

SIMULACIÓN DEL FENÓMENO DE SEGREGACIÓN EN UN DEPÓSITO DE MÁQUINA COMPRESORA EXCÉNTRICA MEDIANTE ELEMENTOS DISCRETOS

Laura Martínez-Martínez

Elisa Sainz-García

Jorge Muro-Hernández

Ana González-Marcos

Departamento de Ingeniería Mecánica. Universidad de La Rioja

Abstract

Main goal of this work is to present the application of discrete element method (DEM) to study the segregation phenomena that occur in the feed hopper of a tablet compression machine ('single punch' eccentric press). The discrete element method, which is classified in the family of numerical methods, allows simulating parameterized models of granular systems and discontinuous materials. Specifically, the software used to carry out these analyses is EDEM®, in which it is possible to either implement the geometry of the elements to simulate or import it from a CAD tool. Thus, the aim of this study is to obtain deeper knowledge about the segregation of certain ingredients of a mixture (usually with larger size or density) that occurs within a feed hopper of an eccentric compression machine. For this purpose, the model parameters (mainly the coefficients of friction) are adjusted by comparison with compression tests performed with a real machine. Once the model is adjusted, it is possible to simulate the segregation process, enabling future works to propose changes in certain parameters (speed or geometry of the hopper) in order to mitigate these phenomena as far as possible, without carrying out extensive and expensive real laboratory tests.

Keywords: *segregation, eccentric compression machine, discrete elements, DEM*

Resumen

En el presente artículo se muestra la aplicación de técnicas DEM (*Discrete Element Method*) en el estudio de los fenómenos de segregación que se producen en el depósito alimentador de una máquina compresora de material pulverulento (tipo excéntrica monopunzón). El método de elementos discretos, enmarcado en la familia de métodos numéricos, permite simular modelos parametrizados de sistemas granulares sólidos y materiales discontinuos. Concretamente, el software empleado es EDEM®, en el que se puede implementar la geometría de los elementos a simular, o importarla de una herramienta CAD. Así, se persigue estudiar la segregación de ciertos ingredientes de una mezcla (normalmente aquellos con mayor tamaño o densidad) que se produce dentro del depósito alimentador de una máquina compresora excéntrica. Para ello, se realiza un ajuste de los parámetros del modelo simulado (principalmente los coeficientes de fricción) mediante la comparación con pruebas con una máquina compresora real. Una vez ajustado el modelo, se comprueba que es posible simular el proceso de segregación. Esto permitirá en futuras investigaciones, la modificación de ciertos parámetros (velocidad o geometría del depósito) para mitigar en la

medida de lo posible dichos fenómenos, sin llevar a cabo numerosas y costosas pruebas reales de laboratorio.

Palabras clave: segregación, máquina compresora excéntrica, elementos discretos, DEM

1. Introducción

En la actualidad, el método de elementos discretos (DEM) es ampliamente reconocido como un método eficaz para abordar problemas de ingeniería en materiales granulares y discontinuos, en especial es útil con los flujos de partículas granulares, la mecánica del polvo, y mecánica de rocas. De este modo, pueden ser simulados multitud de procesos dentro del ámbito industrial. En el caso concreto del presente trabajo, dicho método se ha empleado para el estudio del fenómeno de segregación de materia particulada en el carro alimentador de una máquina compresora directa.

La segregación o desmezcla, es un fenómeno de gran importancia para empresas de sectores industriales tales como la minería, la industria agroalimenticia, la industria farmacéutica, etc., donde la desmezcla de los ingredientes en sus distintos procesos productivos puede originar graves problemas.

La segregación se ve afectada por diversos factores como el tamaño de la partícula (Guo, Wu, Kafui & Thornton, 2011) y la densidad (Guo, Wu, Kafui & Thornton, 2009), la forma (Roskilly et al, 2010), y se rige principalmente por el efecto de las “nueces de Brasil” (Hong, Quinn, 2001).

En esta comunicación se muestran los estudios realizados para la obtención de un modelo que simule el proceso de segregación que se produce dentro de un depósito real de una máquina compresora, con el propósito de, en futuros trabajos, minimizar en lo posible dicho fenómeno.

2. Objetivos

Los objetivos del presente trabajo son los siguientes:

- Estudio de los fenómenos de segregación que se producen en una máquina de compresión directa, basado en la realización de ensayos empíricos y en simulaciones mediante el método de los elementos discretos.
- Determinación de los parámetros de simulación para poder ajustar la simulación a las pruebas empíricas reales.
- Validación del modelo para mejoras en futuras investigaciones.

3. Método de Elementos discretos (DEM)

Hoy día, el método de elementos discretos está ampliamente aceptado como una técnica muy eficaz para resolver problemas de ingeniería de materiales granulares y discontinuos.

