



UNIVERSIDAD DE LA RIOJA

TESIS DOCTORAL

Título
Optimización de sistema dosificador automático de aditivo alimentario comprimido empleando el método de elementos discretos (DEM)
Autor/es
Álvaro Guerra Sánchez de la Nieta
Director/es
Ana González Marcos y Fernando Alba Elías
Facultad
Escuela Técnica Superior de Ingeniería Industrial
Titulación
Departamento
Ingeniería Mecánica
Curso Académico



Optimización de sistema dosificador automático de aditivo alimentario comprimido empleando el método de elementos discretos (DEM), tesis doctoral de Álvaro Guerra Sánchez de la Nieta, dirigida por Ana González Marcos y Fernando Alba Elías (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, 2017
publicaciones.unirioja.es
E-mail: publicaciones@unirioja.es



2017

Optimización de sistema dosificador automático de aditivo alimentario comprimido empleando el método de elementos discretos (DEM)

Tesis Doctoral

DOCTORADO EN INNOVACIÓN EN INGENIERÍA DE PRODUCTO Y PROCESOS INDUSTRIALES



ÁLVARO GUERRA SÁNCHEZ DE LA NIETA
UNIVERSIDAD DE LA RIOJA

Directores de tesis

Dra. Ana González Marcos
Dr. Fernando Alba Elías



**UNIVERSIDAD
DE LA RIOJA**

Departamento de Ingeniería Mecánica

Doctorado en Innovación en Ingeniería de producto y procesos
industriales

Tesis doctoral

Optimización de sistema
dosificador automático de aditivo
alimentario comprimido
empleando el método de
elementos discretos (DEM)

Autor Álvaro Guerra Sánchez de la Nieta

Directores de tesis Ana González Marcos

Fernando Alba Elías

A Virginia, mi esposa, por ser todo para mí

A mis padres, por su ejemplo, esfuerzo y sacrificio

Agradecimientos

Son muchas las personas que aquí deberían quedar reflejadas, aunque, por orden de cercanía al documento, habría de empezar agradeciendo a mis directores de tesis, Ana y Fernando, por haberme alentado y ayudado en todo momento y haber hecho este documento realidad, tras tantas dudas que me asaltaron. Los comienzos fueron difíciles.

El hombre y sus circunstancias no se entienden sin sus relaciones de apego, por ello, un infinito gracias a toda mi familia y amigos, por todo su cariño, su apoyo incondicional, y perdón, claro, por mis ausencias

¡Gracias a todos!

Resumen

En la industria conservera existen diferentes métodos de dosificación de aditivo alimentario, siendo el más extendido el basado en líquido de gobierno, que consiste en verter una cascada de agua que aporta disuelto el aditivo. Este método es una técnica imprecisa en lo que a exactitud de la dosis se refiere, suele aportar impurezas dada la recirculación del líquido de gobierno y es agresiva con la maquinaria al mismo que tiempo que no es respetuosa con el medio ambiente.

De este modo, surge como alternativa la dosificación automática de aditivo alimentario comprimido. Es un método de dosificación en seco preciso, limpio y eficaz, ya que los comprimidos siempre poseen la misma concentración de aditivo y no genera residuo. La complejidad del método reside, por un lado, en la compactación de las mezclas de aditivo y, por otro, en la propia dosificación ya que hay que conseguir una dosificación

continuada y que respete la integridad de los comprimidos. Es por ello que surge esta tesis doctoral, para optimizar los requisitos de diseño del sistema dosificador, alcanzando un valor umbral de velocidad de serialización en comprimidos por minuto minimizando el grado de desgaste de los comprimidos. Para ello, se estudian diferentes configuraciones de funcionamiento del dispositivo, como son la variación de la inclinación del ángulo del depósito almacén, el cual alberga los comprimidos, y la velocidad de rotación de los álabes del sistema serializador de salida, que genera una hilera de comprimidos para su posterior deposición en una línea de envasado de botes de conserva.

En el desarrollo de la presente tesis y para la consecución de los objetivos planteados en la misma, se emplea el método de los elementos discretos (**DISCRETE ELEMENT METHOD, DEM**) en la representación y simulación de los sistemas que componen la dosificación, ya que es una herramienta que reduce a nivel de partículas los sólidos granulares o particulados para estudiar su dinámica y permite entender como un conjunto el sistema complejo que forman las partículas como elementos distintos a la par que conocer el movimiento e interacciones de las partículas.

Como punto de partida de las investigaciones llevadas a cabo, se obtienen diferentes modelos de comprimido de aditivo alimentario, compuesto por sal, en estado granular mediante compresión confinada, y se realizan diferentes baterías de simulaciones con diferentes tamaños de partícula con el objeto de estudiar los diferentes parámetros y variables físicas que interactúan en el proceso. Este proceso requiere definir las condiciones de simulación, así como interacciones entre partículas y modelos de contacto, con el fin de generar los enlaces entre partículas necesarios para que haya una cohesión de las mismas y conformen un comprimido homogéneo. Además, se estudian las fuerzas que intervienen en el proceso para determinar la bondad de los modelos junto con el número de enlaces que se generan en función del número de partículas y el radio de las mismas. Posteriormente, estos modelos de comprimido se incluyen en el sistema dosificador mencionado para su posterior análisis y validación.

El efecto de la velocidad de serialización y el desgaste de los comprimidos se estudia en armonía con los diferentes modelos de comprimido generados, con el objetivo de ver su comportamiento, estudiar las fuerzas que sufren las partículas y la velocidad de serialización que se alcanza, para determinar cuál es la mejor combinación de variables y modelos de comprimido elegidos.

Asimismo, se realiza la modificación de la geometría de los álabes serializadores testeando varias formas para tratar de identificar cual es la más respetuosa con la integridad de los comprimidos manteniendo los mismos criterios de dosificación.

Abstract

There are different methods of food additive dosage in the food industry, being the most widespread the one based on liquid form, which consisting in the spill of a water cascade bringing the additive dissolved. This method is an imprecise technique as far as dose accuracy is concerned, it usually provides spots due to the recirculation of the fluid and it is aggressive with the device mechanical parts while is not respectful with the environment.

In this way, the automatic dosage of compressed additive arises as an alternative in tablet form. It is a precise, clean and effective dry-dossing method, since the tablets always have the same concentration of additive and does not generate any wasted part. This method complexity is found, on one hand, in the food additive mixtures compaction and in the

own dosing due to achieve a continuously dosage respecting the tablets in its totality. For this reason, rises this PHD thesis, to optimize the design requirements of this device mainly are the achieving of a dosage rate threshold value in tablets per minute, and minimize the impact of tablet wear away. To do this, different configurations of operation of the device are studied, such as the variation of the inclination angle of the storage tank, which houses the tablets, and the rotation speed of the blades of the serialized output system, which generates a row of tablets for later place them in a packaging line of canned cans.

In the development of this document and for the attainment of the targets lay out, **DISCRETE ELEMENT METHOD** (DEM) is used for the representation and simulation of the systems which form the dosing, considering it as a tool that reduces to particle level the solids to study its dynamics and it allows to understand like an ensembled complex system formed by the particles as distinct elements at the same time to know the movement and particle interaction.

As the start point of the accomplished research, different models of food additive tablet, composed of salt, are obtained in the granular state by means of confined compression and different simulation batteries are made with various particle sizes to study the different parameters and physical variables that interact in the process. This process needs the simulation conditions are defined, as well as interactions between particles and contact models, to generate the necessary inter-particle bonds for its cohesion and develop a homogenous tablet. Furthermore, the forces involved in the process are analysed to determine the goodness of the models including the number of bonds that are generated as a function of the number of particles and its radius. Subsequently, these tablet models are included in the dosing device system mentioned for further analysis and validation.

The effect of dosing velocity and tablet wearing is studied in harmony with the different models of generated tablet, being the target to see their behaviour, study the forces that suffer the particles and the speed of dosage that is reached, for determining which is the best one variables combination and tablet model chosen.

Also, the geometry of the output blades is modified by testing several ways to try to identify which is the most respectful with the integrity of the tablets, maintaining the same criteria of dosage.

Índice

Índice de figuras	xi
Índice de tablas	xv
Abreviaturas	xvii
Resumen	i
Abstract	iii
Capítulo 1	1
1 Introducción	3

1.1 Antecedentes.....	3
1.1.1 Dosificación de aditivo alimentario.....	3
1.1.2 Método de Elementos Discretos.....	4
1.2 Motivación y objetivos.....	5
1.3 Estructura del documento	7
Capítulo 2	11
2 Estado del arte.....	13
2.1 Sistemas de dosificación	13
2.1.1 Dosificación de aditivos alimentarios en seco.....	13
2.1.2 Dosificación automática por líquido de gobierno	14
2.1.3 Dosificación automática por encapsulación de los ingredientes	15
2.1.4 Dosificación en polvo.....	15
2.1.4.1 Dosificadores volumétricos.....	15
2.1.4.2 Dosificadores sin-fin	16
2.1.5 Resumen comparativo de los métodos de dosificación	16
2.2 Aditivos alimentarios	17
2.2.1 Definición	17
2.2.2 Buenas prácticas de fabricación.....	18
2.3 Fabricación de comprimidos.....	18
2.3.1 Proceso de compresión	18
2.3.2 Problemática de la compresión	21
2.3.3 Propiedades críticas.....	21
2.4 Método de Elementos Discretos (Discrete Element Method: DEM)	23
2.4.1 Introducción	23
2.4.2 Particularidades del método	23
2.4.3 Importancia de los parámetros de simulación	25

2.4.4 Empleo de DEM en la industria e investigaciones recientes	26
2.4.4.1 Minería y proceso de minerales	26
2.4.4.2 Industria farmacéutica	26
2.4.4.3 Relevancia y evolución del método de elementos discretos	27
2.4.4.4 DEM en el marco específico de la presente investigación	29
Capítulo 3	33
3 Metodología	35
3.1 Materiales empleados	35
3.1.1 Sistema dosificador	35
3.1.1.1 Policarbonato	36
3.1.1.2 Aluminio	37
3.1.2 Comprimidos alimentarios	38
3.1.2.1 Sal	38
3.1.2.2 Materiales empleados en la fabricación del comprimido	40
3.1.2.3 Acero	43
3.1.3 Software DEM utilizado	44
3.2 Metodología aplicada en las simulaciones DEM.....	45
3.2.1 Generalidades	45
3.2.2 Fases de las simulaciones del estudio.....	45
3.2.3 Pruebas preliminares	46
3.2.3.1 Acotación de parámetros en la aproximación al modelo de comprimido	46
3.2.3.2 Valor de los parámetros fundamentales.....	48
3.2.3.3 Métodos de aplicación de las interacciones físicas. Modelos de contacto	49
3.2.4 Obtención del nuevo modelo de comprimido	51
3.2.4.1 Repetibilidad de las simulaciones.....	51

3.2.4.2	Fundamentos.....	52
3.2.5	Inclusión del nuevo modelo de comprimido en el sistema dosificador automático.....	54
3.2.5.1	Estudio del método de reemplazo de partículas	54
3.2.5.2	Parámetros de definición de la morfología del modelo del sistema	56
3.2.5.2.1	Fricciones entre partículas.....	56
3.2.5.2.2	Módulo de corte	57
3.2.5.2.3	Coeficiente de Poisson.....	58
3.2.5.2.4	Coeficiente de Restitución.....	58
3.2.5.2.5	Densidad.....	59
3.2.5.2.6	Otros parámetros.....	60
3.2.5.3	Generación de comprimidos.....	60
3.2.5.4	Geometrías del dispositivo dosificador	61
3.2.5.5	Variables de proceso. Búsqueda del modelo óptimo del dosificador ...	63
3.2.5.6	Modificación del sistema de salida. Discos serializadores	63
3.2.5.7	Configuración de la simulación.....	65
3.2.5.7.1	Intervalo de cálculo	65
3.2.5.7.2	Rejilla de simulación	66
3.2.5.7.3	Tiempo de simulación.....	66
3.2.5.7.4	Intervalo de salvaguarda de datos.....	67
Capítulo 4	69
4	Resultados obtenidos.....	71
4.1	Modelo del comprimido de aditivo alimentario.....	71
4.1.1	Introducción	71
4.1.2	Pruebas preliminares	73
4.1.2.1	Consideraciones	73
4.1.2.2	Variación de los parámetros de proceso.....	74
4.1.2.2.1	Valores de los materiales.....	74
4.1.2.2.2	Influencia de la velocidad de compresión	74

4.1.2.2.3	Influencia del valor del módulo de corte	81
4.1.2.2.4	Influencia de los parámetros de configuración del modelo de contacto.....	84
4.1.3	Modelado de comprimido de aditivo alimentario	89
4.1.3.1	Parámetros de configuración de la simulación. Puntos críticos	89
4.1.3.2	Modelos de comprimido generados. Comparativa de tamaños de partícula estudiados	92
4.2	Modelado del sistema dosificador de aditivo.....	101
4.2.1	Introducción	101
4.2.2	Influencia de los parámetros de simulación.....	102
4.2.3	Reemplazo de partículas	104
4.2.4	Validación del modelo de comprimido.....	108
4.2.5	Estudio comparativo sobre la simulación de los modelos de comprimido obtenidos	110
4.2.5.1	Generalidades.....	110
4.2.5.2	Variables de diseño	113
4.2.5.2.1	Velocidad de rotación de los álabes de serialización	113
4.2.5.2.2	Ángulo de inclinación de depósito	114
4.2.5.3	Velocidad de serialización	115
4.2.5.4	Fuerza de desgaste en los comprimidos	119
4.2.5.5	Fuerza tangencial de contacto en los comprimidos	123
4.2.5.6	Fuerza tangencial en los enlaces	126
4.2.5.7	Resumen comparativo de los modelos de comprimido analizados	127
4.2.6	Modificaciones en el Sistema serializador de salida	128
4.2.6.1	Geometría de álabes: Discos serializadores.....	128
4.2.6.2	Geometría de álabes: Triángulos curvilíneos serializadores	133
4.2.6.3	Resumen de resultados para las tres geometrías de álabe estudiadas	137

4.2.6.4	Inclusión de refuerzo plástico en el sistema serializador.....	139
Capítulo 5	141
5	Conclusiones y futuras líneas de investigación.....	143
5.1	Discusiones sobre los resultados obtenidos.....	144
5.1.1	Nuevo modelo de comprimido de aditivo alimentario.....	144
5.1.2	Actualización del modelo del Sistema dosificador de comprimidos.....	145
5.1.3	Software EDEM	147
5.2	Líneas futuras de investigación	147
Referencias	149

Índice de figuras

Figura 1. Sistema dosificador de aditivo alimentario comprimido	6
Figura 2. Etapas de la compactación en la compresión	20
Figura 3. Aumento de la densidad de partículas del comprimido en la compactación	20
Figura 4. Fuerzas de contacto normales entre una partícula y una superficie según modelo LSD.....	24
Figura 5. Mezcladora modelada mediante EDEM	28
Figura 6. Dispositivo dosificador automático de aditivo alimentario comprimido	31
Figura 7. Policarbonato	37
Figura 8. Aluminio en formato perfil estructural	38
Figura 9. Diferentes formatos de sal	40
Figura 10. Geometría de diversas morfologías de comprimido de aditivo alimentario	40
Figura 11. Punzones recubiertos de carburo de cromo (izq.) y tungsteno (dcha.).....	41
Figura 12. Características del acero inoxidable CPM 420 C	42
Figura 13. Matriz con casquillo intercambiable	42

Figura 14. EDEM Software logo	44
Figura 15. Módulos que constituyen EDEM	44
Figura 16. Modelo de compresión simplificado.....	47
Figura 17. Comprimido deformado por tensiones de salida (izq. y centro) Comprimido correcto (dcha.)..	47
Figura 18. Variación de parámetros en los comprimidos cilíndricos de las pruebas preliminares	48
Figura 19. Ventana de configuración del método H.M.w.B. de edem	50
Figura 20. Diferentes resultados de compresión para una misma configuración de parámetros.....	51
Figura 21. Sistema de compresión de aditivo basado en matriz + punzones	53
Figura 22. Factorías de las diferentes simulaciones. Compresión (izq.). Dosificación (dcha.)	61
Figura 23. Modelado del dispositivo dosificador de aditivo comprimido	62
Figura 24. Sistema serializador con triángulos de vértices redondeados	64
Figura 25. Modelos de serializadores. Triángulos curvilíneos (arriba) Discos (abajo.)	64
Figura 26. Ejemplo de comprimido preliminar (izq.) y fuerza de compresión aplicada (dcha.).....	74
Figura 27. Velocidad de compresión 0.2 m/s. Comprimido (izq.) Fuerza de compresión (dcha.)	76
Figura 28. Velocidad de compresión 0.4 m/s. Comprimido (izq.) Fuerza de compresión (dcha.)	77
Figura 29. Velocidad de compresión 0.6 m/s. Comprimido (izq.) Fuerza de compresión (dcha.)	77
Figura 30. Velocidad de compresión 0.8 m/s. Comprimido (izq.) Fuerza de compresión (dcha.)	77
Figura 31. Relación de la fuerza de compresión resultante y la velocidad de compresión.....	78
Figura 32. Relación de la velocidad de compresión y el número de enlaces generados (intactos y rotos) .	80
Figura 33. Efecto de la excesiva velocidad de compresión	80
Figura 34. Módulo de corte 0.1 GPa. Comprimido (izq.) Fuerza de compresión (dcha.)	81
Figura 35. Módulo de corte 1 GPa. Comprimido (izq.) Fuerza de compresión (dcha.)	81
Figura 36. Módulo de corte 10 GPa. Comprimido (izq.) Fuerza de compresión (dcha.)	82
Figura 37. Relación del módulo de corte parametrizado y la fuerza de compresión resultante	83
Figura 38. Relación del número de contactos en función del módulo de corte fijado.....	83
Figura 39. Resultados de cohesión y número de contactos bajo.....	84
Figura 40. Problema de expulsión del comprimido por valores de contacto.....	85
Figura 41. Comprimidos para valores de contacto: 100 MPa (izq.) 2.5 GPa (centro) y 2.9 GPa (dcha.).....	86
Figura 42. Parámetros HMwB de orden 1e+09. Comprimido (izq.) Fuerza de compresión (dcha.)	86
Figura 43. Parámetros HMwB orden 1e+10. Comprimido (izq.) Fuerza de compresión (dcha.)	87
Figura 44. Parámetros HMwB orden 1e+11. Comprimido (izq.) Fuerza de compresión (dcha.)	87
Figura 45. Parámetros HMwB orden 1e+12. Comprimido (izq.) Fuerza de compresión (dcha.)	88
Figura 46. Evolución de la fuerza de compresión frente valores de HMwB.....	88
Figura 47. Evolución de los enlaces en función de los valores de HMwB	89
Figura 48. Salida de un comprimido con mayor número de esferas del teórico aceptado.....	91
Figura 49. Modelo de comprimido obtenido para partícula de radio 0.75 mm	92
Figura 50. Retícula de contactos generados para el comprimido de 0.75 mm.....	92
Figura 51. Modelo de comprimido obtenido para partícula de radio 1 mm.....	93
Figura 52. Retícula de contactos generados para el comprimido de 1 mm.....	93
Figura 53. Modelo de comprimido obtenido para partícula de radio 1.25 mm	94
Figura 54. Retícula de contactos generados para el comprimido de 1.25 mm.....	94
Figura 55. Modelo de comprimido obtenido para partícula de radio 1.5 mm	95
Figura 56. Retícula de contactos generados para el comprimido de 1.5 mm.....	95
Figura 57. Modelo de comprimido obtenido para partícula de radio 1.75 mm	95
Figura 58. Retícula de contactos generados para el comprimido de 1.75 mm.....	96
Figura 59. Modelo de comprimido obtenido para partícula de radio 2 mm.....	96
Figura 60. Retícula de contactos generados para el comprimido de 2 mm.....	97

Figura 61. Evolución de la creación de enlaces entre partículas	98
Figura 62. Solapamiento normal en los enlaces de las partículas.....	98
Figura 63. Fuerza en los enlaces generados.....	99
Figura 64. Curvas de fuerza de compresión resultante para cada modelo de comprimido	100
Figura 65. Diferentes efectos del cambio de valor del rozamiento	103
Figura 66. Reemplazo de partículas defectuoso (i).....	105
Figura 67. Reemplazo de partículas defectuoso (ii).....	105
Figura 68. Prueba preliminar de reemplazo con éxito	106
Figura 69. Reemplazo de partículas para comprimido de 1.5 mm	107
Figura 70. Reemplazo de partículas para comprimido de 1.75 mm	107
Figura 71. Reemplazo de partículas para comprimido de 2 mm	107
Figura 72. Modelo de 83 partículas solapadas empleado en investigaciones previas	108
Figura 73. Cronología de validación de modelos de comprimido y modelo dosificador.....	109
Figura 74. Diseño del sistema serializador de triángulos	110
Figura 75. Atasco entre partículas	112
Figura 76. Dosificación de los modelos. 1.5 mm (arriba izq.) 1.75 mm (arriba dcha.) 2 mm (abajo)	113
Figura 77. Ejemplo de velocidad de serialización edem	115
Figura 78. Ejemplo de velocidad de serialización con atascos.....	116
Figura 79. Ejemplo de velocidad de serialización	117
Figura 80. Dosificación errática para el modelo de 1.5 mm.....	118
Figura 81. Velocidad de serialización para los casos estudiados	119
Figura 82. Fuerza media de desgaste sobre los comprimidos	121
Figura 83. Fuerza máxima de desgaste sobre los comprimidos.....	122
Figura 84. Diferentes instantes de dosificación. Configuración 1, modelo 1.75 mm	123
Figura 85. Fuerzas tangenciales totales de los contactos en los comprimidos en los casos de estudio	124
Figura 86. Fuerza media tangencial en los contactos por comprimido en los casos estudiados.....	125
Figura 87. Fuerza media tangencial en los enlaces por comprimido en los casos estudiados.....	126
Figura 88. Diseño del sistema serializador de discos.....	129
Figura 89. Velocidad de serialización para los discos serializadores	129
Figura 90. Fuerza media de desgaste sufrida por los comprimidos con los discos serializadores.....	130
Figura 91. Fuerza media tangencial en los enlaces de los comprimidos con los discos serializadores	131
Figura 92. Fuerza media tangencial en los contactos de los comprimidos con los discos serializadores ..	132
Figura 93. Instantes de dosificación de los comprimidos con los discos serializadores	132
Figura 94. Diseño del sistema serializador de triángulos curvilíneos	133
Figura 95. Velocidad de serialización para los triángulos curvilíneos	133
Figura 96. Fuerza media de desgaste sufrida por los comprimidos con los triángulos curvilíneos	134
Figura 97. Fuerza media tangencial en los enlaces con los triángulos curvilíneos	135
Figura 98. Fuerza media tangencial en los contactos con los triángulos curvilíneos.....	136
Figura 99. Instantes de dosificación de los comprimidos con los triángulos curvilíneos	136
Figura 100. Fuerzas sufridas por los comprimidos para los discos con banda de goma	140
Figura 101. Validación de modelos de comprimido y modelo dosificador	146

Índice de tablas

Tabla 1. Policarbonato. Propiedades	36
Tabla 2. Aluminio. Propiedades	37
Tabla 3. Sal. Propiedades	39
Tabla 4. Acero. Propiedades	43
Tabla 5. Repetibilidad en la batería de simulaciones.....	51
Tabla 6. Dimensiones del comprimido real a modelar mediante edem	53
Tabla 7. Interacciones entre partículas de partida	57
Tabla 8. Interacciones entre partículas	57
Tabla 9. Coeficiente de Poisson	58
Tabla 10. Densidades.....	59
Tabla 11. Parámetros del acero en las pruebas preliminares	73
Tabla 12. Parámetros de la sal en las pruebas preliminares	74
Tabla 13. Valores para la configuración de la velocidad de compresión.....	75

Tabla 14. Relación de enlaces a distintas velocidades.....	79
Tabla 15. Cálculo de número de partículas en función del radio.....	90
Tabla 16. Datos relevantes de los comprimidos generados.....	97
Tabla 17. Alguna de las variaciones de los parámetros de configuraciones físicas	102
Tabla 18. Valores de velocidad de serialización alcanzados en las pruebas reales	109
Tabla 19. Configuraciones a estudiar del dispositivo dosificador	111
Tabla 20. Resultados de velocidad de serialización obtenidos para los casos de análisis	117
Tabla 21. Resultados de fuerza de desgaste obtenidos para los casos de análisis	120
Tabla 22. Resultados de fuerza tangencial total de contactos para los casos de análisis	123
Tabla 23. Resultados de fuerza tangencial de contactos por comprimido analizados	125
Tabla 24. Resultados de fuerza tangencial en los enlaces por comprimido analizados	126
Tabla 25. Cuadro resumen comparativo para los casos estudiados.....	127
Tabla 26. Resultados de velocidad para los discos serializadores	129
Tabla 27. Resultados de fuerza de desgaste en los comprimidos para los discos serializadores	130
Tabla 28. Resultados de fuerza tangencial en los enlaces y contactos para los discos serializadores	131
Tabla 29. Resultados de velocidad para los triángulos curvilíneos	134
Tabla 30. Resultados de fuerza de desgaste en los comprimidos para los triángulos curvilíneos	134
Tabla 31. Resultados de fuerza tangencial en los enlaces y contactos para los triángulos curvilíneos.....	135
Tabla 32. Resultados obtenidos para los sistemas de serialización estudiados en la configuración 1.....	138
Tabla 33. Ajuste de interacciones físicas para la modificación de los discos serializadores	139
Tabla 34. Resultados obtenidos para los discos modificados con bandas de goma.....	139

Abreviaturas

Se muestran a continuación las diferentes abreviaturas que se encuentran en el presente documento, por orden de aparición.

DEM	Discrete Element Method, en castellano, Método de Elementos Discretos
EDEM	Software del método de elementos discretos
OMS	Organización Mundial de la Salud
FAO	Food and Agriculture Organization, en castellano, Organización para la Alimentación y la Agricultura

UE	Unión Europea
ED DEM	Event Driven Discrete Element Method
MD DEM	Molecular Dynamic Discrete Element Method
F_c	Fuerza de contacto
k_L	Constante de dureza
δ	Desplazamiento
F_d	Fuerza de amortiguamiento
η	Coefficiente constante de amortiguamiento
v	Velocidad relativa de partícula
FEM	Finite Element Method, en castellano, Método de Elementos Finitos
LADAR	Método de variación de Láser 3D
CPM	Acero pulvimetalúrgico
INOX	Inoxidable
CAD	Computer Aided Desing, en castellano, diseño asistido por ordenador
HMwB	Hertz Mindlin with Bonding, en castellano, modelo de contactos Hertz Mindlin con enlazamiento
G	Modulo de corte
F	Fuerza
l	Longitud
A	Área
Δx	Variación de longitud
ν	Coefficiente de Poisson
ϵ	Deformación
C_r	Coefficiente de restitución
n	Número de partículas
t_s	Time step
R	Tamaño de la rejilla de simulación

v	Velocidad de compresión
t_i	Tiempo de comienzo del recorrido de compresión
t_f	Tiempo final del recorrido de compresión
t_p	Tiempo de ejercicio de la presión
c_z	Centro de gravedad
máx	Subíndice que indica el valor máximo de una variable
avg	Subíndice que indica el medio de una variable
V	Volumen
q	Número de esferas que constituyen un comprimido
r	Radio de partícula
α	Ángulo de inclinación del depósito
ω	Velocidad angular
F_c	Fuerza de compresión
F_e	Fuerza de desgaste
v_s	Velocidad de serialización
t_{sim}	Tiempo de duración de la simulación

Capítulo 1

Introducción

1 Introducción

1.1 Antecedentes

1.1.1 Dosificación de aditivo alimentario

En la industria alimentaria, está extendido el empleo de aditivos para la conservación de ciertos alimentos, o potenciación de sabor, u otros fines, por medio de ingredientes o principios activos inocuos para el ser humano. Tanto es así que existen diversos organismos nacionales e internacionales que regulan mediante diferentes normativas el uso y empleo de dichos aditivos, para garantizar la salud del consumidor.

En diferentes verduras y hortalizas embotadas, o enlatadas, en la industria conservera, la inclusión de estos aditivos se realiza gracias al empleo de diferentes métodos técnicos y

tecnológicos de dilatado uso a nivel industrial. Uno de ellos, quizás el más manido, es la adición mediante líquido de gobierno.

Este método se basa en una cascada de aditivo disuelto en agua vertida sobre el alimento destino, pero que presenta dosificaciones inexactas y desiguales (insolubilidad), rápido deterioro de la maquinaria, contaminación y bajo aprovechamiento de sustancias. El método alternativo es la dosificación seca de aditivo, pudiendo ser esta automática o manual. A su vez, se distingue por la morfología del aditivo, o bien en polvo o bien en formato cápsula o comprimido. Esta última combinación es la más limpia en su dosificación y más correcta en cuanto a exactitud en la dosis.

Un problema subyacente del método de la fabricación de comprimidos, es decir, de la compresión de los aditivos, es que, debido a la baja compactibilidad de algunas sustancias empleadas como aditivo, hay que incluir aglutinantes, para formar comprimidos en algunos casos. También se emplean lubricantes inocuos en el caso de sustancias de baja cohesión, como el caso del estearato de magnesio (Desai et al., 1993).

En el caso de la industria alimentaria, campo en el que se enmarca la presente investigación, la cantidad de excipiente es sustancialmente superior a la de un comprimido farmacéutico, hecho que puede poner en entredicho la dosis máxima diaria y por ende la garantía sanitaria. Hay excipientes lubricantes que, aun no teniendo efectos adversos para la salud, sí generan cierto residuo que puede provocar rechazo en el consumidor (Muro, 2015). En el ámbito de la industria farmacéutica, es un hecho sencillamente superable, dado que el principio activo de un fármaco es una dosis pequeña y se completa con una cantidad de excipiente, sustancia inocua, necesaria para una correcta fabricación de la pastilla y no superando la dosis máxima diaria de dicha sustancia.

Sucesos como el anteriormente mencionado provocan la no implantación universal del método de dosificación de aditivo alimentario comprimido, pese a la perfecta dosis de aditivo, la limpieza del proceso per se y el respeto por el medio ambiente que supone este método de dosificación.

1.1.2 Método de Elementos Discretos

El método de elementos discretos (DEM), es un método numérico para la computación de la dinámica de partículas, llegando éstas a tamaños de micras en lo que a diámetro se refiere. La aplicación del método de elementos discretos mediante software supone un coste computacional elevado, normalmente determinado por el número de partículas, a su vez compuestas por un número determinado de superficies. Una buena 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 o fuerzas tangenciales y normales entre partículas y geometrías complicadas (incluyendo poliedros). Con los avances en potencia de cálculo y algoritmos numéricos para la clasificación del vecino más cercano, se ha hecho posible simular numéricamente millones de partículas en un único procesador, haciendo el método y las simulaciones computacionalmente económico. A su vez, el método es beneficioso para ajustar los puntos de ajuste óptimos (set point) de la maquinaria de manera económica y realizar aproximaciones veraces del comportamiento real de las mismas, hecho que sería muy costoso realizarlo por el método de prueba y error directamente sobre los elementos reales.

Este método ayuda a optimizar el manejo de material granulado y los equipos de proceso, incluyendo aplicaciones como la excavación y equipos de movimiento de tierras, molinos de bolas o rodillos, silos, tolvas, sistemas de clasificación y separación de material en ámbitos como la minería. El método de los elementos discretos se ha desarrollado hacia simulaciones de diferentes partículas irregulares y deformables en muchas aplicaciones, incluyendo medicamentos, simulaciones de fluidos, el hormigón y análisis de impacto, y otras muchas.

Las diferentes ramas de la familia DEM son el método de los elementos distintos propuesto por Cundall en 1971, el método de elementos discretos generalizado de Williams, Hocking y Mustoe en 1985, el análisis de la deformación discontinua (DDA) que Shi aportó en 1988 y por último el método de los elementos finitos-discretos desarrollado simultáneamente por diferentes grupos (por ejemplo, Munjiza y Owen). Todos ellos se han empleado en un sinnúmero de investigaciones de material granulado.

En el presente trabajo se emplea el método de elementos discretos a través del software **EDEM**, desarrollado por la compañía DEM Solutions. Con este software se pretende simular la compactación del material granulado para generar comprimidos (sal en el objeto de esta investigación), estudiar su cohesión a través del número de contactos, y finalmente su dosificación en un sistema dosificador.

1.2 Motivación y objetivos

En investigaciones anteriores se ha llegado a la consecución de diferentes etapas previas a la presente tesis. Se ha modelado el dispositivo dosificador en un software de diseño 3D para su posterior incorporación a un software de simulación de elementos discretos. A su vez, se ha modelado el aditivo alimentario comprimido de igual manera que el

Optimización de sistema dosificador automático de aditivo alimentario comprimido empleando el método de elementos discretos (DEM)

prototipo, para su posterior inclusión como ‘partícula discreta’ para el método de elementos discretos. También, se han logrado definir y parametrizar los materiales y sus interacciones habiendo obtenido unos resultados de simulación que se aproximan a la realidad del funcionamiento del dispositivo. Fijados los aspectos anteriores, se continuó realizando una serie de simulaciones en las que se estudió, por un lado, la velocidad de rotación del sistema serializador y, además, el ángulo de inclinación del depósito del dosificador. Así, se halló la relación óptima entre la velocidad de dosificación y el ángulo de inclinación del depósito, donde se intentaron varias cosas, como son minimizar los contactos entre los comprimidos para evitar desgaste, disminuir las tensiones en los comprimidos para evitar rotura y, por último, optimizar la correcta dosificación, entendiendo así dispensar el mayor número de comprimidos en el menor tiempo posible, habiendo respetado su integridad.



Figura 1. Sistema dosificador de aditivo alimentario comprimido

Se parte ahora, por tanto, de ese sistema dosificador previamente patentado (Alba et al., 2005), el cual se modeló mediante software de diseño 3D, y además, se modeló el comprimido de aditivo alimentario a dosificar como un conjunto de esferas; se parametrizaron los materiales empleados y las interacciones entre ellos llegando así a obtener un modelo del sistema completo, optimizando la configuración de inclinación del depósito almacén de comprimidos y la velocidad de serialización del sistema (300 comprimidos/minuto).

La presente tesis doctoral, pretende ir más allá de los resultados obtenidos en las investigaciones previas realizadas para la consecución de la suficiencia investigadora del autor. Se quiere mejorar el sistema dosificador de comprimidos basándose en el modelo de simulación obtenido en dichas investigaciones para validar, por un lado, la fidelidad de los métodos de simulación empleados respecto al comportamiento real del sistema y, por otro lado, la importancia de modelar propia y correctamente los sistemas para optimizar los resultados basándose esas mejoras, para la optimización del sistema real, en los resultados obtenidos mediante simulación.

Por todo ello, como objetivo fundamental se tiene la implementación de un nuevo modelo global de simulación, para optimizar el sistema dosificador, que refleje la bondad en la dosificación de aditivo alimentario comprimido, tanto en términos de velocidad de serialización como de respeto por la integridad del comprimido.

Llegado este punto, se enumeran los diferentes objetivos específicos a alcanzar en la presente tesis doctoral.

- ◆ Validar el modelo conseguido en las investigaciones previas
- ◆ Realizar un nuevo modelado de comprimido obtenido mediante simulación del proceso de compresión real para la fabricación del mismo
- ◆ Emplear este nuevo modelo de comprimido para la validación del sistema
- ◆ Comprobar si este nuevo modelo de comprimido es más exacto frente a los modelos empleados con anterioridad. Ver si computacionalmente es más rentable el uso de qué comprimido para ver si la fidelidad alcanzada compensa o no
- ◆ Se pretende optimizar, apoyándose en las variables de proceso estudiadas y mediante simulación, los álabes el sistema serializador (discos serializadores de comprimido, sistema de salida) testeando tres topologías de álabes diferentes
- ◆ Combinar todas las variables estudiadas con los nuevos discos y ver cuál es el óptimo final para el diseño definitivo del sistema

1.3 Estructura del documento

El presente documento está estructurado en seis capítulos de los que, a continuación, se puede ver una breve descripción en cuanto a su contenido.

Capítulo 1 Introducción

En este primer capítulo del presente documento, se exponen los antecedentes y las investigaciones previas que dan origen a esta tesis doctoral, se detallan las motivaciones

que la han provocado, así como los objetivos que se esperan cumplir, en líneas generales. En último término, en el apartado de estructura del documento, se describen brevemente los capítulos que componen este escrito, dando una visión global de los mismos.

Capítulo 2 Estado del Arte

Se da a conocer en el segundo capítulo, una breve revisión de los temas sobre los que versa esta tesis. En primer lugar, se habla sobre los sistemas de dosificación de aditivo alimentario más empleados en la industria y las características más relevantes de los mismos. Posteriormente se tratan la definición y normativa, según la O.M.S., de los citados aditivos, las claves de la fabricación de aditivo comprimido, así como la problemática y fundamentos de la compresión. Finalmente, se da una idea generalista de qué es el Método de Elementos Discretos (DEM), así como de su relevancia y aplicación industrial. Además, se trata la importancia de los parámetros de simulación de dicho método.

Capítulo 3 Metodología

En una primera parte del capítulo y con el objetivo de poner en situación al lector, se dan unas pinceladas de los materiales que se emplean en este estudio, siendo estos la sal, constituyente fundamental del aditivo alimentario comprimido empleado, el policarbonato y el aluminio, que fundamentan la topología del sistema dosificador. Se da una idea global de los materiales y maquinaria que se emplean en la fabricación de los comprimidos. Este apartado termina detallando las características del software empleado en método de elementos discretos.

Seguidamente, se describe la metodología empleada. Metodología aplicada en las pruebas preliminares realizadas, en las simulaciones realizadas para la definición de parámetros de materiales y de simulación, las simulaciones de obtención de un nuevo modelo de comprimido de aditivo alimentario y las de validación del sistema dosificador automático además de la inclusión de las mejoras propuestas. Se explica la secuencia del proceso y las pruebas realizadas en esta optimización.

Capítulo 4 Resultados obtenidos

En este punto, se muestran los resultados obtenidos de las simulaciones realizadas. En una primera parte, las simulaciones preliminares realizadas que sirven para introducir la parte en la que se determinan, con la mayor fidelidad posible, los parámetros de simulación, velocidad de simulación y parámetros de cohesión en la generación del modelo de comprimido. Posteriormente, se incluye este modelo de comprimido en el dispositivo dosificador automático, a través de un reemplazo de partículas, para simular

y validar el propio modelo y los obtenidos en las investigaciones previas. Consecuentemente se introducen las mejoras propuestas en el dispositivo dosificador.

Capítulo 5 Conclusiones y futuras líneas de investigación

Este apartado, recoge las impresiones que se han obtenido como conclusión de los análisis y estudio realizados. Se extraen las claves de mayor relevancia de los resultados obtenidos. Al mismo tiempo, se deja un escollo para posibles estudios futuros como posibles líneas de investigación que complementen el presente documento.

Referencias

Este capítulo de cierre alberga la relación de las fuentes consultadas en la elaboración de esta tesis doctoral. Se listan todos los artículos científicos, libros, tesis, páginas web y otro material bibliográfico consultado o citado a lo largo del escrito.

Capítulo 2

Estado del arte

2 Estado del arte

2.1 Sistemas de dosificación

2.1.1 Dosificación de aditivos alimentarios en seco

En la dosificación sólida, los aditivos específicos para cada producto se suministran en forma de comprimidos, cada uno de éstos contiene la monodosis específica de aditivos y sal para cada recipiente.

Tradicionalmente, la industria alimentaria se había decantado por sistemas de dosificación por líquido de gobierno. Normalmente se dosifica en seco cuando resulta imposible disolver los ingredientes de la mezcla en el líquido de gobierno o cuando los bajos costes de mano de obra permiten la dosificación por comprimidos, el mejor de los métodos de dosificación por su exactitud en la dosis.

Las características determinantes a la hora de definir la funcionalidad de un dispositivo dosificador en seco son:

- ◆ Velocidad de dosificación
- ◆ Fiabilidad en la dosificación, o también, calidad en la dosificación, es decir, que exista la seguridad de que cada recipiente dosificado contiene la cantidad exacta de aditivo
- ◆ Máxima automatización
- ◆ Preservación del aditivo
- ◆ Disolución total de la mezcla
- ◆ Evitar presencia de residuos
- ◆ Seguridad en el empleo
- ◆ Limpieza y respeto por el medio ambiente

2.1.2 Dosificación automática por líquido de gobierno

Cuando no es posible la compresión de los ingredientes, el comprimido se sustituye por la dosificación de los ingredientes de la mezcla en polvo o por una disolución de los aditivos y sal en agua, preparando así el líquido de gobierno o cobertura del producto. Este líquido de mezcla es añadido a los recipientes después de introducir el alimento y justo antes cerrar el envase.

Según el método de aplicación del líquido en los recipientes se puede hablar de dosificación por cascada, por duchas o volumétrica. Este último es el de mayor coste y mejor en cuanto a la exactitud de la dosificación.

Debido a que el líquido es suministrado de manera continua al paso de los recipientes, existe un porcentaje de éste que no termina en los envases. Esta parte del líquido es recogida y reconducida al depósito de alimentación del líquido.

Este sistema de dosificación presenta los siguientes inconvenientes:

- ◆ Al aplicar una mayor cantidad de aditivo que la necesaria (cascada), es necesario recircular el sobrante para minimizar el coste provocado por el desperdicio, lo que da lugar a impurezas.
- ◆ No existe la certeza en una perfecta concentración de aditivo por envase, ya que el recipiente puede estar totalmente lleno de producto desbordándose así el líquido de gobierno.
- ◆ Dada la baja solubilidad de ciertos ingredientes no se integran uniformemente en el líquido de gobierno.
- ◆ Pérdida de calidad o propiedades en su disolución en el líquido de gobierno.

2.1.3 Dosificación automática por encapsulación de los ingredientes

La segunda alternativa la constituye la posibilidad de encapsular los ingredientes para posteriormente dosificar dichas cápsulas con una máquina dosificadora de cápsulas convencional.

La cápsula blanda de gelatina es una forma de dosificación sólida formada por dos películas de gelatina que contienen entre ellas el ingrediente sólido o líquido que se desea encapsular.

En primer lugar, habría que mezclar los ingredientes en cualquiera de las máquinas mezcladoras convencionales, posteriormente, la mezcla fabricada se encapsularía con el formato correspondiente. Dichas cápsulas alimentarían el depósito-almacén del sistema dosificador. Esta máquina consta de un gran disco rotante en el que separan las cápsulas por centrifugación hasta unos carriles de dimensiones determinadas por el tamaño de la cápsula a dosificar. Es un proceso caro, con una no muy buena disolución de los elementos que encapsulan el aditivo que, además, en proporción a este, es mucho mayor.

2.1.4 Dosificación en polvo

Este sistema de aplicación suele emplearse cuando se dosifican ingredientes como las especias, muy difíciles de comprimir y que poseen un valor relativamente alto en comparación con los aditivos empleados más comúnmente. Estas mezclas se aplican manualmente empleando un recipiente enrasado de la capacidad correspondiente al peso del recipiente destino. El inconveniente principal es la baja velocidad de dosificación, dado que suele realizarse de manera manual.

Otra de las técnicas la constituye la dosificación automática en polvo. Esta maquinaria se emplea para la dosificación de productos secos y de densidad consistente como el arroz, maíz, azúcar, frutos secos o café. Existen dos tipos de máquina que podrían utilizarse para este propósito.

2.1.4.1 **Dosificadores volumétricos**

Estos dispositivos están provistos de vasos telescópicos que permiten ajustar un peso de un determinado producto según su volumen. El dosificador toma el producto de una tolva de alimentación que está instalada encima de los vasos, mediante el movimiento rotativo de los mismos, el producto cae en su interior y posteriormente es dispensado mediante la apertura de una tapa, al correspondiente dispositivo de envasado. Está provisto de un

sistema motorizado que permite el desplazamiento de los vasos telescópicos con gran precisión. Un nivel en la tolva envía la señal al elevador de producto para que siempre esté llena.

2.1.4.2 Dosificadores sin-fin

Los dosificadores sin-fin para polvos están compuestos de una tolva superior acumuladora con un removedor de producto, de marcha continua o bien intermitente, según el producto a dosificar, para evitar su apelmazamiento. El peso a obtener es regulado por un dispositivo generador de impulsos electrónico, que controla los giros del sin-fin.

Este tipo de instalaciones suele emplearse para el envasado de productos en polvo y granulados, tales como: harinas, sopas preparadas, sémolas, café molido, pinturas en polvo, pesticidas, cosméticos, preparados químicos y farmacéuticos.

2.1.5 Resumen comparativo de los métodos de dosificación

Como ya se ha apuntado, en la industria conservera se utilizan diferentes métodos de aditivado, siendo los más difundidos el basado en líquido de gobierno y el que emplea aditivo comprimido. Este segundo método es de un uso menor respecto al primero pese a mostrar ventajas sustanciales.

Las aplicaciones mediante líquido de gobierno históricamente han tenido una mayor repercusión y empleo, sobre todo debido a la dificultad de automatizar la adición de los aditivos por cualquier otro método, incluido los comprimidos. A día de hoy se han realizado avances en la compresión de aditivos, alcanzando muy buenos resultados en algunas mezclas con un alto contenido de sal. Donde radica la complicación de compactación es en mezclas con una alta proporción de ácido cítrico o especias de baja compresibilidad. El objetivo de esta investigación es mejorar un sistema de dosificación de aditivo alimentario comprimido, con el fin de optimizar la morfología del sistema de salida de aditivo, maximizando la velocidad del mismo en equilibrio con el respeto por la integridad del compacto.

A pesar de su uso minoritario y específico, las ventajas más relevantes del sistema de dosificación por comprimidos en comparación con el de líquido de gobierno, son varias. Primeramente, el aspecto de calidad y seguridad del producto, los comprimidos aseguran una dosificación exacta de los ingredientes independientemente del peso de la conserva ya que se formulan sobre pesos netos y las desviaciones en el llenado no hacen variar los resultados finales. Las materias primas empleadas son similares en cuanto a calidad o propiedades físicas y calidad a las utilizadas en la industria farmacéutica por la necesidad

de emplear productos muy refinados que permitan una mezcla plenamente homogénea y una compresión perfectas. Al mismo tiempo, el coste en el empleo y consumo de aditivos en la fabricación se reduce, puesto que se emplean exclusivamente las cantidades necesarias. Por este último motivo, se mejora la calidad de los vertidos en las industrias, de menor cuantía y concentración. También desde el punto de vista económico se reduce el coste unitario del aditivado de una unidad de conserva, porque no existen mermas por manipulación y costes de mantenimiento de las instalaciones a causa de los fenómenos de corrosión provocados por los líquidos de gobierno, hecho que además contribuye al aumento de la vida útil de la maquinaria, empleando el aditivado en seco. La recuperación permanente del líquido de gobierno en las dosificadoras da lugar a turbiedades e impurezas, además de a una continua concentración de los ingredientes por evaporación al trabajar con temperaturas superiores a sesenta grados.

2.2 Aditivos alimentarios

2.2.1 Definición

La Organización de las Naciones Unidas para la Alimentación y la Agricultura (FAO, Food and Agriculture Organization) y la Organización Mundial de la Salud (OMS), crearon en 1963 una serie de normas internacionales armonizadas para fomentar las buenas prácticas en el comercio de alimentos y además proteger a los consumidores. Así nació el [Codex Alimentarius](#), o código alimentario.

Así, se define en el código alimentario al aditivo alimentario:

Se entiende por aditivo alimentario cualquier sustancia que en cuanto tal no se consume normalmente como alimento, ni tampoco se usa como ingrediente básico en alimentos, tenga o no valor nutritivo, y cuya adición intencionada al alimento con fines tecnológicos (incluidos los organolépticos) en sus fases de fabricación, elaboración, preparación, tratamiento, envasado, empaquetado, transporte o almacenamiento, resulte o pueda preverse razonablemente que resulte (directa o indirectamente) por sí o sus subproductos, en un componente del alimento o un elemento que afecte a sus características. Esta definición no incluye “contaminantes” o sustancias añadidas al alimento para mantener o mejorar las cualidades nutricionales.

En el anexo II de este reglamento, se recogen los aditivos que se pueden emplear en el territorio de la UE y se indican las dosis máximas y los alimentos en los que se pueden adicionar. En el anexo III se recogen las sustancias que pueden ser empleados en aditivos, enzimas, aromas y nutrientes.

