

APLICACIONES EN EL ÁMBITO INDUSTRIAL DEL MÉTODO DE ELEMENTOS DISCRETOS. MODELADO DE PARTÍCULA SIMULANDO UN ADITIVO ALIMENTARIO COMPRIMIDO CON DEM

Jesús Las Heras-Casas

Álvaro Guerra-Sánchez de la Nieta

Andrés García-Pascual

Fernando Alba-Elías

Departamento de Ingeniería Mecánica. Universidad de La Rioja

Abstract

In this paper the technical principles of DEM (discrete element method) are shown. The discrete element method, which is based on numerical calculations, can simulate granular systems parameterized models of solids and discontinuous materials. Furthermore, it can be combined with other techniques such as CFD, which provides complete any type of study. In addition to this, it allows an approximate study of the particles dynamic, setting the characteristic parameters of constituent materials, such as density, shear modulus etc. A review of the most prominent applications of this method in industry is shown. As a fundamental part of the method is the modeling of particles by spheres. Depending on their position in space, their size and quantity, the model is very close to the real set, but considering that quantity in order to prevent an increase of simulation time. Thus, a model has been developed, which aims to emulate the reality of a food additive tablet. Specifically, EDEM software is used. Also, it is described the process of creating this model, from a simple to complex, maintaining the balance between the number of surfaces and the simulation time.

Keywords: *Dosage, additive food, tablet, DEM*

Resumen

En el presente artículo se muestran los principios de la técnica DEM (discrete element method). El método de elementos discretos, basado en cálculos numéricos, permite simular modelos parametrizados de sistemas granulares sólidos y materiales discontinuos. Además, se puede conjugar con otro tipo de técnicas, tales como CFD, que facilita completar cualquier tipo de estudio. Permite realizar un estudio aproximado de la dinámica de partículas, configurando los parámetros característicos de materiales constituyentes, tales como densidad, módulo de elasticidad etc. Se muestra una revisión de las aplicaciones más destacadas de este método en el ámbito industrial. Como parte fundamental del método se encuentra el modelado de partículas mediante esferas. Dependiendo de su posición en el espacio, de su tamaño y cantidad, se aproxima el modelo creado al real, pero teniendo en cuenta dicha cantidad, para no incurrir en un elevado tiempo de simulación. Así, se ha desarrollado un modelo, con el que se pretende emular la realidad de un comprimido de aditivo alimentario. Concretamente, el software empleado es EDEM. Se describe el proceso de creación de dicho modelo, desde uno sencillo hasta otros más complejos, manteniendo el compromiso entre el número de superficies y el tiempo de simulación.

Palabras clave: *Dosificación, aditivo alimentario, comprimido, 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, mostrándose alguno de los más destacados en el presente artículo.

Además, como paso fundamental a la hora de aplicar el método de elementos discretos para la simulación de diferentes procesos, se encuentra el modelado del tipo de partícula, conformada por un número óptimo de superficies esféricas, a determinar, y sus características. El número óptimo de esferas, es aquél que no incurre en un elevado tiempo de simulación y no perjudica los resultados de la simulación en comparación con el comportamiento real.

Así, se muestra el modelado de partícula para la simulación de un aditivo alimentario comprimido especial (modelo de utilidad), con DEM. Dicho modelo será utilizado para simular su comportamiento en los procesos en que son utilizados dentro de la industria agroalimentaria. En la aplicación del método de elementos discretos se ha utilizado la plataforma EDEM® en sus versiones 2.2 y 2.3, herramienta de ingeniería asistida por ordenador (CAE) del fabricante *DEM Solutions* (DEM Solutions, Ltd., 2010). Es un software potente, dentro del estado del arte de la tecnología DEM, capaz de generar simulaciones de gran alcance y los análisis necesarios para resolver problemas en el diseño, prototipado, y en la optimización de productos a granel y equipos de proceso.

Estas investigaciones, de modelado de partículas mediante DEM, están enmarcadas en las actividades del Grupo de Investigación EDMANS, en el seno del Área de Proyectos de Ingeniería de la Universidad de La Rioja, cuyo propósito hoy día, es la simulación y optimización de sus invenciones protegidas con patentes y modelos de utilidad (Alba et al., 2005, Alba et al., 2005, y Alba et al., 2007).

