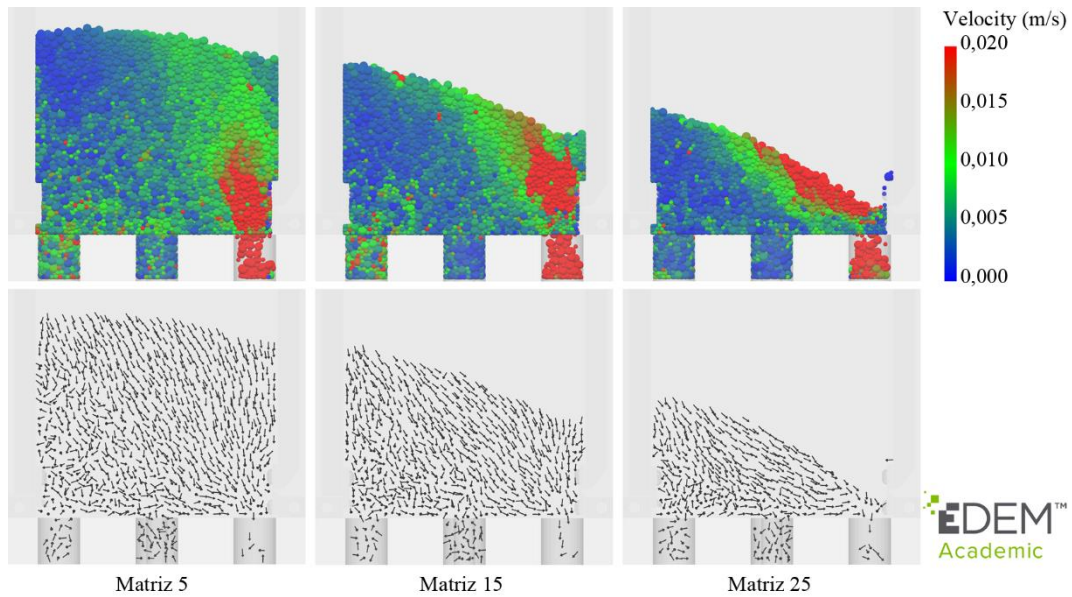


Figura 3.18. Velocidad de las partículas durante el llenado de las matrices en el depósito Largo [43].

En el depósito *Largo* (Figura 3.16, centro), se observó que la superficie libre poseía inicialmente la forma habitual de una pila de material granular, con un pequeño ángulo de reposo. Conforme se iba vaciando el depósito, iba aumentando la pendiente negativa en la parte derecha, que es la zona donde se produce la alimentación de las matrices. Analizando los vectores de velocidad de las partículas en el momento en el que la platina se paraba y comenzaban a llenarse las matrices (Figura 3.18), se pudieron identificar varios comportamientos. En primer lugar, durante el proceso de llenado de todas las matrices, la velocidad de las partículas de la parte izquierda del depósito (coloreadas en azul) fue sensiblemente menor que el de las de la parte derecha (coloreadas en verde y rojo). Este hecho, que no se apreciaba en el depósito *Corto*, fue debido a que el flujo de las partículas se produjo principalmente en la parte inferior derecha como consecuencia de su desplazamiento durante el llenado de las matrices. En segundo lugar, los vectores de velocidad correspondientes a las partículas coloreadas en verde y rojo se orientaron hacia la zona de llenado de la matriz. Este hecho confirmó que se producía un flujo de conducto durante la descarga del depósito. Finalmente, cuando la superficie libre adquiría cierta pendiente (llenado de la matriz 25), se producía un deslizamiento de partículas sobre la superficie similar a la segregación por rodadura identificada por Guo [15] durante el llenado de una matriz fija utilizando un depósito móvil. El impacto de estos hechos sobre el IS del depósito *Largo* no fue muy significativo, pero sí ayudó a comprender por qué el IS del depósito *Largo* era ligeramente superior que el del *Corto*.

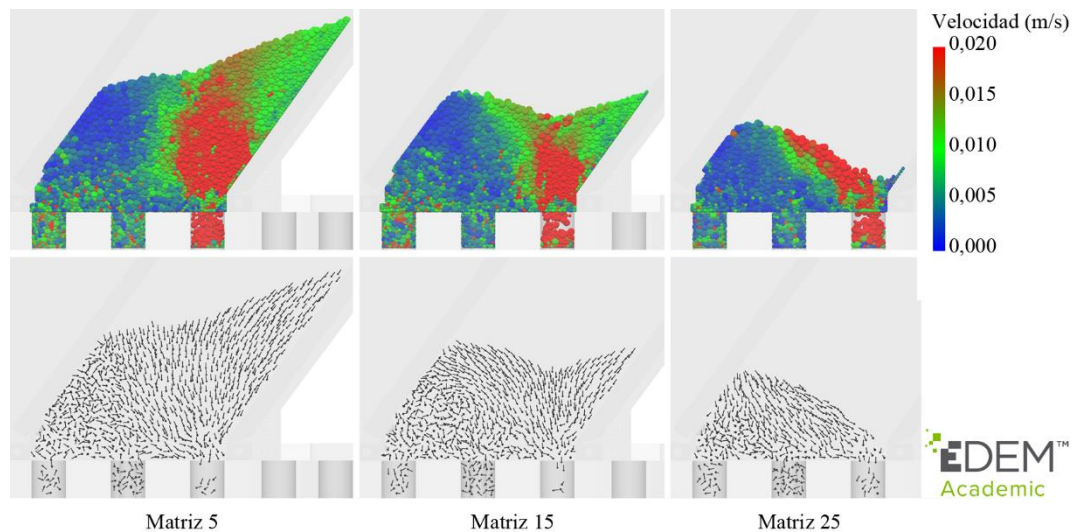


Figura 3.19. Velocidad de las partículas durante el llenado de las matrices en el depósito Inclinado [43].

En la evolución de la superficie libre del depósito *Inclinado* (Figura 3.16, derecha) fue posible identificar 3 morfologías: Inclinada con pendiente positiva, con forma de N e inclinada con pendiente negativa. Analizando los vectores de velocidad de las partículas en el momento en el que la platina se paraba y comenzaban a llenarse las matrices (Figura 3.19), se observó que los comportamientos identificados en este depósito eran muy similares a los del depósito *Largo*. Por una parte, durante el proceso de llenado de todas las matrices, la velocidad de las partículas de la parte izquierda del depósito (coloreadas en azul) era sensiblemente menor que la de las de la parte derecha (coloreadas en verde y rojo). Por otra parte, los vectores de velocidad de estas últimas se orientaban hacia la zona de llenado de la matriz, confirmando, de nuevo, que se producía un flujo de conducto durante la descarga del depósito. Finalmente, hasta la matriz 25, la superficie libre de la mezcla poseía una morfología inclinada con pendiente positiva o en forma de N lo que hacía que las matrices se alimentaran con el material de la parte derecha del depósito. Sin embargo, cuando la superficie libre adquiría una morfología inclinada con pendiente negativa (a partir de la matriz 25), las matrices se abastecían principalmente del material que se deslizaba sobre dicha superficie.

Para completar el análisis de segregación durante el funcionamiento de la máquina compresora rotativa, se examinaron los vectores de velocidad de las partículas durante el giro de la platina posterior al llenado de las matrices (Figura 3.20). Así, se observó la generación de un flujo de partículas que seguía una trayectoria circular y afectaba a la mayoría de las partículas situadas en la parte inferior de cada depósito. En las imágenes se han incluido unas flechas circulares que indican la dirección y sentido de dicha trayectoria. Este flujo circular fue originado por el movimiento de las matrices llenas, que producían un arrastre de las partículas situadas en el fondo del depósito. Este arrastre (representado mediante la flecha horizontal), a su vez, producía el movimiento ascendente de las partículas situadas en la parte izquierda.

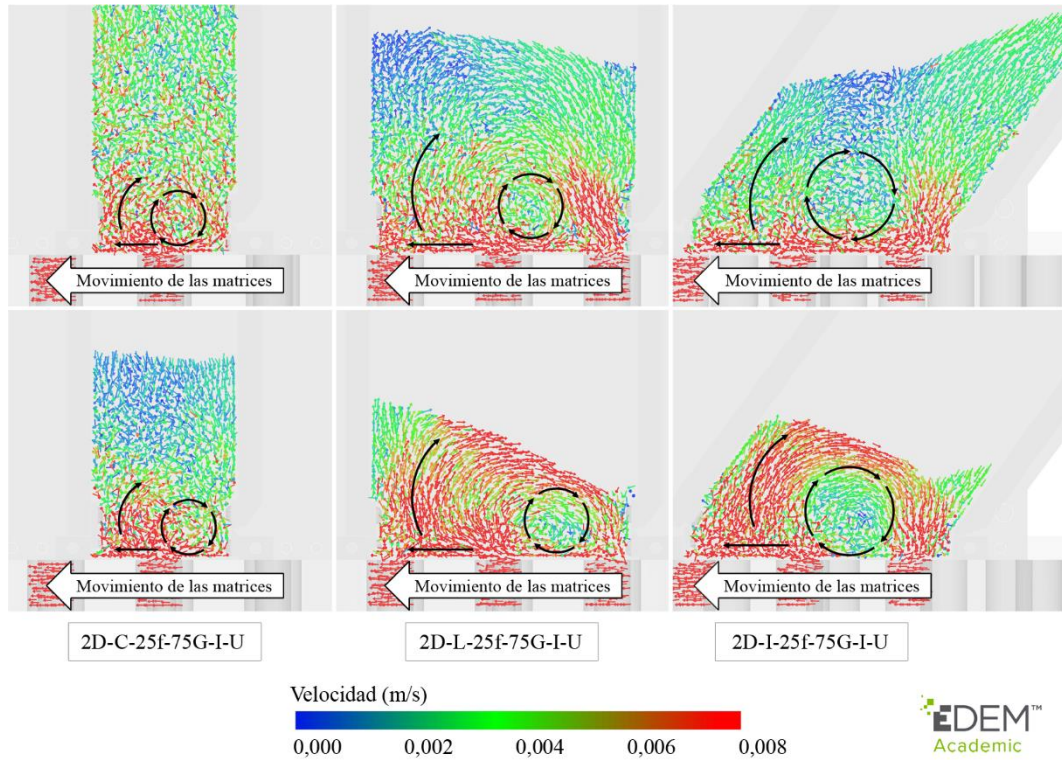


Figura 3.20. Velocidad de las partículas en los depósitos de la máquina compresora rotativa durante el movimiento de la platina tras el llenado de las matrices 5 (arriba) y 20 (abajo) [43].

Con el fin de lograr una visión global de la segregación generada durante el funcionamiento de la máquina, se examinó la variación del porcentaje de material fino contenido en las 30 celdas de cada depósito en diferentes momentos (Figura 3.21).

Capítulo 3. Segregación del material

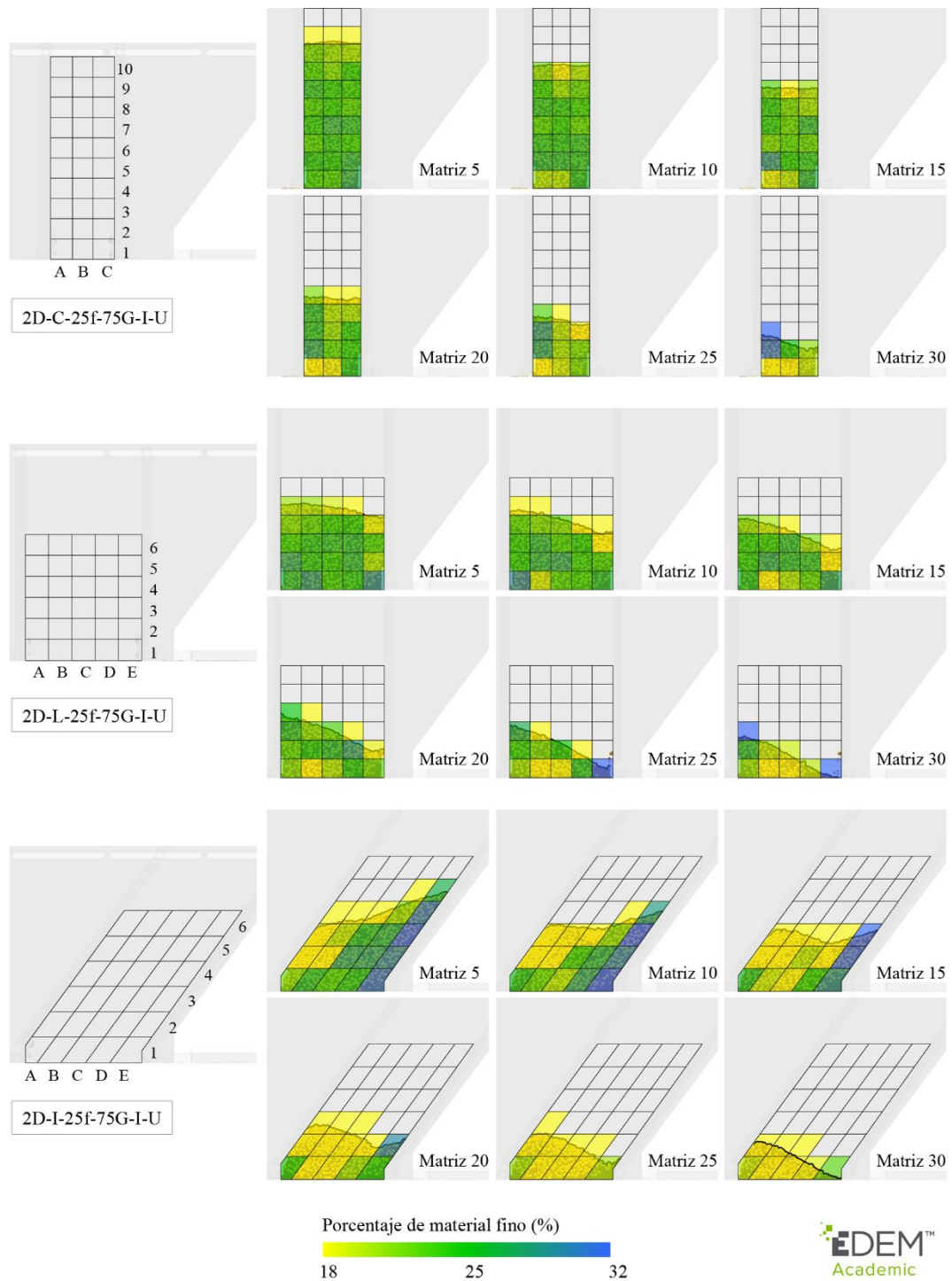


Figura 3.21. Distribución de la mezcla en los depósitos de la máquina compresora rotativa durante su funcionamiento [43].

En las imágenes, se pudo observar que el porcentaje de material fino era inferior al teórico en las celdas correspondientes a superficies libres inclinadas (celdas en color amarillo). Esto confirmó que se producía un fenómeno de segregación por rodadura. En las imágenes correspondientes a los depósitos *Largo e Inclinado*, también se advirtió un aumento del porcentaje de material fino en la celda A1 durante la primera mitad y un posterior decremento del porcentaje de material fino en dicha celda hasta el final del proceso. Este comportamiento era explicado mediante los flujos de partículas observados durante el movimiento de la platina (véase la Figura 3.20). Sin embargo, dado que la movilidad de las partículas gruesas era menor, en esta ocasión, el análisis se centró en los flujos de las partículas finas. Así, se identificaron dos flujos de partículas finas que afectaban a dicha celda (A1). En primer lugar, existía un aporte de partículas finas proveniente de las celdas adyacentes B1 y C1, ya que las partículas finas situadas en el fondo del depósito se introducían parcialmente en los huecos existentes en la parte superior de las matrices a lo largo de su recorrido y eran arrastradas hasta la celda A1. Tras abandonar el depósito, la matriz era enrasada y todas las partículas que no estaban totalmente introducidas en la matriz, se quedaban retenidas en dicha celda. Por otro lado, el movimiento ascendente producido por el flujo circular anteriormente identificado producía una pérdida de partículas finas en la celda A1, que proveía de material fino a las celdas cercanas afectadas por dicho flujo. Debido a que el aporte de partículas finas predominaba sobre la pérdida durante la primera mitad del proceso, se producía un aumento del porcentaje de material fino. Sin embargo, a partir de entonces, el flujo circular era predominante (véase la Figura 3.20), por lo que el porcentaje de material fino se reducía. Por otra parte, se observó un descenso de material fino, que se mantenía durante todo el proceso, tanto en las celdas A1 y B1 del depósito *Corto* como en las celdas B1 y C1 de las configuraciones *Largo e Inclinado*. Este comportamiento fue explicado mediante los dos mismos flujos de partículas finas. En este caso, la combinación de ambos flujos generaba una pérdida constante de partículas en dichas celdas durante todo el proceso. En la celda A1 del depósito *Corto* y en la celda B1 de los diseños *Largo e Inclinado*, el porcentaje de material fino identificado al final de proceso era menor que el identificado en la celda B1 y C1, respectivamente. Esto fue debido a que el flujo circular afectaba en mayor medida a las primeras celdas ya que el flujo circular estaba desplazado hacia la derecha respecto del centro de la base (véase la Figura 3.20).

3.3.2. MÁQUINA COMPRESORA ALTERNATIVA

3.3.2.1. Validación de los modelos DEM

En la Tabla 3.4 se muestran las configuraciones realizadas con el prototipo de la máquina compresora alternativa para validar los modelos de simulación DEM y, posteriormente, analizar los mecanismos de segregación producidos. En este caso, únicamente se contemplaron las configuraciones simplificadas (con el zapato estrecho y llenado único) dado que su capacidad para analizar la segregación ya había sido examinada [54].

Config.	Nomenclatura	Tipo zapato	Diseño zapato	Composición mezcla [% peso]	Método de llenado (nº de capas)	Método de carga	Masa total [g] (masa 1 ^{er} llenado / siguientes cargas)
1	2D-4V120-25f-75G-I-U	2D	4V120	25% fino/75% grueso	Industrial	Única	200 (200/0)
2	2D-4V120-50f-50G-I-U	2D	4V120	50% fino/50% grueso	Industrial	Única	200 (200/0)
3	2D-4V120-75f-25G-I-U	2D	4V120	75% fino/25% grueso	Industrial	Única	200 (200/0)
4	2D-2V120-25f-75G-I-U	2D	2V120	25% fino/75% grueso	Industrial	Única	200 (200/0)
5	2D-2V120-50f-50G-I-U	2D	2V120	50% fino/50% grueso	Industrial	Única	200 (200/0)
6	2D-2V120-75f-25G-I-U	2D	2V120	75% fino/25% grueso	Industrial	Única	200 (200/0)
7	2D-1V130-25f-75G-I-U	2D	1V130	25% fino/75% grueso	Industrial	Única	200 (200/0)
8	2D-1V130-50f-50G-I-U	2D	1V130	50% fino/50% grueso	Industrial	Única	200 (200/0)
9	2D-1V130-75f-25G-I-U	2D	1V130	75% fino/25% grueso	Industrial	Única	200 (200/0)

Tabla 3.4. Configuraciones de las pruebas experimentales y simulaciones DEM realizadas para analizar las máquinas compresoras alternativas [44].

Como se puede observar en la Figura 3.22, se compararon varias fotografías captadas durante los ensayos con las imágenes de las simulaciones correspondientes, de modo que se pudo observar que las simulaciones reproducían con fidelidad el comportamiento del material, ya que, en diferentes momentos, tanto de los ensayos como de las simulaciones, se distinguían zonas en las que se acumulaban partículas de material grueso (material claro) y otras en las que predominaba el material fino (material oscuro). También se observó gran similitud entre las superficies libres generadas en ambos análisis.

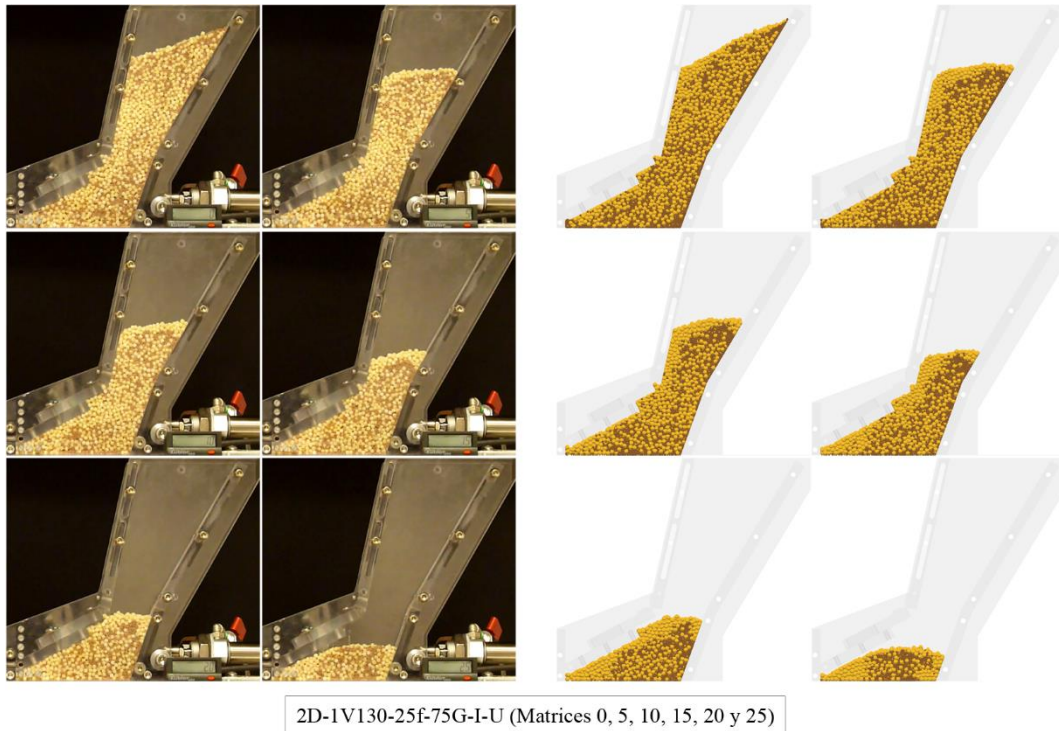


Figura 3.22. Comparación visual de la evolución de la mezcla en los ensayos y simulaciones de la máquina compresora alternativa [44].

En la Figura 3.23 se muestra el porcentaje de material fino que contenido en cada una de las matrices en los ensayos y en las simulaciones correspondientes a las configuraciones mostradas en la Tabla 3.4. Como se puede apreciar, en la mayoría de las configuraciones, las curvas correspondientes a las simulaciones fueron muy próximas a las experimentales hasta las matrices 27-28, a partir de las cuales, ambas curvas tendieron a separarse e incluso el comportamiento de ambas curvas fue diferente, como fue el caso de las configuraciones que emplearon el zapato *4V120*. Esta desviación de las simulaciones respecto de los experimentos pudo deberse a que el zapato se encontraba bastante vacío al final del proceso y las partículas tenían mayor libertad de movimiento. Las partículas dejaban de moverse en masa y comenzaban a moverse de forma individual, creando mayor incertidumbre en la localización de las distintas partículas. La mayor o menor desviación entre las curvas se reflejó en el valor de RMSE obtenido en cada configuración. Así, se observó que los mayores valores de RMSE se obtuvieron en las configuraciones que emplearon el zapato *4V120*, mientras que los valores inferiores correspondieron a las configuraciones *2D-2V120-75f-25G-I-U* y *2D-2V120-50f-50G-I-U*, cuyas curvas se mantuvieron muy próximas hasta el llenado de la última matriz. Atendiendo a los valores de RMSE obtenidos, se consideró que el ajuste era bueno, ya que todos fueron inferiores a 6%.

Capítulo 3. Segregación del material

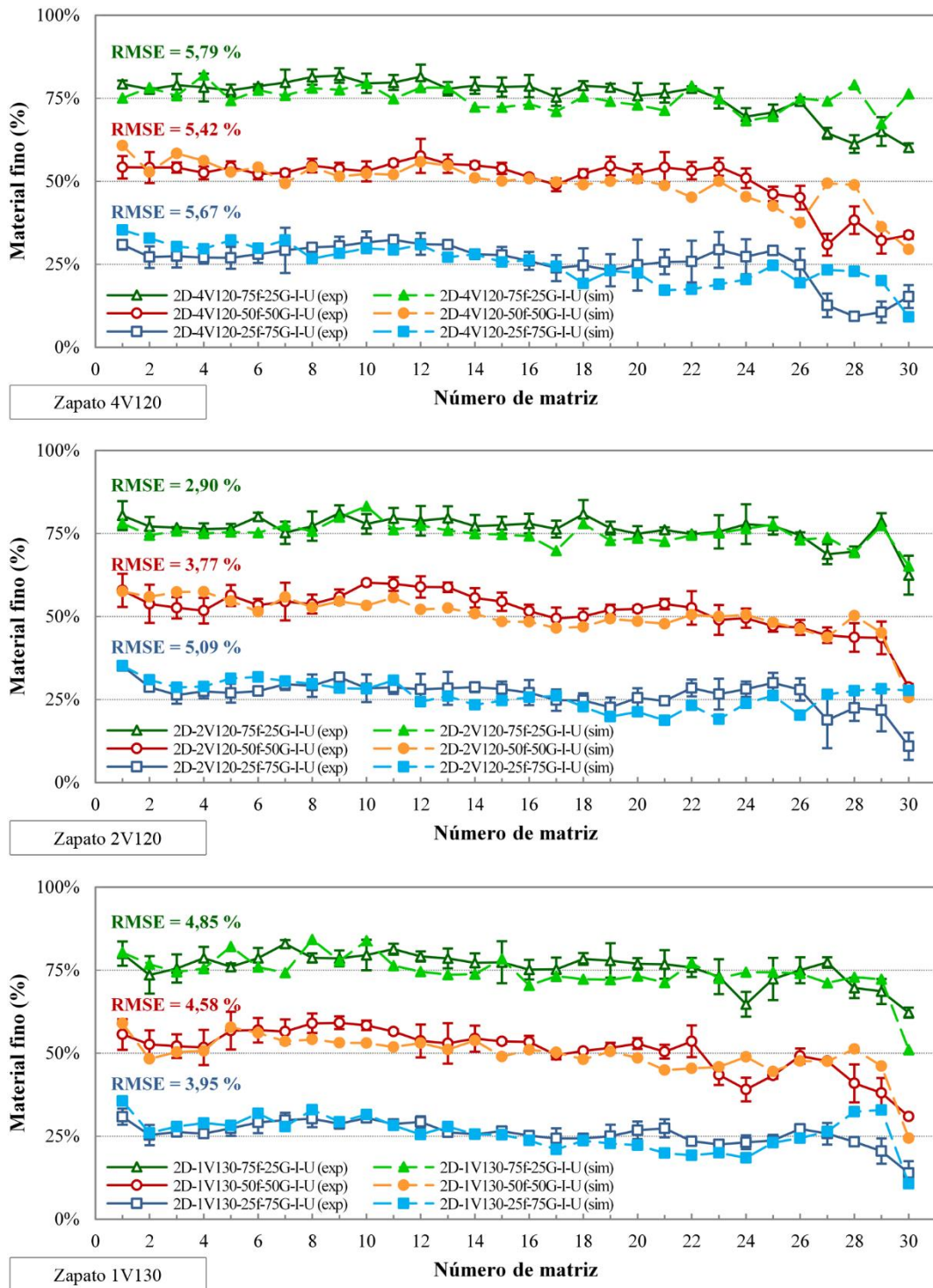


Figura 3.23. Resultados obtenidos en las configuraciones empleadas para validar los modelos de simulación con la máquina compresora alternativa [44].

3.3.2.2. Análisis de los mecanismos de segregación

Una vez validados los modelos de simulación, se emplearon las simulaciones correspondientes a las configuraciones 1-9 (véase la Tabla 3.4) para analizar los mecanismos de segregación. En la Figura 3.24 se muestra el IS obtenido en cada una de las simulaciones.

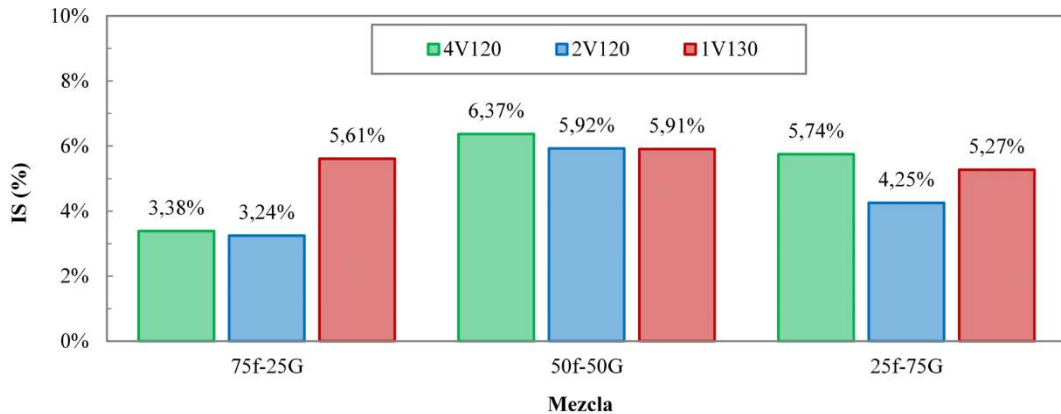


Figura 3.24. Índices de segregación obtenidos en los distintos diseños de zapato de la máquina compresora alternativa [44].

Comparando los ISs obtenidos con los distintos diseños de zapatos, se observó que, en general, el zapato *2V120* generaba menos segregación del material, independientemente de cuál fuera la mezcla empleada. Además, los IS más altos correspondieron a la mezcla *50f-50G* para todos los diseños de zapatos.

Al igual que se hizo con la máquina compresora rotativa, con el fin de explicar los índices de segregación obtenidos, inicialmente se analizó el porcentaje de material fino en distintas celdas de cada uno de los zapatos tras completar su llenado. Para comprender la distribución de la mezcla obtenida tras el llenado de los zapatos, se analizó la velocidad de las partículas durante el proceso de llenado. Una vez establecidas las causas de segregación durante el llenado, se analizó la evolución del porcentaje de material fino en las celdas de cada uno de los zapatos durante el funcionamiento de la máquina. Del mismo modo, se examinó la velocidad de las partículas durante el movimiento de los zapatos con el fin de aclarar las causas de dicha evolución.

Para analizar la distribución de la mezcla en el interior de los zapatos, se hizo una primera división del volumen del zapato en dos zonas, de modo que se diferenció entre la parte superior del zapato (zona A) y la parte inferior del mismo (zona B), dado que, a priori, el material se iba a comportar de distinta forma en cada una de las zonas debido a que la distancia entre la parte frontal y trasera de los zapatos era menor en la zona A y que en la zona B. Cada una de las zonas, a su vez se dividió en 6 partes con el propósito de tener una mayor definición de los resultados.

Capítulo 3. Segregación del material

Al igual que con la máquina compresora rotativa, los resultados de porcentaje de material fino contenido en las 12 celdas de cada zapato después de ser llenado se codificaron según un código de colores para facilitar su visualización (Figura 3.25). De este modo, se pudo observar que, inicialmente, se producía segregación de la mezcla como consecuencia del llenado de los zapatos. Además, la distribución de la mezcla después del llenado del zapato era similar en todos los diseños. Las mezclas mostraban una acumulación de partículas finas cerca de las superficies de la derecha y en la parte inferior de los zapatos (celdas coloreadas en verde oscuro o azul) y una mayor cantidad de partículas gruesas cerca de las superficies de la izquierda (coloreadas en amarillo).

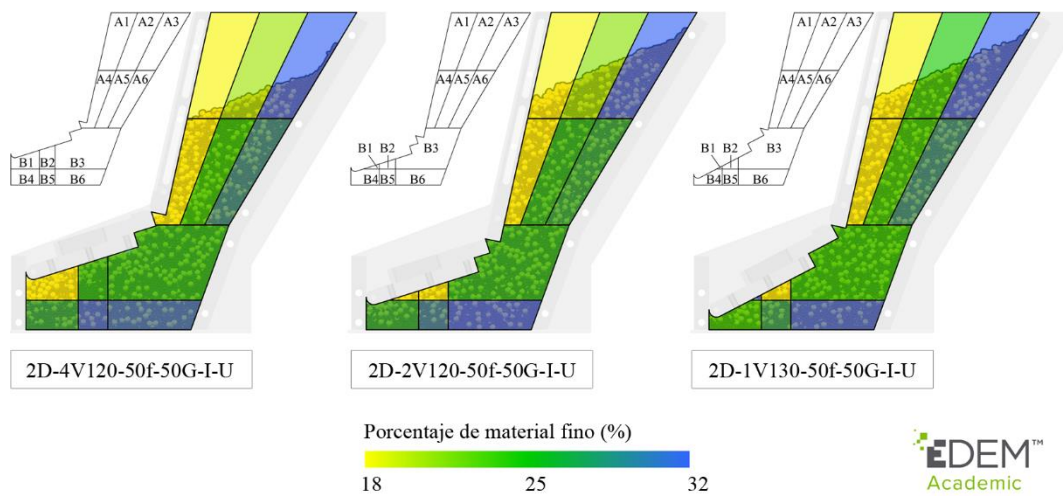


Figura 3.25. Distribución de la mezcla tras el llenado de los zapatos de la máquina compresora alternativa [44].

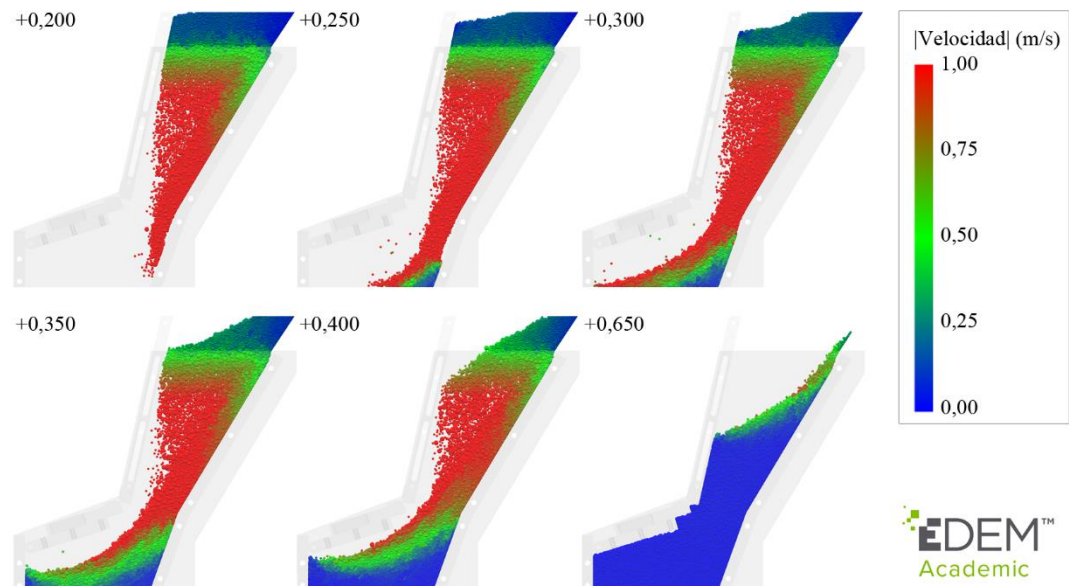


Figura 3.26. Velocidad de las partículas durante el llenado del zapato 4V120 con la mezcla 50f-50G [44].

La distribución inicial de la mezcla se pudo explicar mediante el gradiente de velocidades generado durante el llenado de los zapatos (Figura 3.26) Cuando el zapato comenzaba a llenarse, el material impactaba sobre las superficies inclinadas de la derecha. El material se deslizó sobre estas superficies hasta alcanzar la superficie de la platina, tal y como se puede observar en la imagen que muestra el material 0,2 s después del inicio del llenado (+0,200). En ese momento, algunas de las partículas quedaron atrapadas en la esquina inferior derecha (coloreadas en azul en la imagen +0,250) mientras que la mayoría continuaban deslizándose sobre la superficie de la platina (coloreadas en verde y rojo en la imagen +0,300). Su movimiento prácticamente terminó cuando las partículas tocaron la superficie de la izquierda (+0,350). Después, la mezcla caía sobre la superficie del material depositado anteriormente (+0,400) y las partículas continuaban deslizándose sobre la superficie libre durante todo el proceso. La imagen correspondiente a 0,65 s después del inicio del llenado (+0,650) muestra el gradiente de velocidades de las partículas cuando el zapato estaba casi lleno. Teniendo esto en cuenta, así como la distribución de la mezcla tras el llenado del zapato, los resultados sugirieron que la segregación era producida porque las partículas finas quedaban atrapadas cerca de donde caían, mientras que las partículas gruesas se deslizaban hacia abajo sobre la superficie libre, lo cual indicó que los mecanismos de segregación presentes durante el llenado fueron la rodadura y la filtración, tal y como ocurría en el depósito *Inclinado* de la máquina rotativa.

Para examinar el comportamiento del material durante el funcionamiento de la máquina, se calculó el porcentaje de material fino contenido en las 12 celdas de cada zapato en varios momentos (Figura 3.27). Así, se pudo observar que la segregación aumentaba como resultado del movimiento del zapato alimentador. El porcentaje de material fino en las celdas ubicadas a la derecha de los zapatos generalmente aumentaba durante el proceso, mientras que el porcentaje de material fino en las celdas de la izquierda disminuía. Esta migración de partículas finas se produjo como consecuencia del movimiento alternativo del zapato. Las partículas finas recorrían mayores distancias que las partículas gruesas porque éstas bloqueaban su propio movimiento, mientras que las partículas finas pasaban por los huecos generados entre las gruesas. Esto hizo que el porcentaje de material fino aumentase en las celdas correspondientes a la parte posterior del zapato (celdas A3, A6, B3 y B6). Aunque los zapatos se movían hacia adelante y hacia atrás, este efecto fue más pronunciado cuando los zapatos se movían hacia atrás, ya que las partículas estaban menos confinadas durante el retroceso debido a que, tras el llenado de la matriz, quedaba un espacio libre en la parte superior de la zona B (celdas B1, B2 y B3). Además, mientras la zona A contenía material, este espacio lo ocupaba principalmente la mezcla de la zona A que se encontraba a la izquierda. Por ese motivo, el porcentaje de masa fina en las celdas superiores de la zona B disminuía hasta el llenado de la matriz 10 en el caso del diseño 4V120 y hasta el llenado de la matriz 15 en los otros diseños de zapato. Este flujo de partículas de la zona A hacia la zona B facilitaba el desplazamiento de partículas finas a las celdas centrales y derechas de la zona A cuando los zapatos se movían hacia atrás. Una vez que la zona A se quedaba vacía, la presión sobre las partículas ubicadas en la zona B era menor y, como resultado, las partículas se movían con mayor libertad. Como consecuencia, la segregación de las partículas en la dirección horizontal era más evidente.

Capítulo 3. Segregación del material

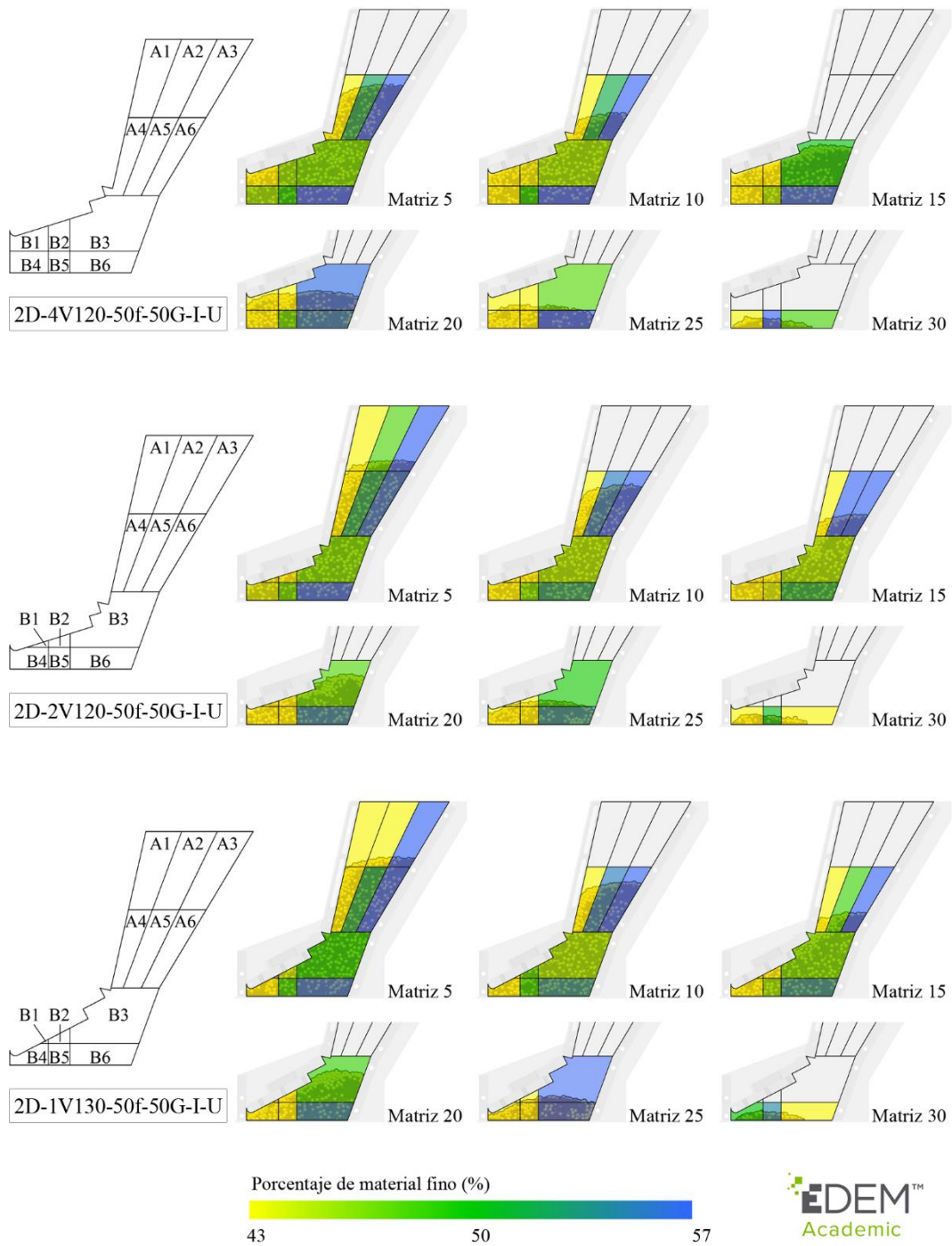


Figura 3.27. Distribución de la mezcla en los zapatos de la máquina compresora alternativa durante su funcionamiento [44].

Para comprobar que, efectivamente la segregación tenía lugar porque las partículas finas se movían con mayor libertad que las gruesas, se comparó el valor medio de la componente horizontal máxima y mínima de las velocidades de cada tipo de partícula a diferentes alturas del zapato cuando éste comenzaba a moverse hacia adelante y hacia atrás (Figura 3.28). En general, se observó que los valores extremos correspondían a las partículas finas. Esto indicó que el movimiento relativo de las partículas gruesas era más limitado que el movimiento de las partículas finas y confirmó que las partículas finas podían moverse a velocidades más altas que las partículas gruesas porque el movimiento de las partículas finas no era bloqueado por otras partículas gruesas, mientras que las partículas gruesas se bloquean entre sí. Por lo tanto, las partículas finas se movían a través de los huecos formados entre las partículas gruesas. Por otra parte, las partículas finas podían permanecer en reposo o moverse a velocidades más bajas que las partículas gruesas porque estas últimas pasaban alrededor de las partículas finas.

Además, analizando los valores de velocidad de las partículas en diferentes alturas del zapato de alimentación, se pudo distinguir entre tres secciones en las que la mezcla se comportó de distinta manera: superior, intermedia e inferior. La sección superior correspondió a la superficie libre de la mezcla. Incluía los 30 mm superiores de la mezcla. La sección intermedia correspondía al material que se encontraba entre las secciones superior e inferior. Su dimensión variaba durante el funcionamiento de la máquina. La sección inferior correspondía a la mezcla que se encontraba en la parte inferior del zapato alimentador. Consistía en los 10-20 mm inferiores de la mezcla. Como puede observarse, las partículas en la sección superior tendían a oponerse al movimiento del zapato, debido a que la presión sobre las partículas de esta zona era baja ya que no había material sobre la superficie libre. La baja presión facilitaba el movimiento relativo de las partículas dentro del zapato. En la sección intermedia, el movimiento de las partículas parecía estar limitado por la presión ejercida por el propio peso del material de la sección superior durante el avance del zapato, por lo que las partículas se movían con una velocidad similar a la del zapato. Sin embargo, durante el movimiento de retroceso, algunas partículas (ubicadas a una altura de 30-60 mm) tendían a oponerse al movimiento del zapato. Esto se debía al hueco generado en la parte superior de la zona B después del llenado de las matrices. Finalmente, las partículas en la sección inferior también tendían a oponerse al movimiento del zapato alimentador debido a la fricción entre las partículas y la superficie de la platina.