2.2.2 Buenas prácticas de fabricación

Las pautas que recomienda el código alimentario de la FAO/OMS para realizar unas buenas prácticas en la fabricación de comprimidos se resume a continuación:

- ◆ La cantidad de aditivo que se añada al alimento se limitará a la dosis mínima necesaria para obtener el efecto deseado;
- ◆ La cantidad de aditivo que pase a formar parte del alimento como consecuencia de su uso en la fabricación, elaboración o envasado de un alimento y que no tenga por objeto obtener ningún efecto físico o técnico en el alimento mismo, se reducirá en la mayor medida que sea razonablemente posible;
- ◆ El aditivo será de una calidad alimentaria apropiada y se preparará y manipulará de la misma forma que un ingrediente alimentario.

2.3 Fabricación de comprimidos

Las primeras aproximaciones realizadas en compactación relacionan el volumen logrado en la compresión con el logaritmo de la presión ejercida para la consecución del mismo (Walker, 1923). Estas ecuaciones reducidas basadas en la aplicación de un factor constante no resultaban un modelo preciso. Por eso, el paso de los años ha propiciado un sinnúmero de variaciones en los criterios de compresión según las áreas de investigación, desembocando en multitud de modelos matemáticos, como es el caso del volumen relativo y la variación de presión en materiales cerámicos (Cooper y Eaton, 1962), o la influencia de la compactación en la posterior sinterización (Bruch, 1967).

2.3.1 Proceso de compresión

Las mezclas de aditivos alimentarios comprimidos poseen una limitación, por razones sanitarias, en el empleo de excipientes que faciliten la compresión (<0.4% en peso del total de la mezcla). 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.

La principal razón que impide la compresión de estas mezclas de aditivos radica en la naturaleza de sus ingredientes. En algunos casos, estos son extremadamente abrasivos con los elementos de la compresión (matriz y punzones) que hacen imposible el trabajo continuado de la máquina de compresión independientemente de la presión o la geometría de la pastilla. Por esta razón, un factor fundamental en la fabricación de comprimidos lo constituye la maquinaria y utillajes empleada en la compresión de las

mezclas. Una modificación de los parámetros de la compresión facilitaría la generación de la pastilla.

La compresión directa de las mezclas es la alternativa más económica para la fabricación de comprimidos para la fabricación de las mezclas que actualmente puede comprimir. Este tipo de fabricación de comprimidos se realiza en 2 tipos de máquina:

- ◆ **Excéntricas** Un punzón que comprime el polvo dosificado en una matriz. Son máquinas tradicionales que se emplean para producciones limitadas.
- ◆ **Rotativas** Varias matrices van siendo llenadas y comprimidas al girar un revolver. Especial para grandes producciones.

En ambos casos se lleva a cabo la misma secuencia en el conformado del comprimido: llenado, matriz, enrasado, compresión y expulsión del comprimido.

Los comprimidos deben poseer una geometría para que puedan ser empleadas con el dosificador automático de comprimidos, la cual viene impuesta por el diseño del propio sistema. Para el correcto funcionamiento de este sistema, es preciso que los comprimidos rueden unos respecto de otros para poder discriminar una hilera de estos, del conjunto almacenado a granel en el depósito principal. Una vez que se ha obtenido una fila de pastillas, éstas tienen que rodar por el conducto del sistema serializador de salida, antes de la dosificación en los recipientes. Para que sean posibles estos movimientos relativos entre pastillas, no es necesario que la pastilla sea totalmente esférica, basta con que el cuerpo de la pastilla tenga unas proporciones similares en cuanto a diámetro y altura y que no presente aristas pronunciadas que puedan provocar atascos entre ellas.

Otra característica destacable que han de poseer los comprimidos de aditivo es la dureza. Su compacidad ha de ser tal que, comprendida entre unos valores mínimo y máximo, sea lo suficientemente alta para no desmoronarse con facilidad debido a golpes naturales por la manipulación, transporte o vertido en el depósito almacén del sistema dosificador, y al mismo tiempo baja para poder disolverse en el líquido de la conserva. Se exige al mismo tiempo, que los comprimidos tengan siempre el mismo peso y composición. Por otro lado, a la hora de generar el comprimido, existe el compromiso entre la concavidad del punzón y la presión ejercida, siendo el menor diámetro posible aquel que permita que los comprimidos giren unos respecto de otros, requisito comentado anteriormente para conseguir la dosificación en hilera correcta, y la presión de conformación será máxima cuando aplicando una mayor se adhiera aditivo al punzón, a razón de que a menor concavidad del punzón mayor puede ser la presión aplicable.

Existen diferentes etapas en la compactación que se da en un proceso de compresión. Se pueden dirimir diferentes etapas en este proceso, tales como reorganización, cuando se aplica presión y se reduce el volumen inicial de las partículas, empaquetamiento, cuando

continúa la presión ejercida y se forman paquetes más estables de partículas, deformación elástica, etapa en la que si cesara la presión aplicada las partículas recuperarían la forma y estado previos, deformación plástica, en la que si el material es frágil se redistribuyen los conglomerados de menor tamaño que estén o no descompuestos para minimizar los huecos y densificar el comprimido entre los pedazos más grandes, y por último, la etapa de fractura que es rotura del material.

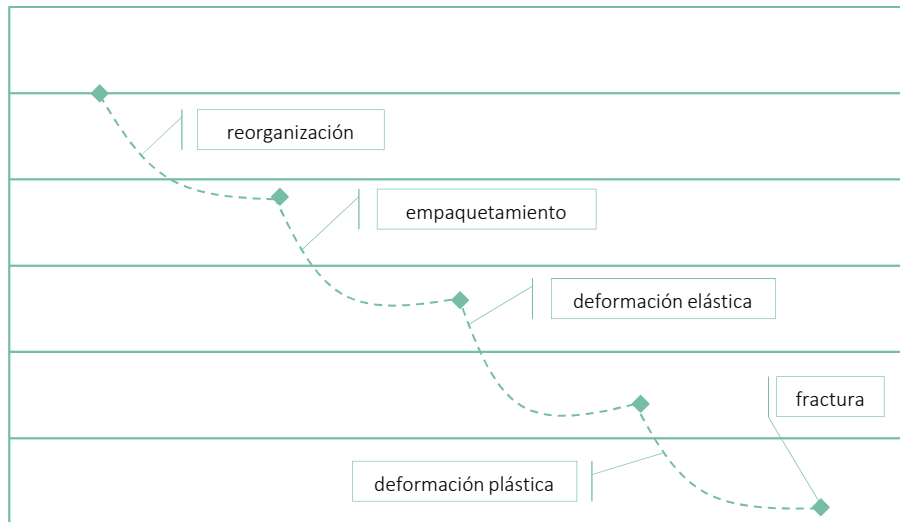


Figura 2. Etapas de la compactación en la compresión (García, 2010)

Algunas variables físicas importantes son la elasticidad y capacidad de recuperación del material (Briscoe y Rough, 1998), y la forma de las partículas, siendo la óptima la forma esférica, por la simplificación que supone (Zavaliangos, 2003).

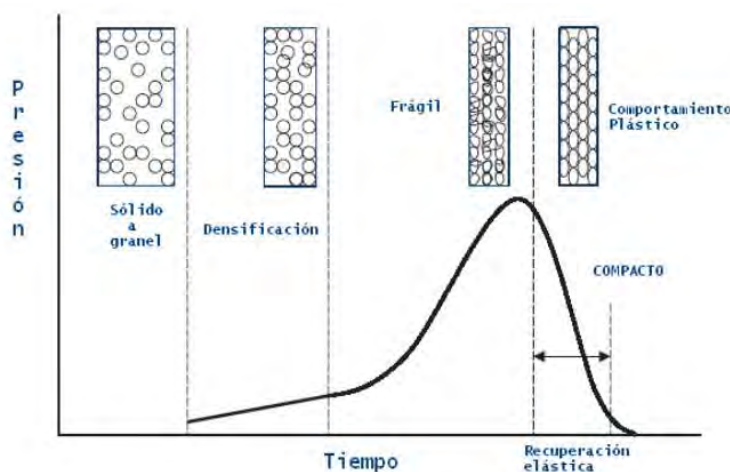


Figura 3. Aumento de la densidad de partículas del comprimido en la compactación (García, 2010)

En el caso de la etapa de deformación plástica, se tiene que las partículas se redistribuyen de tal forma que se homogeniza el comprimido y se rellenan intersticios que pueda haber, incrementando así la densidad del mismo (García, 2010).

En el caso de la densidad, para sistemas granulares gaseosos, de baja densidad, existe la variante ED DEM (Event Driven). En esta aproximación el tiempo de colisión es de un orden muy pequeño y por ello las colisiones son excluidas. Cuando esta asunción no es viable entra en juego otra aproximación como es MD DEM (Molecular Dynamics) en el que las condiciones iniciales del sistema son conocidas (Kruggel-Emden et al., 2006).

2.3.2 Problemática de la compresión

Las tecnologías disponibles para la fabricación de productos farmacéuticos no presentan problemas a la hora de comprimir, dosificar y empaquetar. Esto se debe a que la formulación del producto presenta una concentración de materia activa que difícilmente supera el 20%, siendo el resto excipientes que facilitan la compresión.

En cambio, en el sector de aditivos alimentarios, esto no es posible, ya que únicamente se pueden formular comprimidos 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.

La razón principal que impide la compresión de estas mezclas de aditivos radica en la naturaleza de sus ingredientes. En algunos casos, éstos son extremadamente abrasivos con los elementos de la compresión (matriz y punzones); en otras ocasiones, caso de mezclas que contienen especias, la compacidad de los comprimidos obtenidos es muy pequeña para permitir su manipulación, independientemente de la presión empleada.

Las propiedades especiales del comprimido son: 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.

Es importante, por todo ello, realizar una modificación de las propiedades fisicoquímicas de los ingredientes de la mezcla (humedad, temperatura, estado de agregación, etc.) permitiría la compresión de todo el conjunto (Alba, 2004).

2.3.3 Propiedades críticas

Son varios los factores físicos a tener en cuenta a la hora de comprimir partículas en polvo. La primera que puede venir al pensamiento es la fricción, debido al rozamiento

que se produce entre el material a comprimir y la matriz en la que está alojado, así como con los elementos compresores (punzones). Si este rozamiento es alto, en la fabricación se originarán comprimidos defectuosos y con falta de homogeneidad en su densidad (anisotropía), pudiendo generar fallos de rotura por laminación.

Otra variable a tener en cuenta es la compactibilidad, capacidad de un lecho de polvo para formar un compacto con una resistencia específica debido al ejercicio de presión y, en combinación con la compresibilidad, define la bondad de la fabricación de tabletas. Influyen, también, las características de las partículas previas a la compresión, tales como el tamaño y forma o la distribución de las mismas (intersticios). La porosidad representa la fracción de espacios vacíos que se suelen crear durante la formación de una estructura y disminuye a medida que se ejerce una presión sobre un lecho sólido. Es de gran importancia en la compactación de sólidos pulverulentos porque el aire contenido en el seno de los mismos tendrá un papel determinante en el proceso debido a que su evacuación eficaz a través de los poros evitará problemas de laminación en las estructuras compactadas formadas (Muro, 2015).

La citada compresibilidad de un material se define como su capacidad para reducir su volumen relativo cuando es sometido a una presión de compactación (Grossman et al., 2004). El resultado final está influido por el aire contenido en el material y la facilidad para su expulsión, el grado de reordenamiento, la forma de las partículas e incluso las dimensiones del recipiente. Este hecho influye a su vez en la velocidad de compactación, siendo óptimo que sea baja para dejar escapar el aire interno. Estas limitaciones provocan defectos, como la laminación ya que las partículas se reordenan formando capas o estratos (Simon y Guigon, 2003).

Es destacable al mismo tiempo la resistencia mecánica de los comprimidos, la cual depende de la cantidad de enlaces entre las partículas y dureza, creciendo ambas al aumentar la densidad del comprimido. Se puede expresar como la fuerza necesaria para romper las pastillas aplicando fuerzas de aplastamiento normales o paralelas al eje del elemento a estudiar (Rumpf, 1962).

Por último, se puede hablar de la friabilidad. Se entiende como friabilidad la cualidad de un material de desmenuzarse fácilmente. En el caso del estudio objeto de este documento, es un factor muy importante en las que también influyen las cualidades del comprimido en cuanto a las propiedades descritas anteriormente. En el sistema dosificador es importante que el comprimido fabricado no sea altamente friable, ya que el rozamiento dinámico entre comprimidos y con el propio sistema, hará que se produzcan tensiones en los comprimidos por atasco, así como en la interacción con las geometrías diseñadas. Tanto es así que ha de garantizarse la integridad del comprimido.

2.4 Método de Elementos Discretos (Discrete Element Method: DEM)

2.4.1 Introducción

En ingeniería se puede determinar la solución de un problema a través de un método numérico de cálculo con un comportamiento continuo o discreto, o mezcla de ambos.

En el caso de un sistema continuo, en los límites de cada uno de los componentes en los que se subdivide el dominio del sistema, existe una fuerte conexión con cada uno de los elementos adyacentes durante toda la duración de la simulación del modelo, lo cual implica que no existe ese grado de libertad ya que cada elemento se desplazará con las condiciones de continuidad que imponen sus propios colindantes. Existirá, por tanto, una ecuación diferencial que gobierne el conjunto de los componentes del sistema y que refleja el impedimento de desvincularse entre sí. Esta restricción hace a este sistema ideal para representar la deformación interna de cada elemento, en lugar de su desplazamiento como cuerpo rígido.

En el caso de un sistema discreto, las subdivisiones del dominio son componentes independientes que pueden estar o no conectados y para los que no se requiere ecuación de continuidad. Así, el movimiento de cada uno de los elementos será libre y estará determinado según las interacciones en cada instante. Esta característica es idónea para sistemas particulados y representar el desplazamiento de cada uno de los elementos que componen un sistema rígido, en vez de la deformación interna de cada elemento.

2.4.2 Particularidades del método

El método de los elementos discretos, enmarcado como un método numérico, simula el comportamiento mecánico de un medio formado por un conjunto de partículas (sistema granular) las cuales interactúan entre sí a través de sus puntos de contacto. La disposición de las partículas dentro del conjunto global del sistema o medio es totalmente aleatoria, por lo que se pueden formar medios con diferentes tamaños de partículas distribuidos a lo largo del conjunto, idealizando de este modo la naturaleza granular de los medios que usualmente se analiza y simula mediante esta técnica numérica.

Las partículas como elementos discretos en su conjunto forman el sistema complejo de partículas. En este método, a nivel de cada partícula, se hace uso de la mecánica del cuerpo rígido y los elementos discretos se consideran elementos rígidos en sí mismos, se desplazan independientemente unos de otros e interactúan entre sí en las zonas de contacto.

El modelo constitutivo que define el comportamiento global del material es establecido en las zonas de contactos entre partículas. La caracterización de los contactos en el modelo se describe por los siguientes elementos mecánicos (Malone y Xu, 2008):

- ◆ **Muelles** Describe la fase de comportamiento elástico del medio en la zona de contacto entre cada partícula, uno en la zona normal y otro en la tangencial (descomposición de fuerzas del método). Atiende a la ecuación:

ec.1 $F_c = k_L \cdot \delta$, donde F_c es la fuerza de contacto de repulsión, k_L es la constante de dureza δ y es el desplazamiento

- ◆ **Pistones** Representa la viscosidad del medio simulado. Puede ser viscoso y no viscoso, lo que permite aplicar el modelo a un gran número de problemas mecánicos, tanto elásticos como viscoelásticos. Atiende a la ecuación:

ec.2 $F_d = \eta \cdot v$, donde F_d es la fuerza de amortiguamiento, v es la velocidad relativa de la partícula y η es coeficiente constante de amortiguación.

- ◆ **Elementos de fricción** Atienden a la descohesión y fallo del material en la zona de contacto entre cada partícula. Es decir, si se produce una rotura, esta partícula se desprende del medio.

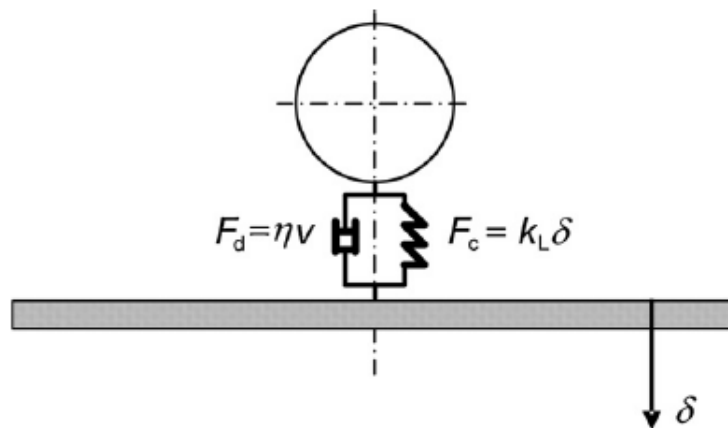


Figura 4. Fuerzas de contacto normales entre una partícula y una superficie según modelo LSD (*Linear-spring dashpot*)

La formulación establecida para el desarrollo de un sistema mediante DEM, adopta una serie de hipótesis que permiten simplificar el problema real desechando los aspectos menos significativos y permitiendo establecer un modelo físico y matemático del

problema de estudio. Las hipótesis que se establecen son las siguientes (O'Sullivan, 2011):

- ◆ El hecho de que las partículas dispongan de masa e inercia propias les dota de rigidez y por ende son consideradas rígidas
- ◆ Las partículas se mueven independientemente unas de otras. Se considera para cada cual un movimiento de translación y rotación tomando en cuenta su posición y velocidad
- ◆ Cuando se da un solape entre partículas, en función de la magnitud de este es determinable la fuerza de compresión dada en la interacción de dichas partículas
- ◆ El punto de contacto entre partículas se identifica automáticamente. Además, acontece en una superficie infinitesimal y es representado como un modelo de masa-resorte. En las direcciones normales de ese punto de contacto se transmiten la tensión, fuerza tangencial y fuerzas de compresión
- ◆ Según sea la distancia entre dos partículas se calcula la fuerza de contacto entre ellas. Si esa fuerza contacto supera el valor máximo de tensión en ese instante, las partículas se alejan entre sí y se anula el contacto. A posteriori ese contacto se denomina como 'contacto cero' y no es tenido en cuenta para el cómputo global de fuerzas normales de contacto
- ◆ El incremento de tiempo debe ser lo suficientemente pequeño como para que el movimiento de una partícula en base a un solape sea lo suficientemente pequeño para influenciar únicamente a las partículas cercanas
- ◆ Un compendio de partículas puede ser asimilable al uso de un sistema de mayor tamaño, causando el movimiento relativo entre las partículas una deformación en el ensamble granular

2.4.3 Importancia de los parámetros de simulación

En los paquetes software implementados en el método de elementos discretos, existen multitud de parámetros de simulación que son determinantes a la hora de obtener resultados fidedignos respecto el comportamiento real de los sistemas. Normalmente, estos parámetros relacionados con las propiedades físicas no están determinados para materiales o aplicaciones concretas, como es el caso objeto de la presente tesis, aunque si estén tipificados los valores para materiales más comunes. Por ello, para poder establecer un valor coherente con la situación real de un sistema, lo habitual es realizar baterías de simulaciones empíricas (Boukouvala et al., 2013) y ensayos experimentales para hallar estos parámetros críticos (Hussain, 1999). Tanto es así, que propiedades como

el coeficiente de restitución (Foerster et al., 1994), el coeficiente de Poisson o los valores de los coeficientes de rozamiento estático y dinámico, son difíciles de determinar a no ser que se empleen el método de prueba y error para asemejar el resultado final simulado con el comportamiento real de un sistema.

Por ello, numerosos autores han realizado multitud de trabajos a este respecto, como es el caso de la determinación del coeficiente de resistencia a la rodadura (Wensrich and Katterfeld, 2011), parámetro que indica la relación entre la fuerza o resistencia que opone un material al movimiento respecto otro y la normal entre ambos, lo cual se ha atribuido a la pérdida de histéresis (Tabor, 1995) y ejemplo de este coeficiente es el estudiado en comprimidos farmacéuticos (Ketterhagen et al., 2010). Los parámetros de interacción entre materiales han sido estudiados por varios autores o también el caso del coeficiente de Poisson o el módulo de corte, determinantes ambos para la precisión en el hallazgo de las fuerzas de contacto (Kodam, 2009).

2.4.4 Empleo de DEM en la industria e investigaciones recientes

2.4.4.1 Minería y proceso de minerales

El método de elementos discretos ayuda a optimizar el manejo de material y los equipos de proceso, incluyendo aplicaciones como: Puntos de transferencia entre bandas (Liss et al., 2004), mejora del comportamiento en la excavación y movimiento de tierras, mejora de la eficiencia de pulverizadores, molinos de bolas o rodillos, en el diseño de silos o tolvas (Ketterhagen et al., 2010) para optimizar el flujo del material o el incremento de la eficiencia de sistemas de clasificación y separación de material (Hancock et al., 2011). En el desarrollo de equipos industriales y maquinaria se está empleando DEM para el rediseño y mejora de maquinaria agrícola y de construcción, análisis de flujo y dispersión de material a granel, mejora del análisis de la interacción del suelo con elementos de apoyo de equipos. (Latham et al., 2011) simulan el comportamiento complejo de la fractura de rocas en ingeniería civil, empleando métodos DEM, FEM y LADAR (3D laser ranging), ya no tanto para modelar sino como para simular el comportamiento de partículas irregulares no esféricas.

2.4.4.2 Industria farmacéutica

En este ámbito, DEM es útil en la mejora de procesos y productos. Se consiguen modelos de equipos y pastillas para poder analizar sus interacciones y evaluar cambios de formulación etc. flexibilizando así los sistemas.

Es importante el grado de mezclado que se debe alcanzar en la composición del principio activo. Atendiendo al flujo de mezcla o las geometrías a emplear en las palas de una

mezcladora, DEM ayuda en la medida experimental y el escalado de procesos del nivel laboratorio al industrial (Ali Hassanpour et al., 2010).

En el caso de la implementación de comprimidos farmacéuticos un detalle importante es el espesor de la película protectora del comprimido, así como la orientación de las partículas que la componen, en orden de predecir el tiempo en el que entrará en acción el principio activo del medicamento en cuestión (Ketterhagen, 2011) (Suzzi et al., 2011). Otros factores importantes son la granulometría y compresión, así como su efecto sobre el transporte y manipulación de algunos materiales y medicamentos en pastilla (Ketterhagen, 2009). También se ha estudiado la disolución de los polímeros que recubren pastillas cilíndricas y la influencia de la absorción de agua por parte de estas moléculas y la concentración dependiente de las mismas (Kimber et al., 2011)

2.4.4.3 Relevancia y evolución del método de elementos discretos

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 general fue originalmente concebido por Cundall en 1971 para resolver problemas de mecánica de rocas. Tras los primeros trabajos realizados por Munjiza y Owen, el método de los elementos discretos se ha desarrollado hacia simulaciones de diferentes partículas irregulares y deformables en muchas aplicaciones, incluyendo medicamentos, simulaciones de fluidos, el hormigón y análisis de impacto, y otras muchas.

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).

El fin fundamental del método de elementos discretos es simular de forma precisa el comportamiento de partículas reales y la morfología de las mismas. Lo habitual es emplear esferas (Ning et al., 1997) que suponen un cálculo más simple, rotación natural de las partículas, es decir, únicamente limitada por las fuerzas de rozamiento en los contactos. Excepcionalmente hay modelos que emplean poliedros para partículas de

superficie plana (Hart et al., 1988). Otra de las geometrías de partícula que se emplean en el método, son discos circulares (Xu y Yu, 1997).

Se pueden emplear esferas, como se apuntaba, de manera aislada para representar la partícula o elemento a simular, pero para otro tipo de formas más complejas o incluso para una mejor definición del cuerpo a simular, se pueden emplear un número n de partículas esféricas para modelar dicho cuerpo y conseguir una mayor fidelidad en los resultados respecto al comportamiento real. Este número de partículas viene definido por el compromiso entre coste computacional y parecido a la realidad (Guerra, 2011) (Song et al., 2005).

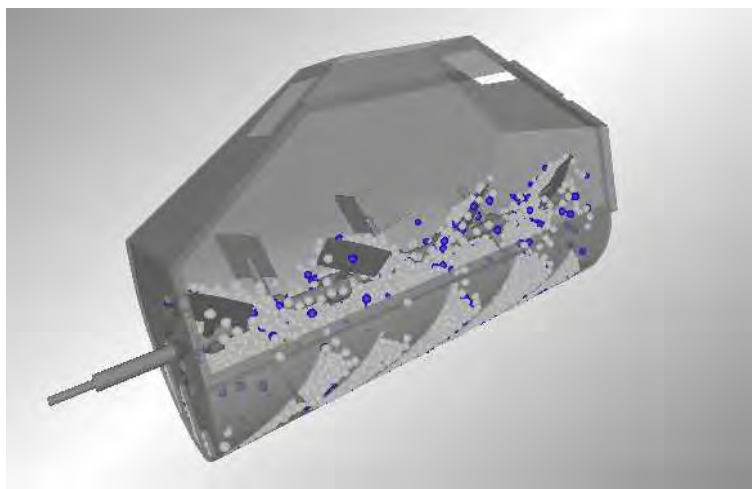


Figura 5. Mezcladora modelada mediante EDEM (Guerra, 2011)

En el empleo de sistemas de partículas no esféricas, las técnicas actuales se están declinando por el empleo conjunto de DEM y CFD (computational fluid dynamics). El empleo de estas técnicas se da en diferentes campos, desde el movimiento de tierras y materiales granulares hasta la producción de biomasa o el flujo sanguíneo (Zhong et al., 2016), donde se muestran recopilados los trabajos más relevantes en el uso conjunto de ambos métodos. Destaca la importancia de modelar el sistema de partículas correctamente, el hallazgo de los contactos entre partículas, las fuerzas de colisión y las debidas al movimiento del fluido.

Otros estudios apuntan al uso de partículas elípticas en compresión cuasi-estática, en el caso de arena, que dan mejores resultados que las partículas circulares (Ting et al., 1995). El problema de estos sistemas es el elevadísimo coste computacional y la pérdida de precisión en la rotación (Lin & Ng, 1995). Otra opción en la representación con partículas no circulares es el uso de funciones supercuadráticas (Song et al., 2005) y, por intersección de una o más funciones se determina el contacto, aunque computacionalmente es prácticamente inviable (Hogue, 1998).

Las partículas lisas y no esféricas generadas por revolución se simulan mediante DEM como superposición de esferas. Los contactos y la fuerza-deformación de las partículas se calcula con técnicas estándar para integrar el comportamiento de cada esfera como el de la partícula global (Favier et al., 1999).

Gracias al avance tecnológico, la capacidad y potencia de cálculo han crecido exponencialmente y aunque hubo modelos que seguían siendo bidimensionales (Cleary, 1998) esta mejora computacional a nivel de software, pero también de hardware, ha permitido la simulación de geometrías tridimensionales (Cleary and Sawley, 2002). 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 (Muro, 2015).

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).

2.4.4.4 DEM en el marco específico de la presente investigación

Existe una clara tendencia generalizada de reducción de modelos que consiste en simplificar los sistemas de partículas comprimidos para reducir el elevado coste computacional (Boukouvala et al., 2013). Al tiempo que la complejidad de los sistemas crece exponencialmente, como por ejemplo gracias a la inclusión de técnicas FEM (método de elementos finitos) o CFD (dinámica de fluidos computacional) que a su vez ayudan a solventar otros problemas, el esfuerzo por realizar controles y simulaciones reales de optimización es aún mayor. Por ello, surgen los modelos de orden reducido (ROM), que son de menor dimensión y coste computacional bajo respecto al modelo de escala completa, de análisis multivariable y como destacan los modelos gray-box, data-driven o POD (Lucía et al., 2004) (Kahrs and Marquardt, 2007).

Como ya se ha comentado, en el caso de la industria farmacéutica, el empleo de comprimidos está muy extendido, dado que es una manera muy común de dispensar medicamentos a un paciente. Por ello, existe un sinfín de literatura publicada no sólo entorno a los comprimidos sino también a la maquinaria que los genera, aunque numerosos aspectos de la tecnología del flujo de material particulado en este ámbito se desconocen o no se entienden correctamente (Ketterhagen, 2015). El caso de la homogenización de materiales granulares y el empleo de DEM, la deformación viene

dada por el desplazamiento relativo de partículas dentro del volumen representativo y la relación esfuerzo – deformación por todas las interacciones ocurridas en dicho volumen (Jerier and Molinari, 2011). En la formulación de los lubricantes, dando por supuesto su compatibilidad con el principio activo, hay que tener en cuenta la hidrofobia de los mismos, en relación a su solubilidad (Wang et al., 2010)

En el caso de la compactación de material en polvo es importante considerar entre las partículas la fricción y deformación plástica locales, en tanto en cuanto se produce la evolución de la estructura interna del comprimido en el ensamblado de las partículas durante la fase de consolidación (Sheng et al., 2003).

El modelo del dosificador automático de aditivo alimentario encontrado en las investigaciones otrora realizadas, responde primeramente al hallazgo de los parámetros de los materiales que conforman el propio modelo mediante simulación; se realizaron diferentes experiencias reales con el dispositivo de dosificación y su posterior comparación con diferentes baterías de simulaciones, variando los parámetros de las interacciones de los materiales, hasta ir encontrando los valores que más se asemejaban a la realidad. Esos parámetros responden al coeficiente de restitución, coeficiente de rozamiento estático y coeficiente de rozamiento dinámico para las interacciones entre comprimido-comprimido y comprimido-dosificador (sal-policarbonato). Otra faceta importante para la construcción y validación del modelo es la obtención del set óptimo de funcionamiento del sistema dosificador, siendo susceptibles de estudio la velocidad de serialización y el ángulo de inclinación del depósito.

Así, para el caso de la inclinación, el cómo afecta al resultado final del modelo es que, a mayor pendiente mayor agolpamiento de los comprimidos en el sistema de salida, debido a que alcanzan una mayor velocidad lineal, hecho no positivo debido al sufrimiento de los comprimidos y por ende pérdida de integridad y principio activo de los mismos. En el caso de pendiente más baja, que resulta insuficiente, la dosificación no se realiza correctamente, quedando comprimidos sin expulsar, aunque el número de contactos y las fuerzas tangenciales entre comprimidos son menores que para inclinaciones mayores, por lo que se produce un menor desgaste.

La otra variable de proceso estudiada atiende a la velocidad de serialización del sistema. Se puede decir que una velocidad baja produce unas fuerzas de compresión bajas en las partículas, independientemente del ángulo de inclinación del depósito establecido, ya que el choque entre discos y partículas es menor. También se da para una mayor velocidad de giro de los discos, una contribución al mayor apelmazamiento y atasco de comprimidos.

Se determinó, por tanto, que el caso más favorable corresponde para la configuración de set óptima del sistema dosificador atiende al caso de caso de ángulo de inclinación 16° y velocidad moderada de 1.4 revoluciones por segundo (Guerra, 2011).

Se encontró la relación óptima entre ellas, minimizando los contactos entre los comprimidos, para evitar desgaste, minimizando las tensiones en los comprimidos, para evitar rotura y por ello se optimizó la manera de dosificación correcta, entendiendo así el dispensar el mayor número de comprimidos en el menor tiempo posible, habiendo respetado su integridad, dado que el cien por cien de la materia constitutiva del comprimido es materia activa.

Atendiendo a lo visto anteriormente se puede describir el punto de partida actual de la presente investigación. Cabe destacar que se parte de buenos modelos tanto de la geometría como de comprimido, hecho comprobable debido a la alta similitud entre los ensayos y test reales en correspondencia con las simulaciones implementadas. Siguiendo con el modelo de comprimido, resulta bueno a la hora de obtener una simulación similar al comportamiento real del dispositivo, sin suponer un coste computacional alto.

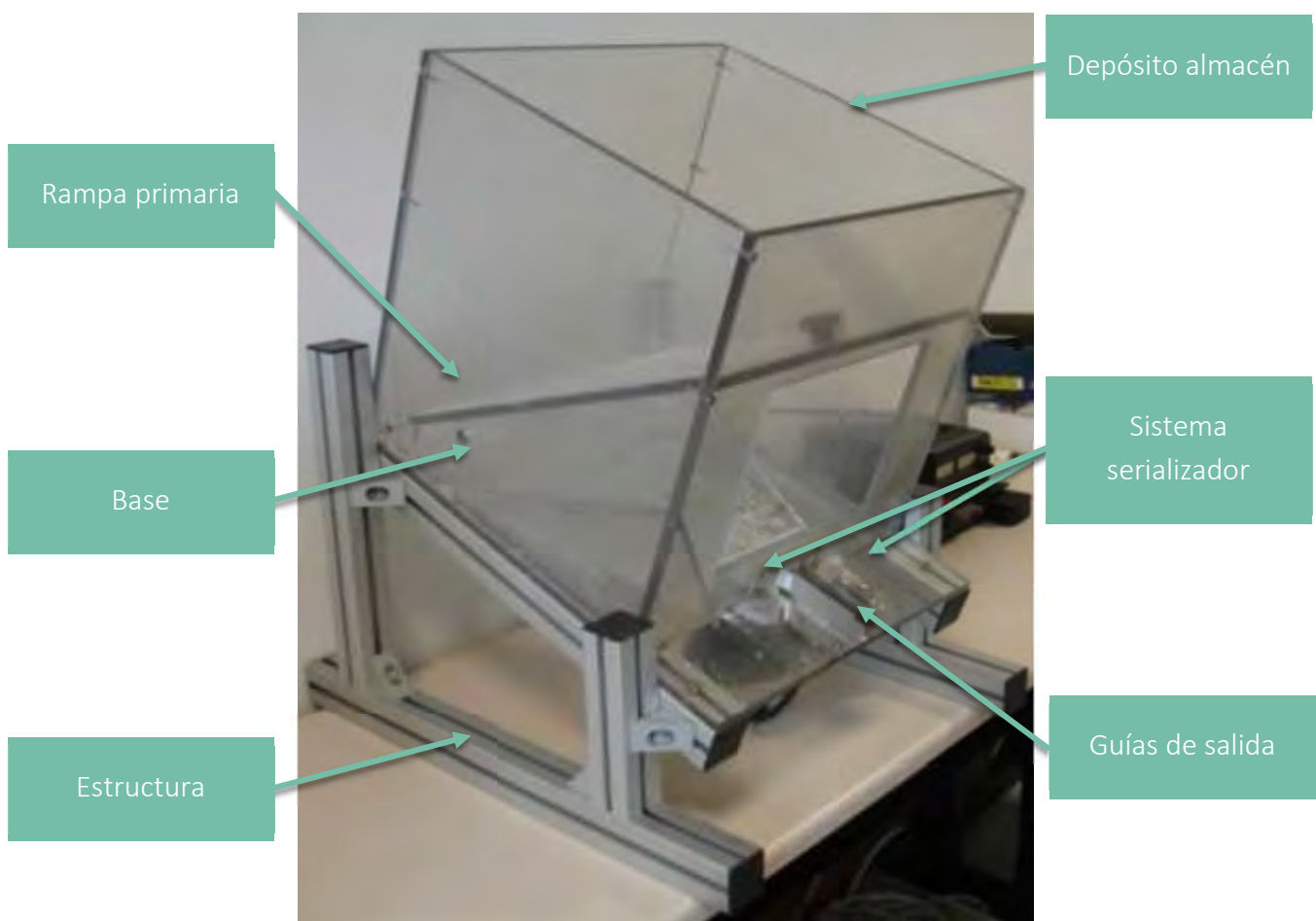


Figura 6. Dispositivo dosificador automático de aditivo alimentario comprimido

Por otro lado, la aproximación de partida de los parámetros intrínsecos a los materiales y sus interacciones se puede considerar bastante aceptable, una vez más, por la fidelidad de resultados entre simulación y realidad.

Así, se tiene como punto de partida un modelo con una configuración que cumple con una buena velocidad de serialización, rápida, constante y sin atascos, con unas fuerzas de compresión bajas, lo que respeta la integridad del comprimido y la seguridad, y por último asegura un buen funcionamiento independientemente del número de comprimidos a dosificar. Ahora es momento de mejorar y optimizar el funcionamiento de todo el sistema.

Capítulo 3

Metodología

3 Metodología

3.1 Materiales empleados

3.1.1 Sistema dosificador

Como se ha venido diciendo en el presente trabajo, se dosifica en seco, y de manera automática, aditivo alimentario comprimido por medio de un sistema dosificador, con el objeto de realizar un aditivado limpio, sostenible y libre de residuos. Los materiales constitutivos del prototipo se resumen en dos, aluminio, material en el que está fabricada la estructura del dosificador y las guías de salida del sistema serializador (que interactúa con los comprimidos), y policarbonato, polímero en el que está fabricado el depósito almacén de aditivo comprimido y a su vez los discos del sistema de salida, que serializa

en una hilera los comprimidos. Se detallan, a continuación, las características más relevantes de ambos materiales.

3.1.1.1 Policarbonato

Notar, que el diseño actual sigue fiel al desarrollado originariamente en la patente del grupo de investigación, pero con las salvedades en las variables de proceso y topologías a optimizar. Una vez realizado un primer diseño del depósito de comprimidos en metacrilato, se decidió realizar una mejora de éste desarrollándolo en policarbonato.

Tabla 1. **Policarbonato. Propiedades**

Propiedades fundamentales del policarbonato

Densidad	1200 kg/m ³
Temperatura de uso	-100 a 135 °C
Punto de fusión	250 °C
Alargamiento a la rotura	100 - 150 %
Coefficiente de fricción	0.31
Dureza	Rockwell M70
Módulo de tracción	2.3 - 2.4 GPa
Módulo de corte	8.97 GPa
Coefficiente de Poisson	0.37
Resistencia a la compresión	> 80 MPa
Resistencia a la tracción	55 - 75 MPa

El nombre de este material se basa en que se trata de una larga cadena de polímeros que presentan grupos funcionales unidos por grupos carbonato.

El policarbonato es un material que está preparado para recibir impactos y, al ser transparente, es una muy buena alternativa al vidrio. Además, es un material preparado para soportar condiciones meteorológicas extremas y utilizable para aplicaciones tanto en la intemperie como en el interior.

Existen variedades con diferentes propiedades como anti reflectantes, con superficies técnicas de alta resistencia contra abrasiones o con tratamientos de alta dureza. El policarbonato pertenece a un grupo de termoplásticos fáciles de trabajar y moldear,

siendo ampliamente utilizados en la manufactura moderna. Una ventaja de este material es que es posible elaborar cualquier tipo de pieza bien sea mediante corte, curvado, roscado, termoconformado, moldeado, torneado o pulido, entre otras.



Figura 7. Policarbonato. Fuente: <http://www.instalacionesyproyectosplasticos.es/>

3.1.1.2 Aluminio

La estructura soporte del dispositivo dosificador de aditivo, está realizada en aluminio. Al mismo tiempo, las guías del sistema serializador del dosificador automático, están construidas en aluminio y consisten la parte final del sistema de salida que hace que los comprimidos de aditivo alimentario discurren a destino en hilera.

Tabla 2. Aluminio. Propiedades

Propiedades fundamentales del aluminio

Densidad	2689 kg/m ³
Masa atómica	26.9815 u
Punto de fusión	660 °C
Alargamiento a la rotura	10 - 25 %
Dureza Mohs	2.75
Módulo de elasticidad	70 GPa
Coefficiente de Poisson	0.35
Resistencia a la tracción	230 - 570 MPa

El aluminio es un material resistente a la corrosión, a la intemperie y al agua de mar, gracias a la capa de óxido de aluminio formada. Es de fácil mecanizado debido a su baja dureza, maleable por lo que permite la producción de láminas muy delgadas, dúctil, es un material blando (Escala de Mohs: 2-3-4).



Figura 8. Aluminio en formato perfil estructural. Fuente: <http://www.diprax.es/>

El aluminio reacciona con facilidad con el ácido clorhídrico (HCl), el hidróxido de sodio (NaOH) o el ácido perclórico (HClO₄), pero en general resiste la corrosión debido al óxido. Sin embargo, cuando hay iones Cu²⁺ y Cl⁻ su pasivación desaparece y es muy reactivo. El óxido de aluminio es tan estable que se utiliza para obtener otros metales a partir de sus óxidos (cromo, manganeso, etc.) por el proceso aluminotérmico. Debido a su elevado estado de oxidación se forma rápidamente al aire una fina capa superficial de óxido de aluminio (Al₂O₃) impermeable y adherente que detiene el proceso de oxidación, lo que le proporciona resistencia a la corrosión y durabilidad. Ciertas aleaciones de alta dureza presentan problemas graves de corrosión.

3.1.2 Comprimidos alimentarios

3.1.2.1 Sal

El constituyente principal del comprimido de aditivo alimentario, empleado en este estudio, es la sal. Es materia prima fundamental en la industria conservera en la producción mayor parte de verduras y hortalizas en conserva u otros preparados alimenticios, empleada tanto como conservante como potenciador de sabor. Es un compuesto químico cuya formulación es NaCl, es decir, cloruro de sodio, estando

formado por un catión sodio (Na^+) y un anión cloruro (Cl^-), y, como tal, puede reaccionar para tener cualquiera de estos dos iones. Es una sal iónica y, como la mayoría de ellas, es capaz de variar la presión de vapor de la disolución, elevar el punto de ebullición y descender el punto de congelación según su concentración molar.

Su estructura cristalina pertenece al sistema cúbico. Cada ion se acomoda en el centro de un octaedro regular quedando rodeado por seis iones de cargas opuestas distribuidos en los distintos vértices del octaedro. El cloruro de sodio químicamente puro no es higroscópico, el que la sal ordinaria se humedezca se debe a las impurezas de cloruro de magnesio, sustancia que sí absorbe la humedad atmosférica.

Desde tiempos inmemoriales, se utiliza para desecar alimentos, para conservar, al fin y al cabo, y esta característica es gracias a su poder osmótico, capaz de deshidratar un amplio espectro de virus y bacterias en estado no-esporulado, siendo razón por lo que ha sido usada como conservante. La salazón de la carne es una forma de preservar ésta de la acción bacteriana, ya que la sal retrasa la descomposición proteica.

Tabla 3. Sal. Propiedades

Propiedades fundamentales del Cloruro de Sodio

Densidad	2170 kg/m ³
Masa molar	58.44 g/mol
Punto de fusión	801 °C
Punto de ebullición	1413 °C
Solubilidad en agua	360 g/l
Dureza	18.2
Límite elástico	2.4 MPa
Coefficiente de Poisson	0.252
Resistencia a la tracción	230 - 570 MPa
Módulo de corte	8.97 GPa
Módulo de compresibilidad	24.42 GPa
Módulo de Young	39.98 GPa

Una ingesta adecuada de cloruro de sodio tiene muchas ventajas para la salud. Es un componente esencial de todos los fluidos corporales, como la sangre. Es necesario para el ser humano, su consumo debe ser comedido, puesto que un exceso no resulta

beneficioso para la salud. Por eso las conservas y otros alimentos preparados deberían llevar una cantidad equilibrada, aunque, en muchos casos, la cantidad es excesiva para la salud, pero apropiada para el proceso industrial (por ejemplo, en la fabricación de embutidos). Las propiedades más relevantes del cloruro de sodio se presentan en la tabla 3.

Otra característica de este compuesto es que es fácilmente soluble en agua e insoluble o ligeramente soluble en la mayoría del resto líquidos. Es inodoro, transparente, incoloro y pequeño en forma de cristales cúbicos blancos.



Figura 9. Diferentes formatos de sal. Fuente: <http://www.cloradoressalinos.es>

Se presenta en varios formatos: fina, o de mesa para la alimentación. Gruesa para alimentación o ámbito industrial, muy gruesa para descalcificar máquinas que trabajan con agua, uso agrícola o ganadero, y deshielo de carreteras. En escamas, extraída por proceso natural sin moler para uso alimentario. Comprimido, para alimentación o descalcificación (Muro, 2015).

3.1.2.2 Materiales empleados en la fabricación del comprimido

Existe una relación directa entre el diámetro que determina la concavidad de los punzones y la presión máxima que se puede ejercer para conformar una pastilla.

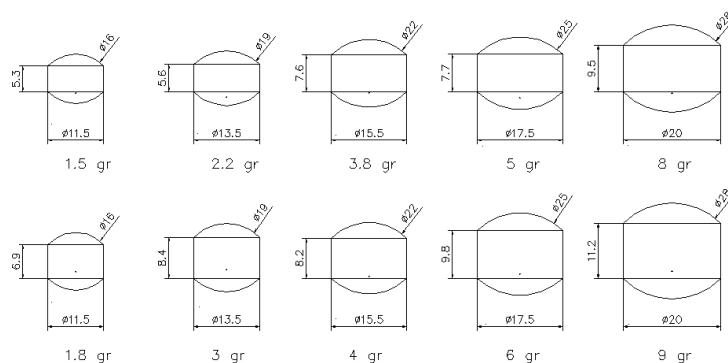


Figura 10. Geometría de diversas morfologías de comprimido de aditivo alimentario

Cuanto menor es la curvatura de los casquetes, mayor es la presión que puede aplicarse sin que el material de la pastilla se adhiera a la superficie de contacto de los punzones. Esta disminución en la curvatura tiene como límite inferior la concavidad necesaria para que las pastillas rueden una respecto de otras en el depósito principal del dosificador.

La mayoría de los problemas existentes a la hora de fabricar comprimidos están relacionados con el desgaste (ataque físico) y la corrosión (ataque químico) de los punzones. Las paradas en la producción para pulir los troqueles eran continuas y la vida útil de los punzones se reducía con cada repaso. El material inicial en el que los punzones estaban fabricados es acero f-521 templado y revenido. Pero, con el propósito de mejorar en este punto tan crítico, se realizó una búsqueda exhaustiva sobre posibles metales y recubrimientos para los punzones tales como carburos de cromo y de tungsteno, recubrimientos de nitruración, de cromo o de carburo de titanio y carburo nitruro de titanio.



Figura 11. Punzones recubiertos de carburo de cromo (izq.) y tungsteno (dcha.)

Otra opción, la del acero pulvimetalúrgico, fue muy superior al resto de las alternativas en términos de número de comprimidos fabricados sin necesidad de pulido y en calidad de los comprimidos obtenidos, ya que con este material era posible aplicar una presión de conformación mayor que la habitual. El acero CPM 420V, es un acero inoxidable pulvimetalúrgico hipercarburado de altísima resistencia al desgaste, oxidación y corrosión con buena pulibilidad. Adecuado para matricería, estampación-corte, herramientas de extrusión que exigen inoxidable (química, plásticos, cauchos...), ejes, válvulas, husillos, matrices. Tiene gran aplicación en industria de la alimentación, cirugía y farmacia (compactación medicamentos). La clave del éxito de este material frente al resto se debe a sus magníficas prestaciones frente a los problemas críticos a la hora de comprimir pastillas: el desgaste físico propio de la erosión y la corrosión química producida por los ingredientes de las mezclas (principalmente sal). En las siguientes figuras, se puede observar los valores de resistencia al desgaste y vida relativa (vida

relativa por corrosión) del acero CPM 420V INOX frente al acero UNE, F-521) que es el que ha sido empleado hasta este momento.

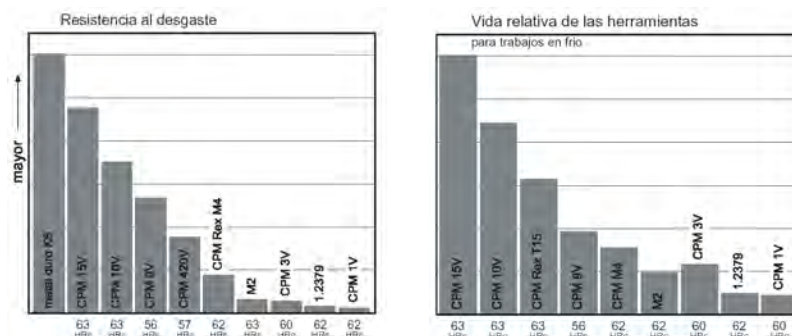


Figura 12. Características del acero inoxidable CPM 420 C. Fuente (Alba, 2004)

Otro de los elementos fundamentales a la hora de la compresión es la matriz que sirve para contener el material el aditivo durante la compresión. Este elemento soporta un gran desgaste producido por el rozamiento que se produce cuando el punzón inferior, una vez conformada la pastilla, la expulsa del alojamiento de la matriz.

Las máquinas de compresión que se emplean actualmente poseen varios punzones con sus respectivas matrices, lo que permite conformar varias pastillas en cada ciclo de compresión. Estos alojamientos están mecanizados en una única pieza. Cuando uno de estos alojamientos ha sufrido un desgaste excesivo que repercute en la calidad de la pastilla, queda inutilizado de manera permanente o hasta que se realice un pulido de esta matriz, con la consiguiente pérdida de productividad por ciclo de compresión.