2. Objetivos

Los objetivos del presente artículo, son mostrar, por un lado, diferentes aplicaciones industriales del método de elementos discretos, y por otro, el modelado realizado de un aditivo alimentario comprimido específico (Alba et al., 2005) para su posterior utilización en la simulación del funcionamiento del dispositivo de dosificación de dichos aditivos (Alba et al., 2005 y Alba et al., 2007).

3. El Método de Elementos Discretos (DEM)

3.1 Orígenes del método 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.

3.2 Herramienta software EDEM

EDEM es una herramienta de software de ingeniería asistida por ordenador (CAE), basada en el método de elementos discretos, capaz de generar las simulaciones y análisis necesarios para resolver problemas complejos en el diseño y en la optimización del manejo de materiales a granel y sus equipos de proceso. EDEM maneja la información sobre cada partícula individual (masa, temperatura, velocidad, etc.) y las fuerzas que actúan sobre ella.

Para el post-procesamiento, EDEM proporciona herramientas de análisis de datos y visualizaciones 3D del flujo de partículas. La tecnología de EDEM de generación de partículas ofrece un método único para la generación eficiente de conjuntos de partículas en asociación con la geometría de la máquina importada de su sistema de CAD o CAE como un modelo sólido o malla.

Los componentes de la máquina se pueden agrupar y se puede especificar la cinemática de cada grupo por separado o de manera conjunta. EDEM da la posibilidad de acoplarse directamente con el software de dinámica de fluidos computacional (CFD) para modelar sistemas de fase sólido-líquido. Esto permite el modelado de sistemas en los que la interacción partícula-partícula y partículas-entorno es fundamental para el comportamiento del sistema.

3.3 Aplicaciones DEM en el ámbito industrial

El empleo del método de elementos discretos en la simulación del flujo de partículas en procesos industriales, se remonta a finales de la década de los setenta cuando Cundall y Strack (1979) comenzaron a modelar sistemas muy pequeños. Durante los años posteriores, hubo una serie de limitaciones en cuanto a la geometría, eran diseños bidimensionales simples como tolvas pequeñas, fluidos a través de un canal, cuyo fin era entender el fundamento de la dinámica de flujos laminares y materiales granulares o particulados (Campbell, 1990; Haff & Werner, 1986; Walton, 1992, cap. 25). Estos modelos de pequeña escala eran del orden de 100 a 1000 partículas. Algunos ejemplos incluyen tolvas (Langston, Tuzun & Heyes, 1995; Potapov & Campbell, 1996), o modelos geofísicos y movimiento de tierras (Cleary & Campbell, 1993).

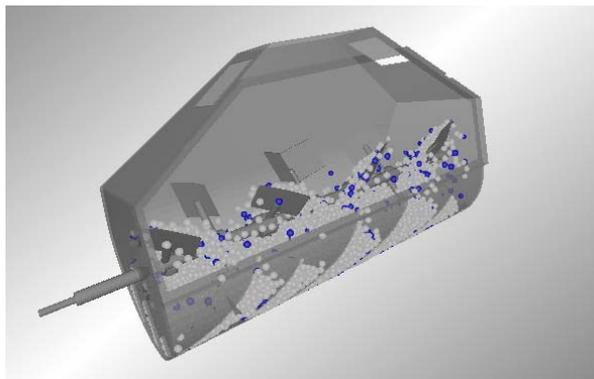
Con la sustancial evolución y mejora que se produjo durante los años 90 en la industria de semiconductores y su consiguiente aplicación en el hardware y en las arquitecturas de los ordenadores hizo que, la escala de los modelos utilizados en el método de elementos discretos se incrementase su potencial del orden de 100 veces hasta el momento (10.000-100.000 partículas). Estos modelos seguían siendo bidimensionales (Cleary, 1998 y 2000).

Posteriormente, los software de aplicación del método de elementos discretos han permitido la simulación de geometrías tridimensionales (Cleary y Sawley 2002; Cleary y Prakash 2004). Hoy día, se sigue progresando en la escala de los modelos así como en el aumento de la fidelidad y exactitud de los resultados de acuerdo a los sistemas reales.