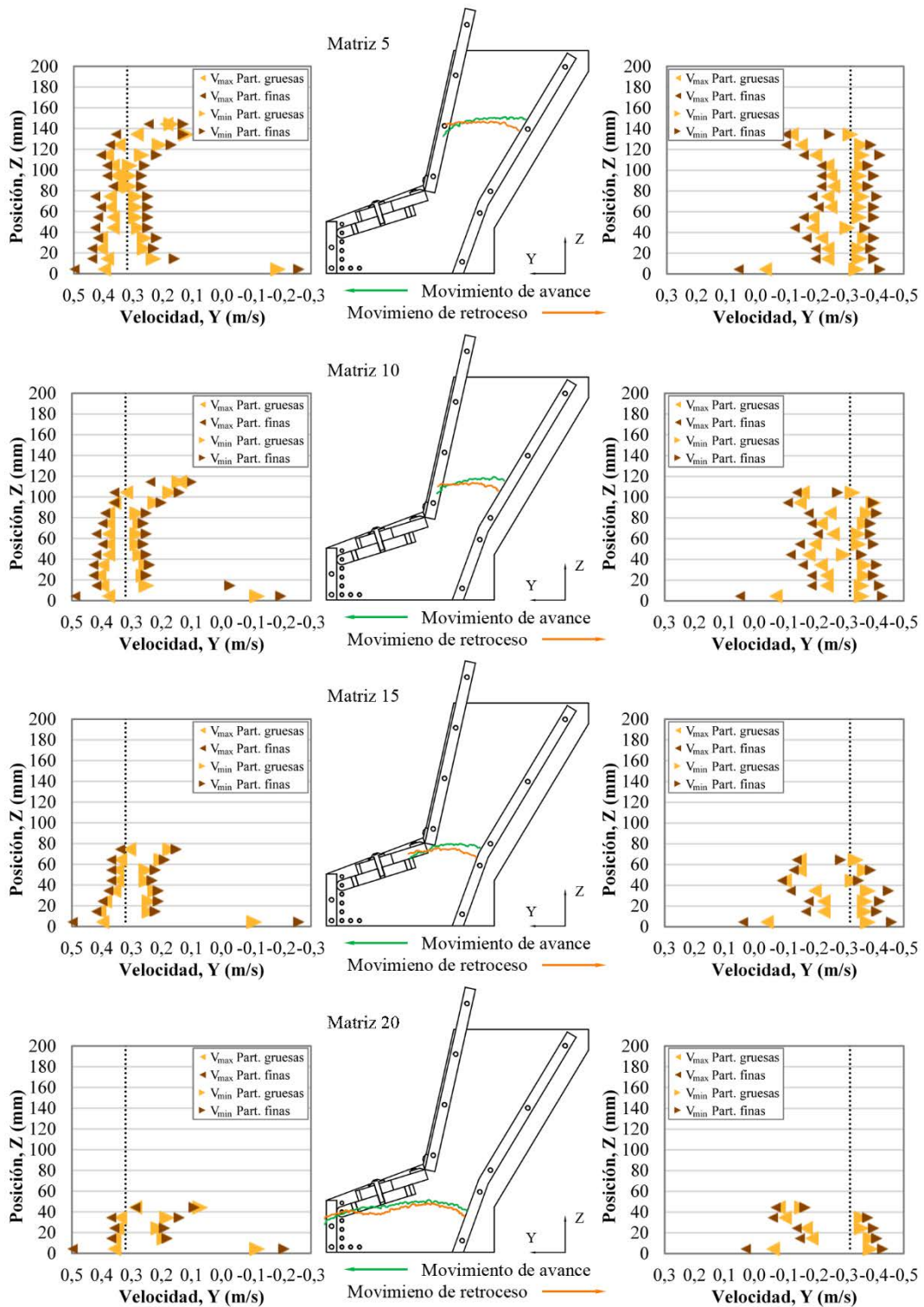


Figura 3.28. Velocidad de las partículas en la dirección del movimiento del zapato durante su avance (previo al llenado de las matrices) y su retroceso (posterior al llenado de las matrices) [44].

3.3.2.3. Reducción de la segregación

En vista de los resultados anteriores, se trató de reducir la segregación de la mezcla producida durante el funcionamiento de la máquina. Para ello, se diseñaron distintos injertos que fueron colocados en el interior de los zapatos con el propósito de reducir la segregación.

La inclusión de injertos en el interior de los depósitos de la máquina compresora rotativa como solución para reducir el índice de segregación del material también fue analizada [55]. Los injertos fueron diseñados para evitar la generación de los flujos de partículas mencionados en el apartado 3.3.1.3. Gracias al uso de injertos se logró una reducción del IS del 42% durante el funcionamiento de la máquina compresora rotativa, empleando el depósito *Inclinado* con la mezcla *25f-75G*.

En este caso, los injertos, mostrados en la Figura 3.29, fueron diseñados para evitar o reducir el efecto de la baja presión en la sección superior (injertos 1-7) y la fuerza de fricción en la sección inferior (injertos 8-15). De este modo, los injertos en la zona A del zapato pretendían aumentar el confinamiento de la mezcla (injertos 1-5) o reducir el movimiento ascendente del material que forma la superficie libre (injertos 6 -7). Alternativamente, el propósito de los injertos situados en la zona B del zapato era contrarrestar el efecto del rozamiento. Por esa razón, se colocaron diferentes obstáculos a ras de la superficie inferior del zapato (injertos 8-15).

Inicialmente, se simuló el comportamiento de cada una de las mezclas empleadas para analizar los mecanismos de segregación en cada uno de los diseños de zapato tras insertar cada uno de los injertos mostrados en la Figura 3.29. Como resultado de la combinación, en total, se realizaron 135 simulaciones. Una vez examinadas esas simulaciones y calculados los índices de segregación obtenidos en cada una de ellas, se realizaron 9 simulaciones adicionales (una por cada combinación de diseño de zapato y mezcla) en las que se introdujeron dos diseños de injertos (uno situado en la zona A del zapato y el otro situado en la zona B). En cada simulación, se modeló la combinación de los dos injertos que, por separado, habían reducido en mayor medida la segregación para cada diseño de zapato y mezcla.

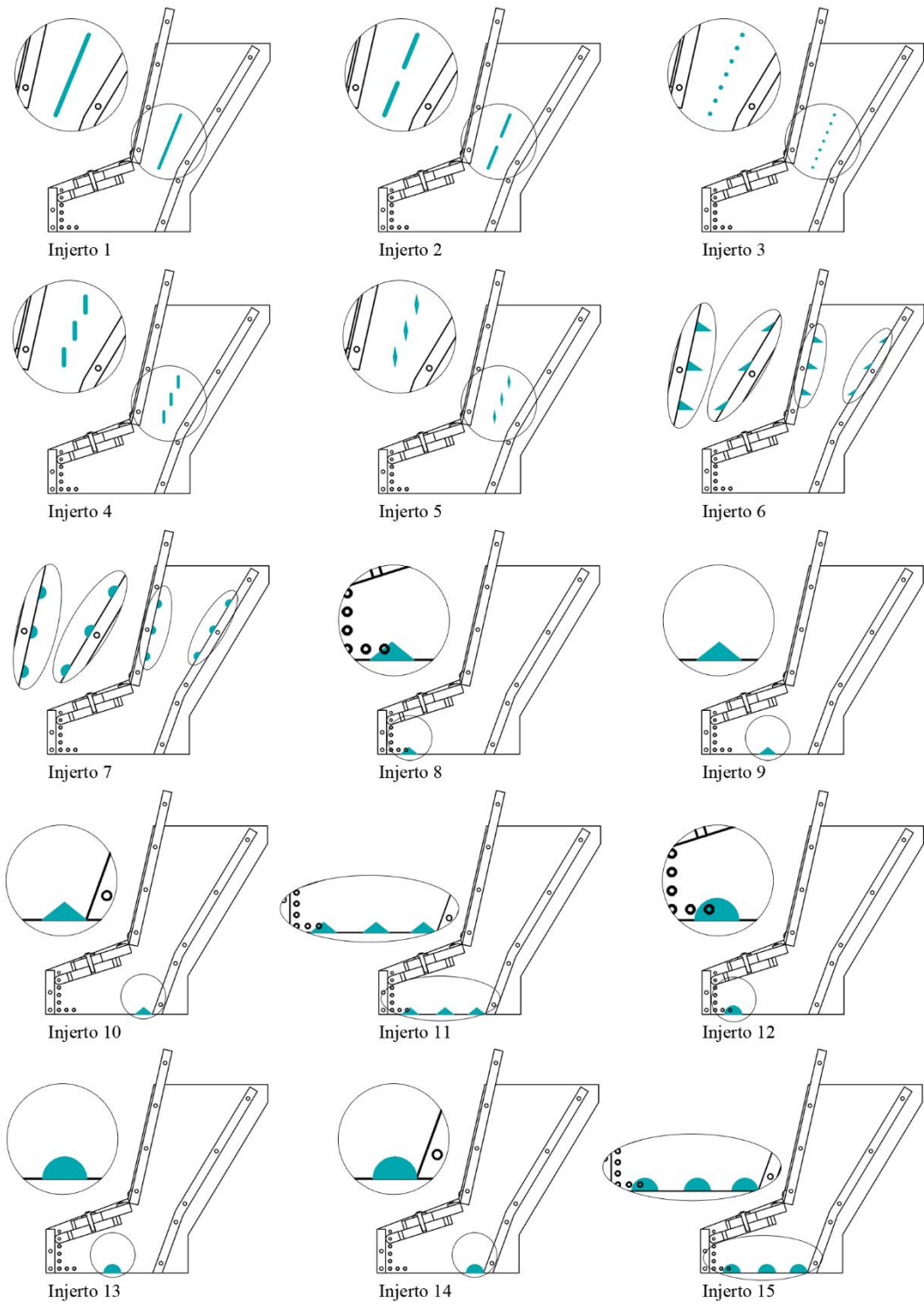


Figura 3.29. Diseños de injertos introducidos en los zapatos de la máquina compresora alternativa [44].

En la Tabla 3.5 se muestran los ISs obtenidos en las simulaciones DEM realizadas para reducir la segregación en los zapatos de las máquinas compresoras alternativas. Como se puede observar, el índice de segregación generado en cada una de las mezclas dentro de cada diseño de zapato desprovisto de injertos se redujo gracias a la presencia de alguno de los injertos colocados en la zona A o en la zona B. Por otra parte, la combinación de los dos injertos más eficaces logró la reducción de la segregación en la mayoría de los casos (excepto para el zapato 2V120 y la mezcla 25f-75G). Sin embargo, sólo en tres casos (con el zapato 4V120 y las mezclas 25f-75G y 75f-25G y con el zapato 2V120 y la mezcla 50f-50G) el IS obtenido con la combinación fue inferior que los obtenidos con los injertos parciales localizados o en la zona A o en la zona B.

Diseño de injerto		Diseño del zapato / Mezcla								
		4V120			2V120			1V130		
		25f-75G	50f-50G	75f-25G	25f-75G	50f-50G	75f-25G	25f-75G	50f-50G	75f-25G
Ninguno		5,74	6,37	3,38	4,25	5,92	3,24	5,27	5,91	5,61
Zona A	1	4,25	5,90	3,81	5,72	5,84	4,27	5,61	6,09	5,06
	2	4,22	4,70	2,98	4,62	5,61	4,09	5,46	5,75	5,19
	3	4,55	5,52	4,00	4,15	5,23	3,70	4,85	5,39	5,78
	4	4,24	5,18	3,85	4,28	4,84	2,86	3,72	4,44	4,74
	5	3,83	6,21	3,13	4,34	4,36	3,78	3,60	4,48	4,69
	6	6,11	8,29	4,32	3,45	7,83	4,21	3,79	7,57	6,60
	7	5,06	5,71	3,04	4,32	4,77	2,86	4,44	5,59	4,87
Zona B	8	4,62	5,32	3,48	4,57	4,44	2,48	4,53	4,64	3,37
	9	3,80	4,43	3,89	4,35	5,65	3,37	4,14	5,90	5,48
	10	5,14	5,56	3,53	4,42	4,85	2,80	3,94	5,62	4,72
	11	4,28	3,90	3,42	4,05	4,49	3,10	3,57	3,20	2,77
	12	4,60	5,97	4,41	4,35	4,44	4,00	3,90	4,86	3,38
	13	4,52	6,34	2,88	3,79	6,71	4,23	4,08	6,74	5,64
	14	4,72	4,71	2,40	4,92	5,82	3,95	4,04	5,64	3,79
	15	3,91	4,27	3,95	4,12	4,62	3,25	4,21	4,61	3,43
Combinado	16	3,52	4,23	2,33	4,71	3,97	3,06	4,12	3,92	3,56

Tabla 3.5. Índices de segregación obtenidos en las simulaciones DEM realizadas para reducir la segregación en los zapatos de las máquinas compresoras alternativas [44].

Atendiendo a los injertos colocados en la zona A, se dedujo que el injerto 5 era el más eficaz, puesto que fue el diseño que redujo la segregación en mayor medida en una mayor variedad de combinaciones (con el zapato *4V120* y mezcla *25f-75G*, con el zapato *2V120* y la mezcla *50f-50G* y con el zapato *1V130* y las mezclas *25f-75G* y *75f-25G*). Del mismo modo, el injerto más efectivo en la zona B fue el 11, que resultó ser el mejor para el zapato *4V120* con la mezcla *50f-50G* y para el zapato *1V130* (empleando cualquiera de las mezclas). La reducción máxima de IS utilizando los injertos combinados se alcanzó con el zapato *4V120* y la mezcla *25f-75G*. El IS disminuyó de 5,74% (sin injerto) a 3,52% (con el injerto 16), lo que supuso una reducción de aproximadamente 39%. Sin embargo, la reducción máxima de IS se obtuvo al incluir un injerto parcial en la zona B del zapato *1V130* con la mezcla *75f-25G*. El IS disminuyó de 5,61% (sin injerto) a 2,77% (con el injerto 11), lo que supuso una reducción de aproximadamente el 51%.

El efecto de los injertos fue examinado durante el llenado de los zapatos mediante la comparación de los gradientes de velocidades de las partículas cuando el zapato era llenado en presencia y en ausencia de los injertos (Figura 3.30). De este modo se pudo observar que el comportamiento de la mezcla cambiaba cuando un injerto estaba presente. En el caso mostrado en la Figura 3.30, por una parte, los rombos estrechos localizados en la zona A del zapato separaban la mezcla en dos flujos de partículas. El primer flujo contenía la mezcla que caía a la derecha del rombo superior y se deslizaba sobre la pared derecha del zapato. El otro flujo, que contenía la mezcla que caía a la izquierda del rombo superior, se desviaba levemente hacia el lado izquierdo y continuaba cayendo (véanse las imágenes +0,200 y +0,250). Las partículas que seguían al primer flujo continuaban deslizándose sobre la superficie libre de la mezcla hasta que el espacio entre los rombos y la pared derecha del zapato se llenaba (+0,300). Entonces, el material que caía a la derecha del rombo superior se unía al segundo flujo (+0,375 y +0,425). Como consecuencia, el zapato requería más tiempo para llenarse (el segundo flujo seguía activo a +0,700). Además, se observó que la pendiente de la superficie libre era mayor que la formada en el zapato sin injertos. Por otra parte, el triángulo ubicado en la parte inferior del zapato influía sobre el flujo de las partículas una vez que llegaban a la superficie de la platina. Inicialmente, el triángulo evitaba que la mezcla se deslizase sobre la superficie de la platina (+0,250). Cuando la altura del material bloqueado por el triángulo superaba su altura, la mezcla que continuaba cayendo, se deslizaba sobre el triángulo (+0,300). Una vez que este flujo de partículas traspasaba el injerto triangular y volvía a entrar en contacto con la superficie de la platina, el material se deslizaba sobre esta superficie hacia la punta del zapato hasta que alcanzaba la superficie frontal del zapato, que impedía que las partículas siguieran avanzando (+0,375). El injerto triangular también aumentó la pendiente de la superficie libre en la zona B del zapato (+0,425). Como resultado del aumento de la pendiente de la superficie libre en las diferentes zonas del zapato, se incrementó el efecto de la segregación por rodadura, lo cual indicó que el injerto resultaba desfavorable durante el llenado del depósito. Por lo tanto, dado que el valor de IS obtenido fue inferior que el alcanzado con el zapato en ausencia de injertos, se evidenció que la reducción de la segregación tuvo lugar durante el funcionamiento de la máquina.

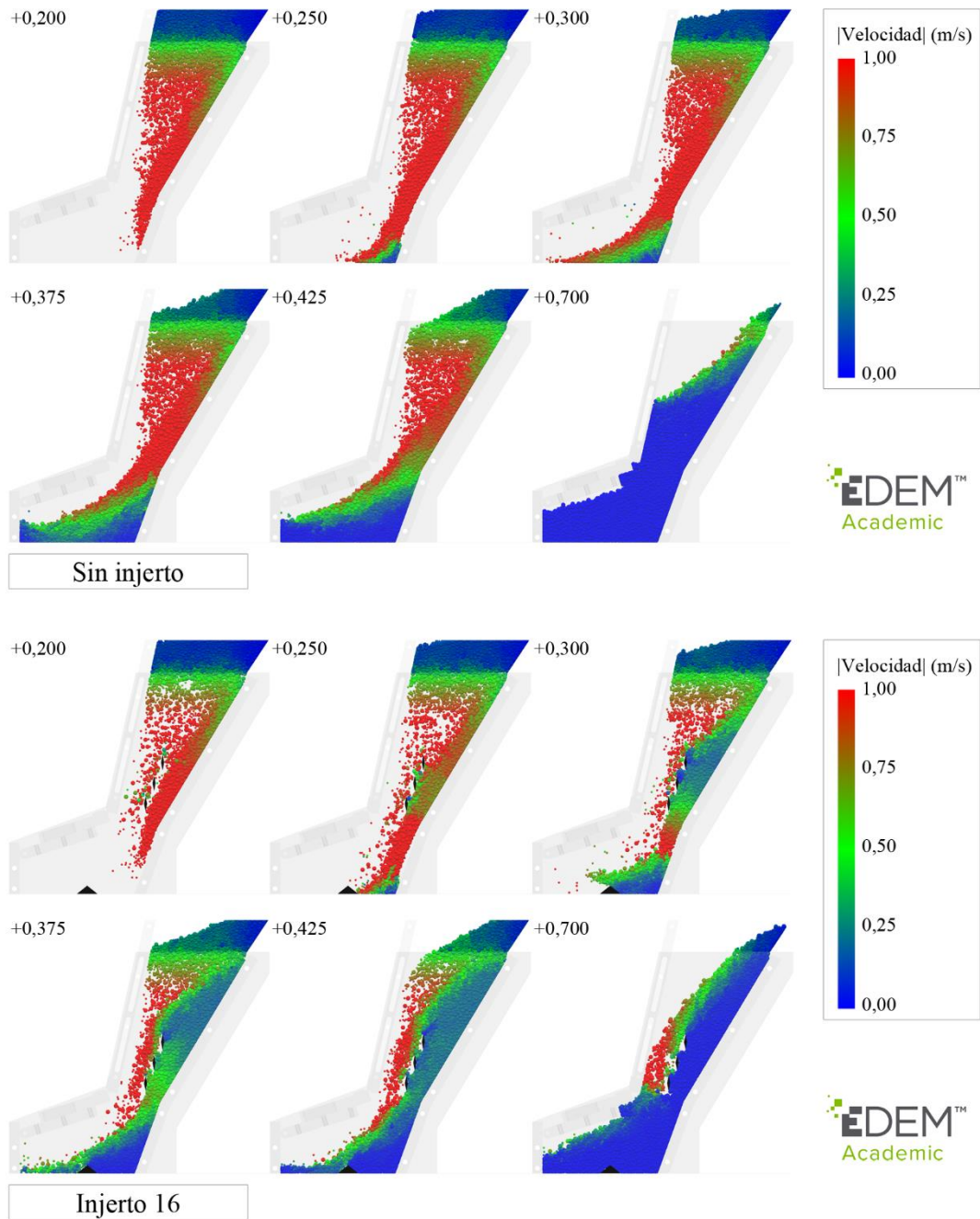


Figura 3.30. Velocidad de las partículas durante el llenado del zapato 4V120 con la mezcla 25f-75G en ausencia de injertos y con el injerto 16 [44].

Con el fin de examinar el efecto de los injertos durante el funcionamiento de la máquina compresora alternativa, se compararon los valores medios de la componente horizontal máxima y mínima de las velocidades de cada tipo de partícula a diferentes alturas del zapato, en presencia y ausencia de injertos, cuando comenzaba a moverse hacia adelante (Figura 3.31) y hacia atrás (Figura 3.32).

De este modo, se pudo ver que las partículas se comportaron de diferente manera con y sin injertos cuando los zapatos comenzaban a moverse hacia adelante. En el caso mostrado en la Figura 3.31, el injerto hizo que las partículas aumentasen sus velocidades mínimas, pero afectó muy poco a los valores máximos. Por lo tanto, la diferencia entre los valores extremos fue menor cuando se usó el injerto, por lo que el gradiente de velocidades fue menor, lo que redujo la generación de segregación. Además, se observó que las velocidades mínimas de las partículas finas fueron muy similares a las de las partículas gruesas. Por lo tanto, se evitó una acumulación de partículas finas en el lado derecho del zapato. También, gracias al injerto, se redujo la resistencia al movimiento del zapato de las partículas situadas en las secciones superior e inferior. Los injertos rómbicos aumentaron el confinamiento de las partículas a la zona A del zapato e impidieron su desplazamiento relativo. Por lo tanto, la velocidad mínima de todas las partículas que se encontraban en la zona A fue similar a la velocidad del zapato. Además, el injerto triangular empujaba las partículas que se encontraban en la parte inferior del zapato, por lo que aumentó la velocidad mínima de las partículas.

Durante el movimiento de retroceso, la diferencia entre los valores extremos también se redujo gracias a la presencia del injerto. Además, todas las partículas se movían más despacio que el zapato cuando el injerto estaba presente, como se puede ver en la Figura 3.32. Posiblemente, los injertos favorecieron que las partículas estuvieran menos confinadas después del llenado de la matriz. Además, las velocidades mínimas de las partículas finas y gruesas fueron casi iguales cuando el zapato se movió hacia atrás, lo que indicó que los injertos evitaban que las partículas finas se desplazasen a la parte trasera del zapato y se acumulasen allí. Además, las velocidades máximas de las partículas finas fueron superiores que las velocidades máximas de las gruesas, lo que indicó que algunas partículas finas sí se desplazaron hacia la parte frontal del zapato. Por lo tanto, el injerto facilitó que la mezcla, segregada durante el proceso de llenado, se volviera a mezclar.

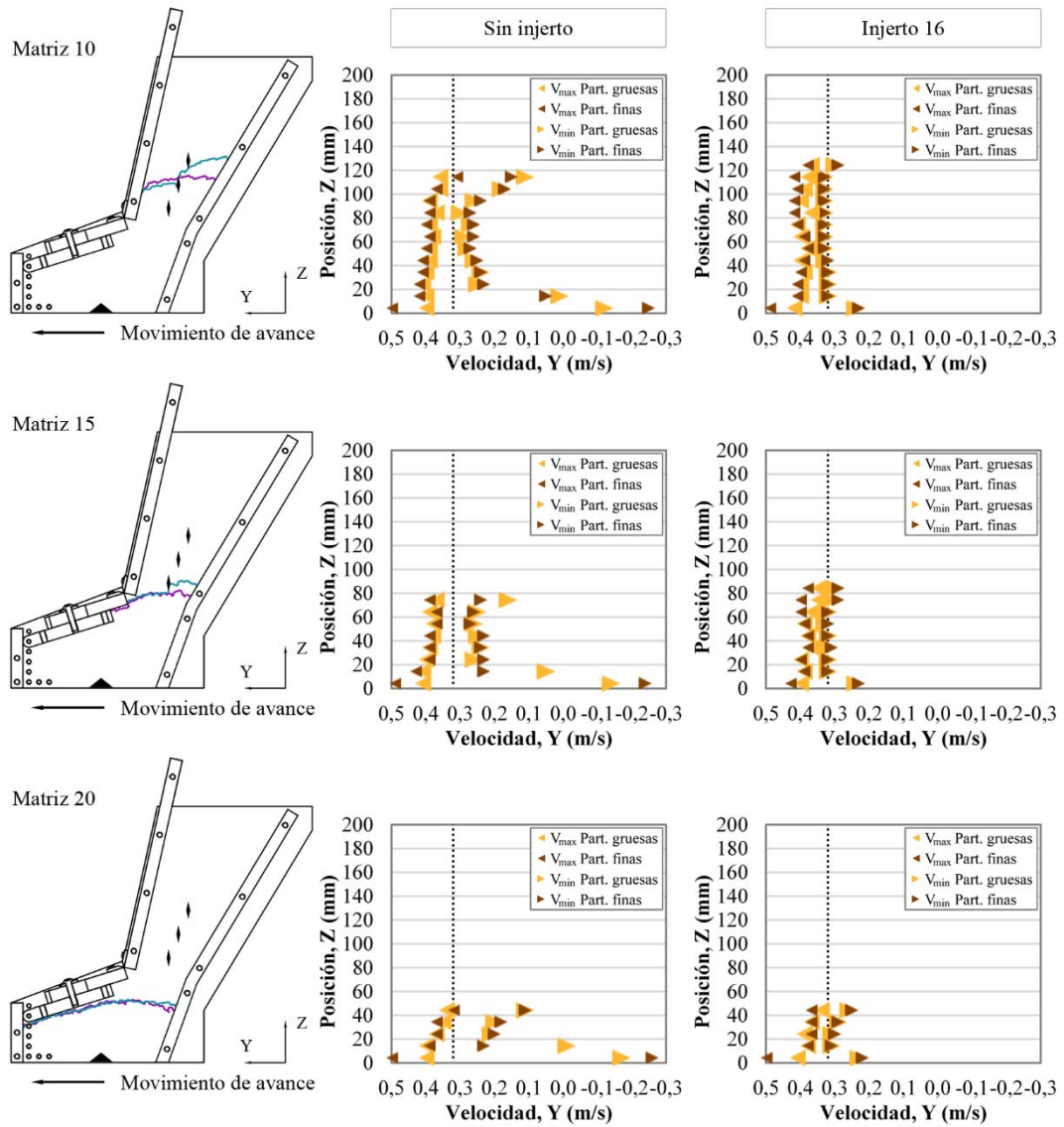


Figura 3.31. Velocidad de las partículas en la dirección y sentido de avance del zapato 4V120 en ausencia de injertos y con el injerto 16 [44].

Capítulo 3. Segregación del material

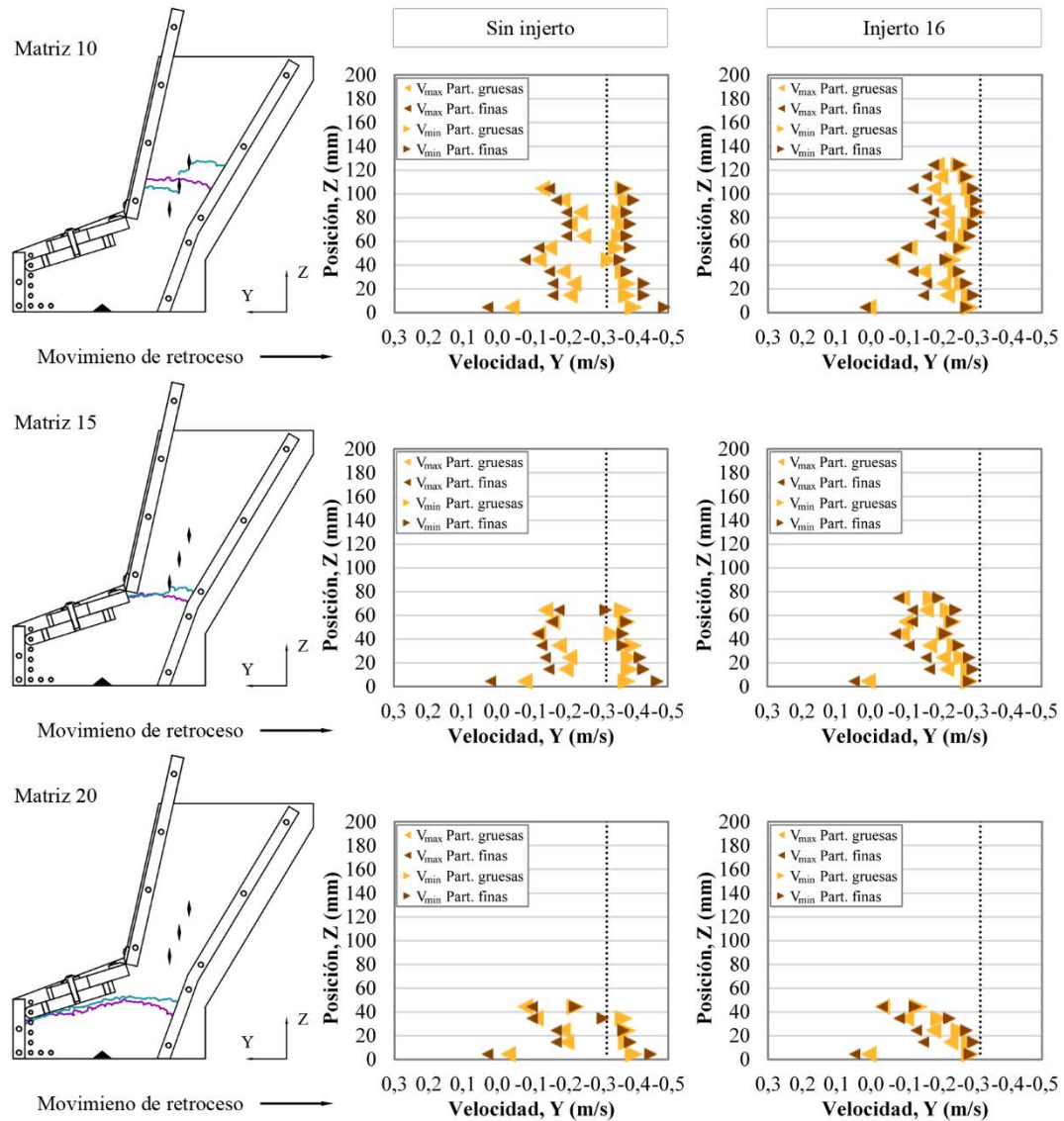


Figura 3.32. Velocidad de las partículas en la dirección y sentido del retroceso del zapato 4V120 en ausencia de injertos y con el injerto 16 [44].

3.4. CONCLUSIONES

Gracias a la simulación DEM, ha sido posible analizar los mecanismos de segregación que tienen lugar en el interior de dos máquinas compresoras, desde el llenado de sus depósitos o zapatos hasta la dosificación del material en las distintas matrices.

Con el fin de validar los modelos de simulación DEM, los resultados de las simulaciones fueron comparados con los datos obtenidos experimentalmente, tanto con un prototipo de máquina compresora rotativa como con otro prototipo de máquina compresora alternativa, logrando un RMSE inferior a 7.3% en todos los casos examinados e inferior a 6% en aquellas simulaciones empleadas para determinar las causas de la segregación producida.

También se ha comprobado que, para analizar la segregación generada en los depósitos o zapatos de las máquinas compresoras, es posible adoptar ciertas simplificaciones en las simulaciones, tales como reducir el grosor de los depósitos o zapatos y llenarlos una sola vez al inicio de la simulación. De este modo, se consigue reducir considerablemente el tiempo de simulación.

Por otra parte, tras examinar la influencia del diseño de tres depósitos de la máquina compresora rotativa y de tres zapatos de la alternativa sobre tres mezclas binarias, se ha podido determinar que existe un diseño de depósito (*Corto*) y otro de zapato (*2V120*), que segregan los materiales en menor medida, independientemente de cuál sea la mezcla empleada.

Además, se ha comprobado que, en ambos tipos de máquina, la segregación es generada, inicialmente, como consecuencia del llenado del depósito o zapato, pero también debido al movimiento de las partes móviles de cada equipo durante su funcionamiento.

Durante el llenado de los depósitos y de los zapatos, se produce segregación del material. Ésta adquiere especial importancia en aquellos casos en los que la mezcla cae sobre las paredes inclinadas de los depósitos o zapatos, ya que esta situación favorece la segregación por rodadura y por filtración. Sin embargo, cuando las paredes son verticales, las mezclas prácticamente se ven inalteradas, siendo la filtración ocurrida como consecuencia de la caída de la mezcla sobre el material asentado la principal causa de segregación.

Durante el funcionamiento, los mecanismos de segregación que tienen lugar en cada una de las máquinas difieren debido a que el funcionamiento de ambas es totalmente distinto.

- ✿ En la máquina compresora rotativa, se ha podido distinguir el tipo de flujo generado durante el llenado de las matrices en cada uno de los depósitos, que fue másico en el depósito *Corto*, mientras que en los diseños *Largo* e *Inclinado* se produjo un flujo de conducto. Este es uno de los factores determinantes en el índice de segregación generado, ya que el flujo másico permite un movimiento uniforme de las partículas, a diferencia de lo que ocurre en los flujos de conducto, donde se generan gradientes de velocidades que facilitan la segregación del material.

Por otra parte, como consecuencia del movimiento de la platina, algunas partículas situadas en la parte inferior del depósito son arrastradas en la misma dirección y sentido del movimiento de las matrices. Este flujo de partículas, al mismo tiempo, genera un flujo con trayectoria circular, cuya localización y tamaño, afecta en diferente medida la segregación generada.

- ✿ En las máquinas compresoras alternativas, la segregación que tiene lugar durante su funcionamiento es consecuencia del movimiento del zapato. Las partículas situadas en el interior del zapato se mueven con él, pero no lo hacen a la misma velocidad ya que tienen cierta libertad de movimiento. Además, dentro de la mezcla, las partículas finas adquieren diferentes velocidades que las gruesas ya que las finas pueden moverse entre los huecos producidos entre las gruesas, de manera que, en ocasiones, las partículas gruesas ven limitado su movimiento, mientras que las finas pueden adquirir mayor velocidad y, en otros casos, las partículas finas pueden quedar quietas mientras que las partículas gruesas las rodean. Las zonas donde es mayor la diferencia de velocidad entre las partículas finas y las gruesas son la superficie libre de la mezcla y la parte inferior del zapato.

Finalmente, una vez conocidos los mecanismos de segregación existentes, se ha propuesto una solución que permite la reducción de la segregación, que consiste en la colocación de uno o varios injertos en el interior de los depósitos y de los zapatos. De este modo, gracias a la simulación DEM, se ha verificado su efectividad, dado que se ha conseguido reducir la segregación en todas las configuraciones analizadas, logrando reducir a la mitad la segregación generada en una de ellas.

Capítulo 4

Compactación del material granular

Este capítulo trata la segunda unidad temática de la tesis: el proceso de compactación de los materiales granulares.

En primer lugar, se hace una introducción sobre el proceso de compactación de los materiales granulares, incidiendo en los factores que influyen en las características del comprimido obtenido y en los defectos de los comprimidos que se producen con mayor frecuencia. Tras dicha introducción, se expone la metodología seguida, en la que se presentan los materiales y equipos utilizados para realizar el análisis experimental, así como los modelos de simulación generados y el proceso seguido para validarlos. Finalmente, se presentan los resultados obtenidos y las principales conclusiones.

4.1. INTRODUCCIÓN

La compactación es un proceso mediante el cual un material granular es consolidado como resultado de la aplicación de presión. Aunque existen distintos métodos de compactación, en las máquinas compresoras, se produce una compactación uniaxial del material contenido en una cavidad (matriz) gracias a la acción de uno o varios punzones que aplican presión en la dirección de sus ejes. Si la fuerza es aplicada por dos punzones se denomina compactación uniaxial de doble efecto. Por el contrario, si un único punzón comprime el material contra la base de la matriz, la compresión uniaxial es de simple efecto.

Independientemente de que sea de simple efecto o de doble efecto, el proceso de compactación uniaxial puede dividirse en las siguientes etapas [56]:

- ❁ **Reorganización.** Al inicio del proceso, las partículas se reorganizan, de forma que éstas van rellenando grandes poros y, por lo tanto, el volumen inicial del material va disminuyendo a la vez que se incrementa el número de contactos entre partículas.
- ❁ **Empaquetamiento.** Al seguir aplicando presión, las partículas comienzan a aglomerarse y se forman estructuras más estables. Como resultado, la porosidad disminuye.
- ❁ **Deformación elástica.** Las partículas ya consolidadas sufren deformación elástica y cambian de forma, de manera que el área de contacto entre las partículas aumenta a la vez que disminuye el volumen del material. Dentro de esta etapa, el comprimido recuperaría la forma alcanzada durante el empaquetamiento en el caso de que cesara la fuerza aplicada.
- ❁ **Deformación plástica.** Conforme se incrementa la fuerza, se reduce el volumen del comprimido como consecuencia de la deformación plástica de las partículas (en el caso de que éstas sean maleables) o de su fragmentación (en el caso de que muestren un comportamiento frágil) y la reorganización de los fragmentos obtenidos. Como resultado, la densidad del comprimido se incrementa.

Teniendo en cuenta el comportamiento de las partículas en cada una de las etapas anteriores, es evidente que tanto el proceso de compactación como las propiedades de los comprimidos dependen de las propiedades de los materiales granulares, como el tamaño de las partículas, su forma, su ángulo de reposo, su humectabilidad, etc. Por eso, es común añadir una serie de aditivos (aglutinantes, lubricantes, etc.) al material original para modificar algunas de sus propiedades.

Además de los materiales, otros factores que influyen en el resultado son el diseño de los punzones y matrices y las condiciones del proceso de compactación. Dentro de estas últimas, cabe señalar lo importante que es seleccionar correctamente la fuerza y la velocidad de compactación, ya que son los principales parámetros del proceso.

Una incorrecta selección de los materiales o de las condiciones del proceso de compactación o un diseño inadecuado de los útiles pueden generar diferentes defectos en los comprimidos, entre los que destacan:

- ❁ **Decapado (capping).** Consiste en una fractura en la parte superior del comprimido y la siguiente separación entre esa fracción superior (capa) y el cuerpo de comprimido. La fractura suele generarse porque el aire atrapado en el material durante la fase de compresión no es liberado durante el proceso. Por lo tanto, cuanto mayor es la velocidad de aplicación de carga, mayor es la probabilidad de que se produzca este defecto, ya que el tiempo de permanencia del punzón es menor y, por lo tanto, el aire dispone de menos tiempo para liberarse. La aparición de este defecto también puede deberse a una formulación errónea del material (demasiado material fino, humedad demasiado baja, poco aglutinante, etc.) o al diseño y estado de los punzones (geometría inadecuada, mal acabado superficial, etc.), de modo que se debe revisar el perfil granulométrico y los aditivos utilizados, así como el estado de los punzones y matrices.
- ❁ **Laminado (lamination).** Consiste en una fractura del comprimido en cualquier parte que no sea la superior y suele deberse a una compresión excesiva del comprimido. También puede producirse porque el material contenga partículas ligeras o finas y no se comprima bien (no haya una buena unión entre las partículas). Para prevenir este problema, debe reducirse el grosor del comprimido. En el caso de que el defecto sea causado por las características del material, se debe aumentar el tiempo de exposición para permitir que las partículas se unan.
- ❁ **Agrietado (cracking).** Consiste en la formación de pequeñas fracturas en las caras superior e inferior del comprimido como consecuencia de la rápida expansión del comprimido, especialmente cuando se emplean punzones cóncavos. También se puede deber a que el material esté excesivamente seco o que el material tenga una porción de material fino demasiado pequeña. Por lo tanto, además de verificar el diseño del comprimido, puede resultar útil añadir partículas finas, aumentar la humedad o incluir un aglutinante.
- ❁ **Pegado (sticking).** Consiste en la adhesión del material en la pared de los punzones o de las matrices. Normalmente es debido a un exceso de humedad del material, a un exceso de aglutinante o a una incorrecta lubricación. También puede deberse a una aplicación deficiente de fuerza. Para evitarlo, además de revisar la formulación del material, se puede aumentar la presión o reducir la velocidad de compactación.
- ❁ **Picado (picking).** Consiste en la adhesión del material en los grabados del punzón utilizados para estampar logotipos o caracteres. Este defecto puede deberse a las mismas causas que favorecen el pegado o a deficiencias en el diseño del grabado o al mal estado superficial de los punzones, de modo que, además de revisar la formulación del material y reducir la fuerza, también se debe verificar el estado de los punzones.

4.2. METODOLOGÍA

Los trabajos de investigación relativos a la simulación del proceso de compactación se han desarrollado siguiendo el proceso descrito a continuación.

Con el propósito de modelar el proceso de compactación mediante dos programas de simulación DEM distintos y verificar su capacidad para reproducir fielmente la realidad, en primer lugar, se realizó un estudio con el objeto de determinar los modelos de contacto equivalentes en ambos programas de simulación, en el cual se hicieron varias simulaciones con partículas con propiedades distintas a las reales (mayor tamaño y menor módulo de elasticidad). De este modo, se consiguió reducir el tiempo requerido para completar las simulaciones. Además, mediante las mismas simulaciones, se obtuvieron los parámetros de la simulación óptimos para modelar el proceso de compactación.

Una vez determinados cuáles eran los modelos de contacto equivalentes en ambos simuladores DEM, se generaron nuevos modelos mediante los cuales se analizó la capacidad de reproducir el proceso de compactación de una mezcla de dos materiales refractarios: magnesia (MgO) y alúmina (Al_2O_3). Inicialmente, se realizó un análisis preliminar de los modelos de contacto en el que se examinó la influencia de tres parámetros sobre los resultados. Los parámetros examinados fueron el módulo de elasticidad de las partículas (E), la densidad de energía de cohesión (CED) y el diámetro de las partículas de Al_2O_3 (D), mientras que los resultados analizados fueron la fuerza aplicada por el punzón (F), la porosidad del comprimido (P) y su calidad morfológica (SQC). Para ello, se planteó un diseño de experimentos (DOE) que comprendió 15 simulaciones en las que se combinaron tres niveles de cada uno de los factores (E, CED y D). La evaluación de los resultados obtenidos de las simulaciones de este análisis preliminar permitió determinar los parámetros más influyentes, que resultaron ser E y CED.

Tras el análisis preliminar, se aplicó un segundo DOE formado por 9 simulaciones mediante las cuales se examinaron tres niveles de cada uno de los dos parámetros más influyentes. Los resultados de estas simulaciones, además de permitir conocer cómo y en qué medida afectan los dos parámetros analizados (E y CED) sobre los resultados (F, P y SQC), permitieron obtener las ecuaciones de calibración de los modelos de simulación mediante su comparación con los resultados obtenidos experimentalmente.

Finalmente, tras hacer una primera calibración de los modelos empleando las ecuaciones obtenidas, se hicieron nuevas simulaciones en las que se modelaron distintos tamaños de partícula de Al_2O_3 (D) con el fin de reducir la desviación entre los resultados de las simulaciones y los datos experimentales. De este modo, se completó la validación de los modelos de simulación.

4.2.1. DETERMINACIÓN DE LOS MODELOS DE CONTACTO EQUIVALENTES

Las simulaciones DEM realizadas para analizar el proceso de compactación se llevaron a cabo en dos programas de simulación distintos: EDEM® 2.7.2 y LIGGGHTS-PUBLIC 3.3.1®. EDEM® es un programa comercial que incluye una interfaz de usuario para generar el modelo, ejecutar la simulación y visualizar los resultados. Por el contrario, LIGGGHTS® es un simulador de código abierto que permite la generación del modelo mediante código y su ejecución. Sin embargo, es necesario emplear otra herramienta para visualizar los resultados. Por ese motivo, el post-procesado de las simulaciones lanzadas en LIGGGHTS fue realizado mediante PARAVIEW 4.4.0.

Inicialmente, se emplearon los modelos de contacto *Linear cohesión* en EDEM y *Simplified Johnson-Kendall-Roberts (SJKR)* y *Modified Simplified Johnson-Kendall-Roberts (SJKR2)* en LIGGGHTS para determinar cuáles de ellos eran los equivalentes en ambos simuladores DEM. En todos ellos, la fuerza de cohesión es calculada como una fuerza normal proporcional al área de contacto entre partículas, tal y como se indicó en el apartado 2.2.

En esas primeras simulaciones, se empleó una mezcla de dos materiales en la siguiente proporción: 80% en masa del material 1 y 20% en masa del material 2. El tamaño medio de partícula de cada componente fue de 2,1 mm y se emplearon tres distribuciones granulométricas distintas (véase la Figura 4.1). De este modo, se pudo analizar el efecto de la distribución de tamaño de partícula (PSD). En la primera PSD analizada, el tamaño de todas las partículas era el mismo (MP). En la segunda PSD, se mantenía constante la proporción en masa de cada tamaño de partícula (UD). Finalmente, el tamaño de las partículas seguía una distribución normal (ND) en la tercera PSD.

Con el fin de simular la compactación de esos materiales, se modelaron las geometrías correspondientes a dos punzones y una matriz, de manera que el conjunto permitía formar una cavidad en su interior de 25 mm de alto y 22 mm de diámetro. Las geometrías fueron creadas en un programa de diseño (CAD) y exportadas en formato STL utilizando distintos valores de tolerancia. De este modo, cuanto menor era la tolerancia empleada, las geometrías se asemejaban más a piezas cilíndricas, mientras que éstas se transformaban en prismas cuyo número de caras era inferior cuanto mayor lo era la tolerancia, tal y como se puede observar en la Figura 4.2.