Figura 13. Matriz con casquillo intercambiable

Para solucionar ambos problemas se ha estudiado la posibilidad de emplear matrices intercambiables. En este caso, los casquillos son de acero cementado. Este material es el

mismo empleado para los casquillos guía para taladrado. En las pruebas realizadas estos casquillos se han comportado de manera excepcional, sin mostrar síntomas de desgaste después de fabricar un gran número de pastillas. Además, se ha realizado un diseño que permite cambiar el casquillo desgastado por otro, de manera inmediata y sin tener que sustituir toda la pieza que contiene los alojamientos de los restantes punzones. La pieza base se construyó de acero F-522, en la que se mecanizó el alojamiento un casquillo guía para taladrar DIN 172 (A).

3.1.2.3 Acero

El acero es el material que sirve como punto de partida para la fabricación de los comprimidos. Por ello, y por ser un material extremadamente utilizado y popular y que se ha estudiado en todas sus vertientes, por lo que está perfectamente definido en lo que a propiedades fisicoquímicas se refiere, se ha asumido como constituyente de los punzones en las simulaciones realizadas.

Existen multitud de tratamientos específicos en función del acabado o la temperatura, numerosas aleaciones de diferentes metales etc. que originan diferentes tipos de acero, que además serán óptimos para un tipo de aplicación u otra, además diferentes procesos de fabricación del mismo que lo dotan de unas propiedades características.

Las características básicas, y al mismo tiempo relevantes en el objeto de su empleo en esta investigación, son mostradas a continuación.

Tabla 4. Acero. Propiedades
Propiedades fundamentales del Acero

Densidad	7850 kg/m ³
Punto de fusión	1535 °C
Punto de ebullición	2740 °C
Límite elástico	600 MPa
Coefficiente de Poisson	0.3
Módulo de corte	85 GPa
Módulo de compresibilidad	160 GPa
Módulo de Young	210 GPa

3.1.3 Software DEM utilizado

El software empleado en esta tesis doctoral, y que se basa en el método de elementos discretos DEM (Discrete Element Method), es **EDEM SOFTWARE**, creado por DEM Solutions, compañía escocesa. La versión empleada es la EDEM Academic v2.7.



Figura 14. EDEM Software logo

Este software, de interfaz sencilla, dispone de diferentes módulos para el desarrollo de aplicaciones de usuario. El primero de ellos es el módulo **CREATOR** en el que se definen y parametrizan los sistemas a simular. Se introducen las características físicas de los materiales y sus interacciones, las geometrías que componen la morfología del sistema y sus dinámicas (cinemáticas lineales, rotacionales, senoidales etc.) y dimensiones, y, por supuesto, las partículas y sus propiedades, tamaño y material constitutivo, así como su origen y ritmo generación; además de ser posible la importación de plantillas o geometrías generadas mediante programas de **CAD**, como CATIA en la presente tesis doctoral. El siguiente módulo disponible es el de simulación, llamado **SIMULATOR**, en el que se fijan los parámetros de simulación, tiempo de simulación, tiempo de guardado de datos, celdas de la rejilla para el cálculo y posicionamiento de partículas etc. para poder optimizar las simulaciones. Por último, el módulo **ANALYST**, en el que se pueden obtener gráficas y estudiar los resultados obtenidos en la simulación como contactos, fuerzas de contacto, velocidad lineal y de rotación, diferentes parámetros físicos etc. con el objetivo de interpretar los datos obtenidos. Se pueden exportar, a su vez, para hacer labor de minería de datos, a archivos de texto asimilables después por otro tipo de procesadores de cálculo.



Figura 15. Módulos que constituyen EDEM

3.2 Metodología aplicada en las simulaciones DEM

3.2.1 Generalidades

Una simulación del método de elementos discretos comienza primeramente con la generación de un modelo, el cual, es el resultado de la ordenación especial de una serie de partículas a las que se le asigna una velocidad inicial. Las fuerzas que actúan en cada una de las partículas se calculan en función de las leyes físicas, las propiedades del modelo y sus contactos. Generalmente una simulación consiste en tres partes diferenciadas: inicialización, el cálculo paso a paso y post-procesado.

A nivel macroscópico se tienen en cuenta la fuerza de fricción, cuando dos partículas en contacto, el contacto plástico o retroceso en una colisión, la gravedad, potenciales de atracción, como son cohesión, adhesión o atracción electrostática. Cabe destacar que debido a estas fuerzas y en función del tamaño de las partículas, se puede necesitar un gran rango de resolución lo que incrementaría mucho el coste computacional o necesitaría algoritmos especiales para resolver las iteraciones.

A nivel molecular, se considera la fuerza de Coulomb, como fuerza electrostática de atracción o repulsión que portan carga eléctrica, el principio de exclusión de Pauli, cuando dos átomos se acercan a otro, y las fuerzas de Van der Waals. Estas fuerzas se añaden para encontrar la fuerza total que actúa en cada partícula. Se emplea un método de integración para computar el cambio en la posición de cada partícula y su velocidad durante un tiempo de muestreo, usando las leyes de Newton. Una vez calculadas las posiciones, se obtienen los resultados de fuerzas sobre cada partícula en el siguiente paso, y así, sucesivamente, se repite el bucle antes que termine el tiempo de simulación.

La ley de Newton proporciona la relación fundamental entre el movimiento del sistema de partículas y las fuerzas que causan dicho movimiento. El sistema de fuerzas puede estar en equilibrio estático cuando estas no están en movimiento o no actúan fuerzas sobre los diferentes elementos distintos o el medio en cuestión. Las fuerzas, los desplazamientos, tensiones y deformaciones son determinados a nivel de cada contacto entre los elementos distintos.

3.2.2 Fases de las simulaciones del estudio

Para hacer más comprensible el desarrollo del estudio, se presenta un pequeño esquema de cómo transcurren los diferentes pasos seguidos en las simulaciones, agrupados en una serie de fases, que compendian este texto.

- ◆ Fase I - Simulaciones preliminares para la obtención del nuevo modelo de comprimido
 - i.a confección de modelo con geometría simple
 - i.b ajuste de las variables de proceso en la compresión
 - i.c búsqueda de los parámetros de simulación
- ◆ Fase II - Obtención del nuevo modelo de comprimido
 - ii.a configuración del modelo definitivo, geometrías y parámetros de simulación
 - ii.b estudio de diferentes tamaños de las partículas de composición
- ◆ Fase III - Ensayo del modelo de comprimido en el sistema dosificador
 - iii.a estudio del método del reemplazo de partículas
 - iii.b simulación de los diferentes comprimidos obtenidos
 - iii.c validación del modelo de partida, variables de proceso
 - iii.d validación del modelo de comprimido óptimo
 - iii.e modificación del sistema de salida

3.2.3 Pruebas preliminares

3.2.3.1 Acotación de parámetros en la aproximación al modelo de comprimido

Como primera fase del presente estudio, se pensó en mejorar el modelo de comprimido que ya se diseñó en investigaciones anteriores, basado en un compendio de un número de partículas solapadas, superpuestas. Es un recurso extendido el de solapar esferas para crear partículas complejas (Song et al. 2005). Este modelo resulta válido como aproximación al comportamiento real de los sistemas, pero es interpretado como un todo, no dando lugar a desprendimientos de las propias partículas que conforman el comprimido, lo que le resta veracidad desde un punto de vista físico, aunque se mantenga fiel en el comportamiento dinámico como sólido. Es por ello que se decidió mejorar el modelo de comprimido.

Gracias a los avances dados en las técnicas y paquetes software de simulación de elementos discretos, y en los métodos numéricos de aproximación de los modelos de comportamiento físico, entre partículas, se pensó ir más allá y generar un comprimido un tanto más real. Dado que es ardua la tarea de generar un sistema de ecuaciones que determine el centro de las n partículas de un radio r que conformen y rellenen el volumen del comprimido objeto de estudio, se pensó en “fabricarlo” mediante simulación directa.

Tanto es así, que se diseñó un modelo con las propias geometrías disponibles en EDEM basado en una prensa especializada, cuya marca es Bonalds y el modelo bf-352, que es

con la que, en su momento, se fabricaron los comprimidos en la realidad. Una imagen del modelo se puede ver a continuación.

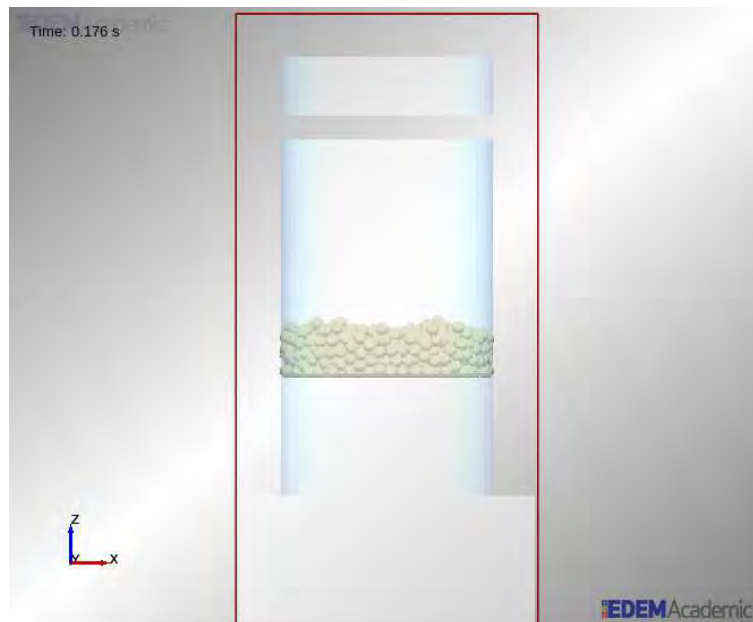


Figura 16. Modelo de compresión simplificado

El modelo simplificado desarrollado, consiste en una matriz donde se aloja del material particulado y una pareja de punzones, superior e inferior, que discurren por el interior de la matriz, para aplicar la presión necesaria para conformar y generar el comprimido de aditivo alimentario (sal). Los comprimidos generados en esta primera etapa son cilíndricos. En simulaciones posteriores se conformarán con su forma definitiva.

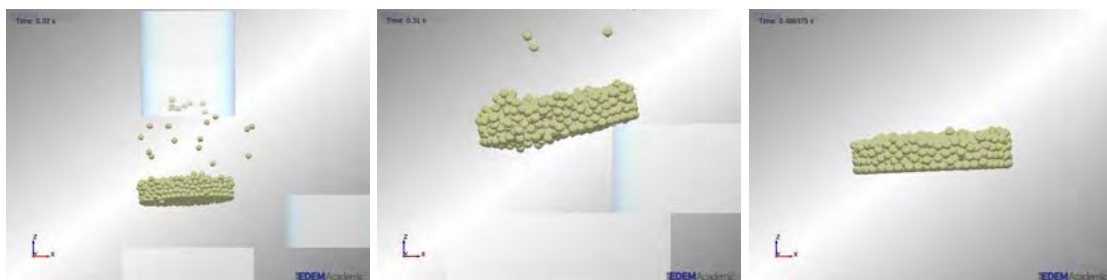


Figura 17. Comprimido deformado por tensiones de salida (izq. y centro) Comprimido correcto (dcha.)

El hecho de simplificar la geometría hasta este punto tan básico es debido a querer minimizar el coste computacional de las simulaciones, para tratar de invertir el menor tiempo posible, ya que, fundamentalmente, este estudio previo tiene como primer objeto encontrar los parámetros de funcionamiento del sistema óptimos, desde un punto de vista mecánico, tales como:

- ◆ Velocidad de movimiento de punzón superior (velocidad de compresión)

- ◆ Tiempo de aplicación de la presión para un buen conformado
- ◆ Velocidad de salida de los punzones, para no generar tensiones y deformaciones innecesarias en la pastilla (ilustración 17)

Se realizarán baterías de simulaciones para encontrar la configuración más económica computacionalmente hablando, y consiguiendo al mismo tiempo como resultado, comprimidos de aditivo con una morfología (criterio visual) y cohesión (número de contactos) correctas.

El siguiente leitmotiv fundamental de este estudio previo es obtener los parámetros propios de los materiales, así como los valores de la configuración del método de cálculo de las interacciones entre partículas, para alcanzar resultados similares a los comprimidos que se obtuvieron en las fabricaciones reales previas.

3.2.3.2 Valor de los parámetros fundamentales

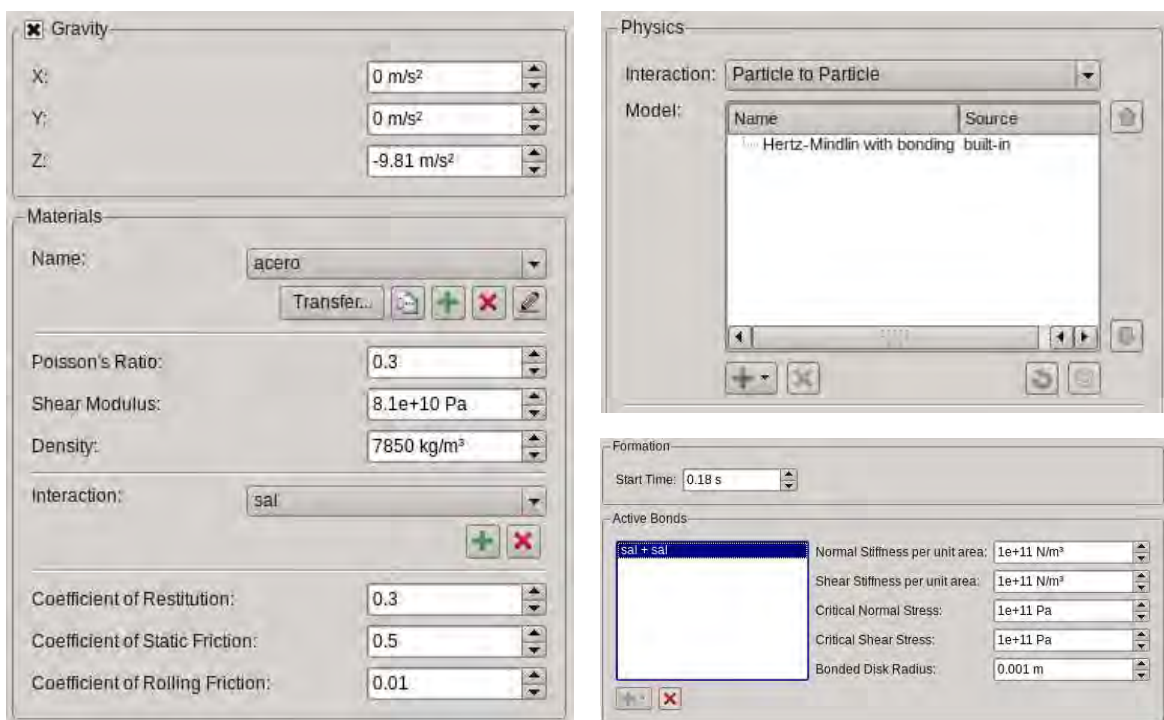


Figura 18. Variación de parámetros en los comprimidos cilíndricos de las pruebas preliminares

Viendo de manera global la cantidad de variables y parámetros determinantes a la hora de encontrar un resultado fiel al comportamiento real de las partículas que conforman el comprimido, dada la imposibilidad de determinar algunos de ellos de manera experimental, y debido al amplio rango en el que se puede mover su valor, la manera más 'rápida' de encontrar para el sistema dosificador un ajuste óptimo, es realizando baterías de simulaciones.

Es por ello, que lo pretendido es encontrar una zona de confort, en la que se abarque una combinación razonable de los parámetros y su valor. Incluso, se da el caso en el que a algunos parámetros se les puede asignar un valor irreal o desmedido, desde el punto de vista físico, aun dando resultados de simulación óptimos. Este fenómeno es debido a las simplificaciones que realiza el método de elementos discretos.

Estos parámetros a estudiar serían:

- ◆ Parámetros de material
 - Densidad del compacto
 - Densidades propias de los materiales
 - Módulo de corte
 - Coeficiente de restitución
 - Fricciones dinámica y estática
 - Coeficiente de Poisson
- ◆ Parámetros de configuración del modelo
 - Velocidad de los punzones del sistema de compresión
 - Tamaño de partículas, generación de partículas y el número óptimo de las mismas
- ◆ Parámetros de configuración de las físicas de EDEM

3.2.3.3 Métodos de aplicación de las interacciones físicas. Modelos de contacto

El software de elementos discretos EDEM, dispone de diferentes técnicas para calcular las interacciones entre partículas y entre éstas y las diferentes geometrías de un sistema. Estos modelos de contacto se describen someramente a continuación.

Hertz-Mindlin no slip Es el método básico con el que el paquete software calcula por defecto. En este método no es posible la modificación de parámetro alguno.

Hertz-Mindlin with bonding Es un método, de contacto elástico, que incluye en el cálculo a la técnica anterior, por lo que sería redundante emplear ambos. En este caso se pueden modificar varios parámetros e incluir tantas interacciones para los contactos de las partículas como combinaciones entre tipos de partícula y geometrías (material) haya. En la ilustración número 18, se pueden observar los parámetros del método y las unidades de trabajo, a saber:

- ◆ **Tiempo de comienzo** Es el instante de aplicación del enlazado de partículas
- ◆ **Rigidez Normal** Rigidez a la tracción y compresión en la dirección del eje principal de cada contacto (enlace)

- ◆ **Rigidez a cizalladura** Rigidez al cizallamiento en el plano ortogonal al eje del enlace
- ◆ **Tensión normal crítica** Valor máximo de la tensión normal que puede tolerar un enlace antes de llegar al fallo por rotura
- ◆ **Tensión cortante crítica** Valor máximo de la tensión tangencial que puede tolerar un enlace antes de llegar al fallo por rotura
- ◆ **Radio de contacto** El radio de contacto del cilindro generado en la unión

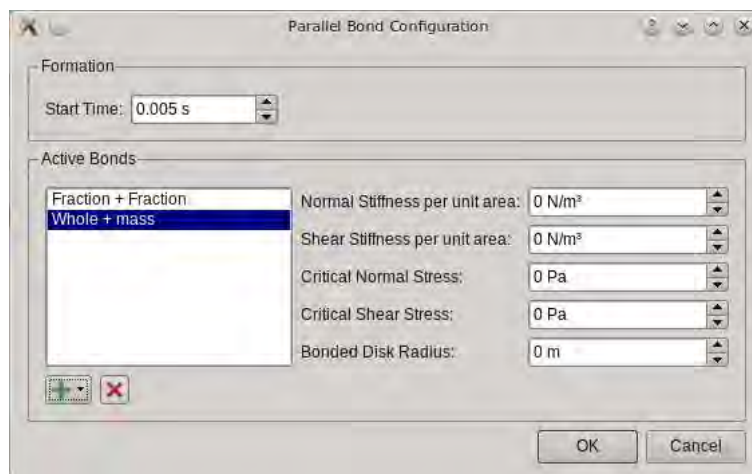


Figura 19. Ventana de configuración del método H.M.w.B. de EDEM

Linear cohesión Es una variación del método Hertz-mindlin en el que se incluye una fuerza de cohesión normal y no existen los contactos como en el modelo H.M. with bonding. Se puede modificar la densidad de energía, que indica la deformación por volumen y se ha de usar junto con la técnica Linear Spring, modelo de contacto elástico.

H.M. JKR Cohesión Es una variación en la cohesión para materiales humectados.

Histeryc spring Es un método de contacto elasto-plástico, con la inclusión de ecuaciones mecánicas, se observa la deformación elástica hasta un valor de tensión y la deformación plástica a partir del mismo.

Dado que esta investigación es una parte de un estudio global, que comprende desde la adecuación, pretratamiento y mezcla de diferentes recetas de aditivo, diversas técnicas de compactación y fabricación de los comprimidos con su posterior dosificación, ya existe otro estudio publicado (Muro, 2015) que se encarga de valorar el uso de todas estas técnicas de contacto entre partículas en la compresión, cuyos resultados sirven en parte como punto de partida de la presente investigación, por lo que se decidió, en este punto, emplear en la generación del nuevo modelo de comprimido de aditivo alimentario solamente una de ellas, *Hertz-Mindlin with bonding*, método que se comporta de manera

correcta en los procesos de compactación y cohesión de partículas, otorgando resultados óptimos.

3.2.4 Obtención del nuevo modelo de comprimido

3.2.4.1 Repetibilidad de las simulaciones

Una característica relevante de este método de simulaciones es la aleatoriedad en el propio proceso de ejecución. Viene determinada desde la generación de partículas, dado que la posición, aunque determinable, es solo relativamente fija, ya que sigue siendo inesperada, hasta la propia compactación de las mismas, no sabiendo cómo se van a ir acomodando a medida que la fuerza de compresión va creciendo y sigue siendo una incógnita hasta la fase de consolidación. Esta particularidad sumada con otras hace que para unas mismas condiciones de inicio se obtengan resultados diferentes.

Es por ello que es oportuno encontrar un índice de variabilidad. Este índice, es de gran ayuda a la hora de acotar el recorrido de los diferentes parámetros configurables en la totalidad del sistema.

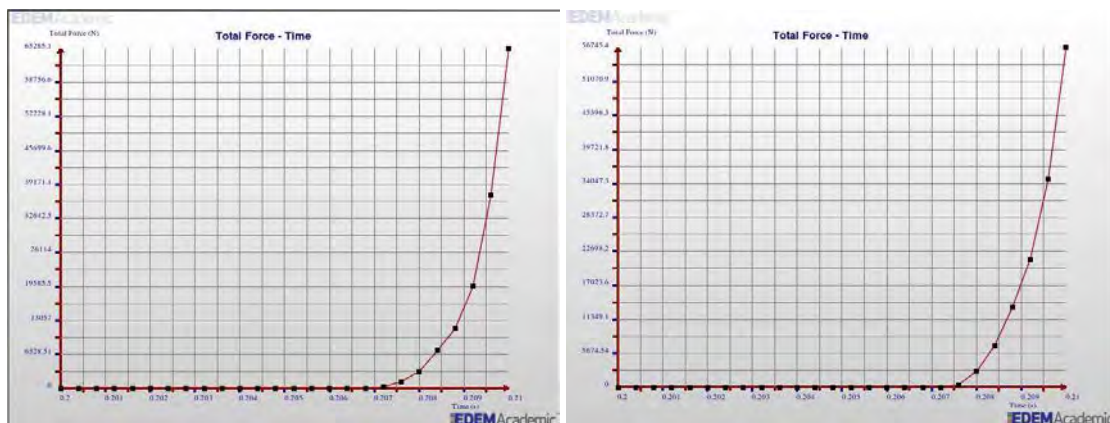


Figura 20. Diferentes resultados de compresión para una misma configuración de parámetros

Tabla 5. Repetibilidad en la batería de simulaciones

Para una misma configuración de simulación se obtienen diferentes resultados

Variable	sim.1	sim.2	sim.3
Enlaces totales	3298	3217	3342
Enlaces intactos	2951	2897	2975
Enlaces rotos	347	320	367
% bondad	89.47	90.05	89.01

Un método que ayuda en este hecho es generar una simulación en la que se fijan los parámetros y condiciones de partícula y geometrías y hasta el instante en que se da el enlace, o cuando comienza la interacción de los punzones con las partículas. En ese momento se realiza una salvaguarda de esos archivos de simulación para posteriormente guardar diferentes versiones de una misma simulación. Supone un importante ahorro de tiempo y coste computacional al mismo tiempo.

3.2.4.2 Fundamentos

Habiendo sido determinado el valor adecuado de los parámetros de las diferentes partes de las simulaciones mediante las pruebas preliminares, se está en disposición de poder simular con las geometrías definitivas para el modelo de comprimido cilíndrico con casquetes en las bases, morfología final del mismo.

Aun disponiendo de esos datos, es conveniente, y así se hará, variar dentro de un pequeño recorrido de valores los parámetros de configuración, interacciones y variables físicas las simulaciones para el hallazgo del modelo de comprimido final, entre otras causas por la aleatoriedad, el cambio de geometría, el número de partículas y su radio.

Al comienzo de esta etapa de la investigación, el software de simulación empleado, **EDEM**, había evolucionado brindando nuevas y diferentes maneras de poder procesar el tratamiento de las esferas o partículas discretas. Tanto es así, que se decidió implementar un nuevo comprimido que se asemejara aún más a la tableta real empleada.

En este punto se decidió, por tanto, crear el comprimido a través de un sistema de compresión simulado. Este sistema consiste en una matriz cilíndrica que alberga el aditivo en polvo, que en el caso de la presente investigación es sal, el cual descansa sobre un punzón inferior que proporcionará la forma de casquete al comprimido. Por la matriz, discurrirá otro punzón, el superior, que comprimirá el aditivo contra el punzón inferior conformándose así la tableta o comprimido de aditivo con su forma final, cilíndrica cubierta por dos casquetes semiesféricos (concavidad de los punzones).

El sistema de compresión empleado, implementado en **CATIA** y modelado mediante **EDEM**, se puede ver en la Figura 21.

El punzón superior descenderá hasta el punto en el que el comprimido queda conformado con la altura del cilindro deseada. Tras unos instantes de compresión, para favorecer la cohesión de las partículas, el punzón superior y la matriz ascienden al tiempo que el punzón inferior desciende para poder liberar el comprimido creado.

Con el fin de optimizar el comprimido, se han generado varios en función del tamaño de la partícula que lo conforma. Los dos parámetros determinantes a la hora de decantarse por un modelo fiable son, por un lado, los intersticios que se pueden generar cuanto

mayor sea el radio de las partículas que dan forma al comprimido y por otro, el tiempo de simulación, no sólo en la generación del comprimido, si no posteriormente en la simulación general del sistema dosificador. Cuanto mayor sea el radio de las partículas, menor será el tiempo de simulación, pero mayor serán los huecos entre partículas, por lo que el comprimido no se comportará de manera del todo real. Por el contrario, cuanto menor sea el radio de la partícula más homogéneo resultará el comprimido modelado, pero habrá un mayor coste computacional.

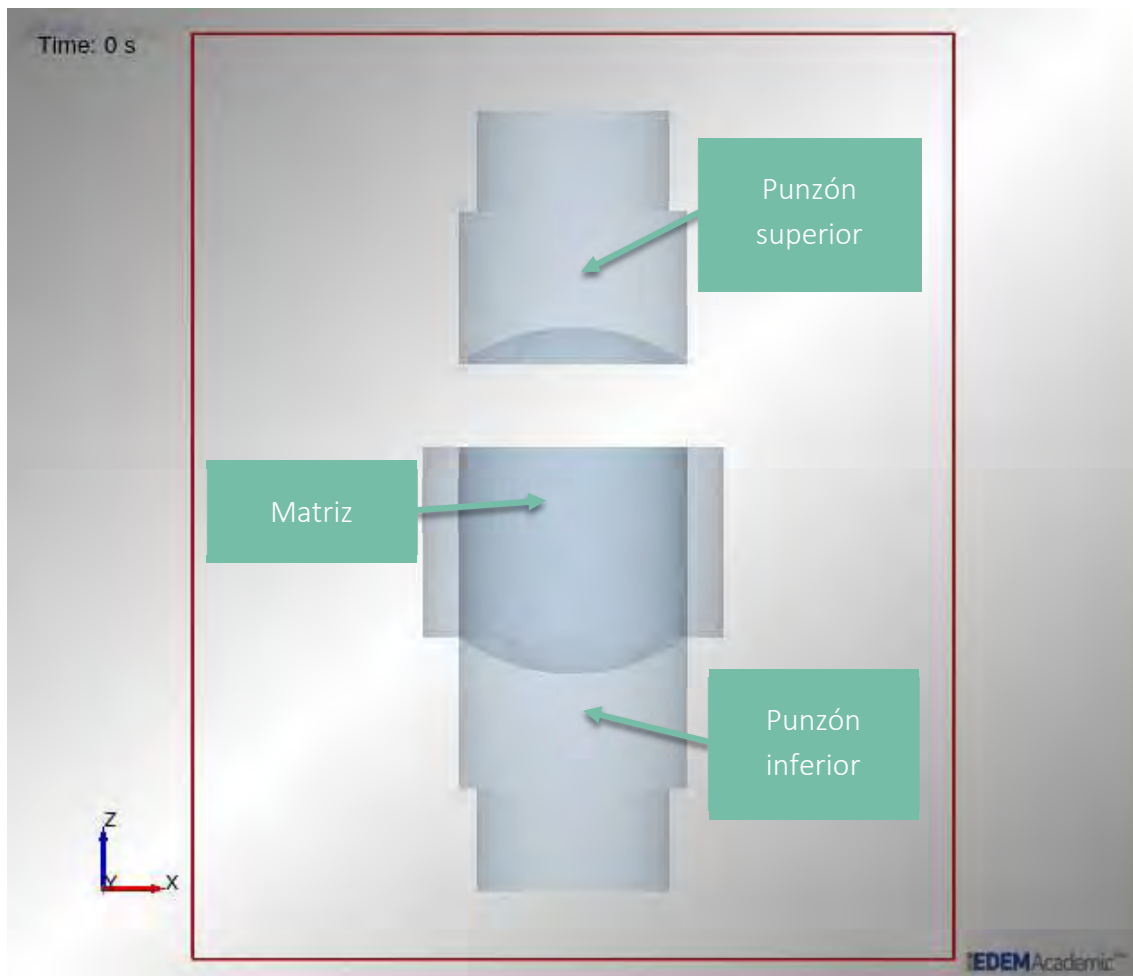


Figura 21. Sistema de compresión de aditivo basado en matriz + punzones

Tabla 6. Dimensiones del comprimido real a modelar mediante EDEM

Dimensiones físicas del comprimido aditivo de sal a modelar

Peso	6 g
Diámetro cilindro	17.5 mm
Altura cilindro	9.8 mm
Diámetro casquete	25 mm

En lo que concierne a la metodología de búsqueda del modelo de comprimido, notar que el que se va a modelar es de seis gramos y sus dimensiones las que se muestran a continuación, según tabla anterior.

El criterio a seguir para alcanzar un buen modelo de comprimido de aditivo alimentario estará basado en tres variables, además de en el aspecto visual del mismo, determinante a la hora de, sobre todo, desechar los resultados de comprimidos no válidos. Las citadas variables son el número de contactos realizados entre partículas, así como la fuerza aplicada para generar el compacto y, por último, el tiempo de simulación, tanto en la generación del comprimido, como en el uso del mismo, que servirá para declinar la balanza hacia el modelo óptimo.

3.2.5 Inclusión del nuevo modelo de comprimido en el sistema dosificador automático

3.2.5.1 Estudio del método de reemplazo de partículas

EDEM software ha diseñado una técnica novedosa que potencialmente brinda un sinfín de aplicaciones. Este método, llamado *particleReplacement*, supone un avance en simulación en el ámbito de los elementos discretos. Hasta ahora había un pequeño escollo, en sí salvable, aunque haciéndolo de una manera tediosa y es que cuando se generaba mediante simulación un compendio particulado, no se podía exportar de ninguna manera para poder emplearlo en otra aplicación o sistema. Para poder hacerlo había que generarlo en un archivo de simulación y cuando estuviese dispuesto para utilizarlo, retirar las geometrías existentes, incluir las nuevas, con el problema que conlleva de emplazamientos y con el hándicap de la unicidad del sistema de partículas generado.

Con este método de reemplazo de partículas, se puede crear en un archivo de simulación el material particulado deseado y exportar a un archivo de texto las coordenadas de los centros de todas las partículas existentes junto con las propiedades que se deseen, aunque, bien es cierto que, en el momento de la importación de las partículas en una nueva aplicación de simulación, lo único relevante son los datos de emplazamiento de cada partícula.

Hecho esto, EDEM pone a disposición del usuario una serie de archivos en los que es necesario modificar una pequeña serie de parámetros para lograr hacerlo funcionar, pero siempre de una manera simple e intuitiva. Estos archivos se enumeran y describen como sigue:

- ◆ **Librería del reemplazo de partículas** Este archivo es el código que ejecuta el cambio de unas partículas por otras. No es configurable.
- ◆ **Preferencias del reemplazo** En este archivo se encuentran los cuatro parámetros fundamentales para que se lleve a cabo con éxito el reemplazo de partículas. Estos son:
 - Nombre del tipo de partícula a reemplazar
 - Nombre del tipo de partícula que reemplaza
 - Relación de escala entre partículas
 - Instante de comienzo del reemplazo
- ◆ **Datos del clúster de partículas** En este archivo se configura la red de partículas generada previamente y que va a sustituir a unas dadas en la aplicación final en la que se quiere estudiar su comportamiento. Los datos configurables son:
 - Número de partículas que compone el compendio de partículas generado
 - Una tabla (separada por tabulaciones) de tres columnas en las que se dispone las coordenadas x , y , z de cada una de las partículas que componen el sistema de partículas, y una cuarta columna compuesta por unos.

Una vez se definen los datos y parámetros, se está en disposición de emplear un compendio de partículas en otras aplicaciones de simulación.

En el caso objeto de estudio, según se encontró el nuevo modelo de comprimido de aditivo alimentario, se realizó el siguiente proceso:

1. Exportación de los centros de las partículas
2. Tratamiento oportuno en un programa de hoja de cálculo para adecuarlo a la tipología necesaria
3. Se realizó la importación en los diferentes archivos de simulación del sistema dosificador de aditivo.

En el momento en el que se tienen los archivos con los datos correctos, se debe incluir en el archivo de simulación, en el apartado de físicas del sistema, un modelo de contacto entre partículas, propiamente llamado *particleReplacement*, en el que no se permite la configuración de parámetro alguno. Para la generación de las partículas, se debe generar una factoría ficticia por el método de transferencia, y así el reemplazo se realizará de manera correcta.

3.2.5.2 Parámetros de definición de la morfología del modelo del sistema

A continuación, se dan unas pinceladas de los parámetros fundamentales de simulación. Estos aspectos son relevantes tanto para simulaciones de las pruebas preliminares, como para las simulaciones de compresión de la consecución del modelo y las realizadas con el sistema dosificador de comprimidos, aunque cada uno de ellos tiene mayor o menor influencia dependiendo del tipo de simulación.

Como ya se ha comentado con anterioridad, se tienen simulaciones y modelos obtenidos de investigaciones previas. Esto es un punto de partida ventajoso porque ya se tiene inercia de cómo acotar y hallar los parámetros críticos de proceso. Por tanto, se parte de una buena aproximación.

3.2.5.2.1 *Fricciones entre partículas*

Se define como fuerza de rozamiento o fuerza de fricción entre dos superficies en contacto a la fuerza que se opone al movimiento de una superficie sobre la otra, fuerza de fricción dinámica, o a la fuerza que se opone al inicio del movimiento, fuerza de fricción estática. Se genera debido a las imperfecciones, especialmente microscópicas, entre las superficies en contacto. Estas imperfecciones hacen que la fuerza entre ambas superficies no sea perfectamente perpendicular a éstas, sino que forma un ángulo con la normal, el ángulo de rozamiento. Por tanto, esta fuerza resultante se compone de la fuerza normal, perpendicular a las superficies en contacto, y de la fuerza de rozamiento, paralela a las superficies en contacto.

El coeficiente de rozamiento es prácticamente independiente del área de la superficie de contacto y, además, depende de la naturaleza de los cuerpos en contacto, así como del estado en que se encuentren sus superficies. Para un mismo par de cuerpos, el rozamiento es mayor un instante antes del movimiento que cuando se está en movimiento.

El roce estático es siempre menor o igual al coeficiente de rozamiento entre los dos objetos, número que se mide experimentalmente y está tabulado, multiplicado por la fuerza normal. El roce cinético, en cambio, es igual al coeficiente de rozamiento por la normal en todo instante.

No se tiene una idea perfectamente clara de la diferencia entre el rozamiento dinámico y el estático, pero se tiende a pensar que el estático es mayor que el dinámico, porque al permanecer en reposo ambas superficies, pueden aparecer enlaces iónicos, o incluso micro-soldaduras entre las superficies. Éste fenómeno es tanto mayor cuanto más perfectas son las superficies.

Tabla 7. Interacciones entre partículas de partida

Parámetros físicos a modelar para las simulaciones de compresión y del Dosificador automático de aditivo

Interacción	Coefficiente de restitución	Fricción estática	Fricción dinámica
Sal - Sal	0,50	0,45	0,05
Sal - Policarbonato	0,50	0,30	0,01
Sal - Acero	0,50	0,33	0,01

Tabla 8. Interacciones entre partículas

Variaciones de las interacciones físicas entre partículas

Interacción	Coefficiente de restitución	Fricción estática	Fricción dinámica
Sal - Sal	0,50	0,45	0,05
Sal - Policarbonato	0,15	0,20	0,05
Sal - Acero	0,50	0,27	0,01

Dado que el valor crítico se podría decir que es el coeficiente de rozamiento entre el comprimido y la superficie, aunque también consigo mismo, en experiencias previas para encontrar esos parámetros de interacción entre la sal y el policarbonato, se realizaron diferentes simulaciones de uno y cinco comprimidos, hasta obtener un resultado muy similar a la realidad. Así se probaron diferentes tipos de generación de partícula y caídas, ajustando poco a poco dichos valores, gracias a una buena aproximación inicial (Guerra, 2011). Las interacciones iniciales y alguna de sus variaciones testadas en diferentes baterías de simulación, se muestran en las tablas siete y ocho.

3.2.5.2.2 Módulo de corte

El módulo de corte, o cizalladura, (*Shear modulus*) es una constante elástica de un material, que define su cambio de forma cuando es sometido a un esfuerzo cortante (paralelo a su sección transversal). Otra forma de referirse a esa propiedad es el módulo de elasticidad transversal.

Su definición se muestra en la siguiente ecuación.

$$\text{ec.3} \quad G = \frac{\text{esfuerzo}}{\text{deformación}} = \frac{F \cdot l}{\Delta x \cdot A}, \text{ donde } F \text{ es la fuerza aplicada, } l \text{ es la longitud, la variación de } x \text{ dependiendo del ángulo de aplicación y } A \text{ es el área}$$

Es un parámetro fundamental en la configuración de la simulación desde varios puntos de vista. El primero de ellos es que es determinante en el alcance de un buen compacto,

a mayor módulo de corte, mayor rigidez del comprimido, y el segundo aspecto es que cuanto mayor sea, también aumentará el tiempo de simulación final.

En cuanto al valor del módulo de corte en las simulaciones del sistema dosificador, es relevante por el contacto que se genera entre los comprimidos y con las geometrías del modelo y entre sí mismos.

3.2.5.2.3 Coeficiente de Poisson

El coeficiente de Poisson (*Poisson ratio*), también es una constante elástica que refleja la proporción del estrechamiento de la sección de un material (isótropo y lineal) cuando se estira en su eje longitudinal, es decir se le aplica una fuerza de tracción, y este 'adelgaza' en las secciones perpendiculares al antedicho estiramiento. Este valor oscila en un rango desde 0 a 0.5, siendo este último el valor de un material incompresible, perfectamente rígido. Su ecuación se muestra a continuación.

ec.4
$$\nu = \frac{\epsilon_{\text{transversal}}}{\epsilon_{\text{longitudinal}}}$$
 donde ν es el coeficiente de Poisson y ϵ , las deformaciones transversal y longitudinal

Para los materiales que se emplean en la consecución del comprimido de aditivo alimentario, este coeficiente está tipificado. Lo mismo ocurre con los dos materiales restantes que se emplean en este estudio y que componen el modelo del sistema dosificador; estos dos materiales son el policarbonato y el aluminio. El valor de todos de ellos está recogido en la siguiente tabla.

Tabla 9. Coeficiente de Poisson

Valores del coeficiente de Poisson de los materiales empleados	
Acero	0.3
Sal	0.252
Policarbonato	0.37
Aluminio	0.35

3.2.5.2.4 Coeficiente de Restitución

El coeficiente de restitución es una constante, expresada por un cociente de velocidades, que mide el grado de conservación de la energía cinética en el choque entre partículas. Se relacionan así, las velocidades posteriores y anteriores a la colisión. Esta constante toma valores entre 0 y 1, siendo este último el valor para un choque perfectamente elástico en el que se conservaría tanto la energía cinética como el momento lineal. Si el

valor está comprendido en el rango anterior, se tiene un choque inelástico donde solamente se conserva el momento lineal, ya que una parte de la energía se transforma durante el choque. Si el valor es cero se produce una deformación plástica con la consecuente transformación de la energía cinética en sonora o calorífica.

ec.5
$$C_r = -\frac{v_{1f}-v_{2f}}{v_{1i}-v_{2i}}$$
 donde 1 y 2 son las partículas, i y f son los instantes anterior y posterior al choque

3.2.5.2.5 Densidad

De la misma manera que ocurre con el coeficiente de Poisson, los valores de densidad de los materiales empleados están recogidos en multitud de diferentes literaturas.

A continuación, se pueden encontrar recogidas los valores de densidad de los mismos, y aplicados en las simulaciones.

Tabla 10. Densidades

Valores de la densidad de los materiales empleados en kg/m ³	
Acero	7850
Sal	2170
Policarbonato	1200
Aluminio	2689

Hablando sobre la densidad de un material, se puede diferenciar algunas variedades, la propia del material, que son las mostradas en la tabla 10, la relativa a un material en polvo y el volumen que ocupa su masa, o la de un material comprimido que pueda presentar más o menos oquedades en su conformación.

Si se aumentara el valor de la densidad hasta un valor físicamente inconcebible en una simulación, o con vago sentido, el tiempo de duración de esta se reduciría considerablemente. Existen autores que lo sostienen, pero hay algún otro autor que, hace este tipo de pruebas, con un compuesto como el del presente estudio, y se observa que carece de sentido cuando se habla de compresión, aunque quizás si lo tenga en el tratamiento de material granulado (Muro, 2015).

Además del test de la densidad mencionado anteriormente, en el que el autor ha encontrado que las partículas desaparecen del dominio de la simulación instantáneamente, debido a la incongruencia física y valores de fuerza de compresión obtenidos, también se ha probado a modificar el tamaño de la partícula en orden de

encontrar mayor homogeneidad en el compacto. Así, si el tamaño de partícula es del orden del milímetro, se obtienen mejores resultados de homogeneidad de compacto que en valores mayores, pero, obviamente, el tiempo de simulación se dispara.

3.2.5.2.6 *Otros parámetros*

Hay otros parámetros que también son relevantes para el correcto desempeño de las simulaciones.

Pese a que resulte obvio, por su ya inherente cotidianeidad, un parámetro vital para el desarrollo es la gravedad. Mucho se puede decir en relación a ella, pero se resumirá en que, si no se coloca el valor de la aceleración de la gravedad en su dirección correcta de actuación, las simulaciones no funcionan.

Existe otra serie de variables, como son los tiempos de simulación, de salvado de datos, generación de comprimidos, relaciones de escala etc. que se irán explicando en los puntos siguientes, dentro de su propio marco de actuación.

3.2.5.3 **Generación de comprimidos**

En el entorno de simulación de **EDEM SOFTWARE**, para realizar la generación de partículas, es necesario configurar un elemento geométrico, diseñado para tal fin. Se puede tomar perfectamente alguno de los elementos geométricos básicos del programa o implementarlo, como el resto de geometrías, en un programa de CAD de tres dimensiones. Es conveniente que dicha geometría se defina como virtual, en lugar de mediante un material físico, para que no interactúe con las partículas.

Existen varios tipos de generación de partículas. En la configuración de las factorías de partículas, se puede elegir si la generación es de manera estática o dinámica, si es por número de partículas o por peso y la ratio de generación de partículas por unidad de tiempo. Por otro lado, es configurable qué tipo de partícula generar, la posición de las partículas, su velocidad inicial, el escalado de las mismas en función de la definición del tipo de partícula. En todas las simulaciones que se han llevado a cabo, se han elegido factorías dinámicas y la generación por número de partículas, sin velocidad inicial y posición aleatoria, respetando el radio definido en el tipo de partícula, es decir, sin escalado.

En el caso de las simulaciones de obtención del modelo de comprimido, se diseñó un cilindro virtual, es decir, sin configurar como material físico alguno, alojado en el interior de la matriz de compresión, en el que se generan las partículas. Como se ha apuntado anteriormente, se trabaja con diferentes tamaños de partícula, por lo que en función del radio de la misma y de las dimensiones del comprimido final deseado, se genera un

número de partículas diferente para cada radio, a mayor radio, menor cantidad de partículas.

Atendiendo a las simulaciones finales del sistema dosificador, existen hasta tres factorías. El sentido de todas ellas se explica a continuación:

- ◆ **Factoría de comprimidos** Es la factoría en la que se genera el número de partículas reemplazar por el modelo de comprimido obtenido que se van a dosificar
- ◆ **Factoría de reemplazo** Es la factoría necesaria para efectuar el reemplazo de las partículas generadas por el modelo de comprimido obtenido
- ◆ **Factoría de masa crítica** En esta factoría se generan las partículas que componen la masa de comprimidos que no se sustituyen por el nuevo modelo de comprimido, para reducir el tiempo de simulación considerablemente, pero necesarias para una correcta dosificación

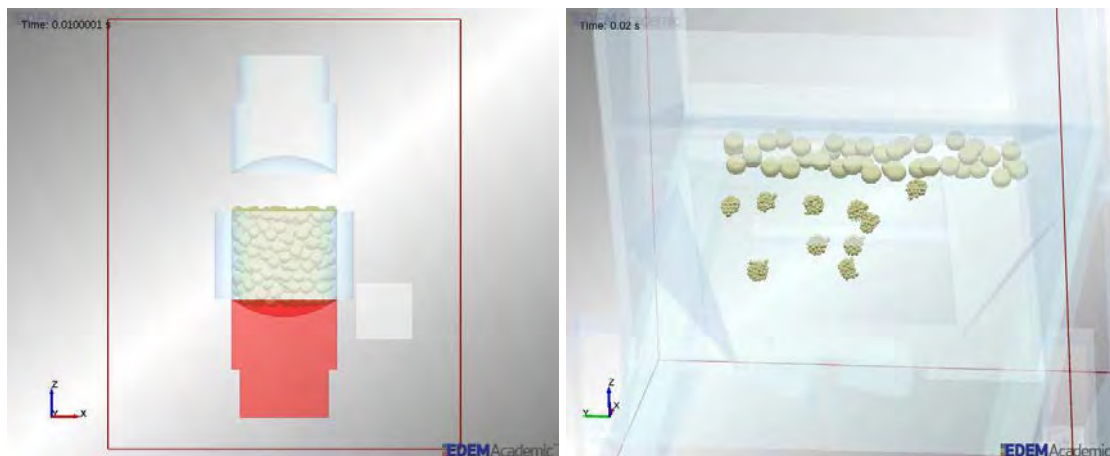


Figura 22. Generación de partículas en las factorías de las diferentes simulaciones. Compresión (izq.). Dosificación (dcha.)

3.2.5.4 Geometrías del dispositivo dosificador

El propio software EDEM, dispone de una herramienta de dibujo, bastante simple, en la que se pueden incluir formas geométricas sencillas como planos y volúmenes básicos. Pero la verdadera potencia de esta interfaz de dibujo es la posibilidad de importar sistemas desarrollados en otro tipo de herramienta software CAD. En este caso, se ha desarrollado el modelo real en una herramienta de diseño 3D como es CATIA.

Así, se dibuja el modelo del sistema con esta herramienta, se exporta a formato IGES o STP y posteriormente se importa desde EDEM, obteniendo, en función de cómo se haya realizado el diseño 3D, una serie de geometrías, que conforman el modelo de simulación del sistema, a las que se puede dotar de diferentes atributos como el material del que están compuestas, o asignarle diferentes dinámicas de movimiento.

Se han desarrollado diferentes geometrías en tres dimensiones. Primeramente, para la fase de simulaciones de generación de los comprimidos, se diseñó un modelo 3D constituido por una matriz de acero y dos punzones que discurren a su través, que responden a una versión reducida de una máquina de compresión. Para las fases finales de la tesis, se empleó el diseño del dosificador automático. Se realizan agrupaciones de los elementos que componen dicha geometría, por un lado, la estructura, por otro el depósito con sus rampas de caída internas y por otro los álabes del sistema de serialización. Además, se debe definir un dominio, a partir del cual se delimita el área de simulación. Uno de los modelos desarrollados en Catia, del sistema dosificador de aditivo alimentario comprimido, se puede ver en la siguiente imagen.