Algunas aplicaciones actuales del método de elementos discretos, mostradas por Cleary (2010), son: separación por una pantalla de doble cubierta, mezcla de granos en un mezclador, excavadora de cuchara de arrastre, cinta transportadora de tobogán (a diferentes alturas) o la segunda cámara de una hormigonera de doble cámara.

A pesar del aumento de la escala, en muchos sistemas en los que el número de partículas verdadero es muy superior a dicha escala, como pueden ser mezcladoras, tolvas o silos, que puedan contener partículas pulverulentas, se puede asumir una densidad equivalente de un compendio de partículas en una de mayor tamaño (Hassanpour et al., 2011). Esto facilita la simulación de estos modelos de gran escala, en consonancia a las limitaciones de escala actuales, anteriormente descritas, obteniendo resultados válidos. Bajo esta asunción de densidad equivalente, se ha desarrollado un modelo DEM en torno a un prototipo para mezclas especiales de aditivo alimentario (Guerra et al., 2011) (Figura 1).

Figura 1: Mezcladora modelada mediante DEM



4. Modelado del aditivo alimentario comprimido

En el sector agroalimentario, se pueden formular aditivos alimentarios con prácticamente el 100% de aditivos y/o ingredientes. Por este motivo, la operación de compresión supone una tarea muy delicada y difícil (en algunos casos, imposible) debido a las características particulares de los componentes, y sus ingredientes. Éstos son extremadamente abrasivos con los elementos de la compresión, como matriz y punzones; en otras ocasiones, caso de mezclas que contienen especias, la compactación de los comprimidos obtenidos es baja para permitir su manipulación, independientemente de la presión empleada. A esto hay que unir las propiedades especiales del comprimido: formulación compleja por la granulometría, elevada higroscopicidad de los componentes, compactación de la pastilla limitada por la necesidad posterior de disolución, componentes muy pulverulentos, cristalizados, deshidratados, especias, etc. (Las Heras et al., 2010).

Teniendo en cuenta todo lo expuesto, se pensaron diferentes modelos de comprimido, llegando a uno que minimizase la abrasión de los elementos de compresión y facilitase su posterior dosificación (Alba et al., 2005). Se realizaron unas experiencias preliminares que indicaron que una modificación de las propiedades físico-químicas de los ingredientes de la mezcla (humedad, temperatura, estado de agregación, etc.) permitiría la compresión de todo el conjunto (mezcla de aditivos). Aún así, debido a las peculiaridades de los ingredientes del comprimido, se pensó en un modelo que fuera realizable, dado que una esfera, en este caso, era imposible de producir, y que, además, permitiera una manipulación óptima y evitara un desgaste en sus movimientos relativos. Por eso, el primer modelo desarrollado fue un cilindro, pero viendo una serie de atascos en el dispositivo dosificador, se decidió ampliar su geometría con unos casquetes esféricos en las bases del cilindro, para emular una esfera y permitir mejor la rodadura (Alba et al., 2005).

4.1 Modelo de aproximación

Como primera alternativa al modelado del aditivo alimentario comprimido, y como prueba inicial del método de elementos discretos, se optó por adecuar el tamaño y forma del

comprimido real a una superficie esférica de radio la mitad de la altura de dicho comprimido. Con esto se comprobó un funcionamiento ideal del comprimido, obteniendo resultados, evidentemente, no muy satisfactorios, ya que al ser esferas perfectas rodaban en exceso entre sí y con el depósito. Sin embargo, estos resultados, sirvieron como punto de partida para el diseño de diferentes modelos, conformados por varias superficies esféricas, hasta llegar al diseño del modelo de partícula definitivo, sin perder de vista el coste computacional a medida que se aumentaba el número de esferas (Tabla 1).