Capítulo 4. Compactación del material granular

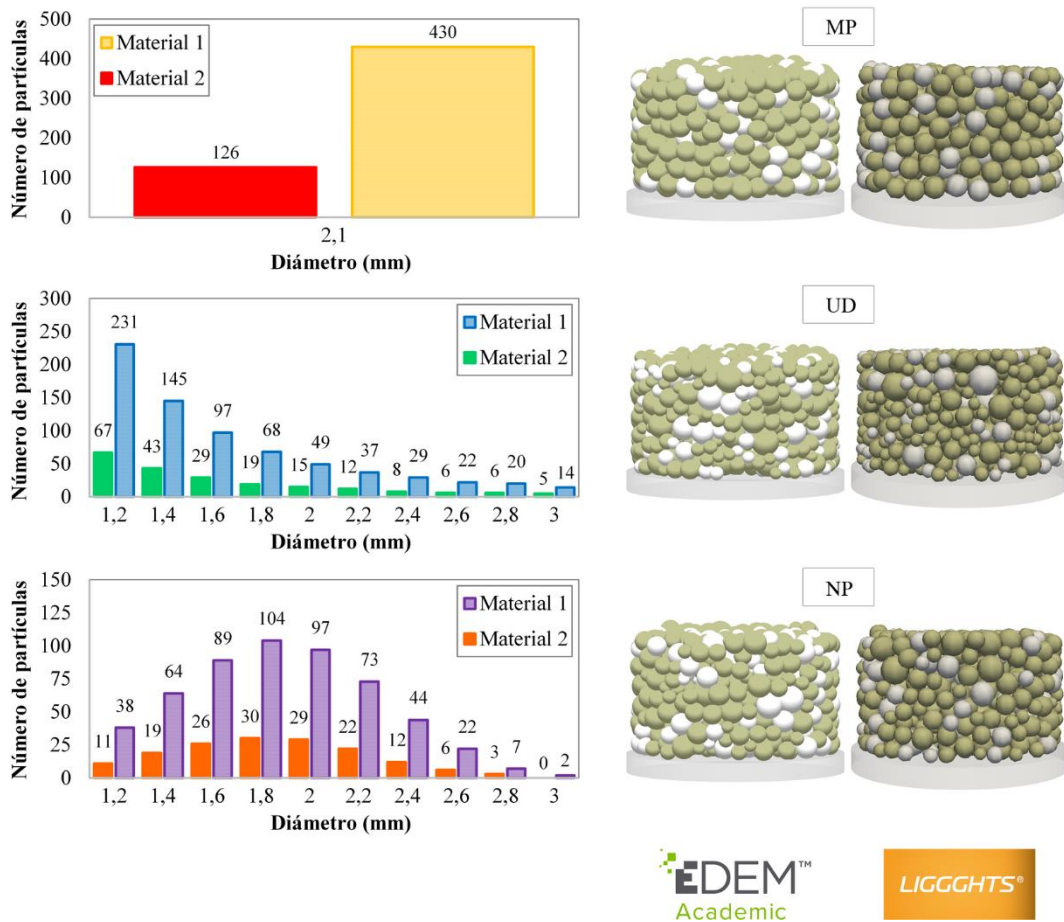


Figura 4.1. Materiales empleados en las simulaciones de compactación para determinar los modelos de contacto equivalentes.

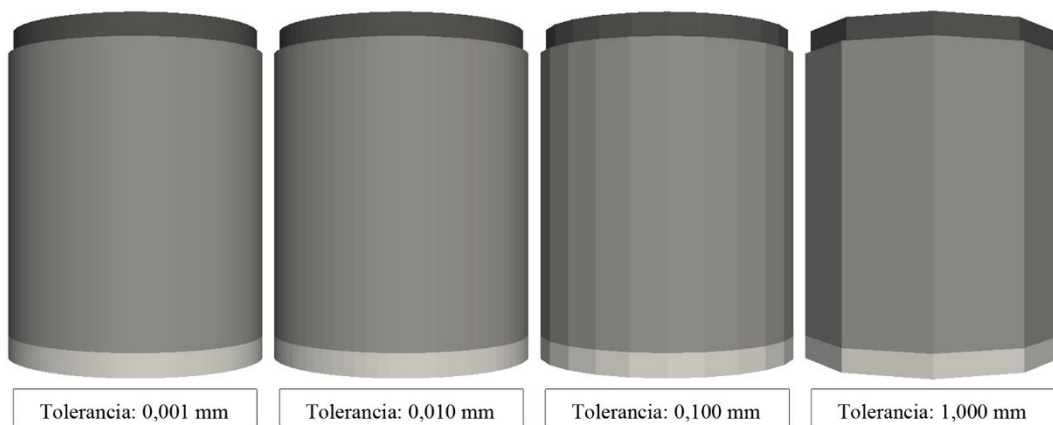


Figura 4.2. Tolerancias de conversión de las geometrías empleadas en las simulaciones de compactación para determinar los modelos equivalentes.

Como además se quería determinar el valor óptimo de la velocidad de aplicación de la fuerza de compactación, se generaron distintas dinámicas del punzón superior. En todas ellas, tras generar las partículas en el interior de la cavidad, el punzón comenzaba a moverse hacia abajo a una velocidad constante hasta situarse a 8 mm de separación respecto del punzón inferior, alcanzando la máxima fuerza aplicada. A continuación, el punzón superior ascendía a la misma velocidad hasta separarse del comprimido. Finalmente, se eliminaban las geometrías correspondientes a la matriz y al punzón superior y se simulaban 0,05 s adicionales con el fin de determinar la calidad del comprimido obtenido. El proceso simulado se puede ver en la Figura 4.3.

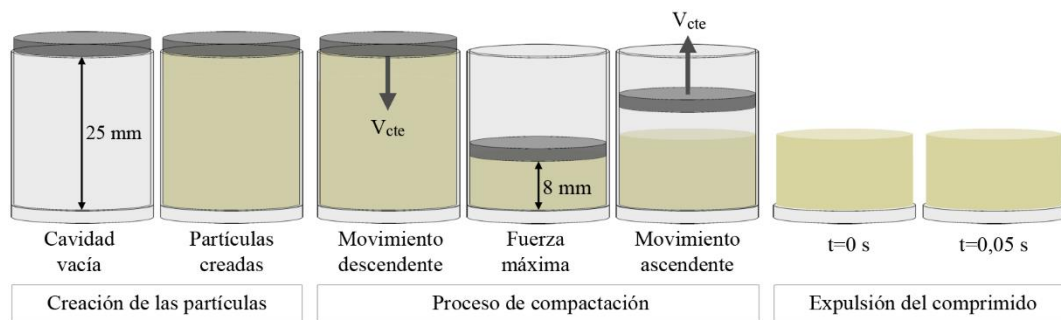


Figura 4.3. Proceso de compactación simulado para determinar los modelos equivalentes.

Por lo tanto, mediante las simulaciones realizadas con el objeto de determinar los modelos de contacto equivalentes en EDEM y LIGGGHTS, se pudieron comparar los resultados obtenidos en cada uno de los modelos de contacto, pero además se pudo examinar la influencia de algunos parámetros como la PSD, la tolerancia de conversión de las geometrías o la velocidad del punzón. Además, como punto de partida, se realizó un estudio para determinar el máximo timestep que se podía emplear para analizar el proceso de compactación empleando los modelos de contacto seleccionados.

En todas las simulaciones, se analizaron y compararon los valores de fuerza máxima aplicada por el punzón y el porcentaje de contactos eliminados al final de la simulación (mediante el cual se puede estimar si un comprimido mantenía su forma o se desmenuzaba al retirar la matriz), así como el coste computacional de las simulaciones.

4.2.2. SIMULACIÓN DE UN SISTEMA REAL

4.2.2.1. Análisis experimental

Con el fin de realizar los ensayos de compactación de la mezcla de los materiales refractarios se adaptó una máquina de ensayo triaxial. Ésta quedó formada por la estructura y el sistema de control de la máquina original, un conjunto formado por un punzón inferior, una matriz y un punzón superior, y un sensor que medía la fuerza aplicada por el punzón superior (véase la Figura 4.4).

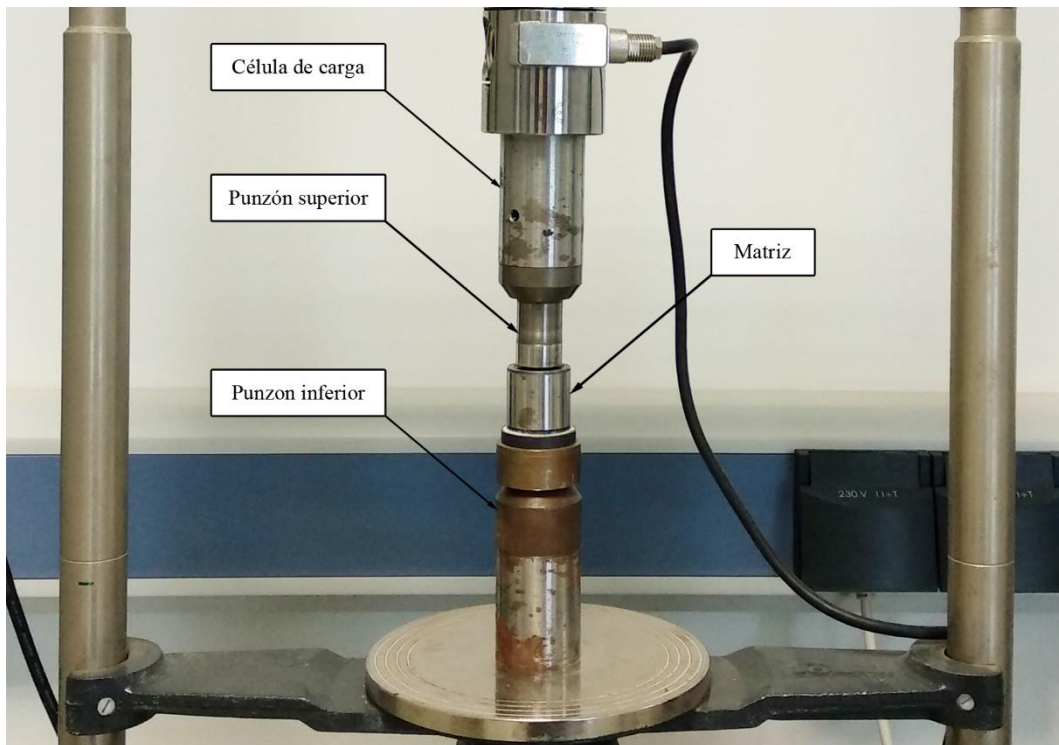


Figura 4.4. Equipo de compactación empleado en los experimentos.

Al principio de cada ensayo, la matriz y el punzón inferior eran ensamblados, de manera que se formaba una cavidad cilíndrica de diámetro 22,05 mm y altura 11 mm. Después, se introducían 9,13 g de la mezcla del material en la cavidad y, una vez asentado el material, el punzón superior, inicialmente situado a 20 mm sobre el punzón inferior, comenzaba a descender a una velocidad de 1 mm/min. El movimiento descendente del punzón superior paraba cuando la distancia entre ambos punzones era de 8 mm. A continuación, comenzaba a ascender a 25 mm/min hasta alcanzar su posición inicial. Finalmente, se retiraba la matriz y el comprimido era expulsado. En la Figura 4.5 se muestran fotografías tomadas durante el proceso. Durante el funcionamiento de la máquina, el sensor medía la fuerza aplicada por el punzón superior y el desplazamiento del punzón superior era calculado a partir de la velocidad del punzón y del tiempo transcurrido.

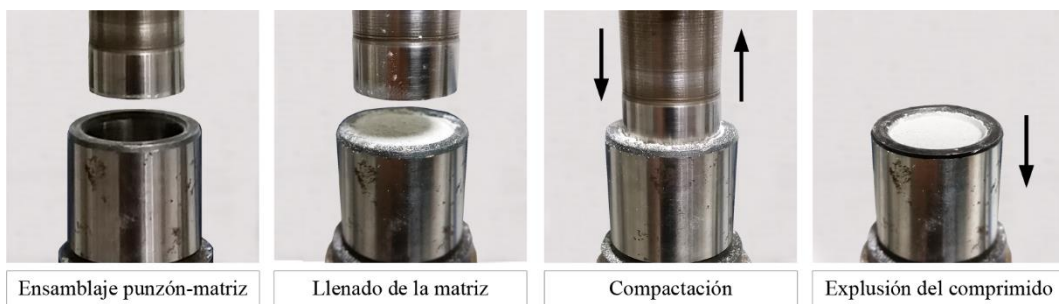


Figura 4.5. Proceso de compactación realizado durante el análisis experimental.

Los materiales utilizados fueron magnesia (MgO) y alúmina (Al_2O_3), que fueron mezclados en proporción 80% - 20% (en masa), respectivamente. En la Figura 4.6 se presentan muestras de cada material. El tamaño de las partículas de Al_2O_3 era inferior a $45 \mu\text{m}$, mientras las partículas de MgO eran de diámetro igual o inferior a 3 mm. Su granulometría, mostrada en la Figura 4.7, fue determinada mediante un ensayo granulométrico utilizando un equipo vibrador.

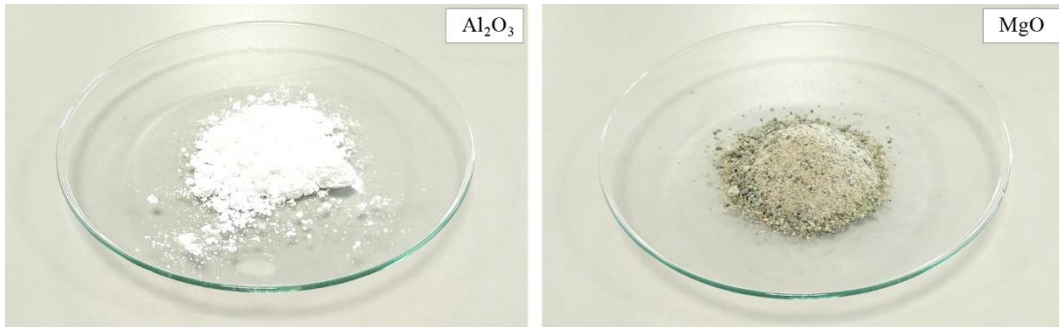


Figura 4.6. Materiales empleados en el análisis del proceso de compactación.

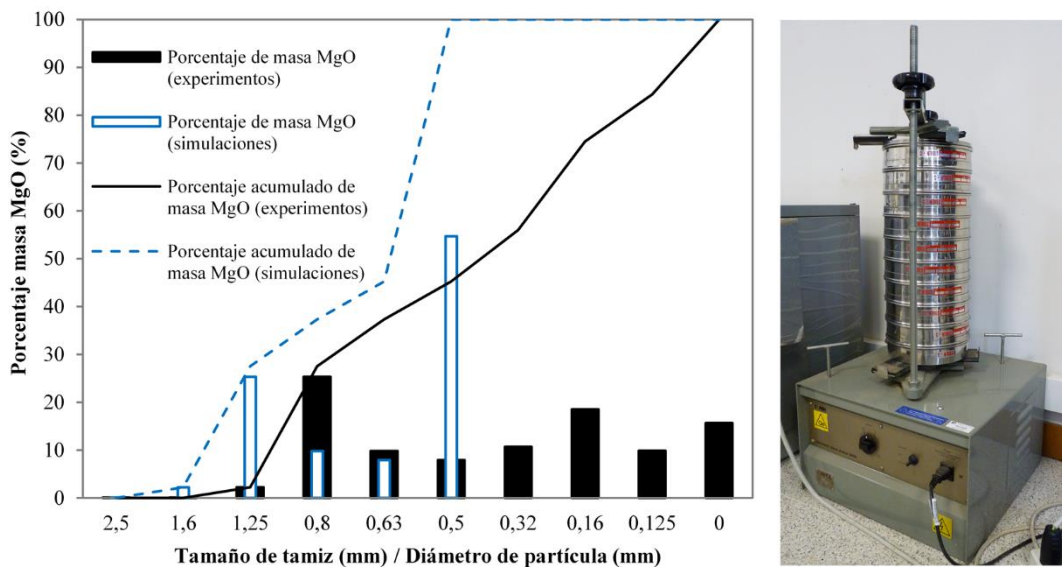


Figura 4.7. Curva granulométrica de la magnesia (izquierda) y equipo vibrador (derecha).

4.2.2.2. Simulación DEM

Las simulaciones DEM se llevaron a cabo en los dos mismos programas de simulación, EDEM[®] 2.7.2 y LIGGGHTS-PUBLIC 3.3.1[®]. En este caso, dado que ya se había determinado cuáles eran los modelos de contacto equivalentes en ambos programas, únicamente se utilizaron los modelos *Linear cohesión* en EDEM y *Modified Simplified Johnson-Kendall-Roberts (SJKR2)* en LIGGGHTS. El timestep empleado en todas las simulaciones fue del 10% del timestep de Rayleigh, ya que había resultado ser el valor óptimo de simulación.

Con el fin de reproducir los ensayos de laboratorio, se modelaron los dos materiales refractarios. En el caso de la magnesia (MgO), se generó un conjunto de partículas con tamaños de partícula comprendidos entre 0,5 y 3 mm. Para definir la distribución de partículas, se partió de la curva granulométrica obtenida experimentalmente y se hicieron algunas simplificaciones. Se consideró que todas las partículas contenidas en cada uno de los tamices eran del tamaño de la malla del tamiz. Además, la masa de todas las partículas contenidas en los tamices de tamaño de malla 0,5 mm o inferior fue simulada con partículas de 0,5 mm de diámetro. La diferencia entre la granulometría real de MgO y la simulada se puede observar en la Figura 4.7. Por el contrario, dado que el diámetro de las partículas de alúmina era muy pequeño (45 μm), este material fue simulado con partículas del mismo tamaño, utilizando, inicialmente, partículas de diámetro 0,3, 0,4 y 0,5 mm. Con estas medidas se trató de reducir el coste computacional de las simulaciones. Sin embargo, finalmente, se simularon partículas de Al_2O_3 con tamaños inferiores: 0,25, 0,20 y 0,15 mm. Al igual que el tamaño de las partículas de Al_2O_3 , el módulo de elasticidad de los materiales también se varió desde 250 hasta 3625 MPa en las distintas simulaciones con el objeto de evaluar su repercusión sobre los resultados. Del mismo modo, se emplearon distintos valores de densidad de energía de cohesión (desde $1 \cdot 10^6$ hasta $7 \cdot 10^6$ J/m²).

Al igual que en las simulaciones realizadas con el propósito de determinar los modelos de contacto equivalentes, se modelaron las geometrías correspondientes a los punzones y la matriz y se exportaron en formato STL utilizando una tolerancia de 0,01 mm, correspondiente al valor óptimo obtenido anteriormente. En este caso, la cavidad formada por el conjunto tenía un diámetro de 22,05 mm y una altura de 20 mm.

El proceso simulado (véase la Figura 4.8) comenzaba con la creación de las partículas en el interior del conjunto matriz-punzones. La cantidad de partículas generadas dependía de la granulometría simulada, pero en todos los casos, se correspondía con los 9,13 g de mezcla utilizada en los ensayos de laboratorio. A continuación, sin esperar a que las partículas se asentaran, el punzón superior comenzaba a descender a 0,02 m/s y paraba su movimiento cuando la separación entre ambos punzones era de 8 mm, es decir, transcurridos 0,06 s. A partir de ese momento, el punzón se movía a la misma velocidad, pero en sentido ascendente durante 0,04 s. Después, se eliminaban las geometrías correspondientes a la matriz y al punzón superior y se continuaba la simulación durante 0,05 s para comprobar el aspecto final del comprimido. La velocidad del punzón utilizada en las simulaciones fue bastante mayor a la utilizada en los ensayos con el fin de reducir el tiempo de simulación. El valor 0,2 m/s fue seleccionado conforme a los resultados obtenidos anteriormente. Aunque se había determinado un valor óptimo de 0,1 m/s para todos los modelos de contacto, una velocidad de 0,2 m/s resultaba más favorable en los modelos de contacto *Linear cohesión* y *SJKR2*.

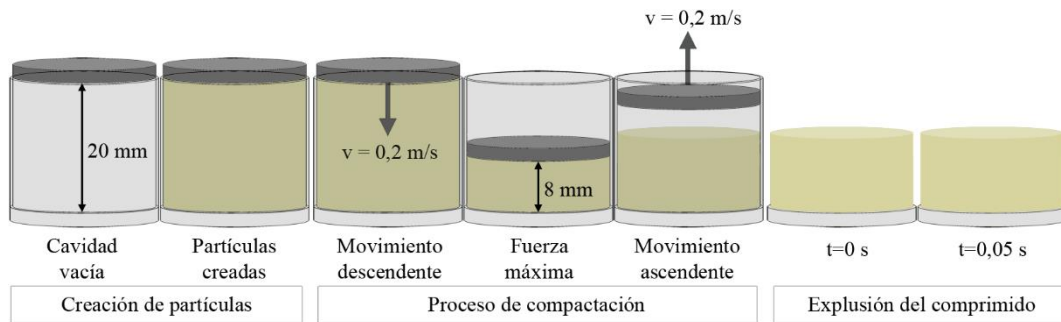


Figura 4.8. Proceso simulado para reproducir la compactación de un sistema real.

4.2.2.3. Cálculos

Con el fin de comparar los resultados de las simulaciones con los de los ensayos de laboratorio, se calculó la fuerza aplicada por el punzón, la porosidad del comprimido y se cuantificó la morfología del comprimido.

La fuerza aplicada por el punzón en los ensayos era uno de los resultados obtenidos automáticamente mediante el equipo empleado. Por lo tanto, el valor medio de la fuerza máxima era conocido y podía compararse directamente con los resultados de la simulación. Tanto en los ensayos como en las simulaciones, la fuerza máxima tenía lugar en el momento en el que el punzón superior se encontraba en su posición más baja (a 8 mm de distancia del punzón inferior).

La porosidad de los comprimidos (P) se calculó como la diferencia entre el volumen del comprimido (V_{comp}) y el volumen real del material (V_{mat}), tal y como se indica en la Ecuación 4.1. Al tratarse de un cilindro, el volumen del comprimido fue calculado mediante la Ecuación 4.2, donde r_{comp} era el radio del comprimido y h su altura. El volumen del material fue calculado de distinta forma en los ensayos ($V_{mat,exp}$) y las simulaciones ($V_{mat,sim}$). Experimentalmente, se calculó mediante la Ecuación 4.3, es decir, sumando los volúmenes de los n componentes de la mezcla, calculados a partir de la masa (m_i) y la densidad (ρ_i) de cada uno de los materiales. Sin embargo, el volumen del material fue calculado en las simulaciones como la diferencia entre el volumen total de las partículas (V_{part}) y el volumen total de los solapes entre partículas (V_{sol}), tal y como indica la Ecuación 4.4, donde m es el número de partículas que forman el comprimido y l es el número de solapes producidos entre las m partículas.

$$P = V_{\text{comp}} - V_{\text{mat}} \quad (4.1)$$

$$V_{\text{comp}} = \pi r_{\text{comp}}^2 h \quad (4.2)$$

$$V_{\text{mat,exp}} = \sum_{i=1}^n \frac{m_i}{\rho_i} \quad (4.3)$$

$$V_{\text{mat,sim}} = \sum_{j=1}^m V_{\text{part},j} - \sum_{k=1}^l V_{\text{sol},k} \quad (4.4)$$

Por último, con el fin de determinar de una forma cuantitativa la forma de los comprimidos transcurrido un tiempo (SQC), se aplicó el criterio de similitud de Kohonen según la Ecuación 4.5, teniendo en cuenta la altura del comprimido y el radio medio del mismo a diferentes alturas (desde 0 hasta 15 mm), tanto en el momento inicial tras eliminar la matriz y el punzón superior ($x_{1,i}$), como transcurridos 0,05 s ($x_{2,i}$).

$$S_{\text{Kohonen}} = \frac{\sum_{i=1}^n x_{1,i} x_{2,i}}{\sum_{i=1}^n x_{1,i} x_{2,i} + \|x_1 - x_2\|_2^2} \quad (4.5)$$

Los valores del coeficiente de similitud de Kohonen (S_{Kohonen}) fueron codificados según una escala del 1 al 5. Los valores de dicha escala (SQC) fueron los que se utilizaron para comparar los resultados de las simulaciones con los experimentales, y fueron los siguientes: 5 ~ (100-87,5%); 4 ~ (87,5-75%); 3 ~ (75-62,5%); 2 ~ (62,5-50%); 1 ~ (50-0%). De este modo, el valor de SQC igual a 5 indicaba que el comprimido mantenía la forma deseada tras eliminar la matriz y el punzón superior, mientras que valor de 1 correspondía a un comprimido que se había ido deshaciendo conforme pasaba el tiempo tras eliminar las geometrías que mantenían a las partículas unidas.

Finalmente, para determinar la bondad de los modelos de simulación, se calculó la desviación relativa entre los valores de fuerza, porosidad y SQC obtenidos experimentalmente (x_{exp}) y mediante simulación (x_{sim}), tal y como indica la Ecuación 4.6.

$$\text{Desviación relativa} = \frac{|x_{\text{exp}} - x_{\text{sim}}|}{x_{\text{exp}}} \times 100 \quad (4.6)$$

4.3. RESULTADOS

A continuación, se exponen los resultados obtenidos durante el estudio de la compactación de los materiales granulares.

4.3.1. DETERMINACIÓN DE LOS MODELOS DE CONTACTO EQUIVALENTES

Con el fin de determinar los modelos de contacto equivalentes en EDEM y LIGGGHTS, se realizaron diversas simulaciones para cada uno de los materiales (MP, UD y ND) en las que se varió el timestep, la tolerancia de conversión y la velocidad del punzón. Todas las combinaciones analizadas se indican en la Tabla 4.1. Mediante esas simulaciones, además, se determinaron algunos de los parámetros óptimos de simulación y se examinó la influencia de la distribución del tamaño de partícula de los materiales.

Config.	Timestep [s]		Timestep [% Rayleigh]	Tolerancia de conversión [mm]	Velocidad del punzón [m/s]
	MP	UD/ND			
1	$1,0 \times 10^{-6}$	$5,0 \times 10^{-7}$	~ 5	0,01	0,2
2	$2,0 \times 10^{-6}$	$1,0 \times 10^{-6}$	~10	0,01	0,2
3	$3,125 \times 10^{-6}$	$2,0 \times 10^{-6}$	~15	0,01	0,2
4	$4,0 \times 10^{-6}$	$2,5 \times 10^{-6}$	~20	0,01	0,2
5	$5,0 \times 10^{-6}$	$3,125 \times 10^{-6}$	~25	0,01	0,2
6	$6,25 \times 10^{-6}$	$4,0 \times 10^{-6}$	~30	0,01	0,2
7	$2,0 \times 10^{-6}$	$1,0 \times 10^{-6}$	~10	0,001	0,2
8	$2,0 \times 10^{-6}$	$1,0 \times 10^{-6}$	~10	0,1	0,2
9	$2,0 \times 10^{-6}$	$1,0 \times 10^{-6}$	~10	1,0	0,2
10	$2,0 \times 10^{-6}$	$1,0 \times 10^{-6}$	~10	0,01	0,0001
11	$2,0 \times 10^{-6}$	$1,0 \times 10^{-6}$	~10	0,01	0,0005
12	$2,0 \times 10^{-6}$	$1,0 \times 10^{-6}$	~10	0,01	0,001
13	$2,0 \times 10^{-6}$	$1,0 \times 10^{-6}$	~10	0,01	0,005
14	$2,0 \times 10^{-6}$	$1,0 \times 10^{-6}$	~10	0,01	0,01
15	$2,0 \times 10^{-6}$	$1,0 \times 10^{-6}$	~10	0,01	0,05
16	$2,0 \times 10^{-6}$	$1,0 \times 10^{-6}$	~10	0,01	0,1
17	$2,0 \times 10^{-6}$	$1,0 \times 10^{-6}$	~10	0,01	0,5

Tabla 4.1. Simulaciones del proceso de compactación utilizadas para determinar los modelos de contacto equivalentes [45].

Capítulo 4. Compactación del material granular

En primer lugar, se determinó que el timestep óptimo para simular el proceso de compactación utilizando los modelos de contacto *Linear cohesion*, *SJKR* y *SJKR2* era igual al 10% del timestep de Rayleigh. Como se puede observar en la Figura 4.9, la fuerza máxima aplicada por el punzón dependía del timestep empleado en las simulaciones. Para valores pequeños de timestep (hasta aproximadamente el 15% del timestep de Rayleigh), la fuerza máxima obtenida fue muy parecida, independientemente del modelo de contacto utilizado o la PSD. Sin embargo, conforme se aumentaba el timestep, disminuía la fuerza máxima. Por otra parte, no se encontró relación entre el timestep y el porcentaje de contactos eliminados tras quitar la matriz y el punzón superior. El factor que resultó determinante en la elección del timestep óptimo fue el coste computacional, que fue mayor cuanto menor era el timestep utilizado. Dado que el coste computacional se redujo considerablemente al pasar del 5% al 10% del Rayleigh timestep en todos los casos analizados, se determinó que el 10% del Rayleigh timestep era el valor óptimo para lograr unos resultados adecuados en el menor tiempo.

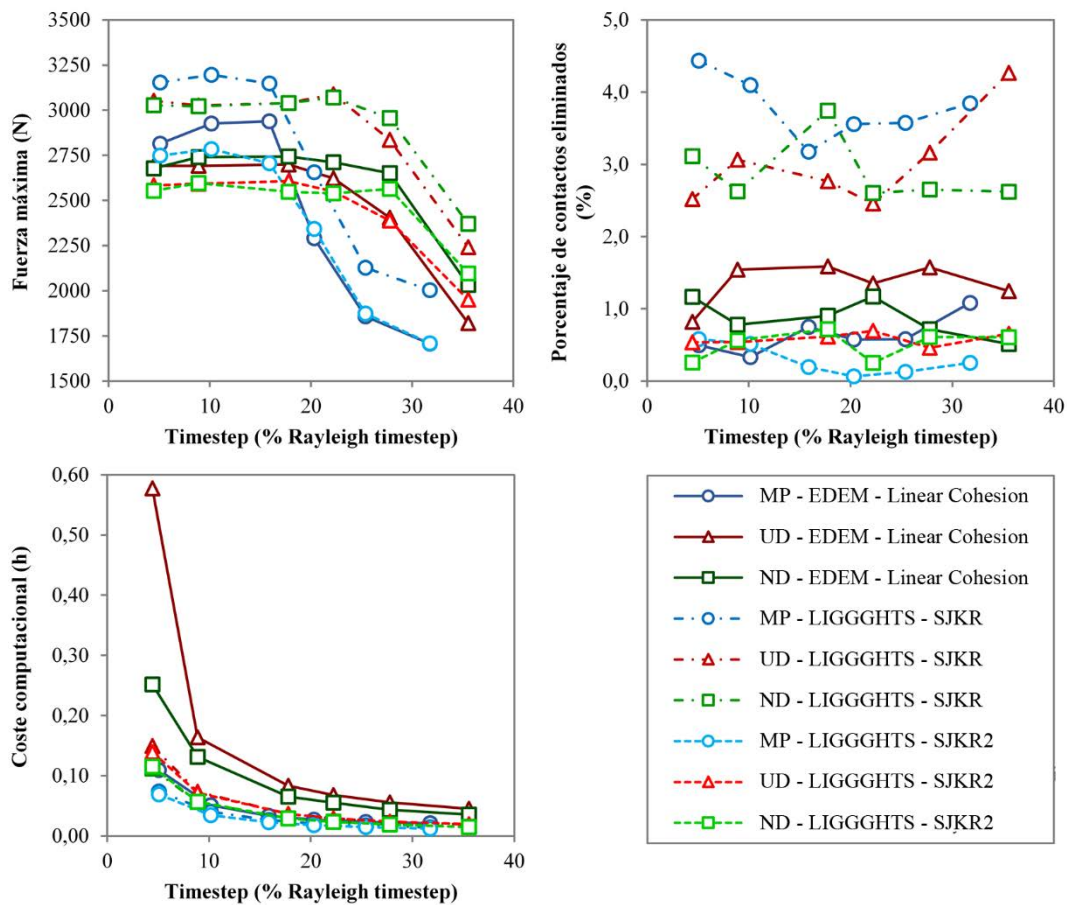


Figura 4.9. Efecto del timestep sobre los resultados y el coste computacional de las simulaciones del proceso de compactación [45].

A continuación, se analizó el efecto de la tolerancia de conversión de las geometrías empleadas en las simulaciones (Figura 4.10). De este modo, se comprobó que la fuerza máxima era mayor cuanto mayor era la tolerancia de conversión de las geometrías debido a que la sección transversal disminuía conforme aumentaba la tolerancia. El porcentaje de contactos eliminados no dependió de la tolerancia de conversión, excepto para el modelo de contactos *SJKR*. Probablemente, fue debido a que la fuerza de cohesión aplicada mediante ese modelo de contactos era menor que la aplicada mediante los otros dos modelos de contactos (véanse las Ecuaciones 2.15, 2.16 y 2.17). También se observó que la tolerancia de conversión influía en el tiempo requerido para completar las simulaciones. El coste computacional era mayor cuanto menor era la tolerancia, ya que el número de caras de los prismas generados era mayor y, por lo tanto, el número de comprobaciones necesarias para detectar el contacto entre las distintas caras y las partículas también lo era. Teniendo en cuenta los valores de fuerza máxima y de coste computacional, se determinó que el valor óptimo de tolerancia de conversión de las geometrías era 0,01 mm.

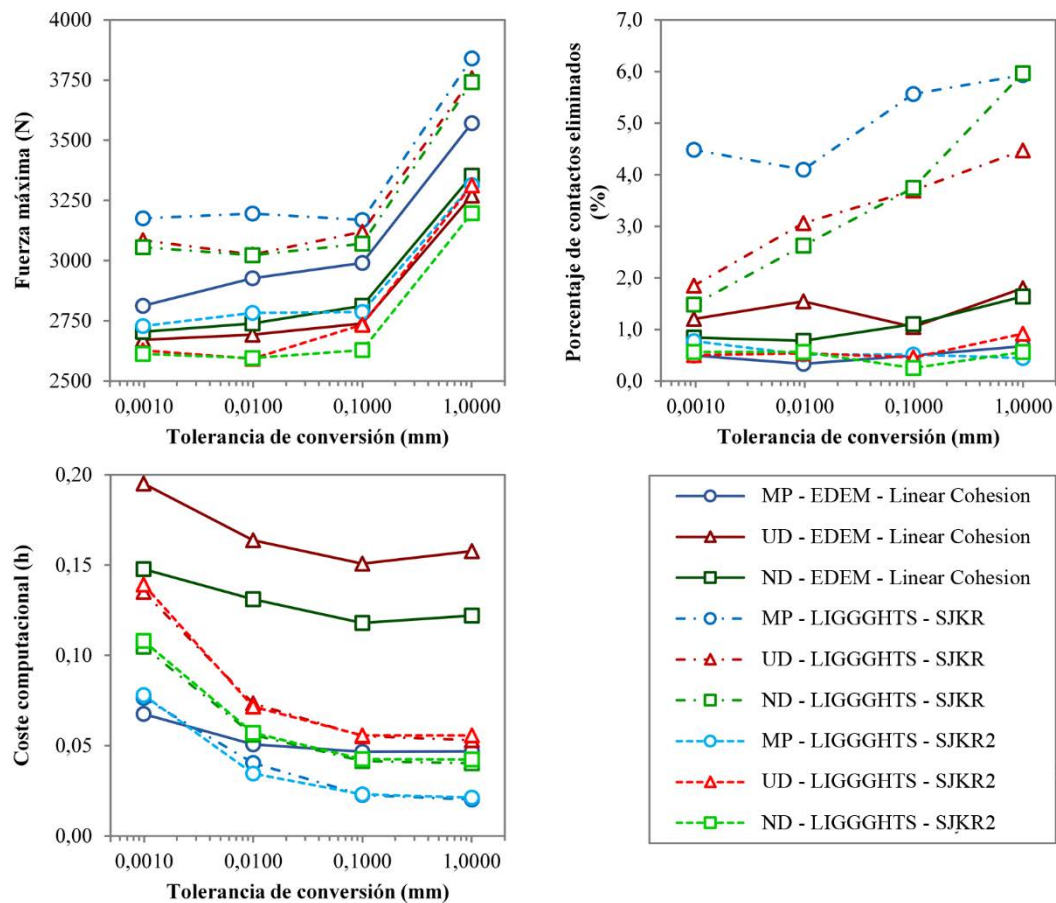


Figura 4.10. Efecto de la tolerancia de conversión sobre los resultados y el coste computacional de las simulaciones del proceso de compactación [45].

Capítulo 4. Compactación del material granular

Finalmente, se realizaron varias simulaciones para analizar el efecto de la velocidad de aplicación de la fuerza mediante el punzón superior con el fin de determinar cuál era la velocidad del punzón más apropiada para simular el proceso de compactación (Figura 4.11). Los resultados no mostraron relación entre la fuerza máxima y la velocidad del punzón. En el caso del porcentaje de contactos eliminados, aunque la curva fluctuaba para velocidades bajas, el porcentaje de contactos eliminados aumentó cuando la velocidad del punzón fue superior a 0,1 m/s. Atendiendo a la relación entre el coste computacional y la velocidad del punzón, se observó que el coste computacional aumentaba conforme se reducía la velocidad del punzón. Teniendo en cuenta esta relación y, principalmente, el efecto de la velocidad en el porcentaje de contactos eliminados se determinó que una velocidad del punzón de 0,1 m/s era adecuada para simular la compactación de los materiales granulares con cualquiera de los modelos de contacto analizados.

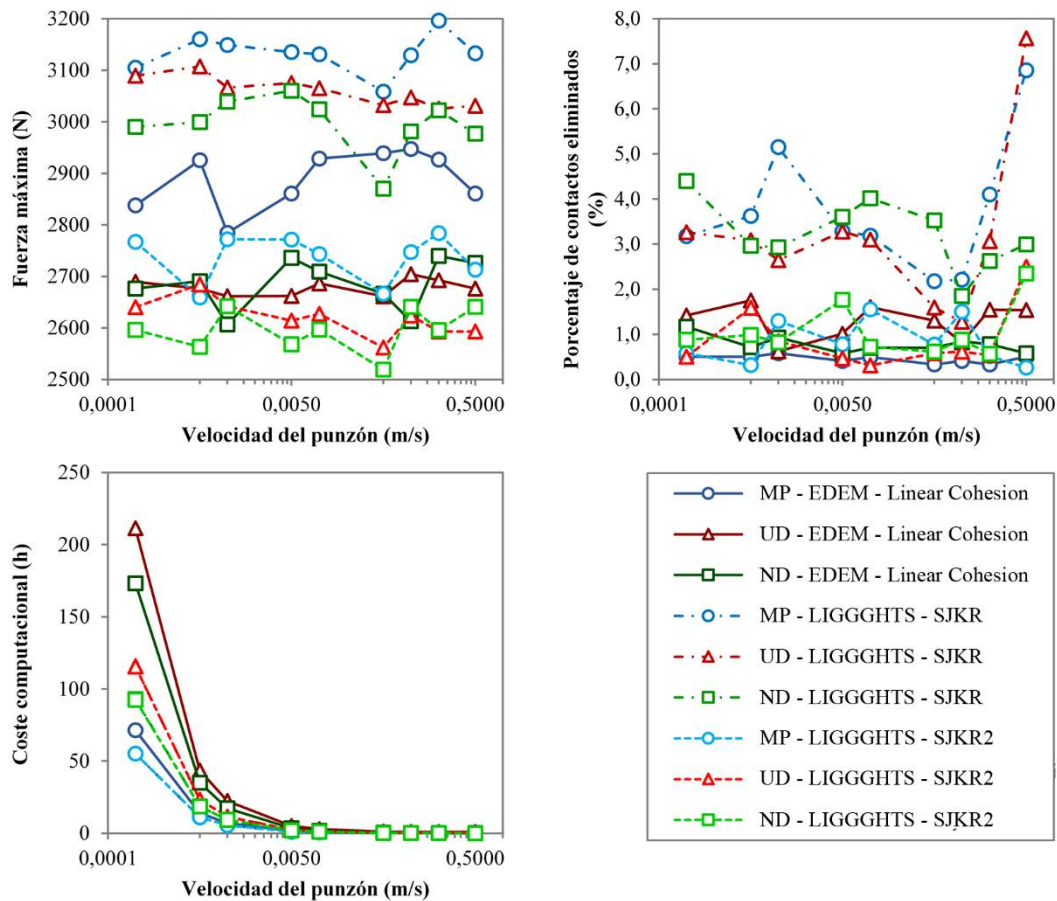


Figura 4.11. Efecto de la velocidad del punzón sobre los resultados y el coste computacional de las simulaciones del proceso de compactación [45].

Mediante los estudios anteriores, también se pudo examinar el efecto de la PSD. Se observó que la fuerza máxima era mayor en las simulaciones de la mezcla cuyas partículas eran del mismo tamaño (MP), intermedia para la distribución uniforme (UD) y menor para la distribución normal (ND). Esto se debió a que la reorganización de las partículas durante el proceso de compactación se vio afectado por la PSD. En aquellos materiales en los que existía una mayor cantidad de partículas pequeñas, era más fácil que éstas ocupasen los huecos que se formaban entre las partículas y, por lo tanto, el volumen total ocupado por el material era menor. Aunque no se identificó ninguna relación entre la PSD y el porcentaje de contactos eliminados, sí se observó su efecto sobre el coste computacional. Al igual que en el caso de la fuerza máxima, el coste computacional se vio afectado por el número y tamaño de las partículas. Cuanto mayor era el número de partículas o menor su tamaño, el coste computacional era mayor.

Analizando los resultados obtenidos, también se pudo identificar que, tanto la fuerza máxima como el porcentaje de contactos eliminados obtenidos mediante el modelo *SJKR* fueron superiores a los obtenidos en las simulaciones homólogas en las que se emplearon los modelos *Linear Cohesion* y *SJKR2*.

Con el fin de determinar cuáles eran los modelos de contacto equivalentes en EDEM y LIGGGHTS, se compararon los valores medios de la fuerza máxima y el porcentaje de contactos eliminados utilizando cada modelo de contactos para cada una de las PSD. Como se puede observar en la Figura 4.12, que muestra dicha comparación, los resultados obtenidos mediante los modelos *Linear cohesion* y *SJKR2* fueron más parecidos que los obtenidos mediante el modelo *SJKR*. Además, la diferencia entre los resultados obtenidos mediante el modelo *SJKR* y los obtenidos mediante los modelos *Linear cohesion* y *SJKR2* fue más acusada en el caso del porcentaje de contactos eliminados. Teniendo en cuenta los resultados de esta comparación, se determinó que los modelos *Linear cohesion* de EDEM y *SJKR2* de LIGGGHTS eran equivalentes.

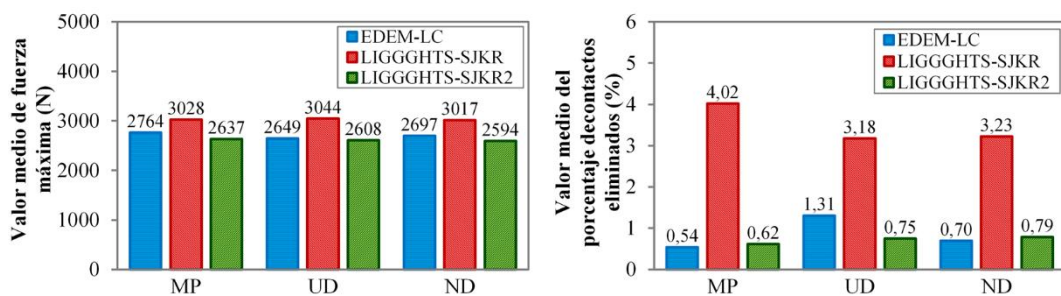


Figura 4.12. Comparativa de resultados medios obtenidos empleando los distintos modelos de contacto [45].

4.3.2. SIMULACIÓN DE UN SISTEMA REAL

Una vez establecidos los modelos de contacto equivalentes, se simuló un proceso real de compactación. Para ello, inicialmente, se realizaron ensayos mediante los cuales obtener datos con los que comparar los resultados de las simulaciones. Conocidos los datos a alcanzar, se comenzaron a generar modelos de simulación. En primer lugar, se hizo un análisis preliminar para determinar los factores de los modelos de simulación que más efecto tenían sobre los resultados. Una vez identificados, se utilizaron para calibrar los modelos de simulación. Para ello, se ejecutó un diseño de experimentos, gracias al cual, se obtuvieron ecuaciones de regresión con las que ajustar el modelo. Finalmente, se realizaron varias simulaciones con el fin de validar esas ecuaciones, así como lograr un mejor ajuste de los modelos.

4.3.2.1. Análisis experimental

Mediante el análisis experimental, se obtuvieron los datos con los cuales comparar los resultados de las simulaciones con el fin de examinar su viabilidad y exactitud para simular el proceso de compactación de materiales reales.

Los parámetros que se midieron fueron la fuerza máxima aplicada por el punzón y las dimensiones del comprimido. A partir de esos datos y conocida la densidad de los materiales y la cantidad utilizada, se pudo calcular la porosidad del comprimido. El valor medio de la fuerza máxima aplicada por el punzón en los ensayos de laboratorio fue de 25.095 N. En los ensayos, se obtuvieron comprimidos de diámetro 22,05 mm y altura 9,55 mm, por lo que su porosidad fue de 26,08%. Además, los comprimidos se pudieron extraer de la matriz sin deshacerse, por lo que se consideró un valor de SQC igual a 5 como dato experimental.

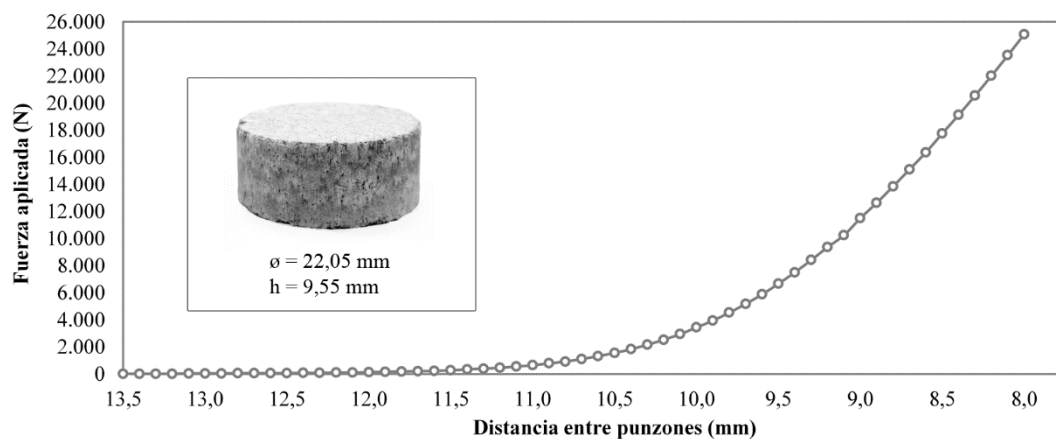


Figura 4.13. Resultados obtenidos en los ensayos de compactación [46].

4.3.2.2. Análisis preliminar

Con el fin de examinar la influencia del módulo de elasticidad de las partículas (E), la densidad de energía de cohesión (CED) y el diámetro de las partículas de Al_2O_3 (D) sobre la fuerza aplicada por el punzón (F), la porosidad del comprimido (P) y su calidad morfológica (SQC), se realizaron las simulaciones indicadas en la Tabla 4.2.