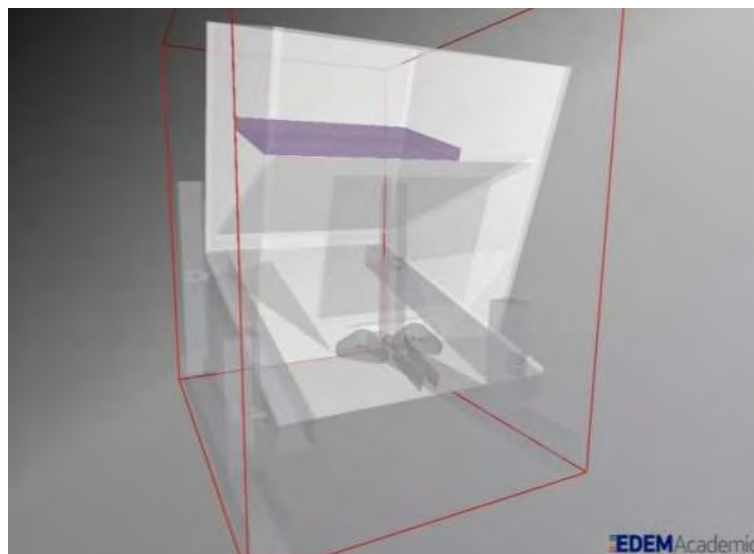


Figura 23. Modelado del dispositivo dosificador de aditivo comprimido

En el caso de la parametrización de las simulaciones en lo que a las geometrías se refiere, se debe asignar el material constituyente a cada una de ellas, otorgando así las propiedades del mismo para la interacción con las partículas.

Por otro lado, se puede dotar a las geometrías de movimiento, pudiendo parametrizar movimientos rotacionales, traslacionales o senoidales.

En las pruebas preliminares y en las simulaciones para la búsqueda del modelo de comprimido, simplemente se diseñan unas dinámicas de traslación lineal a una velocidad a determinar.

En el sistema dosificador, se parametriza la velocidad de rotación de los discos serializadores del sistema de salida, siendo ésta una variable de proceso importante a optimizar, siendo este hecho una de las razones de ser de este estudio. Así, se instauran las rotaciones de los álabes para dotarles de movimiento. Dado que están en un plano inclinado, ha de realizarse una conversión de coordenadas del vector 'velocidad angular'

con el módulo de la velocidad de giro deseada y el ángulo complementario a la inclinación del depósito.

3.2.5.5 Variables de proceso. Búsqueda del modelo óptimo del dosificador

Uno de los objetivos de esta tesis doctoral, es encontrar modelos de simulación que fidelicen el comportamiento del sistema de dosificación de aditivo alimentario comprimido. Para ello, una de las facetas importantes a desarrollar es encontrar un óptimo en la configuración de los modelos, para su posterior aplicación en el sistema real, atacando sobre las variables de proceso del dosificador, las cuales son el ángulo de inclinación del depósito almacén y la velocidad de giro de los álabes del sistema serializador de salida, que indica la cantidad de tabletas que se dosifican por minuto.

Centrando la vista sobre las antedichas variables, hablando en términos de velocidad, resulta más ventajoso, desde el punto de vista de la integridad del comprimido, el empleo de velocidades bajas, ya que el valor de las fuerzas de compresión e impacto que éstos sufren es menor que en casos de velocidad mayores.

Considerando el ángulo de inclinación del depósito como el otro principal parámetro de proceso, se puede decir que, independientemente de la velocidad de rotación de los discos serializadores, el set de grados de poca inclinación puede resultar insuficiente. Los casos de ángulo elevado se tornan excesivos, por la inercia que cogen los propios comprimidos y por los apelmazamientos que se dan en la parte frontal, así como atascos, en el sistema de serialización y altas fuerzas de compresión sobre los comprimidos. Por eso, la configuración más favorable está en torno a los dieciséis grados.

Los casos de las variables de proceso contemplados en investigaciones previas, de manera combinada, resultaron satisfactorias. Es por ello que se pretende validar los dos mejores de entre todos esos modelos estudiados con la inclusión del nuevo modelo de comprimido junto con la modificación de los discos del sistema de salida (serialización) y observar su comportamiento.

3.2.5.6 Modificación del sistema de salida. Discos serializadores

Otra de las posibles modificaciones del dispositivo dosificador son los discos que componen el sistema serializador de salida.

En un primer momento, se trabajó con los discos triangulares con los vértices redondeados. El modelo obtenido trabaja bien y es fiel al comportamiento real del sistema. Además, las simulaciones que se han realizado consiguen unos buenos tiempos de simulación, siendo computacionalmente rentable.

En este momento se ha decidido ir más allá y modificar dicho sistema en la búsqueda de mejorar el dispositivo en su productividad, intentando incrementar la velocidad de dosificación, pero, sobre todo, minimizar el impacto y el desgaste que sufren los compactos. Así, se han diseñado y simulado otros dos tipos de serializadores como son los discos circulares y los triángulos curvilíneos.

En la ejecución de las simulaciones, se verán resultados para la combinación de las diferentes velocidades y ángulos, junto con los tres sistemas de serialización diferentes, validando así los modelos anteriores, gracias a la inclusión del nuevo modelo de comprimido, y generando por ende un nuevo modelo de simulación más completo y fiel al sistema real.

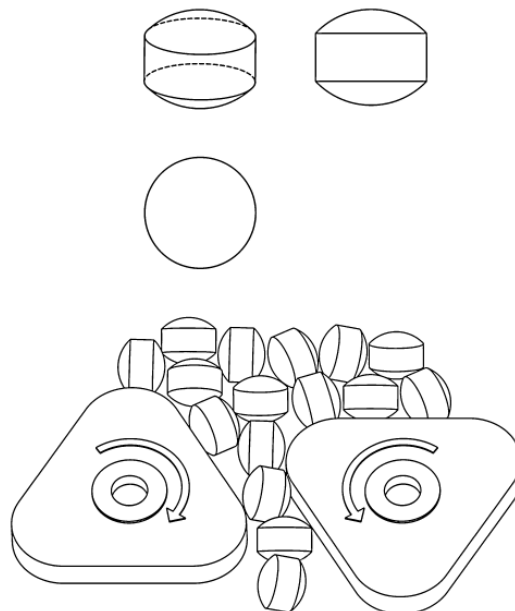


Figura 24. Sistema serializador con triángulos de vértices redondeados. Fuente Alba et al., 2014

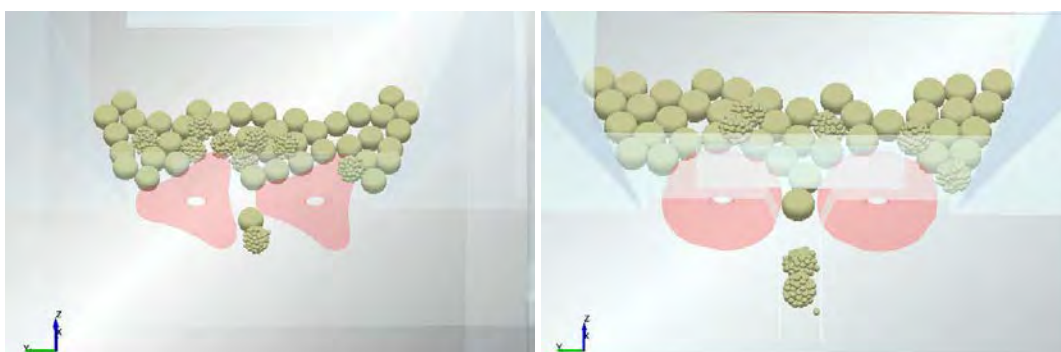


Figura 25. Modelos de simulación con los nuevos serializadores. Triángulos curvilíneos (arriba) Discos (abajo.)

3.2.5.7 Configuración de la simulación

Son varios los parámetros habilitados en la configuración de una simulación en EDEM, que permiten la optimización de la misma. El objetivo fundamental de la simulación es obtener una reproducción mediante cálculo tan similar a la realidad como sea posible. El siguiente paso sería intentar que esa aproximación a la realidad sea económica desde el punto de vista del coste invertido, tanto en tiempo de simulación como en recursos informáticos (coste computacional).

3.2.5.7.1 Intervalo de cálculo

De los valores variables en la parametrización de la simulación mencionados, el primero de ellos es el lapso de tiempo entre iteraciones de cálculo, llamado *time step*. Indica la resolución de la simulación, entendida del modo en el que se determina cada cuanto instante de tiempo se van a realizar los cálculos (contactos, fuerzas de colisión, posición etc.), lo que quiere decir que cuanto menor sea su valor mayor será el número de veces que se calculen los datos de la simulación.

Este hecho es algo positivo desde el punto de vista de la trazabilidad de la simulación y la posibilidad de albergar una red de datos tal como para calcular con una precisión muy certera. Como contrapartida, destaca que el tiempo total de simulación tanto mayor será cuanto menor sea el *time step*. Por tanto, se ha de buscar el equilibrio encontrando un fino paso de tiempo sin que alargue demasiado la duración de las simulaciones. Por otro lado, es destacable que este parámetro sufre modificación si se altera el valor de algunas otras variables, como ocurre en el caso del módulo de corte que, si éste aumenta, consecuentemente el *time step* disminuye.

Este parámetro puede ser configurado por dos vías, una es como variable de tiempo, en segundos, o un porcentaje del mismo. El valor más manido en las simulaciones realizadas ronda el 7%, lo que equivale a dos décimas de microsegundo. Para llegar a este valor óptimo en la simulación, es conveniente empezar las simulaciones por valores más elevados, entorno al 15-25%, para comprobar si el trascurso de la simulación va por buen camino y, si no lo hace, ir bajándolo paulatinamente. Lo que permite este proceso es ver en qué momento las partículas se comportan de manera adecuada, es decir, no desaparecen del dominio al producirse una eclosión, o fuerzas y/o colisiones que no se calculan correctamente porque el tiempo no es lo suficientemente bajo y el software no puede calcular la posición de la partícula en ese instante, dando lugar a un comportamiento errático.

3.2.5.7.2 Rejilla de simulación

Este parámetro configurable es el que permite tener una estructura de celdas, en la simulación, con una luz más o menos amplia con el objetivo de detectar los contactos entre partículas.

Si se tiene una rejilla con unas celdas cuya luz sea muy pequeña, es decir muchas celdas creadas formando una retícula densa, el tiempo de simulación puede crecer desorbitadamente, ya que mayor será el número de cálculos y emplazamientos de partícula por cada una de ellas, puesto que se tiene en cuenta toda celda con más de dos partículas en su interior (contactos). Es por ello que lo más aconsejable es encontrar un tamaño de celda ideal en el que se encuentre un compromiso entre el tiempo de duración de la simulación y el número de contactos certeros. Dicho tamaño de celda está en torno al doble del radio de la menor partícula a simular.

En este estudio y la batería de simulaciones de todas sus fases, el *cell size* está en torno a 2.5 R, siendo R el radio de la partícula más pequeña en cada caso simulado, oscilando éste entre 1 mm y 2 mm.

3.2.5.7.3 Tiempo de simulación

El tiempo de simulación, viene determinado por el *simulation time - total time*. Supone el tiempo del comportamiento real del sistema que se simula. Es decir, es la cantidad de tiempo real de simulación de un sistema, el cual, si tarda un tiempo t en realizar n operaciones y eso es lo que se quiere simular, el valor a configurar en el parámetro *simulation time*, será el valor de t en segundos.

Aun así, EDEM invierte un tiempo sustancialmente más elevado para llevar a cabo la simulación y realizar el compendio de cálculos, tiempo que es proporcional al tiempo del proceso real. Ese tiempo empleado por el software es la duración de la simulación, la cual, dependiendo del propio tiempo de simulación, el intervalo de cálculo, el tamaño de la celda de la rejilla, las geometrías, el número de partículas, los contactos y el valor del resto de las variables, se puede prolongar desde horas a semanas.

En las simulaciones realizadas en el hallazgo del modelo de comprimido de aditivo, el tiempo de simulación, al igual que el de proceso, ronda el segundo de duración, sin embargo, el software emplea, en los casos más complejos, hasta cuarenta y ocho horas.

En el caso de las simulaciones del sistema dosificador automático, el tiempo de simulación son treinta segundos, y la duración de la simulación con todos los cálculos posibles, se puede llegar a extender hasta los seis días.

3.2.5.7.4 Intervalo de salvaguarda de datos

Este parámetro indica la frecuencia con la que realiza el grabado de los datos obtenidos en el cálculo de la simulación. A tal efecto, se dispone de tres variantes que pueden satisfacer diferentes necesidades para el usuario.

La primera de ellas es el intervalo de guardado objetivo o *target save interval*. Es el intervalo de almacenamiento de los datos; la simulación calcula todos los datos y valores cada time step prefijado y, si se guardaran todos ellos, supondría una cantidad ingente de información, por ello, aquí es donde el parámetro antedicho cobra relevancia porque, propicia que solamente se guarde la información calculada los instantes de tiempo cada intervalo definido, reduciendo así el volumen de datos almacenado. Por otro lado, en función del interés de los resultados a obtener, se puede modificar este parámetro, para guardar pocos datos en momentos poco relevantes, o una cantidad mayor cuando interesa encontrar algún evento crítico o simplemente más información del desarrollo de la simulación.

Otra de las tres variantes es el guardado selectivo o *selective save*. Cuando no se busca estudiar toda la información si no una parte de las variables de la simulación, es posible indicarle a EDEM cuáles son las que se desea guardar. Así se reduce la cantidad de datos almacenados sustancialmente.

La última variante es guardar toda la información con una frecuencia deseada del propio intervalo de guardado y en el resto de instantes solamente parte de los datos. Es una combinación de las dos primeras. Es la denominada *full data save period*.

En esta tesis doctoral se empleará el primer método, utilizando como valor del intervalo objetivo de guardado un milisegundo, que proporciona datos más que suficientes para hacer un estudio pormenorizado de las variables de proceso no siendo el volumen de archivos almacenados muy grande.

Capítulo 4

Resultados obtenidos

4 Resultados obtenidos

4.1 Modelo del comprimido de aditivo alimentario

4.1.1 Introducción

Una vez definidos los objetivos y metodología del estudio se pasan a relatar los resultados obtenidos de las simulaciones realizadas. En este primer punto, se van a mostrar los resultados alcanzados en la consecución del nuevo modelo de comprimido de aditivo alimentario (fase ii), para el que, primeramente, se realizó una amplia batería de simulaciones como pruebas preliminares (fase i).

Aunque ya se había encontrado un modelo de comprimido válido, confeccionado con ochenta y tres partículas esféricas solapadas (Guerra, 2011), se decidió adentrarse en la mejora del mismo desde el punto de vista del proceso de compresión y los contactos

entre partículas, primeramente, con un modelo simple de comprimido cilíndrico, para estudiar el comportamiento de las partículas y los contactos al ser sometidas a presión y, posteriormente, con el desarrollo de simulaciones de compresión para formar el comprimido con su morfología y peso de seis gramos finales.

Como ya se ha apuntado en capítulos anteriores, este estudio es parte de un proyecto mucho más global. Es por ello que el punto fundamental del presente documento no es el estudio pormenorizado de la compresión del aditivo, ya que eso se ha reflejado en otra tesis doctoral (Muro, 2015), mas sí es relevante el hecho de la consecución de un modelo de comprimido para ser empleado en el sistema dosificador, más real que el que ya se obtuvo en investigaciones previas de partículas con solapamiento. Así, los dos puntos importantes son la obtención de la mejora de ambos modelos, tanto del comprimido, como del dosificador automático.

Se tiene por tanto que las variables críticas en la compresión y los parámetros determinantes de simulación ya han sido estudiadas, con lo que existe un punto de partida provechoso, aunque no por ello se ha dejado de investigar y experimentar con los valores de las distintas variables para contrastar y validar, por sí mismo, el nuevo modelo de comprimido de aditivo alimentario apoyado en estudios previos y complemento de este.

Las simulaciones realizadas en las citadas fases i y ii, se han desarrollado con el modelo de contactos del software *EDEM*, *Hertz-Mindlin with bonding*, que como su propio nombre indica, genera enlaces entre partículas. Posteriormente se verá la influencia de los parámetros configurables propios de este modelo de contactos en el resultado final del comprimido.

Se verá cómo afecta el cambio de valor de los diferentes parámetros del sistema físico a simular, como puede ser el módulo de corte o las fuerzas de rozamiento, en el aspecto y cohesión del compacto alcanzado. Al mismo tiempo, se estudiará el impacto del empleo de diferentes valores de velocidad en la cohesión del compacto, en su número de partículas y en la forma final obtenida. También será relevante la fuerza de compresión aplicada en la generación del comprimido.

Por otro lado, se generarán modelos de diferentes tamaños de partícula con el fin de obtener un compromiso entre el tiempo total de duración de la simulación y la aproximación obtenida respecto al modelo real del sistema dosificador, en el que se simularán los diferentes modelos de comprimido alcanzados.

4.1.2 Pruebas preliminares

4.1.2.1 Consideraciones

Antes de ahondar en el desarrollo completo de un modelo, es conveniente realizar aproximaciones que sirvan para acotar los aspectos variables más relevantes del sistema a modelar. Así, y aunque se tenían indicios de los dominios de los valores gracias a las investigaciones previas del autor y otros, se determinó realizar un modelo sencillo. Este modelo simplificado consiste en unos punzones y una matriz básicos que generan por movimiento y presión de los punzones un comprimido cilíndrico, a partir de un material particulado (sal) alojado en la matriz.

Tabla 11. Parámetros del acero en las pruebas preliminares

Valores de los materiales en las pruebas preliminares

Coefficiente de Poisson	0.3
Módulo de corte	8.1e+10
Densidad	2170 kg/cm ³
Coefficiente de restitución	0.4
Fricción estática	0.5
Fricción dinámica	0.01

Es por eso que las geometrías simples realizadas atienden a formas básicas (cilindros) que son configuradas en base a los valores del acero, material del que están compuestos, tal como se indica en la tabla 11.

Este hecho, supone una reducción considerable del tiempo de simulación, con lo que se optimiza el proceso, y sobre todo se acelera, permitiendo llegar, en menos tiempo a ciertas conclusiones que en breve se explicarán.

La misma forma de proceder se aplica a las factorías de generación de partículas, las cuales están diseñadas en las simulaciones para generar partículas del mismo diámetro en todas ellas para aislar los efectos de las variaciones del resto de los parámetros, de dicho valor. La factoría de generación, alojada en la matriz de compresión, es otra geometría básica, un cilindro virtual, que carece de cualquier tipo de propiedad.

Así, las simulaciones del estudio preliminar transcurren con el fin de encontrar un rango de valores mínimo para poder optimizar la búsqueda de los modelos de comprimido definitivos.

A continuación, se puede ver una imagen de un comprimido cilíndrico generado en las pruebas preliminares y una gráfica de fuerza de compresión.

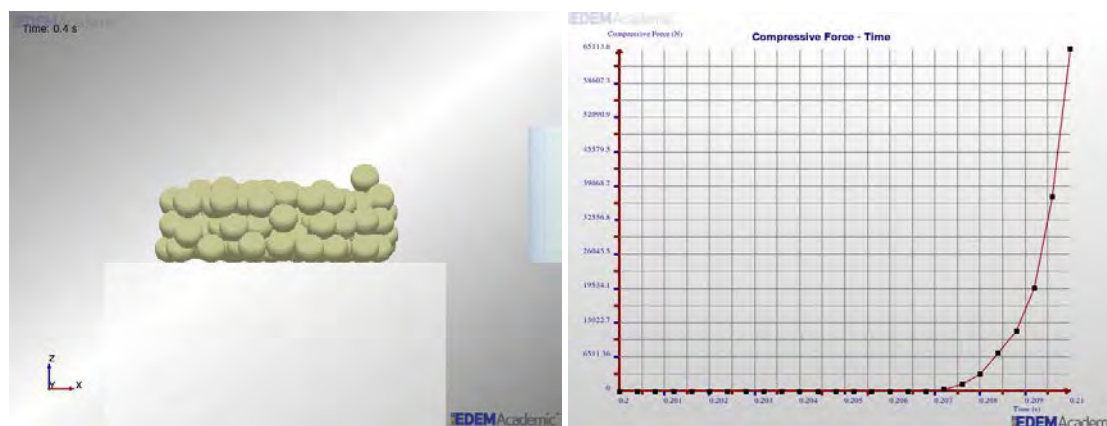


Figura 26. Ejemplo de comprimido preliminar (izq.) y fuerza de compresión aplicada (dcha.)

4.1.2.2 Variación de los parámetros de proceso

4.1.2.2.1 Valores de los materiales

En esta primera fase de la simulación, se han asumido los parámetros que en su día se emplearon para la realización de las investigaciones anteriores y que aportaron resultados muy satisfactorios. Estos se muestran en las tablas once y doce.

Tabla 12. Parámetros de la sal en las pruebas preliminares

Valores de los materiales en las pruebas preliminares

Coefficiente de Poisson	0.3
Módulo de corte	0.1 - 10 GPa
Densidad	7850 kg/cm ³
Coefficiente de restitución	0.3
Fricción estática	0.5
Fricción dinámica	0.01

4.1.2.2.2 Influencia de la velocidad de compresión

En las pruebas de fabricación real que se realizaron, se determinó una velocidad de compresión en la prensa de 2 mm/min (Muro, 2015).

Al ser la compresión real un evento que se realiza a una velocidad muy baja es lícito asumir que es un proceso cuasi-estático. Para realizar una batería de simulaciones con

dicho valor, la inversión sería elevadísima, ya que, en la prueba realizada, la simulación resultante tendría un volumen virtual estimado muy elevado, alrededor de sesenta gigabytes, y el tiempo necesario para generarlo estaría en torno a los doce días. Es por ello que se ha buscado una alternativa en la compresión para obtener buenos resultados de cohesión de las partículas con unos valores de velocidad distintos a los reales, pero que supongan una menor inversión de tiempo y se siga alcanzando un resultado óptimo.

Para apoyar el método del estudio se han realizado una serie de cálculos para las cinemáticas exactas de las geometrías del sistema.

Tabla 13. Valores para la configuración de la velocidad de compresión

Parámetros cinemática punzón superior			
velocidad	v	1000,000000	mm/s
tiempo comienzo bajada	ti_1	0,100000	s
recorrido	e	12,060000	mm
tiempo recorrido	tr	0,012060	s
tiempo fin bajada	tf_1	0,112060	s
tiempo presión	tp	0,010000	s
tiempo comienzo subida	ti_2	0,262060	s
tiempo fin subida	tf_2	0,274120	s
centro gravedad	c_z	83,921770	mm
base	b	73,950000	mm
parte superior cilindro	a	61,890000	mm

Para alcanzar una velocidad óptima, se han realizado una serie de pruebas en las que se ha ido modificando el valor de velocidad de compresión. La fuerza de compresión alcanzada es la variable que se ha considerado como determinante a la hora de fijar la velocidad para el resto de simulaciones de los modelos finales de comprimido. En el momento que se produce un cambio destacable en la fuerza de compresión máxima obtenida ese es el valor que se ha considerado como valor de velocidad máxima.

A continuación, se puede ver el resultado de algunas de las pruebas realizadas, las más significativas, a distintas velocidades para un módulo de corte (*shear modulus*) de 0.1 GPa, como primera aproximación, y favorable desde el punto de vista computacional al

no ser un valor muy elevado, aunque se han realizado también pruebas con otros valores de dicho módulo, estos resultados ilustran muy bien la evolución de la influencia de la velocidad en el comprimido generado y el coste computacional. La mayor parte de las simulaciones se han realizado para una cantidad y tamaño de partícula, concretamente *mil partículas de un milímetro de radio*, aunque se han realizado para otros tamaños como se podrá ver en imágenes mostradas con posterioridad. En la parametrización del modelo de contactos empleado, *Hertz Mindlin with bonding*, se ha optado por valores altos para asegurar la generación de enlaces, estos valores son del orden de $1e+11$, en detrimento del coste computacional, que aumenta con el orden de estos parámetros, ya que se ha visto que para valores menores de cohesión las simulaciones son más rápidas.



Contactos 3071, enlaces intactos 2987, enlaces rotos 84

Figura 27. Velocidad de compresión 0.2 m/s. Comprimido (izq.) Fuerza de compresión (dcha.)



Contactos 3098, enlaces intactos 3073, enlaces rotos 25

Figura 28. Velocidad de compresión 0.4 m/s. Comprimido (izq.) Fuerza de compresión (dcha.)

Desde el punto de vista del aspecto de la morfología del comprimido generado, casi todas las velocidades son apropiadas. Está claro que no tiene el mismo efecto cuando las velocidades más altas se aplican en conjunción con valores bajos de los parámetros del método de contacto, ya que los enlaces son menores, y peores, resultando un comprimido de una mayor plasticidad, lo que origina que esas velocidades altas traten con mayor “violencia” al comprimido, sufriendo por ello alguna rotura de enlaces extra.



Contactos 3198, enlaces intactos 3146, enlaces rotos 52

Figura 29. Velocidad de compresión 0.6 m/s. Comprimido (izq.) Fuerza de compresión (dcha.)



Contactos 3023, enlaces intactos 2907, enlaces rotos 116

Figura 30. Velocidad de compresión 0.8 m/s. Comprimido (izq.) Fuerza de compresión (dcha.)

Asimismo, se entiende que, si los valores del modelo de contactos son de orden elevado, aunque rocen lo irreal, como el empleado en esta parte del estudio, otorgan mayor consistencia al comprimido resultante, pero combinado con las velocidades altas, son mayores las fuerzas de compresión para formar una tableta con pocos enlaces rotos. Resulta por tanto que con el empleo de valores elevados del modelo de contacto a la par que velocidades bajas, se consigue, primeramente, un comprimido con un buen número de enlaces intactos, bajo índice de enlaces rotos en relación al global generado, es decir, un comprimido con buenos valores de cohesión y densidad conseguido sin demasiada agresividad, y segundo, un coste computacional asumible. Las altas velocidades empleadas junto con valores de alto orden de cohesión generan comprimidos más frágiles, y la combinación de ambas variables con valores bajos o muy bajos, no generan comprimidos consistentes.

Seguidamente, se relacionan los resultados anteriores.

En la gráfica reflejada en la imagen 31, se observa que la fuerza de compresión es siempre creciente según crece la velocidad del punzón superior. Así, se observa que este valor creciente de la fuerza de compresión sufre un cambio de pendiente notable en torno a 0.4 m/s y 0.8 m/s, por lo que se puede determinar esos valores como intervalo de velocidades a emplear en las simulaciones, ya que a valores mayores se tienen mayores fuerzas ejercidas, por lo que no es conveniente su empleo en la simulación, aunque suponga un ahorro en el coste computacional. Por el contrario, para valores inferiores a ese rango, los valores de fuerza de compresión son sensiblemente menores, pero en este caso las simulaciones tardan varias horas más que las comprendidas en el intervalo escogido, por lo que no compensa su empleo frente el bajo beneficio en lo que a valores menores de fuerza de compresión se refiere.

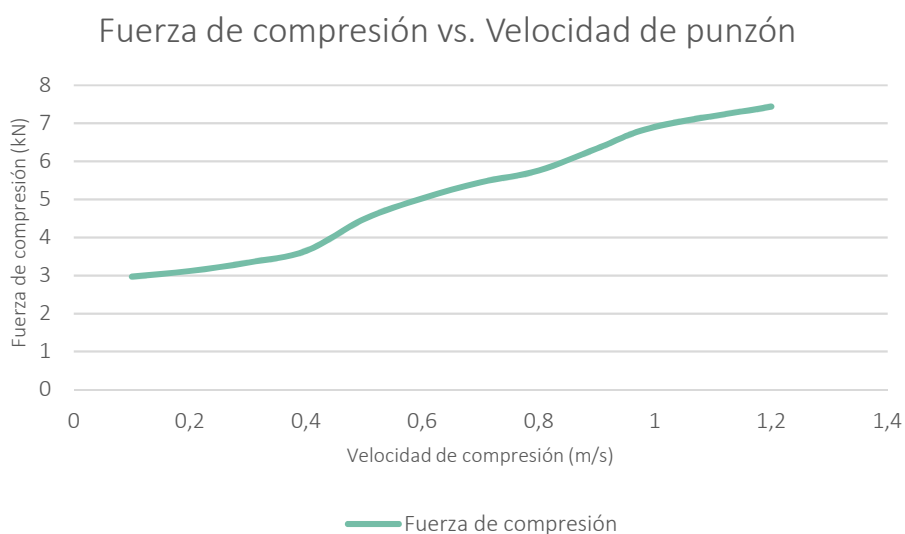


Figura 31. Relación de la fuerza de compresión resultante y la velocidad de compresión

Otro resultado relevante es el número de enlaces generados mediante el método de cohesión de partículas *Hertz Mindlin with Bonding*, pudiendo observarse en la tabla 14 y su complemento, la Figura 32, que el número de enlaces rotos se mantiene prácticamente constante para las velocidades mostradas y prácticamente en la misma proporción que los enlaces totales generados. El problema se encuentra para la velocidad de 0.8 m/s en la que se produce una pérdida de enlaces y a partir de la cual se atisba una recuperación hasta la velocidad de un metro por segundo, pero que para valores mayores vuelve a decrecer. Esto indica la no optimización de la simulación para valores de velocidad rápidos, ya que no se generan comprimidos tan válidos como a velocidades menores.

Atendiendo a estos resultados de velocidad, fuerza de compresión y número de contactos llegados a buen fin, se puede definir como la velocidad óptima de simulación 0.4 m/s. Notar que es un resultado recurrente, ya que se concluye de igual forma que en estudios anteriormente mencionados aun siendo diferentes parámetros, distinto número de partículas y forma de proceder (Muro, 2015).

Tabla 14. Relación de enlaces a distintas velocidades

Valores de los enlaces y % de bondad de los comprimidos preliminares

v (m/s)	E. totales	E. intactos	E. rotos	F _{máx} (kN)	% bondad
0.1	3042	2932	110	2.97	96.38
0.2	3071	2987	84	3.12	97.26
0.3	3080	3013	67	3.34	97.82
0.4	3098	3073	25	3.65	99.19
0.5	3105	3034	71	4.49	97.71
0.6	3198	3146	52	5.03	98.37
0.7	3196	3105	91	5.45	97.15
0.8	3023	2907	116	5.76	96.16
0.9	3185	3080	105	6.34	96.70
1	3149	3009	140	6.91	95.55
1.2	3103	2943	160	7.44	94.84

Se puede observar en la tabla anterior, que el porcentaje de bondad de los comprimidos elegidos de entre todos los simulados, que para la velocidad de 0.4 m/s se tiene que es

el mayor de todos ellos. La mayoría de ellos son valores más que aceptables que demuestran que los comprimidos generados son un buen resultado, cosa aparente si se atiende también al aspecto visual de todos ellos. Este parámetro refleja la consecuencia de los hechos comentados.

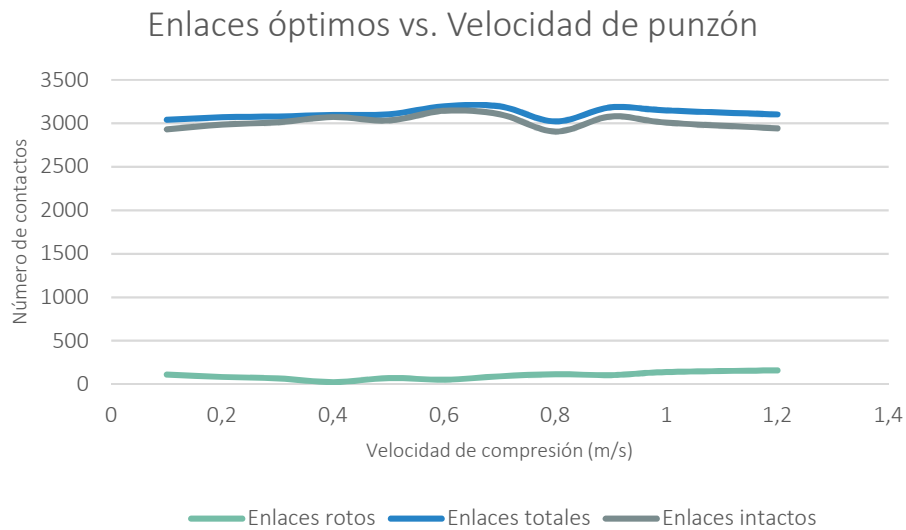


Figura 32. Relación de la velocidad de compresión y el número de enlaces generados (intactos y rotos)

En otro orden de cosas, en el empleo de velocidades altas (cercanas a los 2 m/s), alguno de los efectos del exceso de velocidad del punzón de compresión, y por ende de la fuerza de compresión, es que las partículas llegan a tomar valores tan altos que en el cese de la presión es como si estallaran tendiendo a salir del dominio de la simulación, lo que generaría una tendencia decreciente en el número de enlaces y por ello crecimiento de enlaces rotos.



Figura 33. Efecto de la excesiva velocidad de compresión

4.1.2.2.3 *Influencia del valor del módulo de corte*

Siguiendo con la tónica del punto anterior, se muestran los resultados de las pruebas preliminares realizadas con el objetivo de encontrar un valor apropiado para el módulo de corte. Una vez más, es necesario encontrar un compromiso entre el coste computacional y el resultado final del comprimido. En el caso del módulo de corte, tanto aumenta su valor, tanto aumentará el tiempo invertido en simular.



Contactos 3034, enlaces intactos 3026, enlaces rotos 8

Figura 34. Módulo de corte 0.1 GPa. Comprimido (izq.) Fuerza de compresión (dcha.)



Contactos 3104, enlaces intactos 3073, enlaces rotos 31

Figura 35. Módulo de corte 1 GPa. Comprimido (izq.) Fuerza de compresión (dcha.)

Optimización de sistema dosificador automático de aditivo alimentario comprimido empleando el método de elementos discretos (DEM)

En algunas de las pruebas que se han llevado a cabo, se ha fijado el valor de la velocidad de compresión a 1 m/s para reducir el tiempo de simulación, dado que se emplean valores altos de *shear modulus* que hace subir dicho tiempo, y los valores del modelo de contacto del orden de $1e+11$. Así las variaciones que se han efectuado para el valor del módulo de corte se encuentran en el intervalo 0.001 - 1000 GPa.

En el caso de la variación del módulo de corte, se ha observado que su crecimiento implica un aumento en la fuerza de compresión que sufren las partículas. Si el valor del módulo sigue creciendo, se dan mayores deformaciones debido a las tensiones internas y esto genera que el número de enlaces rotos crezca considerablemente. Así el comprimido resulta más quebradizo y por ello no es oportuno tomarlo como modelo.

A partir de este punto, para simulaciones posteriores que serán definitivas para la elección del modelo de comprimido de aditivo, el valor empleado en la mayoría de ellas estará en torno a 7 GPa, siendo el valor real 8.97 GPa.



Contactos 3126, enlaces intactos 3020, enlaces rotos 106

Figura 36. Módulo de corte 10 GPa. Comprimido (izq.) Fuerza de compresión (dcha.)

El empleo de valores de módulos de corte elevados supone un incremento en la inversión de la simulación, tanto en tiempo como en recursos. Por ello, desde el punto de vista computacional, junto con el valor óptimo de velocidad lo más efectivo no sea la combinación elegida, pero desde luego los resultados obtenidos en cuanto a fuerza y apariencia del comprimido, justifican el empleo de estos valores, es decir, merece la pena sacrificar el pequeño sobrecoste computacional que supone el uso de estos valores en pro de los resultados que se alcanzan.

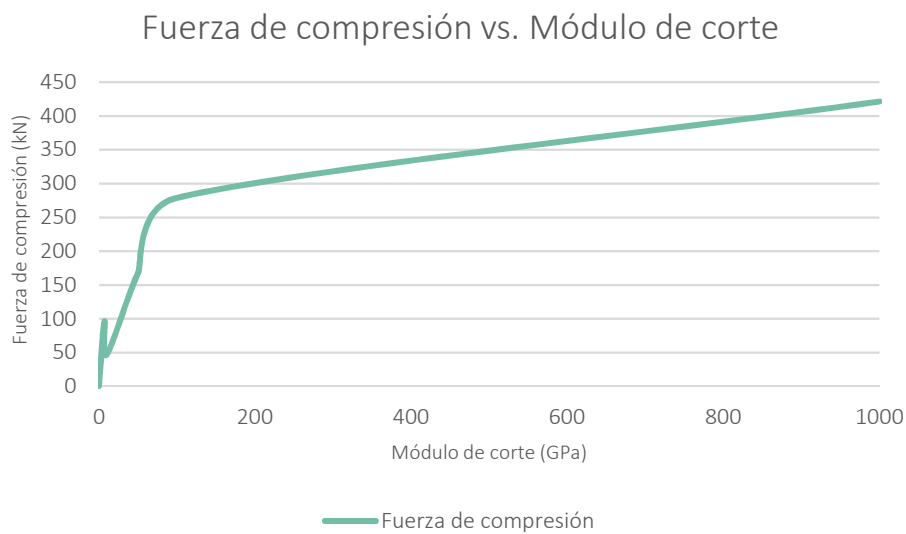


Figura 37. Relación del módulo de corte parametrizado y la fuerza de compresión resultante

Siguiendo la tónica de análisis de resultados plasmada anteriormente, se tiene la siguiente gráfica que esboza lo ya comentado, un crecimiento de la fuerza de compresión resultante conforme aumenta el valor del módulo de corte.

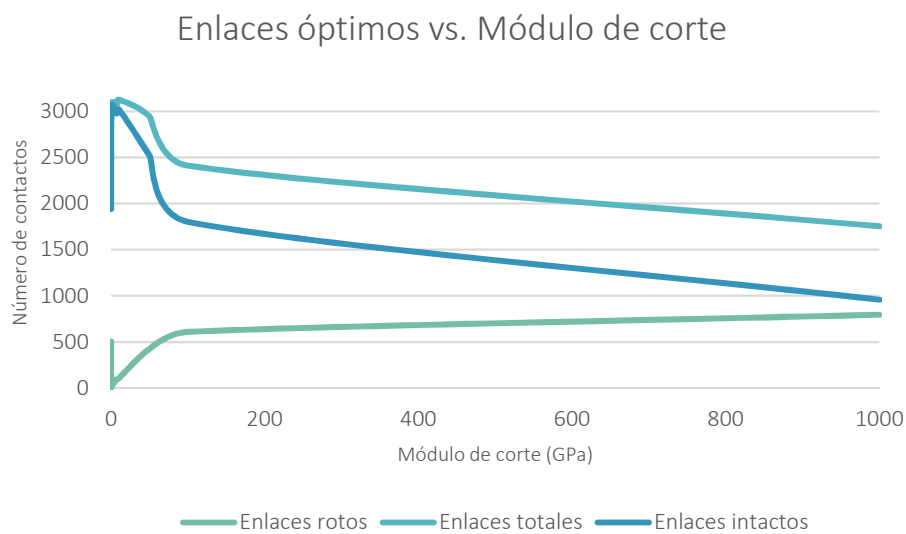


Figura 38. Relación del número de contactos en función del módulo de corte fijado

En relación al número de contactos generados, se puede observar que el número de enlaces totales es bajo hasta llegar a un valor umbral de módulo de corte que se considera mínimo, como ya se ha dicho en el orden de los pocos MPa, y otro punto a considerar como máximo, puesto que a partir de él, el número de contactos comienza a diezmar notablemente, por lo que, claro está, el número de enlaces rotos aumenta, y así, llegaría

un valor en el que se invertiría la curva, siendo mayor el número de enlaces rotos que la cantidad de enlaces intactos.

4.1.2.2.4 Influencia de los parámetros de configuración del modelo de contacto

Como ya se ha apuntado en apartados anteriores, existen diferentes modelos de contacto dentro del software EDEM. Para el desarrollo de esta tesis, el modelo de interacciones físicas empleado es el modelo basado en enlaces entre partículas o contactos llamado *Hertz-Mindlin with bonding* (bond, contacto).

En las ilustraciones 18 y 19 se pueden ver los parámetros a configurar. En primera instancia se realizaron pruebas con valores bajos (del orden de los kPa) no surtiendo efecto alguno en la cohesión de las partículas, puesto que, independientemente del valor de la velocidad de compresión y el módulo de corte, no se generaba contacto alguno. Paulatinamente se fue incrementando el valor de estos parámetros hasta empezar a percibir un número de contactos razonable y que, visualmente, daban a entender que se generaba un comprimido casi suficiente.

Cruzado el umbral mínimo para el cual el comprimido resultante está muy lejos de ser, tan siquiera, aceptable, se empezaron a obtener comprimidos como los mostrados a continuación.

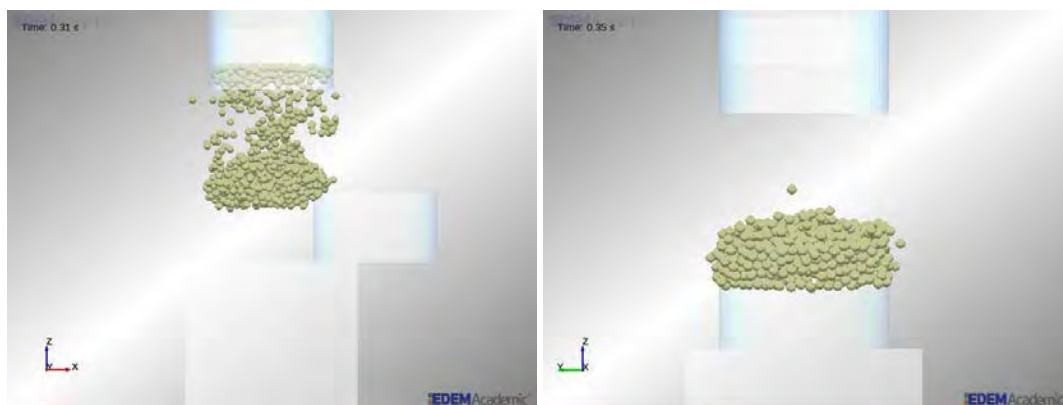


Figura 39. Resultados de cohesión y número de contactos bajo

En este punto, se generó un pequeño conflicto entre el empleo de estos valores en el orden umbral detectado (MPa) y el número de partículas a simular. Podía ser que el número de partículas fuera superior al máximo de enlaces que se podían generar para una velocidad de compresión y área de contacto dadas.

Nótese que, en el recorrido del punzón superior, al final deja un volumen en el que se conforma el comprimido con sus dimensiones finales. Si la carrera aumentase con el fin de generar una presión mayor, sin alterar la velocidad de compresión, dejaría un volumen menor, y para un número de partículas n , la fuerza de compresión y tensiones internas

de las partículas serían mayores, lo cual es contraproducente y, además, las dimensiones finales del compacto serían menores, hecho no deseable. Por ello habría que aumentar el número de partículas, para mostrar una mayor resistencia al ejercicio de la fuerza de compresión. Este hecho provoca que no se generen los contactos suficientes y “sobren” partículas.

En otro orden de cosas, se tiene que para un volumen teórico de comprimido V se necesitan un número de partículas n , aunque al ser la simulación una aproximación que depende del tamaño de las partículas, la cantidad y tamaño de los intersticios que dejan éstas son mayor que en la realidad, por lo que el número necesario de partículas para generar la tableta es menor que el real. El efecto de este fenómeno combinado con el anterior también es causa de una baja cohesión, además de una consecución incorrecta del comprimido.

Por ello, lo que se ha realizado ha sido fijar la velocidad de compresión y fijar el recorrido del punzón superior pasando a variar el número de partículas, variable en función de su tamaño para alcanzar siempre un mismo volumen (y peso) de comprimido.

Otrosí, la adhesión de las partículas a la geometría es otro problema añadido. Para evitar este efecto, se redujo el valor de la interacción entre la sal y el acero. No obstante, este hecho se ve a su vez perjudicado por el empleo de valores de orden alto en los parámetros del modelo de contacto, que provocan un efecto de rigidez al comprimido y esto conlleva que se quede dentro de la matriz y no sea expulsado.

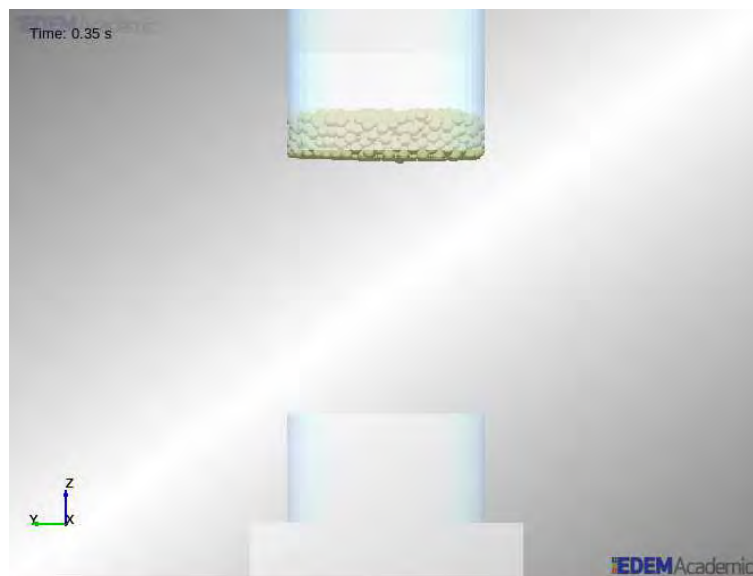


Figura 40. Problema de expulsión del comprimido por valores de contacto

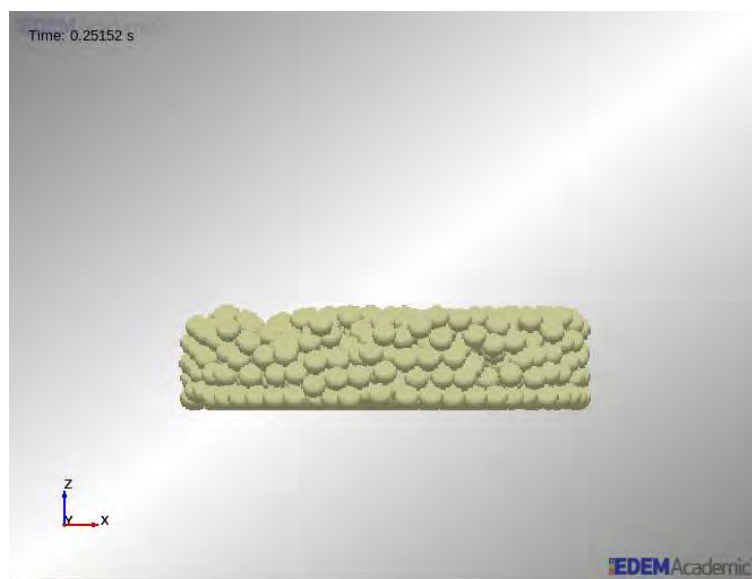
Continuando con la variación de los parámetros del modelo de contactos, se vio que para valores bajos (en torno a 100 MPa), la cantidad de partículas que quedaban libres, sin

establecer un contacto con sus aledañas, se iba reduciendo, como se puede ver a continuación.



Figura 41. Comprimidos para valores de contacto: 100 MPa (izq.) 2.5 GPa (centro) y 2.9 GPa (dcha.)

En la última imagen de la Figura anterior, se pueden comprobar también varios hechos ya comentados, primeramente, el de la interacción de la partícula de sal con las geometrías, dada la dificultad en la expulsión (dcha.), seguidamente un mayor número de contactos respecto el resto de comprimidos de la Figura, ya que se generó con un valor de cohesión mayor, y por último una mayor plasticidad de comprimido para menores valores de cohesión (izq.), efecto no deseable.



Contactos 3108, enlaces intactos 2306, enlaces rotos 802

Figura 42. Parámetros HMwB de orden $1e+09$. Comprimido (izq.) Fuerza de compresión (dcha.)

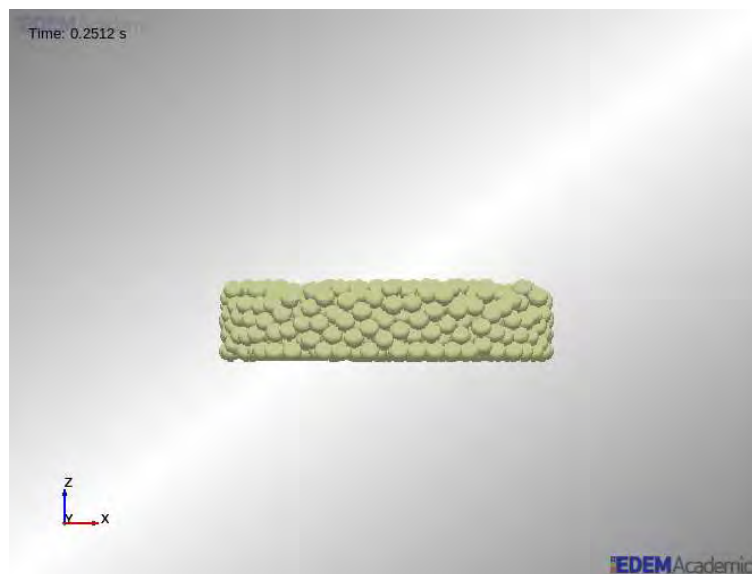


Contactos 3101, enlaces intactos 2868, enlaces rotos 233

Figura 43. Parámetros HMwB orden $1e+10$. Comprimido (izq.) Fuerza de compresión (dcha.)