Tabla 1. Resumen de configuraciones para el modelo de aditivo alimentario comprimido

Modelo	Superficies	Hileras	Superficies por casquete semiesférico	Radio de partícula (mm)
conf.0	8	1	1 en polo	4.5
conf.1	14	2	1 en polo	4,5
conf.2	24	2	1 en polo	4,5
conf.3	65	3	1 en polo	3
conf.4	79	3	7 + 1 en polo	3
conf.5	85	3	10 + 1 en polo	3

El siguiente paso consistió en importar, desde el módulo de creación del software EDEM, el diseño del modelo de comprimido real realizado en CATIA (Figura 2, Superior izquierda). Este diseño sirve de apoyo, a modo de plantilla, para comprobar visualmente el proceso de "rellenado" de la partícula mediante superficies esféricas de manera óptima.

Con el objetivo de, por un lado, conformar la partícula de forma rápida, coherente y de un modo distribuido, y por otro, obtener la distribución espacial de los centros de las superficies esféricas con respecto al centro de masa de la plantilla, se diseñó una hoja de cálculo. De este modo en función del radio de la partícula, de la altura del comprimido, el número de filas de esferas que integren el modelo, se halla la distribución mencionada. Se calcularon las coordenadas cartesianas de las siguientes configuraciones de partículas (Tabla 2).

Una de las primeras aproximaciones que se probó del modelo de comprimido, fue la configuración 1. Consta de dos hileras, de seis esferas cada una, conformando el cilindro central del comprimido, y dos esferas a modo de casquete semiesférico (Tabla 2). Este modelo no resultó útil, puesto que las partículas se quedaban enganchadas entre si y clavadas en el depósito, ya que existe espacio sin rellenar entre el casquete y el extremo del cilindro, quedando el comprimido de pie o apoyado. En la Figura 2 (Superior derecha y centro izquierda) se muestra la causa de dicha situación, así se ve como el modelo se adapta bien a la plantilla en su parte cilíndrica, mientras en los casquetes semiesféricos se observa un vacío significativo que provoca el cabeceo del comprimido.

Las siguientes configuraciones generadas, se produjeron con un aumento progresivo del número de superficies y reduciendo paulatinamente el radio de las mismas, con el fin de minimizar intersticios. A medida que el número de superficies crecía, y se iba mejorando el modelo, iba aumentando el coste computacional. Por ello, un buen modelo se encontró con la partícula diseñada en la Figura 2 (Centro derecha). Consiste en una hilera central, con otras dos, encima y debajo, menos superpuestas entre sí, las cuales aumentan el "relleno" de los casquetes, que igualmente están coronados por una esfera del mismo radio, quedando así menor hueco entre la cúspide del polo y el lado del cilindro, aumentando la rodadura.

Tabla 2. Cálculos realizados para la obtención de los centros de las esferas que constituyen el modelo de comprimido.