El método de elementos discretos (DEM), también llamado de volúmenes finitos, pertenece a la familia de métodos numéricos y es utilizado en la simulación de la dinámica de partículas, llegando a tamaños de micras en lo que al diámetro de partícula se refiere. La aplicación del método de elementos discretos supone un coste computacional relativamente elevado, normalmente limitado por el número de partículas, pudiendo estar a su vez compuestas por un número determinado de superficies esféricas, por lo que es beneficioso usar varios procesadores en paralelo. Otra manera de reducir el tiempo de cálculo consiste en realizar aproximaciones de las partículas reales mediante modelos de partículas

dispuestas para que se asemejen a la realidad. A pesar de que DEM está estrechamente relacionado con la dinámica molecular, el método se caracteriza por la inclusión de grados de libertad de rotación así como el contacto entre partículas y geometrías complicadas (incluyendo poliedros). Con los avances en potencia de cálculo y algoritmos numéricos, se ha hecho posible simular numéricamente millones de partículas.

4. Segregación de materiales particulados

4.1 Fenómeno de la segregación

Se considera que un material en polvo ha sufrido un proceso de segregación cuando presenta variaciones importantes en la distribución de las partículas que lo componen. Por diferentes motivos, unas partículas se separan de las otras, dando lugar a una mezcla no homogénea del producto.

4.2 Mecanismos de segregación

Se denomina mecanismo de segregación al proceso regular que produce la agrupación de partículas similares.

- El mecanismo de **condensación** tiene su origen en la diferencia de la densidad de las partículas: las partículas más pesadas tienden a ubicarse en la parte baja del medio y las menos pesadas en la superior (Schröter et al., 2006).
- El mecanismo de **convección** se presenta en mezclas de partículas de diferentes tamaños, que al someterse a ciertas condiciones de vibración (en un contenedor), presentan un movimiento cíclico que hace que se acumulen en regiones localizadas (Zuriguél, 2003).
- La segregación por **percolación** se origina por la entrada de las partículas pequeñas en los espacios vacíos generados por las partículas grandes, en la dirección de la aceleración de la gravedad, hasta que la estructura granular tiende a ser localmente de partículas iguales.
- Trayectoria de **segregación**, por el cual los efectos de fricción reducen las velocidades de las partículas más pequeñas o más angulares en una fina capa de material en movimiento.

La combinación de las propiedades del material con los procesos mecánicos presentes en la naturaleza da como resultado mecanismos de segregación más complejos.

5. Metodología

5.1 Materiales de la experiencia

▪ Ingredientes de la Mezcla:

Los ingredientes empleados en los comprimidos que pueden fabricarse en una máquina compresora como la empleada, son muy variados. Algunos de estos ingredientes pueden ser:

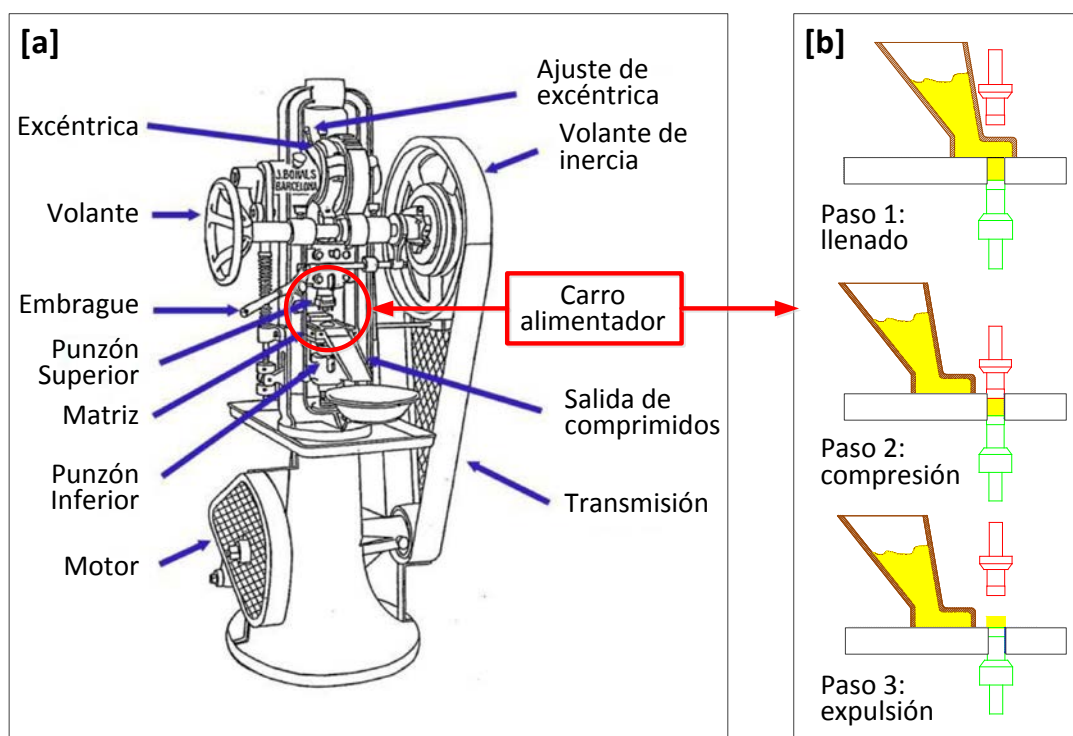
- Principios activos de comprimidos farmacéuticos
- Conservantes, saborizantes y aditivos en general de comprimidos de la industria agroalimentaria: sal, ácido cítrico, ácido ascórbico, etc.
- Detergentes comprimidos para lavadoras, lavavajillas, etc.