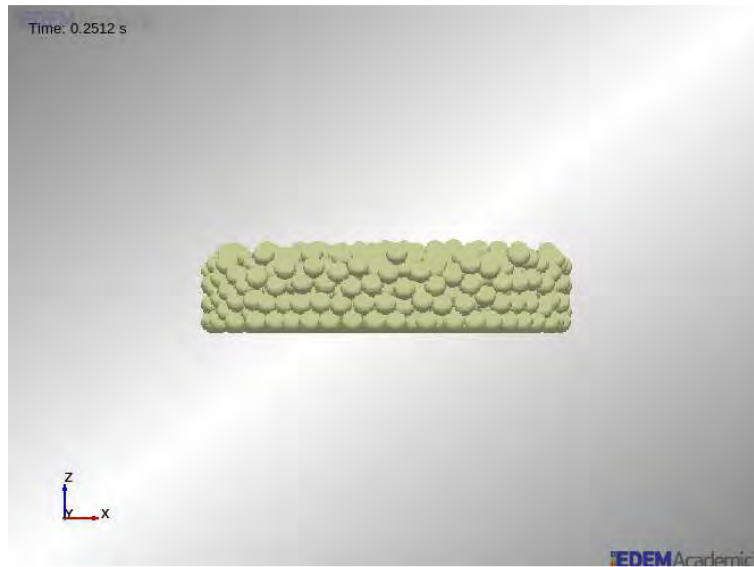
Dados los resultados hasta el momento, se prosiguió con el incremento del valor de los parámetros del modelo de contacto para tratar de encontrar un óptimo en la simulación. Así, se realizó una nueva batería de simulaciones fijando los valores de velocidad a 1 m/s y módulo de corte a 7 GPa, variando el modelo de contacto.

Atendiendo al número de contactos generados, a medida que aumenta el valor de las variables de cohesión, se reduce ostensiblemente la cantidad de enlaces rotos, lo que mejora la calidad y aspecto del compacto. Al mismo tiempo, la fuerza de compresión también reduce su valor, como se puede ver en las diferentes gráficas posteriores.



Contactos 3071, enlaces intactos 2977, enlaces rotos 94

Figura 44. Parámetros HMwB orden $1e+11$. Comprimido (izq.) Fuerza de compresión (dcha.)



Contactos 3106, enlaces intactos 3070, enlaces rotos 36

Figura 45. Parámetros HMwB orden $1e+12$. Comprimido (izq.) Fuerza de compresión (dcha.)

En estas gráficas, también se puede observar una variación introducida a la hora de generar el comprimido y es un pequeño escalón de tiempo en el que se sostiene el punzón superior en la posición final de su recorrido con el fin de dar más tiempo para que se asienten las partículas y redistribuyan. Ese pequeño lapso de tiempo supone un incremento asumible en el tiempo total de simulación.

En las siguientes líneas, se puede observar, en imágenes, la influencia del valor de los parámetros de configuración del método de contactos, tal y como se ha ido adelantando.

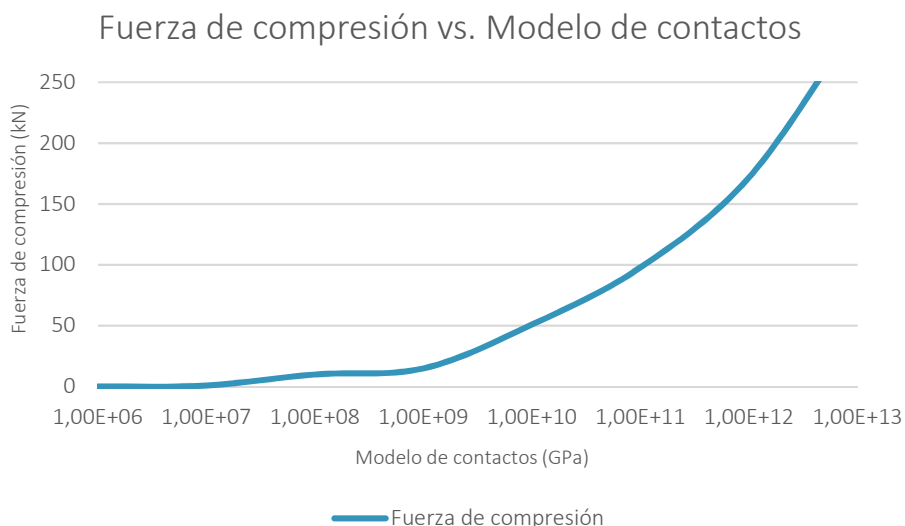


Figura 46. Evolución de la fuerza de compresión frente valores de HMwB

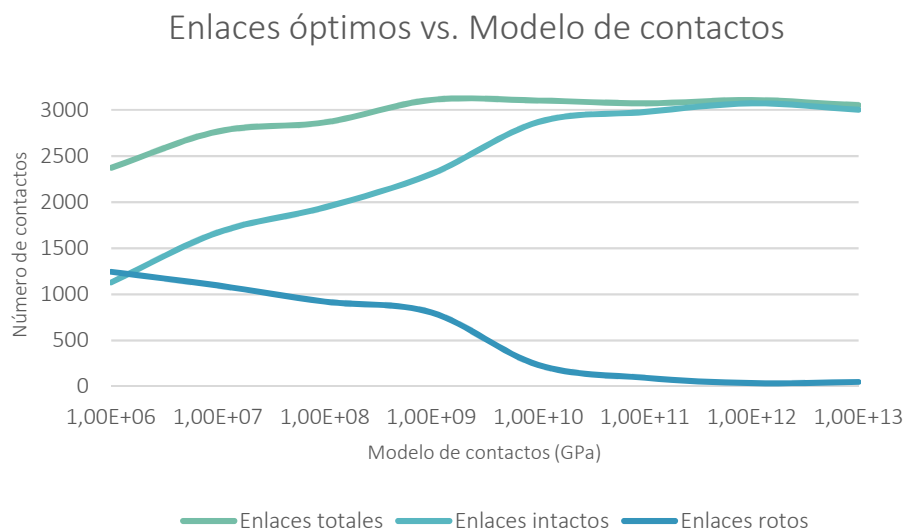


Figura 47. Evolución de los enlaces en función de los valores de HMwB

En este caso, se ha empleado una escala logarítmica, dado la naturaleza de los datos a analizar. Atendiendo a la evolución de la fuerza de compresión resultante, se ve que crece casi exponencialmente conforme se aumenta el valor de los parámetros de *Hertz Mindlin with Bonding*.

A la hora de determinar qué valor resulta más adecuado cabría pensar que para valores bajos del modelo de contacto, ya que la fuerza de compresión es muy baja, pero si se observa la ilustración 47, se ve que apenas existe cohesión entre las partículas, ya que el número de enlaces rotos es superior al de enlaces intactos. Por ello, aunque sea un tanto desmedido, o irreal tal vez, se tiene que los resultados óptimos para el modelo de enlaces de *EDeM*, se da para valores elevados, en torno a potencia de orden once y doce, donde el número de enlaces rotos empieza a tender a cero y la fuerza de compresión no ha comenzado su crecimiento de manera drástica.

4.1.3 Modelado de comprimido de aditivo alimentario

4.1.3.1 Parámetros de configuración de la simulación. Puntos críticos

Ya se ha comentado en apartados y capítulos anteriores, el porqué de la elección del valor de numerosos parámetros configurables en las simulaciones de los sistemas objeto de estudio.

Siguiendo en el proceso de búsqueda del nuevo modelo de comprimido de aditivo alimentario, y superadas las pruebas preliminares, con la determinación alcanzada de las variables principales en la compresión, como velocidad, módulo de corte y valores del modelo de contactos, cabe pensar en este punto en cómo dirimir las múltiples

combinaciones que se pueden originar. Se aborda entonces, el proceso de simulación del comprimido con su morfología final y diferentes tamaños de partícula con unas pequeñas variaciones, circunstanciales, más que otra cosa, de los parámetros antedichos.

Dado que se va a trabajar con un único tamaño de comprimido, de seis gramos, en la tabla 15 se tiene el cálculo para conformar el compacto con los diferentes tamaños de partícula que se van a estudiar.

Cabe destacar, que el volumen teórico real del comprimido tiene un valor, pero el volumen resultante para el comprimido simulado puede verse afectado por el número de las partículas que lo van a conformar, ya que, generando el número de partículas calculado, el comprimido adquiere un volumen mayor del esperado, es por ello que hay que poner un número de partículas menor que el teórico, para dotarlo de unas dimensiones lo más aproximadas a la realidad. El volumen teórico del comprimido, al dividirlo en n partes, siendo n el número de partículas, es una partición matemática, pero física, el volumen de cada una de las partículas que forman la pastilla está representado por una esfera sólida e indeformable y por eso, se da este hecho de disparidad teórica y simulada en el número de partículas, debido a la recolocación de las partículas y a los intersticios que se pueden ocasionar. Un comprimido generado con un mayor número de partículas sufre mayores fuerzas de compresión y es despedido con relativa “violencia” de los mecanismos de compresión, como puede verse en la ilustración 48.

Tabla 15. Cálculo de número de partículas en función del radio
Esferas por comprimido a volumen constante

	Radio		Volumen		Esferas teóricas		Simuladas	
radio 1	r_1	0,75 mm	volumen	V_1	1,7671 mm ³	esferas	q_1 1398	1100
radio 2	r_2	1,00 mm	volumen	V_2	4,1888 mm ³	esferas	q_2 590	410
radio 3	r_3	1,25 mm	volumen	V_3	8,1812 mm ³	esferas	q_3 302	260
radio 4	r_4	1,50 mm	volumen	V_4	14,1372 mm ³	esferas	q_4 175	150
radio 5	r_5	1,75 mm	volumen	V_5	22,4493 mm ³	esferas	q_5 110	90
radio 6	r_6	2,00 mm	volumen	V_6	33,5103 mm ³	esferas	q_6 74	55
Volumen del comprimido				V	2471,0955 mm ³			

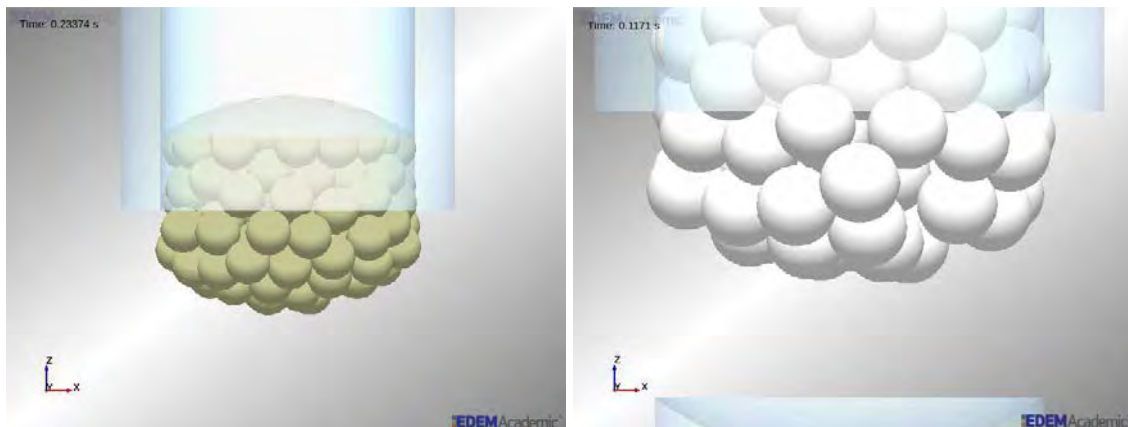


Figura 48. Salida de un comprimido con mayor número de esferas del teórico aceptado

En este caso, el cambio de morfología del compacto a generar no presenta alteración en el uso de los parámetros estudiados con anterioridad. El módulo de corte empleado en la mayoría de las simulaciones ha sido 7 GPa, llegando a subir en algunos casos hasta los diez. La velocidad del punzón superior, que ejerce la fuerza de compresión, tampoco se ha variado de los 0.4 m/s. En algunos casos, cuando se ha subido el módulo de corte o variado el número de partículas, entorno al número teórico, se ha podido subir la velocidad hasta los 0.6 m/s, no encontrando mucha variación en la morfología del comprimido, aunque si un ligero aumento en la fuerza máxima de compresión. Lo mismo ocurre para los parámetros del modelo de contacto *Hertz Mindlin with Bonding*, los enlaces se han generado, finalmente, en el orden de $1e+11$. Los valores de las interacciones entre partículas y con la geometría son los mismos ensayados en las pruebas preliminares, mostrados anteriormente en la tabla 8.

Lo que se ha perseguido, en todos los casos, es conseguir una densidad de compacto máxima, siendo el criterio de elección meramente visual. La consecución de este hecho se ha logrado variando el número de partículas, sin llegar a sobrepasar el número teórico para no generar tensiones y deformaciones de salida en el comprimido, para intentar minimizar el aire entre las esferas que dan forma al comprimido. Al mismo tiempo, se ha sostenido el ejercicio de la presión del punzón durante un escalón de tiempo, para favorecer el acomodo de las partículas, en lugar de aplicar una presión instantánea.

En el caso de los valores propios del software de simulación, se ha mantenido constante el valor de *fixed time step* alrededor de 0.15 - 0.2 μ s para favorecer, junto con un valor de tamaño de celda de 2 - 3, el cálculo de posiciones de las partículas y sus enlaces. El intervalo de salvaguarda de datos ha sido de 0.1 ms, generándose una buena cantidad de información para interpretar los resultados obtenidos.

4.1.3.2 Modelos de comprimido generados. Comparativa de tamaños de partícula estudiados

Una vez fijados todos los parámetros de simulación, se realizaron diferentes baterías para diferentes tamaños de partícula con el fin de obtener varios modelos teniendo en cuenta la repetibilidad y aleatoriedad del método de simulación.

Se muestran seguidamente, el modelo de comprimido de aditivo alimentario obtenido para cada uno de los seis radios de partícula, en milímetros, definidos en el intervalo:

$$[0.75, 2] \Leftrightarrow 0.75 \leq r \leq 2, \forall r, \Delta r_i = 0.25.$$

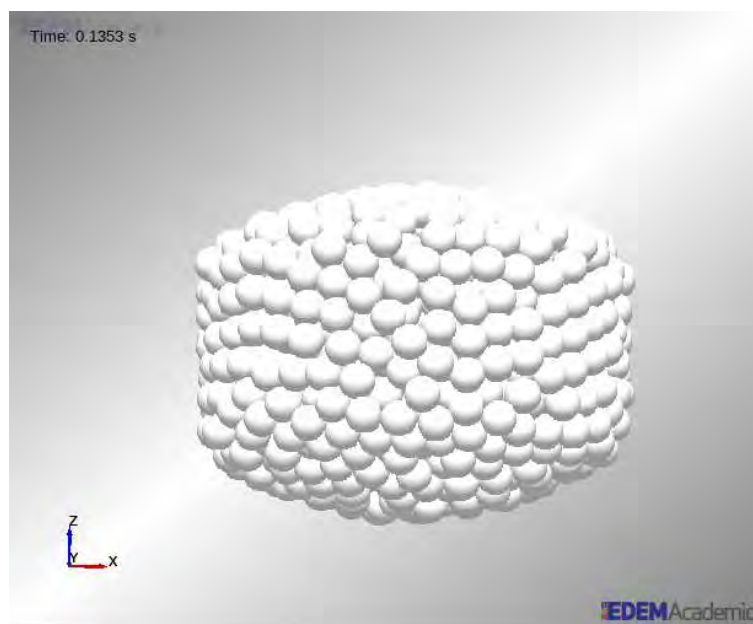


Figura 49. Modelo de comprimido obtenido para partícula de radio 0.75 mm

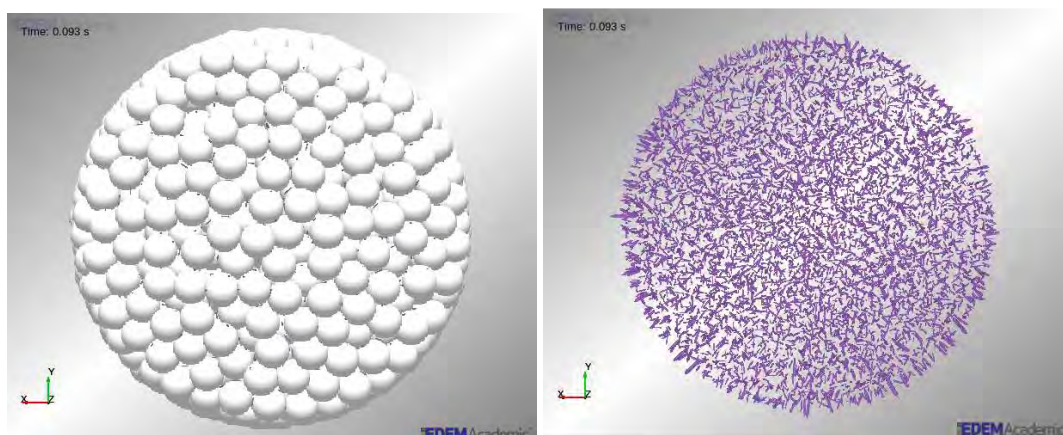


Figura 50. Retícula de contactos generados para el comprimido de 0.75 mm

Para el primer tamaño de partícula testado, radio de 0.75 mm, las conclusiones son positivas casi en su totalidad. La fuerza de compresión máxima resultante es de un valor

moderado, comparado con otros valores obtenidos, y el aspecto visual del compacto es muy bueno. La red de contactos es homogénea, no habiendo demasiados intersticios y un número de enlaces bajo, resultando una proporción de bondad de enlaces intactos respecto de los totales de casi el noventa por ciento. El hándicap de este modelo reside en el coste computacional, demasiado elevado, llegando alrededor de las 48 horas, sobrepasándolas en algunos casos.

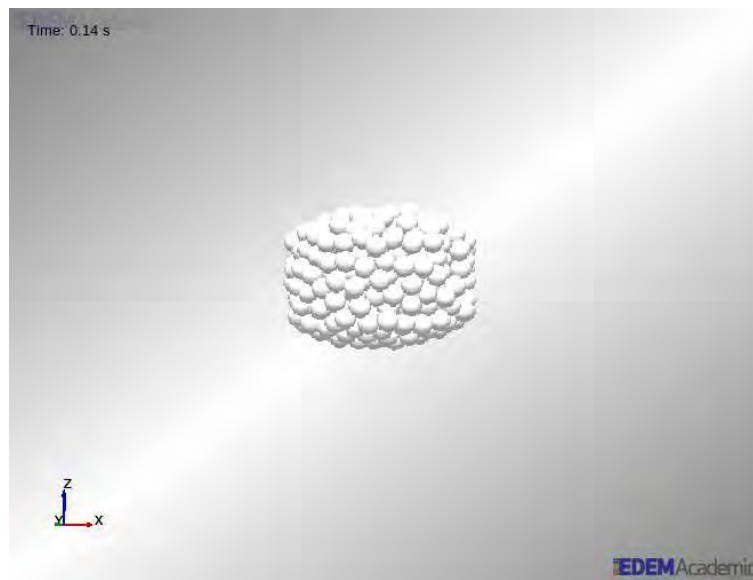


Figura 51. Modelo de comprimido obtenido para partícula de radio 1 mm

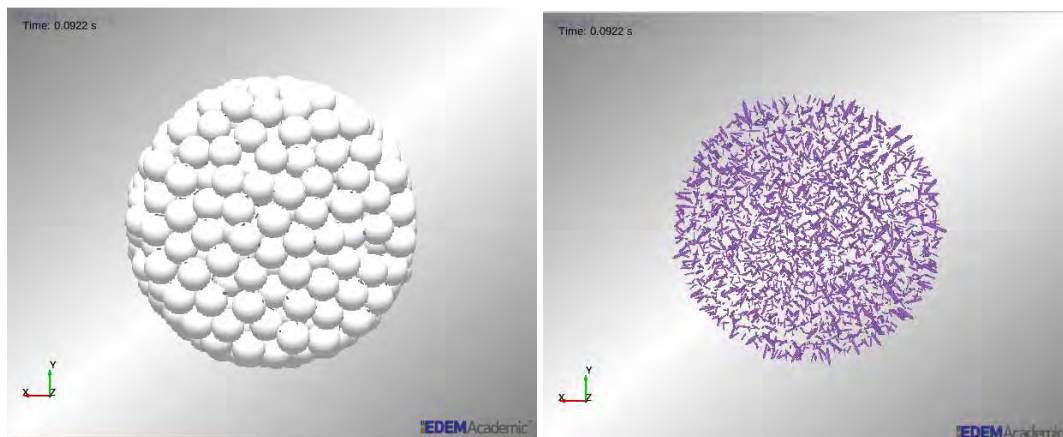


Figura 52. Retícula de contactos generados para el comprimido de 1 mm

Atendiendo al siguiente modelo realizado, de radio de partícula de 1 mm, los resultados respecto al modelo anterior son parcialmente mejores. Se reduce la fuerza de compresión máxima resultante, se mantiene el buen aspecto de la morfología de la pastilla y la red de contactos, e intersticios, teniendo una buena densidad de compacto, y se mejora el porcentaje de bondad sobrepasando en este caso el noventa por ciento

anterior. El tiempo de simulación se reduce considerablemente, al hacerlo el número de partículas, hasta casi treinta horas.



Figura 53. Modelo de comprimido obtenido para partícula de radio 1.25 mm

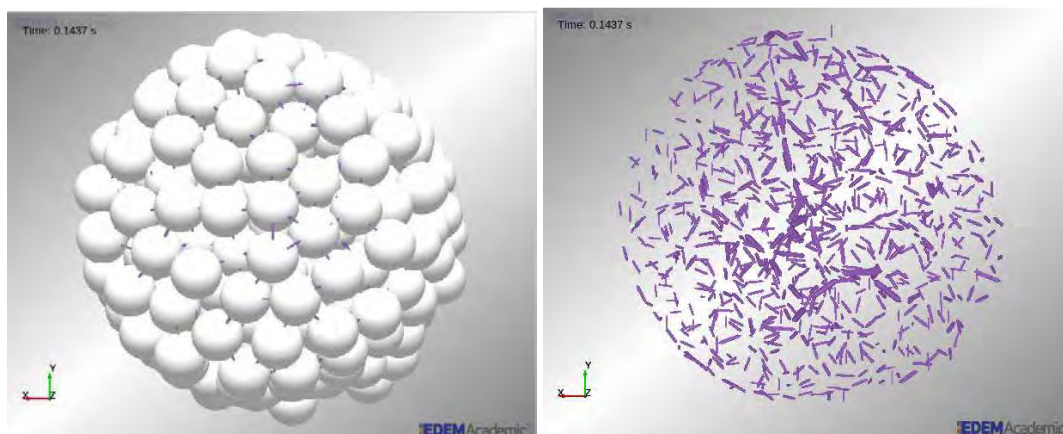


Figura 54. Retícula de contactos generados para el comprimido de 1.25 mm

En el tercer modelo desarrollado, el tamaño de partícula asciende 0.25 mm respecto al radio del anterior, es decir 1.25 mm, y en este caso se sigue manteniendo el buen aspecto resultante y una homogeneidad en la red de contactos, aunque se reduce la densidad de compacto ya que al ser mayores las esferas que componen el comprimido, estas comienzan a dejar mayores huecos. La bondad del comprimido en lo que a enlaces se refiere es casi del ochenta y nueve por ciento, lo que lo hace más que aceptable. Lo mismo ocurre desde el punto de vista computacional, es óptimo, al reducirse el número de esferas. El peor aspecto ha resultado la fuerza de compresión, se dispara hasta los 164 kN. Computacionalmente se reduce el coste considerablemente hasta las veinte horas.



Figura 55. Modelo de comprimido obtenido para partícula de radio 1.5 mm

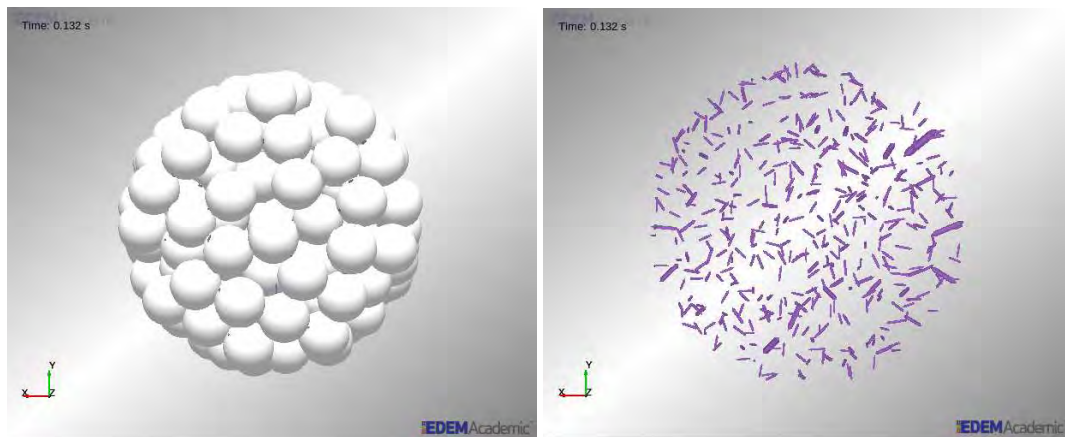


Figura 56. Retícula de contactos generados para el comprimido de 1.5 mm



Figura 57. Modelo de comprimido obtenido para partícula de radio 1.75 mm

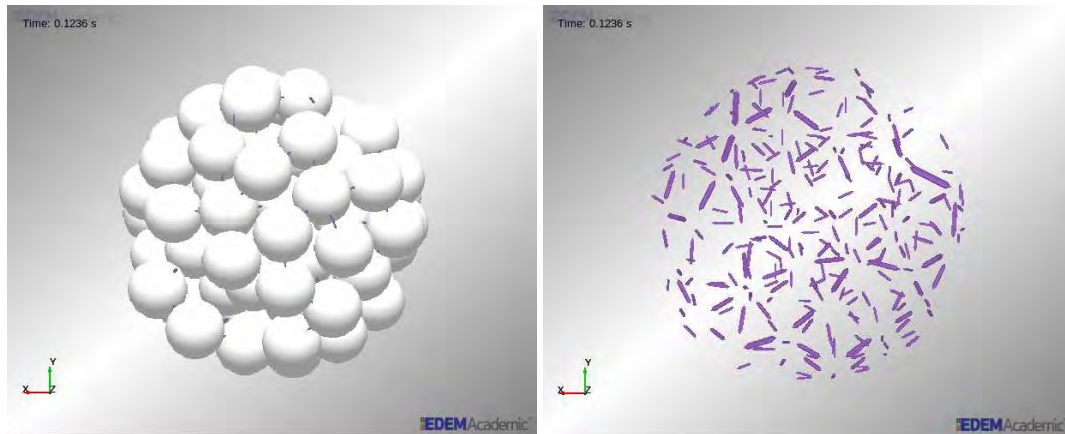


Figura 58. Retícula de contactos generados para el comprimido de 1.75 mm

En los dos modelos anteriores, se han encontrado resultados muy similares. Prácticamente, para ambos tamaños de partículas, 1.5 y 1.75 mm, el valor de fuerza máxima de compresión es similar, y casi tan alto como en el tercer modelo. Los tiempos de simulación son mucho más bajos, del orden de nueve a seis horas, ya que son pocas esferas simuladas, hecho que hace que se encuentre una menor densidad de compacto por el hecho de ser partículas grandes. El aspecto visual del comprimido es relativamente bueno para ambos tamaños de esfera constitutiva.



Figura 59. Modelo de comprimido obtenido para partícula de radio 2 mm

Por último, en la imagen anterior y las dos siguientes, se muestra el último comprimido estudiado, el de radio de partícula de dos milímetros. En este caso se alcanza un buen número de enlaces, teniendo en cuenta el gran tamaño de las partículas y escasa cantidad de las mismas. En lo que al aspecto del comprimido se refiere, dado el tamaño de las

partículas, tras un buen número de simulaciones, se ha conseguido uno que es aceptable. Este modelo es el que menos inversión requiere, ya que se resuelve en unas cuatro horas.

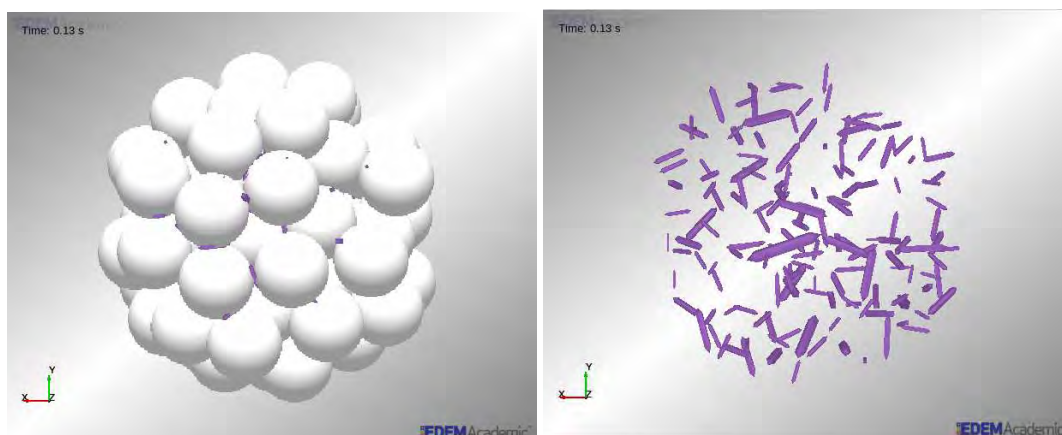


Figura 60. Retícula de contactos generados para el comprimido de 2 mm

La siguiente tabla resume, para cada uno de los modelos de comprimido mostrados, los parámetros resultantes más relevantes.

Tabla 16. Datos relevantes de los comprimidos generados

Valores de los enlaces, fuerza máxima de compresión y % de bondad de los comprimidos definitivos

Radio (mm)	E. totales	E. intactos	E. rotos	$F_{c,m\acute{a}x}$ (kN)	$F_{c,avg}$ (kN)	nº partículas	% bondad	t_{sim} (h)
0.75	6394	5601	793	93.64	16.87	1100	87.60	44
1	1764	1616	148	50.01	9.22	410	91.61	29
1.25	990	881	109	164.05	38.75	260	88.99	20
1.5	430	382	48	164.70	35.71	150	88.84	9
1.75	318	254	64	153.65	35.58	90	79.87	6
2	176	148	28	115.81	24.77	55	84.09	4

La generación de los contactos se produce en el momento en el que el punzón superior acaba su recorrido. En ese instante, la concentración de enlaces es máxima, pero según va pasando el tiempo y el comprimido se va liberando, van fallando algunos de ellos, tendiendo al final al número de enlaces intactos que se muestra en la tabla 16. En la figura 61 se puede observar dicha evolución temporal de la generación de enlaces.

En relación a la evolución de los contactos, otro aspecto a tener en cuenta es el solapamiento que puede llegar a darse entre las partículas durante el ejercicio de la fuerza de compresión. Se muestra seguidamente una de las gráficas de EDEM más

relevantes que se ha encontrado en esta parte de la investigación. Para todos los tamaños de partícula ensayados, se ha visto que el solapamiento entre partículas oscila desde 0.4 a 0.5 mm como valores máximos, produciéndose durante el momento de máxima fuerza de compresión, entre los instantes de tiempo 0.08 y 0.09 s. Después de ese tiempo, el comprimido se libera y las partículas se relajan recuperando parte de esa posición inicial previa al ejercicio de la presión, quedando patente el enlace o produciéndose rotura ya que en los instantes posteriores se produce la liberación del comprimido y comienzan a romperse enlaces a causa de la fricción con las paredes de la matriz hasta el despegue total.

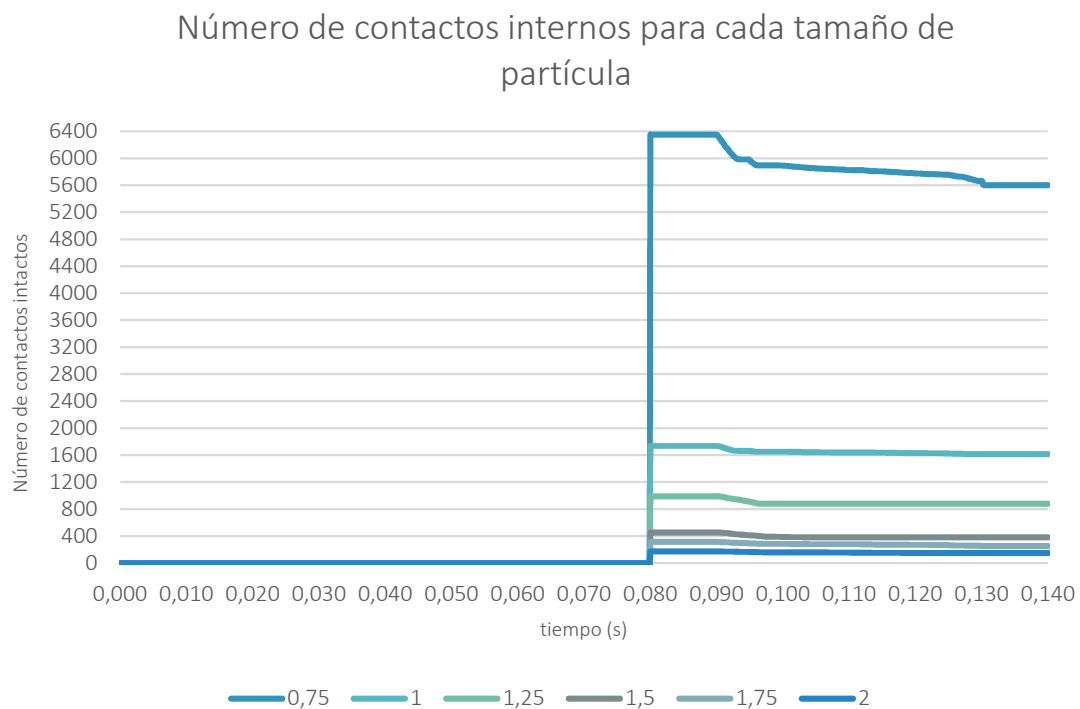


Figura 61. Evolución de la creación de enlaces entre partículas

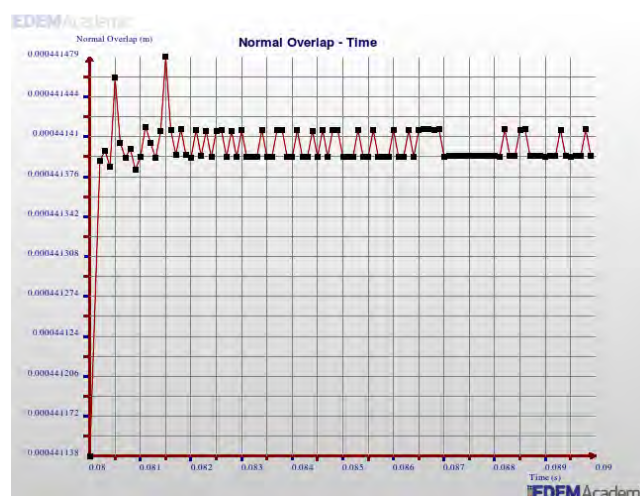


Figura 62. Solapamiento normal en los enlaces de las partículas

La componente tangencial de la fuerza en los enlaces varía en función del tamaño y número de partículas. En la siguiente gráfica se puede ver su evolución para los diferentes tamaños de esferas estudiados.

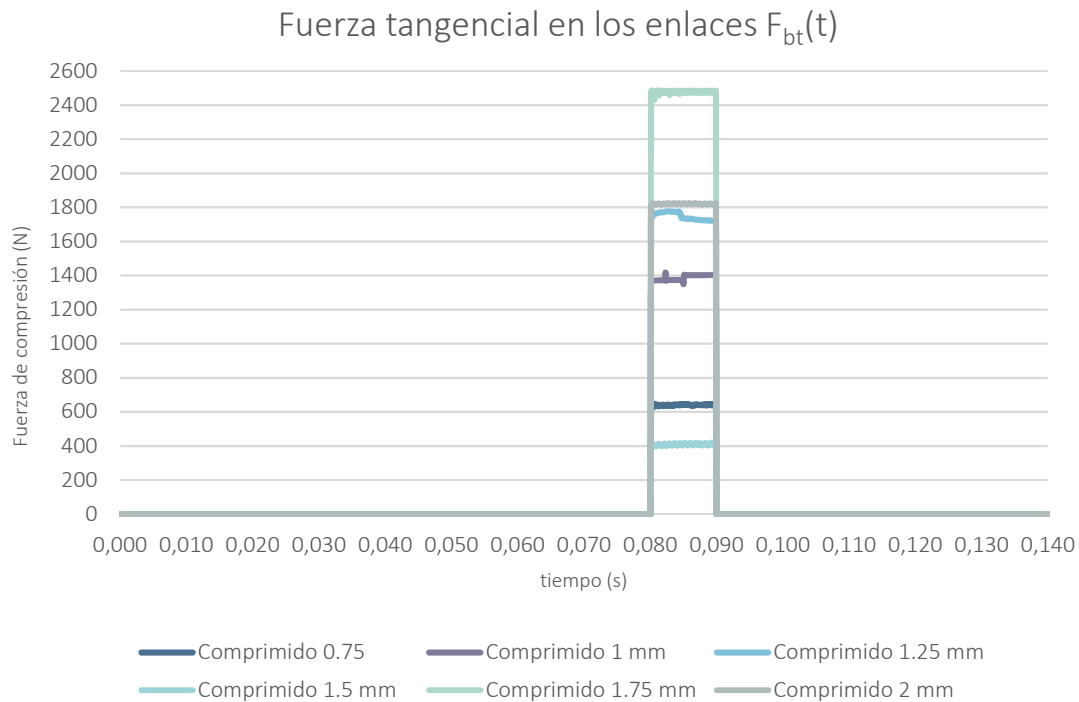


Figura 63. Fuerza en los enlaces generados

Para concluir con los datos más relevantes que se han obtenido de la generación de los modelos de comprimido de aditivo alimentario, se muestra un gráfico comparativo de la fuerza de compresión resultante en la generación de cada uno de los comprimidos mostrados anteriormente, en la Figura 63. Observando la gráfica comparativa de las fuerzas de compresión resultantes para los modelos de comprimido obtenidos, se puede ver que todas atienden a la misma secuencia de fabricación. En el efecto final de la fuerza de compresión, influye directamente la cantidad y tamaño de las partículas. El volumen inicial del polvo de sal a comprimir es relativo, ya que, a mayor radio de partículas, mayor es este por la aleatoriedad de caída de las esferas. Las simulaciones están diseñadas para un número óptimo de partículas de tal forma que, para cada radio de esfera, siempre se genera el mismo volumen final de comprimido. Esta variación del tamaño de las partículas provoca también que, cuanto más grandes sean, mayores intersticios de aire se produzcan y más complicado sea generar un compacto denso, por lo que la fuerza de compresión a ejercer es mayor, para generar un número de enlaces máximo en función del tamaño de partícula. Así, ocurre que, para tamaños de partícula intermedios del intervalo estudiado, se dan valores de fuerza compresión elevados, más que para valores de esferas pequeñas (0.75 o 1 mm). Otro factor influyente es el valor configurado para

los parámetros del modelo de contacto, al ser tan elevado, para generar una buena cohesión, quizás sea demasiado alto para que se reproduzca fielmente el comportamiento físico en la simulación, y por eso se dan los saltos entre las fuerzas resultantes para los diferentes tamaños de partícula.

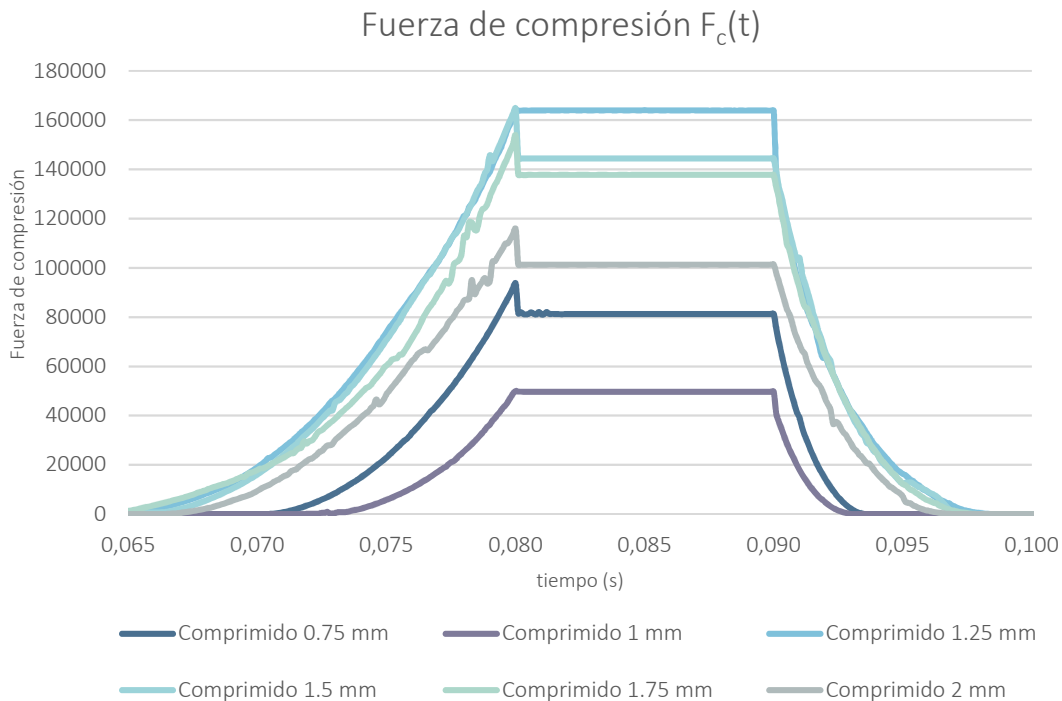


Figura 64. Comparativa de las curvas de fuerza de compresión resultante para cada modelo de comprimido

Así, los comprimidos pueden resultar válidos en función del fin al que se destinen, es decir, para diferentes aplicaciones pueden ser óptimos algunos de ellos, por ejemplo, los de radio de partícula 0.75 y 1, en función del coste computacional que se pueda asumir, se pueden emplear en sistemas en los que se simulen varios de ellos, pero no un gran número, puesto que el coste de simulación se dispararía. Para aplicaciones en las que sea necesario simular un número mayor, sería factible el empleo de comprimidos de menor número de partículas, siendo este el caso el del sistema dosificador de aditivos. Por otro lado, en aplicaciones de friabilidad o rotura, todos son susceptibles de un uso óptimo, sin tener impacto relevante sobre el coste computacional, al tratarse de simulaciones de un único comprimido.

4.2 Modelado del sistema dosificador de aditivo

4.2.1 Introducción

Una vez definidos los modelos de comprimido de aditivo alimentario, se propone su simulación en el objeto principal de esta tesis doctoral, el sistema dosificador de comprimidos para proceder a la optimización de su configuración de funcionamiento.

Dados los tiempos de simulación alcanzados para cada modelo de compacto, es de suponer que una vez se empleen estos modelos en otra aplicación de uso, la duración e inversión computacional de esa nueva simulación será mayor para los modelos de comprimido en los que se invierte un mayor tiempo de simulación que para los de menor tiempo de creación. Así, una simulación de un número n de comprimidos del modelo generado con partículas de 0.75 mm, que dispone de más de mil esferas, será mucho más costosa que otra que emplee el mismo número de comprimidos de tamaño de partícula de 2 mm. Por ello, la selección realizada para la nueva batería de simulaciones del sistema dosificador, dado que se han de simular un buen número de comprimidos, comprende tres tamaños de partícula, a saber: 1.5, 1.75 y 2 mm, es decir, los de mayor tamaño de partícula y por ello menor coste computacional.

Determinados los modelos de comprimido a utilizar en esta fase de la investigación, se plantea como primer paso incluir los modelos citados en la simulación del dispositivo dosificador. Gracias al desarrollo del software EDEM y la evolución de numerosas librerías y métodos para el tratamiento de partículas, se ha aprovechado la creación de una nueva herramienta, llamada *ParticleReplacement*, para poder sustituir una partícula, o varias, por un compendio de otras. Por tanto, empleando este método, es posible la inclusión de los comprimidos generados en el dispositivo dosificador para estudiar y optimizar su comportamiento.

Para la optimización del dispositivo se ha llevado a cabo una serie de simulaciones con los modelos de comprimido de diferente tamaño de partícula constitutiva para estudiar, por un lado, la velocidad de serialización medida en comprimidos por minuto del sistema y, por otro, la fuerza de desgaste que sufren los comprimidos durante la dosificación. En esta dirección, se modifican algunos de los diferentes aspectos de la configuración de trabajo de la dosificadora como son el ángulo de inclinación del depósito y, posteriormente, los discos del sistema serializador de salida. Como se parte con cierto conocimiento y se dispone de los datos ya obtenidos en la investigación previamente realizada, solamente se van a optimizar dos de los casos resueltos en ella. Esto es así porque ya se descartaron otras configuraciones de velocidades de serialización alta, a causa del impacto que sufren los comprimidos a la salida del sistema, o los ángulos de

inclinación de depósito elevados, ya que originan apelmazamientos y atascos excesivos, también en la salida, hecho altamente perjudicial para la integridad de los compactos.

A continuación, se da explicación a los pasos realizados para la consecución de la mejora del dispositivo y los resultados obtenidos en ese camino.

4.2.2 Influencia de los parámetros de simulación

A lo largo de los diferentes capítulos del documento, se han ido mostrando los parámetros de configuración de los diferentes materiales empleados en la simulación.

Los valores de las características físicas de los distintos materiales implicados en cuanto a densidad, módulo de corte, coeficiente de Poisson, han permanecido invariables respecto a los valores empleados en las simulaciones de generación de comprimidos explicadas en este documento.

Sin embargo, en esta fase de la investigación, se han variado los valores de las interacciones de los materiales para intentar aproximar el comportamiento simulado al que sucede en la realidad, en diferentes simulaciones de la batería realizada. Los valores iniciales de partida mostrados en las tablas 7 y 8. Una de las variaciones experimentadas se muestra en la siguiente tabla.

Tabla 17. **Alguna de las variaciones de los parámetros de configuraciones físicas**

Interacciones	C. de restitución	Fricción estática	Fricción dinámica
Sal - Sal	0.30	0.5	0.01
Sal - Policarbonato	0.15	0.27	0.01
Sal - Aluminio	0.15	0.2	0.05

Estas variaciones se han realizado con el fin de fidelizar el comportamiento de los comprimidos simulados. Así en el caso del rozamiento, se ha variado para evitar que los comprimidos se quedan estancos en el sistema dosificador ya que, al mismo tiempo, el tamaño de partícula también incide en la movilidad de los comprimidos, así, cuanto mayor es el radio de las esferas constituyentes, mayores huecos se encuentran en la superficie de los comprimidos y mayor posibilidad de quedarse estancos sobre el fondo del dosificador, por eso, en alguna simulación es conveniente bajar el rozamiento para que rueden y deslicen unos respecto de otros además de por la base del sistema, con el fin de lograr un resultado veraz. El coeficiente de restitución se ha modificado en el caso de la interacción entre la sal y el policarbonato, para evitar rebote excesivo en la generación de los comprimidos.