Config.	Nomenclatura	Módulo de elasticidad [MPa]	Densidad de energía de cohesión [J/m^3]	Diámetro de Al_2O_3 [μm]
1	E0250 CED1 D300	250	1×10^6	300
2	E0250 CED1 D500	250	1×10^6	500
3	E0250 CED3 D400	250	3×10^6	400
4	E0250 CED5 D300	250	5×10^6	300
5	E0250 CED5 D500	250	5×10^6	500
6	E1375 CED1 D400	1375	1×10^6	400
7	E1375 CED3 D300	1375	3×10^6	300
8	E1375 CED3 D400	1375	3×10^6	400
9	E1375 CED3 D500	1375	3×10^6	500
10	E1375 CED5 D400	1375	5×10^6	400
11	E2500 CED1 D300	2500	1×10^6	300
12	E2500 CED1 D500	2500	1×10^6	500
13	E2500 CED3 D400	2500	3×10^6	400
14	E2500 CED5 D300	2500	5×10^6	300
15	E2500 CED5 D500	2500	5×10^6	500

Tabla 4.2. Simulaciones utilizadas en el análisis preliminar de los modelos DEM aplicados a la simulación del proceso de compactación de un sistema real [46].

Los resultados obtenidos en las simulaciones utilizadas en el análisis preliminar (Tabla 4.2) son mostrados en la Tabla 4.3. Como se puede observar, la fuerza máxima aplicada en los ensayos únicamente se alcanzó en aquellas configuraciones en las que se simularon materiales con módulo de elasticidad igual a 2.500 MPa. En todos los casos se obtuvieron comprimidos con mayor porosidad que la deseada. En cuanto a la morfología, se obtuvieron comprimidos con valores de SQC entre 2 y 5.

Capítulo 4. Compactación del material granular

En cualquier caso, el objeto de estas simulaciones era determinar cuáles eran los factores más influyentes, lo cual fue posible gracias al análisis de la varianza (ANOVA). Éste determinó que la fuerza máxima estaba influenciada principalmente por el módulo de elasticidad y que la porosidad aumentaba con el módulo de elasticidad y el diámetro de las partículas de Al_2O_3 , pero disminuía con la densidad de energía de cohesión. Gracias al ANOVA también se identificaron los factores más influyentes en los resultados, que fueron el módulo de elasticidad y la densidad de energía de cohesión en ambos simuladores, aunque también fue considerable el efecto del diámetro de las partículas de Al_2O_3 en EDEM.

Config.	Nomenclatura	EDEM			LIGGGHTS		
		F [N]	P [%]	SQC [-]	F [N]	P [%]	SQC [-]
1	E0250 CED1 D300	2.729	41,86	5	2.750	38,25	4
2	E0250 CED1 D500	2.333	54,20	5	2.919	41,90	4
3	E0250 CED3 D400	2.260	48,02	5	2.250	35,60	5
4	E0250 CED5 D300	1.424	32,81	1	1.457	29,37	5
5	E0250 CED5 D500	1.182	45,21	5	1.628	31,66	5
6	E1375 CED1 D400	17.091	55,29	2	17.276	47,95	2
7	E1375 CED3 D300	15.787	41,48	5	15.865	41,34	3
8	E1375 CED3 D400	16.551	51,24	5	16.624	43,47	3
9	E1375 CED3 D500	12.475	55,13	5	16.858	44,41	3
10	E1375 CED5 D400	15.922	48,94	5	15.986	38,24	5
11	E2500 CED1 D300	30.093	47,07	2	30.297	47,59	2
12	E2500 CED1 D500	23.613	58,17	2	31.987	48,94	2
13	E2500 CED3 D400	29.909	54,22	3	31.053	47,35	2
14	E2500 CED5 D300	28.867	41,32	5	29.015	40,51	4
15	E2500 CED5 D500	22.453	54,14	5	30.807	43,98	3

Tabla 4.3. Resultados obtenidos en las simulaciones utilizadas en el análisis preliminar de los modelos DEM aplicados a la simulación del proceso de compactación de un sistema real [46].

4.3.2.3. Calibración de los modelos DEM

Una vez identificados los factores más influyentes (E y CED), se realizaron las simulaciones indicadas en la Tabla 4.4, combinando tres niveles de los dos factores, con el fin de analizar el efecto de ambos factores sobre la fuerza aplicada por el punzón (F), la porosidad (P) y la calidad de los comprimidos (SQC).

Config.	Nomenclatura	Módulo de elasticidad [MPa]	Densidad de energía de cohesión [J/m ³]	Diámetro de Al ₂ O ₃ [μm]
1	E1375 CED3 D300	1375	3×10^6	300
2	E1375 CED5 D300	1375	5×10^6	300
3	E1375 CED7 D300	1375	7×10^6	300
4	E2500 CED3 D300	2500	3×10^6	300
5	E2500 CED5 D300	2500	5×10^6	300
6	E2500 CED7 D300	2500	7×10^6	300
7	E3625 CED3 D300	3625	3×10^6	300
8	E3625 CED5 D300	3625	5×10^6	300
9	E3625 CED7 D300	3625	7×10^6	300

Tabla 4.4. Simulaciones utilizadas en la calibración de los modelos DEM aplicados a la simulación del proceso de compactación de un sistema real [46].

En primer lugar, se analizó la evolución de la fuerza aplicada por el punzón, así como del volumen ocupado por las partículas y los solapes medios entre partículas, durante el proceso de compactación. Los resultados obtenidos se pueden ver en la Figura 4.14.

En la gráfica correspondiente a la fuerza aplicada se distinguieron los procesos de carga (desde el momento inicial hasta 0,06 s) y descarga (a partir del instante 0,06 s), coincidiendo con el movimiento descendente y ascendente del punzón, respetivamente, cuya posición fue representada mediante una línea punto-rayas en la gráfica que muestra la evolución de la altura del comprimido. Durante el proceso de carga, la fuerza aplicada aumentó conforme el punzón descendía hasta alcanzar su máximo valor en el instante 0,06 s, momento en el que el punzón se encontraba en su posición más baja. A continuación, el punzón comenzaba a ascender y la fuerza aplicada se iba reduciendo, lo cual permitió la relajación del material. La fuerza finalmente cesó cuando el punzón se separó del material.

Capítulo 4. Compactación del material granular

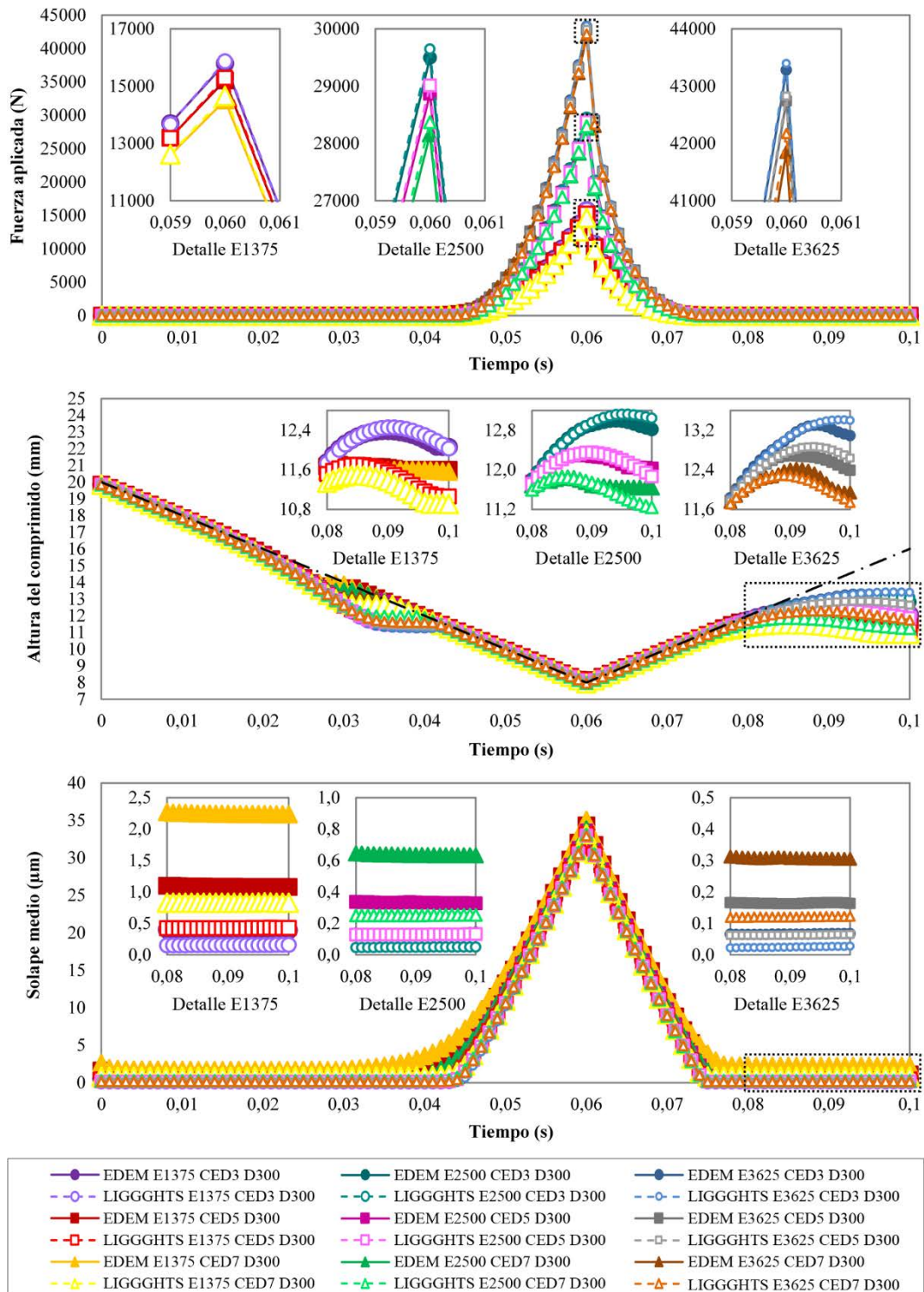


Figura 4.14. Resultados obtenidos en las simulaciones del proceso de compactación realizadas para calibrar el modelo DEM. Fuerza aplicada por el punzón, altura del comprimido y solape entre partículas [46].

Tal y como se puede ver en la gráfica correspondiente a la altura del comprimido, al inicio del proceso de carga, la altura del comprimido coincidía con la posición del punzón, debido a que, en las simulaciones, el movimiento del punzón se inició tras completar la creación de las partículas, por lo que las partículas no se asentaron antes de la compactación. Como consecuencia, al inicio de la compresión, el punzón empujó las partículas hacia abajo, por lo que éstas descendieron a mayor velocidad y se asentaron rápidamente. Por ese motivo, durante un pequeño periodo de tiempo, la superficie del comprimido quedó por debajo del punzón. Tras ese receso, el punzón volvió a entrar en contacto con las partículas y comenzó a compactarlas hasta el instante 0,06 s. Al inicio del proceso de descarga, conforme se elevaba el punzón, el comprimido se iba expandiendo para relajar las fuerzas de contacto entre las partículas, que eran demasiado elevadas en el momento de aplicación de la fuerza máxima. Por ese motivo, tal y como se observa en la gráfica, la altura del comprimido continuó coincidiendo con la posición del punzón hasta que, finalmente, se volvieron a separar cuando las fuerzas de contacto de las partículas se estabilizaron.

En cuanto al solape medio entre partículas, inicialmente las partículas se solaparon mínimamente hasta que se asentaron. Conforme el punzón iba aplicando fuerza sobre el material, el solape entre partículas aumentaba debido a la reducción del volumen delimitado por las geometrías, hasta alcanzar su valor máximo en el momento de aplicación de la fuerza máxima (0,06 s), cuando el punzón se encontraba en su posición más baja. A partir de ese momento, el solape medio comenzaba a descender como consecuencia de la relajación del comprimido al retirar el punzón. Finalmente, el solape medio se mantenía constante una vez que el comprimido se estabilizaba y el punzón se separaba del material.

Los resultados obtenidos en las simulaciones utilizadas para calibrar los modelos DEM se muestran en la Tabla 4.5.

Config.	Nomenclatura	EDEM			LIGGGHTS		
		F [N]	P [%]	SQC [-]	F [N]	P [%]	SQC [-]
1	E1375 CED3 D300	15.787	41,48	5	15.865	41,34	3
2	E1375 CED5 D300	15.201	39,14	5	15.283	36,20	5
3	E1375 CED7 D300	14.506	38,95	5	14.662	35,32	5
4	E2500 CED3 D300	29.495	44,93	4	29.647	45,87	2
5	E2500 CED5 D300	28.867	41,32	5	29.015	40,51	4
6	E2500 CED7 D300	28.155	39,37	5	28.369	37,23	5
7	E3625 CED3 D300	43.279	46,08	3	43.393	47,31	2
8	E3625 CED5 D300	42.745	43,02	5	42.827	44,14	2
9	E3625 CED7 D300	41.846	40,90	5	42.172	39,87	4

Tabla 4.5. Resultados obtenidos en las simulaciones utilizadas en la calibración de los modelos DEM aplicados a la simulación del proceso de compactación de un sistema real.

Como se puede observar, los valores de fuerza máxima y porosidad obtenidos en ambos simuladores DEM fueron muy parecidos, aunque las fuerzas máximas obtenidas mediante LIGGGHTS fueron un poco superiores a las obtenidas mediante EDEM. En cualquier caso, las tendencias observadas en ambos simuladores fueron las mismas.

La fuerza máxima aumentaba considerablemente con el módulo de elasticidad y disminuía conforme se incrementaba la densidad de energía de cohesión. Estas tendencias se muestran en las imágenes de detalle de la gráfica superior de la Figura 4.14 y se pueden explicar mediante el análisis del solape medio de las partículas. Como se puede ver en las imágenes de detalle de la gráfica inferior de la Figura 4.14, los solapes eran menores cuanto mayor era el módulo de elasticidad de los materiales. Esto se debe a que las deformaciones de las partículas que tienen lugar en la realidad son simuladas mediante el solape entre partículas en los modelos DEM. Por lo tanto, el incremento del módulo de elasticidad hizo que el material ocupase un volumen mayor ya que los solapes entre partículas eran menores (en ausencia de fuerzas externas), de manera que era necesario aplicar una fuerza mayor para reducir su volumen hasta el determinado por la posición inferior del punzón. Por otra parte, en la gráfica superior, también se observó que la máxima fuerza aplicada decrecía conforme aumentaba la densidad de energía de cohesión. Esto se debe a que la fuerza de cohesión, que es proporcional a la densidad de energía de cohesión, incrementa el solape entre partículas en estado de reposo y, por lo tanto, cuanto mayor es la densidad de energía de cohesión, mayor es el solape debido al efecto de la cohesión. Al ser mayor el solape de las partículas (en ausencia de fuerzas externas), el volumen que ocupa el material en reposo también es menor. Por ese motivo, la fuerza externa necesaria para reducir el volumen de las partículas hasta su mínimo valor fue menor cuanto mayor era la densidad de energía de cohesión.

La porosidad de los comprimidos se comportó del mismo modo que la fuerza máxima, es decir, fue mayor cuanto mayor era el módulo de elasticidad y menor la densidad de energía de cohesión. Sin embargo, en este caso, la influencia de ambos factores sobre la porosidad fue parecida. Dado que la porosidad fue calculada a partir del volumen del comprimido y que la sección transversal del comprimido era constante, existía una relación entre la porosidad y la altura del comprimido. Por lo tanto, el efecto del módulo de elasticidad y de la densidad de energía de cohesión en la porosidad pudo visualizarse en las imágenes de detalle de la gráfica central de la Figura 4.14, que muestran la altura del comprimido al final del proceso de compactación, una vez retirado el punzón. Como se puede observar, la altura del comprimido y, por lo tanto, su volumen fue mayor cuanto mayor era el módulo de elasticidad, ya que el solape era menor. Del mismo modo, el solape de las partículas en reposo fue menor cuanto menor era la densidad de energía de cohesión, por lo que el volumen aumentó conforme se reducía la densidad de energía de cohesión. Dado que la porosidad aumentaba con el volumen del comprimido, las relaciones anteriores también se aplicaron a la porosidad.

En cuanto a la calidad de los comprimidos, el valor de SQC obtenido en cada simulador DEM fue distinto, aunque la tendencia que mostraron ambos fue la misma. La calidad del comprimido aumentaba conforme aumentaba la densidad de energía de cohesión y disminuía conforme aumentaba el módulo de elasticidad. Esta relación se puede ver en la Figura 4.15, que muestra los comprimidos una vez transcurridos 0,05 s después de eliminar la matriz.

Analizando los resultados mostrados en la Tabla 4.5 también se observó que el valor de la fuerza máxima alcanzada experimentalmente se encontraba dentro del rango de valores obtenidos en las simulaciones. En concreto, en las simulaciones en las que se emplearon partículas con un módulo de elasticidad de 1375 MPa, la fuerza obtenida fue inferior al valor de referencia, mientras que este valor fue superado en las simulaciones correspondientes al módulo de elasticidad de 2500 MPa. Por otra parte, se observó que, en todas las simulaciones, la porosidad obtenida fue superior a la real. Esto se debió a que las partículas simuladas fueron de mayor tamaño que las reales. No obstante, los valores más próximos se obtuvieron con un valor de CED igual a $7 \times 10^6 \text{ J/m}^3$. Finalmente, se observó que en aquellas simulaciones en las que se empleó un módulo de elasticidad de 1375 MPa o de 2500 MPa y un CED igual a $7 \times 10^6 \text{ J/m}^3$ se obtuvieron comprimidos con un SQC igual a 5. Teniendo esto en cuenta, era de esperar que se pudiera obtener un comprimido de buena calidad aplicando una fuerza máxima similar a la de los ensayos, pero su porosidad sería superior a la real.

Esto se pudo comprobar gracias a que, mediante el análisis de la varianza (ANOVA) de los resultados obtenidos, se pudieron generar modelos de regresión cuadráticos para predecir la fuerza máxima (F), la porosidad (P) y la calidad de los comprimidos (SQC) en función del módulo de elasticidad (E) y la densidad de energía de cohesión (CED), empleando los dos simuladores DEM.

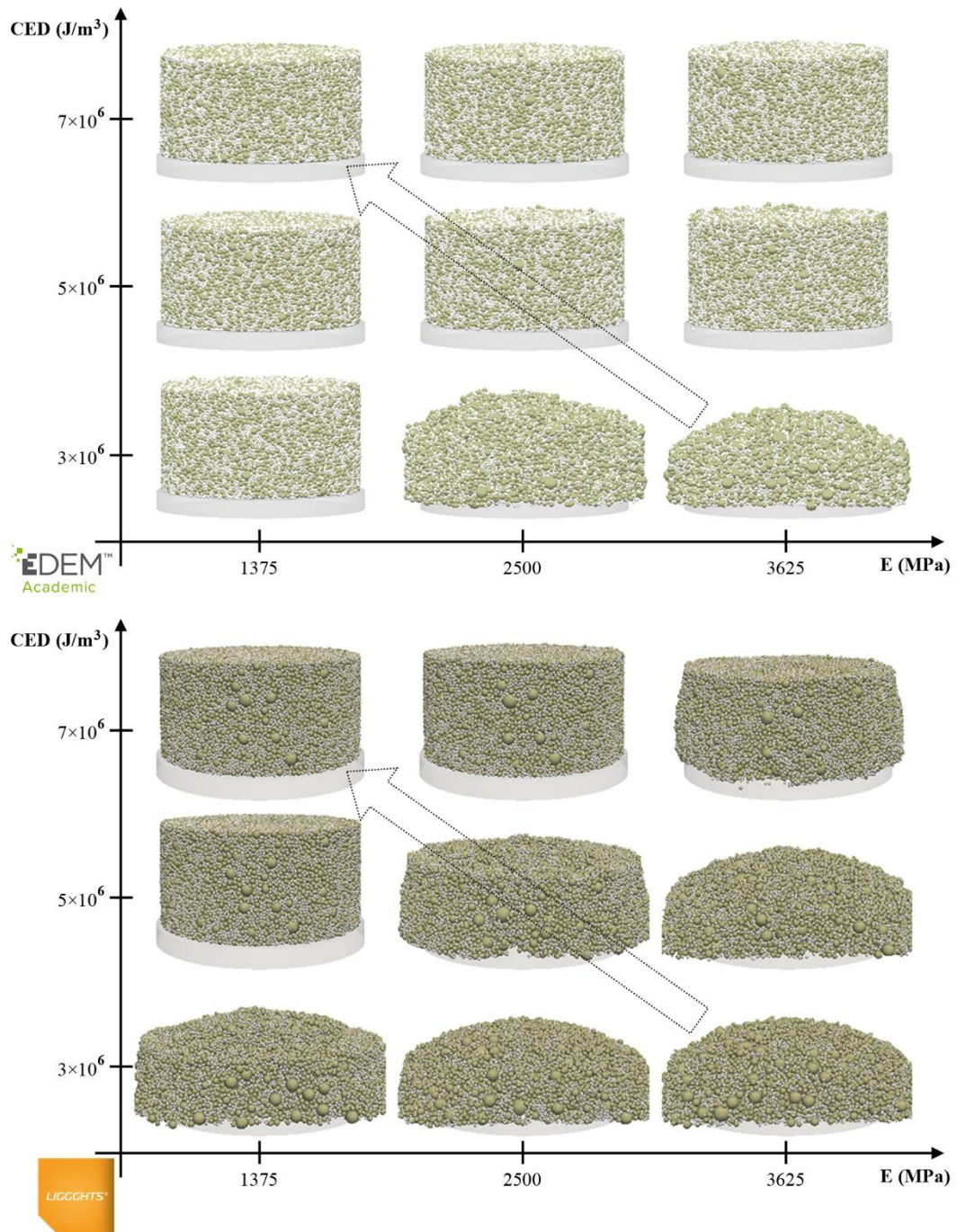


Figura 4.15. Resultados obtenidos en las simulaciones del proceso de compactación realizadas para calibrar el modelo DEM. Calidad de los comprimidos (SQC) [46].

4.3.2.4. Validación de los modelos DEM

Aplicando los resultados experimentales para resolver las ecuaciones de los modelos de regresión obtenidos durante la calibración de los modelos, se pudieron predecir los valores del módulo de elasticidad y densidad de energía de cohesión a emplear para validar los modelos DEM, cuyos valores se indican en la Tabla 4.6 (configuraciones 1-2).

Config.	Nomenclatura	Programa DEM	Módulo de elasticidad [MPa]	Densidad de energía de cohesión [J/m ³]	Diámetro de Al ₂ O ₃ [μm]
1	E2250 CED7 D300	EDEM	2250	7×10^6	300
2	E2230 CED7 D300	LIGGGHTS	2230	7×10^6	300
3	E2341 CED7 D250	EDEM	2341	7×10^6	250
4	E2322 CED7 D250	LIGGGHTS	2322	7×10^6	250
5	E2535 CED7 D200	EDEM	2535	7×10^6	200
6	E2525 CED7 D200	LIGGGHTS	2525	7×10^6	200
7	E2910 CED7 D150	EDEM	2910	7×10^6	150
8	E2903 CED7 D150	LIGGGHTS	2903	7×10^6	150

Tabla 4.6. Simulaciones utilizadas en la validación de los modelos DEM aplicados a la simulación del proceso de compactación de un sistema real [46].

Los resultados alcanzados en dichas configuraciones se muestran en la Tabla 4.7 (configuraciones 1-2). Se puede observar que se consiguieron buenos comprimidos (SQC igual a 5) aplicando una fuerza muy similar a la de los ensayos de laboratorio. Sin embargo, tal y como cabía esperar analizando los resultados de las simulaciones utilizadas para calibrar los modelos (Tabla 4.5), la porosidad obtenida fue superior a la real.

Config.	Nomenclatura	Programa DEM	F [N]	P [%]	SQC [-]
1	E2250 CED7 D300	EDEM	25.153	38,90	5
2	E2230 CED7 D300	LIGGGHTS	25.134	36,83	5
3	E2341 CED7 D250	EDEM	25.089	37,24	5
4	E2322 CED7 D250	LIGGGHTS	25.075	35,19	5
5	E2535 CED7 D200	EDEM	24.970	34,37	5
6	E2525 CED7 D200	LIGGGHTS	25.012	33,28	5
7	E2910 CED7 D150	EDEM	25.159	31,57	5
8	E2903 CED7 D150	LIGGGHTS	25.135	30,37	5

Tabla 4.7. Resultados obtenidos en las simulaciones utilizadas en la validación de los modelos DEM aplicados a la simulación del proceso de compactación de un sistema real [46].

Con el fin de reducir esa desviación, se realizaron varias simulaciones (Tabla 4.6, (configuraciones 3-8) en las que se redujo el tamaño de partícula de Al_2O_3 hasta modelar partículas de 0,15 mm de diámetro. Los resultados de estas simulaciones se muestran en la Tabla 4.7 (configuraciones 3-8). Se puede observar que, conforme se redujo el tamaño de las partículas de Al_2O_3 , disminuyó la porosidad, ya que las partículas de Al_2O_3 eran capaces de introducirse en pequeños huecos formados por las partículas de MgO . De este modo, se consiguió reducir la desviación relativa entre la porosidad obtenida en los experimentos y la simulada desde 49,2% y 41,2% (con un diámetro de 0,3 mm) hasta 21,0% y 16,4% (con un diámetro de 0,15 mm) en EDEM y LIGGGHTS, respectivamente, mientras que, la desviación relativa entre la fuerza aplicada experimentalmente y la simulada se mantuvo inferior a 0,5% en todas las simulaciones.

Sin embargo, se observó que, mientras la porosidad se reducía de forma lineal conforme se reducía el tamaño de partícula de Al_2O_3 , el coste computacional se incrementaba de forma potencial (Figura 4.16). Atendiendo a las regresiones indicadas en las gráficas, simulando partículas del tamaño real (de diámetro igual a 0,045 mm) en EDEM y LIGGGHTS, se obtendrían comprimidos de aproximadamente 26,56% y 26,25%, respectivamente, lo que supone una desviación relativa menor del 2%. Sin embargo, esas simulaciones requerirían un coste computacional inaceptable.

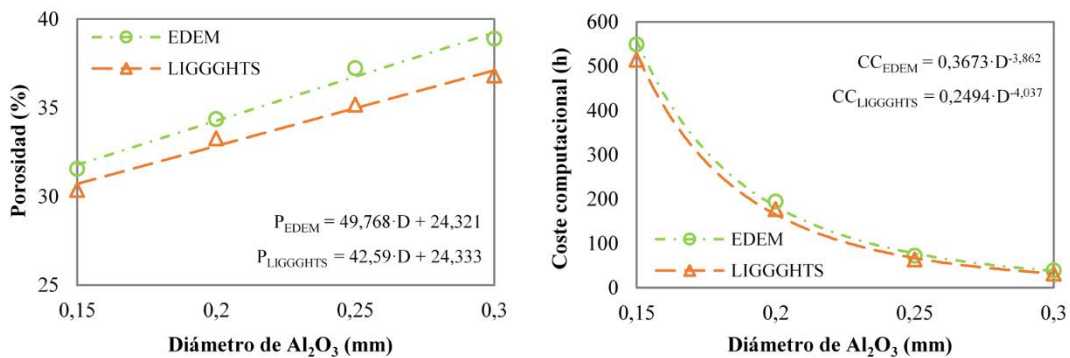


Figura 4.16. Efecto del tamaño de partícula de Al_2O_3 sobre la porosidad de los comprimidos y el coste computacional de las simulaciones del proceso de compactación [46].

En la Figura 4.17 se muestran los comprimidos obtenidos en cada una de las simulaciones realizadas durante la validación de los modelos DEM y experimentalmente.

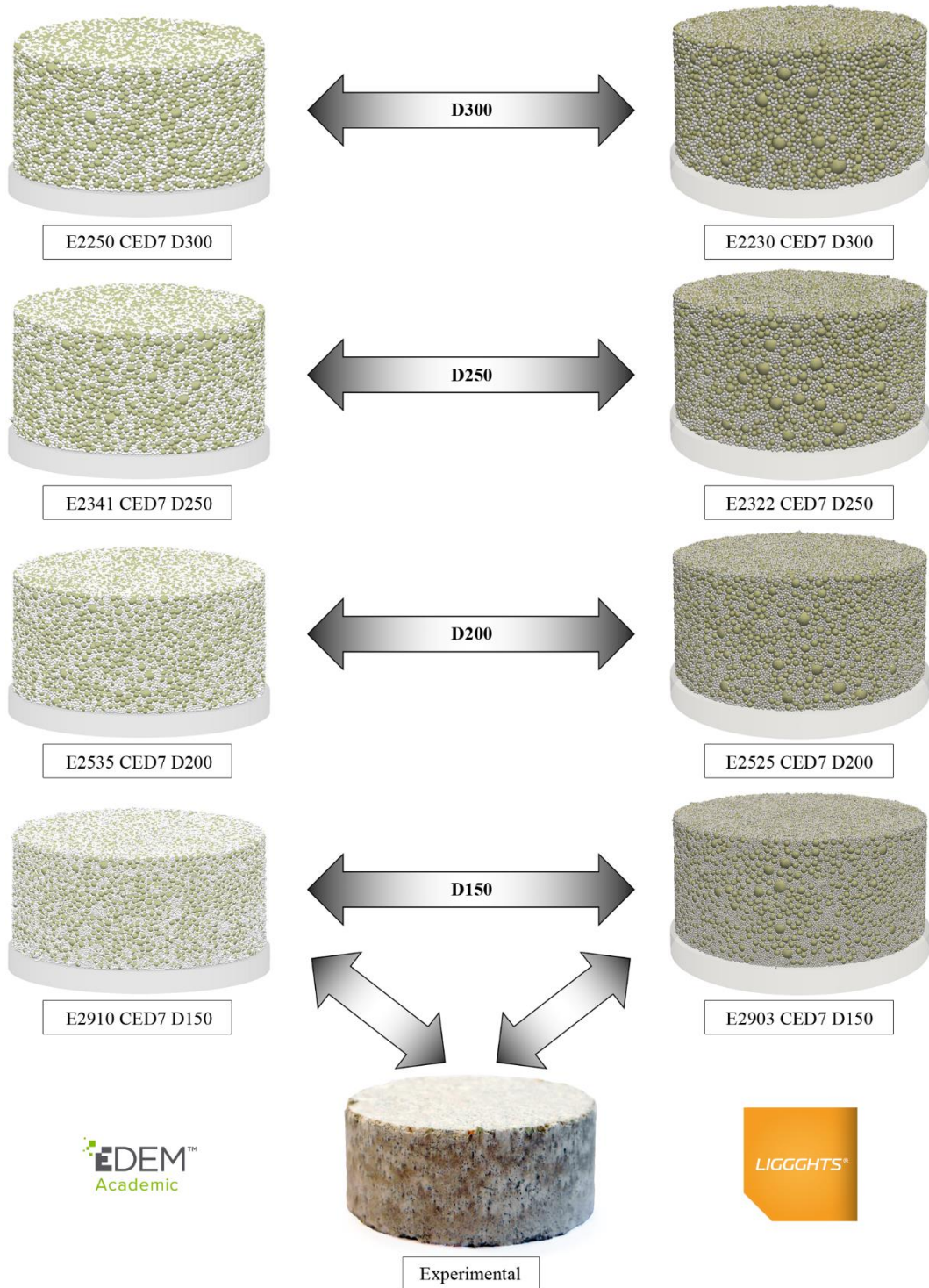


Figura 4.17. Comprimido realizado en los ensayos de compactación y comprimidos obtenidos en las simulaciones del proceso de compactación realizadas para validar el modelo DEM [46].

4.4. CONCLUSIONES

La capacidad del método de los elementos discretos para reproducir el proceso de compactación de materiales refractarios ha sido examinada mediante la comparación de los datos experimentales de un ensayo de compresión axial con los resultados obtenidos de dos programas de simulación DEM, uno comercial (EDEM) y otro libre (LIGGGHTS).

En primer lugar, se han determinado cuáles son los modelos de contacto equivalentes en ambos simuladores, comparando los resultados obtenidos de una serie de simulaciones diferenciadas entre sí únicamente por el modelo de contactos empleado. De este modo, se han analizado tres modelos cohesivos, uno de ellos implementado en EDEM y los otros dos en LIGGGHTS. Además, durante la determinación de los modelos equivalentes, también se ha examinado el efecto de algunos parámetros de simulación (timestep, tolerancia de conversión de las geometrías, velocidad del punzón y distribución granulométrica) sobre los resultados obtenidos (fuerza máxima aplicada por el punzón y porcentaje de contactos eliminados) y el coste computacional requerido para completarlas. De este modo, ha sido posible establecer aquellos valores que permiten optimizar el coste computacional de las simulaciones sin afectar a sus resultados. Las principales conclusiones derivadas de este análisis son las siguientes:

- ❁ El modelo *Linear Cohesion* de EDEM y el modelo *SJKR2* de LIGGGHTS son modelos de contacto equivalentes.
- ❁ El timestep establecido en las simulaciones influye sobre la máxima fuerza aplicada por el punzón debido a que, cuando mayor es el valor de timestep empleado, menor es la exactitud de los cálculos que determinan la posición del punzón o su fuerza. Como resultado, la fuerza máxima obtenida es menor cuanto mayor es el timestep empleado. Sin embargo, el porcentaje de contactos eliminados no guarda relación con el timestep.
- ❁ Cuanto mayor es la tolerancia de conversión de las geometrías, mayor es el valor de fuerza máxima aplicada por el punzón debido a que la sección transversal es menor. En los modelos equivalentes, no se observa relación entre la tolerancia de conversión y el porcentaje de contactos eliminados.
- ❁ Aunque la velocidad del punzón no guarda relación con el valor máximo de fuerza aplicada por el mismo, sí se observa que, con valores bajos de velocidad, el porcentaje de contactos eliminados fluctúa, pero éste se incrementa cuando se emplea una velocidad superior a 0,2 m/s.
- ❁ El coste computacional disminuye conforme aumenta la velocidad del punzón, el timestep o la tolerancia de conversión.

- ❁ La distribución granulométrica influye sobre la fuerza aplicada por el punzón debido a que la reorganización de las partículas durante el proceso de compactación se ve favorecida en aquellas PSDs en las que los huecos entre partículas gruesas se pueden llenar con partículas finas. La distribución granulométrica también tiene efecto sobre el coste computacional debido a la cantidad y tamaño de las partículas simuladas.

Una vez determinados los modelos de contacto equivalentes, estos fueron empleados para simular un proceso de compactación real. Para ello, se realizaron varios ensayos con una mezcla de dos materiales refractarios (magnesia y alúmina) que fueron reproducidos en las simulaciones con el fin de validar los modelos DEM mediante la comparación de los resultados experimentales con los obtenidos de las simulaciones. Los resultados que se analizaron fueron la fuerza máxima aplicada por el punzón, la porosidad del comprimido y la calidad de los comprimidos.

Antes de comparar los datos experimentales con los resultados obtenidos en las simulaciones, fue necesario realizar la calibración de varios de los parámetros de simulación: módulo de elasticidad, densidad de energía de cohesión y diámetro de las partículas de alúmina. Del proceso de calibración se extrajeron las siguientes conclusiones:

- ❁ El módulo de elasticidad y la densidad de energía de cohesión influyen sobre los resultados en mayor medida que el tamaño de las partículas de alúmina.
- ❁ La fuerza máxima aplicada por el punzón crece considerablemente conforme aumenta el módulo de elasticidad y conforme se reduce la densidad de energía de cohesión. También se ve afectada por el diámetro de las partículas de alúmina, especialmente en EDEM.
- ❁ La porosidad de los comprimidos aumenta con el módulo de elasticidad y disminuye con la densidad de energía de cohesión. La porosidad también es mayor cuanto mayor es el tamaño de las partículas de alúmina.
- ❁ La calidad de los comprimidos mejora con valores altos de densidad de energía de cohesión, mientras que empeora con valores altos de módulo de elasticidad.

Tras completar la calibración de los modelos, se compararon los resultados de los ensayos con los obtenidos mediante simulación, alcanzando, en el mejor de los casos, una desviación relativa del 0,5% sobre el valor de la fuerza máxima aplicada por el punzón y del 20% sobre la porosidad de los comprimidos. En todos los casos, la calidad de los comprimidos simulados fue buena. Además, se estimó que la desviación relativa sobre la porosidad se podía reducir hasta un 2% si el tamaño de partícula de alúmina simulado fuera el real. Sin embargo, el coste computacional de dicha simulación sería inaceptable. Por todo ello, se consideró que los modelos de contacto empleados son válidos para analizar ciertos aspectos del proceso de compactación.

Capítulo 5

Conclusiones

5.1. CONCLUSIONES

En este trabajo, se ha aplicado la simulación DEM para analizar los principales procesos que tienen lugar en las máquinas compresoras: la dosificación del material y su compactación.

Puesto que existen dos tipos de máquinas compresoras, las rotativas y las alternativas, y que la forma en que ambas dosifican el material es completamente distinta, se ha simulado el proceso de dosificación en una máquina compresora rotativa y en otra alternativa. Por el contrario, aunque existen distintos métodos de compactación (de simple acción, de doble acción, etc.), el proceso es similar en todas las máquinas, por lo que no se ha hecho ninguna distinción.

Respecto a la dosificación del material, se ha analizado el comportamiento de varias mezclas de materiales granulares durante todo el proceso, desde que se llena el depósito o el zapato con la mezcla hasta que ésta se distribuye en las distintas matrices. De este modo, se han podido identificar los mecanismos de segregación que tienen lugar en cada máquina.

Por una parte, se ha evidenciado que la segregación generada durante el llenado de los depósitos o zapatos tiene gran repercusión sobre la composición de la mezcla contenida en las matrices. Así, se ha identificado que se produce segregación por filtración en todos los casos, pero su efecto sobre la composición de los comprimidos es muy leve. Sin embargo, en aquellos casos en los que la mezcla cae sobre una superficie inclinada, además, se genera segregación por rodadura, que supone un gran impacto en la composición de los comprimidos.

Por otra parte, se ha comprobado que los mecanismos de segregación generados durante el funcionamiento de ambas máquinas son distintos, aunque provocados, en parte, por el movimiento de sus partes móviles. En el caso de la máquina compresora rotativa, se ha observado que, además de influir el tipo de flujo de descarga producido durante el llenado de las matrices, la segregación del material tiene su origen en el movimiento de la platina, que genera un flujo de arrastre de partículas y, éste a su vez, produce otro flujo de partículas que sigue una trayectoria circular. Por el contrario, en la máquina compresora alternativa, la segregación tiene lugar como consecuencia del movimiento del zapato y de la capacidad de cada tipo de partícula para oponerse a ese movimiento.

Finalmente, una vez identificadas las causas de la segregación, se ha propuesto una solución para reducir la segregación generada, que consiste en la inclusión de uno o varios injertos en el interior del depósito o zapato. Esta solución ha resultado eficaz, ya que ha sido posible reducir el índice de segregación hasta un 51%.

Como resultado de los trabajos de investigación relacionados con el proceso de compactación, se ha evaluado la capacidad de las simulaciones DEM para reproducir un proceso real de compactación. Los resultados que se han tenido en cuenta en esta evaluación han sido la fuerza máxima que es aplicada por el punzón, la porosidad del comprimido y su calidad morfológica. Con el fin de comprobar que el proceso se puede simular con cualquier herramienta, se han puesto a prueba dos programas de simulación DEM distintos.

En primer lugar, se ha simulado la compactación de varios materiales granulares formados por partículas de gran tamaño empleando varios modelos de contacto cohesivos. De este modo, se han identificado los modelos de contacto cohesivos equivalentes en ambos simuladores. También se han podido establecer los valores óptimos de varios parámetros de los modelos de simulación (timestep, tolerancia de conversión de las geometrías y velocidad del punzón), de modo que se ha podido partir de ellos a la hora de simular materiales con tamaño de partícula real.

Tras ese análisis, se ha simulado un proceso de compactación real, cuya calibración se ha basado en la determinación de los factores más influyentes sobre los resultados y en un diseño de experimentos mediante el cual se han probado diferentes combinaciones de dichos factores, que han resultado ser el módulo de elasticidad y la densidad de energía de cohesión. Durante el proceso de calibración, además, se ha podido examinar la relación entre esos factores y los resultados obtenidos.

Finalmente, los modelos de simulación han sido validados mediante la comparación de sus resultados con los obtenidos experimentalmente. Los resultados han mostrado muy poca desviación respecto a la fuerza máxima, mientras que se ha identificado que la desviación entre la porosidad real y la obtenida en las simulaciones se reduce conforme el tamaño de las partículas simuladas se aproxima a la granulometría real. Sin embargo, cuanto más se aproxima el modelo y los resultados a la realidad, el coste computacional se incrementa. Puesto que, en todos los casos, la calidad de los comprimidos ha sido correcta, se ha demostrado que las simulaciones DEM son capaces de simular el proceso de compactación, pero es necesario alcanzar un equilibrio entre la bondad de la simulación y el coste computacional.

5.2. FUTURAS LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

En este trabajo, se han investigado dos procesos que tienen lugar en las máquinas compresoras de forma independiente. Aunque de este modo ha sido posible realizar un análisis minucioso de cada uno de los procesos, el examen del funcionamiento global de estas máquinas ha quedado fuera del alcance. Por lo tanto, una línea de investigación futura podría consistir en simular el funcionamiento completo de un equipo de compactación. De este modo, se podría examinar el efecto que tiene la segregación del material en su compactación, tanto como consecuencia de la variabilidad de su composición, como de la distribución de sus componentes dentro de la matriz.

Además, respecto al análisis de la segregación, en este trabajo se han empleado unos determinados materiales y se han simulado unos diseños de máquinas concretos que, además, han tenido unas condiciones de funcionamiento fijadas por las características de los prototipos. Por lo tanto, por una parte, se podrían emplear otros materiales y mezclas con el fin de determinar si los mecanismos de segregación identificados en cada máquina compresora se generan con los nuevos materiales. Por otra parte, se podría continuar este trabajo modificando las geometrías de los equipos o las condiciones de funcionamiento. De este modo, se podría modelar la geometría de una máquina compresora convencional o simular el llenado simultáneo de varias matrices. Además, otros factores que podrían evaluarse serían la velocidad de la platina o del zapato, la velocidad de descenso del punzón (que también podría incluirse en la máquina compresora), etc.

Capítulo 5. Conclusiones

Del mismo modo, en el ámbito de la compactación, se abre un abanico de posibilidades. Se podría continuar el estudio del proceso de compactación, incidiendo en otros factores como la distribución de tensiones internas del comprimido durante el proceso de compresión y después del mismo, la variabilidad de la porosidad en distintas partes del comprimido o su resistencia frente a fuerzas externas. También se podrían investigar otros materiales o su comportamiento cuando las matrices tienen geometrías complejas, así como el proceso de compresión cuando éste se realiza en varios ciclos.