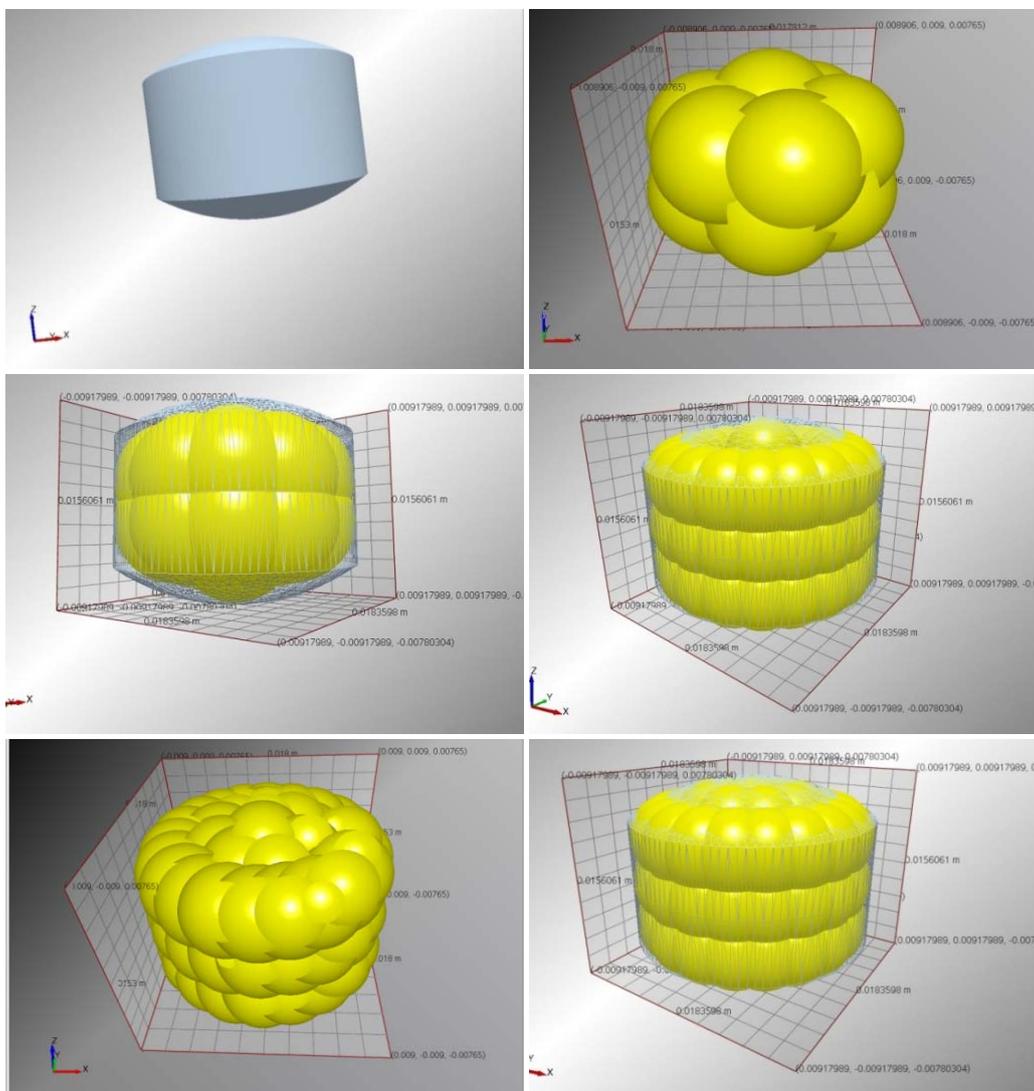
Modelo de 10 superficies en 1 hilera para el cilindro del comprimido					
Altura Comprimido (mm)	Radio Cilindro (mm)	Radio Partícula (mm)	Radio Centros (mm)	Número de Partículas	Ángulo (°)
15,3	9	4,5	4,5	10	36
N arco	Arcos (°)	Arcos (rad)	X (m)	Y (m)	Z (m)
0	0	0,000	0,000000	0,004500	0
1	36	0,628	0,002645	0,003641	0
2	72	1,257	0,004280	0,001391	0
3	108	1,885	0,004280	-0,001391	0
4	144	2,513	0,002645	-0,003641	0
5	180	3,142	0,000000	-0,004500	0
6	216	3,770	-0,002645	-0,003641	0
7	252	4,398	-0,004280	-0,001391	0
8	288	5,027	-0,004280	0,001391	0
9	324	5,655	-0,002645	0,003641	0
Modelo de 6 superficies en hilera más 1 superficie en el polo para cada casquete semiesférico					
Altura Comprimido (mm)	Radio Cilindro (mm)	Radio Partícula (mm)	Radio Centros (mm)	Número de Partículas	Ángulo (°)
15,3	9	4,5	4,5	6	60
N arco	Arcos (°)	Arcos (rad)	X (m)	Y (m)	Z (m)
0	0	0,000	0,000000	0,004500	0,002473
1	60	1,047	0,003897	0,002250	0,002473
2	120	2,094	0,003897	-0,002250	0,002473
3	180	3,142	0,000000	-0,004500	0,002473
4	240	4,189	-0,003897	-0,002250	0,002473
5	300	5,236	-0,003897	0,002250	0,002473
Z_{sup}		Z_{inf}		$Z_{hilera casquete}$	
0,00315		-0,00315		0,002473	
				-0,002473	

CILINDRO

CASQUETES SEMIESFÉRICOS

Nota: Donde: *Radio Cilindro* es el radio del cilindro imaginario que envolvería las esferas que lo componen; *Radio Centros* es el módulo del vector que indica la posición del centro de las esferas (*Radio Cilindro - Radio Partícula*); *Arcos* el argumento de dicho vector; Z_{inf} y Z_{sup} son las alturas de los centros de las esfera situadas en la parte inferior y superior, respectivamente, que conforman parte de los casquetes semiesféricos del comprimido (Altura del comprimido entre dos menos *Radio Partícula*); y $Z_{hilera casquete}$ altura de las hileras que conforman los casquetes semiesféricos.