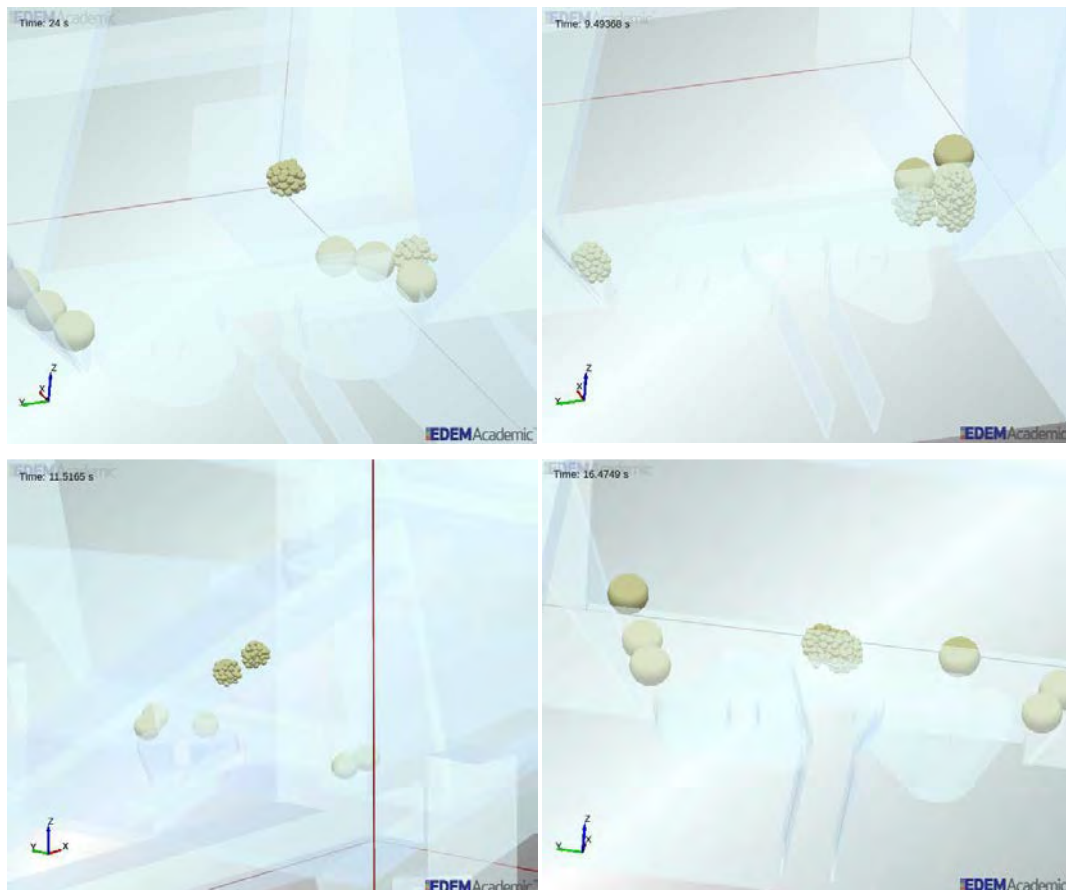


Figura 65. Diferentes efectos del cambio de valor del rozamiento

En el caso del modelo de contactos empleado, sigue siendo el utilizado con anterioridad, el modelo *Hertz Mindlin with Bonding*, su influencia en estas simulaciones es importante ya que, como se verá el siguiente punto, va más allá de modelar los roces y contactos entre los comprimidos, puesto que es responsable, una vez más, de la unión de las partículas a través de herramienta *ParticleReplacement*.

En relación a los parámetros de configuración de las simulaciones, dado que existen enlaces a generar, se han empleado valores continuistas como los ya utilizados en las fases previas de la investigación, para lograr un cálculo minucioso de las posibles roturas de enlaces y posiciones de partículas etc. El time step utilizado, independientemente del modelo de comprimido empleado en el dosificador, está en torno a 0.2 microsegundos, con unos intervalos de guardado de un milisegundo. Con valores más altos de time step, las simulaciones no funcionan de manera correcta, dado que el programa no consigue calcular bien los centros de las partículas, los enlaces y el movimiento general de los comprimidos, produciéndose pérdida de partículas y saltos inconexos.

4.2.3 Reemplazo de partículas

La herramienta de reemplazo de partículas, *ParticleReplacement*, consiste en un modelo que sustituye una partícula existente, o varias, en un instante determinado, por un compendio de otras partículas. Este compendio final de partículas de reemplazo, se acomodará a la forma original de la partícula inicial, aun pudiendo tener propiedades diferentes.

En las simulaciones del sistema dosificador realizadas, se parte de una factoría virtual de generación de esferas que crea diez partículas cuyo radio es el mismo que el de la base del cilindro del comprimido final. En un instante definido, estas diez partículas son sustituidas por los modelos de comprimido de aditivo previamente obtenidos. Con esa intención, se deben definir dos tipos de partícula, el primero de ellos es el tipo de partícula que va a ser sustituida, otorgándole propiedades de tamaño, material etc. y el segundo corresponde a las partículas finales, cuyas propiedades son idénticas a las anteriores salvo el radio. Estas últimas, en cada simulación correspondiente, tendrán el tamaño de las partículas que conforman el modelo de comprimido que se va a estudiar en cada caso. Para que esta transformación se haga efectiva, es necesario hacer una transferencia de la biblioteca correspondiente de EDEM y crear lo que por defecto se llama factoría personalizada de reemplazo de partículas. Esta factoría es compilada por EDEM y materializa el reemplazo satisfactoriamente en función de los parámetros fijados.

Una vez hecho lo anterior, para dar sentido la sustitución, se tiene un archivo con los datos exportados de la posición (coordenadas x, y, z) de todas las partículas que han sido cohesionadas en las simulaciones de compresión (obtención de los diferentes modelos de comprimidos). Esos archivos, son interpretados por EDEM tal y como se ha descrito en la metodología, para realizar el reemplazo final. En el instante en el que se debe efectuar el cambio de unas partículas por otras, las originales (partículas unitarias) desaparecen y surgen las partículas cohesionadas como un todo (comprimido generado).

Cuando se tiene materializada la sustitución, gracias a la factoría personalizada y fijadas las posiciones de las partículas, el modelo de *Hertz Mindlin with Bonding* sigue siendo, en este caso, el encargado de realizar los cálculos de contactos entre partículas, y por ello el artífice de los enlaces. Así, los valores que configuran sus variables parametrizables siguen siendo del orden de $e+11$, ya que, si no, los comprimidos se desmoronan una vez creados. Este hecho es necesario para poder realizar la sustitución con éxito, en detrimento del coste computacional, que es elevado.

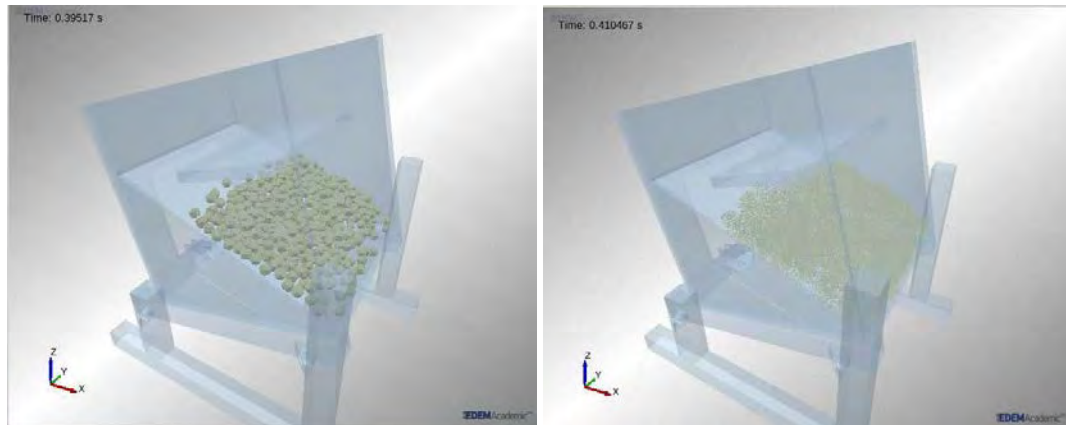


Figura 66. Reemplazo de partículas defectuoso (i)

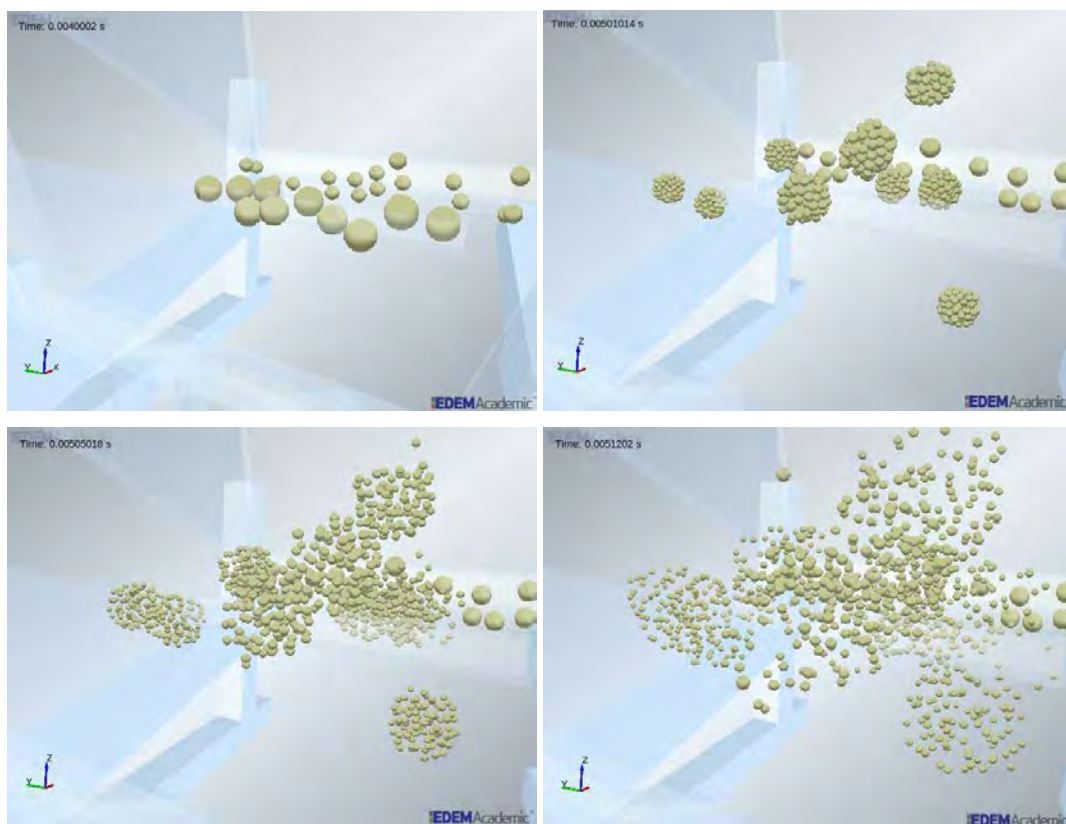


Figura 67. Reemplazo de partículas defectuoso (ii)

Hasta establecer los valores finales de los parámetros del modelo de contacto, se realizaron diferentes pruebas preliminares y aproximaciones. En las imágenes anteriores de la ilustración 66, se puede ver cómo para valores de orden insuficiente no se produce la cohesión de las partículas de manera correcta; una vez generadas las partículas unitarias, son sustituidas por el comprimido final pero las partículas que lo conforman no consiguen enlazarse por valores de cohesión insuficientes.

Otro hecho que se ha observado es que cuando se parametriza el modelo de contactos con valores muy elevados, las partículas no logran cohesionar, de la misma forma que

Optimización de sistema dosificador automático de aditivo alimentario comprimido empleando el método de elementos discretos (DEM)

ocurría en las simulaciones de compresión, aunque en este caso las partículas salen despedidas de su posición como si colisionaran unas con otras cuando se intentan enlazar, debido a dichos valores. En la imagen 67, se muestra unas instantáneas del efecto de “colisión” observado. Tras diferentes pruebas realizadas, ajustando los parámetros adecuadamente, los resultados que otorga esta herramienta EDEM, son como los que se pueden observar a continuación.

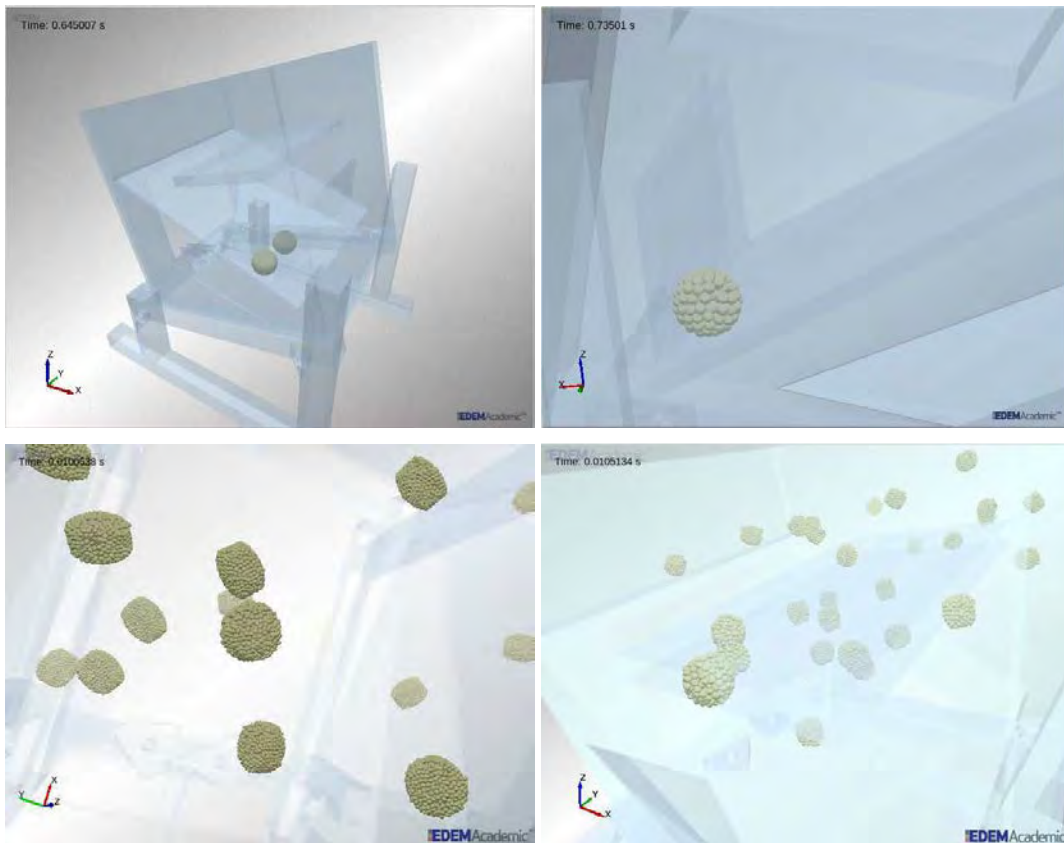


Figura 68. Prueba preliminar de reemplazo con éxito

Una vez fijados los parámetros satisfactorios, se comenzó la fase de simulación de la inclusión de los modelos de comprimido seleccionados anteriormente. Seguidamente, se pueden ver los diferentes reemplazos satisfactorios para todos ellos.

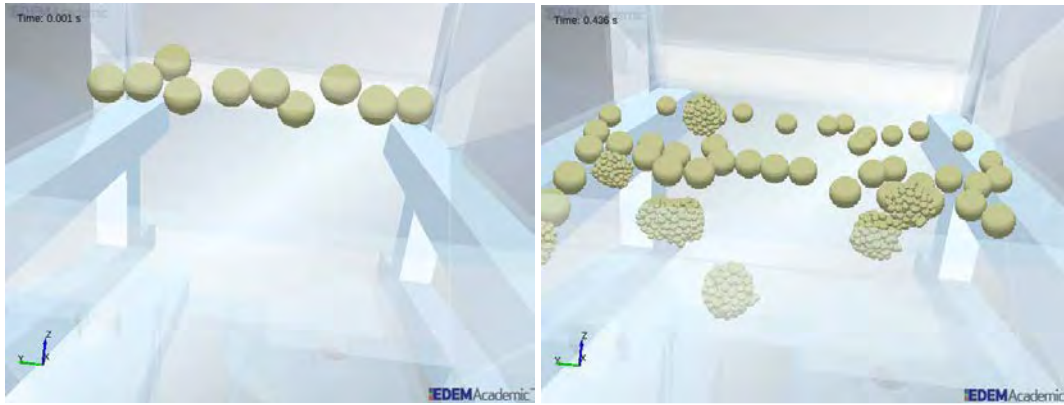


Figura 69. Reemplazo de partículas para comprimido de 1.5 mm

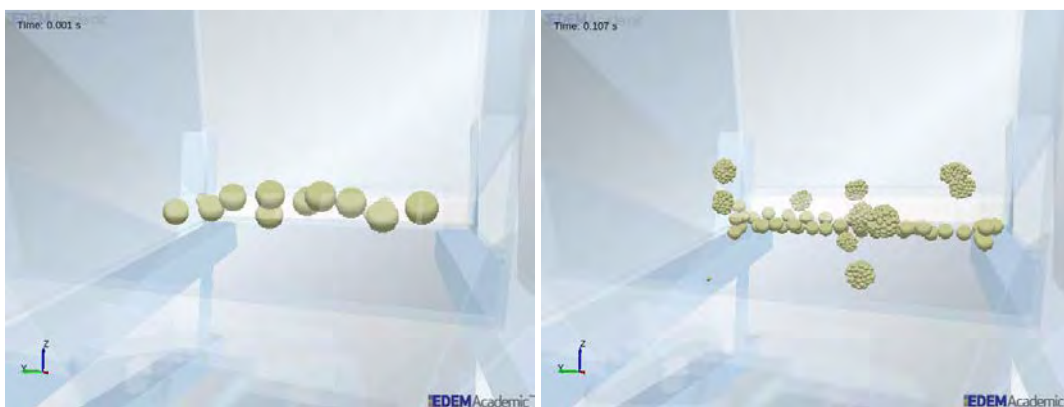


Figura 70. Reemplazo de partículas para comprimido de 1.75 mm

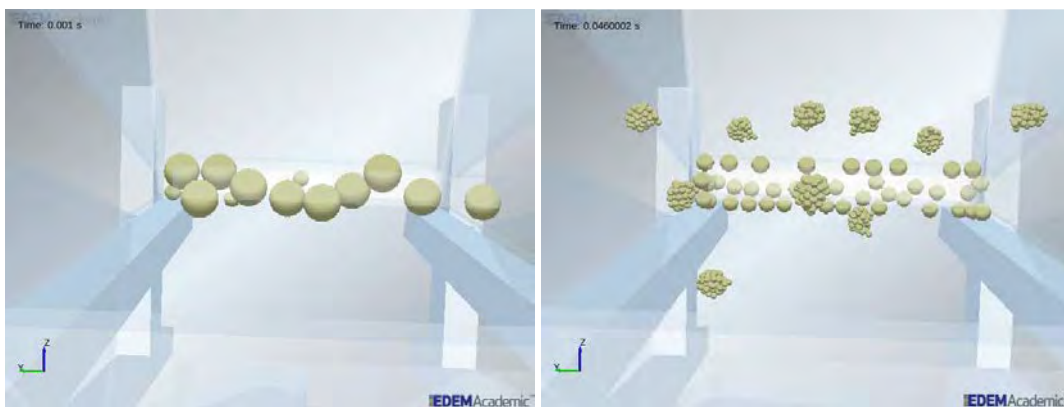


Figura 71. Reemplazo de partículas para comprimido de 2 mm

4.2.4 Validación del modelo de comprimido

En las investigaciones previas realizadas (Guerra, 2011), se realizaron una serie de pruebas reales y simulaciones con el fin de encontrar una configuración óptima para el dispositivo automático dosificador de aditivo alimentario comprimido. El sistema serializador empleado en dichas pruebas reales y simulaciones fue el conformado por dos álabes triangulares con los vértices redondeados, como se puede ver la imagen 74. Para esta configuración se alcanzó una velocidad de serialización de trescientos comprimidos por minuto, tanto en la realidad como en la simulación. El modelo de comprimido empleado fue el de esferas solapadas, del que se hablará más adelante. De esta forma, se validó el sistema dosificador, al encontrar una configuración del modelo que se ajustaba de una manera muy cercana a la realidad.

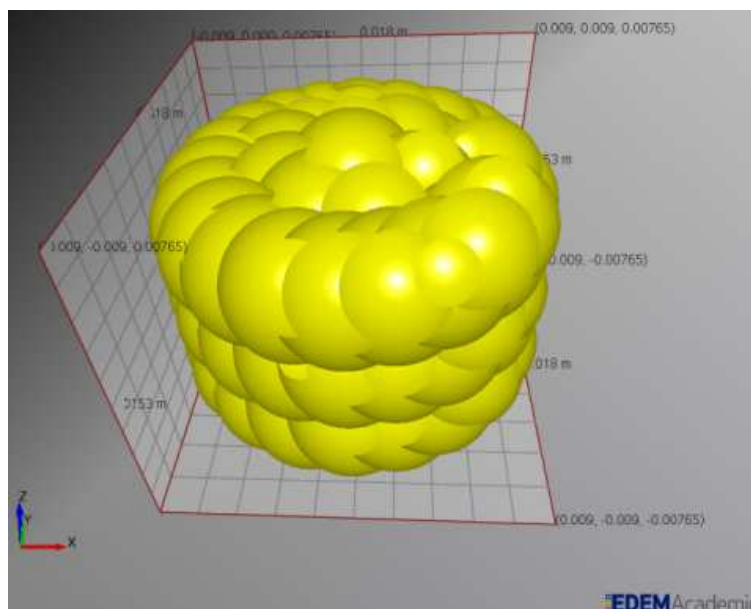


Figura 72. Modelo de 83 partículas solapadas empleado en investigaciones previas

Ahora se pretende validar en dicho modelo del sistema dosificador, los modelos de comprimido anteriormente alcanzados. Por ello se realiza la batería de simulaciones del dispositivo con cada uno de los tres modelos de comprimido elegidos y, así, quedará validado el comprimido que más se aproxime a los valores de las pruebas reales realizadas.

En el caso de las modificaciones del sistema serializador de salida, con las dos geometrías de alabe que se van a testar, discos y triángulos curvilíneos, ocurre lo mismo que en el caso anterior, habrá de validarse el modelo de comprimido en tanto en cuanto se aproxime a los valores de velocidad de serialización obtenidos en las pruebas de laboratorio, las cuales se realizaron tiempo ha de comenzar este documento.

En el siguiente diagrama cronológico se plasman los hitos alcanzados y los objetivos a validar.



Figura 73. Cronología de validación de modelos de comprimido y modelo dosificador

A continuación, se resume en una breve tabla los datos de velocidad de serialización obtenidos en las pruebas reales de laboratorio y que sirven como target para la validación de los modelos en las simulaciones.

Tabla 18. Valores de velocidad de serialización alcanzados en las pruebas reales

	Triángulos	Discos	Triángulos curvilíneos	
Velocidad de serialización (comprimidos/min)	300	315	320	@Ángulo 16°
	280	--	--	@Ángulo 14.5°

4.2.5 Estudio comparativo sobre la simulación de los modelos de comprimido obtenidos

Superadas las fases previas de generación modelos de comprimidos y reemplazo de partículas, se dispone de todo lo necesario para afrontar con garantía la simulación del sistema dosificador de aditivo alimentario comprimido con el objetivo de alcanzar la validación de modelos anteriormente descrita.

4.2.5.1 Generalidades

Ya se han ido mencionando, las diferentes características de las simulaciones, su parametrización y la influencia de esta en algunos aspectos. En las investigaciones realizadas (Guerra, 2011), se realizaron multitud de pruebas de configuración del dispositivo dosificador. Estas pruebas consistieron en modificar dos de los aspectos críticos o decisivos del sistema, uno constructivo, como es el ángulo de inclinación del depósito, y otro de funcionamiento, como es la velocidad de rotación de los discos del sistema serializador de salida, tomando ambos de esta forma como variables de diseño. Así, se obtuvieron una serie de resultados que derivaron en una primera configuración óptima de entre todas las estudiadas, y una segunda opción, nada desdeñable frente a la anterior. Consecuentemente, estas dos configuraciones obtenidas, son las que se toman ahora como punto de partida y objeto de análisis. Notar que la geometría empleada para los álabes del sistema serializador son los triángulos de vértices redondeados.

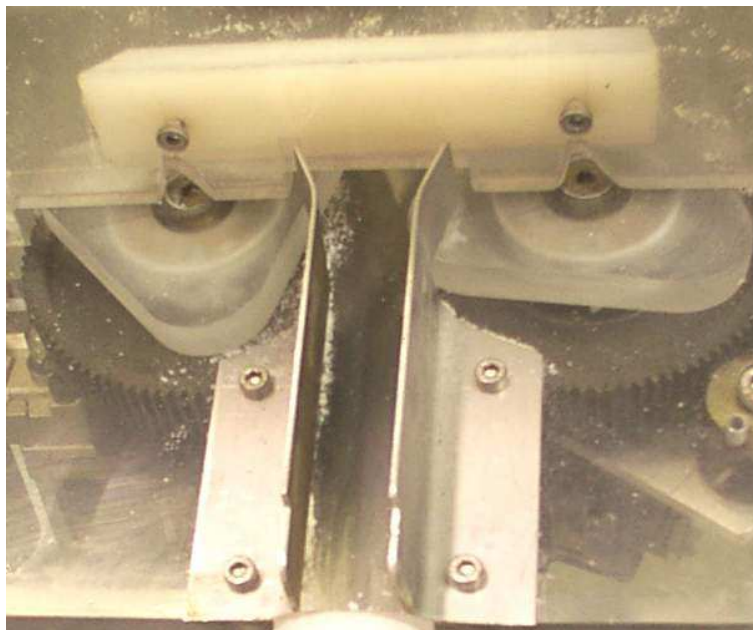


Figura 74. Diseño del sistema serializador de triángulos

Tabla 19. Configuraciones a estudiar del dispositivo dosificador

	Ángulo de inclinación (α)	Velocidad de serialización (ω)
Configuración 1	16°	84 r.p.m
Configuración 2	14.5°	120 r.p.m

Definidos las dos configuraciones del sistema dosificador y los tres modelos de comprimido, se tienen dispuestos todos los escenarios a analizar. De esta forma, se realiza la batería de simulaciones con todas las combinaciones posibles, es decir, se simula cada una de las dos configuraciones de ángulo de inclinación de depósito y la correspondiente velocidad de rotación de discos, con los tres modelos de comprimido, siendo el total seis tipos de simulación diferentes a llevar a cabo.

A la hora de simular, es primordial minimizar el tiempo total de la simulación. Con esta intención, y teniendo en cuenta las lecciones aprendidas de las investigaciones de otro tiempo, siendo una de las conclusiones más relevantes obtenidas la del concepto de masa crítica, se modifica el punto de generación de comprimidos. Así, las factorías se ubican en el piso inferior del tanque del dispositivo, en la base, con el objeto de reducir el coste computacional, aun cuando en los modelos anteriores se situó sobre la rampa primaria de caída en el piso superior (que es donde, en el sistema real, se depositan los comprimidos), evitando todo ese recorrido de los comprimidos. Asimismo, y por esa razón, se diseñan dos factorías, en primer plano, se sitúa la factoría de partículas que van a ser reemplazadas por el modelo de comprimido en cada caso y, por detrás de esta, se sitúa una segunda factoría de partículas que conforman la 'masa crítica'. Partículas que, además, no van a ser reemplazadas.

Este término responde a una cantidad mínima necesaria de comprimidos para el correcto funcionamiento de la máquina, cuyo efecto, deseado y necesario, es el ejercicio de un leve empuje hacia la salida del dosificador y que hace que no se estancuen los comprimidos en el suelo del dispositivo. Las condiciones de trabajo normales del dispositivo real se dan con una alimentación continua de comprimidos, por lo que el piso inferior de la máquina estaría siempre repleto de ellos. Por ello, el empuje es continuo lo que provoca una dosificación continuada y, presumiblemente, correcta. Una vez más, la economía computacional impide simular este hecho con los nuevos modelos de comprimido. En la investigación previa, la cantidad simulada atendía a trescientos comprimidos, obteniendo un buen balance entre resultados y coste de simulación, pero en ese marco los comprimidos solamente tenían ochenta y tres partículas, por tanto, aun siendo un número elevado de ellas, no es comparable al número de partículas del sistema actual. Y por supuesto no había enlaces, hecho que dispara el coste de la simulación por

el cálculo de las fuerzas y emplazamientos de todos ellos para representarlos como un todo, ahí es donde reside la gran diferencia de rendimiento computacional.

Es por todo lo anterior que existen dos generaciones diferentes de comprimidos. Una para las partículas reemplazables y otra para la masa crítica. El número de ellas es distinto. Las esferas a reemplazar por los nuevos modelos de comprimido, generadas en la primera factoría, son diez, número suficiente de comprimidos a dosificar pudiendo sacar buenas conclusiones de funcionamiento a la par de mantener un número global asumible de partículas a simular, dados los medios y tiempo disponibles. Las partículas que conforman la llamada masa crítica son cuarenta, número suficiente para conformar junto con las anteriores una cantidad mínima de comprimidos a dosificar, cincuenta en total. Obviamente, el tratamiento de ambos tipos de partícula es el mismo (mismo material, misma parametrización), los dos tipos atienden al concepto de comprimido, el primero compuesto por partículas generadas mediante compresión, concepto real simplificado, y el segundo tipo es un comprimido compuesto por una sola partícula, concepto más simplificado aun, que ayuda a la reducción del coste global de las simulaciones, es decir, una aproximación necesaria.

Un aspecto, aunque negativo, destacable, son los atascos. Normalmente cuando se producen es por la rotación de los comprimidos entre sí. Esto provoca fricción que se deriva en desgaste de las pastillas y por ello, es un hecho a tratar de evitar en la medida de lo posible ya que, cabe recordar, que los comprimidos son en su totalidad materia activa a dosificar. En las simulaciones realizadas se ha encontrado un mayor número de atascos en los casos de mayor radio de partícula que constituyen el comprimido.



Figura 75. Atasco entre partículas

En estos casos la cantidad de aire que se haya entre el perímetro ideal del comprimido y la superficie de la primera esfera es mayor, o lo que es lo mismo, el hueco existente entre partículas es suficiente para que un comprimido pueda quedarse estancado y no ruede o deslice.

A parte de este hecho constatado, a continuación, se puede ver un atasco que se ha encontrado, incluso con los comprimidos de partícula unitaria. Durante unos pocos instantes se observa la rotación continuada de las partículas, hasta que en uno de los vaivenes del sistema serializador, deshace el embrollo continuando con la dosificación normal.

Los tiempos de simulación en general, pese a las acotaciones realizadas, son largos. Dependiendo del modelo de comprimido que se emplee en la dosificación, los tiempos van desde las cuarenta horas hasta los tres, casi cuatro días.

Como introducción a los siguientes resultados, se pueden observar las siguientes imágenes de la correcta dosificación de cada uno de los modelos de comprimido ensayado.

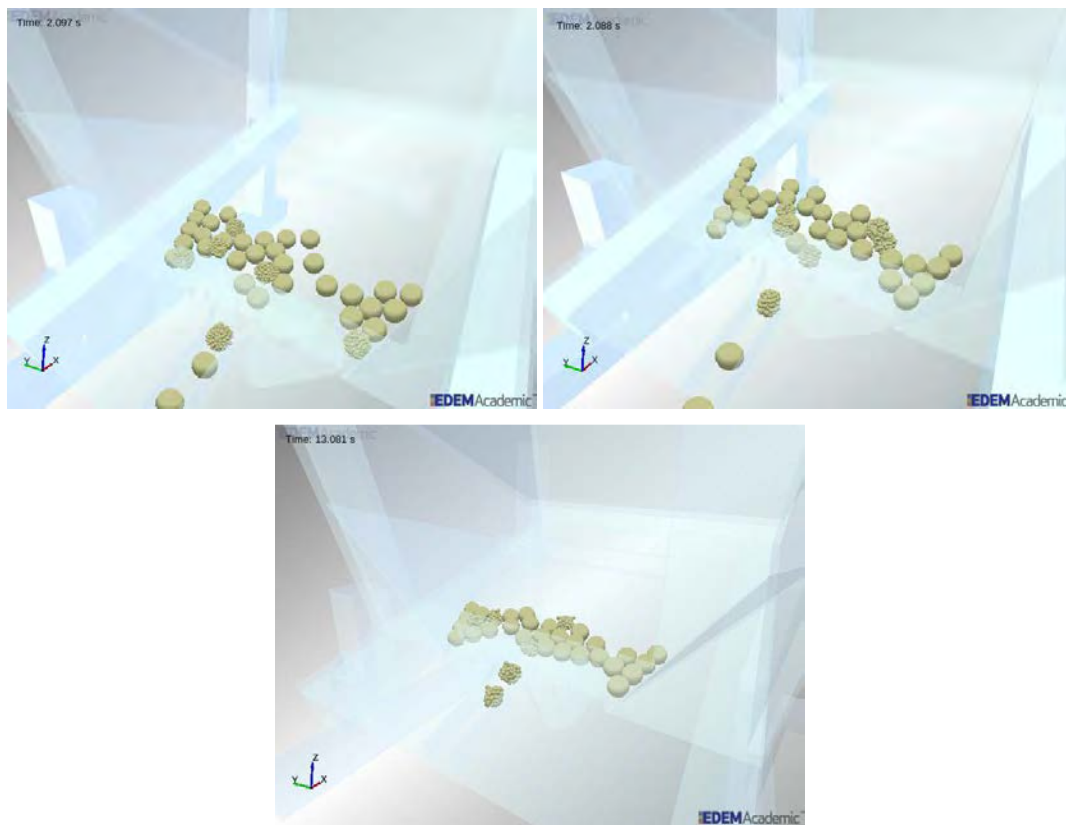


Figura 76. Correcta dosificación de los tres modelos estudiados. 1.5 mm (arriba izq.) 1.75 mm (arriba dcha.) 2 mm (abajo)

4.2.5.2 Variables de diseño

4.2.5.2.1 *Velocidad de rotación de los álabes de serialización*

Uno de los requisitos de diseño del dispositivo dosificador de aditivo alimentario comprimido, es la velocidad de serialización. Se entiende entonces que es la capacidad

de dosificar un número de comprimidos por unidad de tiempo, en este caso, el minuto, siendo ahí donde reside la verdadera necesidad de optimización en el diseño.

El objeto o fin de este sistema dosificador es su inclusión en una línea de producción de conserva, concretamente en las fases previas a la finalización del proceso. Por ello, la máquina debe adaptarse al ritmo de producción de la cadena que es quien demanda, y hace *pull* sobre el anexo que supone el dosificador respecto de la propia línea.

El umbral de diseño óptimo está en trescientos comprimidos por minuto, siendo este el valor adecuado para la buena sintonía entre dosificación y proceso productivo. Bajo estas premisas, se estudia, por tanto, cómo alcanzar y superar este valor requisito en el diseño, y ya en este caso, optimización de diseño inicial.

Esta velocidad de serialización, como variable de proceso, está íntimamente ligada con las dos variables de diseño estudiadas, como son el ángulo de inclinación del depósito y la velocidad de rotación de los álabes que componen el sistema serializador de salida. Cabe destacar en este punto, que se refiere así al sistema de dosificación, serializador, porque consigue una serie, una hilera de comprimidos, para hacer así unitaria la dosificación por cada envase destino.

Como ya se ha mencionado, se van a estudiar dos combinaciones de ambas variables de diseño. Las conclusiones que se obtuvieron en las investigaciones anteriores fueron, en resumen, que resulta más ventajoso, desde el punto de vista de la integridad del comprimido, el empleo de velocidades bajas, como los dos casos presentes, ya que el desgaste en la realidad de los comprimidos, puede ser alto para velocidades mayores a ciento veinte revoluciones por minuto; incluso, no influye en gran medida el ángulo del depósito para casos de muy baja velocidad, no siendo así para velocidades moderadas, como en el presente caso.

4.2.5.2.2 *Ángulo de inclinación de depósito*

La segunda variable de diseño a estudiar es el ángulo de inclinación del depósito. Su influencia consiste en propiciar un refuerzo en el avance de los comprimidos hacia la salida. Tanto mayor sea este, mayor será la rampa por la que discurren los comprimidos. Independientemente de la velocidad de rotación de los discos serializadores, los ángulos excesivos, mayores de dieciséis grados, originan importantes apelmazamientos de comprimidos en la parte frontal del dispositivo, dada la inercia que toman al recorrer la base del sistema, con lo que se forman atascos en la entrada de los álabes serializadores, dando lugar a altas fuerzas de desgaste, hecho perjudicial para los comprimidos. Para valores de ángulo, por debajo de los dieciséis grados, la rampa es menor, con lo que los comprimidos no alcanzan una velocidad excesiva y alcanzan el final de su recorrido en un

tiempo razonable no formándose además apelmazamientos destacables, aun siendo necesaria la, anteriormente descrita, masa crítica.

4.2.5.3 Velocidad de serialización

Ya se ha comentado, que la velocidad de serialización es una variable importante a nivel de requisito de diseño. Los dos factores fundamentales que inciden en ella de manera directa son la velocidad de rotación de los álabes serializadores y el ángulo de inclinación del depósito almacén del dispositivo dosificador.

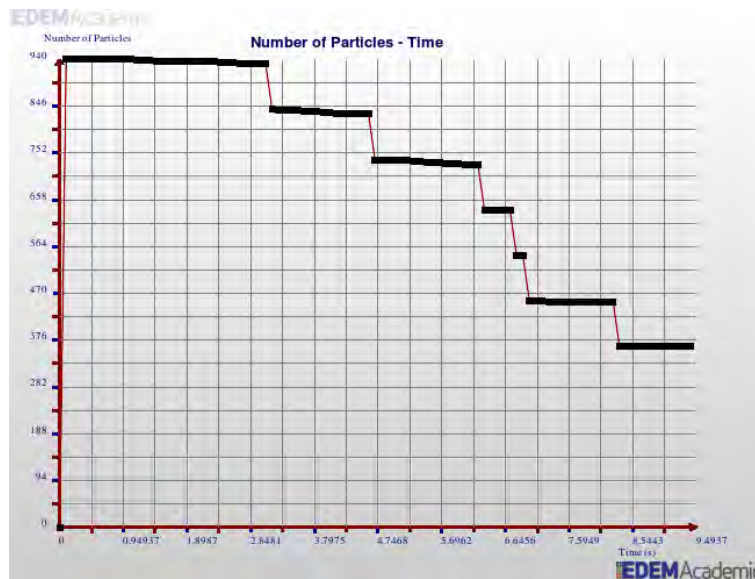


Figura 77. Ejemplo de velocidad de serialización EDEM

Cuando en una simulación del sistema dosificador de comprimidos de aditivo alimentario en EDEM, se analiza la velocidad de serialización, hay que atender a la evolución temporal del número total de partículas. En este caso, hay que recordar que, en esta batería de simulaciones, se cuenta con cincuenta comprimidos, cuarenta de ellos formados por una sola partícula y los diez restantes son el modelo obtenido por compresión, es decir un compendio de ellas. El software no es capaz de interpretar qué partículas conforman un todo y darles un trato unitario, por lo que el número de partículas total de las simulaciones de esta fase de la tesis variará en función del número de partículas que conformen el comprimido de reemplazo, y a su vez del tamaño del radio de ellas. En el caso de comprimidos formados por esferas de radio 1.5 mm, el cual está compuesto por ciento cincuenta partículas, el número global de partículas es 1540. Por tanto, para calcular la velocidad de serialización, o el ritmo de comprimidos por minuto que el dispositivo es capaz de expulsar, hay que asumir cada escalón de los que se muestran en la gráfica de la Figura 77, como una partícula, en realidad como un comprimido. De esta forma, y con unos simples cálculos aritméticos elementales, dado el tiempo de

dosificación de la simulación real, y el número de comprimidos a dosificar, o sea, cincuenta, valor constante, se está en disposición de calcular cuántos comprimidos se dosifican en ese intervalo de tiempo (pendiente de una función de primer orden) y extrapolarlo a comprimidos por minuto, apoyándose en el concepto de masa crítica (ahorro computacional).

En las dos configuraciones analizadas, se han obtenido valores distintos para diferentes repeticiones de las simulaciones realizadas. En ello ha influido los pequeños atascos que se pueden producir. Como ejemplo de ello se tienen las dos gráficas siguientes, que se explicarán a continuación.

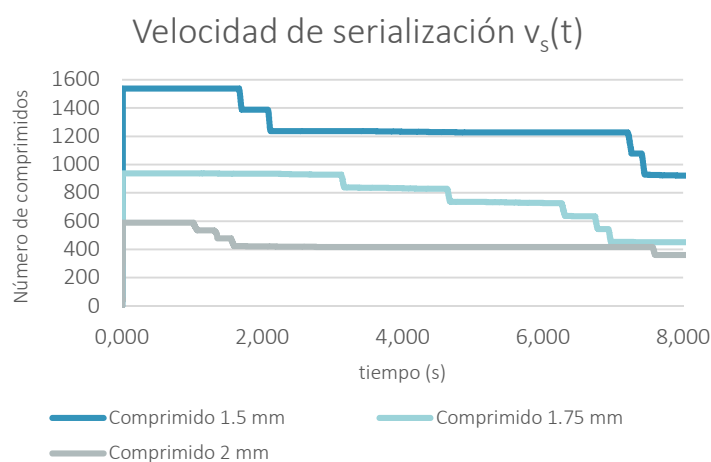


Figura 78. Ejemplo de velocidad de serialización con atascos

En la ilustración anterior, se puede ver el efecto no deseado de los atascos. Cuando las partículas se apelmazan por un ángulo de inclinación muy alto o porque no ruedan entre sí el sistema no dosifica de manera correcta. En el muestreo realizado se ha visto que se da un mayor número de atascos para el caso del comprimido formado por partículas de 2 mm, ya que no tiene un perímetro linealmente formado, es menos uniforme y tiene mayores cavidades para poderse estancar. Aun así, en el resto de casos para los diferentes tamaños estudiados, como 1.5 mm y 1.75 mm, también ocurren, como se puede observar en la gráfica. Destacar que, de las dos configuraciones de ángulo estudiadas, los atascos son más recurrentes en el caso de catorce grados y medio, siendo la pendiente para este caso un tanto insuficiente, incluso siendo mayor la velocidad de rotación de los alabes en relación a la configuración de dieciséis grados.

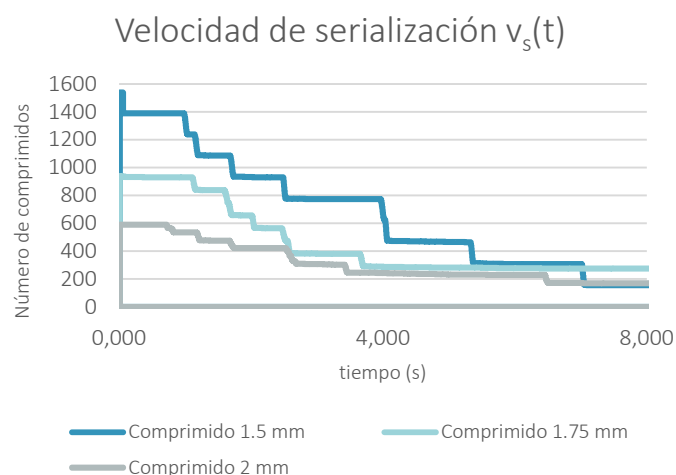


Figura 79. Ejemplo de velocidad de serialización

Si se atiende a una velocidad de serialización a un ritmo normal, ininterrumpido, los datos que devuelve el software de simulación se recogen en la Figura 79. Se observa que los tramos sin escalón son mucho menos continuados y no son horizontales, como prácticamente lo eran en el resultado anterior, si no que se siguen dosificando comprimidos formados por una sola partícula.

Otro factor influyente es la geometría del álabe del sistema de salida. En este punto del estudio, para los seis casos estudiados de las dos configuraciones, se emplea la geometría triangular con los vértices redondeados, como se apuntaba al inicio, que es la que originalmente se ha empleado en las simulaciones de investigaciones anteriores, es decir el modelo validado. Posteriormente, se verán los resultados de simulación con otras geometrías.

Tras diferentes simulaciones realizadas para ambas configuraciones, junto con los tres modelos de comprimido, se llega a unos resultados finales que se asemejan a los obtenidos en las investigaciones previas (Guerra, 2011) y los valores anteriormente fijados como objetivo. El número de comprimidos serializado encontrado para cada caso se expone en la siguiente tabla.

Tabla 20. Resultados de velocidad de serialización obtenidos para los casos de análisis

Configuraciones	Variables de proceso	Comprimido partícula r 1.5	Comprimido partícula r 1.75	Comprimido partícula r 2
Conf.1 $\alpha 16^\circ$ y $\omega 84$ r.p.m	v_d (c/min)	260	300	150
Conf.2 $\alpha 14.5^\circ$ y $\omega 120$ r.p.m.	v_d (c/min)	235	278	90

La configuración óptima de ángulo de depósito y velocidad de rotación del sistema de salida resulta la configuración uno en todos los casos de los diferentes modelos de comprimido ensayados. Los valores generales de dosificación de comprimidos por minuto que se ha encontrado en la mayoría de simulaciones de la configuración uno, son superiores a la configuración dos, de catorce grados y medio. En algunos casos, se llega a aproximar la ratio de dosificación, pero el hecho de poseer una mayor velocidad de rotación de los discos hace de la configuración dos una peor opción dado que los comprimidos pueden sufrir mayores impactos en la dosificación.

Atendiendo al modelo de comprimido que mejor ha funcionado en las dosificaciones, y para ambos casos de inclinación de depósito, con esta geometría de serialización, ha sido el conformado por partículas de 1.75 mm. En el caso del comprimido de partículas de 2 mm, cuya ventaja destacable es tener un menor consumo computacional y de almacenamiento de datos, no se ha llegado a igualar la velocidad de serialización fijada como target y en la gran mayoría de las simulaciones se daban valores bajos de velocidad de serialización (como en el dato mostrado de la configuración 2) a la par que un elevado número de atascos, debido a los intersticios perimetrales. El comprimido de 1.75 mm en relación al de 1.5 mm, dispone de una buena línea perimetral y conformado, y aun siendo un poco mejor la de menor radio de partícula se han dado más atascos que en el caso de 1.75 mm, no alcanzando una velocidad de serialización cercana a la deseada, al menos para esta geometría de álabe serializador. Como se verá en siguientes líneas, además, el modelo de 1.75 tiene un coste computacional menor que el de 1.5 mm.

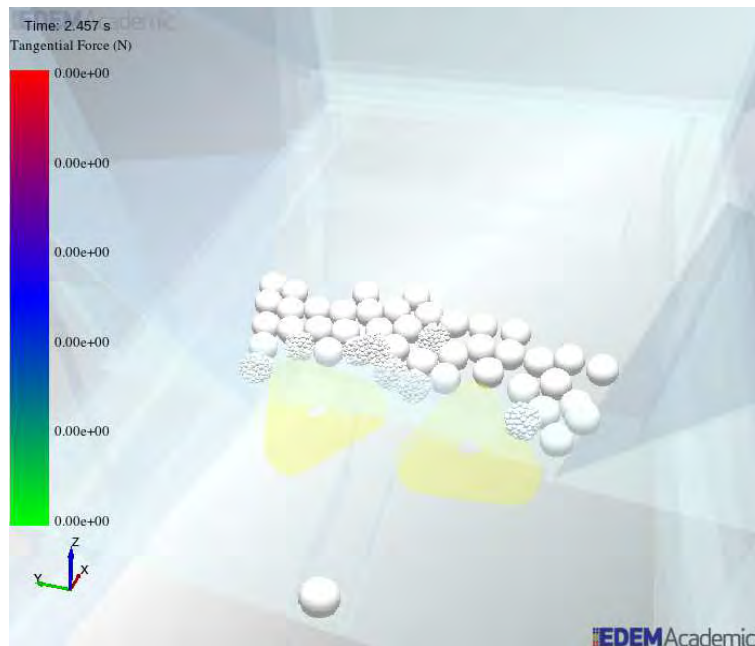


Figura 80. Dosificación errática para el modelo de 1.5 mm

Por último, y resumiendo para dar una idea global del ritmo de dosificación que supone cada valor de velocidad de comprimidos por minuto, se muestra la siguiente gráfica. En ella se muestran como funciones de primer orden la representación, a través de la pendiente, de la velocidad de serialización continuada.

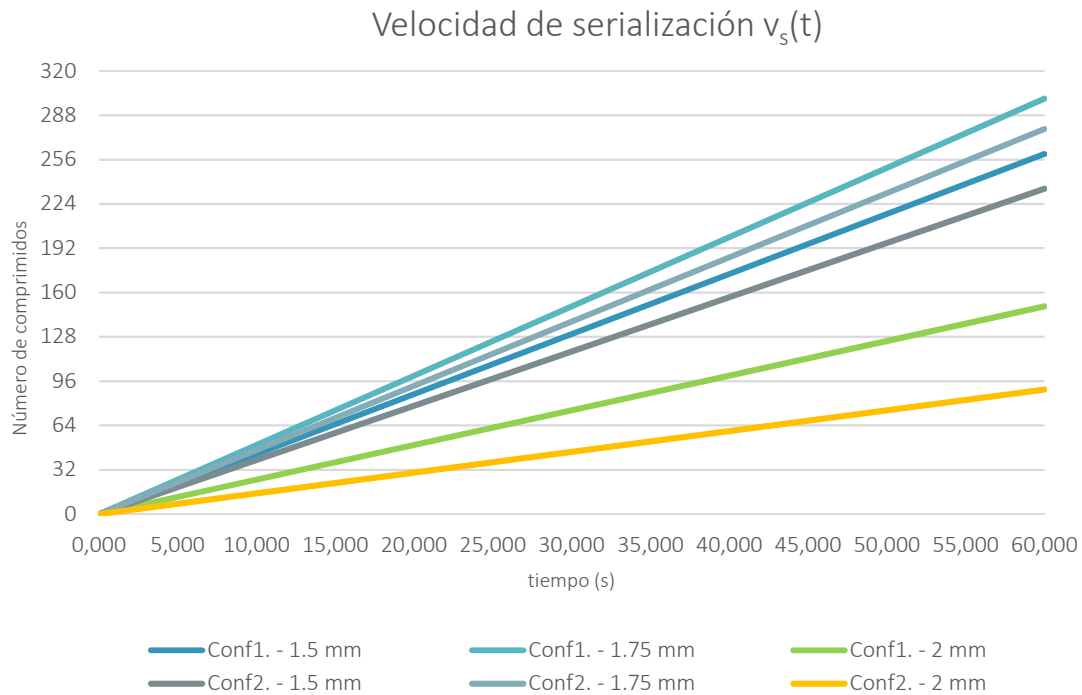


Figura 81. Velocidad de serialización para los casos estudiados

4.2.5.4 Fuerza de desgaste en los comprimidos

El software empleado devuelve el resultado de distintas fuerzas sufridas por las diferentes geometrías y partículas de los sistemas. Algunos de los datos más relevantes se encuentran para los valores medio o máximo de la fuerza compresiva sufrida por las partículas. Estos valores, son un buen indicador de la fuerza global externa que pueden llegar a sufrir los comprimidos y el desgaste que puede acarrear por la fricción de los comprimidos entre sí y con las propias geometrías del sistema.