Referencias

- [1] H. M. Jaeger, S. R. Nagel, y R. P. Behringer, «Granular solids, liquids, and gases», *Rev. Mod. Phys.*, vol. 68, pp. 1259-1273, 1996.
- [2] P. A. Cundall y O. D. L. Strack, «A discrete numerical model for granular assemblies», *Géotechnique*, vol. 29, n.º 1, pp. 47-65, 1979.
- [3] S. Wu *et al.*, «DEM simulation of particle size segregation behavior during charging into and discharging from a Paul-Wurth type hopper», *Chem. Eng. Sci.*, vol. 99, pp. 314–323, 2013, doi: 10.1016/j.ces.2013.06.018.
- [4] J. Li, P. a. Langston, C. Webb, y T. Dyakowski, «Flow of sphero-disc particles in rectangular hoppers - A DEM and experimental comparison in 3D», *Chem. Eng. Sci.*, vol. 59, n.º 24, pp. 5917-5929, 2004, doi: 10.1016/j.ces.2004.07.022.
- [5] R. Mukherjee, C. Mao, S. Chatteraj, y B. Chaudhuri, «DEM based computational model to predict moisture induced cohesion in pharmaceutical powders», *Int. J. Pharm.*, vol. 536, pp. 301-309, 2018, doi: 10.1016/j.ijpharm.2017.12.001.
- [6] W. R. Ketterhagen, J. S. Curtis, C. R. Wassgren, y B. C. Hancock, «Modeling granular segregation in flow from quasi-three-dimensional, wedge-shaped hoppers», *Powder Technol.*, vol. 179, n.º 3, pp. 126-143, 2008, doi: 10.1016/j.powtec.2007.06.023.
- [7] Y. Yu y H. Saxén, «Experimental and DEM study of segregation of ternary size particles in a blast furnace top bunker model», *Chem. Eng. Sci.*, vol. 65, n.º 18, pp. 5237-5250, 2010, doi: 10.1016/j.ces.2010.06.025.
- [8] W. R. Ketterhagen, J. S. Curtis, C. R. Wassgren, A. Kong, P. J. Narayan, y B. C. Hancock, «Granular segregation in discharging cylindrical hoppers: A discrete element and experimental study», *Chem. Eng. Sci.*, vol. 62, n.º 22, pp. 6423-6439, 2007, doi: 10.1016/j.ces.2007.07.052.
- [9] W. R. Ketterhagen y B. C. Hancock, «Optimizing the design of eccentric feed hoppers for tablet presses using DEM», *Comput. Chem. Eng.*, vol. 34, n.º 7, pp. 1072-1081, 2010, doi: 10.1016/j.compchemeng.2010.04.016.
- [10] M. Combarros Garcia, H. J. Feise, S. Strege, y A. Kwade, «Segregation in heaps and silos: Comparison between experiment, simulation and continuum model», *Powder Technol.*, vol. 293, pp. 26–36, 2016, doi: 10.1016/j.powtec.2015.09.036.
- [11] Y. Guo, C. Y. Wu, y C. Thornton, «The effects of air and particle density difference on segregation of powder mixtures during die filling», *Chem. Eng. Sci.*, vol. 66, n.º

Referencias

- 4, pp. 661-673, 2011, doi: 10.1016/j.ces.2010.11.017.
- [12] R. Furukawa *et al.*, «Size-induced segregation during pharmaceutical particle die filling assessed by response surface methodology using discrete element method», *J. Drug Deliv. Sci. Technol.*, vol. 35, pp. 284-293, 2016, doi: 10.1016/j.jddst.2016.08.004.
- [13] Y. Guo, C. Y. Wu, K. D. Kafui, y C. Thornton, «Numerical analysis of density-induced segregation during die filling», *Powder Technol.*, vol. 197, n.º 1-2, pp. 111-119, 2009, doi: 10.1016/j.powtec.2009.09.003.
- [14] E. N. Nwose, C. Pei, y C. Y. Wu, «Modelling die filling with charged particles using DEM/CFD», *Particuology*, vol. 10, pp. 229-235, 2012, doi: 10.1016/j.partic.2011.11.010.
- [15] Y. Guo, C. Y. Wu, K. D. Kafui, y C. Thornton, «3D DEM/CFD analysis of size-induced segregation during die filling», *Powder Technol.*, vol. 206, n.º 1-2, pp. 177-188, 2011, doi: 10.1016/j.powtec.2010.05.029.
- [16] H. Yao, Y. Mori, K. Takabatake, X. Sun, y M. Sakai, «Numerical investigation on the influence of air flow in a die filling process», *J. Taiwan Inst. Chem. Eng.*, vol. 90, pp. 9-17, 2018, doi: 10.1016/j.jtice.2017.11.031.
- [17] Y. Tsunazawa, Y. Shigeto, C. Tokoro, y M. Sakai, «Numerical simulation of industrial die filling using the discrete element method», *Chem. Eng. Sci.*, vol. 138, pp. 791-809, 2015, doi: 10.1016/j.ces.2015.09.014.
- [18] L. Martínez-Martínez, E. Sáinz-García, J. Muro-Hernández, F. Alba-Elías, y A. González-Marcos, «Segregation of a binary granular mixture in a feed shoe of a single punch press», en *Project Management and Engineering, Lecture Notes in Management and Industrial Engineering*, 2013, pp. 249-263, doi: 10.1007/978-3-319-12754-5_19.
- [19] S. R. Gopireddy, C. Hildebrandt, y N. A. Urbanetz, «Numerical simulation of powder flow in a pharmaceutical tablet press lab-scale gravity feeder», *Powder Technol.*, vol. 302, pp. 309-327, 2016, doi: 10.1016/j.powtec.2016.08.065.
- [20] C. Hildebrandt, S. R. Gopireddy, R. Scherließ, y N. A. Urbanetz, «Simulation of particle size segregation in a pharmaceutical tablet press lab-scale gravity feeder», *Adv. Powder Technol.*, vol. 29, n.º 3, pp. 765-780, mar. 2018, doi: 10.1016/j.appt.2017.12.019.
- [21] C. Hildebrandt, S. R. Gopireddy, R. Scherließ, y N. Urbanetz, «Numerical Analysis of the Die Filling Process Within a Pharmaceutical Tableting Machine», *Chemie-Ingenieur-Technik*, vol. 90, n.º 4, pp. 483-492, abr. 2018, doi: 10.1002/cite.201700114.
- [22] C. Hildebrandt, S. R. Gopireddy, R. Scherließ, y N. A. Urbanetz, «Assessment of material and process attributes' influence on tablet quality using a QbD and DEM

- combined approach», *Powder Technol.*, vol. 345, pp. 390-404, mar. 2019, doi: 10.1016/j.powtec.2019.01.015.
- [23] D. Mateo-Ortiz, F. J. Muzzio, y R. Méndez, «Particle size segregation promoted by powder flow in confined space: The die filling process case», *Powder Technol.*, vol. 262, pp. 215-222, 2014, doi: 10.1016/j.powtec.2014.04.023.
- [24] D. Mateo-Ortiz y R. Méndez, «Relationship between residence time distribution and forces applied by paddles on powder attrition during the die filling process», *Powder Technol.*, vol. 278, pp. 111-117, 2015, doi: 10.1016/j.powtec.2015.03.015.
- [25] D. Mateo-Ortiz y R. Méndez, «Microdynamic analysis of particle flow in a confined space using DEM: The feed frame case», *Adv. Powder Technol.*, vol. 27, pp. 1597–1606, 2016, doi: 10.1016/j.appt.2016.05.023.
- [26] C. Hildebrandt, S. R. Gopireddy, R. Scherließ, y N. A. Urbanetz, «Investigation of powder flow within a pharmaceutical tablet press force feeder – A DEM approach», *Powder Technol.*, vol. 345, pp. 616-632, mar. 2019, doi: 10.1016/j.powtec.2019.01.040.
- [27] W. R. Ketterhagen, «Simulation of powder flow in a lab-scale tablet press feed frame: Effects of design and operating parameters on measures of tablet quality», *Powder Technol.*, vol. 275, pp. 361-374, 2015, doi: 10.1016/j.powtec.2015.01.073.
- [28] W. Grymonpré *et al.*, «Optimizing feed frame design and tableting process parameters to increase die-filling uniformity on a high-speed rotary tablet press», *Int. J. Pharm.*, vol. 548, n.º 1, pp. 54-61, sep. 2018, doi: 10.1016/j.ijpharm.2018.06.047.
- [29] D. J. Muro Hernández, «Modelizado y optimización del proceso de compresión de aditivos alimentarios mediante DEM (Discrete Element Method)», Universidad de La Rioja, 2015.
- [30] J. Horabik y M. Molenda, «Parameters and contact models for DEM simulations of agricultural granular materials: A review», *Biosyst. Eng.*, vol. 147, pp. 206-225, 2016, doi: 10.1016/j.biosystemseng.2016.02.017.
- [31] S. Garner, J. Strong, y A. Zavaliangos, «Study of the die compaction of powders to high relative densities using the discrete element method», *Powder Technol.*, vol. 330, pp. 357-370, may 2018, doi: 10.1016/j.powtec.2018.02.015.
- [32] A. Janda y J. Y. Ooi, «DEM modeling of cone penetration and unconfined compression in cohesive solids», *Powder Technol.*, 2016, doi: 10.1016/j.powtec.2015.05.034.
- [33] S. C. Thakur, J. P. Morrissey, J. Sun, J. F. Chen, y J. Y. Ooi, «Micromechanical analysis of cohesive granular materials using the discrete element method with an adhesive elasto-plastic contact model», *Granul. Matter*, 2014, doi: 10.1007/s10035-014-0506-4.

Referencias

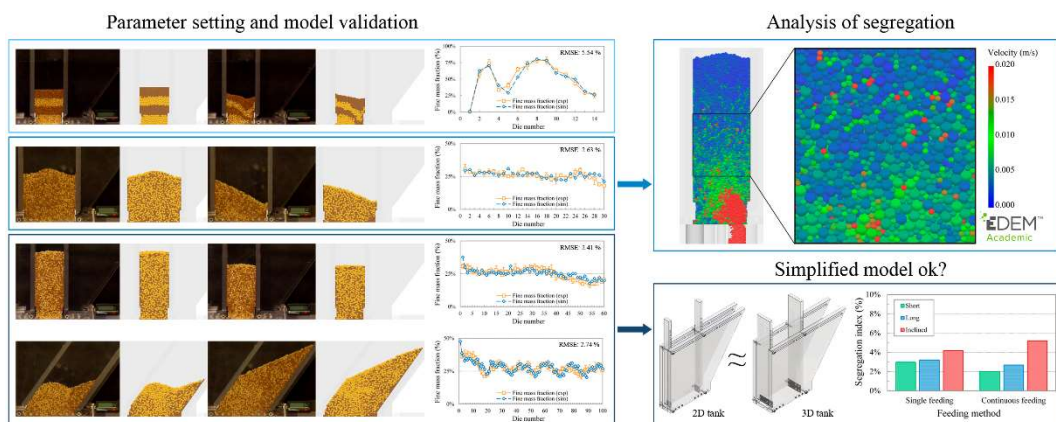
- [34] S. C. Thakur, J. Y. Ooi, y H. Ahmadian, «Scaling of discrete element model parameters for cohesionless and cohesive solid», *Powder Technol.*, 2016, doi: 10.1016/j.powtec.2015.05.051.
- [35] J. Yoon, «Application of experimental design and optimization to PFC model calibration in uniaxial compression simulation», *Int. J. Rock Mech. Min. Sci.*, 2007, doi: 10.1016/j.ijrmms.2007.01.004.
- [36] Y. He, Z. Wang, T. J. Evans, A. B. Yu, y R. Y. Yang, «DEM study of the mechanical strength of iron ore compacts», *Int. J. Miner. Process.*, 2015, doi: 10.1016/j.minpro.2015.05.005.
- [37] Y. He, T. J. Evans, A. B. Yu, y R. Y. Yang, «DEM investigation of the role of friction in mechanical response of powder compact», *Powder Technol.*, 2017, doi: 10.1016/j.powtec.2017.06.055.
- [38] Y. He y F. Guo, «Micromechanical analysis on the compaction of tetrahedral particles», *Chem. Eng. Res. Des.*, vol. 136, pp. 610-619, 2018, doi: 10.1016/j.cherd.2018.06.019.
- [39] Y. He, T. J. Evans, Y. S. Shen, A. B. Yu, y R. Y. Yang, «Discrete modelling of the compaction of non-spherical particles using a multi-sphere approach», *Miner. Eng.*, 2018, doi: 10.1016/j.mineng.2017.12.013.
- [40] J. Wiacek, M. Molenda, J. Horabik, y J. Y. Ooi, «Influence of grain shape and intergranular friction on material behavior in uniaxial compression: Experimental and DEM modeling», *Powder Technol.*, 2012, doi: 10.1016/j.powtec.2011.10.060.
- [41] J. Wiącek y M. Molenda, «Effect of particle size distribution on micro-and macromechanical response of granular packings under compression», *Int. J. Solids Struct.*, 2014, doi: 10.1016/j.ijsolstr.2014.06.029.
- [42] J. Nordström, G. Alderborn, y G. Frenning, «Compressibility and tablet forming ability of bimodal granule mixtures: Experiments and DEM simulations», *Int. J. Pharm.*, vol. 540, pp. 120-131, 2018, doi: 10.1016/j.ijpharm.2018.02.006.
- [43] C. Ramírez-Aragón, F. Alba-Elías, A. González-Marcos, y J. Ordieres-Meré, «Segregation in the tank of a rotary tablet press machine using experimental and discrete element methods», *Powder Technol.*, vol. 328, pp. 452-469, 2018, doi: 10.1016/j.powtec.2018.01.054.
- [44] C. Ramírez-Aragón, F. Alba-Elías, A. González-Marcos, y J. Ordieres-Meré, «Improving the feeder shoe design of an eccentric tablet press machine», *Powder Technol.*, vol. 372, pp. 542-562, jul. 2020, doi: 10.1016/j.powtec.2020.05.104.
- [45] C. Ramírez-Aragón, J. Ordieres-Meré, F. Alba-Elías, y A. González-Marcos, «Comparison of Cohesive Models in EDEM and LIGGGHTS for Simulating Powder Compaction», *Materials (Basel)*, vol. 11, 2341, 2018, doi: 10.3390/ma11112341.

-
- [46] C. Ramírez-Aragón, J. Ordieres-Meré, F. Alba-Elías, y A. González-Marcos, «Numerical modeling for simulation of compaction of refractory materials for secondary steelmaking», *Materials (Basel)*., vol. 13, n.º 1, ene. 2020, doi: 10.3390/ma13010224.
- [47] H. Hertz, «On the contact of elastic solids», *J. reine und Angew. Math.*, vol. 92, pp. 156-171, 1882.
- [48] R. D. Mindlin y H. Deresiewicz, «Elastic spheres in contact under varying oblique forces», *ASME*, pp. 327-344, 1953.
- [49] Y. Tsuji, T. Tanaka, y T. Ishida, «Lagrangian numerical simulation of plug flow of cohesionless particles in a horizontal pipe», *Powder Technol.*, vol. 71, pp. 239-250, 1992.
- [50] E. Sakaguchi, E. Ozaki, y T. Igarashi., «Plugging of the flow of granular materials during the discharge from a silo», *Int. J. Mod. Phys. B* 7, pp. 1949-1963, 1993.
- [51] Y. C. Zhou, B. D. Wright, R. Y. Yang, B. H. Xu, y A. B. Yu., «Rolling friction in the dynamic simulation of sandpile formation», *Phys. A Stat. Mech. its Appl.*, vol. 269, pp. 536-553, 1999.
- [52] J. Gyenis, «2nd Israel Conference for Conveying and Handling of Particulate Solids», en *Segregation-free particle mixing*, 1997.
- [53] G. G. Enstad, «Segregation of powders - mechanisms, processes and counteraction», *Handb. Powder Technol.*, 2001, doi: 10.1016/S0167-3785(01)80061-0.
- [54] Martínez Martínez Laura, «Estudio de la segregación de una mezcla granular en una máquina compresora mediante el método de los elementos discretos (DEM)», Universidad de La Rioja, Logroño, 2017.
- [55] R. Aragon, M. Fraguas, M. Vidal, S. García, y A. Elías, «Mejora del depósito de una máquina compresora rotativa mediante la simulación DEM», en *22nd International Congress on Project Management and Engineering. Madrid, 11-13 julio*, 2018, pp. 911-923.
- [56] H. Yi, A. Pandeya, A. Karamchandani, y V. M. Puri, «Critical review on engineering mechanical quality of green compacts using powder properties», *KONA Powder and Particle Journal*, vol. 2018, n.º 35. Hosokawa Powder Technology Foundation, pp. 32-48, 2018.

Publicaciones

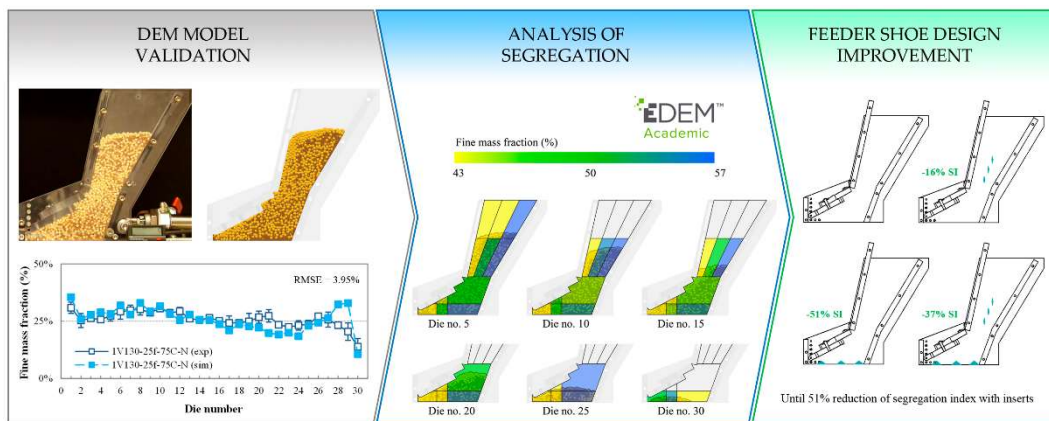
Publicación 1

C. Ramírez-Aragón, F. Alba-Elías, A. González-Marcos, y J. Ordieres-Meré, «Segregation in the tank of a rotary tablet press machine using experimental and discrete element methods», Powder Technol., vol. 328, pp. 452-469, 2018, doi: 10.1016/j.powtec.2018.01.054.



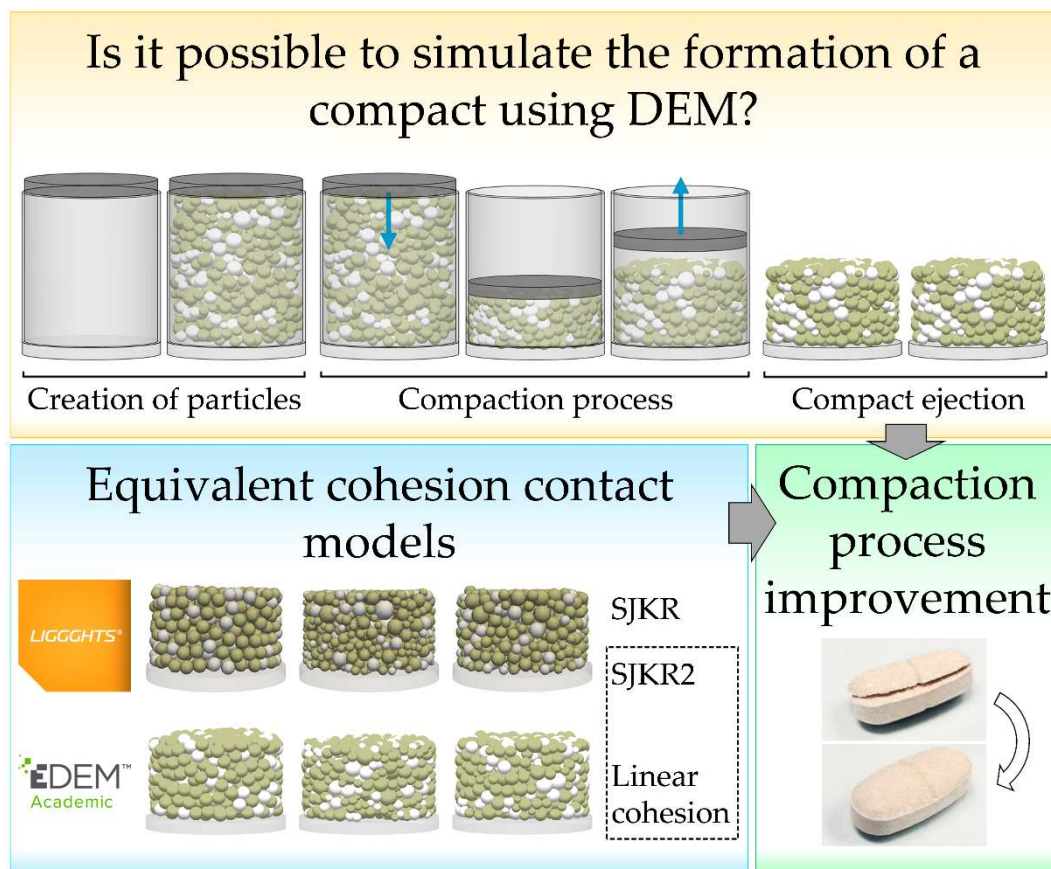
Publicación 2

C. Ramírez-Aragón, F. Alba-Elías, A. González-Marcos, y J. Ordieres-Meré, «Improving the feeder shoe design of an eccentric tablet press machine», Powder Technol., vol. 372, pp. 542-562, 2020, doi: 10.1016/j.powtec.2020.05.104.





Publicación 3

C. Ramírez-Aragón, J. Ordieres-Meré, F. Alba-Eliás, y A. González-Marcos, «Comparison of Cohesive Models in EDEM and LIGGGHTS for Simulating Powder Compaction», *Materials.*, vol. 11, 2341, 2018, doi: 10.3390/ma11112341.



Article

Comparison of Cohesive Models in EDEM and LIGGGHTS for Simulating Powder Compaction

Cristina Ramírez-Aragón¹, Joaquín Ordieres-Meré^{2,3,*} , Fernando Alba-Eliás¹
and Ana González-Marcos¹ 

¹ Department of Mechanical Engineering, University of La Rioja, C/Luis de Ulloa, 20, 26004 Logroño, Spain; maria-cristina.ramirez@alum.unirioja.es (C.R.-A.); fernando.alba@unirioja.es (F.A.-E.); ana.gonzalez@unirioja.es (A.G.-M.)

² Department of Industrial Engineering, Business Administration and Statistics, Polytechnic University of Madrid, C/José Gutiérrez Abascal, 2, 28006 Madrid, Spain

³ Visiting Scholar at École Polytechnique, Route de Saclay, 91128 Palaiseau, France

* Correspondence: j.ordieres@upm.es; Tel.: +34-91-336-3144

Received: 3 October 2018; Accepted: 17 November 2018; Published: 21 November 2018



Abstract: The purpose of this work was to analyse the compaction of a cohesive material using different Discrete Element Method (DEM) simulators to determine the equivalent contact models and to identify how some simulation parameters affect the compaction results (maximum force and compact appearance) and computational costs. For this purpose, three cohesion contact models were tested: linear cohesion in EDEM, and simplified Johnson-Kendall-Roberts (SJKR) and modified SJKR (SJKR2) in LIGGGHTS. The influence of the particle size distribution (PSD) on the results was also investigated. Further assessments were performed on the effect of (1) selecting different timesteps, (2) using distinct conversion tolerances to export the three-dimensional models to standard triangle language (STL) files, and (3) moving the punch with different speeds. Consequently, we determined that a timestep equal to a 10% Rayleigh timestep, a conversion tolerance of 0.01 mm, and a punch speed of 0.1 m/s is adequate for simulating the compaction process using the materials and the contact models in this work. The results showed that the maximum force was influenced by the PSD due to the rearrangement of the particles. The PSD was also related to the computational cost because of the number of simulated particles and their sizes. Finally, an equivalence was found between the linear cohesion and SJKR2 contact models.

Keywords: powder compaction; discrete element method (DEM); cohesive contact models; LIGGGHTS; EDEM

1. Introduction

Granular materials are compacted to form solid components in the powder metallurgy and ceramic industries. Some of the problems that occur during the compaction process are related to segregation of the materials, the weight variability or non-uniform density in compacts, and inadequate selection of the materials (without plasticity, lubricant, or binding agents) [1,2]. Using adequate simulation models may help engineers to address these constraints to develop new products.

The discrete element method (DEM) allows a variety of granular materials to be simulated by selecting an adequate contact model [3]. DEM has been used to analyse the mechanisms of segregation that occur when a hopper is filled or discharged with dry granules using non-cohesive contact models [4,5]. These contact models have also been used in other applications, such as to improve blending machines [6,7] and screeners [8,9]. These non-cohesive models may simulate elastic, elastic-plastic, or visco-elastic materials. The effect of the moisture content on particles is usually

modelled by applying cohesive contact models that consider the Van der Waals forces to calculate the contact between the particles [10]. Other cohesive models are used to simulate the behavior of small-sized particles (powders) that tend to agglomerate by introducing an attraction force that pulls the particles toward each other, leading to the adhesion of the particles. Another contact model, called the bonded-particle model, establishes the bonds between the particles to keep them joined. Once the stress between two particles exceeds a critical value, the bond breaks. These models are used to simulate the mill process [11,12] or to determine the failure of structural materials [13,14].

Some of these contact models have been used to examine the behaviors of different materials during the formation of a compact. For example, Janda and Ooi [15] simulated the consolidation process of real soils by modelling a uniaxial confined compression. Then, they used the same model to analyse the penetration resistance of cohesive soils. Thakur et al. [16] simulated the compaction of detergent powders to form a cylindrical sample and analysed the relationship between the porosity of the compact and the consolidation stress. The results were contrasted with experimental data. Following this, an unconfined compression test was simulated. The stress-strain curves during failure were compared. Aranda [17] simulated the compaction of a refractory disc using different particle size distributions (PSDs) and materials. The porosity and permeability of the compacts were analysed in all cases. Other authors studied the effect of the PSD [18,19] and examined the influence of the particle shape [20,21] on the compaction process.

Different software packages for DEM simulations have been introduced. Some of them, such as EDEM[®] (version 2018, DEM Solutions Ltd., Edinburgh, UK), ROCKY[®] (version 4.1, ESSS, Florianópolis, Brazil), and PFC[™] (version 6.0, Itasca Consulting Group, Inc., Minneapolis, MN, USA), are commercially distributed, but other ones, like LIGGGHTS[®] (version LIGGGHTS-PUBLIC 3.3.1, DCS Computing GmbH, Linz, Austria) or YADE (The Yade Project [22]), are open-source packages. All these software programs provide several contact models, so it is possible to choose the most appropriate program for simulating different processes or systems. For example, Jiménez-Herrera et al. [23] simulated the breakage of particle beds due to the impact of a ball using three contact models. Two of them were implemented in EDEM and the other in ROCKY. Some features, including the ease of using each model and the similitude of the simulation results with an experiment, were analysed. Another interesting approach is comparing the results using different simulation packages. Wei et al. [24] investigated the charging system of an ironmaking blast furnace using a non-cohesive model in EDEM and LIGGGHTS. The results obtained using each software program were compared. A good agreement was found between them and the experimental data. Similarly, Markauskas et al. [25] compared the results obtained using EDEM and DEMMAT (swMATH, Berlin, Germany) during a silo discharge. Soltanbeigi et al. [26] used the multi-sphere approach in EDEM and superquadric shapes in LIGGGHTS to simulate the behavior of non-spherical particles during different processes, such as heap formation, shear testing, or discharging of a silo. They also compared the results obtained using both software programs. Kozhar et al. [27] tested an irregular-shaped particle under uniaxial compression and then simulated the particle with DEM. They used two types of software for that purpose: EDEM and MUSEN (Institute of Applied Mechanics, Braunschweig, Germany). Two contact models were applied in EDEM, where a multi-sphere approach was used to simulate the irregular shape of the particle. In MUSEN, the particle was simulated with a bonded-particle model, where different models defined the characteristics of the bonds.

To satisfy the interest in the different DEM simulators and contact models, in this work, DEM was used to analyse the capability of some cohesion contact models to simulate the compaction of a granular mixture to form a compact. A system including a matrix and two punches was used for this purpose. Three cohesion contact models implemented in two software packages were applied to simulate the particles' behavior. The results obtained using the different contact models were compared to determine their equivalence. The analysis considered the maximum force applied by the upper punch, the percentage of eliminated contacts after the ejection of the compact, and the computational costs required by the simulations. Three PSDs were modelled to observe the influence of the materials'

granulometric properties on the compaction process. The influence of some parameters, such as the timestep, geometries, and speed of the punch on the results, were studied. The optimal values of these parameters for simulating the compaction process using these contact models were determined. Consequently, these values could be used in future works to model the compaction of other materials.

Although the effects of the PSD or the speed of the punches on the compaction process are known, the novelty of this work is the use of different DEM simulators to compare several contact models and find equivalent models implemented in each DEM package. No references in the literature compare cohesive models implemented in different DEM simulators and apply them to the compaction of powders. Thereby, this study may be useful for those that use the commercial package EDEM, but also for people that use the open-source package LIGGGHTS. The results of this study provide a perspective on multiple simulation tools. This research might be interesting for future simulations of the compaction process because it provides some keys to defining the DEM models and reducing the computational costs of the simulations.

2. Materials and Methods

This section presents the characteristics of the DEM models that were simulated using EDEM and LIGGGHTS. It describes how the models were defined in each type of DEM software in order to prevent differences between both simulators, and presents the details about the methodology used in this work.

2.1. Discrete Element Method (DEM)

The discrete element method proposed by Cundall and Strack [28] is a numerical method that is capable of simulating the mechanical behavior of a granular medium that is composed of an assembly of particles that displace independently and interact with the other particles at their contact points. This method is based on the application of Newton's second law of particles and a force-displacement law at the contacts. The properties of the particles (position, velocity, and forces acting on them) are updated at every timestep. At each timestep, a calculation cycle is completed. This cycle begins with the detection of contacts between particles. At this time, the contact point and the overlap between two particles in contact are calculated. Then, they are used to obtain the contact forces by applying the force-displacement laws. Once the forces and the moments applied to each particle have been calculated, the motion of each particle is calculated using Newton's second law. Thereby, the acceleration, velocity, and positions of the particles are updated using a time integration algorithm, and the calculation cycle is completed. The updated values are used to detect the subsequent contacts and another cycle begins. Because an explicit integration technique performs the updates, the timestep must be very small to obtain stable numerical solutions. The maximum value of the timestep at which the solutions to the simulations are stable is known as the critical timestep. Different criteria have been defined to calculate the critical timestep, but the Rayleigh critical timestep ($\Delta T_{Rayleigh}$) is used most frequently. These criteria are calculated as a function of the radius (R), the density (ρ), the shear modulus (G), and the Poisson ratio (ν) of the particles:

$$\Delta T_{Rayleigh} = \frac{\pi R}{0.163\nu + 0.8766} \sqrt{\frac{\rho}{G}} \quad (1)$$

The displacements of each particle are obtained by explicitly integrating Newton's differential equations of motion:

$$m_i \frac{d^2}{dt^2} x_i = \sum_j (F_{n,ij} + F_{t,ij}) + m_i g \quad (2)$$

$$I_i \frac{d\omega_i}{dt} = \sum_j (T_{ij}) \quad (3)$$

where m_i , I_i , x_i , and ω_i are the mass, the moment of inertia, the position, and the angular velocity of particle i , respectively; g is the acceleration due to gravity, and $F_{n,ij}$, $F_{t,ij}$, and T_{ij} are the normal force,

the tangential force, and the torque between particles i and j , respectively. The effect of rolling friction was ignored in this work, so its calculation is not shown in this section.

The force-displacement laws, named contact models, are used to calculate forces between particles ($F_{n,ij}$ and $F_{t,ij}$). In this work, a modification of the Hertz-Mindlin contact model was used. This consists of the addition of a normal cohesion force ($F_{n,cohesion,ij}$). Therefore, $F_{n,ij}$ and $F_{t,ij}$ were calculated as follows:

$$F_{n,ij} = F_{n,HM,ij} + F_{n,cohesion,ij} \quad (4)$$

$$F_{t,ij} = F_{t,HM,ij} \quad (5)$$

where $F_{n,HM,ij}$ and $F_{t,HM,ij}$ are the normal and tangential forces between particles i and j , respectively, calculated using the Hertz-Mindlin contact model.

In the Hertz-Mindlin model [29], the normal force is based on the Hertzian contact theory, the Mindlin and Deresiewicz theory is used to calculate the tangential force, and the tangential friction force is calculated according to the Coulomb law of friction. In addition to these forces, a damping component is implemented. The following equations include all these components:

$$F_{n,HM,ij} = \frac{4}{3} E_{ij} \delta_{n,ij}^{\frac{3}{2}} \sqrt{R_{ij}} - \sqrt{\frac{20}{3}} \frac{(\ln e)}{\sqrt{\ln^2 e + \pi^2}} (m_{ij} E_{ij} \sqrt{R_{ij} \delta_{n,ij}})^{\frac{1}{2}} v_{n,ij} \quad (6)$$

$$F_{t,HM,ij} = \min \left[\mu_{s,ij} F_{n,HM,ij} \left| -8 G_{ij} \delta_{t,ij} \sqrt{R_{ij} \delta_{n,ij}} - \sqrt{\frac{80}{3}} \frac{(\ln e)}{\sqrt{\ln^2 e + \pi^2}} (m_{ij} G_{ij} \sqrt{R_{ij} \delta_{n,ij}})^{\frac{1}{2}} v_{t,ij} \right| \right] \quad (7)$$

where $\delta_{n,ij}$ and $\delta_{t,ij}$ are the normal and tangential overlap between particles i and j , respectively; $v_{n,ij}$ and $v_{t,ij}$ are the normal and tangential components of the relative velocity between particles i and j , respectively; $\mu_{s,ij}$ is the coefficient of static friction between particles i and j ; E_{ij} is the equivalent Young's modulus; G_{ij} is the equivalent shear modulus; R_{ij} is the equivalent radius; and m_{ij} is the equivalent mass. They are defined as:

$$\frac{1}{E_{ij}} = \frac{1 - \nu_i^2}{E_i} + \frac{1 - \nu_j^2}{E_j} \quad (8)$$

$$\frac{1}{G_{ij}} = \frac{2 - \nu_i}{G_i} + \frac{2 - \nu_j}{G_j} \quad (9)$$

$$\frac{1}{R_{ij}} = \frac{1}{R_i} + \frac{1}{R_j} \quad (10)$$

$$\frac{1}{m_{ij}} = \frac{1}{m_i} + \frac{1}{m_j} \quad (11)$$

where E_i , G_i , ν_i , R_i and m_i are the Young's modulus, shear modulus, Poisson's ratio, radius and mass of the particle i , respectively; E_j , G_j , ν_j , R_j and m_j are the Young's modulus, shear modulus, Poisson's ratio, radius and mass of the particle j , respectively.

The normal cohesion force is calculated as follows:

$$F_{n,cohesion,ij} = k_{ij} A_{ij} \quad (12)$$

where k_{ij} is the cohesion energy density and A_{ij} is the contact area between particles i and j . The contact area is calculated through Equations (13) or (14) depending on the contact model.

2.2. DEM Simulations

The DEM simulations were performed using two different software programs: EDEM[®] 2.7.2 (DEM Solutions Ltd., Edinburgh, UK) and LIGGGHTS[®] version LIGGGHTS-PUBLIC 3.3.1 (DCS Computing

GmbH, Linz, Austria). The postprocessing of the simulations that were run in LIGGGHTS was performed using PARAVIEW version 4.4.0 64-bit (Kitware Inc., New York, NY, USA). The simulations were conducted on a server with 64 GB of RAM with a $2 \times$ Intel Xeon Quad-core 2.0 GHz E5504 CPU (© Intel Corporation, Santa Clara, CA, USA). The simulations in LIGGGHTS were run on a single processor. In contrast, the simulations in EDEM were run in batch mode using four cores.

To search for equivalent cohesion contact models in both DEM packages, three contact models were used in this work. The linear cohesion contact model was used in the simulations run in EDEM. In LIGGGHTS, the simplified Johnson-Kendall-Roberts (SJKR) and modified SJKR (SJKR2) models were applied. The reason for choosing these contact models was that they all calculate the cohesion force as a normal force that is proportional to the contact area, as shown in Equation (12). Other cohesion contact models are available in both software programs, but they consider other forces, such as the liquid bridge force (e.g., the Hertz-Mindlin with JKR cohesion model in EDEM or the easo/capillary/viscous and washino/capillary/viscous models in LIGGGHTS). This means that other parameters, different from the cohesion energy density and contact area, are considered for the calculation of the force. Therefore, the equations that define the cohesion force are also different. Although the three contact models that were used in this work seem to be equivalent, they calculate the contact area using different methods. The contact area in the SJKR2 and linear cohesion models is calculated as a simplification of the contact area used in the SJKR model. The latter uses the area of the circle corresponding to the intersection of two spheres with different diameters [30], whereas the first considers the equivalent radius. The contact area (A_{ij}) between particles i and j is calculated in each contact model as follows:

$$A_{ij(SJKR)} = \frac{\pi}{4} \frac{(-d + R_i + R_j)(d + R_i - R_j)(d - R_i + R_j)(d + R_i + R_j)}{d^2} \quad (13)$$

$$A_{ij(SJKR2, linear\ cohesion)} = 2\pi\delta_{n,ij}R_{ij} \quad (14)$$

where R_i and R_j are the radii of particles i and j , respectively; d is the distance between their centers; $\delta_{n,ij}$ is the normal overlap between particles i and j that is calculated as $R_i + R_j - d$; and R_{ij} is the equivalent radius, see Equation (10). Despite this difference, it could be interesting to analyse how the results and computational costs are influenced by this factor.

The compaction mechanism in the uniaxial presses used to form compacts is generally composed of two punches and a matrix. The punches compact the powder into the required shape that is determined by the shape of the matrix when pressure is applied. The geometries of the components that were used in this work and their dimensions are depicted in Figure 1.

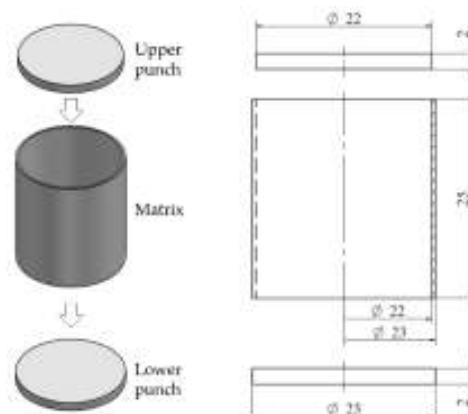


Figure 1. Geometries used in discrete element method (DEM) simulations. Dimensions are expressed in mm.

The process that was simulated in this work consisted of the three following stages, as shown in Figure 2: the creation of the particles, the compaction process, and compact ejection. During the creation process, the particles were created in a cylindrical factory. This factory was a virtual geometry located in the initial assembly of the physical components (punches and matrix). At this moment, the upper punch was located 25 mm away from the lower punch. After the particle creation was completed, the compaction process began by moving down the upper punch with a constant velocity. This movement stopped when the distance between the punches was 8 mm. At this moment, the upper punch applied the maximum force. Then, the upper punch began its upward movement with the same velocity. The movement ceased when the upper punch was placed at a height of 16 mm. Finally, the matrix was removed, and the simulation process ended after waiting for 0.05 s. Although in real applications the punch remains at its lower position during a dwell time, this aspect was not simulated in order to reduce the computational costs. By using an appropriate dwell time, some of the defects in the compacts are reduced [31,32]. However, the quality of the compacts was not analysed in this work. Another difference between the simulations performed in this work and real applications is that the compact is ejected from the matrix in real processes, whereas the matrix disappeared in the simulations. Consequently, the effect of the friction between the compact and the wall of the matrix was ignored in the simulations. Nevertheless, the processes that were simulated in this work were valid for comparing the contact models and analysing their applicability to compact granular materials. To simulate this process, the geometries of each component (punches and matrix) were generated on computer-aided design (CAD) software (Solid Edge Version 18, © UGS Corp., Plano, TX, USA) and then imported into the DEM software as standard triangle language (STL) files.

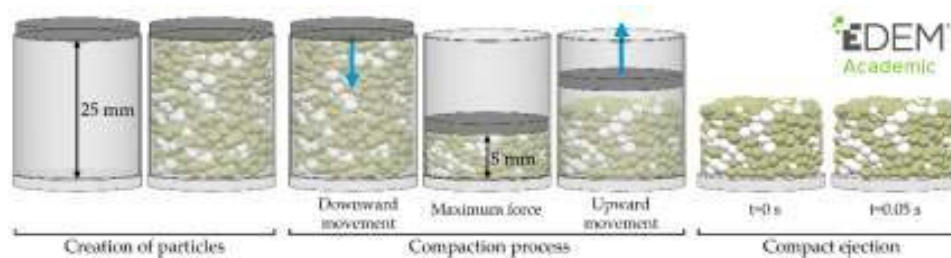


Figure 2. Stages of the simulated process.

Two granular materials were simulated in this work. Their properties are shown in Table 1. Although the particle sizes of these materials and some of their properties were unreal, they mimicked the simulation of two real materials. The Young's modulus of the real materials are approximately 200–250 GPa, but lower values are usually used to simulate materials at a reasonable computational cost [33]. The reduction in the computational cost was crucial in this work because of the number of simulations that were performed. Preliminary simulations were performed to determine some of the interaction parameters. The effect of the rolling friction on the results was analysed by comparing different simulations, in which values in the range of 0 to 0.05 were assigned to the materials. The results of these simulations revealed a small influence of the rolling friction. Therefore, the effect of the rolling friction was ignored in all cases. The coefficient of static friction was 0.5, and the coefficient of restitution was 0.2 for all possible interactions (particle–particle, particle–wall, and wall–wall). The cohesion effect was only applied to the interparticle contacts. The value of cohesion energy density was $3 \times 10^6 \text{ J/m}^3$ in all of the simulations. The cohesion energy density is strongly dependent on some of the properties of the materials, such as the Young's modulus and particle size. Its calibration is necessary to accurately simulate the cohesive behavior of real materials. However, the purpose of this work was to analyse the capability of different cohesion contact models to simulate the compaction process. Therefore, the calibration of the cohesion energy density in this work involved determining the optimal value that allowed the formation of a compact. The value used in this work was determined after performing

several simulations with values of cohesion energy densities in the range of 1 to 5×10^6 J/m³. These simulations showed stability problems at high values, whereas low values were not capable of keeping the particles joined after the compaction.

Table 1. Summary of material properties used in the DEM simulations.

Material Property	Material 1	Material 2	Wall
Mean diameter (mm)	2.1	2.1	-
Density (kg/m ³)	3500	3000	8000
Young's modulus (Pa)	2.5×10^8	2.5×10^8	2.0×10^8
Poisson's ratio	0.25	0.25	0.25

A combination of different materials is commonly used in the metallurgical industry [34]. Thus, a mixture of Materials 1 and 2 in weighted proportions of 80% and 20%, respectively, was used. Material 1 was colored beige and Material 2 was colored white, as shown in Figures 2 and 3, to distinguish between the particles of each material. To examine the influence of the size of particles, three different PSDs were analysed. These PSDs were as follows: monosized particles (MP), uniform distribution (UD), and normal distribution (ND). The sizes of all the particles were the same in the first PSD (MP). The mixture of the second one (UD) consisted of the same particle size proportions by weight. The sizes of the particles followed a normal distribution in the last one (ND). Figure 3 shows the number of particles of each size that were created to simulate the mixtures using the different PSDs.

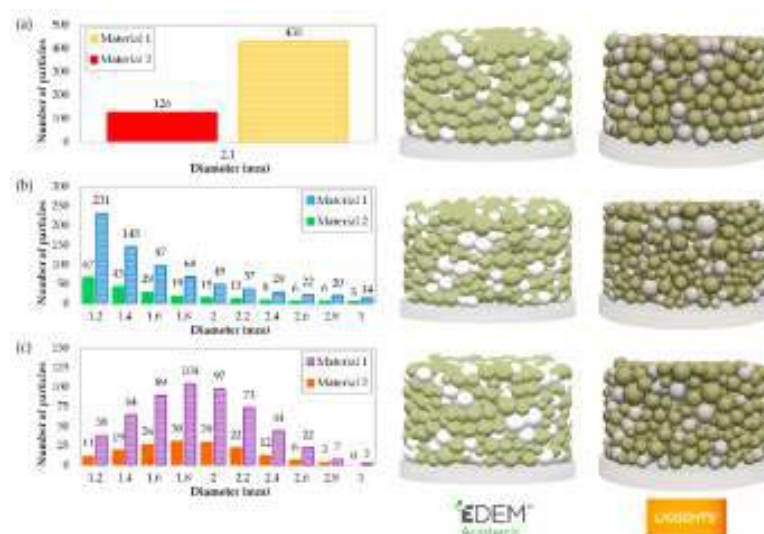


Figure 3. Number of particles used in the DEM simulations and the appearance of compacts obtained in both software programs with different particle size distributions (PSDs): (a) monosized particles (MP), (b) uniform distribution (UD), and (c) normal distribution (ND).

The simulations were initially run in LIGGGHTS. After visualization of the simulated system in PARAVIEW, the simulations were conducted in EDEM. Thus, the simulations in EDEM were modelled exactly like their homologues in LIGGGHTS. This was possible due to controlling all the parameters and dynamics of the models throughout the EDEM interface. For example, both software programs enabled the automatic creation of a set of particles with different PSDs (uniform distribution, Gaussian distribution, etc.). However, the number of particles of each size could be varied in the different simulations using these options. Thus, none of the automatic options were used in EDEM to create the particles; instead, the number of particles of each size was introduced manually. As a result,

the same number of particles of each size was used in both programs. However, the positions of the particles were not identical in all the simulations with the same PSD because the particles were created randomly in both DEM simulators. This difference had a negligible impact on the results.

2.3. Methodology

This work analysed the relationship between five parameters introduced in the simulations (timestep, conversion tolerance, speed of the upper punch, PSD, and contact model) and three critical factors that determined the goodness of the simulations and their efficiency: the maximum force applied by the upper punch, the percentage of eliminated contacts (related to the final appearance of the compact), and the computational cost.

First, the influence of the timestep was examined. For this purpose, six simulations (Table 2, setups no. 1–6) using different timesteps were conducted for all PSDs and contact models. The timestep values were approximately 5%, 10%, 15%, 20%, 25%, and 30% of the Rayleigh timestep. However, the Rayleigh timestep was higher for the MP distribution than for UD and ND because the latter used smaller particles. Moreover, it was necessary for the timestep values to be divisors of the values of the target save interval (0.001 s in these simulations) so that the results were obtained at exactly the same time. For these reasons, the values of the timesteps in the simulations of the MP distribution were different from those used in the UD or ND. In addition, the computational costs required to complete these simulations were analysed to obtain the optimal value for the Rayleigh timestep percentage.

The use of different geometries was analysed. For this purpose, the geometries corresponding to the punches and matrix were generated on CAD software and exported as STL files using different conversion tolerances (Table 2, setups no. 2 and 7–9). The mesh sizes of the geometries increased as the tolerance increased. Therefore, the geometries with smaller meshes were more similar to the theoretical cylindrical geometries, but they became prisms with a lower number of lateral faces when the sizes of the meshes were greater, as shown in Figure 4. In this work, the effects of using four conversion tolerances on the results and computational cost were analysed to determine the optimum value. Finally, several simulations (Table 2, setups no. 2 and 10–17) were conducted to examine the effect of the punch speed. The simulation time of the simulations of the compaction process increased proportionally as the speed of the punch decreased (Table 2). Therefore, the computational cost also increased. For this reason, we considered how this parameter influenced the results of the simulations and their computational costs to determine the maximum speed that could be applied to obtain adequate results by employing an acceptable time.

Table 2. Setup of DEM simulations.