- Cloro y aditivos comprimidos para piscinas

Para el presente proyecto se ha empleado una mezcla de 2 ingredientes que por sus características, permiten estudiar varios de los mecanismos de segregación citados anteriormente (distintos tamaños, densidades y coeficientes de fricción).

- El ingrediente Mayoritario, **IMay (85%)** corresponde al de mayor tamaño y menor densidad: Granza de color rojo. Cilindro de 2.1 mm de diámetro y 3.4 mm de altura.
- El ingrediente minoritario, **Imin (15%)** corresponde al de menor tamaño y mayor densidad: Pasta alimenticia. Cilindro de 1.6 mm de diámetro y 1.6 mm de altura.

Figura 1. [a] Esquema de Máquina compresora. [b] Proceso de conformado de un comprimido.



▪ Máquina compresora directa:

- Máquina compresora monopunzón de la marca Bonals.
- Carro alimentador con capacidad para 1 kg de producto.

▪ Software empleado

- CAD: SolidEdge®
- DEM: EDEM® Academics 2.3

5.2 Simulación del proceso de compresión. Aproximación “Carro 2D”

▪ Carro Alimentador Simplificado “2D”

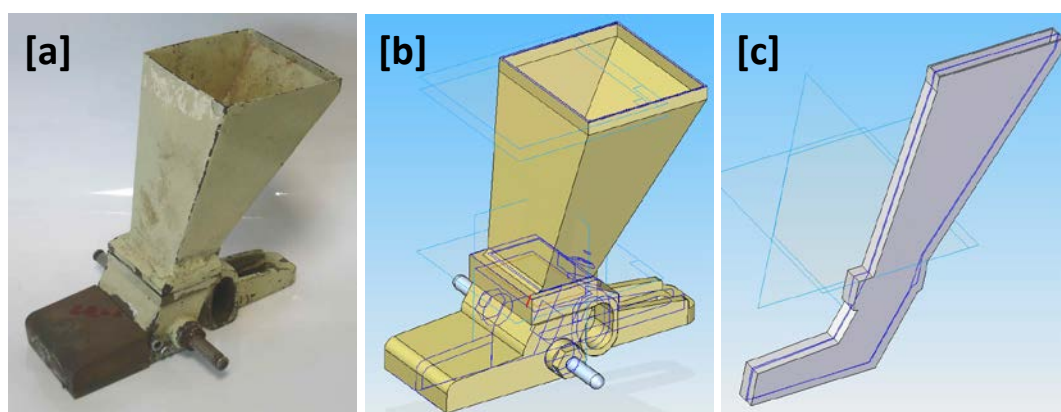
En un primer momento, se reprodujeron mediante un programa de CAD (SolidEdge®) las dimensiones exactas del carro original empleado en las pruebas empíricas. Esta geometría

fue denominada como carro “3D”. Dicha geometría fue importada posteriormente a programa de simulación EDEM®.

En las pruebas preliminares de simulación empleando las dimensiones reales, tanto del carro alimentador (carro “3D”), como de los ingredientes de mezcla (85-15%), se comprobó que el coste computacional era excesivo. El tiempo de cálculo necesario para simular la descarga total del carro alimentador era de 126 horas, empleando 8 servidores en paralelo. Ante esta circunstancia, cabía la posibilidad de reducir el número de partículas de la mezcla (aumentando su tamaño) o la de, poniendo en práctica las experiencias de otros autores (Ketterhagen et al., 2008 y Guo, Wu, Kafui & Thornton, 2011), emplear un modelo de carro “simplificado”. Se optó por emplear esta última opción, reservando el modelo de carro “3D” para la validación del modelo obtenido a partir del modelo simplificado.

El modelo simplificado o “2D” (fig.2c), se configuró a partir de una “rebanada” de 2 cm de espesor del carro “3D” (fig.2b).

Figura 2. [a] Carro “real” [b] Carro “3D” y [c] Carro “2D”

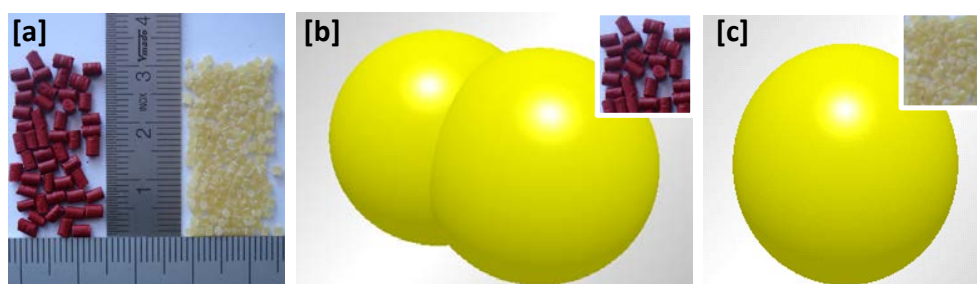


▪ Modelo empleado para la simulación de los ingredientes

El software EDEM® emplea partículas esféricas (una o varias) para la generación de los modelos de los ingredientes de la mezcla:

- El ingrediente Mayoritario, **IMay**: 2 esferas de 2.1mm de diámetro y una longitud de la unión de 3 mm (fig. 3a).
- El ingrediente minoritario, **Imin**: 1 esfera de 1.6mm de diámetro (fig. 3b)

Figura 3. [a] Partículas IMay e Imin, [b] Modelo IMay, [c] Modelo Imin



▪ **Interacciones entre los elementos. Valores iniciales**

Posteriormente se definieron las variables más significativas correspondientes a la simulación del proceso de compresión: propiedades físicas de los materiales que intervienen en el proceso (ingredientes y materiales de la máquina compresora), parámetros relativos a las interacciones entre las diferentes partículas, etc.

Los valores iniciales de estas variables empleados en la primera iteración se obtuvieron de la base de datos del software de simulación (Database EDEM®, 2011) y de referencias de otros trabajos (Yu & Saxén, 2010). Así mismo, se definieron los posibles rangos de variación de cada una de dichas variables, en función de las limitaciones propias del software empleado (Tabla 1 y 2).

Tabla 1. Características iniciales de los diferentes materiales y rangos de variación empleados en el ajuste del modelo

	Coefficiente Poisson	Densidad (kg/m3)	Modulo de Corte (Pa)
IMay	0.4 (0-1)	1021 (750-1300)	1x105 (1x104-1x108)
Imin	0.4 (0-1)	1104 (750-1300)	1x105 (1x104-1x108)
Material de la máquina compresora (acero)	0.3 (0-1)	7850 (7850)	8.4x1010 (1x104-1x1013)

Tabla 2. Parámetros iniciales relativos a las interacciones

	Coefficiente Restitución	Coefficiente de fricción estática	Coefficiente de rodadura
IMay- IMay	0.8 (0-1)	0.5 (0-1)	0.01 (0-1)
IMay - Imin	0.8 (0-1)	0.5 (0-1)	0.01 (0-1)
IMay -Acero	0.8 (0-1)	0.15 (0-1)	0.01 (0-1)
Imin - Imin	0.8 (0-1)	0.5 (0-1)	0.01 (0-1)
Imin -Acero	0.8 (0-1)	0.15 (0-1)	0.01 (0-1)
Acero-Acero	0.8 (0-1)	0.15 (0-1)	0.01 (0-1)

Una vez definidos los parámetros iniciales se comenzó un proceso iterativo para ajustar el modelo, de tal modo que el porcentaje de Imin de la simulación (carro “2D”) coincidiese con los valores experimentalmente obtenidos (carro “real”). En este proceso iterativo, los valores de los parámetros se modificaron dentro de los rangos establecidos (Tabla 1 y 2) con el objeto de obtener el mínimo error posible. El criterio utilizado para determinar la bondad de cada una de las simulaciones fue el error relativo RRSE (Root Relative Squared Error). Tras el proceso de ajuste se consiguió reducir el error inicial de un 23.4% al 9.8% (ver Figura 4d), el cual es considerado como un error razonable.

▪ **Ciclo Simulado del carro “2D”**

En una simulación completa del modelo carro “2D” se obtienen 108 comprimidos, mientras que en una simulación completa del carro “real” se obtienen 336 comprimidos. Para poder comparar los valores del porcentaje de Imin de la simulación carro “2D” y de las pruebas “reales” se tomaron como referencia los 108 comprimidos de la simulación, mientras que de las pruebas experimentales se analizaron 1 de cada 3 comprimidos, es decir, 112

comprimidos. Desechando los 2 primeros y 2 últimos valores se pudieron comparar el mismo número de comprimidos en ambas pruebas.