Existe una limitación en **EDem** que no permite que se reproduzca un hecho que sí se da en la realidad, y consiste en la disgregación de partículas debido al rozamiento y las fuerzas de desgaste. En las condiciones de trabajo normales del dispositivo, con el paso de las horas de funcionamiento, la erosión producida por los posibles atascos, o por el simple recorrido que han de llevar a cabo los comprimidos, así como el roce de los comprimidos entre sí y con el sistema serializador, hace mella en los comprimidos que van desprendiendo pequeñas partículas, generando una fina capa pulverulenta. En la simulación, no ha sido posible reproducir estos efectos debido a dos limitaciones. La

primera de ellas es el tamaño de las partículas que constituyen el comprimido; para poder generar modelos de comprimido computacionalmente manejables, hubo que marcar un umbral de tamaño de partícula (0.75 mm) ya que emplear partículas del orden de micras, cosa que hubiera sido lo deseable, era inviable. Que las partículas tengan este tamaño, hace que los valores de los modelos de contacto tengan que ser muy elevados para poder establecer los enlaces. Así, las fuerzas que sí se reproducen en la simulación del ejercicio de la dosificación, son insuficientes para poder romper esos enlaces, mientras que, en el sistema real, las partículas, del orden de micras, sí se disgregan. La segunda limitación reside en el propio *ParticleReplacement*, aunque tiene mucho que ver con lo anterior. Para poder realizar el reemplazo de partículas, se tiene la posición de las partículas, pero para establecer su cohesión, han de parametrizarse los modelos de contacto con valores elevados para que puedan generarse los enlaces. El hecho de modificar los parámetros reduciendo su valor, era insuficiente para que el reemplazo de partículas se realizara de manera correcta. Por tanto, debido al tamaño de las partículas y los valores del modelo de contacto, ha sido imposible simular la disgregación de partículas del comprimido durante el funcionamiento normal del dosificador.

En la batería de simulaciones realizada, se han ido extrayendo todos los datos referentes a la fuerza media y máxima que se dan en los comprimidos, para cada modelo de pastilla y configuración de inclinación de depósito. En la tabla que se muestra a continuación, se recogen los datos encontrados.

Tabla 21. Resultados de fuerza de desgaste obtenidos para los casos de análisis

Configuraciones	Variables de proceso	Comprimido partícula r 1.5	Comprimido partícula r 1.75	Comprimido partícula r 2
Conf.1 α 16° y ω 84 r.p.m.	$F_{e,max}$ (N)	581.83	2482.50	9458.53
	$\overline{F_{e,max}}$ (N)	556.97	2329.74	8817.35
	$\overline{F_e}$ (N)	2.35	15.57	70.18
Conf.2 α 14.5° y ω 120 r.p.m.	$F_{e,max}$ (N)	574.82	2465.79	9383.25
	$\overline{F_{e,max}}$ (N)	535.30	1785.72	9016.97
	$\overline{F_e}$ (N)	2.01	6.30	20.34

Destacar que el valor $F_{e,max}$ hace referencia al pico máximo de fuerza que se da de entre los valores máximos encontrados para todas las partículas en cada instante simulado. El valor medio de la variable anterior es el representado con la línea horizontal sobre su nombre, mientras que el valor medio global de la fuerza media de desgaste es $\overline{F_e}$.

En cuanto a los valores de fuerza de desgaste obtenidos, se dan mejores valores para la configuración dos, que teniendo menor pendiente pero más atascos, provoca que los comprimidos no se agolpen tanto sobre el sistema de salida y alcancen menor inercia en el recorrido. En las siguientes gráficas mostradas a continuación, se muestra la evolución temporal de las fuerzas de desgaste anteriormente tabuladas. En la primera de ellas, se puede ver que en los instantes iniciales de la dosificación en los que los comprimidos no interactúan entre sí y no rotan sobre sí mismos estando en contacto unos con otros, es decir cuando ruedan hacia la salida, los valores son mínimos, alcanzándose el primer valor máximo cuando se agolpan sobre el sistema de salida y sufren los primeros impactos. Una vez que la masa se estabiliza y entra en armonía con la rotación de los álabes, los valores se mantienen relativamente constantes.

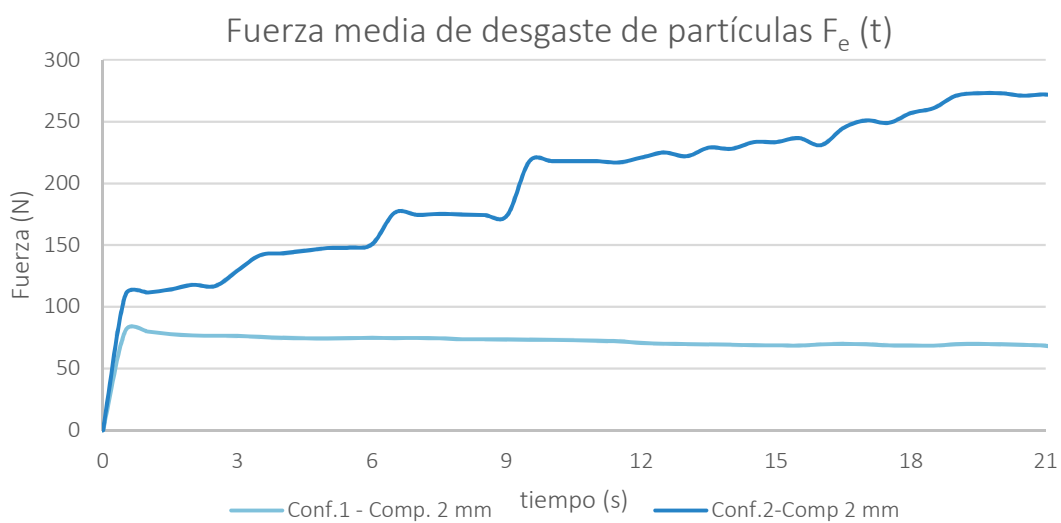
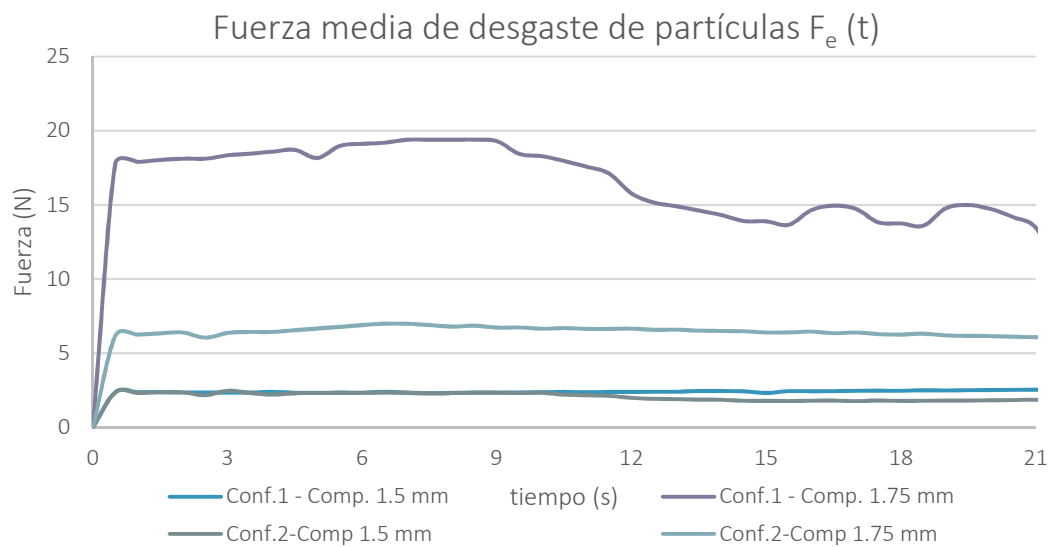


Figura 82. Fuerza media de desgaste sobre los comprimidos

En el caso de las fuerzas máximas representadas a continuación, se observa que existe una mayor relación entre sí de los modelos de comprimido para cada configuración, dando la sensación de independencia al mismo tiempo del ángulo de inclinación del depósito y de la velocidad de rotación de los álabes. Estos valores máximos ponen de relevancia el comportamiento de los tres modelos de comprimido ante los atascos y rotaciones de las partículas entre sí y con la geometría.

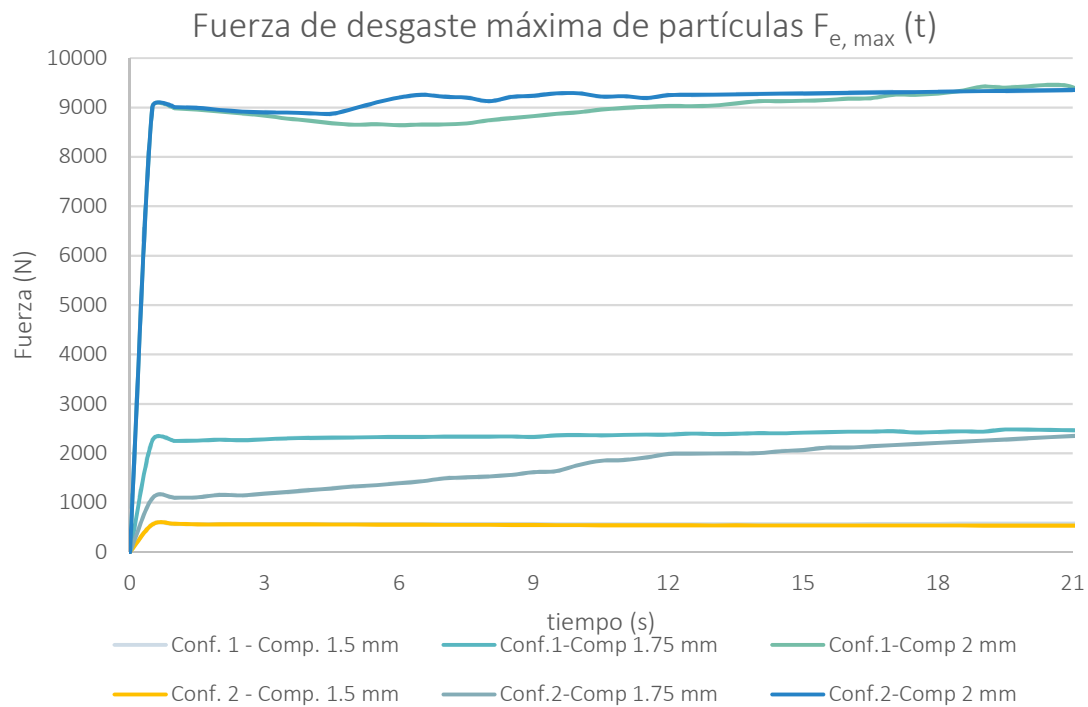
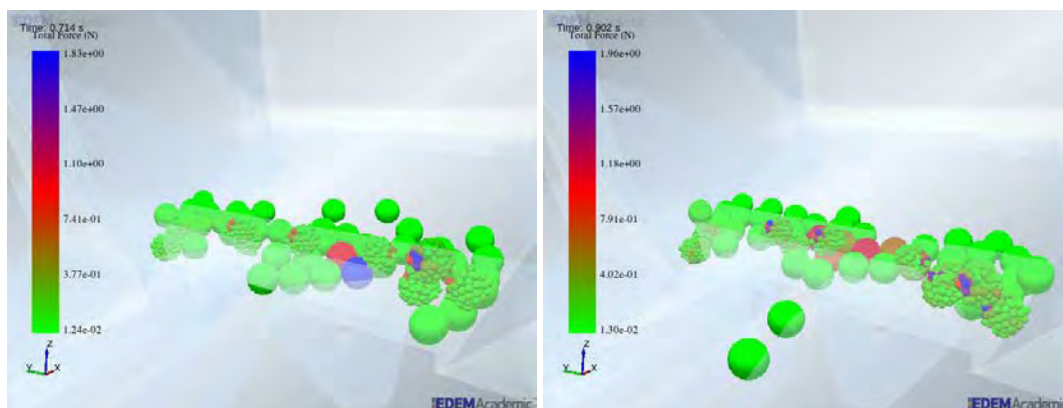


Figura 83. Fuerza máxima de desgaste sobre los comprimidos

A continuación, se muestran algunas instantáneas de la dosificación de la configuración uno para el modelo de comprimido de radio de partícula de 1.75 mm.



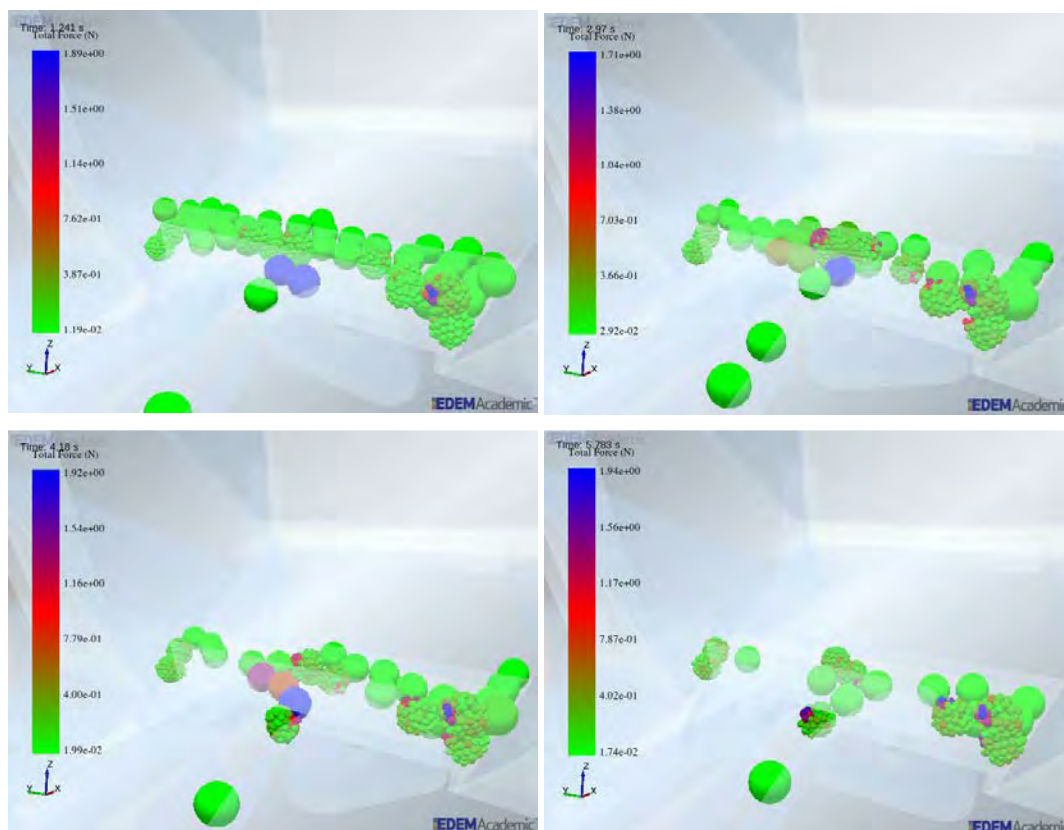


Figura 84. Diferentes instantes de dosificación. Configuración 1, modelo 1.75 mm

4.2.5.5 Fuerza tangencial de contacto en los comprimidos

En el caso del análisis de las fuerzas que se transmiten a la masa de comprimidos, se han encontrado resultados que apoyan la elección de los modelos respecto los criterios de ángulo de depósito y velocidad de serialización para esta geometría de serialización.

A continuación, se muestran los valores de fuerza de contacto tangencial totales encontrados.

Tabla 22. Resultados de fuerza tangencial total de contactos para los casos de análisis

Configuraciones	Variables de proceso	Comprimido partícula r 1.5	Comprimido partícula r 1.75	Comprimido partícula r 2
Conf.1 α 16° y ω 84 r.p.m.	$\overline{F_{c,t,max}}$ (kN)	68.75	36.58	161.42
	$\overline{F_{c,t}}$ (kN)	43.72	28.50	84.06
Conf.2 α 14.5° y ω 120 r.p.m.	$\overline{F_{c,t,max}}$ (kN)	27.41	27.75	41.04
	$\overline{F_{c,t}}$ (kN)	16.04	15.96	22.49

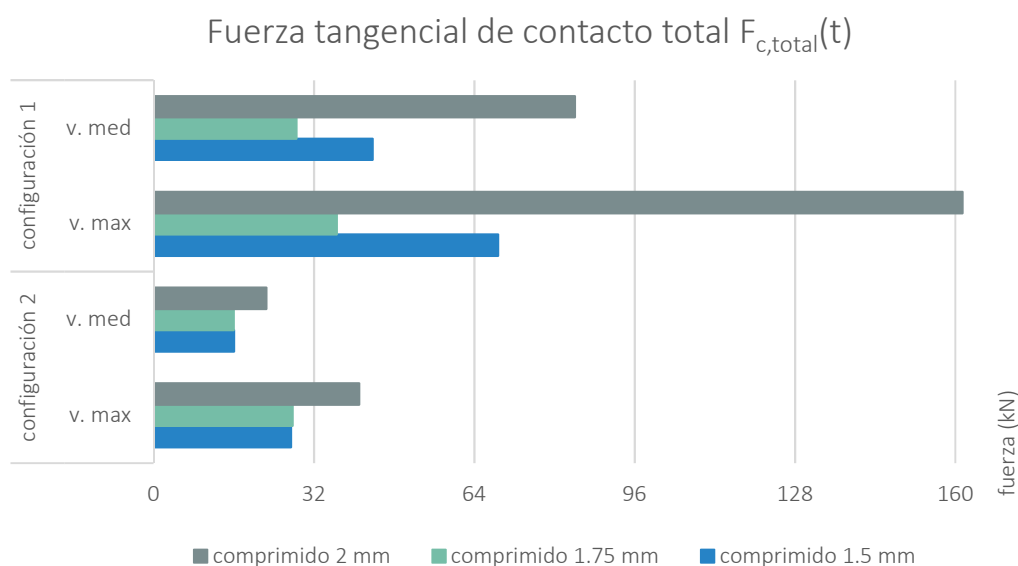


Figura 85. Fuerzas tangenciales totales de los contactos en los comprimidos en los casos de estudio

En la gráfica anterior, se muestra la comparativa de los valores medios y máximos de fuerza total tangencial de contacto que sufren todos los comprimidos en los casos estudiados. En estos casos cotejados, ninguna de las fuerzas máximas es mayor a las fuerzas ejercidas para la generación de los modelos de comprimido, con lo que no se alcanzaría la rotura de los comprimidos, salvo en la configuración 1 para el comprimido de partículas de dos milímetros. En este último caso, sí se podría llegar a romper algún comprimido, coincidiendo este valor de fuerza con atascos puntuales en la salida acontecidos durante la dosificación o exceso de presión.

Para la configuración dos, se dan menores valores de fuerza de contacto total ya que la pendiente es menor y el agolpamiento de los comprimidos se produce con una menor brusquedad al inicio y en los instantes de tiempo siguientes. Y aunque los mínimos encontrados se dan para el caso del comprimido formado por partículas de 1.75 mm, los resultados que se dan para el radio de partícula inmediatamente inferior, 1.5 mm, también son aceptables y muy próximos entre sí, siendo el valor máximo para 1.5 mm inferior al de 1.75 mm.

Volviendo a nivel de comprimido, los valores por cada instante de tiempo son menores que los globales presentados en las líneas anteriores. A continuación, se puede ver la gráfica que resulta en los primeros instantes de tiempo para los valores medios de la fuerza media tangencial en los contactos entre comprimidos y las diferentes geometrías $F_{t,c}$. Para cada modelo de comprimido y configuración analizados, se tienen los siguientes valores medios de la citada fuerza tangencial de contacto.

Tabla 23. Resultados de fuerza tangencial de contactos por comprimido analizados

Configuraciones	Variables de proceso	Comprimido partícula r 1.5	Comprimido partícula r 1.75	Comprimido partícula r 2
Conf.1 α 16° y ω 84 r.p.m.	$\overline{F}_{t,c}$ (N)	77.84	140.87	614.82
Conf.2 α 14.5° y ω 120 r.p.m.	$\overline{F}_{t,c}$ (N)	49.05	204.02	531.89

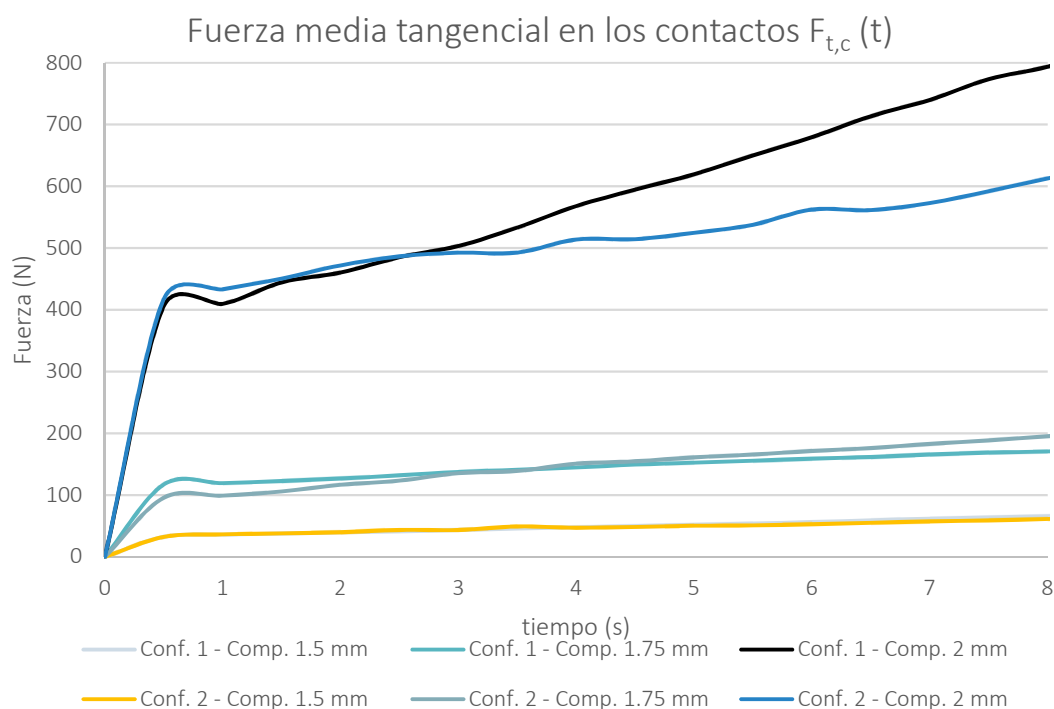


Figura 86. Fuerza media tangencial en los contactos por comprimido en los casos estudiados

Desde el punto de vista de las fuerzas sufridas por los contactos en cada modelo de comprimido analizado, y teniendo en cuenta las fuerzas de desgaste e interacciones que se transmiten a los mismos, los modelos de partícula de 1.5 y 1.75 mm, son aceptables; ya se vio en la generación de sendos modelos de comprimido la similitud de los valores de fuerza de compresión, además de la red de contactos, lo que da a entender que son modelos similares a pesar de la disparidad en el % de bondad de los mismos. Aunque a nivel global los valores eran muy próximos para ambos modelos, en el desglose unitario, la tendencia del modelo de 1.5 mm es más respetuosa con la integridad de los comprimidos, ya que la superficie de contacto entre ellos es mayor, hecho que favorece la rotación sobre si mismos, reduciendo la presión, a la vista de los resultados mostrados en la tabla 22.

4.2.5.6 Fuerza tangencial en los enlaces

En este punto, se muestran los resultados en los primeros instantes de tiempo para los valores medios de la fuerza media tangencial en los enlaces de cada modelo de comprimido $F_{t,b}$. Para cada configuración analizada, se tienen los siguientes valores medios de la citada fuerza tangencial de contacto.

Tabla 24. Resultados de fuerza tangencial en los enlaces por comprimido analizados

Configuraciones	Variables de proceso	Comprimido partícula r 1.5	Comprimido partícula r 1.75	Comprimido partícula r 2
Conf.1 α 16° y ω 84 r.p.m.	$\overline{F}_{t,b}$ (N)	67.17	116.06	772.27
Conf.2 α 14.5° y ω 120 r.p.m.	$\overline{F}_{t,b}$ (N)	40.72	170.69	478.00

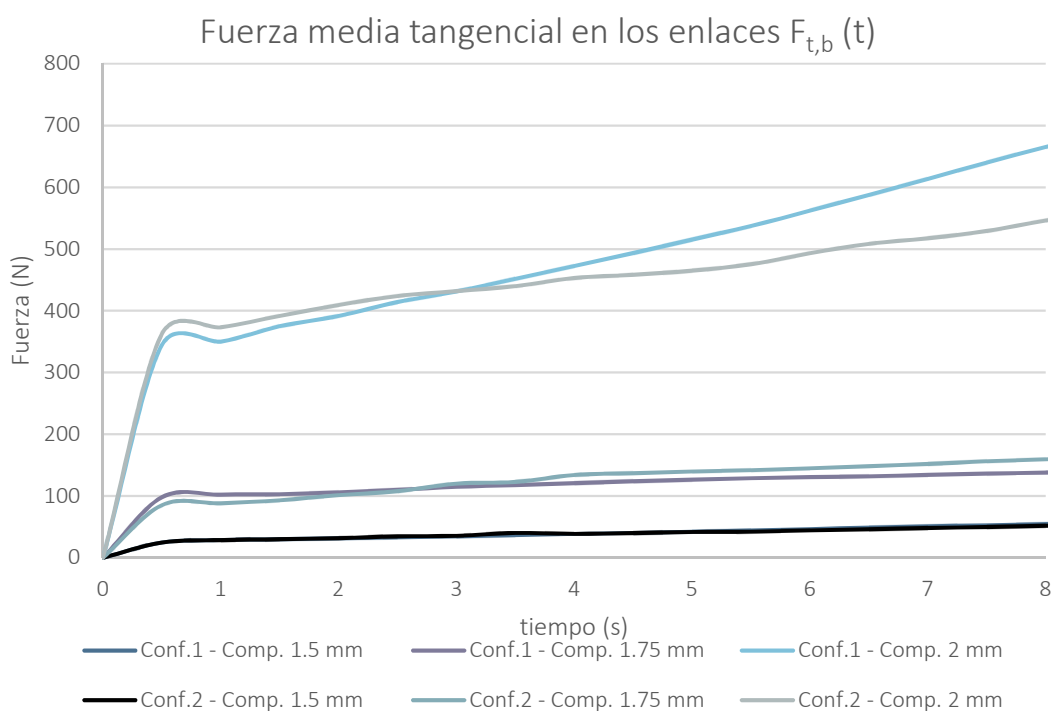


Figura 87. Fuerza media tangencial en los enlaces por comprimido en los casos estudiados

En este caso, las fuerzas sufridas en los enlaces de los comprimidos siguen el mismo patrón que las fuerzas mostradas anteriormente, pero con un decremento en su valor. La tendencia creciente, en este caso, es debida a la ausencia de masa crítica, ya que al quedar menos comprimidos en el depósito los golpes ocasionados por los 'alabes, no se

distribuyen. En cualquier caso, las fuerzas sufridas en esta batería de simulaciones son aceptables desde el punto de vista constructivo del modelo de comprimido.

4.2.5.7 Resumen comparativo de los modelos de comprimido analizados

Se recoge en una tabla los valores anteriormente descritos a modo de resumen. Al igual que ocurría en las primeras investigaciones, ambas configuraciones tienen un comportamiento general similar y aceptable, desde el punto de vista de ratio de dosificación e integridad por los comprimidos.

Tabla 25. Cuadro resumen comparativo para los casos estudiados

Configuraciones	Variables de proceso	Comprimido partícula r 1.5	Comprimido partícula r 1.75	Comprimido partícula r 2
Conf.1 α 16° y ω 84 r.p.m	$\overline{F_{c,total}}$ (kN)	43.72	28.50	84.06
	$\overline{F_{t,c}}$ (N)	77.84	140.87	614.82
	$\overline{F_{t,b}}$ (N)	67.17	116.06	772.27
	$\overline{F_e}$ (N)	2.35	15.57	70.18
	$F_{e,max}$ (N)	581.83	2482.50	9458.53
	$\overline{F_{e,max}}$ (N)	556.97	2329.74	8817.35
	v_{dos} (c/min)	260	300	150
Conf. 2 α 14.5° y ω 120 r.p.m.	$\overline{F_{c,total}}$ (kN)	16.04	15.96	22.49
	$\overline{F_{t,c}}$ (N)	49.05	204.02	531.89
	$\overline{F_{t,b}}$ (N)	40.72	170.69	478.00
	$\overline{F_e}$ (N)	2.01	6.30	20.34
	$F_{e,max}$ (N)	574.82	2465.79	9383.25
	$\overline{F_{e,max}}$ (N)	535.30	1785.72	9016.97
	v_{dos} (c/min)	235	278	90
Tiempo de simulación (días)		4.6	2.8	1.3

Bien es cierto, que al igual que ocurrió entonces, los mejores valores de dosificación de comprimidos por minuto se dan para el ángulo de dieciséis grados, es decir la configuración 1, que, aunque tiene una menor velocidad angular de los álabes de salida,

hecho que provoca un menor impacto en los compactos, se dan mayores valores de fuerza de desgaste, y por ende en los contactos y enlaces, que en la configuración dos, debido a la mayor pendiente del depósito. Dichos valores de fuerza son asumibles y el resultado óptimo se da para el comprimido de 1.75 mm, quedando por tanto validado este modelo de comprimido por la similitud con las pruebas reales del dispositivo con los triángulos en el sistema serializador.

4.2.6 Modificaciones en el Sistema serializador de salida

En este punto de la investigación, se decidió ver el efecto del cambio de geometría de álabe del sistema serializador de salida. En el diseño del dispositivo se contemplaban dos diseños más, a parte del triangular estudiado anteriormente, como son los álabes en forma de disco y triángulo de lados curvilíneos. A continuación, se puede ver el análisis realizado para ambas geometrías en los mismos términos en los que se ha estudiado la primera configuración de álabes triangulares, para analizar y realizar un estudio comparativo de resultados de velocidad, fuerzas de desgaste y las fuerzas que se dan en los enlaces y los contactos de los comprimidos, con el objetivo de encontrar el óptimo de todos ellos, combinado con la inclusión de los tres modelos de comprimido elegidos. Notar que las experiencias que se han llevado a cabo en las simulaciones de esta fase de la tesis doctoral se ciñen únicamente a la configuración 1 del dispositivo, es decir 16° de inclinación del depósito almacén y 84 r.p.m. de velocidad de rotación de álabes.

4.2.6.1 Geometría de álabes: Discos serializadores

Para esta primera modificación llevada a cabo, se van a mostrar los resultados más relevantes obtenidos. En la siguiente ilustración, se puede ver el detalle del diseño de los discos, al que se le han practicado unos cortes perimetrales para incidir con una parte plana sobre los comprimidos.

En cuanto a la velocidad de serialización de comprimidos por minuto se puede observar, que, para esta geometría de álabe, ha funcionado mejor el modelo de comprimido de radio de partícula de 1.75 milímetros. Para este sistema serializador, se ha encontrado, respecto a la anterior geometría triangular, que la dosificación es todavía más continuada. La geometría curva en casi todo el perímetro del disco serializador permite que los comprimidos fluyan mejor, ya que las rotaciones de los comprimidos entre sí producidas en la boca de salida del sistema son menos prolongadas en el tiempo que para los álabes triangulares.

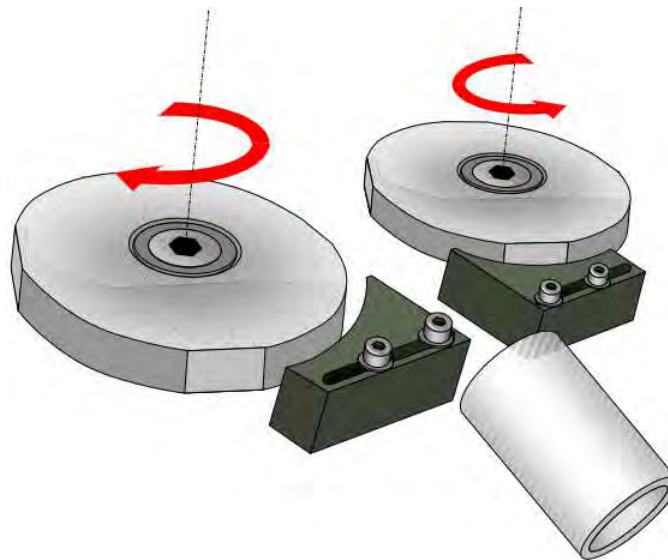


Figura 88. Diseño del sistema serializador de discos

Tabla 26. Resultados de velocidad para los discos serializadores

Variable	r 1.5	r 1.75	r 2
v_d (c/min)	292	310	135

El ritmo de dosificación, traducido a gráfica, se puede ver en la siguiente imagen.

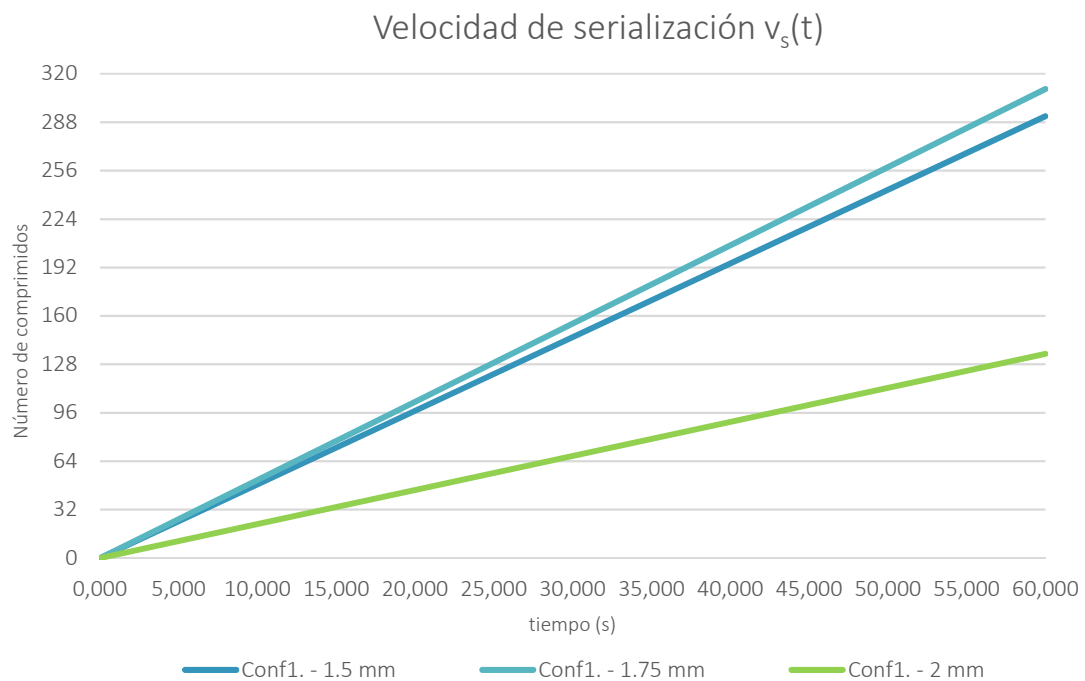


Figura 89. Velocidad de serialización para los discos serializadores

En el caso estudiado, siendo la configuración de dieciséis grados de inclinación de depósito no se han detectado atascos excesivos y, como se ha apuntado anteriormente, las rotaciones entre comprimidos en la boca de salida del sistema serializador, mejoran respecto al modelo geométrico anterior.

En términos de fuerza de desgaste de los comprimidos, se muestra el valor medio porque el máximo no aporta mucho más allá de lo ya dicho. Para esta geometría, los modelos de 1.5 y 1.75 se comportan de una manera similar, produciéndose menores valores de fuerza para el primero de ellos. En el caso del modelo de mayor radio de partícula, el de dos milímetros, las fuerzas disparan sus valores en relación a los anteriores, al tiempo de presentar una evolución un tanto irregular, debido al no muy buen funcionamiento de este modelo para este caso de geometría de álabes. Este modelo sí que presenta más rotaciones entre compactos y la circulación de los mismos no es óptima como en los otros dos modelos de comprimido. Además, siguen quedando comprimidos estancados en la base del depósito para este radio de partícula. La fuerza de desgaste máxima, en este caso de estudio, no es relevante ya que no aporta demasiado, puesto que los valores son un poco superiores a los medios, dado que la tendencia es muy uniforme en todo punto, incluso en el modelo de dos milímetros. Los valores medios de la fuerza media de desgaste encontrados para los tres modelos de comprimido se muestran en la siguiente tabla e ilustraciones.

Tabla 27. Resultados de fuerza de desgaste en los comprimidos para los discos serializadores

Variable	r 1.5	r 1.75	r 2
\bar{F}_e (N)	2.06	5.84	59.01

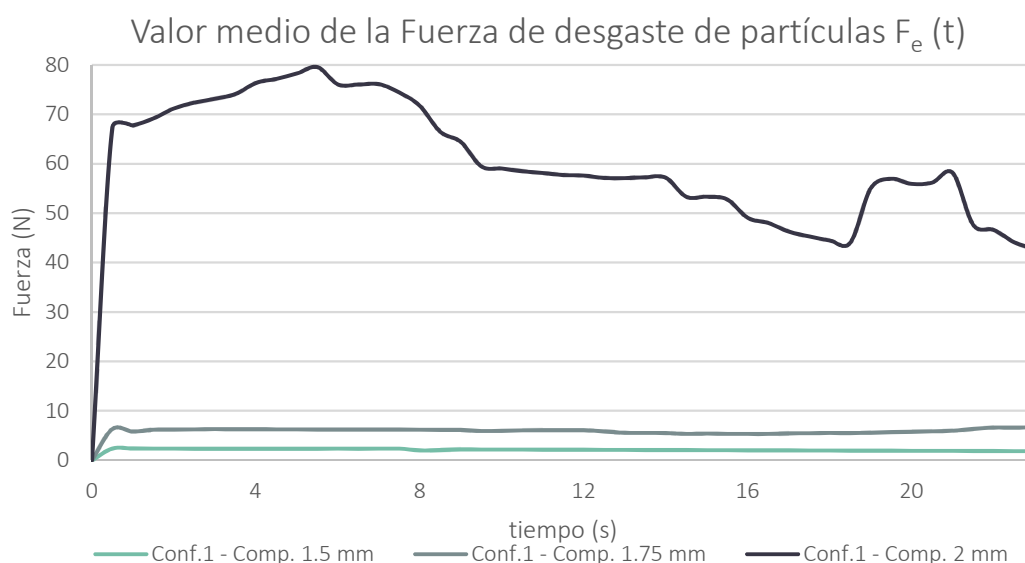


Figura 90. Fuerza media de desgaste sufrida por los comprimidos con los discos serializadores

En lo que a la fuerza tangencial media en los enlaces de los comprimidos y en los contactos acontecidos, la tendencia ocurrida es similar para ambas variables. En el caso de los modelos de comprimido de 1.5 y 1.75 mm de radio de partícula, los valores se estabilizan cuando lo hace la masa de comprimidos, con una posterior evolución hacia un valor continuo. Destacar en este punto, que las siguientes gráficas son mucho más suaves que las que se encontraban para la anterior geometría de álabe, el triángulo de vértices redondeados. Esto demuestra que este sistema de discos es más respetuoso con la integridad de los comprimidos que el anterior, los impactos no son tan bruscos y el movimiento general de la masa se produce con una mayor armonía.

En el caso del modelo de comprimido de radio de partícula de dos milímetros, los valores tienden hacia un crecimiento exponencial, con lo que no funciona de manera correcta para esta geometría. A continuación, se muestra en una tabla los valores medios de las fuerzas de desgaste y la gráfica con su evolución en el tiempo.

Tabla 28. Resultados de fuerza tangencial en los enlaces y contactos para los discos serializadores

Configuraciones	Variables de proceso	Comprimido partícula r 1.5	Comprimido partícula r 1.75	Comprimido partícula r 2
Conf.1 $\alpha 16^\circ$ y $\omega 84$ r.p.m.	$\overline{F}_{t,b}$ (N)	35.03	130.37	971.50
	$\overline{F}_{t,c}$ (N)	42.57	160.88	912.37

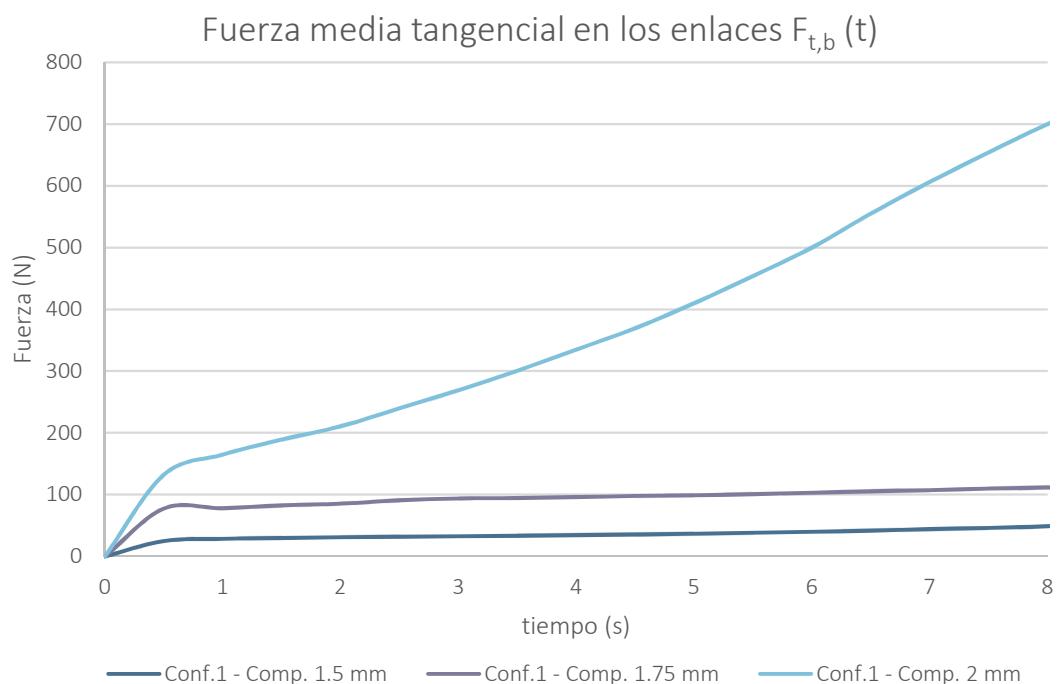


Figura 91. Fuerza media tangencial en los enlaces de los comprimidos con los discos serializadores

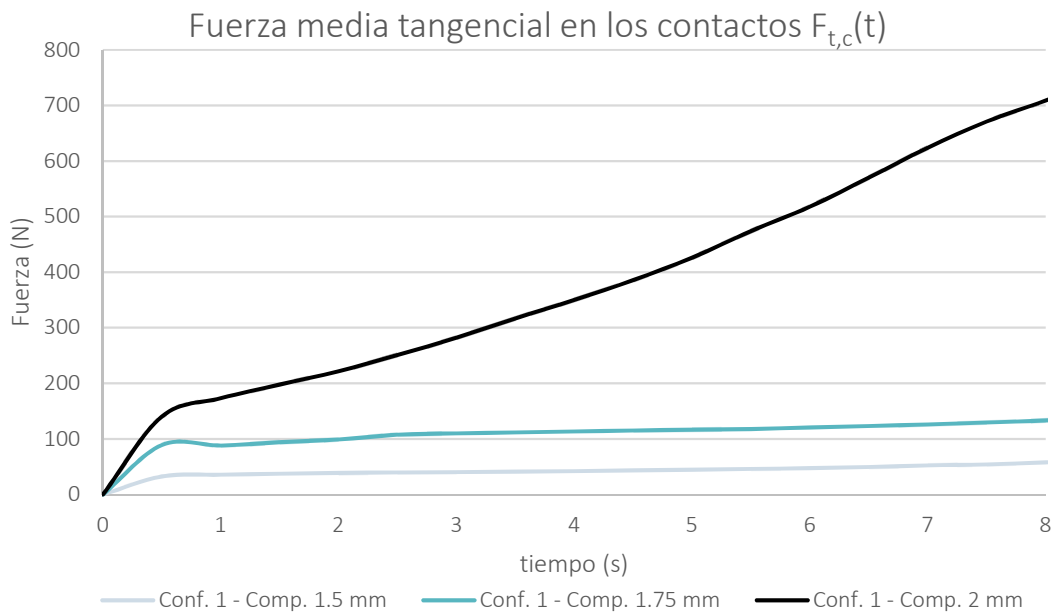


Figura 92. Fuerza media tangencial en los contactos de los comprimidos con los discos serializadores

A continuación, se pueden ver unas imágenes de la dosificación del sistema de discos para el modelo de comprimido de 1.75 mm, validado en relación a los resultados de pruebas reales.

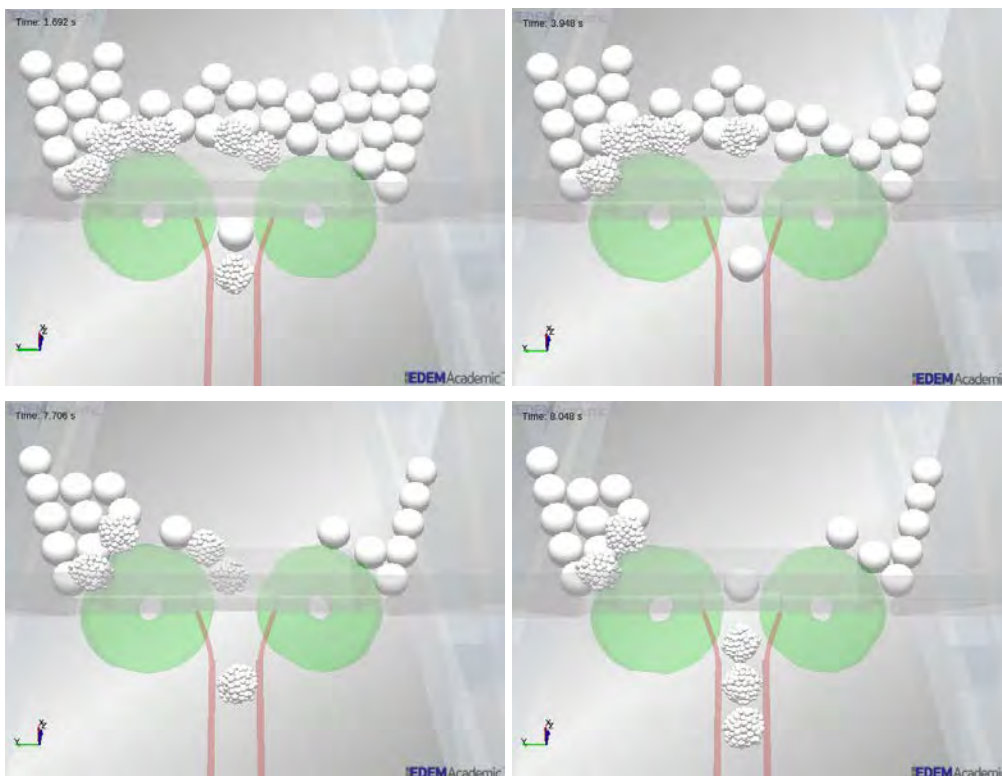


Figura 93. Instantes de dosificación de los comprimidos con los discos serializadores

4.2.6.2 Geometría de álabes: Triángulos curvilíneos serializadores

Para esta geometría de álabes, los triángulos de aristas curvadas, y al igual que en el ejemplo anterior, únicamente se va a estudiar la configuración uno, de dieciséis grados de inclinación de depósito, ya que se ha visto que es mejor en el primer ejemplo de sistema serializador estudiado y validado.