Setup Number	Timestep (s)		Timestep (% Rayleigh)	Conversion Tolerance (mm)	Speed of Punch (m/s)	Total Simulation Time (Compaction + Ejection) (s)	
	MP	UD/ND					
1	1.0×10^{-6}	5.0×10^{-7}	~5	0.01	0.2	0.175	(0.125 + 0.05)
2	2.0×10^{-6}	1.0×10^{-6}	~10	0.01	0.2	0.175	(0.125 + 0.05)
3	3.125×10^{-6}	2.0×10^{-6}	~15	0.01	0.2	0.175	(0.125 + 0.05)
4	4.0×10^{-6}	2.5×10^{-6}	~20	0.01	0.2	0.175	(0.125 + 0.05)
5	5.0×10^{-6}	3.125×10^{-6}	~25	0.01	0.2	0.175	(0.125 + 0.05)
6	6.25×10^{-6}	4.0×10^{-6}	~30	0.01	0.2	0.175	(0.125 + 0.05)
7	2.0×10^{-6}	1.0×10^{-6}	~10	0.001	0.2	0.175	(0.125 + 0.05)
8	2.0×10^{-6}	1.0×10^{-6}	~10	0.1	0.2	0.175	(0.125 + 0.05)
9	2.0×10^{-6}	1.0×10^{-6}	~10	1.0	0.2	0.175	(0.125 + 0.05)
10	2.0×10^{-6}	1.0×10^{-6}	~10	0.01	0.0001	250.05	(50 + 0.05)
11	2.0×10^{-6}	1.0×10^{-6}	~10	0.01	0.0005	50.05	(50 + 0.05)
12	2.0×10^{-6}	1.0×10^{-6}	~10	0.01	0.001	25.05	(25 + 0.05)
13	2.0×10^{-6}	1.0×10^{-6}	~10	0.01	0.005	5.05	(5 + 0.05)
14	2.0×10^{-6}	1.0×10^{-6}	~10	0.01	0.01	2.55	(2.5 + 0.05)
15	2.0×10^{-6}	1.0×10^{-6}	~10	0.01	0.05	0.55	(0.5 + 0.05)
16	2.0×10^{-6}	1.0×10^{-6}	~10	0.01	0.1	0.3	(0.25 + 0.05)
17	2.0×10^{-6}	1.0×10^{-6}	~10	0.01	0.5	0.1	(0.05 + 0.05)

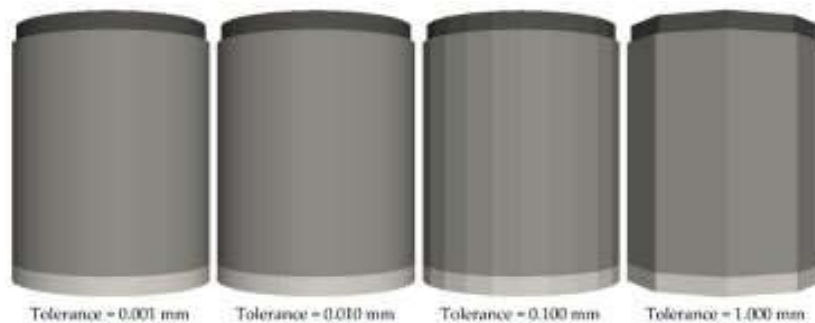


Figure 4. Geometries used to analyse the effects of the conversion tolerance.

The influence of the PSD was analysed by comparing the results of all simulations. The similarities and differences between the results obtained with the different contact models were examined in all of the simulations.

The three factors mentioned above (maximum force, percentage of eliminated contacts, and computational cost) were compared in all cases. The maximum force applied by the upper punch during the compaction process was analysed. The maximum force value was attained when the upper punch was located 8 mm from the lower punch. This factor can be considered the most important, as some of the main defects in the compacts are generated by the application of excessive or insufficient force. Consequently, the force is one of the parameters that is usually controlled in experimental testing. In addition, the appearance of the compacts after they were compacted was examined. To quantify this quality of the compacts, the percentage of eliminated contacts from 0.01 s to 0.05 s after the matrix was removed was calculated. This parameter is related to the final appearance of the compacts because a greater percentage of eliminated contacts indicates that the particles have been separated and the forces that kept them joined have disappeared. If this occurs, the particles could fall and form a heap of particles instead of a compact. Finally, the computational costs of the simulations were compared. Thus, a combined examination of these three factors was performed to determine the optimal values of the timestep, conversion tolerance, and punch speed. The optimal values of these parameters were those that provided adequate results (maximum force and percentage of eliminated contacts) using the lowest computational cost.

3. Results and Discussion

3.1. Effect of the Timestep

Figure 5 shows the effects of the timestep on the maximum force applied by the punch, the percentage of eliminated contacts after the matrix was removed, and the computational cost of the simulations.

As evident in Figure 5a, the maximum force was dependent on the timestep that was fixed in the simulations. The trend shown in all of the curves is the same. The maximum force remained nearly constant as the timestep increased at low values. However, the force decreased as the timestep increased at higher values. More specifically, these values were approximately equal to 15% of the Rayleigh timestep in the cases of MP and UD, but in the case of ND, the change in the curve was produced near the 25% Rayleigh timestep. This behavior was more evident in the case of MP. The maximum forces that were applied by the punch in the simulations that used the SJKR model were greater than their homologues using the SJKR2 and linear cohesion models, as Figure 5a illustrates. By comparing the calculations of the contact area in each model, the value of the contact area that was calculated using Equation (13) (SJKR model) was slightly lower than those calculated using Equation (14) (SJKR2 and linear cohesion models) for the same pair of particles. Consequently, the cohesion force acting on a pair of particles using the SJKR model was lower than that obtained using the SJKR2 or the linear cohesion

model. This lowers the updated normal overlap between the pair of particles in the SJKR model than in the other models if only the cohesion force was acting on the particles. Therefore, the average overlap in an assembly of particles was also lower for the SJKR model when external forces were not acting upon it. As a consequence, the volume that the assembly of particles occupies was greater for that model. The volume occupied by the particles when the punch applied the maximum force was the same for all contact models, i.e., the overlap was necessarily the same for all cases. For that reason, the punch must apply a greater force when the SJKR model is used to achieve the same average overlap obtained by the SJKR2 or the linear cohesion model. Despite this difference, the curves obtained from the homologue simulations were similar, regardless of the contact model used. The behavior of all of these curves indicates that the simulation models converge at low timesteps, regardless of the PSD and contact model used. This may be due to an error in the calculation of the position of the punch or its force when a large timestep is fixed.

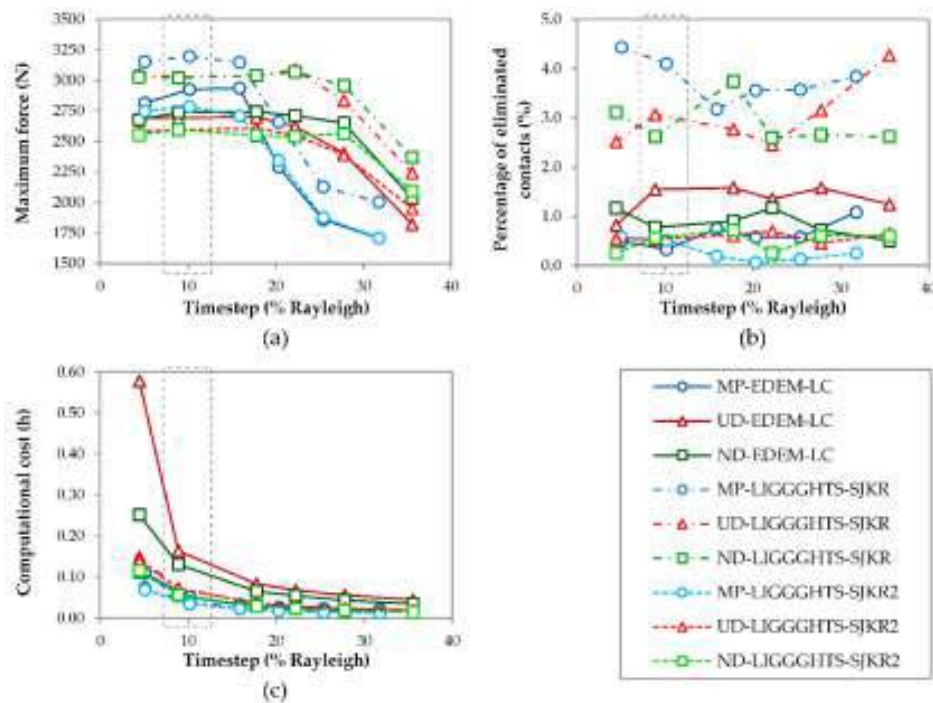


Figure 5. Effect of the timestep on (a) the maximum force applied by the punch, (b) the percentage of eliminated contacts after the matrix has been removed, and (c) the total computational cost.

Figure 5b shows the percentage of eliminated contacts during the compact ejection. This parameter quantifies the stability of the particles, which is related to the compact's final appearance. Two groups were clearly identified. The results obtained with EDEM and using the SJKR2 model in LIGGGHTS indicated a greater compact stability in comparison with the results obtained using the SJKR model. The percentage of eliminated contacts was greater in the latter. This was due to the difference between the calculations of the cohesion force, as mentioned above. A small expansion of the compact occurred after the matrix was removed in all cases as a consequence of the cessation of the confinement force. Therefore, the distance between particles increased due to this expansion, and some of the particles that were in contact during the confinement stopped being in contact afterward. The expansion ended when the tensional state stabilized. At this moment, the contact force between the particles was lower when the SJKR model was used because the cohesion contact force was also lower. This reduced the

overlap between the particles, i.e., the distance between the particles was greater. For that reason, the number of eliminated contacts was higher when the SJKR model was applied. No relationship was found between the PSD or timestep used and the percentage of eliminated contacts.

Regarding the effect of the timestep on the computational cost, cost decreased as the timestep increased, as shown in Figure 5c. This occurred because the number of iterations that were necessary for completing a determined simulation was lower when a large timestep was used than when a low value was adopted. The slopes of all the curves decreased heavily at 5–15% Rayleigh timesteps and decreased slightly from 15% onward, especially in simulations using EDEM. The computational costs required by the simulations that were run in EDEM were greater than those required for their homologue simulations using the two contact models in LIGGGHTS, despite the fact that the first simulations ran under four cores and the latter only used one core. The difference between the computational costs for both types of software using the same number of cores were assumed to be greater. However, the use of different numbers of cores did not have a considerable impact on the computational costs for the same simulation in EDEM. This could be because the files that save the results in EDEM increase at each data save interval; that is, it is necessary to read and write those files as many times as there are data points. However, in LIGGGHTS, a new result file is created at each data save interval. The computational costs required for both packages would be reduced if graphics processing unit (GPU) was used.

In view of these results, 10% Rayleigh timestep was determined to be the optimum value because the maximum force remained constant until a 15% Rayleigh timestep in all cases. The percentage of eliminated contacts was not related to the timestep and the major diminution of the computational cost occurred between the 5% and 10% Rayleigh timesteps. The selection of this timestep matches the range of critical timesteps determined by Thakur et al. [35]. Although the optimal Rayleigh timestep value of 10% was used for the set of simulations shown in Table 2 in setups no. 1–6, the value might be different for the simulation of other materials or operating conditions (punch speed).

3.2. Effect of Conversion Tolerance

Figure 6 shows the effect of using different conversion tolerances to export the three-dimensional (3D) models to STL files on the maximum force applied by the punch, the percentage of eliminated contacts after the removal of the matrix, and the computational cost.

The maximum force increased with the conversion tolerance, regardless of the PSD simulated or the contact model used, as illustrated in Figure 6a. This trend arose because the cross-section of the geometries decreased as the tolerance increased, as shown in Figure 4. The maximum force varied slightly between tolerance values of 0.001 and 0.1 mm, but increased considerably from 0.1 mm to 1 mm. This occurred because the prism corresponded to the geometry, where 1 mm of tolerance only had 10 faces. The maximum force values of the simulations that used the linear cohesion and SJKR2 models were lower than those obtained using the SJKR model, as shown in Figure 5a.

Figure 6b plots the percentage of eliminated contacts during the compact ejection. The results of the simulations run in EDEM and LIGGGHTS using the SJKR2 model were almost unaffected by the conversion tolerance. However, the percentage of eliminated contacts increased considerably with the tolerance when the SJKR model was used, except for the MP distribution. This probably occurred because the overlaps between particles were greater at the beginning of the ejection process (before the matrix was removed) as the conversion tolerance was greater because the cross-section was smaller, and the particles had smaller volumes. This was the case for all the contact models, but the effect was more marked in the simulations that used the SJKR model because the cohesion force in this model was lower than that calculated for the linear cohesion and SJKR2 models. Thus, the confinement force was necessarily greater for the SJKR model. When this force ceased, the expansion of the disc simulated under the SJKR model was greater than in the other simulations. The percentage of eliminated contacts using the SJKR model was generally greater for the MP distribution than for the other models and was

less affected by the conversion tolerance. No relationship was found between the PSD and percentage of eliminated contacts.

The difference in the number of faces affected the computational cost, as illustrated in Figure 6c. The time simulation decreased as the conversion tolerance increased. This occurred because the number of elements that compounded the meshes increased as the mesh size decreased; that is, the number of elements increased as the tolerance decreased. Therefore, the simulation times were longer when the tolerance was lower because the DEM simulators detected the contact between the particles and surfaces (mesh elements). When the mesh sizes of the geometries were extremely small, the DEM simulators had to check more elements to identify whether the particles were in contact with them. This was the case for the geometry with 0.001 mm tolerance, where the simulation time was considerably higher than the time required to simulate the geometry with 0.01 mm tolerance. The effect of the conversion tolerance on the computational cost was lower in the simulations using EDEM than in their homologues in LIGGGHTS, regardless of the PSD simulated.

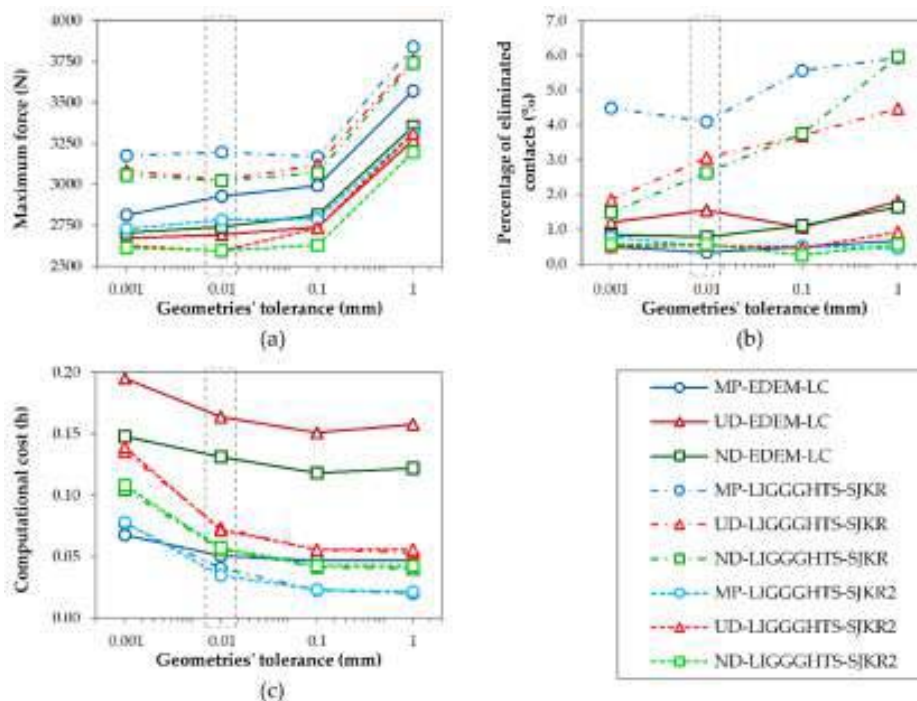


Figure 6. Effect of the conversion tolerance on (a) the maximum force applied by the punch, (b) the percentage of eliminated contacts after the removal of the matrix, and (c) the total computational cost.

The maximum force increased when the tolerance decreased, the percentage of eliminated contacts remained constant (except for the SJKR model) and the computational cost decreased with the tolerance, especially from 0.001 mm to 0.01 mm. For these reasons, when considering the effect of the conversion tolerance on the maximum force and computational cost, a tolerance of 0.01 mm was considered optimal.

3.3. Effect of Punch Speed

Figure 7 shows the effect of moving the punch at different velocities on the maximum force it applies, the percentage of eliminated contacts after removal of the matrix, and the computational cost.

As shown in Figure 7a, the maximum force values fluctuated with the velocity of the punch; thus, no relationship exists between the speed of the punch and the force it applies in the range of velocities that were considered in this work. However, the results obtained in LIGGGHTS using the SJKR model showed higher values than their homologues using the SJKR2 model or the linear cohesion model from EDEM. This is in accordance with the results shown in Figures 5a and 6a. The difference between the results obtained using the linear cohesion and SJKR2 models was greater in the case of MP than in the other PSDs.

As Figure 7b displays, for the SJKR model, the percentage of eliminated contacts after the matrix was removed fluctuated with a punch speed up to 0.01 m/s. Then, the percentage decreased from 0.01 to 0.1 m/s. After that, it increased and attained its maximum value at the fastest speed (0.5 m/s) in several cases. The minimum attained at 0.1 m/s means that the compacts obtained at that punch speed were more stable than those compacted at other speeds for this contact model. However, this minimum was not found for the other contact models, where the percentage of eliminated contacts fluctuated from 0.0001 m/s to 0.5 m/s. The amplitude of the fluctuations was lower in these latter cases. In addition, the percentage of eliminated contacts was lower in the simulations that used the linear cohesion and the SJKR2 models than in the simulations corresponding to the SJKR model, including the simulations with a punch speed of 0.1 m/s. Although a velocity of 0.2 m/s was used in the previous simulations (Table 2, setups no. 1–9), the results shown in Figures 5b and 6b are considered valid because the SJKR model showed a higher percentage of eliminated contacts than the other models for all of the punch speeds. The same can be observed in Figures 5b and 6b. The other reason is that it is not necessary to use the optimal values to compare the different contact models; the conditions are only required to be equal.

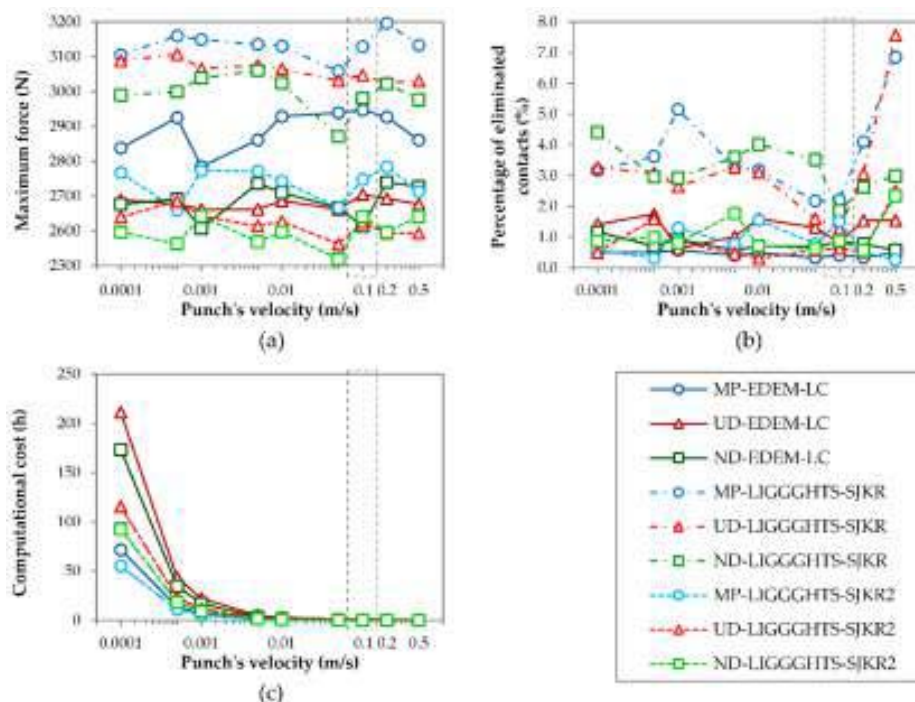


Figure 7. Effect of the speed of the punch on (a) the maximum force applied by the punch, (b) the percentage of eliminated contacts after removal of the matrix, and (c) the total computational cost.

The relationship between the computational cost and punch speed was clear: the computational cost increased exponentially as the speed of the punch decreased (Figure 7c), regardless of whether the PSD or the contact model was used. This was because the simulation time increased from 0.05 s (when the punch moved at 0.5 m/s) to 250 s (when the punch's speed was 0.0001 m/s), as shown in Table 2. Therefore, this latter simulation required 5000 times as many interactions as required by the first one.

In brief, no relationship was observed between the maximum speed of the punch and the maximum force that it applies. The percentage of eliminated contacts was lowest 0.1 m/s, and after that, the percentage increased for the SJKR model. No relationship was found for the other contact models. The computational cost decreased exponentially as the speed of the punch increased. As a consequence, a punch speed of 0.1 m/s was the optimal value for all of the contact models.

3.4. Effect of the PSD

In general, PSDs can be sorted into MP, UD, and ND according to their maximum force values in descending order, as illustrated in Figures 5a, 6a, and 7a, respectively. The rearrangement of the particles during the confined compression is affected by the PSD, as indicated by Wiacek and Molenda [19]. This reorganization of particles is easier in UD and ND than in MP because of the presence of large voids filled by the smaller particles. This increases the volume that the particles occupy in MP compared to the volume occupied by particles in UD and ND after rearrangement. Therefore, it was necessary to apply a greater force to the MP material to compress it into a cylindrical cavity with a diameter of 22 mm and a height of 8 mm. This behavior means that the powder related to the MP distribution is less compressible than the UD and ND powders. This is in accordance with the reduction in porosities of each mixture after their compaction. In the current study, the mean initial porosities were 54.5%, 52.5%, and 53.8% in the compacts with MP, UD, and ND mixtures, respectively, for setup no. 16 (Table 2). Their mean final porosities were 44.7%, 42.0%, and 43.5%, respectively. Therefore, reductions of 9.9%, 10.5%, and 10.3% were obtained for the MP, UD, and ND powders, respectively. Although the differences in the porosity reductions for the different mixtures were small, these results confirm that the MP powder is less compressible than the others. In contrast, it was not clear if the percentage of eliminated contacts was related to the PSD. Regarding the computational cost, the PSDs can be sorted in ascending order as follows: MP, ND, and UD. This classification is due to the number of particles that were simulated in each case and the minimum particle size they contain. First, the lowest computational costs were required for the MP distribution. This PSD contained 556 particles with a diameter of 2.1 mm. Second, the ND was composed of 698 particles with diameters between 1.2 and 3 mm and demanded intermediate computation time. Finally, although the UD used the same size range of particles as ND, the UD required the most computational time because it used a greater number of particles (922).

3.5. Comparison between the Contact Models

Figure 8 shows the mean results obtained using each model for different PSDs. As shown in Figure 8a, the mean values of maximum force were similar for all contact models. However, the results that were obtained from LIGGGHTS using the SJKR2 model and from EDEM (linear cohesion) were more similar than those obtained using the SJKR model. The maximum difference between the first models (SJKR2 and linear cohesion) was lower than 150 N. The minimum difference between the results corresponding to the SJKR model and the results of the other models was greater than 250 N. Regarding the percentage of eliminated contacts, a greater difference was found between the results obtained from the SJKR model and those obtained from the linear cohesion and SJKR2 models, as shown in Figure 8b. The mean percentage of eliminated contacts was higher than 3% when the SJKR model was used, but lower than 1.5% for the other contact models. This means that the compacts were more stable in the simulations that used the linear cohesion and SJKR2 models. In view of these results, the linear cohesion and SJKR2 models can be considered equivalent contact models.

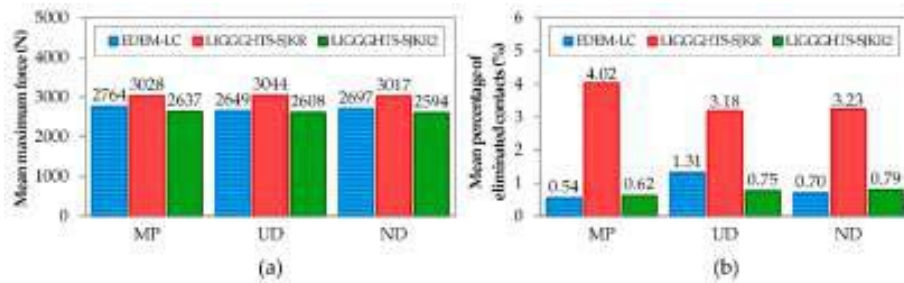


Figure 8. Mean values of (a) the maximum force and (b) the percentage of eliminated contacts.

4. Conclusions

Several simulations of a compaction process were performed to examine the capability of certain contact models. For this purpose, three contact models were tested. All of them allowed the formation of a compact via particle cohesion. Some differences were observed between them. This enabled us to obtain equivalent DEM models with two different simulators: EDEM and LIGGGHTS. In addition, different timestep, conversion tolerance, and punch speed values were used. Three PSDs were simulated to investigate the influences of these parameters on the results obtained using each PSD. Thus, we established the following conclusions.

The selection of the timestep determines the maximum force that the punch applies due to the inaccuracy of the calculation when a long timestep is chosen. The results showed that the maximum force is lower when the timestep is higher. The computational cost decreases with the increase in this simulation parameter. However, the percentage of eliminated contacts does not depend on the selected timestep. A 10% of Rayleigh time was adequate to simulate the compaction process using the materials and the contact models employed in this work.

Concerning the conversion tolerance, the force applied by the punch increases as the tolerance of the geometries increases because the cross-section is smaller when the tolerance is higher. The behavior of the percentage of eliminated contacts differs depending on the applied contact model. The conversion tolerance does not influence the percentage of eliminated contacts when the linear cohesion or SJKR2 model is used. However, the percentage of eliminated contacts increases as the tolerance rises when the SJKR model is selected. Contrary to the maximum force, the computation cost decreases as the conversion tolerance increases because the number of faces is lower in those geometries where the tolerance is higher. For these reasons, the tolerance that is recommended for converting the 3D models to STL files for the geometries used in this work is 0.01 mm.

The maximum force fluctuates with the punch speed. Therefore, no relationship between the two was observed. The percentage of eliminated contacts fluctuated for the linear cohesion and SJKR2 models, but a minimum was attained at a speed of 0.1 m/s for the SJKR model. The computational cost is strongly influenced by the punch speed. Consequently, the maximum speed for moving the punch is 0.1 m/s for the contact models used in this work.

Concerning the PSD of the materials, the maximum forces are obtained for the MP distribution because the particle rearrangement is more challenging in this context than it is in other PSDs because the large voids between particles were filled by the smaller particles in UD and ND distributions. However, there is no relationship between the percentage of eliminated contacts and the PSD. The MP distribution has the lowest computational costs because a small number of large particles is created. However, a larger number of small particles is found in the other PSDs. The simulations that use the UD distribution have the highest computational costs because they use the largest number of particles.

Finally, the conclusions relating to the contact models and software packages are as follows. Although the results obtained using the three contact models were similar, a greater difference was found in the results related to the SJKR model. Therefore, the linear cohesion model implemented in EDEM and the SJKR2 model in LIGGGHTS can be considered equivalent.

This work focused on the differences and similarities between several contact models, but this study was intended to be a starting point for the study of the compaction process. This work does not propose models that simulate real systems, but aimed to provide a better understanding of the dependence between the parameters used and the results obtained. The optimal values obtained in this work might be different for other applications, but the practitioners might use them initially to study their particular problems. Consequently, the application of the equivalent contact models for simulating the compaction of real materials requires additional investigation, such as the calibration of the simulation models by comparing them with experiments. Once the models have been validated, they might be useful for understanding the compaction process and finding solutions to the problems that usually occur during the formation of compacts.

Author Contributions: J.O.-M. proposed the research topic; C.R.-A. performed the DEM simulations, analysed the results and wrote the manuscript; F.A.-E. and A.G.-M. guided and supervised the project. All the authors revised the manuscript and contributed some useful suggestions in pre-publication stage.

Funding: This work was funded by the EU program RFSR through project RFSR-CT-2015-00005 ‘LEANSTORY’.

Acknowledgments: The discrete element method (DEM) simulations and analysis were conducted using EDEM® 2.7.2 bulk material simulation software that was provided by DEM Solutions Ltd., Edinburgh, Scotland, UK and LIGGGHTS-PUBLIC 3.3.1 open-source. The authors want to acknowledge the contribution provided by the Materials Engineering degree thesis carried out by Luis Domingo Aranda, although specific citation was added when appropriate. Joaquín Ordieres-Meré wants to acknowledge the grant PRX18/00036 provided by the Spanish Secretaría de Estado de Universidades, Investigación, Desarrollo e Innovación del Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades.

Conflicts of Interest: The authors declare no conflict of interest.

References

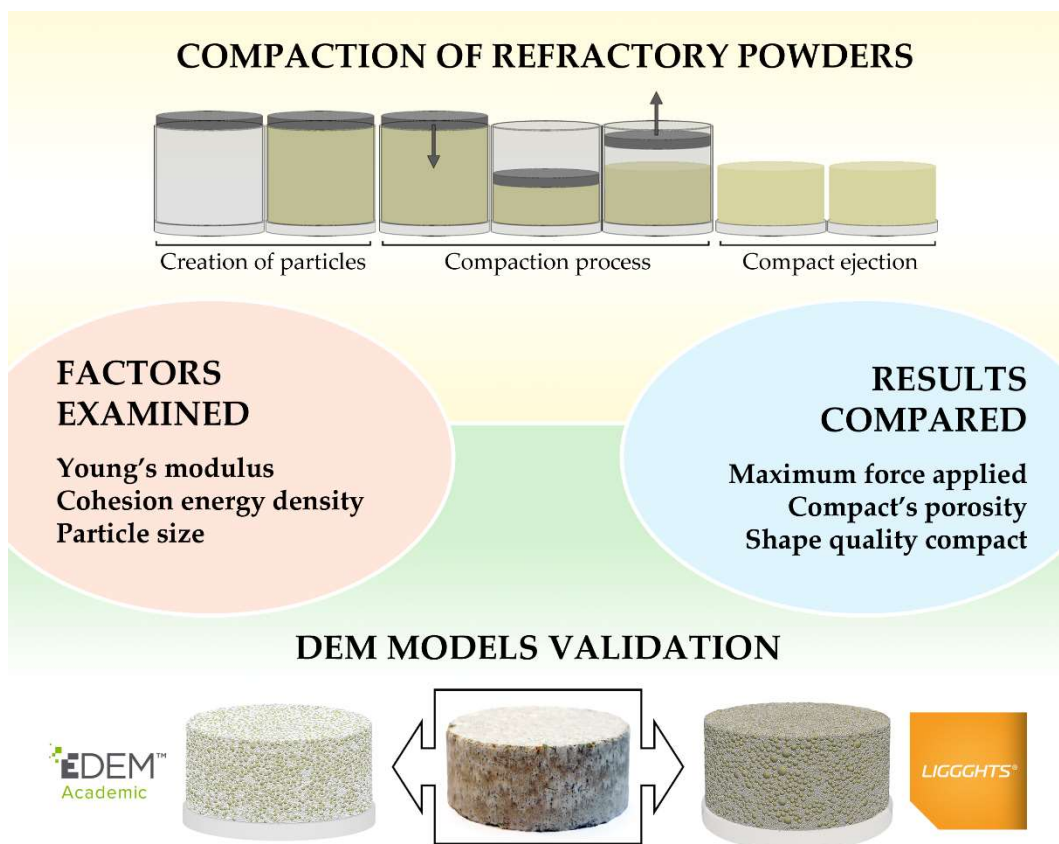
1. Cronin, K.; Ring, D.; Sheehan, L.; Foulon, A. Probabilistic analysis of weight variability in tablets & capsules arising from the filling of a cavity with powder of a poly-dispersed size. *Powder Technol.* **2015**, *270*, 287–295. [[CrossRef](#)]
2. Furukawa, R.; Shiosaka, Y.; Kadota, K.; Takagaki, K.; Noguchi, T.; Shimosaka, A.; Shirakawa, Y. Size-induced segregation during pharmaceutical particle die filling assessed by response surface methodology using discrete element method. *J. Drug Deliv. Sci. Technol.* **2016**, *35*, 284–293. [[CrossRef](#)]
3. Horabik, J.; Molenda, M. Parameters and contact models for DEM simulations of agricultural granular materials: A review. *Biosyst. Eng.* **2016**, *147*, 206–225. [[CrossRef](#)]
4. Ketterhagen, W.R.; Curtis, J.S.; Wassgren, C.R.; Kong, A.; Narayan, P.J.; Hancock, B.C. Granular segregation in discharging cylindrical hoppers: A discrete element and experimental study. *Chem. Eng. Sci.* **2007**, *62*, 6423–6439. [[CrossRef](#)]
5. Yu, Y.; Saxén, H. Experimental and DEM study of segregation of ternary size particles in a blast furnace top bunker model. *Chem. Eng. Sci.* **2010**, *65*, 5237–5250. [[CrossRef](#)]
6. Yang, S.C. Density effect on mixing and segregation processes in a vibrated binary granular mixture. *Powder Technol.* **2006**, *164*, 65–74. [[CrossRef](#)]
7. Jiang, M.; Zhao, Y.; Liu, G.; Zheng, J. Enhancing mixing of particles by baffles in a rotating drum mixer. *Particuology* **2011**, *9*, 270–278. [[CrossRef](#)]
8. Zhao, L.; Zhao, Y.; Bao, C.; Hou, Q.; Yu, A. Optimisation of a circularly vibrating screen based on DEM simulation and Taguchi orthogonal experimental design. *Powder Technol.* **2017**, *310*, 307–317. [[CrossRef](#)]
9. Zhao, L.; Zhao, Y.; Bao, C.; Hou, Q.; Yu, A. Laboratory-scale validation of a DEM model of screening processes with circular vibration. *Powder Technol.* **2016**, *303*, 269–277. [[CrossRef](#)]
10. Barbabela e Silva, B.; da Cunha, E.R.; de Carvalho, R.M.; Tavares, L.M. Modeling and simulation of green iron ore pellet classification in a single deck roller screen using the discrete element method. *Powder Technol.* **2018**, *332*, 359–370. [[CrossRef](#)]
11. Ghodki, B.M.; Charith Kumar, K.; Goswami, T.K. Modeling breakage and motion of black pepper seeds in cryogenic mill. *Adv. Powder Technol.* **2018**, *29*, 1055–1071. [[CrossRef](#)]
12. Metzger, M.J.; Glasser, B.J. Simulation of the breakage of bonded agglomerates in a ball mill. *Powder Technol.* **2013**, *237*, 286–302. [[CrossRef](#)]

13. Obermayr, M.; Dressler, K.; Vrettos, C.; Eberhard, P. A bonded-particle model for cemented sand. *Comput. Geotech.* **2013**, *49*, 299–313. [[CrossRef](#)]
14. Manso, J.; Marcelino, J.; Caldeira, L. Crushing and oedometer compression of rockfill using DEM. *Comput. Geotech.* **2018**, *101*, 11–22. [[CrossRef](#)]
15. Janda, A.; Ooi, J.Y. DEM modeling of cone penetration and unconfined compression in cohesive solids. *Powder Technol.* **2016**. [[CrossRef](#)]
16. Thakur, S.C.; Ahmadian, H.; Sun, J.; Ooi, J.Y. An experimental and numerical study of packing, compression, and caking behaviour of detergent powders. *Particuology* **2014**. [[CrossRef](#)]
17. Aranda-Sánchez, L.D. *Simulación numérica de las propiedades del refractario libre de carbono*; Polytechnic University of Madrid: Madrid, Spain, 2016.
18. Nordström, J.; Alderborn, G.; Frenning, G. Compressibility and tablet forming ability of bimodal granule mixtures: Experiments and DEM simulations. *Int. J. Pharm.* **2018**. [[CrossRef](#)] [[PubMed](#)]
19. Wiacek, J.; Molenda, M. Effect of particle size distribution on micro-and macromechanical response of granular packings under compression. *Int. J. Solids Struct.* **2014**. [[CrossRef](#)]
20. Wiacek, J.; Molenda, M.; Horabik, J.; Ooi, J.Y. Influence of grain shape and intergranular friction on material behavior in uniaxial compression: Experimental and DEM modeling. *Powder Technol.* **2012**. [[CrossRef](#)]
21. He, Y.; Evans, T.J.; Shen, Y.S.; Yu, A.B.; Yang, R.Y. Discrete modelling of the compaction of non-spherical particles using a multi-sphere approach. *Miner. Eng.* **2018**. [[CrossRef](#)]
22. Šmilauer, V.; Catalano, E.; Chareyre, B.; Dorofeenko, S.; Duriez, J.; Dyck, N.; Eliáš, J.; Er, B.; Eulitz, A.; Gladky, A.; et al. *Yade Documentation 2nd ed. The Yade Project*. 2015. Available online: <http://yade-dem.org/doc/> (accessed on 9 November 2018).
23. Jiménez-Herrera, N.; Barrios, G.K.P.; Tavares, L.M. Comparison of breakage models in DEM in simulating impact on particle beds. *Adv. Powder Technol.* **2018**, *29*, 692–706. [[CrossRef](#)]
24. Wei, H.; Zhao, Y.; Zhang, J.; Saxén, H.; Yu, Y. LIGGGHTS and EDEM application on charging system of ironmaking blast furnace. *Adv. Powder Technol.* **2017**. [[CrossRef](#)]
25. Markauskas, D.; Ramírez-Gómez, Á.; Kacianauskas, R.; Zdancevicius, E. Maize grain shape approaches for DEM modelling. *Comput. Electron. Agric.* **2015**, *118*, 247–258. [[CrossRef](#)]
26. Soltanbeigi, B.; Podlozhnyuk, A.; Papanicolopoulos, S.A.; Kloss, C.; Pirker, S.; Ooi, J.Y. DEM study of mechanical characteristics of multi-spherical and superquadric particles at micro and macro scales. *Powder Technol.* **2018**. [[CrossRef](#)]
27. Kozhar, S.; Dosta, M.; Antonyuk, S.; Heinrich, S.; Bröckel, U. DEM simulations of amorphous irregular shaped micrometer-sized titania agglomerates at compression. *Adv. Powder Technol.* **2015**, *26*, 767–777. [[CrossRef](#)]
28. Cundall, P.A.; Strack, O.D.L. A discrete numerical model for granular assemblies. *Géotechnique* **1979**, *29*, 47–65. [[CrossRef](#)]
29. DEM Solutions. *EDEM 2.6 Theory Reference Guide*; DEM Solutions: Edinburgh, UK, 2014.
30. Weisstein, E.W. Sphere-Sphere Intersection. Available online: <http://mathworld.wolfram.com/Sphere-SphereIntersection.html> (accessed on 23 October 2018).
31. Wang, W.; Qi, H.; Liu, P.; Zhao, Y.; Chang, H. Numerical simulation of densification of Cu–Al mixed metal powder during axial compaction. *Metals* **2018**. [[CrossRef](#)]
32. Nunes de Barros, F.; Bhaskar, A.; Singh, R. A Validated Model for Design and Evaluation of Control Architectures for a Continuous Tablet Compaction Process. *Processes* **2017**. [[CrossRef](#)]
33. Olmos, L.; Martin, C.L.; Bouvard, D. Sintering of mixtures of powders: Experiments and modelling. *Powder Technol.* **2009**, *190*, 134–140. [[CrossRef](#)]
34. Wang, H.; Glaser, B.; Sichen, D. Improvement of Resistance of MgO-Based Refractory to Slag Penetration by In Situ Spinel Formation. *Metall. Mater. Trans. B Process Metall. Mater. Process. Sci.* **2015**, *46*, 749–757. [[CrossRef](#)]
35. Thakur, S.C.; Ooi, J.Y.; Ahmadian, H. Scaling of discrete element model parameters for cohesionless and cohesive solid. *Powder Technol.* **2016**. [[CrossRef](#)]





Publicación 4

C. Ramírez-Aragón, J. Ordieres-Meré, F. Alba-Elías, y A. González-Marcos, «Numerical modeling for simulation of compaction of refractory materials for secondary steelmaking», *Materials.*, vol. 13, 224, 2020, doi: 10.3390/ma13010224.



Article

Numerical Modeling for Simulation of Compaction of Refractory Materials for Secondary Steelmaking

Cristina Ramírez-Aragón ¹, Joaquín Ordieres-Meré ^{2,*} , Fernando Alba-Elías ¹ and Ana González-Marcos ¹ 

¹ Department of Mechanical Engineering, University of La Rioja, C/Luis de Ulloa, 20, 26004 Logroño, Spain; maria-cristina.ramirez@alum.unirioja.es (C.R.-A.); fernando.alba@unirioja.es (F.A.-E.); ana.gonzalez@unirioja.es (A.G.-M.)

² Department of Industrial Engineering, Business Administration and Statistics, Universidad Politécnica de Madrid, C/José Gutiérrez Abascal 2, 28006 Madrid, Spain

* Correspondence: j.ordieres@upm.es; Tel.: +34-91-067-7107

Received: 19 November 2019; Accepted: 2 January 2020; Published: 4 January 2020



Abstract: The purpose of this work is to simulate the powder compaction of refractory materials, using the discrete element method (DEM). The capability of two cohesive contact models, implemented in different DEM packages, to simulate the compaction of a mixture of two refractory materials (dead burnt magnesia (MgO) and calcined alumina (Al₂O₃)) was analyzed, and the simulation results were compared with experimental data. The maximum force applied by the punch and the porosity and final shape quality of the compact were examined. As a starting point, the influence of Young's modulus (E), the cohesion energy density (CED), and the diameter of the Al₂O₃ particles (D) on the results was analyzed. This analysis allowed to distinguish that E and CED were the most influential factors. Therefore, a more extensive examination of these two factors was performed afterward, using a fixed value of D. The analysis of the combined effect of these factors made it possible to calibrate the DEM models, and consequently, after this calibration, the compacts had an adequate final shape quality and the maximum force applied in the simulations matched with the experimental one. However, the porosity of the simulated compacts was higher than that of the real ones. To reduce the porosity of the compacts, lower values of D were also modeled. Consequently, the relative deviation of the porosity was reduced from 40–50% to 20%, using a value of D equal to 0.15 mm.

Keywords: powder compaction; refractory materials; discrete element method (DEM); experiments; cohesive contact models

1. Introduction

Sintering is a processing technique that consists of compacting metal or ceramic powders to form solid components by applying thermal energy. This technique is interesting because it allows to obtain the parts of controlled porosity composed of different materials (combining distinct metals and/or ceramics). Moreover, the parts can be mass produced, and only a little amount of material is wasted during the process because the parts are produced with their final shapes.

Three processes are typically involved in the sintering technique: (1) powder synthesis, (2) compaction, and (3) heat treatment [1]. The first of them consists of the preparation of the powder blend (milling, blending, etc.). The second one consists of the compaction of the powder to form a part called “green body”. The last one consists of the application of heat treatment to the green body to obtain the sintered product. The properties of the final products are affected by all the processes involved in the sintering process. For example, some factors such as the firing temperature or dwell time must be carefully controlled during the heat treatment because they influence the

physical and mechanical properties of the sintered parts [2]. Alternatively, some of the problems in the sintered parts are derived from the compaction process, including incorrect density, size or shape, variations in density throughout the parts, and cracking. Moreover, the raw materials influence the properties of the sintered parts. For example, the sizes and shapes of the particles affect the packing density or the porosity of the green compacts and, therefore, the pore sizes of the sintered parts [3–5]. As a consequence, the combination of different refractory materials has been also analyzed to improve the corrosion resistance of refractory parts by modifying their porosities [6–8].

The discrete element method (DEM) is a numerical method that is widely accepted as a useful tool to analyze the behavior of granular materials and solve different engineering problems, such as granular flows, powder mechanics, and rock mechanics [9]. Therefore, simulations using DEM have been used to analyze a great variety of processes, including the processes involving the sintering technique. The DEM simulations have been used to simulate the mill process [10,11], powder mixing [12,13], or powder packing [14–24]. Moreover, some approaches have been developed over the last years to simulate the behavior of the particles during the heat treatment in the sintering process [25–29]. In these works, the authors incorporated the concepts of the model developed by Parhami et al. [30] into three-dimensional (3D) DEM models. Usually, the contact model that describes the behavior of the particles under the heat treatment is combined with the other contact model that is used to compact the powder previously [29]. Therefore, it is interesting to acquire knowledge about the contact models that allow us to simulate the powder compaction because a better understanding of them would help in developing more realistic DEM simulations of the sintering process.

Different contact models and DEM packages have been used to simulate powder compaction. Janda and Ooi [14] used a visco-elasto-plastic frictional adhesive model to simulate confined compression and then unconfined compression and cone penetration resistant tests. Moreover, they investigated the possibility of calibrating the parameters of the contact model using big particles in the simulations to produce the same behavior instead of using small ones, thereby reducing the number of particles used and the computational cost required to complete the simulations. Using coarse particles and low values of Young's modulus are some of the most usual approaches that researchers assume to reduce the computational cost. Thakur et al. [15] also used the API (application programming interface) in EDEM (DEM Solutions Ltd., Edinburgh, UK), to implement an adhesive elasto-plastic contact model to simulate cohesive powders under confined and unconfined compression. This contact model was used later [16] to investigate the scalability of the system, as done by Janda and Ooi [14]. Garner et al. [31] proposed another adhesive elasto-plastic contact model to simulate the powder compaction. The authors calibrated that model by the simulations of the compaction and ejection and tensile strength of the monosized particles. Yoon [17] used a bonded-particle model to simulate a uniaxial compression test. This type of contact model generates bonds between the particles that are in contact to keep them joined. The bond between two particles is broken when the stress between them exceeds a critical value. The effects of some microparameters of the bonded-particle model and other ones of the particles on the macroscopic responses of the materials under uniaxial compression were analyzed. The results allowed to develop a mathematical model for estimating the set of microparameters that must be set to simulate the behavior of a real material. Therefore, the bonded-particle model was calibrated and the results of the simulations were compared with the results of experiments that other authors had carried out previously using different types of rocks. Other authors combined the effect of a bonded-particle model with other contact models to simulate the behavior of spherical [18,19] and nonspherical [20,21] particles under confined and unconfined compression. In all the cases, they used the combination of an elasto-plastic model with other contact model that introduces capillary forces to simulate the powder compaction. After that, they applied a bonded-particle model to simulate the brittle failure of the compact. The effects of the particle size distribution [22] and the particle shape [23] on the mechanical responses of granular materials subjected to uniaxial compression were also studied by other authors. The effects of the particle size distribution were also analyzed by Nordström et al. [24], who implemented other contact models for this purpose.

They simulated the compaction of several binary mixtures of different-sized particles and compared the results obtained with mixtures whose particle size ratios were 1:2 and 1:4. The results showed differences in most of the analyzed results: the relative density of the compacts, strain–pressure curves, coordination number, etc.