Figura 2: (Superior izq.) Plantilla importada en EDEM; (Superior dcha.) Modelo de 14 superficies; (Centro izq.) Plantilla y modelo de 24 superficies; (Centro dcha.) Plantilla y modelo de 65 superficies; (Inferior izq.) Modelo de 79 superficies; (Inferior dcha.) Plantilla y modelo de 79 superficies



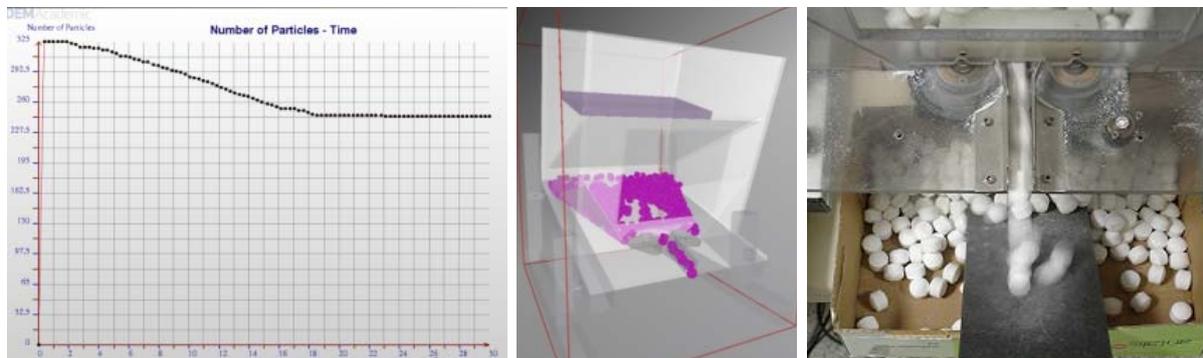
4.2 Modelo final de partícula. Eficiencia del modelo

Finalmente, se ha llegado a un modelo válido, aunque se pretenden conjugar partículas de diferentes tamaños, consistente en 79 superficies que, esta vez, cubren mejor los intersticios entre esferas (Figura 2, inferiores). Estas superficies están distribuidas en 3 hileras conformando la parte cilíndrica del comprimido y parte del comienzo de ambos casquetes semiesféricos del comprimido con 21 superficies por hilera y otras 2 hileras, superior e inferior, de 7 superficies más 1 superficie en el polo rellenando las cúspides de los casquetes semiesféricos. Señalar que con la configuración 5 (Tabla 1) se obtenían resultados similares a los del modelo de 79 superficies, por lo que se optó por este último provocando así una reducción en el tiempo de simulación.

Con el modelo descrito, se pudo realizar la simulación de un dispositivo dosificador de este tipo de partículas (aditivo comprimido), mediante DEM, con el que se obtuvo una buena aproximación al comportamiento real del dispositivo mencionado, alcanzando unas

velocidades de dosificación, en la simulación, idénticas a las testeadas con el prototipo de laboratorio (Guerra, et al., 2011) (Figura 3).

Figura 3: Velocidad de dosificación de 300 comprimidos por minuto



5. Conclusiones

El método de elementos discretos tiene aplicación en gran variedad de aplicaciones de ingeniería, muestra de ello son las descritas en diferentes campos de mecánica de rocas, mezclado de materiales y dinámica de partículas.

Se ha diseñado una partícula que permitirá la aplicación del método de elementos discretos en la simulación y en el estudio de diferentes configuraciones del sistema de dosificación, con el objetivo de optimizar así el proceso y el propio diseño de la partícula (Guerra et al., 2011).