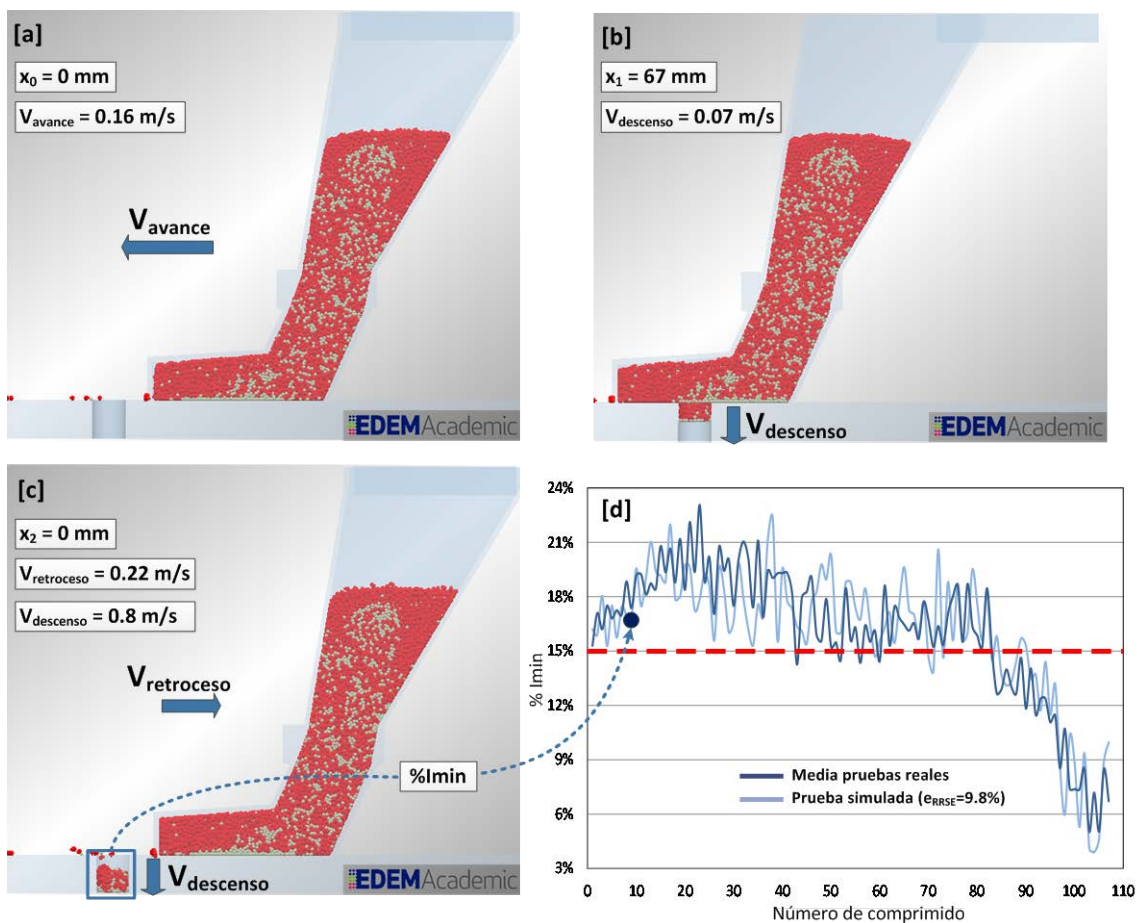
En la figura 4, se muestra la secuencia completa para la formación y análisis de un comprimido. El proceso de compresión de 1 comprimido consta de 3 pasos principales:

1. Avance del carro hasta posicionarse sobre la matriz con el punzón elevado (fig.4a).
 - Velocidad de avance: 0.16 m/s
2. Descenso del punzón la distancia establecida: 1.5mm (fig.4b)
 - Velocidad de descenso: 0.07 m/s
3. Retroceso del carro hasta la posición inicial y descenso del punzón para desalojar los ingredientes almacenados en la matriz (fig.4c)
 - Velocidad de retroceso: 0.22 m/s
 - Velocidad de descenso: 0.8 m/s

En la figura 4d, se muestra la representación gráfica de los valores del porcentaje de I_{min} correspondientes a los 108 comprimidos analizados relativos a la prueba simulada final "2D" ($e_{RRSE}=9.8\%$) y a la prueba "real". En la misma gráfica se aprecia la desviación de dichos valores del porcentaje teórico del ingrediente I_{min} , fijado en el 15%.

Los valores medios correspondientes a la gráfica "real" se obtuvieron después de 10 ensayos.

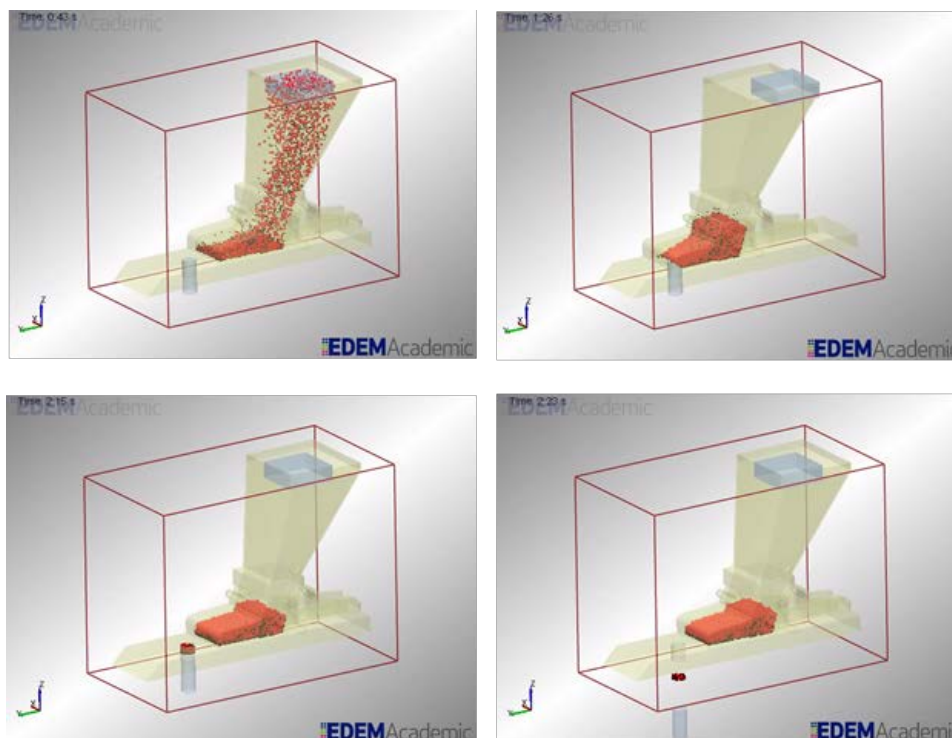
Figura 4. Ciclo Simulado de la formación de un comprimido y análisis del mismo