Because of the existence of different DEM packages and contact models, some authors have compared the results obtained using several of them. Jiménez-Herrera et al. [32] used two contact models implemented in EDEM and other one in ROCKY (ESSS, Florianópolis, Brazil) to simulate the breakage of particle beds when a ball hits them. Markauskas et al. compared the flow patterns, the velocity profiles, and discharge rates during the discharge of a silo obtained using EDEM and DEMMAT (swMATH, Berlin, Germany) [33]. Similarly, Wei et al. studied the charging of burden and the formation of burden layers in a blast furnace, using EDEM and LIGGGHTS (DCS Computing GmbH, Linz, Austria) [34]. Soltanbeigi et al. have also made a complete comparison between the results obtained with EDEM and LIGGGHTS, using nonspherical particles that include heap formation, direct shear test, and silo discharge [35]. In a previous work [36], three cohesive contact models implemented in different DEM simulators were used to examine their applicability to simulate the powder compaction. Several simulations were conducted for this purpose, which allowed to analyze the effects of some parameters on the results. Moreover, their results were compared and it was possible to determine that the “linear cohesion” model implemented in EDEM and the “SJKR2” model implemented in LIGGGHTS were equivalent contact models. However, in that work, the results of the simulations were not compared with experiments, and therefore, the capacity of those contact models to simulate the compaction of real materials were not examined.

In this work, the compaction of a refractory mixture to form a green compact was analyzed using DEM. Simulations were conducted using the equivalent contact models implemented in two DEM software packages that were determined previously [36]. A design of experiments (DOE) that comprehended 15 simulations was conducted to examine the influence of three parameters (Young’s modulus, cohesion energy density and particle size). After that, the effect of the two most influential parameters (Young’s modulus and cohesion energy density) was analyzed. Another DOE was applied for this purpose. This DOE also allowed to calibrate both simulation models. The results obtained using each software were compared to observe similarities and differences between them. The simulated results were also compared with experimental data in order to validate the DEM models. All of these simulations modeled particles larger than the real ones in order to reduce the computational costs during the analysis of the parameters and the calibration of the models. Finally, additional simulations were conducted using smaller particles to reduce the differences between the results of the simulations and the experimental ones.

The goal of this article is to promote a methodology enabling numerical simulation tools to help technical decision-makers in daily activities when the configuration of new materials to be built by sintering. Therefore, accuracy, computational cost, and time needs to be balanced. The computational cost is mainly influenced by the number of particles and the critical timestep. Moreover, this latter parameter is determined by the minimum particle size and the density and Young’s modulus of the material. Consequently, different strategies based on the modification of these four parameters have been used to reduce the computational cost [37–39]. In this work, the computational cost was reduced by means of one of those strategies that consists of simulating particles larger than the real ones, but keeping the real domain size [40], thereby leading to a greater critical timestep and reducing the number of particles. Special care was devoted to implementing this strategy but having a calibration procedure that makes it possible to keep the accuracy over a significant threshold. In this way, the procedure can be useful for practitioners because of the aforementioned balance accuracy versus resources.

2. Materials and Methods

2.1. Experimental Procedure

A triaxial test machine (as shown in Figure 1a) has been adapted to compact the powder. It consists of the original frame and control system, a force sensor that measures the applied force by an upper punch, a lower punch, and a matrix. The diameter of the matrix was 22.05 mm. During this process, the speed of the punch was fixed and its displacement was calculated through time readings. Meanwhile, the force sensor measured the force applied by the punch. At the beginning of the process, the matrix and lower punch were assembled, thereby forming a cavity (die) with a diameter of 22.05 mm and height 11 mm. Then, the material (9.13 g in all) was introduced in the die. The upper punch was initially located at a distance of 20 mm over the lower punch. Once the machine and the material were ready, the upper punch began to move down, with a velocity of 1 mm/min. The movement of the upper punch stopped when the distance between the punches was 8 mm, and it began moving up, with a velocity of 25 mm/min, until it reached its initial position. Then, the matrix was removed and the compact was collected.

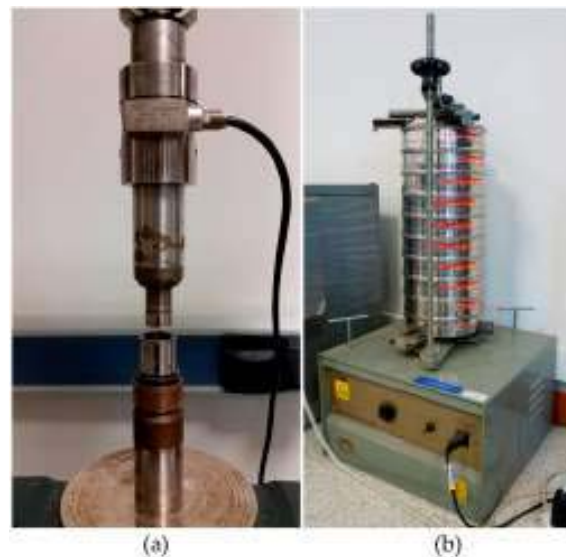


Figure 1. Equipment used in experiments. (a) Triaxial machine adapted to the compaction process. (b) Mechanical shaker with the sieves used for the gradation test.

The materials used in this work included dead burnt magnesia (MgO) and calcined alumina (Al_2O_3). They were supplied by Refractory Solutions Insertec, S.L.U. These two materials are usually used for sintering of refractory castables [6,8,41,42]. The particle size of MgO was lower than 3 mm. A gradation test was performed to define its particle size distribution (PSD), which consists of introducing the granular material in a nested column of sieves with different-sized wire mesh. The sieves are orderly nested. The bigger mesh sieve is placed at the top and the smaller mesh sieve at the bottom of the column. A round pan (called “receiver”) is placed below the smaller mesh sieve. The nested column is placed in a mechanical shaker (see Figure 1b). This equipment shakes the column for several minutes. After that, the column is disassembled and the material on each sieve is weighed. Figure 2 presents the gradation test results for MgO. The particle size of Al_2O_3 was less than 45 μm . A mixture that consisted of Al_2O_3 and MgO in proportions of 20% and 80% (by weight), respectively, was used.

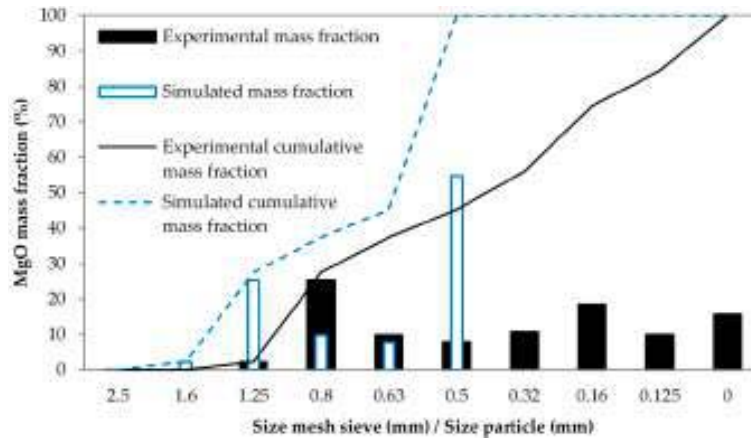


Figure 2. Results obtained in the gradation test for MgO and PSD used in simulations.

2.2. DEM Simulations

The DEM simulations were performed using two software packages: (1) EDEM[®] 2.7.2, which is a commercial software (DEM Solutions Ltd., Edinburgh, UK) and (2) LIGGGHTS-PUBLIC[®] 3.3.1, which is an open-source software (DCS Computing GmbH, Linz, Austria). The “linear cohesion” contact model was employed in the simulations that ran in EDEM. The “modified simplified Johnson–Kendall–Roberts (SJKR2)” contact model was used in LIGGGHTS. In a previous work [36], the equivalence between these contact models was discussed. Both models work in combination with the Hertz–Mindlin contact model and complement it by the addition of a normal cohesion force. This normal cohesion force takes the form $F_{\text{cohesion}} = k \cdot A$, where k is the cohesion energy density (J/m^3) and A is the contact area (m^2). This contact area takes the form $A = 2 \cdot \pi \cdot h \cdot R$, where h is the normal physical overlap between the particles (m) and R is the equivalent radius of the particles (m).

In order to simulate the experimental procedure, the geometries corresponding to the punches and matrix were modeled using a computer-aided design (CAD) software package (Solid Edge Version 18, © UGS Corp., Plano, TX, USA) and then converted into standard triangle language (STL) files. A tolerance of 0.01 mm was fixed to convert the 3D models into STL files. Finally, the same STL files were imported into both DEM simulators. In a previous work [36], the influence of using different conversion tolerances was analyzed. A value of 0.01 mm was considered optimum to convert similar geometries.

The simulation procedures are as follows: Initially, the particles were created in a virtual cylinder that had a height of 20 mm and a diameter of 22.05 mm. The amount of particles that was created in each simulation can be seen in Tables S1–S6 of the Supplementary material. Although the number of particles was slightly different in each simulation, approximately the same mass of mixture that was used in the experiments (9.13 g) was simulated in all cases. This factory was located in the space delimited by the inner surface of the matrix, lower surface of the upper punch, and upper surface of the lower punch. This volume was higher than the one adopted in experiments, where the height was 11 mm, in order to make the insertion of the particles possible in simulations. For that reason, the initial porosity of the material in the simulations was not compared with the initial porosity in the experiments. Once the particles had been created, the upper punch began to move down, with a constant velocity of 0.2 m/s. The downward movement stopped after 0.06 s. At this moment, the upper punch began to move up, with the same velocity during 0.04 s. Then, the matrix and upper punch disappeared in the simulation. Once the matrix had been removed, the simulation ran during 0.05 s in order to appreciate the final appearance of the compact. Figure 3 shows a scheme of the process that was simulated. A timestep equivalent to approximately 10% of the Rayleigh timestep was fixed in all simulations. In a previous work [36], this value was considered optimum for simulating the compaction process,

using the same contact models that were used in this work. The effect of gravity force was taken into account in all simulations.

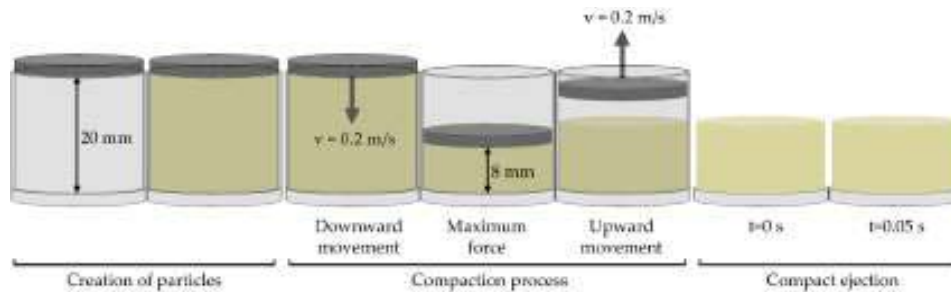


Figure 3. Scheme of the simulated process.

Some differences between simulations and experiments were assumed: Firstly, the particles did not settle at the beginning of the compaction in the simulations. However, a few minutes elapsed between the filling of the die and the compaction during the experimental testing, making the particles settle before the compaction started. This slightly affected the rearrangement of the particles in the simulations, but it greatly reduced the simulation time. Additional simulations were conducted to analyze this effect. The particles were settle in those simulations and the results of compaction were almost the same that those obtained when the particles were not settle. Secondly, the velocity of simulations was widely increased in order to reduce the computational cost. The influence of the speed of the punch was examined in a previous work [36], where a velocity of 0.1 m/s was considered adequate to simulate the compaction process, using the linear cohesion, SJKR, and SJKR2 models. This value was determined by the results obtained from the SJKR model. However, no differences in the results were found from 0.1 to 0.2 m/s for the linear cohesion and SJKR2 models, but the computational cost significantly reduced when a velocity of 0.2 m/s was used. For this reason, a velocity of 0.2 m/s was chosen in this work. Moreover, the velocity during the downward and upward movements was equal in the simulations, whereas the velocity in the upward movement was 25 times higher than that in the downward movement in the experiments. Finally, the simulations did not consider the effect of the walls during the ejection of the compact. The geometries relating to the matrix and upper punch were removed when the upper punch ended its upward movement, as mentioned above. This action was also conducted in other works [18,19].

The PSD used to simulate MgO was similar to the one obtained from the gradation test. However, the size of the simulated particles was decided to be higher than the real ones in order to reach a compromise between the hardware used and the simulation time, making it possible for practitioners to replicate the method. The PSD obtained from the gradation test and the simulated PSD are compared in Figure 2. The wide bars indicate the mass fraction of MgO that was retained in each sieve and in receiver (0 mm), and the narrow bars indicate the simulated PSD of MgO. As one can see, the experimental PSD was discretized and a minimum diameter was chosen for the MgO particles. This value was fixed to 0.5 mm. Therefore, the mass fraction corresponding to the real particles with diameters lower than 0.5 mm was simulated using particles with a diameter of 0.5 mm (scalping [37]). Similarly, the remaining amounts of material contained in each sieve were simulated with particles of diameters equal to the size of the mesh of the last sieve through which these materials passed (coarse graining [37]). This fact has been appreciated by a comparison of the experimental and simulated cumulative mass fraction lines provided in Figure 2. The particle size of Al₂O₃ was also greater in simulations. The simulated Al₂O₃ particles had diameters in the range of 0.3–0.5 mm in most of the setups of this work. These values are more than six times the real ones, but simulating particles of 45 μm would require an unacceptable computational cost. A few simulations using particles with a diameter of 0.15 mm were performed in order to reduce this difference. However, the computational cost of these

latter simulations was approximately sixteen times the computational cost of their homologues with particles of diameter 0.3 mm. The properties of the materials that were simulated and their interaction parameters are summarized in Tables 1 and 2, respectively. As one can see in these tables, the Young's modulus of the materials and the cohesion energy density between particles were modified while other parameters kept constant. The relationships between the Young's modulus of the different materials were equal in all the simulations. Similarly, the same value of cohesion energy density was chosen for all particle interactions in each simulation.

Table 1. Summary of material properties used in DEM simulations.

Material Properties			
	MgO	Al ₂ O ₃	Wall
Density (kg/m ³)	3500	3000	8000
Young's modulus (MPa)	250–3625	250–3625	200–2900
Poisson's ratio	0.25	0.25	0.29

Table 2. Summary of interaction parameters used in DEM simulations.

Interaction Parameters			
	Particle-Particle	Particle-Wall	Wall-Wall
Coefficient of restitution	0.5	0.5	0.5
Coefficient of static friction	0.2	0.2	0.2
Coefficient of rolling friction	0	0	0
Cohesion energy density (J/m ³)	1×10^6 – 7×10^6	–	–

It should be noted that the values of the Young's modulus of the simulated materials were lower than those of the real ones. However, this difference was assumed to reduce the computational cost, but also was necessary to counteract the effect of using greater particles than the real ones. The values of cohesion energy density were in the range 1 to 7×10^6 J/m³ to avoid stability problems. This parameter is strongly dependent on some of the properties of the materials, such as the Young's modulus and particle size and its calibration is necessary to accurately simulate the cohesive behavior of real materials [36]. Consequently, the range of values of cohesion energy density was established to ensure the stability of the simulations taking into account the range of Young's modulus and particle sizes used in them.

2.3. Methodology

At the beginning of this work, several DEM models were performed. In these models, the compact process described in Section 2.2 was simulated in order to analyze the influence of Young's modulus (E), the cohesion energy density (CED), and the particle size of Al₂O₃ (D) on the maximum force applied by the punch (F) and the porosity (P) and final shape quality of the compact (SQC). A DOE was applied for this purpose, where three levels of each factor (E, CED, and D) were examined. The details of the simulations used are provided in Table 3. Once these factors had been identified, another DOE was applied to verify if both software packages could generate results similar to the experimental data. For this purpose, three levels of the two most influential factors were examined, using both DEM packages. The simulations that were conducted are given in Table 4. The combined effect of these two factors was examined too. This analysis made it possible to predict the values of those factors that must be set to obtain results similar to the experimental ones in each DEM simulator. The simulations provided in Table 5 (setups nos. 1 and 2) were performed to validate this prediction. Finally, additional simulations using smaller Al₂O₃ particles were conducted to reduce the deviation between the experimental data and the results obtained from the simulations. The details of these simulations are presented in Table 5 (setups nos. 3–8).

Table 3. Setups used for the preliminary analysis of the DEM models.

Setup No.	Nomenclature	Young's Modulus [MPa]	Cohesion Energy Density [J/m ³]	Al ₂ O ₃ Diameter [μm]
1	E0250 CED1 D300	250	1 × 10 ⁶	300
2	E0250 CED1 D500	250	1 × 10 ⁶	500
3	E0250 CED3 D400	250	3 × 10 ⁶	400
4	E0250 CED5 D300	250	5 × 10 ⁶	300
5	E0250 CED5 D500	250	5 × 10 ⁶	500
6	E1375 CED1 D400	1375	1 × 10 ⁶	400
7	E1375 CED3 D300	1375	3 × 10 ⁶	300
8	E1375 CED3 D400	1375	3 × 10 ⁶	400
9	E1375 CED3 D500	1375	3 × 10 ⁶	500
10	E1375 CED5 D400	1375	5 × 10 ⁶	400
11	E2500 CED1 D300	2500	1 × 10 ⁶	300
12	E2500 CED1 D500	2500	1 × 10 ⁶	500
13	E2500 CED3 D400	2500	3 × 10 ⁶	400
14	E2500 CED5 D300	2500	5 × 10 ⁶	300
15	E2500 CED5 D500	2500	5 × 10 ⁶	500

Table 4. Summary of interaction parameters used in DEM simulations.

Setup No.	Nomenclature	Young's Modulus [MPa]	Cohesion Energy Density [J/m ³]	Al ₂ O ₃ Diameter [μm]
1	E1375 CED3 D300	1375	3 × 10 ⁶	300
2	E1375 CED5 D300	1375	5 × 10 ⁶	300
3	E1375 CED7 D300	1375	7 × 10 ⁶	300
4	E2500 CED3 D300	2500	3 × 10 ⁶	300
5	E2500 CED5 D300	2500	5 × 10 ⁶	300
6	E2500 CED7 D300	2500	7 × 10 ⁶	300
7	E3625 CED3 D300	3625	3 × 10 ⁶	300
8	E3625 CED5 D300	3625	5 × 10 ⁶	300
9	E3625 CED7 D300	3625	7 × 10 ⁶	300

Table 5. Setups used for the validation of the DEM models.

Setup No.	Nomenclature	DEM Simulator	Young's Modulus [MPa]	Cohesion Energy Density [J/m ³]	Al ₂ O ₃ Diameter [μm]
1	E2250 CED7 D300	EDEM	2250	7 × 10 ⁶	300
2	E2230 CED7 D300	LIGGGHTS	2230	7 × 10 ⁶	300
3	E2341 CED7 D250	EDEM	2341	7 × 10 ⁶	250
4	E2322 CED7 D250	LIGGGHTS	2322	7 × 10 ⁶	250
5	E2535 CED7 D200	EDEM	2535	7 × 10 ⁶	200
6	E2525 CED7 D200	LIGGGHTS	2525	7 × 10 ⁶	200
7	E2910 CED7 D150	EDEM	2910	7 × 10 ⁶	150
8	E2903 CED7 D150	LIGGGHTS	2903	7 × 10 ⁶	150

As mentioned above, the maximum force applied by the punch and the porosity and final shape quality of the compacts were analyzed in simulations because of their importance in determining the goodness of the compacts: Firstly, some of the defects in the compacts, such as capping or lamination, are usually generated by the application of an inadequate force. The maximum force applied by the punch was chosen to compare the simulations with the experiments because the force was controlled in experimental testing and the comparison between experiments and simulations was immediate. The maximum force value was attained when the upper punch was located in its lower position in both cases. Secondly, the porosity of the compacts determine their mechanical properties. The porosity is the quotient between the volume of voids and the volume that is occupied by the compact ($P = V_{\text{voids}}/V_{\text{compact}}$). For simple geometries, such as the geometry of the compacts formed in this work, the porosity may be measured indirectly by determining the mass and dimensions of

the component [43]. For this reason, the volume of the compact was calculated as the volume of a cylinder with the radius and the height of the compact ($V_{\text{compact}} = \pi \cdot r_{\text{compact}}^2 \times h_{\text{compact}}$). The volume of the voids is the difference between the volume of the compact and the real volume of the material ($V_{\text{voids}} = V_{\text{compact}} - V_{\text{material}}$). This volume is calculated in a different way in experiments and simulations. The real volume of the material was calculated experimentally as the summation of the volume of each material, which is calculated by the quotient between the mass and the density ($V_{\text{material,exp}} = \sum m_i / \rho_i$). Alternatively, the real volume of the simulated material was calculated as the difference between the summation of the volume of all the particles and the summation of the overlapped volume ($V_{\text{material,sim}} = \sum V_{\text{particle}} - \sum V_{\text{overlap}}$). Lastly, the final SQC after the removal of the matrix was examined. The similarity ratio (or Kohonen similarity) taking into account the height of the compact and the average maximum radius at 15 levels of the height (from 0 to 0.015 m) just after the matrix had been removed and 0.05 s after that, was calculated and used to quantify this qualitative result (SQC). Moreover, a scale from 1 to 5 was applied to define the goodness of the compacts, where 5 means “very good SQC” and 1 means “very bad SQC.” The correspondence between each value of the scale and the Kohonen similarity was chosen taking into account that similarity ratios lower than 50% indicated “very bad SQC” and the optimal similarity ratio was 100%. The intermediate values of the scale were obtained by dividing the range between 50% and 100% in 4 equal parts. The scale used is the following: 5 ~ (100–87.5%); 4 ~ (87.5–75%); 3 ~ (75–62.5%); 2 ~ (62.5–50%); 1 ~ (50–0%).

3. Results and Discussion

3.1. Preliminary Analysis

The results obtained from the simulations that were conducted to determine the most influential parameters of the contact models are provided in Table 6. As one can see, the maximum force applied in experiments (25,095 N) was attained in the setups that used a Young’s modulus of 2500 MPa. Moreover, the porosity of the simulated compacts was greater than that of the real ones (26.08%) in all cases. Finally, good compacts were obtained in some cases but they were very bad in others, as the values of SQC indicated.

Table 6. Results obtained in the simulations used for the preliminary analysis of the DEM models.

Setup No.	Nomenclature	EDEM			LIGGGHTS		
		F [N]	P [%]	SQC [-]	F [N]	P [%]	SQC [-]
1	E0250 CED1 D300	2729	41.86	5	2750	38.25	4
2	E0250 CED1 D500	2333	54.20	5	2919	41.90	4
3	E0250 CED3 D400	2260	48.02	5	2250	35.60	5
4	E0250 CED5 D300	1424	32.81	1	1457	29.37	5
5	E0250 CED5 D500	1182	45.21	5	1628	31.66	5
6	E1375 CED1 D400	17,091	55.29	2	17,276	47.95	2
7	E1375 CED3 D300	15,787	41.48	5	15,865	41.34	3
8	E1375 CED3 D400	16,551	51.24	5	16,624	43.47	3
9	E1375 CED3 D500	12,475	55.13	5	16,858	44.41	3
10	E1375 CED5 D400	15,922	48.94	5	15,986	38.24	5
11	E2500 CED1 D300	30,093	47.07	2	30,297	47.59	2
12	E2500 CED1 D500	23,613	58.17	2	31,987	48.94	2
13	E2500 CED3 D400	29,909	54.22	3	31,053	47.35	2
14	E2500 CED5 D300	28,867	41.32	5	29,015	40.51	4
15	E2500 CED5 D500	22,453	54.14	5	30,807	43.98	3

F: maximum force; P: compact’s porosity; SQC: final shape quality of the compacts.

The results of the analysis of variance (ANOVA) of the quadratic model and the estimated regression coefficients for the maximum force, porosity of the compact, and shape quality of the compact can be seen in Tables S10–S12 of the Supplementary material, respectively. The DOE conducted, the levels of

each factor and the results obtained are shown in Tables S7–S9. The regression models relating to the maximum force (Table S10) and porosity of the compact (Table S11) fitted the data well. The maximum force was mainly influenced by Young's modulus in both DEM simulators. The regression models also indicated that the porosity of the compact increased with Young's modulus and the diameter of the particles, but it decreased with CED. However, a good fitting between the regression models and the data was not possible for SQC, especially using EDEM (Table S12). Moreover, the ANOVA results revealed that Young's modulus and CED were the factors that influenced, to a greater extent, all the results, using LIGGGHTS. However, the effect of the diameter was also important in EDEM, especially on the porosity of the compacts. Because the fitting for SQC using the data obtained from LIGGGHTS was better than that obtained from EDEM, the most influential parameters in LIGGGHTS were considered for the calibration of the models for both DEM simulators. Therefore, the effects of Young's modulus and CED on the results have been covered in Section 3.2.

3.2. Calibration of the DEM Models

In this section, the effects of Young's modulus and CED on the maximum force applied by the punch and the porosity and final shape quality of the compact are analyzed. Moreover, the analysis of the evolution of the height of the compact and overlap between the particles along the time supports the examination of the force. Figures 4 and 5 show the results that were obtained from the nine simulations included in the DOE used to calibrate the DEM models (see Table 7). In addition, the regression models that were obtained from these simulations are presented in this section.

The evolution of the force applied by the punch along the time is shown in Figure 4a. Two sections are distinguished in this plot: The first of them corresponds to the loading process (from 0 to 0.06 s) and the second corresponds to the unloading process (from 0.06 to 0.1 s). The position of the punch along the time is represented by a black dot–dash line in Figure 4b. During the loading process, the punch moved down and the powder compaction took place. For this reason, the force increased until 0.06 s, when the maximum value of the force was attained. At this moment, the punch was located in its lowest position. After that, it began to move up. Consequently, the compact began to relax into its final dimensions. This induced the reduction of the force until its cessation. The cessation took place when the punch separated from the particles. As one can see in the detailed images (Figure 4a), the force reduced more quickly than it increased, although the velocity of the punch was the same during both processes (loading and unloading).

The evolution of the height of the compact along the time is shown in Figure 4b. It was calculated as the maximum distance between the particles along the z axis. In all cases, the curves showed some zones where the height of the compact matched the z position of the punch (represented by the black dot–dash line). Nevertheless, the height of the compact was lower than the z position of the punch in other zones. During the loading process (from 0 to 0.06 s), the height of the compact matched the z position of the punch at the beginning. This was because the particles were created in all the volume that was defined by the inner surfaces of the punches and matrix, and the upper punch began its movement just after the creation of the particles. For this reason, the punch pushed the particles down from this moment. The contact between the punch and particles kept for a brief moment. Then, the particles separated from the punch as a consequence of the impulse added by the punch. In this moment, the particles kept falling and then settled. The height of the compact was lower than the z position of the punch during this interval. After the settlement of the particles, the punch got in contact with the particles and began to push them down again until it stopped its downward movement, which resulted in a new matching between the height of the compact and the z position of the punch. During the unloading process (from 0.06 to 0.1 s), the compact initially expanded as the punch moved up because the contact forces between the particles were too high. Finally, the particles attained a steady state. For this reason, the height of the compact was relatively constant at the end of the process. Different behaviors took place at the end of this process in the simulations, as the detailed images of Figure 4b show. Although all the curves showed a curvature and reduction at the end of the process,

some of them attained a constant value. This curvature was because some particles were taken off from the compact when the punch separated from the compact as a consequence of their interactions with the punch.

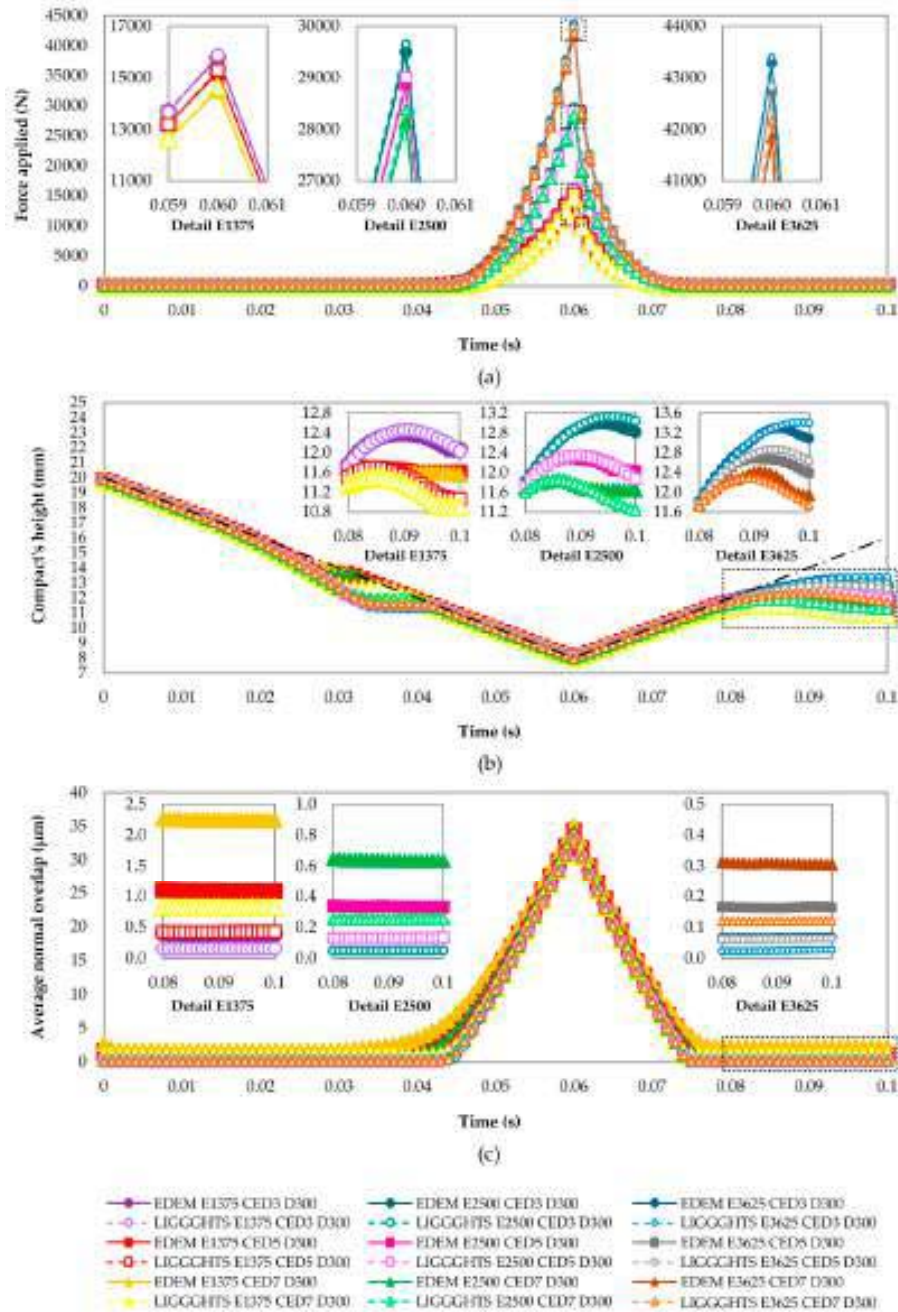


Figure 4. Results obtained in simulations relating to the DOE used to calibrate the DEM models. Evolution of (a) total force applied by the punch, (b) compact's height and (c) average normal overlap between particles.

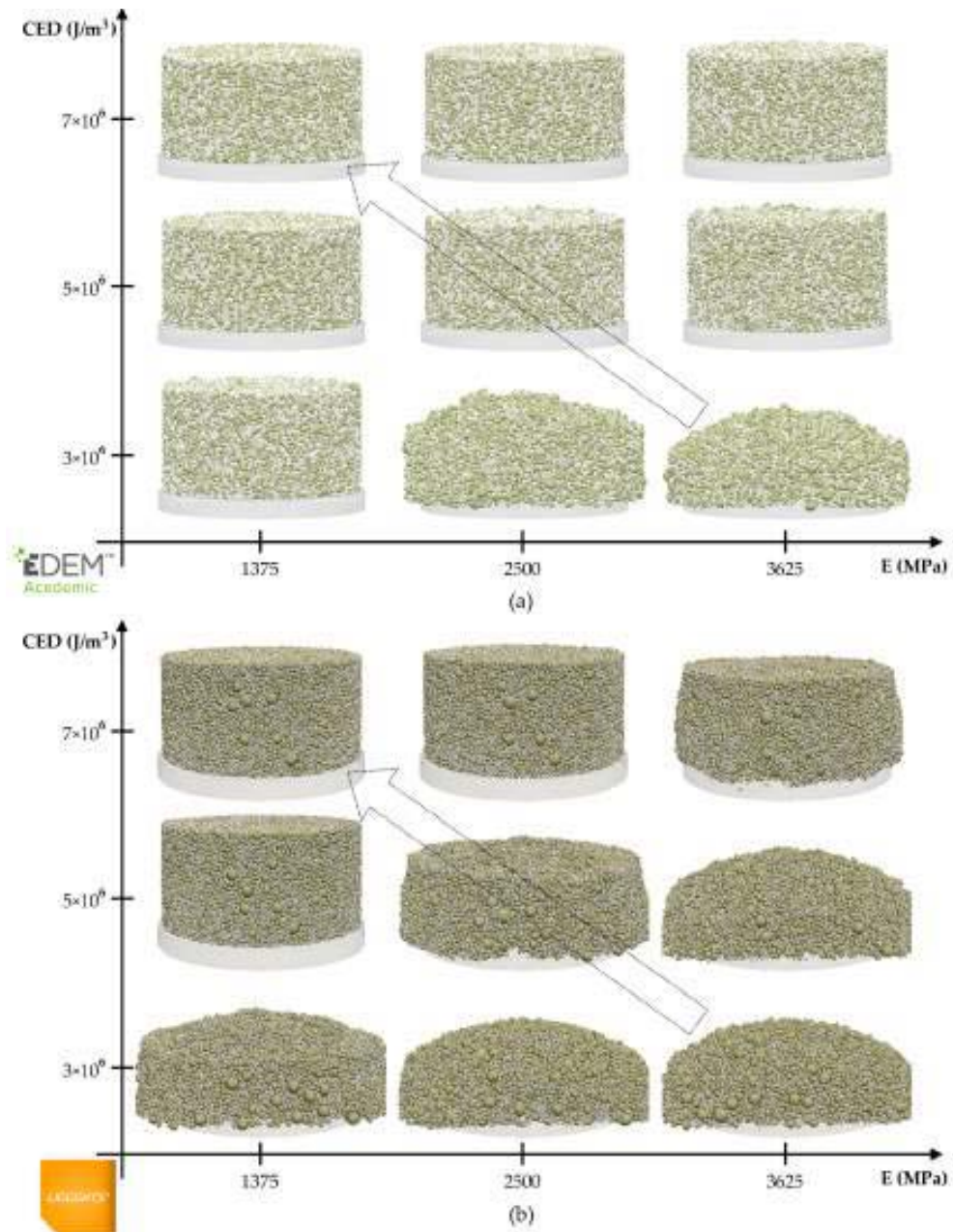


Figure 5. Results obtained in simulations relating to the DOE used to calibrate the DEM models. Final shape quality of the compacts obtained in (a) EDEM and (b) LIGGGHTS.

Table 7. Results obtained in the simulations used for the calibration of the DEM models.

Setup no.	Nomenclature	EDEM			LIGGGHTS		
		F [N]	P [%]	SQC [-]	F [N]	P [%]	SQC [-]
1	E1375 CED3 D300	15,787	41.48	5	15,865	41.34	3
2	E1375 CED5 D300	15,201	39.14	5	15,283	36.20	5
3	E1375 CED7 D300	14,506	38.95	5	14,662	35.32	5
4	E2500 CED3 D300	29,495	44.93	4	29,647	45.87	2
5	E2500 CED5 D300	28,867	41.32	5	29,015	40.51	4
6	E2500 CED7 D300	28,155	39.37	5	28,369	37.23	5
7	E3625 CED3 D300	43,279	46.08	3	43,393	47.31	2
8	E3625 CED5 D300	42,745	43.02	5	42,827	44.14	2
9	E3625 CED7 D300	41,846	40.90	5	42,172	39.87	4

F: maximum force; P: compact's porosity; SQC: final shape quality of the compacts.

The average normal overlap between the particles along the time is shown in Figure 4c. As one can see, it was the greatest at the maximum load moment (0.06 s; see Figure 4a). Firstly, the particles had to overlap and be rearranged in order to fit in the volume delimited by the geometries, which made the volume to decrease as the upper punch moved down. The minimum volume took place at the maximum load moment (0.06 s) because the position of the upper punch was the lowest (8 mm; see Figure 4b). At this moment, the maximum values of normal overlap were attained. Secondly, the normal overlap was gradually reduced as the punch moved up at the beginning of the unloading process. This was due to the relaxation of the compact. Finally, the particles attained a steady state when the contact between the upper punch and particles disappeared (0.08 s, approximately). From this moment on, the normal overlap was kept relatively constant, as one can see in the detailed images of Figure 4c.

Despite the fact that the behavior of all the curves was generally the same, the effects of Young's modulus and CED were identified: Firstly, three groups of curves were distinguished, as shown in Figure 4a. The curves corresponding to each level of Young's modulus integrated each group. As expected, the Young's modulus had a great influence on the maximum force applied by the punch. The force was higher as Young's modulus was higher. These behaviors can be explained by means of an analysis of the average normal overlap between the particles (see Figure 4c). As one can see in the detailed images, the overlap was lower as Young's modulus of the particles of a granular material was higher. This is because the deformations that occur at the contacts between the real particles are simulated by the overlap between the particles in the DEM models. The deformations of the real materials are lower as their Young's modulus is higher. In the analyzed system, this increment of Young's modulus induced that the granular material occupied a greater volume because the overlaps between the particles were lower. For this reason, the volume of the compact was also higher as Young's modulus was higher. Because the transversal section was constant, the behavior of the heights of the compacts displayed in Figure 4b can explain the evolution of the volumes of the compacts along the time. Therefore, it was necessary to apply a higher force in order to reduce its volume (or height) until a determined value (8 mm in this case). Secondly, CED had a little influence on this maximum force (see Figure 4a). However, although the difference between the curves with equal Young's modulus was too small, it was possible to appreciate that the maximum force decreased as CED increased (see the detailed images of Figure 4a). This was because the overlaps between the particles increased as a consequence of the attraction forces induced by the cohesion (as one can see in the detailed images of Figure 4c). The contact models used in this work considered that the cohesion force was proportional to the cohesion energy density. For this reason, as CED was higher, the overlap between the particles was higher too and the volume that they occupied was lower. The influence of CED on the final height of the compacts (at 0.1 s) is easy to perceive in Figure 4b. As one can see, the final height of the compacts was lower as CED was higher.

Figure 5 shows the final SQC 0.05 s after the matrix has been removed. As one can observe, the SQC depended on both parameters, Young's modulus and CED. Although the shape qualities of the compacts that were simulated in EDEM did not match with their homologues in LIGGGHTS, it was possible to determine a similar trend in both simulators. The final SQC was better as Young's modulus was lower and CED was higher.

Table 7 summarizes the results that were obtained from the simulations corresponding to the DOE used to calibrate the DEM models. As one can see, the maximum forces and porosity of the compacts were very similar in both software packages. Despite this similarity, the maximum forces applied by the punch in LIGGGHTS were slightly higher than the ones applied in EDEM. Moreover, the trends of both results were also similar for both DEM simulators. The maximum force increased considerably as Young's modulus increased and decreased slightly as CED increased, as shown in Figure 4a. The porosity of the compacts behaved similar to the forces, but the effect of both parameters on the porosity was similar. This is in agreement with the results shown in Figure 4b. At 0.1 s, the height of the compact increases with Young's modulus and decreases with CED. Because the porosity has been calculated as a function of the height of the compact in this work, both factors had the same effect on the porosity of the compact. However, the values assigned to the final SQC were different in some homologue simulations. Although the values obtained using one software did not match with the corresponding values obtained using the other, the trends in both software packages were the same (as shown in Figure 5). SQC got better as CED increased. However, the compacts tended to deteriorate as Young's modulus increased.

Furthermore, as one can see in Table 7, the force that was applied in the experiments (25095 N) is within the range of values obtained from the simulations. Therefore, it seems necessary to simulate a material with a Young's modulus between 1375 and 2500 MPa. However, the porosity of the real compacts (26.08%) is out of range. This can be due to the approximation of the particle size distribution. The porosities of all the simulated compacts were higher than 35% because the sizes of the simulated particles were higher than those of the real ones. The porosity of the compacts can be reduced using smaller particles, as concluded in a preliminary analysis (see Section 3.1), but the computational cost would become too high. For this reason, it seems impossible to obtain a compact with a porosity of 26.08% by simulating the particles that were used in this work. Moreover, the appearance of the simulated compacts was good for those compacts with Young's modulus of 1375 and 2500 MPa and CED of 7×10^6 J/m³. Therefore, it appears at first sight that it would be possible to obtain a good-shape-quality compact after the application of a similar force to the experimental one, although its porosity would be higher than the real one.

The ANOVA results of the quadratic model and the estimated regression coefficients for the maximum force, porosity of the compact, and shape quality of the compact can be seen in Tables S16–S18, respectively. The DOE conducted, the levels of each factor and the results obtained are shown in Tables S13–S15. As one can see, the regression predictions relating to the maximum force (Table S16) perfectly fitted the data. (R^2 and adjusted R^2 were equal to 1.) The regression models for the porosity of the compact (Table S17) also fitted the data well. In the case of SQC (Table S18), the fitting between the prediction and the data was worse, with R^2 close to 0.9. Despite this, the regression model for EDEM relating to SQC was significantly better during the calibration than in the preliminary analysis (Table S12).

Taking the ANOVA results into account, the regression models for the maximum force (F), porosity of the compact (P), and shape quality of the compact (SQC) using EDEM were determined by Equations (1)–(3), respectively. Equations (4)–(6) correspond to the regression predictions for LIGGGHTS as being dependent on Young's modulus (E) and the cohesion energy density (CED).

$$F_{\text{EDEM}} = 28,900.822 + 13,729.317 \cdot E - 675.683 \cdot \text{CED} - 38.1 \cdot E \cdot \text{CED} + 54.917 \cdot E^2 - 92.683 \cdot \text{CED}^2 \quad (1)$$

$$P_{\text{EDEM}} = 41.34556 + 1.73833 \cdot E - 2.21167 \cdot \text{CED} - 0.6625 \cdot E \cdot \text{CED} - 0.27833 \cdot E^2 + 0.79167 \cdot \text{CED}^2 \quad (2)$$

$$SQC_{EDEM} = 5 - 0.33333 \cdot E + 0.5 \cdot CED + 0.5 \cdot E \cdot CED - 0.5 \cdot CED^2 \quad (3)$$

$$F_{LIGGGHTS} = 29,026.111 + 13,763.667 \cdot E - 617 \cdot CED - 4.5 \cdot E \cdot CED + 23.333E^2 - 23.667 \cdot CED^2 \quad (4)$$

$$P_{LIGGGHTS} = 40.62111 + 3.07667 \cdot E - 3.68333 \cdot CED - 0.355 \cdot E \cdot CED - 0.50667 \cdot E^2 + 0.87333 \cdot CED^2 \quad (5)$$

$$SQC_{LIGGGHTS} = 3.77778 - 0.83333 \cdot E + 1.16667 \cdot CED - 0.16667 \cdot E^2 - 0.16667 \cdot CED^2 \quad (6)$$

It must be noted that these equations were obtained for particles of Al_2O_3 with diameter equal to 0.3 mm, and therefore, the validity of these equations is only demonstrated for that diameter.

3.3. DEM Model Validation

Once the simulations conducted to calibrate the DEM models were completed, it was possible to predict the values that must be set in order to obtain results similar to the experimental ones, using each software. For this purpose, the values of the maximum force and porosity of the compact that were obtained in experimental testing and a value of 5 for SQC were used to resolve each one of the equation systems formed by Equations (1)–(3) and (4)–(6).

The parameters predicted and results obtained from the simulations corresponding to the validation of the models are provided in Table 8 (setup nos. 1 and 2). The parameters predicted in each software were the same, except for Young's modulus. The value of this parameter in EDEM was slightly higher than that in LIGGGHTS because the maximum forces were lower in EDEM than in LIGGGHTS for the same set of parameters (as mentioned in Section 3.2). Comparing the results obtained from both DEM simulators with the experimental ones, one can see that the simulated maximum force was closed from the experimental force. The deviations were lower than 60 N in both cases, and therefore, the relative difference was lower than 0.25% for both DEM models. However, the relative deviation between the experimental data and the results of the simulations was higher than 40% (49.2% EDEM; 41.2% LIGGGHTS) for the porosity. The simulated compacts had a porosity greater than 35%, whereas the porosity was 26.08%. This seems to indicate that the porosity of the real compact cannot be reached by simulating the Al_2O_3 material with particles of diameter 0.3 mm. Finally, SQC was "very good" in both simulations.

Table 8. Results obtained in the simulations used for the validation of the DEM models.

Setup No.	Nomenclature	DEM Simulator	F [N]	P [%]	SQC [-]
1	E2250 CED7 D300	EDEM	25,153	38.90	5
2	E2230 CED7 D300	LIGGGHTS	25,134	36.83	5
3	E2341 CED7 D250	EDEM	25,089	37.24	5
4	E2322 CED7 D250	LIGGGHTS	25,075	35.19	5
5	E2535 CED7 D200	EDEM	24,970	34.37	5
6	E2525 CED7 D200	LIGGGHTS	25,012	33.28	5
7	E2910 CED7 D150	EDEM	25,159	31.57	5
8	E2903 CED7 D150	LIGGGHTS	25,135	30.37	5

F: maximum force; P: compact's porosity; SQC: final shape quality of the compacts.