Referencias

- Alba, F., Ordieres, J., Vergara, E., Martínez de Pisón, F. J., & Castejón, M. (2005), *Patente europea, EP 1 595795 A1, Device for supplying/dosing packaged tablets for the food industry*.
- Alba, F., Ordieres, J., Vergara, E., Martínez de Pisón, F. J., Pernía, A. V., Castejón, M., & González, A. (2005), *Modelo de utilidad, ES 1 059 831, Comprimido de producto aditivo para su dosificación automática a envases en la industria alimentaria*.
- Alba, F., Ordieres, J., Vergara, E., Martínez de Pisón, F. J., & Castejón, M. (2007), *Patente con examen previo, ES 2 277 503, Mejoras introducidas en la patente de invención nº P200202907 por: Suministrador-dosificador de comprimidos a envases para la industria alimentaria*.
- Campbell, C. S. (1990). Rapid granular flows. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 22, 57–90.
- Cleary, P. W., & Campbell, C. S. (1993). Self-lubrication for long run-out landslides: Examination by computer simulation. *Journal of Geophysical Research*, 98, 21911–21924.
- Cleary, P. W. (1998). Discrete element modelling of industrial granular flow applications. *TASK Quarterly: Scientific Bulletin*, 2, 385–416.
- Cleary, P. W. (2000). DEM simulation of industrial particle flows: Case studies of dragline excavators, mixing in tumblers and centrifugal mills. *Powder Technology*, 109, 83–104.

- Cleary, P. W., & Sawley, M. L. (2002). DEM modelling of industrial granular flows: 3D case studies and the effect of particle shape on hopper discharge. *Applied Mathematical Modeling*, 26, 89–111.
- Cleary, P. W., & Prakash, M. (2004). Discrete-element modelling and smooth particle hydrodynamics and discrete element modelling: Potential in the environmental sciences. *Philosophical Transactions A*, 362, 2003–2030.
- Cleary, P. W. (2010). DEM prediction of industrial and geophysical particle flows. *Particuology*, 8, 106–118
- Cundall, P. A., & Strack, O. D. L. (1979). A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique*, 29, 47–65.
- DEM Solutions, Ltd. (2010), *EDEM 2.2 User Guide* Copyright © 2009, Edinburgh, Scotland, UK.
- Guerra, Á., Las-Heras, J., García, A., & Alba, F. (2011), 3rd EDEM Conference, Determination of optimal process parameters and materials using DEM.
- Guerra, Á., García, A., Las-Heras, J., & Alba, F. (2011), 3rd EDEM Conference, A DEM application to improve the design of an industrial prototype.
- Guerra, Á., Las-Heras, J., García, A. y Alba, F. (2011), XV International congress on project engineering, Determinación de los parámetros de proceso y materiales óptimos usando DEM.
- Haff, P. K., & Werner, B. T. (1986). Computer simulation of the mechanical sorting of grains. *Powder Technology*, 48, 239–245.
- Hassanpour, A., Tan, H., Bayly, A., Gopalkrishnan, P., Ng, B. & Ghadiri, M. (2011). Analysis of particle motion in a paddle mixer using Discrete Element Method (DEM). *Powder Technology*, 206, 189–194.
- Langston, P. A., Tuzun, U., & Heyes, D. M. (1995). Discrete element simulation of granular flow in 2D and 3D hoppers: Dependence of discharge rate and wall stress on particle interactions. *Chemical Engineering Science*, 50, 967–987.
- Las Heras, J., Guerra, Á., Alba, F., Bao, C., & Martínez-de-Pisón, E. (2010), XIV International congress on project engineering, Product design applied to improved a device for dosing additive tablets in the food industry.
- Potapov, A. V., & Campbell, C. S. (1996a). Computer simulation of hopper flows. *Physics of Fluids*, 8, 2884–2894.
- Walton, O. R. (1992). Numerical simulation of inelastic frictional particle–particle interaction. In M. C. Roco (Ed.), *Particulate two-phase flow* (pp. 884–911). Boston: Butterworth-Heinemann.

Correspondencia (Para más información contacte con):

Fernando Alba Elías.
Área de Proyectos de Ingeniería. Departamento de Ingeniería Mecánica.
Universidad de La Rioja.
C/ Luis de Ulloa 20, 26004 Logroño, La Rioja (España).
Phone: +34 941 299 276
E-mail: fernando.alba@unirioja.es