5.3 Validación del proceso de compresión: "Carro 3D"

Como resultado del proceso iterativo de la fase anterior se obtuvieron los valores de las variables que permiten simular satisfactoriamente el proceso de compresión "real". Sin embargo, no hay que perder de vista que estos valores se obtuvieron a partir de un modelo simplificado del carro (modelo "2D"), por lo tanto, se hace imprescindible confirmar la validez de dichos valores, a partir de la simulación del mismo proceso de compresión, pero en este caso con el modelo de carro "3D".

Figura 5. Ciclo de formación de un comprimido. Modelo carro "3D"



6. Resultados

6.1 Valores finales de los parámetros de la simulación

Tabla 3. Características de los diferentes materiales

	Coefficiente Poisson	Densidad (kg/m3)	Modulo de Corte (Pa)
IMay	0.4 (0-1)	1216 (750-1300)	1x105 (1x104-1x108)
Imin	0.4 (0-1)	1419 (750-1300)	1x105 (1x104-1x108)
Material de la máquina compresora (acero)	0.3 (0-1)	7850 (7850)	8.4x1010 (1x104-1x1013)

Tabla 4. Parámetros relativos a las interacciones

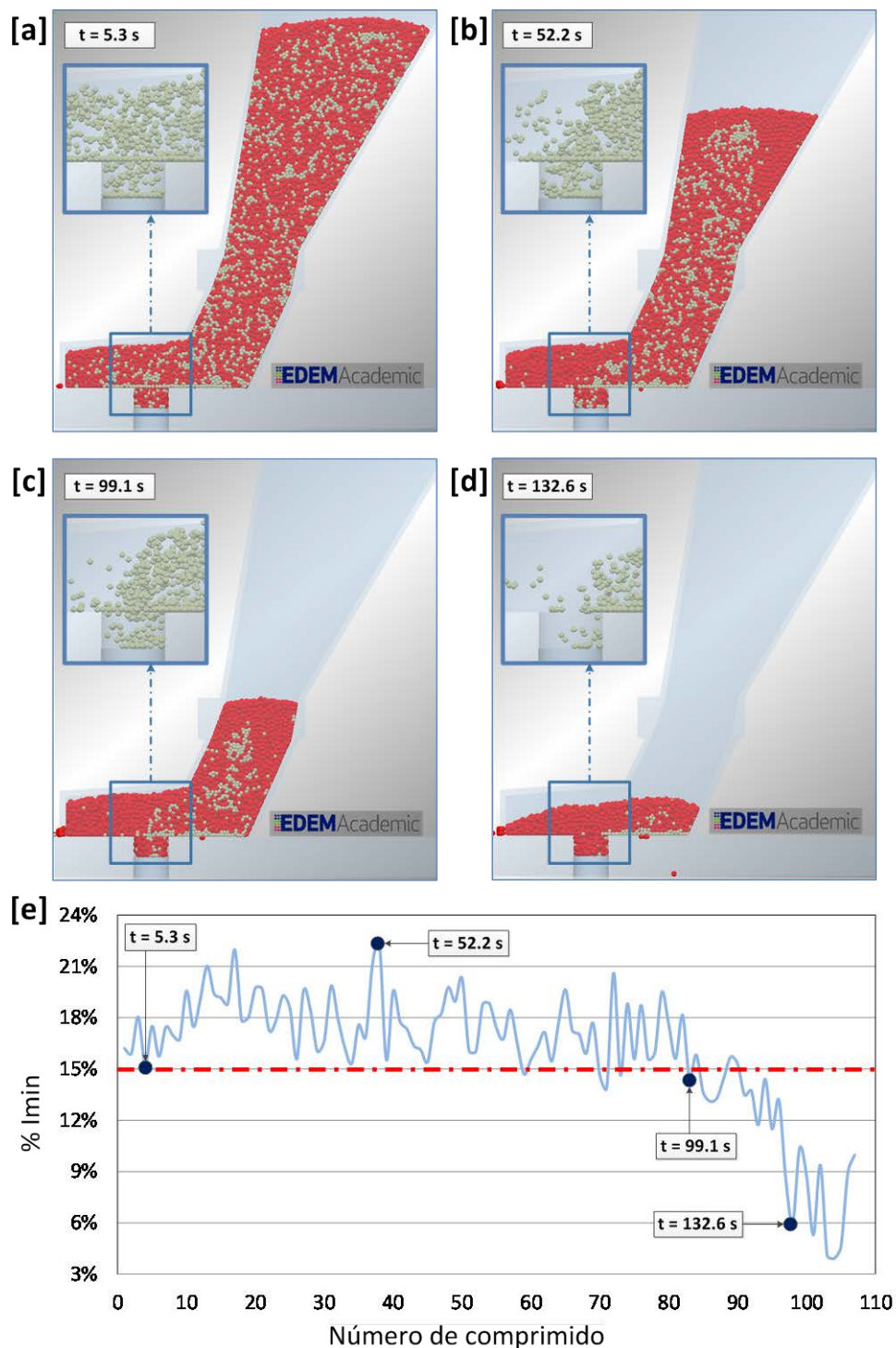
	Coefficiente Restitución	Coefficiente de fricción estática	Coefficiente de rodadura
IMay- IMay	0.8 (0-1)	0.5 (0-1)	0.01 (0-1)
IMay - Imin	0.8 (0-1)	0.5 (0-1)	0.01 (0-1)
IMay -Acero	0.8 (0-1)	0.7 (0-1)	0.01 (0-1)
Imin - Imin	0.8 (0-1)	0.5 (0-1)	0.01 (0-1)
Imin -Acero	0.8 (0-1)	0.7 (0-1)	0.01 (0-1)
Acero-Acero	0.8 (0-1)	0.15 (0-1)	0.01 (0-1)