In this work, some simplifications were assumed to reduce the computational cost during the calibration of the DEM models. The real PSD of MgO was discretized and the size of the Al_2O_3 particles was more than six times the size of the real ones. These actions reduced the width of the PSD of the mixture and, therefore, the packing density that might be attained [44]. For this reason, additional simulations using the Al_2O_3 particles with lower diameters (0.25, 0.2, and 0.15 mm) were modeled to check the ability of the simulations to form compacts with real porosities. The parameters used in these simulations are provided in Table 8 (setup nos. 3–8). The values of the maximum force applied by the punch were lower as the diameters were smaller, using the original Young's modulus (2250 MPa in EDEM and 2230 MPa in LIGGGHTS). Because of this, Young's modulus needed to be

increased to compensate for the reduction of the maximum force that occurred when the size of the Al_2O_3 particles was reduced. In this work, only the results of the simulations with different-sized Al_2O_3 particles after their calibration have been presented. As provided in Table 8 (setups nos. 1–8), the values of the maximum forces were close to the experimental ones (25095 N). The relative deviation of the maximum forces was lower than 0.5% in all cases. On the contrary, the porosity was higher than the real one (26.08%) in all the cases. Nevertheless, one can appreciate that the porosity reduced as the particle size of Al_2O_3 was reduced, using both DEM simulators. The results show a reduction in the relative deviation of the porosity from 49.2% and 41.2% (with a diameter of 0.3 mm) to 21.0% and 16.4% (with a diameter of 0.15 mm) in EDEM and LIGGGHTS, respectively. Figure 6a plots the relationship between the porosity of the compact and the diameter of the Al_2O_3 particles. As one can see, the porosity decreases as the diameter of Al_2O_3 particles becomes smaller. The trend of the curve indicates that the real porosity would be reached if the particles with diameters similar to the real ones were simulated. The porosity of the compact using particles of diameter 0.045 mm is estimated to be 26.56% for EDEM and 26.25% for LIGGGHTS. These values indicate that the relative deviation would be lower than 2% in both simulators if these simulations were conducted. However, these simulations would require an unacceptable computational cost because the computational cost increases as the particle size of Al_2O_3 decreases, describing a power function as shown in Figure 6b. As a consequence, the minimum particle size simulated in this work was 0.15 mm. Each simulation that used particles of diameter 0.15 mm required approximately 3 weeks (515–550 h) to complete when they were run in conventional servers, which the practitioners usually have available. Additionally, the simulation conducted in LIGGGHTS with particles of diameter 0.15 mm was repeated using high-performance computing technology. This simulation was run under 64 cores and required approximately 30 h to complete. Although the reduction of the computational cost was important, lower diameters were not simulated because the technology required to keep the computational cost under acceptable figures is not commonly available to the practitioners and because the porosity reduction law becomes clearly inferred from the experiments that have already been carried out. As regards the appearance of the compacts after the matrix has been removed, the final SQC was 5 (“very good”) in all the simulations. The final appearance of the compacts simulated in both simulators using the Al_2O_3 particles of diameters 0.3, 0.25, 0.2, and 0.15 mm can be seen in Figure 7.

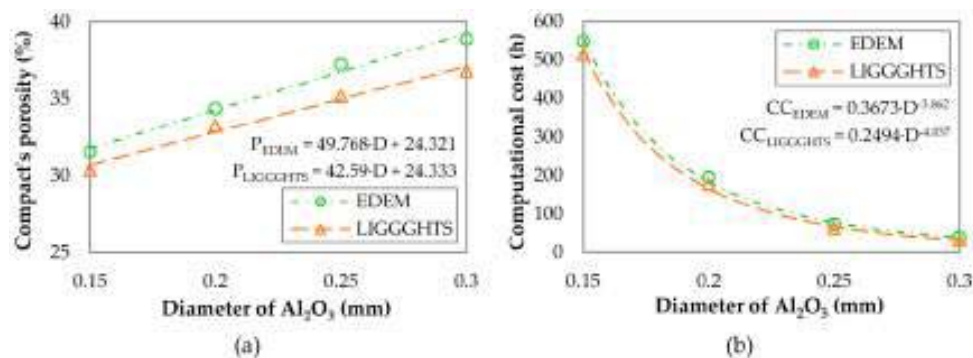


Figure 6. Effect of the particle size of Al_2O_3 on (a) the compact’s porosity and (b) the computational cost.

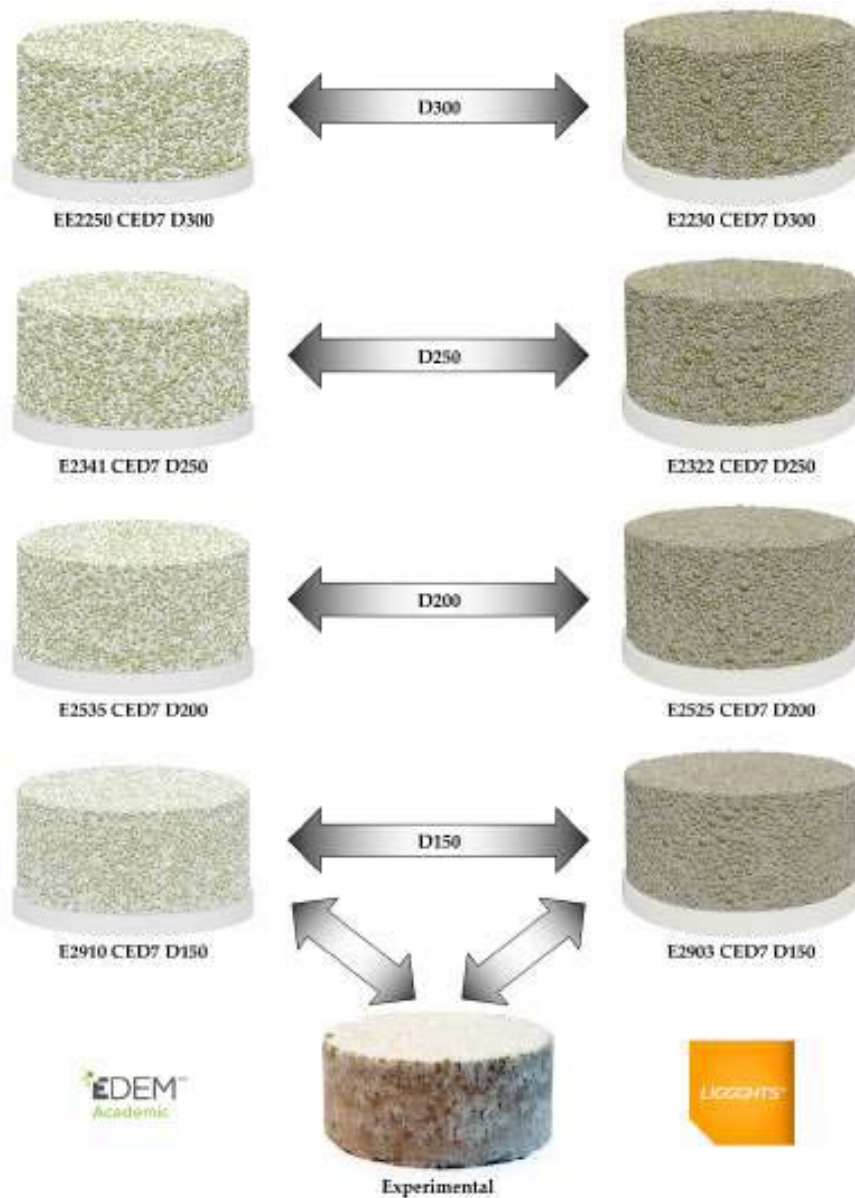


Figure 7. Green compacts obtained in the simulations used to validate the DEM models and real green compact.

4. Conclusions

In this work, two DEM simulators, EDEM 2.7.2 and LIGGGHTS 3.3.1, were used to model the compaction of refractory materials. The contact models “linear cohesion” and “SJKR2”, implemented in EDEM and LIGGGHTS, respectively, were used for this purpose. The capability of these two contact models to simulate this process was examined by a comparison between the results of the simulations and those of the experiments. The maximum force applied by the punch and the porosity and final shape quality of the compact were the results that were considered in this work.

In order to analyze the capability of both models, it was necessary to calibrate them. Therefore, several simulations were conducted to study the effect of some parameters on the results. The parameters that were examined included Young's modulus, CED, and the particle size of Al_2O_3 . A preliminary analysis of these three factors determined that Young's modulus and CED were the most influential factors. Therefore, the effects of these latter factors were examined in detail. The main conclusions that were obtained from these simulations are the following:

- The maximum force was mainly influenced by Young's modulus. It increased significantly as Young's modulus increased and decreased slightly as CED increased. The maximum force was also affected by the diameter of the Al_2O_3 particles, especially in EDEM.
- The porosity of the compacts increased with Young's modulus and decreased with CED. The effect of both factors on the porosity was similar. Additionally, the porosity increased as the particle size of Al_2O_3 was larger. The effect of the diameter was also more remarkable in EDEM.
- SQC got better as CED increased, but it worsened with the increment of Young's modulus. The effect of the particle size on SQC was negligible.
- The values of the maximum force and porosity of the compact were very similar in both software packages. On the contrary, there was not an equivalence between the values assigned to SQC in EDEM and LIGGGHTS. However, the trend in both software packages was the same.

By means of these simulations, it was also possible to obtain different regression models for each DEM simulator that allowed to predict the values of Young's modulus and CED that were necessary to obtain simulated results similar to the real ones. The results obtained using both DEM packages were compared to experimental data to validate the DEM models. They showed that both DEM models were capable of reproducing the formation of the compacts after the application of a maximum force similar to the experimental one. However, the porosity of the simulated compacts was higher than that of the real ones. For this reason, additional simulations using the Al_2O_3 particles with lower diameters were conducted to reduce the porosity of the compacts. The relative deviation of the maximum force between the experiments and simulations was lower than 0.5% in all the simulations used to validate the DEM models. The relative deviation of the porosity was reduced from 40–50% to approximately 20% by means of the reduction in the particle size of Al_2O_3 . SQC at the end of the simulations was “very good” in all of them.

In view of these results, the simulations using Al_2O_3 particles of diameter 0.3 mm may be useful to analyze some aspects of the powder compaction where the porosity of the compact is almost irrelevant—for example, the powder compaction to form green bodies with special shapes, including different sections, concave or convex surfaces. In other study cases where the porosity is critical, these simulations may be used to make a preliminary calibration of the model because of their low computational cost. After this preliminary calibration, other simulations should be conducted using a more realistic particle size distribution to validate the model.

The DEM models validated in this work would be used in future works to simulate the compaction of green bodies with more complex geometries. The distribution of the tension of the particles during the process and the possible inhomogeneities in the porosity of the compacts would be analyzed. Alternatively, the compaction of other mixtures consisting of different proportions of the materials used in this work would also be examined.

Supplementary Materials: The following are available online at <http://www.mdpi.com/1996-1944/13/1/224/s1>.

Author Contributions: J.O.-M. proposed the research topic; C.R.-A. performed the DEM simulations, analyzed the results and wrote the manuscript; F.A.-E. and A.G.-M. guided and supervised the project. All the authors revised the manuscript and contributed some useful suggestions in pre-publication stage. All authors have read and agreed to the published version of the manuscript.

Funding: This work was partially funded by EU under the Research Funds for Coal and Steel, through the grant number RFSR-CT-2015-00005 (LEANSTORY).

Acknowledgments: The DEM simulations and analysis were conducted using EDEM[®] 2.7.2, a bulk material simulation software that was provided by DEM Solutions Ltd. (Edinburgh, Scotland, UK), and LIGGGHTS-PUBLIC[®] 3.3.1, an open-source software. The authors acknowledge the support provided by Refractory Solutions Insertec, S.L.U., especially Roberto Caballero for his support to this research. They also acknowledge the contribution provided by the Materials Engineering degree thesis carried out by Luis Domingo Aranda. This research was partially funded by EU under the Research Funds for Coal and Steel, through the grant number RFSR-CT-2015-00005 (LEANSTORY). The authors would like to acknowledge the computer resources and technical assistance provided by the Centro de Supercomputación y Visualización de Madrid (CeSViMa). The UPM authors also thankfully acknowledge the computer resources, technical expertise and assistance provided by the Red Española de Supercomputación.

Conflicts of Interest: The authors declare no conflict of interest.

References

- Gupta, N.; Basu, B. Hot pressing and spark plasma sintering techniques of intermetallic matrix composites. In *Intermetallic Matrix Composites*; Mitra, R., Ed.; Elsevier Woodhead Publishing: Amsterdam, The Netherlands, 2018; pp. 243–302. ISBN 9780857093462.
- Braulio, M.A.L.; Bittencourt, L.R.M.; Pandolfelli, V.C. Magnesia grain size effect on in situ spinel refractory castables. *J. Eur. Ceram. Soc.* **2008**, *28*, 2845–2852. [[CrossRef](#)]
- Ye, X.; Li, Y.; Ai, Y.; Nie, Y. Novel powder packing theory with bimodal particle size distribution-application in superalloy. *Adv. Powder Technol.* **2018**. [[CrossRef](#)]
- Qian, Q.; An, X.; Zhao, H.; Dong, K.; Yang, X. Numerical investigations on random close packings of cylindrical particles with different aspect ratios. *Powder Technol.* **2018**. [[CrossRef](#)]
- Zhao, S.; Zhang, N.; Zhou, X.; Zhang, L. Particle shape effects on fabric of granular random packing. *Powder Technol.* **2017**. [[CrossRef](#)]
- Wang, H.; Glaser, B.; Sichen, D. Improvement of Resistance of MgO-Based Refractory to Slag Penetration by In Situ Spinel Formation. *Metall. Mater. Trans. B Process Metall. Mater. Process. Sci.* **2015**, *46*, 749–757. [[CrossRef](#)]
- Braulio, M.A.L.; Martinez, A.G.T.; Luz, A.P.; Liebske, C.; Pandolfelli, V.C. Basic slag attack of spinel-containing refractory castables. *Ceram. Int.* **2011**. [[CrossRef](#)]
- Tomba Martinez, A.G.; Luz, A.P.; Braulio, M.A.L.; Pandolfelli, V.C. Ceramics International Al₂O₃-based binders for corrosion resistance optimization of Al₂O₃-MgAl₂O₄ and Al₂O₃-MgO refractory castables. *Ceram. Int.* **2015**, *41*, 9947–9956. [[CrossRef](#)]
- Weerasekara, N.S.; Powell, M.S.; Cleary, P.W.; Tavares, L.M.; Evertsson, M.; Morrison, R.D.; Quist, J.; Carvalho, R.M. The contribution of DEM to the science of comminution. *Powder Technol.* **2013**, *248*, 3–24. [[CrossRef](#)]
- Metzger, M.J.; Glasser, B.J. Simulation of the breakage of bonded agglomerates in a ball mill. *Powder Technol.* **2013**, *237*, 286–302. [[CrossRef](#)]
- Ghodki, B.M.; Charith Kumar, K.; Goswami, T.K. Modeling breakage and motion of black pepper seeds in cryogenic mill. *Adv. Powder Technol.* **2018**, *29*, 1055–1071. [[CrossRef](#)]
- Pantaleev, S.; Yordanova, S.; Janda, A.; Marigo, M.; Ooi, J.Y. An experimentally validated DEM study of powder mixing in a paddle blade mixer. *Powder Technol.* **2017**. [[CrossRef](#)]
- Sebastian Escotet-Espinoza, M.; Foster, C.J.; Ierapetritou, M. Discrete Element Modeling (DEM) for mixing of cohesive solids in rotating cylinders. *Powder Technol.* **2018**. [[CrossRef](#)]
- Janda, A.; Ooi, J.Y. DEM modeling of cone penetration and unconfined compression in cohesive solids. *Powder Technol.* **2016**. [[CrossRef](#)]
- Thakur, S.C.; Morrissey, J.P.; Sun, J.; Chen, J.F.; Ooi, J.Y. Micromechanical analysis of cohesive granular materials using the discrete element method with an adhesive elasto-plastic contact model. *Granul. Matter* **2014**. [[CrossRef](#)]
- Thakur, S.C.; Ooi, J.Y.; Ahmadian, H. Scaling of discrete element model parameters for cohesionless and cohesive solid. *Powder Technol.* **2016**. [[CrossRef](#)]
- Yoon, J. Application of experimental design and optimization to PFC model calibration in uniaxial compression simulation. *Int. J. Rock Mech. Min. Sci.* **2007**. [[CrossRef](#)]
- He, Y.; Wang, Z.; Evans, T.J.; Yu, A.B.; Yang, R.Y. DEM study of the mechanical strength of iron ore compacts. *Int. J. Miner. Process.* **2015**. [[CrossRef](#)]

19. He, Y.; Evans, T.J.; Yu, A.B.; Yang, R.Y. DEM investigation of the role of friction in mechanical response of powder compact. *Powder Technol.* **2017**. [[CrossRef](#)]
20. He, Y.; Guo, F. Micromechanical analysis on the compaction of tetrahedral particles. *Chem. Eng. Res. Des.* **2018**, *136*, 610–619. [[CrossRef](#)]
21. He, Y.; Evans, T.J.; Shen, Y.S.; Yu, A.B.; Yang, R.Y. Discrete modelling of the compaction of non-spherical particles using a multi-sphere approach. *Miner. Eng.* **2018**. [[CrossRef](#)]
22. Wiacek, J.; Molenda, M. Effect of particle size distribution on micro-and macromechanical response of granular packings under compression. *Int. J. Solids Struct.* **2014**. [[CrossRef](#)]
23. Wiacek, J.; Molenda, M.; Horabik, J.; Ooi, J.Y. Influence of grain shape and intergranular friction on material behavior in uniaxial compression: Experimental and DEM modeling. *Powder Technol.* **2012**. [[CrossRef](#)]
24. Nordström, J.; Alderborn, G.; Frenning, G. Compressibility and tablet forming ability of bimodal granule mixtures: Experiments and DEM simulations. *Int. J. Pharm.* **2018**, *540*, 120–131. [[CrossRef](#)]
25. Martin, C.L.; Schneider, L.C.R.; Olmos, L.; Bouvard, D. Discrete element modeling of metallic powder sintering. *Scr. Mater.* **2006**, *55*, 425–428. [[CrossRef](#)]
26. Henrich, B.; Wonisch, A.; Kraft, T.; Moseler, M.; Riedel, H. Simulations of the influence of rearrangement during sintering. *Acta Mater.* **2007**, *55*, 753–762. [[CrossRef](#)]
27. Olmos, L.; Martin, C.L.; Bouvard, D. Sintering of mixtures of powders: Experiments and modelling. *Powder Technol.* **2009**, *190*, 134–140. [[CrossRef](#)]
28. Martin, S.; Guessasma, M.; Léchelle, J.; Fortin, J.; Saleh, K.; Adenot, F. Simulation of sintering using a Non Smooth Discrete Element Method. Application to the study of rearrangement. *Comput. Mater. Sci.* **2014**. [[CrossRef](#)]
29. Nosewicz, S.; Rojek, J.; Pietrzak, K.; Chmielewski, M. Viscoelastic discrete element model of powder sintering. *Powder Technol.* **2013**, *246*, 157–168. [[CrossRef](#)]
30. Parhami, F.; McMeeking, R.M.; Cocks, A.C.F.; Suo, Z. A model for the sintering and coarsening of rows of spherical particles. *Mech. Mater.* **1999**, *31*, 43–61. [[CrossRef](#)]
31. Garner, S.; Strong, J.; Zavaliangos, A. Study of the die compaction of powders to high relative densities using the discrete element method. *Powder Technol.* **2018**. [[CrossRef](#)]
32. Jiménez-Herrera, N.; Barrios, G.K.P.; Tavares, L.M. Comparison of breakage models in DEM in simulating impact on particle beds. *Adv. Powder Technol.* **2018**, *29*, 692–706. [[CrossRef](#)]
33. Markauskas, D.; Ramírez-Gómez, Á.; Kacianauskas, R.; Zdancevicius, E. Maize grain shape approaches for DEM modelling. *Comput. Electron. Agric.* **2015**, *118*, 247–258. [[CrossRef](#)]
34. Wei, H.; Zhao, Y.; Zhang, J.; Saxén, H.; Yu, Y. LIGGGHTS and EDEM application on charging system of ironmaking blast furnace. *Adv. Powder Technol.* **2017**. [[CrossRef](#)]
35. Soltanbeigi, B.; Podlozhnyuk, A.; Papanicolopulos, S.A.; Kloss, C.; Pirker, S.; Ooi, J.Y. DEM study of mechanical characteristics of multi-spherical and superquadric particles at micro and macro scales. *Powder Technol.* **2018**. [[CrossRef](#)]
36. Ramírez-Aragón, C.; Ordieres-Meré, J.; Alba-Eliás, F.; González-Marcos, A. Comparison of Cohesive Models in EDEM and LIGGGHTS for Simulating Powder Compaction. *Materials* **2018**, *11*, 2341. [[CrossRef](#)]
37. Roessler, T.; Katterfeld, A. Scaling of the angle of repose test and its influence on the calibration of DEM parameters using upscaled particles. *Powder Technol.* **2018**. [[CrossRef](#)]
38. Thornton, C.; Antony, S.J. Quasi-static shear deformation of a soft particle system. *Powder Technol.* **2000**. [[CrossRef](#)]
39. Washino, K.; Chan, E.L.; Tanaka, T. DEM with attraction forces using reduced particle stiffness. *Powder Technol.* **2018**. [[CrossRef](#)]
40. Thakur, S.C.; Ahmadian, H.; Sun, J.; Ooi, J.Y. Scaling of discrete element model parameters in uniaxial test simulation. In Proceedings of the Sixth International Conference on Discrete Element Methods (DEM 6), Golden, CO, USA, 5–6 August 2013; pp. 457–462.
41. Sako, E.Y.; Braulio, M.A.L.; Pandolfelli, V.C. How effective is the addition of nanoscaled particles to alumina–magnesia refractory castables? *Ceram. Int.* **2012**, *38*, 5157–5164. [[CrossRef](#)]

42. Luz, A.P.; Tomba Martinez, A.G.; Braulio, M.A.L.; Pandolfelli, V.C. Thermodynamic evaluation of spinel containing refractory castables corrosion by secondary metallurgy slag. *Ceram. Int.* **2011**. [[CrossRef](#)]
43. German, R.M. *Particulate Composites*; Springer International Publishing: Cham, Switzerland, 2016; ISBN 978-3-319-29915-0.
44. Kong, L.B.; Huang, Y.; Que, W.; Zhang, T.; Li, S.; Zhang, J.; Dong, Z.; Tang, D. Powder characterization and compaction. In *Metallurgy and Materials Engineering*; Springer International Publishing: Cham, Switzerland, 2015.



© 2020 by the authors. Licensee MDPI, Basel, Switzerland. This article is an open access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY) license (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

Supplementary Materials

Numerical Modeling for Simulation of Compaction of Refractory Materials for Secondary Steelmaking

Cristina Ramírez-Aragón ¹, Joaquín Ordieres-Meré ^{2,*}, Fernando Alba-Elías ¹ and Ana González-Marcos ¹

¹ Department of Mechanical Engineering, University of La Rioja, C/Luis de Ulloa, 20, 26004 Logroño, Spain; maria-cristina.ramirez@alum.unirioja.es (C.R.-A.); fernando.alba@unirioja.es (F.A.-E.); ana.gonzalez@unirioja.es (A.G.-M.)

² Department of Industrial Engineering, Business Administration and Statistics, Universidad Politécnica de Madrid, C/José Gutiérrez Abascal 2, 28006 Madrid, Spain

* Correspondence: j.ordieres@upm.es; Orcid: 0000-0002-9677-6764; Tel.: +34-91-067-7107

Received: 19 November 2019; Accepted: 2 January 2020; Published: 4 January 2020

S1. Number of Particles Simulated

Table S1. Number of particles simulated in the configurations that used Al₂O₃ particles of diameter 0.5 mm.

Material	Number of Particles	Particle Size (mm)
MgO	17368	0.5
	1252	0.63
	763	0.8
	504	1.25
	22	1.6
	2	2.5
Al ₂ O ₃	9272	0.5

Table S2. Number of particles simulated in the configurations that used Al₂O₃ particles of diameter 0.4 mm.

Material	Number of Particles	Particle Size (mm)
MgO	17368	0.5
	1252	0.63
	763	0.8
	504	1.25
	24	1.6
	2	2.5
Al ₂ O ₃	18111	0.4

Table S3. Number of particles simulated in the configurations that used Al₂O₃ particles of diameter 0.3 mm.

Material	Number of Particles	Particle Size (mm)
MgO	17368	0.5
	1252	0.63
	763	0.8
	504	1.25
	24	1.6
	2	2.5
Al ₂ O ₃	42930	0.3

Table S4. Number of particles simulated in the configurations that used Al₂O₃ particles of diameter 0.25 mm.

Material	Number of Particles	Particle Size (mm)
MgO	17368	0.5
	1251	0.63
	763	0.8
	504	1.25
	25	1.6
	2	2.5
Al ₂ O ₃	74183	0.25

Table S5. Number of particles simulated in the configurations that used Al₂O₃ particles of diameter 0.2 mm.

Material	Number of Particles	Particle Size (mm)
MgO	17368	0.5
	1252	0.63
	763	0.8
	504	1.25
	24	1.6
	2	2.5
Al ₂ O ₃	144889	0.2

Table S6. Number of particles simulated in the configurations that used Al₂O₃ particles of diameter 0.15 mm.

Material	Number of Particles	Particle Size (mm)
MgO	17368	0.5
	1252	0.63
	763	0.8
	504	1.25
	24	1.6
	2	2.5
Al ₂ O ₃	343441	0.15

S2. Combined Effect of the Young's Modulus (E), the Cohesion Energy Density (CED) and the Al₂O₃ Particle Size (D)

Table S7. Factors and levels used in the simulations conducted in the preliminary analysis of the DEM models.

	Factor	Uncoded Value Assigned to Each Level			Transformation from Coded to Uncoded
		-1	0	1	
E:	Young's modulus [MPa]	250	1375	2500	$\times 1 \sim (E - 1375)/1125$
CED:	Cohesion energy density [J/m ³]	1×10^6	3×10^6	5×10^6	$\times 2 \sim (CED - 3 \times 10^6)/2 \times 10^6$
D:	Particle size Al ₂ O ₃ [μ m]	300	400	500	$\times 3 \sim (D - 400)/100$

Table S8. Setups of the simulations used in the preliminary analysis of the DEM models.

Setup Number	Nomenclature	Uncoded Values			Coded Values		
		E	CED	D	$\times 1$	$\times 2$	$\times 3$
1	E0250 CED1 D300	250	1×10^6	300	-1	-1	-1
2	E0250 CED1 D500	250	1×10^6	500	-1	-1	1
3	E0250 CED3 D400	250	3×10^6	400	-1	0	0
4	E0250 CED5 D300	250	5×10^6	300	-1	1	-1
5	E0250 CED5 D500	250	5×10^6	500	-1	1	1
6	E1375 CED1 D400	1375	1×10^6	400	0	-1	0
7	E1375 CED3 D300	1375	3×10^6	300	0	0	-1
8	E1375 CED3 D400	1375	3×10^6	400	0	0	0
9	E1375 CED3 D500	1375	3×10^6	500	0	0	1
10	E1375 CED5 D400	1375	5×10^6	400	0	1	0
11	E2500 CED1 D300	2500	1×10^6	300	1	-1	-1
12	E2500 CED1 D500	2500	1×10^6	500	1	-1	1
13	E2500 CED3 D400	2500	3×10^6	400	1	0	0
14	E2500 CED5 D300	2500	5×10^6	300	1	1	-1
15	E2500 CED5 D500	2500	5×10^6	500	1	1	1

Table S9. Results obtained in the simulations used in the preliminary analysis of the DEM models.

Setup Number	Nomenclature	EDEM			LIGGGHTS		
		Maximum Force [N]	Compact's Porosity [%]	Final Compact's Appearance	Maximum Force [N]	Compact's Porosity [%]	Final Compact's Appearance
1	E0250 CED1 D300	2729	41.86	5	2750	38.25	4
2	E0250 CED1 D500	2333	54.20	5	2919	41.90	4

3	E0250 CED3 D400	2260	48.02	5	2250	35.60	5
4	E0250 CED5 D300	1424	32.81	1	1457	29.37	5
5	E0250 CED5 D500	1182	45.21	5	1628	31.66	5
6	E1375 CED1 D400	17091	55.29	2	17276	47.95	2
7	E1375 CED3 D300	15787	41.48	5	15865	41.34	3
8	E1375 CED3 D400	16551	51.24	5	16624	43.47	3
9	E1375 CED3 D500	12475	55.13	5	16858	44.41	3
10	E1375 CED5 D400	15922	48.94	5	15986	38.24	5
11	E2500 CED1 D300	30093	47.07	2	30297	47.59	2
12	E2500 CED1 D500	23613	58.17	2	31987	48.94	2
13	E2500 CED3 D400	29909	54.22	3	31053	47.35	2
14	E2500 CED5 D300	28867	41.32	5	29015	40.51	4
15	E2500 CED5 D500	22453	54.14	5	30807	43.98	3

Table S10. ANOVA results of the quadratic model and estimated regression coefficients for MAXIMUM FORCE (Preliminary analysis).

EDEM						LIGGGHTS					
Source	DF	Sum of Squares	Mean Squares	F-value	p-value	Source	DF	Sum of Squares	Mean Squares	F-value	p-value
Model	9	1,630,498,613	181,166,512.56	204.828	<0.001	Model	9	2028635369	225,403,929.89	12,678.813	<0.001
Linear	3	1,594,630,358	531,543,453.00	600.966	<0.001	Linear	3	2027137315	675,712,438.00	38,007.960	<0.001
Square	3	18,784,905	6,261,635	7.0794	0.0300	Square	3	1237233	412411	23.1976	0.0023
Interaction	3	17,083,350	5,694,450	6.4382	0.0361	Interaction	3	260821	86940	4.8903	0.0600
Residuals	5	4,422,407	884,481	–	–	Residuals	5	88891	17778	–	–
Lack-of-fit	5	4,422,407	884,481	1	0.5	Lack-of-fit	5	88891	17778	1	0.5
Pure error	0	0	0	–	–	Pure error	–	0	0	–	–
Total	14	1,634,921,020	–	–	–	Total	14	2028724260	–	–	–
R ² = 0.9973		–	–	–	–	R ² = 1		–	–	–	–

Adj-R ² = 0.9924					Adj-R ² = 0.99990				
Term	Estimate	Std. Error	t-value	p-value	Term	Estimate	Std. Error	t-value	p-value
Intercept	16,384.826	505.487	32.414	<0.001	Intercept	16,637.689	71.665	232.1581	<0.001
×1	12,500.613	297.402	42.0327	<0.001	×1	14215.5	42.164	337.1464	<0.001
×2	−600.972	297.402	−2.0207	0.0993	×2	−633.6	42.164	−15.027	<0.001
×3	−1684.204	297.402	−5.663	0.0024	×3	481.5	42.164	11.4196	<0.001
×1×2	8.865	332.506	0.0267	0.9798	×1×2	15.25	47.141	0.3235	0.7594
×1×3	−1532.082	332.506	−4.6077	0.0058	×1×3	392.75	47.141	8.3314	<0.001
×2×3	27.527	332.506	0.0828	0.9372	×2×3	13	47.141	0.2758	0.7938
×1 ²	−259.047	586.485	−0.4417	0.6772	×1 ²	10.389	83.149	0.1249	0.9054
×2 ²	163.118	586.485	0.2781	0.7920	×2 ²	−10.111	83.149	−0.1216	0.9079
×3 ²	−2212.532	586.485	−3.7725	0.0130	×3 ²	−279.611	83.149	−3.3628	0.0200

$$\times 1 \sim (E - 1375)/1125; \times 2 \sim (CED - 3 \times 10^6)/2 \times 10^6; \times 3 \sim (D-400)/100$$

Table S11. ANOVA results of the quadratic model and estimated regression coefficients for COMPACT's POROSITY (Preliminary analysis).

EDEM					LIGGGHTS						
Source	DF	Sum of Squares	Mean Squares	F-value	p-value	Source	DF	Sum of Squares	Mean Squares	F-value	p-value
Model	9	689.86	76.65	164.841	<0.001	Model	9	483.31	53.70	61.939	<0.001
Linear	3	612.61	204.202	439.301	<0.001	Linear	3	452.32	150.77	173.814	<0.001
Square	3	9.03	3.011	6.4766	0.0357	Square	3	6.49	2.165	2.4958	0.17433
Interaction	3	68.22	22.740	48.9206	0.0004	Interaction	3	24.5	8.165	9.4133	0.01689
Residuals	5	2.32	0.465	−	−	Residuals	5	4.34	0.867	−	−
Lack-of-fit	5	2.62	0.465	1	0.5	Lack-of-fit	5	4.34	0.867	1	0.5
Pure error	0	0	0	−	−	Pure error	0	0	0	−	−
Total	14	694.8	−	−	−	Total	14	491.99	−	−	−
R ² = 0.9966	−	−	−	−	−	R ² = 0.9911	−	−	−	−	−
Adj-R ² = 0.9906	−	−	−	−	−	Adj-R ² = 0.9751	−	−	−	−	−

Term	Estimate	Std. Error	t-value	p-value	Term	Estimate	Std. Error	t-value	p-value
Intercept	52.02622	0.36645	141.9738	<0.001	Intercept	43.55178	0.50059	87.0007	<0.001
×1	3.281	0.21560	15.2180	<0.001	×1	5.159	0.29452	17.5165	<0.001
×2	−3.418	0.21560	−15.8534	<0.001	×2	−4.087	0.29452	−13.8767	<0.001
×3	6.23	0.21560	28.8961	<0.001	×3	1.383	0.29452	4.6957	0.0054
×1×2	1.03375	0.24105	4.2886	0.0078	×1×2	0.885	0.32929	2.6876	0.0434
×1×3	−0.10125	0.24105	−0.4200	0.6919	×1×3	−0.14	0.32929	−0.4252	0.6884
×2×3	0.22375	0.24105	0.9282	0.3959	×2×3	0.095	0.32929	0.2885	0.7845
×1 ²	−1.10278	0.42517	−2.5937	0.0486	×1 ²	−2.09722	0.58081	−3.6109	0.0154
×2 ²	−0.10778	0.42517	−0.2535	0.8100	×2 ²	−0.47722	0.58081	−0.8217	0.4487
×3 ²	−3.91778	0.42517	−9.2146	<0.001	×3 ²	−0.69722	0.58081	−1.2004	0.2837

$$\times 1 \sim (E - 1375)/1125; \times 2 \sim (CED - 3 \times 10^6)/2 \times 10^6; \times 3 \sim (D-400)/100$$

Table S12. ANOVA results of the quadratic model and estimated regression coefficients for SHAPE QUALITY of the COMPACT (Preliminary analysis).

EDEM						LIGGGHTS					
Source	DF	Sum of Squares	Mean Squares	F-value	p-value	Source	DF	Sum of Squares	Mean Squares	F-value	p-value
Model	9	25.9222	2.88	2.369	0.1775	Model	9	17.7083	1.97	4.858	0.0483
Linear	3	5.7	1.90	1.563	0.30854	Linear	3	16.5	5.50	13.580	0.0077
Square	3	16.5	5.5	4.5247	0.06879	Square	3	0.375	1.25	0.3086	0.8189
Interaction	3	3.7222	1.2407	1.0207	0.45745	Interaction	3	0.8333	0.2778	0.5859	0.5982
Residuals	5	6.0778	1.2156	–	–	Residuals	5	2.025	0.405	–	–
Lack-of-fit	5	6.0778	1.2156	1	0.5	Lack-of-fit	5	2.025	0.405	1	0.5
Pure error	0	0	0	–	–	Pure error	0	0	1	–	–
Total	14	32	–	–	–	Total	14	19.7333	–	–	–
R ² = 0.8101		–	–	–	–	R ² = 0.8974		–	–	–	–
Adj-R ² = 0.4682		–	–	–	–	Adj-R ² = 0.7127		–	–	–	–

Term	Estimate	Std. Error	t-value	p-value	Term	Estimate	Std. Error	t-value	p-value
Intercept	4.55556	0.59259	7.6876	<0.001	Intercept	3.13333	0.34205	9.1604	<0.001
×1	−0.4	0.34865	−1.1473	0.3032	×1	−1	0.20125	−4.9690	0.0042
×2	0.5	0.34865	1.4341	0.2110	×2	0.8	0.20125	3.9752	0.0106
×3	0.4	0.34865	1.1473	0.3032	×3	−0.1	0.20125	−0.4969	0.6403
×1×2	1.25	0.38980	3.2068	0.0238	×1×2	0.125	0.22500	0.5556	0.6025
×1×3	−0.5	0.38980	−1.2827	0.2558	×1×3	−0.125	0.22500	−0.5556	0.6025
×2×3	0.5	0.38980	1.2827	0.2558	×2×3	−0.125	0.22500	−0.5556	0.6025
×1 ²	−0.44444	0.68754	−0.6464	0.5465	×1 ²	0.33333	0.39686	0.8399	0.4393
×2 ²	−0.94444	0.68754	−1.3737	0.2279	×2 ²	0.33333	0.39686	0.8399	0.4393
×3 ²	0.55556	0.68754	0.8080	0.4558	×3 ²	−0.16667	0.39686	−0.4200	0.6920

$$\times 1 \sim (E - 1375)/1125; \times 2 \sim (CED - 3 \times 10^6)/2 \times 10^6; \times 3 \sim (D - 400)/100$$

S3. Combined Effect of the Young's Modulus (E) and the Cohesion Energy Density (CED)

Table S13. Factors and levels used in the simulations conducted in the calibration of the DEM models.

Factor	Uncoded Value Assigned to Each Level			Transformation from Coded to Uncoded
	−1	0	1	
E: Young's modulus [MPa]	1375	2500	3625	$\times 1 \sim (E - 2500)/1125$
CED: Cohesion energy density [J/m ³]	3×10^6	5×10^6	7×10^6	$\times 2 \sim (CED - 5 \times 10^6)/2 \times 10^6$

Table S14. Setups of the simulations used to calibrate of the DEM models.

Setup Number	Nomenclature	Uncoded Values		Coded Values	
		E	CED	×1	×2
1	E1375 CED3 D300	1375	3× 10 ⁶	−1	−1
2	E1375 CED5 D300	1375	5× 10 ⁶	−1	0
3	E1375 CED7 D300	1375	7× 10 ⁶	−1	1
4	E2500 CED3 D300	2500	3× 10 ⁶	0	−1
5	E2500 CED5 D300	2500	5× 10 ⁶	0	0
6	E2500 CED7 D300	2500	7× 10 ⁶	0	1
7	E3625 CED3 D300	3625	3× 10 ⁶	1	−1
8	E3625 CED5 D300	3625	5× 10 ⁶	1	0
9	E3625 CED7 D300	3625	7× 10 ⁶	1	1

Table S15. Results obtained in the simulations used to calibrate of the DEM models.

Setup Number	Nomenclature	EDEM			LIGGGHTS		
		Maximum Force [N]	Compact's Porosity [%]	Final Compact's Appearance	Maximum Force [N]	Compact's Porosity [%]	Final Compact's Appearance
1	E1375 CED3 D300	15787	41.48	5	15865	41.34	2
2	E1375 CED5 D300	15201	39.14	5	15283	36.20	5
3	E1375 CED7 D300	14506	38.94	5	14662	35.31	5
4	E2500 CED3 D300	29495	44.93	2	29647	45.87	1
5	E2500 CED5 D300	28867	41.32	5	29015	40.51	3
6	E2500 CED7 D300	28155	39.37	5	28369	37.23	5
7	E3625 CED3 D300	43279	46.08	2	43393	47.31	1
8	E3625 CED5 D300	42745	43.02	5	42827	44.14	2
9	E3625 CED7 D300	41846	40.90	5	42172	39.87	3

Table S16. ANOVA results of the quadratic model and estimated regression coefficients for MAXIMUM FORCE (Calibration).

EDEM						LIGGGHTS					
Source	DF	Sum of Squares	Mean Squares	F-value	p-value	Source	DF	Sum of Squares	Mean Squares	F-value	p-value
Model	5	1,133,733,123	226,746,624.60	83118.264	<0.001	Model	5	1,138,917,545	227,783,509.00	352,606.051	<0.001
Linear	2	1,133,704,105	566,852,052.00	2.08×10^5	<0.001	Linear	2	1,138,915,255	569,457,627.00	8.81×10^5	<0.001
Square	1	5806	5806	2.13	0.2407	Square	1	81	81	0.125	0.7467
Interaction	2	23212	11606	4.25	0.1331	Interaction	2	2209	1105	1.71	0.3195
Residuals	3	8185	2728	–	–	Residuals	3	1938	646	–	–
Lack-of-fit	3	8185	2728	1	0.5	Lack-of-fit	3	1938	646	1	0.5
Pure error	0	0	0	–	–	Pure error	0	0	0	–	–
Total	11	1133741308	–	–	–	Total	11	1138919483	–	–	–
R ² = 1	–	–	–	–	–	R ² = 1	–	–	–	–	–
Adj-R ² = 1	–	–	–	–	–	Adj-R ² = 1	–	–	–	–	–

Term	Estimate	Std. Error	t-value	p-value	Term	Estimate	Std. Error	t-value	p-value
Intercept	28900.822	38.932	742.3359	<0.001	Intercept	29026.111	18.945	1532.1328	<0.001
×1	13729.317	21.324	643.8409	<0.001	×1	13763.667	10.377	1326.42	<0.001
×2	−675.683	21.324	−31.6864	<0.001	×2	−617	10.377	−59.461	<0.001
×1×2	−38.1	26.117	−1.4588	0.2407	×1×2	−4.5	12.709	−0.3541	0.7467
×1 ²	54.917	36.934	1.4869	0.2338	×1 ²	23.333	17.973	1.2983	0.2850
×2 ²	−92.683	36.934	−2.5094	0.0870	×2 ²	−23.667	17.973	−1.3168	0.2795

×1 ~ (E - 2500)/1125; ×2 ~ (CED - 5 × 10⁶)/2 × 10⁶

Table S17. ANOVA results of the quadratic model and estimated regression coefficients for COMPACT's POROSITY (Calibration).

EDEM						LIGGGHTS					
Source	DF	Sum of Squares	Mean Squares	F-value	p-value	Source	DF	Sum of Squares	Mean Squares	F-value	p-value
Model	5	50.644	10.13	27.811	0.0101	Model	5	140.74	28.15	23.205	0.0132
Linear	2	47.48	23.74	65.190	0.0034	Linear	2	138.197	69.10	5.982	0.0041
Square	1	1.756	1.7556	4.821	0.1156	Square	1	0.504	0.504	0.4157	0.5650
Interaction	2	1.408	0.7042	1.9338	0.2887	Interaction	2	2.039	1.019	0.8407	0.5130
Residuals	3	1.092	0.3642	–	–	Residuals	3	3.638	1.213	–	–
Lack-of-fit	3	1.092	0.3642	1	0.5	Lack-of-fit	3	3.638	1.213	1	0.5
Pure error	0	–	0	–	–	Pure error	0	0	0	–	–
Total	11	52.828	–	–	–	Total	11	148.016	–	–	–
R ² = 0.9789	–	–	–	–	–	R ² = 0.9748	–	–	–	–	–
Adj-R ² = 0.9437	–	–	–	–	–	Adj-R ² = 0.9328	–	–	–	–	–

Term	Estimate	Std. Error	t-value	p-value	Term	Estimate	Std. Error	t-value	p-value
Intercept	41.34556	0.44979	91.9216	<0.001	Intercept	40.62111	0.82079	49.4904	<0.001
×1	1.73833	0.24636	7.056	0.0059	×1	3.07667	0.44956	6.8437	0.0064
×2	−2.21167	0.24636	−8.9773	0.0029	×2	−3.68333	0.44956	−8.1931	0.0038
×1×2	−0.6625	0.30173	−2.1957	0.1156	×1×2	−0.355	0.5506	−0.6447	0.5650
×1 ²	−0.27833	0.42671	−0.6523	0.5607	×1 ²	−0.50667	0.77867	−0.6507	0.5616
×2 ²	0.79167	0.42671	1.8553	0.1606	×2 ²	0.87333	0.77867	1.1216	0.3437

×1 ~ (E - 2500)/1125; ×2 ~ (CED - 5 × 10⁶)/2 × 10⁶

Table S18. ANOVA results of the quadratic model and estimated regression coefficients for SHAPE QUALITY of the COMPACT (Calibration).

EDEM						LIGGGHTS					
Source	DF	Sum of Squares	Mean Squares	F-value	p-value	Source	DF	Sum of Squares	Mean Squares	F-value	p-value
Model	5	3.66667	0.73	6.600	0.07564	Model	5	12.4444	2.49	4.200	0.1336
Linear	2	2.16667	1.08	9.750	0.0487	Linear	2	12.3333	6.17	10.406	0.0447
Square	1	1	1	9	0.0577	Square	1	0	0	0	1
Interaction	2	0.5	0.25	2.25	0.2530	Interaction	2	0.1111	0.556	0.0938	0.9131
Residuals	3	0.33333	0.11111	–	–	Residuals	3	1.7778	0.5926	–	–
Lack-of-fit	3	0.33333	0.11111	1	0.5	Lack-of-fit	3	1.7778	0.5926	1	0.5
Pure error	0	0	0	–	–	Pure error	0	0	0	–	–
Total	11	4	–	–	–	Total	11	16	–	–	–
R ² = 0.9167	–	–	–	–	–	R ² = 0.8750	–	–	–	–	–
Adj-R ² = 0.7778	–	–	–	–	–	Adj-R ² = 0.6667	–	–	–	–	–
Term	Estimate	Std. Error	t-value	p-value	Term	Estimate	Std. Error	t-value	p-value		
Intercept	5	0.24845	20.1246	<0.001	Intercept	3.77778	0.57378	6.5841	0.0071		
×1	−0.33333	0.13608	−2.4495	0.0917	×1	−0.83333	0.31427	−2.6517	0.0769		
×2	0.5	0.13608	3.6742	0.0349	×2	1.16667	0.31427	3.7123	0.0340		
×1×2	0.5	0.16667	3.0000	0.0577	×1×2	0	0.38490	0.0000	1.0000		
×1 ²	0	0.23570	0.0000	1.0000	×1 ²	−0.16667	0.54433	−0.3062	0.7795		
×2 ²	−0.5	0.23570	−2.1213	0.1240	×2 ²	−0.16667	0.54330	−0.3062	0.7795		

×1 ~ (E - 2500)/1125; ×2 ~ (CED - 5 × 10⁶)/2 × 10⁶



© 2020 by the authors. Licensee MDPI, Basel, Switzerland. This article is an open access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY) license (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