6.2 Análisis de la segregación durante el proceso de vaciado del carro “2D”

En la figura 6, se muestran cuatro imágenes de una misma posición del carro en cuatro momentos representativos del proceso de simulación del vaciado del carro “2D”. Dicha posición corresponde al instante en el que el punzón se ha desplazado y permite la entrada de los ingredientes de la mezcla en la matriz.

Para facilitar la interpretación del fenómeno de segregación que se produce en la zona de la matriz, en cada una de ellas se ha añadido una imagen de detalle de dicha zona en la que únicamente se ha representado el ingrediente Imin. En el instante t=5.3 segundos (fig.6a), nada más comenzar el proceso de vaciado, se aprecia una distribución homogénea de Imin, que se confirma en el instante t=5.3s de la figura 6e (15.2%). En los sucesivos instantes, t=52.2s, 99.1s y 132.6s (figs. 6b, 6c y 6d), se observa la relación existente entre las imágenes y los valores del porcentaje de Imin de la figura 6e.

Figura 6. Proceso de análisis de las simulaciones.

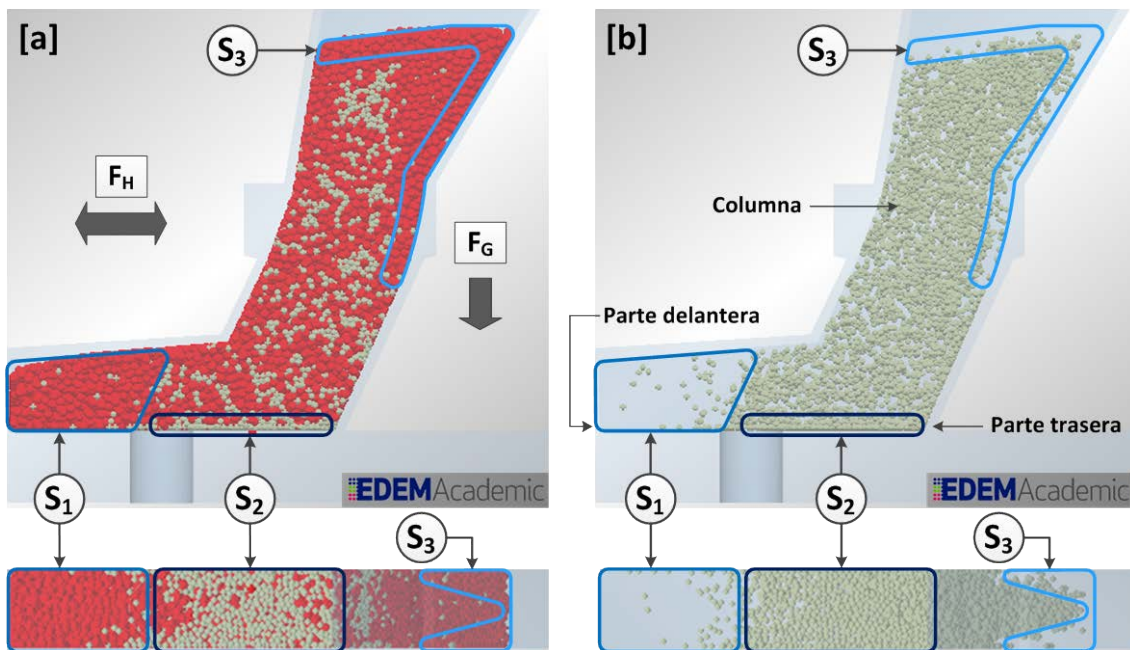


6.3 Zonas y mecanismos de segregación

En la figura 7, se muestran las tres principales zonas de segregación identificadas y que, de manera combinada, se producen durante las simulaciones realizadas en el instante $t=73.42\text{s}$. En la figura 7a, se muestra el alzado y planta del carro “2D” con ambos ingredientes (IMay e Imin), mientras que en la figura 7b, únicamente se representa el ingrediente Imin, para facilitar la identificación de las zonas y mecanismos de segregación.

En este caso parecen identificarse los cuatro mecanismos de segregación comentados en la sección 4.2. De hecho, las principales zonas de segregación podrían explicarse con una combinación de los mismos. Así, en primer lugar, los fenómenos de percolación (segregación por tamaño) y condensación (segregación por densidad) explicarían que las partículas I_{min} , que son más pequeñas y más densas, se concentren en la base del carro (zona S2) y, como consecuencia, las partículas I_{May} lo hagan en la zona superior del mismo (zona S3). Junto a estos fenómenos, parecen observarse también los efectos de los mecanismos de trayectoria de segregación (segregación por fricción) y convección (segregación por vibración), debidos a la vibración producida por el movimiento horizontal alternativo del carro (F_H). Esto es, las partículas I_{min} ven reducida su velocidad durante el avance y retroceso del carro (segregación por fricción), lo que conduce a una acumulación de las mismas en la zona central de la base. No obstante, las partículas I_{min} se extienden hasta la parte trasera del carro por el efecto de los mecanismos de percolación y condensación producidos en columna del mismo, lo que explicaría la acumulación de partículas I_{min} en la zona S2. En cuanto a la mayor concentración de partículas I_{May} en la zona S1, esta podría explicarse por el fenómeno de convección, junto a la eliminación de partículas en la formación de comprimidos, que se produce en una zona de descarga del carro, que impide que las partículas I_{min} avancen hasta la zona delantera del carro.

Figura 7. Zonas de segregación: [a] Mezcla Total; [b] I_{min}



7. Conclusiones

En la presente comunicación se muestra una aplicación del método de los elementos discretos (DEM) en la que se ha llevado a cabo la simulación del proceso de vaciado completo del carro alimentador de una máquina compresora directa.

Los valores óptimos de las variables del proceso han sido determinados a través de un proceso iterativo, con el que se han alcanzado errores relativos (RRSE) aceptables.

Con el modelo obtenido ha sido posible analizar con mayor grado de detalle el proceso de segregación que se produce en este tipo de máquinas. Este modelo constituye el punto de partida que permitirá, en futuras investigaciones, proponer mejoras tanto en el diseño de los

elementos del proceso de compresión (por ejemplo, geometría del carro, ubicación y geometría de la matriz, etc.), como en los parámetros de proceso que han demostrado ser relevantes en el proceso de segregación (por ejemplo, velocidad del carro, capacidad de llenado del carro, etc.).

Agradecimientos

Este trabajo ha sido posible gracias al apoyo DEM Solutions y al Plan Riojano de I+D de la Comunidad Autónoma de La Rioja, a través del proyecto FOMENTA 2010/02.

Referencias

- Database EDEM®*, [Edingurgo, Escocia]. Base de datos bibliográfica disponible en el distribuidor DEM Solutions [Consulta: 29 Agosto 2011].
- Guo, Y., Wu, C. Y., Kafui, K. D., & Thornton, C. (2009). Numerical analysis of density-induced segregation during die filling, *Powder Technology*, 197, 111-119.
- Guo, Y., Wu, C. Y., Kafui, K. D., & Thornton, C. (2011). 3D DEM/CFD analysis of size-induced segregation during die filling, *Powder Technology*, 206, 177-188.
- Hong, D.C., & Quinn, P. V. (2001). Reverse Brazil nut problem: competition between percolation and condensation. *Phys. Rev. Lett*, 86, 3423–3426.
- Ketterhagen, W. R., Curtis, J. S., Wassgren, C. R., & Hancock, B. C. (2008). Modeling granular segregation in flow quasi-three-dimensional, wedge-shaped hoppers. *Powder Technology*, 179, 126-143.
- Roskilly, S. J., Coulbourn, E. A., Alli, O., Williams D., Paul, K. A., Welfare, E. H., & Trusty, P.A. (2010). Investigating the effect of shape on particle segregation using a Monte Carlo simulation, *Powder Technology*, 203, 211-222.
- Schröter M., Ulrich S., Kreft J, Swift J, Swinney H.(2006) Mechanisms in the Size Segregation of a Binary Granular Mixture. Center for Nonlinear Dynamics and Department of Physics, University of Texas at Austin, Physical review E74, 011307.
- YU, Y., Saxén, H. (2010). Experimental and DEM study of Segregation of ternary size particles in a blast furnace top bunker model. *Chemical Engineering Science*, 65, 5237-5250.
- Zuriguel I. Movimiento de convección en un medio granular agitado verticalmente. España, Departamento de Física y Matemática Aplicada, Universidad de Navarra, 2003.

Correspondencia (Para más información contacte con):

Ana González Marcos.
Área de Proyectos de Ingeniería. Departamento de Ingeniería Mecánica.
Universidad de La Rioja
C/ Luis de Ulloa 20, 26004 Logroño, La Rioja (España).
Phone: +34 941 299 519
E-mail: ana.gonzalez@unirioja.es