Figura 94. Diseño del sistema serializador de triángulos curvilíneos

Atendiendo a la velocidad de serialización, en este caso los resultados son muy satisfactorios para los tres modelos de comprimido analizados, llegando e incluso superando la velocidad umbral estipulada como requisito de diseño. De esta forma, se alcanza un máximo encontrado para el modelo de 1.75 mm de radio de partícula, seguido por un valor muy aceptable para el comprimido de 1.5 mm. Incluso para el modelo que peor había interactuado hasta ahora en el dosificador, el modelo de radio de partícula superior ha sido satisfactorio.

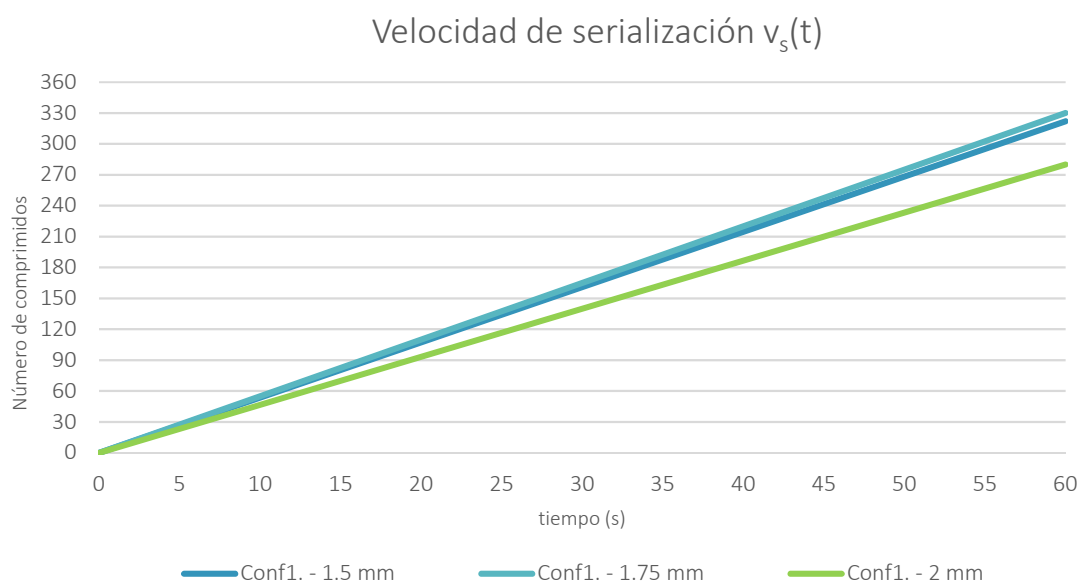


Figura 95. Velocidad de serialización para los triángulos curvilíneos

A continuación, se muestran los datos obtenidos para los tres modelos de comprimido referentes a la gráfica anterior.

Tabla 29. Resultados de velocidad para los triángulos curvilíneos

Variable	r 1.5	r 1.75	r 2
v_d (c/min)	322	330	280

Si se atiende a la Fuerza de desgaste que se da en los modelos de comprimidos para esta geometría, los valores medios tienen una tendencia similar para todos los casos, por eso es relevante destacar los valores máximos de la fuerza de desgaste, dado que la dosificación para este caso, aun siendo continuada en el tiempo, hace que el movimiento de la masa total de comprimidos sufra unos vaivenes que con las geometrías anteriores no ocurría. Así, los valores máximos que se alcanzan están, para los casos de mayor radio de partícula, muy por encima de los valores medios, contribuyendo esto a un mayor desgaste de los comprimidos. Resulta, por tanto, que el caso más favorable se da para el modelo de comprimido de 1.5 mm, aun siendo válido el modelo de 1.75 mm.

Tabla 30. Resultados de fuerza de desgaste en los comprimidos para los triángulos curvilíneos

Variable	r 1.5	r 1.75	r 2
\bar{F}_e (N)	5.10	5.32	4.12
$F_{e,max}$ (N)	8.70	17.11	118.73

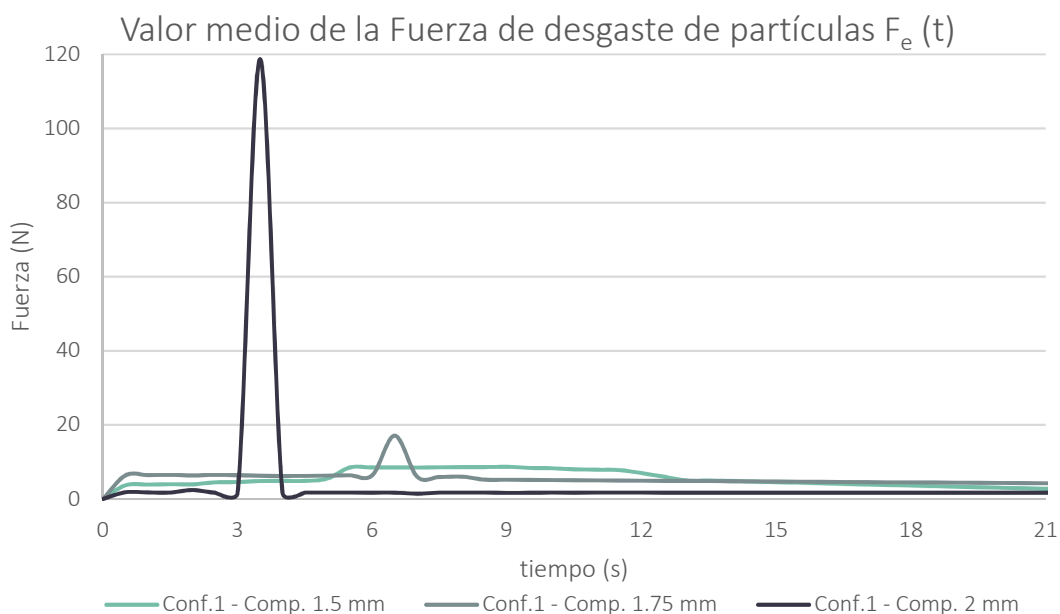


Figura 96. Fuerza media de desgaste sufrida por los comprimidos con los triángulos curvilíneos

Para esta geometría de triángulos curvilíneos, los resultados son similares que para el caso anterior de la geometría de los discos. Los modelos de comprimido de 1.5 y 1.75 mm de radio de partícula, son los que presentan unos menores valores de fuerza tangencial media, tanto en los contactos como en los enlaces, en relación al modelo de 2 mm. Aun así, estos valores de fuerza para ambos modelos resultan mayores que los que se daban para el modelo de los discos serializadores, no mejorando por tanto este hecho el nuevo cambio de geometría.

Además, esta geometría no es tan respetuosa con los comprimidos como lo era la anterior, de curvas muy suaves y de tendencia casi constante, presentando ahora varios cambios de pendiente y picos elevados en los valores tanto de la fuerza tangencial media en los enlaces como en los contactos. Esto es debido al mencionado vaivén que sufre la masa de comprimidos en el ejercicio de la dosificación.

En el caso del modelo de comprimido de radio de partícula de dos milímetros, los valores tienden hacia un crecimiento exponencial, al igual que ocurría con la geometría anteriormente estudiada, con lo que tampoco se puede aseverar que funcione de manera adecuada para esta geometría. Seguidamente, se detalla la tabla con los valores medios de las fuerzas de desgaste y la gráfica con su evolución en el tiempo.

Tabla 31. Resultados de fuerza tangencial en los enlaces y contactos para los triángulos curvilíneos

Configuraciones	Variables de proceso	Comprimido partícula r 1.5	Comprimido partícula r 1.75	Comprimido partícula r 2
Conf.1 $\alpha 16^\circ$ y $\omega 84$ r.p.m.	$\overline{F}_{t,b}$ (N)	54.89	159.91	369.26
	$\overline{F}_{t,c}$ (N)	58.41	183.53	444.09

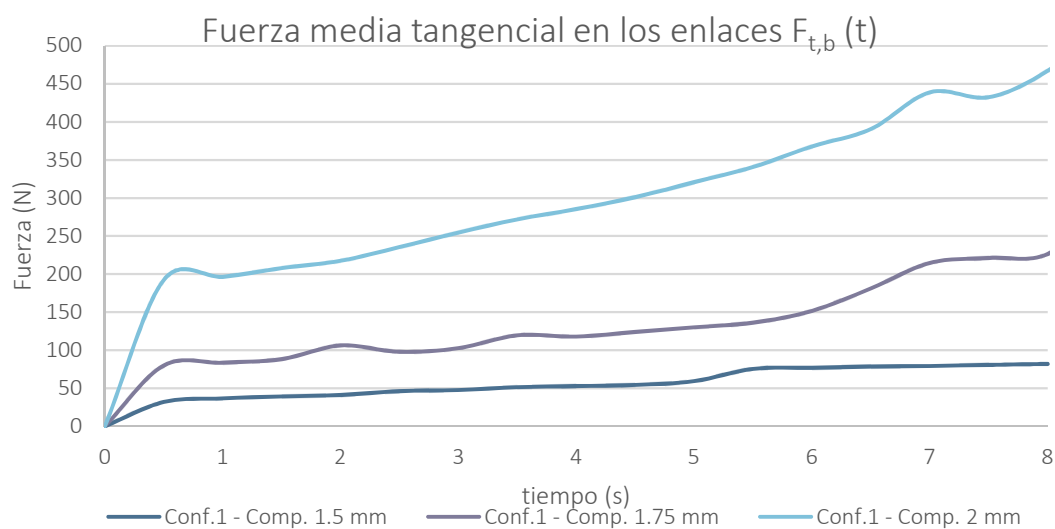


Figura 97. Fuerza media tangencial en los enlaces con los triángulos curvilíneos

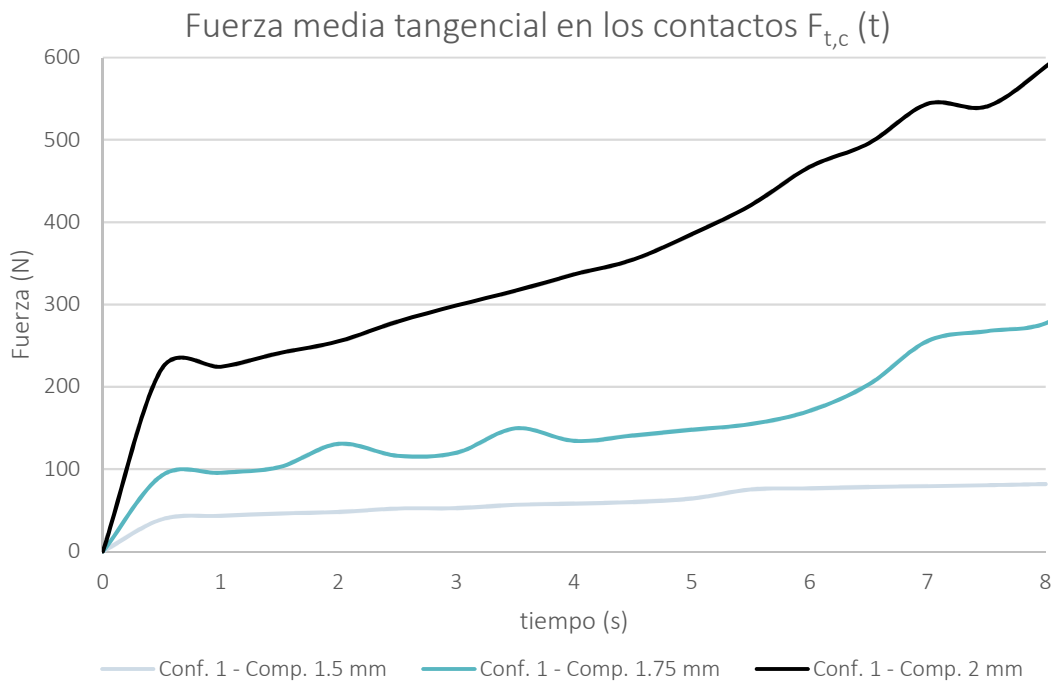


Figura 98. Fuerza media tangencial en los contactos con los triángulos curvilíneos

Seguidamente, se pueden ver unas tomas de la dosificación del sistema de triángulos curvilíneos para el modelo de comprimido de 1.75 mm.

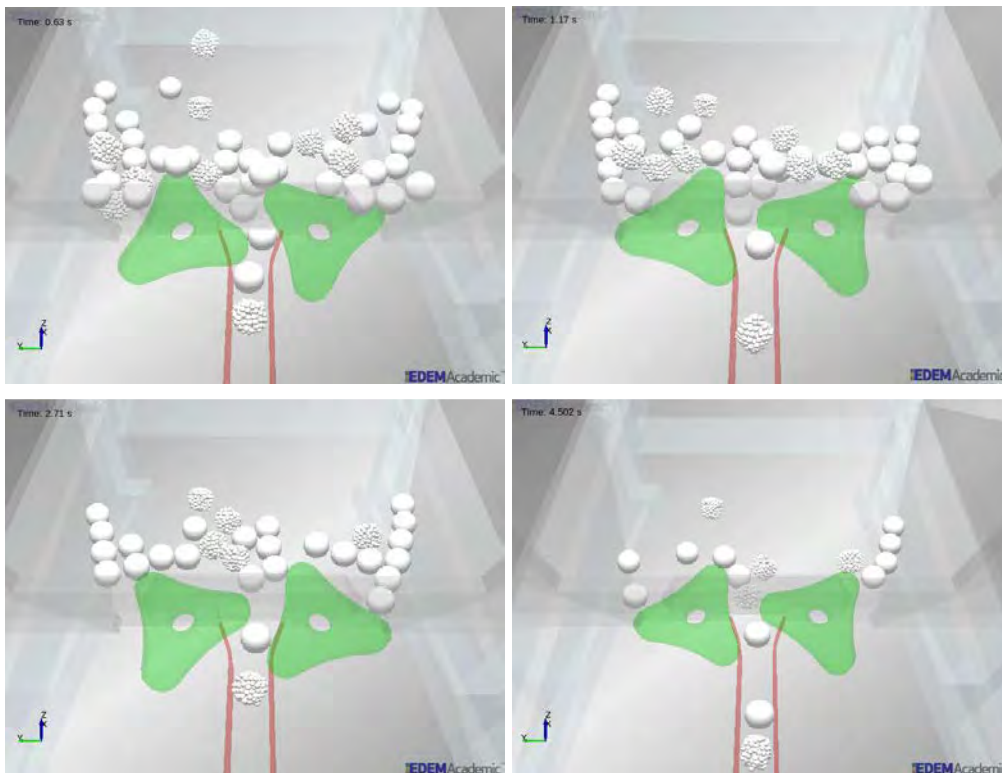


Figura 99. Instantes de dosificación de los comprimidos con los triángulos curvilíneos

4.2.6.3 Resumen de resultados para las tres geometrías de álabe estudiadas

Habiendo visto los resultados particulares para cada modelo de comprimido y configuración, se comentan de manera general los resultados obtenidos.

Esta última fase de la tesis, en la que se han probado diferentes geometrías para los álabes del sistema serializador, se ha realizado con la configuración uno, de inclinación de depósito de dieciséis grados y velocidad de rotación de álabes de ochenta y cuatro revoluciones por minuto.

En el caso de los triángulos redondeados iniciales, el modelo que mejor se ha comportado ha sido el de radio de partícula de 1.75 mm. Aunque los valores de fuerza de desgaste, y la obtenida en los enlaces y contactos, es inferior para el modelo de 1.5 mm de radio, los valores encontrados de velocidad de serialización en comprimidos por minuto distan mucho del valor umbral para este modelo, quedando de esta forma validado el modelo de comprimido de 1.75 por similitud de los resultados de velocidad con el valor obtenido en las pruebas realizadas reales.

Para el modelo de dosificador con discos serializadores, el valor de velocidad del modelo 1.5 mm, mejora sustancialmente respecto al anterior, aunque no lo suficiente para mejorar el valor del comprimido de 1.75 mm, el cual para esta geometría sigue siendo mejor dada la velocidad de serialización alcanzada. Atendiendo a los resultados de fuerza de desgaste y en los enlaces y contactos, el modelo de 1.5 mm es notablemente superior, incluso para todos los modelos de geometría, respecto al caso de 1.75 mm. Así, para esta geometría de discos serializadores, la opción óptima es el modelo de 1.75 mm, una vez más, por alcanzar la velocidad deseada y siendo, además el modelo validado en el caso anterior. Para esta geometría de discos, se puede decir que es una geometría mucho más respetuosa con la integridad del comprimido, con lo que no generaría tanta disgregación de partículas y formación de polvo en la dosificación.




En el último caso de geometría estudiada, los valores de dosificación son óptimos para todos los modelos de comprimido, sin embargo, la dosificación es más irregular que en los demás casos analizados debido a los vaivenes comentados. Para este caso, el modelo óptimo resulta el comprimido de 1.75 ya que además de una buena velocidad de serialización, presenta unos bajos valores de fuerza.

El modelo de comprimido de mayor radio de partícula, dos milímetros, es el que peor se ha comportado en líneas generales en todos los casos por su morfología e inercia.

Cabe destacar que los tiempos de simulación no varían demasiado respecto los mencionados en la tabla 24, ya que sobre todo este se ve afectado por el modelo de comprimido empleado en cada caso. El cambio de geometría del sistema serializador, así

como el cambio de pendiente del depósito, no es un hecho lo suficientemente relevante desde la atalaya del coste computacional para los casos estudiados.

Tabla 32. Resultados obtenidos para los sistemas de serialización estudiados en la configuración 1

Variable	r 1.5	r 1.75	r 2	r 1.5	r 1.75	r 2	r 1.5	r 1.75	r 2
v_d (c/min)	260	300	150	292	310	135	322	330	280
\overline{F}_e (N)	2.35	15.57	70.18	2.06	5.84	59.01	5.10	5.32	4.12
$\overline{F}_{t,bond}$ (N)	67.17	116.06	772.27	35.03	130.37	971.50	54.89	159.91	369.26
$\overline{F}_{t,contact}$ (N)	77.84	140.87	614.82	42.57	160.88	912.37	58.41	183.53	444.09
Geometría del álabe serializador									

Finalmente, atendiendo a los resultados de la tabla, se puede enumerar lo siguiente, en relación a todas las pruebas realizadas y contrastando con los valores objetivo que se han obtenido en las pruebas reales:

- ◆ La configuración 1, de 16° de inclinación de depósito, ha resultado mejor que la configuración 2, de 14.5°, para todos los modelos de comprimido ensayados con los álabes triangulares.
- ◆ En el caso de los álabes triangulares, el modelo de comprimido que más se acerca a los resultados reales es el modelo de 1.75, que es con el que mejor velocidad de serialización se alcanza. Por ello, el modelo de 1.75, queda validado.
- ◆ En el caso de los discos, solamente se ha simulado la configuración 1, ya que en el punto anterior se ha visto claramente la superior respecto a la configuración dos. Para esta geometría, los discos, el modelo de comprimido que ha alcanzado una mejor velocidad de serialización ha sido el modelo de 1.75 mm.
- ◆ Para la geometría de serialización formada por los triángulos curvilíneos, también se ha simulado únicamente la configuración 1. En este caso las velocidades alcanzadas son buenas para todos los modelos, pero el mejor ha sido el de 1.75 mm.
- ◆ Para la elección de la geometría óptima de álabe serializador, hay que atender a los valores de fuerzas obtenidos. A priori, el sistema de triángulos curvilíneos es el que mejor velocidad de serialización aporta, sin embargo, los valores de fuerza son elevados. Aunque no se ha tenido opción de medir los valores de fuerza de desgaste, y enlaces y contactos, en las pruebas reales, lo que sí está claro es que, para una velocidad de serialización similar, tanto será mejor un sistema de álabes

que sea más respetuoso con la integridad del comprimido. Por ello, se puede concluir que la geometría óptima son los discos.

4.2.6.4 Inclusión de refuerzo plástico en el sistema serializador

Una de las últimas mejoras implementadas en el sistema dosificador de aditivo alimentario comprimido, consiste en la adhesión de unas bandas de gomas en lateral de los álabes del sistema de salida, es decir, en la parte que entra en contacto con los comprimidos. Así, se minimiza el impacto del disco con los comprimidos, absorbiendo la goma gran parte del choque, con lo que se incrementa la salvaguarda de la integridad de los compactos.

Así, y en base a la configuración uno mencionada anteriormente, en cuanto a inclinación de depósito y velocidad de álabes, se han realizado algunas simulaciones con el objeto de optimizar el sistema de discos serializadores. A continuación, se muestra una de las pruebas realizadas, mostrando primeramente la modificación sobre las interacciones físicas llevada a cabo.

Tabla 33. Ajuste de interacciones físicas para la modificación de los discos serializadores

Interacciones	C. de restitución	Fricción estática	Fricción dinámica
Sal - Goma	0.5	0.4	0.1

Así, los mejores resultados que se han obtenido para esta configuración del sistema dosificador se recogen todos ellos en la tabla 33.

Tabla 34. Resultados obtenidos para los discos modificados con bandas de goma

Variable	r 1.75 mm
v_d (c/min)	323
\bar{F}_e (N)	2.29
$\overline{F_{t,bond}}$ (N)	34.89
$\overline{F_{t,contact}}$ (N)	42.36

Como se puede ver la velocidad de serialización ha mejorado sustancialmente respecto a la velocidad máxima alcanzada para este sistema serializador sin las bandas de goma. Esto es debido a que la goma incrementa la adherencia de los comprimidos a los discos, es como si los abrazara y acompañara de una manera mucho más suave y continuada hacia la salida, además de, como ya se ha apuntado, minimizar el impacto, como se puede ver si se atiende a los valores de las fuerzas medias tangenciales en los contactos y los enlaces, que son un poco menores que en el caso sin bandas estudiado anteriormente. A

continuación, se pueden ver las curvas de fuerza media obtenidas para el sistema modificado empleando el modelo de comprimido de 1.75 mm de radio de partícula.

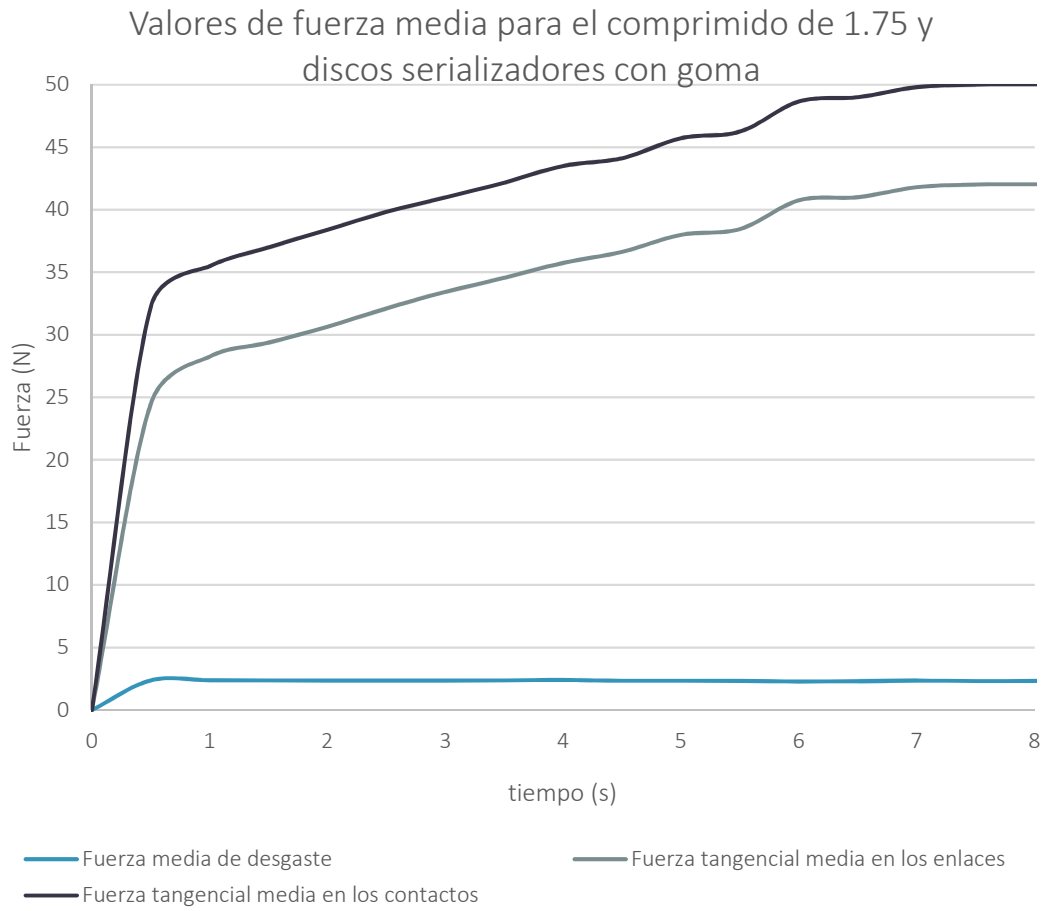


Figura 100. Fuerzas sufridas por los comprimidos para los discos con banda de goma

Capítulo 5

Conclusiones y futuras líneas
de investigación

5 Conclusiones y futuras líneas de investigación

A continuación, se van a describir las conclusiones derivadas de los resultados obtenidos de la presente investigación, así como las posibles líneas futuras de investigación.

A lo largo del documento, se han presentado los resultados de las diferentes fases que componen esta tesis doctoral y se ha mostrado el análisis de los mismos de las que se derivaban conclusiones concretas. En este capítulo se van a describir las diferentes conclusiones de manera más generalista en cuanto a la compresión de aditivo y la dosificación de comprimidos, además de dar unas pequeñas pinceladas de lo que supone el uso de [EDM](#).

5.1 Discusiones sobre los resultados obtenidos

5.1.1 Nuevo modelo de comprimido de aditivo alimentario

Dados los modelos de contacto disponibles en el software de simulación y, sobre todo, gracias a la herramienta de reemplazo de partículas, se decidió abordar la mejora del modelo de comprimido existente, el modelo de partículas solapadas.

Para la consecución de los nuevos modelos de comprimido, se ha visto que el modelo de contactos *Hertz Mindlin with Bonding*, es un sistema aceptable a la hora de generar enlaces entre partículas. Existen otros, pero atendiendo a otros resultados de investigaciones previas, es un buen modelo para lograr los objetivos de esta tesis, además de conocer así el número de enlaces rotos e intactos. El hecho de haber realizado numerosas pruebas preliminares y simplificadas con este método, además, ha sido favorable, para después determinar los modelos definitivos, reduciendo los tiempos de simulación.

Un apartado determinante a la hora de alcanzar los resultados ha sido la configuración de las simulaciones. Es muy importante fijar los parámetros de simulación en lo que a tiempos se refiere (*time step*, etc.) dado que son simulaciones muy complejas de llevar a cabo, con un sinfín de cálculos de posición de enlaces y partículas. A este hecho hay que añadir el elevado número de variables a parametrizar y el efecto que se puede derivar de la modificación de unas sobre otras, lo cual hace muy complicado encontrar parámetros de simulación, aunque no óptimos, adecuados. Las pruebas preliminares, una vez más, fueron muy importantes para encontrar una pauta de trabajo.

Atendiendo a la generación de comprimidos, se ha visto que cuanto mayor es el valor del módulo de corte, mejores comprimidos se generan, aunque no se acerque mucho a la realidad, por eso se ha intentado mantener ese equilibrio junto con el número de enlaces y con la velocidad de compresión, que al crecer provoca una mayor fuerza de compresión.

En cuanto a los tamaños de partículas empleados, los de mayor coste computacional son los que podrían resultar más fieles al complejo de partículas real, dado su menor tamaño de radio de partícula, pero para la posterior inclusión en el sistema dosificador, y simular un buen número de los mismos, son, a día de hoy, computacionalmente inviables. Aun así, están un poco lejos de ser iguales a los comprimidos reales, con partículas del orden de micras. No obstante, en cuanto a definición de contorno, fuerzas de compresión en la generación, son notablemente mejores y más reales, que los modelos de mayor radio de partícula que se han desarrollado en la dosificación. Aun así, con los modelos testados en el dosificador, se alcanzado buenos resultados, continuistas, además, con las líneas de investigaciones previas.

En este sentido, se están validando metodologías de trabajo al tiempo que los modelos de comprimido, ya que se ratifica el empleo de estos métodos al utilizar una topología de comprimido, peso y dimensiones, y tamaños de partícula diferentes, para validar los propios modelos llegando a las mismas conclusiones en cuanto a velocidad de compresión y modelo de contacto.

5.1.2 Actualización del modelo del Sistema dosificador de comprimidos

El modelo de partículas solapadas del que se disponía hasta el comienzo de esta investigación se comportaba de una manera un poco irregular, dado que la rodadura no estaba del todo lograda sobre todo por la deficiencia en los casquetes del comprimido, pero se suplía con unos bajos valores de las interacciones físicas como el rozamiento dinámico. Por otro lado, los atascos eran superiores a los encontrados con el modelo actual. El hecho de poder incluir en el sistema dosificador un comprimido mucho más cercano al real, es toda una ventaja. Y un logro.

Hasta el momento de comenzar esta tesis doctoral, la posibilidad de generar un sistema de partículas compacto (por compresión, en este caso), era más o menos realizable, pero no era un sistema exportable. El origen de la librería *particleReplacement*, ha sido determinante a la hora de realizar la investigación en este sentido. Permite simular cualquier tipo de sistemas de partículas y en este caso se han logrado mejoras gracias a ello. Se ha visto que el número de atascos, en general, con los nuevos modelos empleados, es menor que los resultados previos.

La inclusión de los nuevos modelos de comprimido ha obligado, pero a la vez permitido, el parametrizar de manera más conveniente, y quizás más real, las interacciones físicas de las partículas de sal con las geometrías del sistema dosificador.

Como contrapartida se tiene que los tiempos de simulación son mucho más elevados, pero asumibles dada la inclusión de un modelo de comprimido mucho más real, ya que el número de partículas por comprimido es superior.

En cuanto a los requisitos de diseño, inclinación del depósito y velocidad de giro de los álabes del sistema serializador de salida, se corrobora que la configuración de partida, entendida como óptima, sigue siéndolo. En términos de velocidad de serialización, se ha mantenido la línea de resultados e incluso, con los nuevos modelos de comprimido, se ha mejorado el valor umbral de comprimidos por minuto. Por otro lado, las fuerzas generales sufridas por los comprimidos han aumentado, respecto los resultados de investigaciones previas, aunque manteniendo la tendencia, incluso en las dos configuraciones de sistema analizadas, ya que lo han hecho las interacciones físicas y

también por la existencia de los enlaces entre partículas de los comprimidos modelados. El caso de la configuración 1, con dieciséis grados de inclinación y ochenta y cuatro revoluciones por minuto para la velocidad de rotación de los álabes del sistema serializador de salida, ha resultado ser el set point más favorable para el dispositivo dosificador, por alcanzarse mejores valores de velocidad de serialización, dados los objetivos fijados, y menos atascos. En las geometrías de álabe analizadas, se tienen diferentes conclusiones finales. Para los triángulos de vértices redondeados, el primer caso analizado, el modelo que mejor se comporta es el comprimido de 1.75 en cuanto a velocidad y fuerzas de desgaste, aunque desde el punto de vista de las fuerzas de enlaces y contactos lo mejora el de 1.5 mm, quizás porque constructivamente es un modelo más compacto y de mayor densidad. A continuación, se expone completada la figura 73.

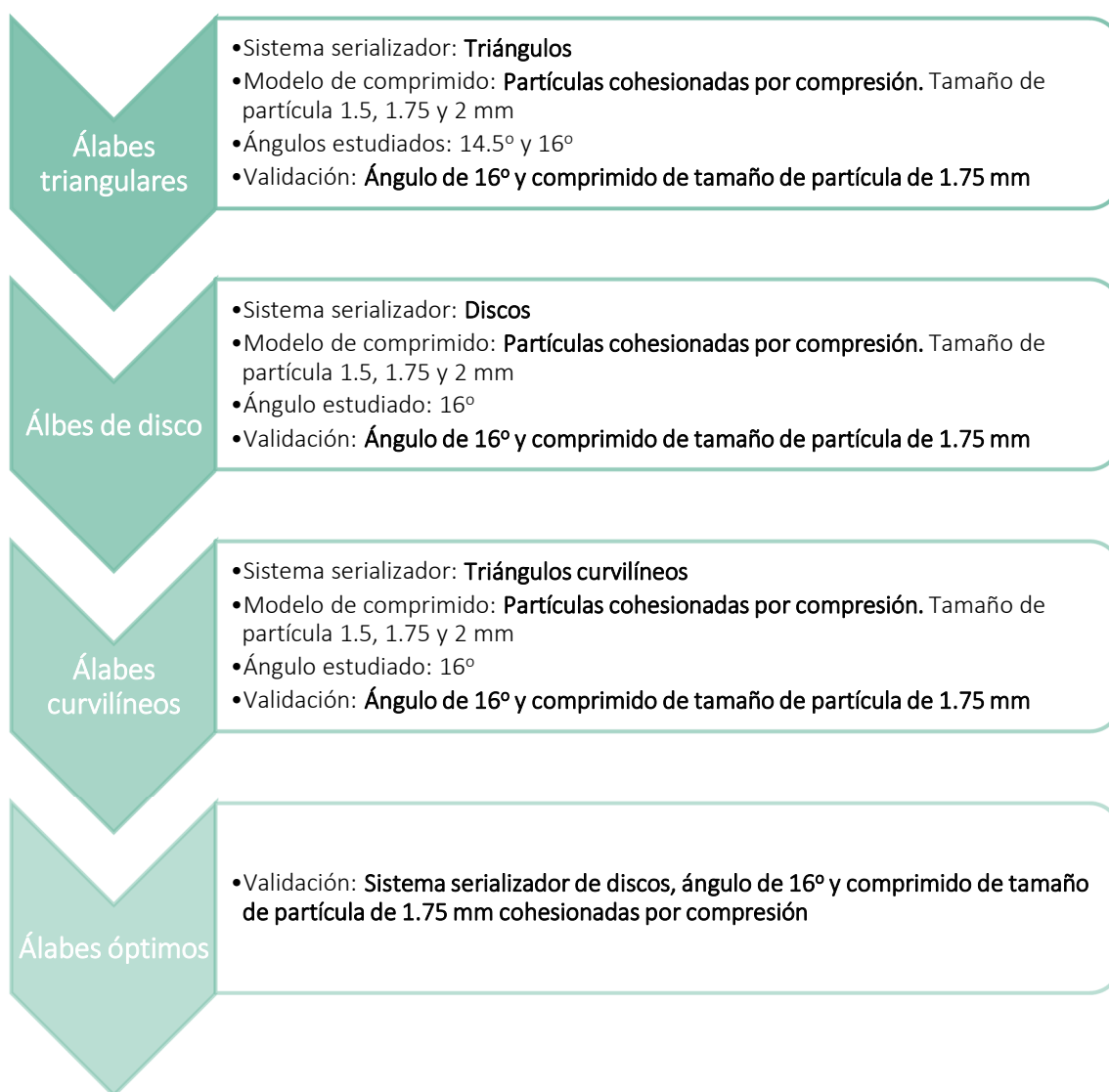


Figura 101. Validación de modelos de comprimido y modelo dosificador

Para las otras dos geometrías estudiadas, discos y triángulos curvilíneos, el modelo que mejor se ha comportado en todos los aspectos ha sido el de 1.75 mm, mejorando el caso anterior en velocidad y mejorando también los valores de fuerza globales dados en el sistema. De entre estas dos configuraciones, resulta el caso óptimo final para el comprimido de 1.75 mm y los discos serializadores, tanto por su velocidad alcanzada como por ser el que menores fuerzas globales alberga y ser más respetuoso con la integridad del comprimido, aunque no se haya logrado la disgregación de las partículas. Resulta aún mejor, el modelo de discos serializadores, cuando se incluyen las bandas de goma al lateral de los discos, hecho que contribuye a la mejora de velocidad y reducción globales de las fuerzas sufridas por los comprimidos, respetando su integridad.

5.1.3 Software EDEM

Habiendo trabajado durante mucho tiempo con EDEM, sus bondades eran ya bien conocidas, además de que su potencia y versatilidad hablan por sí solas, dado el éxito y uso extendido a nivel mundial.

No obstante, cabe reseñar su evolución y mejora, tanto desde el punto de vista de aplicación como de cálculo. La implementación de nuevos modelos de contacto y el propio reemplazo de partículas, dota a este software, más si cabe, de unas cualidades y posibilidades de generar cualquier tipo de aplicación relacionada con la dinámica de partículas.

Los resultados obtenidos son, en líneas generales, satisfactorios, aunque, como todo son mejorables. El hecho de haber encontrado esa pequeña limitación en cuanto al modelo de contactos Hertz Mindlin with Bonding y no haber logrado que las partículas se disgreguen, genera una pequeña desilusión e insatisfacción, a nivel personal del autor, por no haber conseguido fidelizar ese hecho en la simulación. Para poder encontrar un resultado semejante a la disgregación, se deben variar los parámetros del modelo de contacto dando valores que distan mucho de los empleados en el proceso de compresión, por tanto, contradictorios con el modelo original.

5.2 Líneas futuras de investigación

Aunque se ha dado un pequeño gran paso confirmando las teorías previas a la investigación actual en cuanto a la configuración óptima del sistema dosificador, aun se pueden pulir numerosos detalles, como es el ajuste de los parámetros de interacción entre los materiales para poder acelerar el tiempo de simulación y reducirlo, lo que permitiría simular los modelos de comprimido, de menor radio de partícula, que ahora suponen un muy elevado coste, encontrando así una mayor fidelidad. Aprovechando las

futuras mejoras de la tecnología y hardware, se podrá mejorar de manera paralela este hecho, e incluso con los avances de mejora de cálculo que se darán en nuevas versiones del software EDEM, que a buen seguro permitirán modelar de manera más real el dispositivo.

En cuanto a la generación de modelos de comprimido, se pueden realizar distintas mejoras. La primera de ellas estaría relacionada con los modelos de contacto, ajustando los parámetros para intentar sintonizar, junto con otros modelos, un modelo con un mayor número de partículas, y menor radio de las mismas. Al mismo tiempo, se puede hacer uso del software TRUBAL, para poder calcular la fricción en los enlaces de partículas, así como la deformación plástica en el proceso cuasi-estático de la compresión (Sheng, 2003).

Otra idea factible, aunque compleja, es estudiar la inclusión de recubrimientos en el proceso de compresión para la obtención de modelos de comprimido. En los procesos reales de compresión de aditivo alimentario, se usan diferentes lubricantes inocuos para su ingesta por parte del ser humano, que facilitan el proceso de compactación y salida del compacto de la matriz, ayudando además a mantener la vida útil de las herramientas de fabricación. Se podrían generar diferentes factorías, que circunvalen a la factoría principal de generación de partículas de aditivo, en las que se originarían partículas de lubricante del orden de micras para crear una película protectora alrededor de las partículas de aditivo, y simular el efecto de dichos lubricantes, ajustando los parámetros de interacción y de enlace entre las partículas del lubricante y aditivo o de lubricante y material de la matricería de fabricación. Posteriormente, habría que estudiar el efecto de la inclusión de esta película, en el sistema dosificador, simulando estos comprimidos, con el fin de encontrar los parámetros que se ajusten al efecto de la misma, ya que sería menor el rozamiento de los comprimidos, tanto estático como dinámico, entre sí y con las posibles superficies de contacto. Es un reto complicado a la par que atractivo.

En la línea de obtención de modelos de comprimido, se podrían generar sistemas de comprimidos de varios ingredientes a la vez, intentando optimizar la densidad y compacidad del comprimido, siendo diferentes tipos de enlaces los que se tendrían que generar. Posteriormente, habría que estudiar su comportamiento en el dosificador, de la misma forma que los comprimidos con película protectora.

Por último, y de la misma forma que se puede ahondar en los temas mencionados, se pueden aplicar algoritmos de detección de contactos (Song et al. 2005) para optimizar la dosificación y el propio diseño del modelo de comprimido, teniendo en cuenta la velocidad angular de rotación de los comprimidos.

Referencias

- Alba, F. 2004. Aplicación del QFD para el Diseño de Sistema Automático de Dosificación seca de aditivos especiales en la Industria Alimentaria. Tesis doctoral, Universidad de La Rioja
- Alba, F, Ordieres, J., Vergara, E.P., Martínez de Pisón, F.J., Castejón, M. 2005, European patent, EP 1 595 795 A1, Device for supplying/dosing packaged tablets for the food industry
- Alba, F., Guerra, Á., Las Heras, J., González, A., Alfonso, J., Castejón, M. 2014. A new device for dosing additives in the food industry using quality function deployment. *Journal of Food Process Engineering*, 37(4), 387–395
- Boukouvala, F., Gao, Y., Muzzio, F., Ierapetritou, M.G. 2013. Reduced-order discrete element method modeling. *Chemical engineering science*, 95, 12-26
- Briscoe, B.J. y Rough, S.L. 1998. The effects of wall friction in powder compaction. *Colloids and surfaces. Physicochemical and Engineering aspects*, 137, 103-116
- Bruch, C.A. 1967. Problems in the pressing submicron size alumina powder. *Ceramic Age*, 83, 44-53
- Campbell, C.S. 1990. Rapid granular flows. *Ann. Rev. Fluid mech.*, 22, 57-92
- 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. y Sawley, M.L. 2002. DEM modelling of industrial granular flows: 3D case studies and the effect of particles shape on hopper discharge. *Applied mathematical modelling*, 26, 89-111
- Cooper, A.R. y Eaton, L.E. 1962. Compaction behaviour of several ceramics powders. *Journal of American ceramic society*, 45, 97-101
- Cundall, P.A. 1971. A computer model for simulating progressive, large-scale movements in blocky rock systems. *Proceedings of the International Symposium on Rock Mechanics*. Nancy, France (1971), pp. 129-136 [s.n.]
- Cundall, P. A., & Strack, O. D. L. 1979. A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique*, 29, 47–65
- Desai, D.S., Rubitski, S.A., Newman, A.W. 1993. Physical interactions of magnesium stearate with starch-derived disintegrants and their effects on capsule and Tablet dissolution, *Int. Journal Pharm.* 91, 1993, 217-226

FAO 1981. Food and agriculture organization of the United Nations. Norma general del codex para el etiquetado de aditivos alimentarios que se venden como tales

FAO 1992. Food and agriculture organization of the United Nations. Comisión del codex alimentarius, manual de procedimiento

Favier, J.F., Abbaspour-Fard, M.H., Kremmer, M., Raji, A.O. 1999. Shape representation of axisymmetrical, non-spherical particles in discrete element simulation using multi-element model particles. *Engineering computations*, vol.16, 467-480

Foersters, S.F., Louge, M.Y., Chang, H. Allia, K. 1994. Measurement of the collision properties of small spheres. *Physical fluids*, nº6, p. 1108-1115

García, P. 2010. Avances en aglomeración y compactación de partículas. Departamento de Ingeniería Química de la Universidad de Santiago de Compostela

Grossman, L., Tomas, J. y Csöke, B. 2004. Compressibility and flow properties of a cohesive limestone powder in a medium pressure range. *Granular matter*, 6, 103-109

Guerra, Á. 2011. Modelado y optimización de un dispositivo dosificador automático de aditivos comprimidos empleando DEM (Discrete Element Method). Departamento Ingeniería Mecánica de la Unviersidad de La Rioja

Haff, P. K., & Werner, B. T. 1986. Computer simulation of the mechanical sorting of grains. *Powder Technology*, 48, 239–245

Hancock BC, Ketterhagen WR. 2011. Discrete element method (DEM) simulations of stratified sampling during solid dosage form manufacturing. *Int. J Pharm.* 418, 14

Hart, R., Cundall, P.A, Lemos, J. 1988. Formulation of a three-dimensional distinct element model – part II, Mechanical calculations for motion and interaction of a system composed of many polyhedral blocks. *International journal of rock mechanics*, vol. 25, nº 3, 117-125

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

Hocking, G. 1989. The DEM for analysis for fragmentation of discontinua. First conference on the Discrete Element Method, Golden, CO

Hoghe, C. 1998. Shape representation and contact detection for discrete element simulations of arbitrary geometries. *Engineering computations*, vol. 15, nº3, 374-390

- Hussain, M.A., 1999. Review of the applications of neural networks in chemical process control - simulation and online implementation. *Artificial Intelligence in engineering*, 13 (1), 55-68
- Jerier, J.F., Molinari, J.F. 2011. Normal contact between rough surfaces by the Discrete Element Method. *Tribology international*, 47, 1-8
- Kahrs, O., Marquardt. W., 2007. The validity domain of hybrid models and its application in process optimization. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 46 (1), 1054-1066
- Ketterhagen, W.R., Ende, M.T., Hancock, B.C. 2009. Process modelling in the pharmaceutical industry using the discrete element method. *Journal of pharmaceutical science*, 98
- Ketterhagen, W.R., Bharadwaj, R., Hancock, B.C. 2010. The coefficient of rolling resistance (CoRR) of some pharmaceutical tablets. *International journal of pharmaceutics*
- Ketterhagen, W. 2011. Modeling the motion and orientation of various pharmaceutical tablet shapes in a film coating pan using DEM. *International journal of pharmaceutics*, 409, 137-149
- Ketterhagen, W. 2015. Simulation of powder flow in a lab-scale tablet press feed frame: effects of design and operating parameters on measures of tablet quality. *Powder technology*, 275, 361-374
- Kimber, J.A., Kazarian, S.G, Stepanek, F. 2011. Modelling of pharmaceutical tablet swelling and dissolution using Discrete Element Method. *Chemical engineering Science*, 69, 394-403
- Kodam, M, Bharadwaj, R., Curtis, J., Hancock, B.C., Wassgren, C. 2009. Force model considerations for glued-sphered discrete element method simulations. *Chemical engineering science*, 64, 3466-3475
- Kruggel-Emden, H., Simsek, E., Rickelt, S., Wirtz, S., Scherer, V. 2006. Review and extension of normal force models for the Discrete Element Method. *Powder technology*, 171, 157-173
- 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
- Latham, J.P., Munjiza, A., García, X., Xiang, Z., Guises, R. 2011. Three-dimensional particle shape acquisition and use of shape library for DEM and FEM/DEM simulation. *Minerals engineering*, 21, 797-805

- Lin, X., Ng, T.T. 1995. Short communication, contact detection algorithms for three-dimensional ellipsoid in discrete element modelling. *International journal for numerical method in geo-mechanics*, vol. 19, 653-659
- Liss, E.D., Conway, S.I., Zega, J.A., Glasser, B.J., 2004. Segregation of powders during gravity flow through vertical pipes, *Pharm. Technol.* 78-96
- Lucía, D.J., Beran, P.S., Silva, W.A., 2004. Reduced-order modelling: new approaches for computational physics. *Progress in Aerospace Sciences*, 40 (1-2), 51-117
- Malone, K.F., Xu, B.H. 2008. Determination of contacts parameters for discrete element method simulations of granular systems. *Particuology* 6, 521-528
- Munjiza, A., Owen, D.R. and Bicanic, N. A combined finite-discrete element method intransient dynamics of fracturing solids. *Engineering computations*, Vol. 12 Nº 2, 145-174
- Muro, J., 2015. Modelizado y optimización del proceso de compresión de aditivos alimentarios mediante DEM (Discrete Element Method). Departamento de ingeniería mecánica de la Universidad de La Rioja
- Ning, Z., Boerefijn, R., Ghadiri, M., Thornton, C. 1997. Distinct element simulation of impact breakage of lactose agglomerates. *Advanced powder technology*, Vol. 8, nº 1, 15-37
- O'Sullivan, C. 2011. *Particulate Discrete Element Modelling. A geomechanics perspective.* Spon press
- Polycarbonate, Massey, L. 2005 ISBN 9780815515050, páginas 81-109
- Potapov, A. V., & Campbell, C. S. 1996. Computer simulation of hopper flows. *Physics of Fluids*, 8, 2884–2894
- Rumpf, H. 1962. *The strength of granules and agglomerates.* W.A. Knepper, Inter-Science publishers. New York
- Sheng, Y., Lawrence, C.J., Briscoe, B.J. 2003. Numerical studies of uniaxial powder compaction process by 3D DEM. *Engineering computations*, vol. 21, n 2/3/4, 304-317
- Shi Gen-Hua, 1988. *Discontinuous deformation analysis- a new numerical model for the statics and dynamics of block systems.* PhD Thesis, University of California, Berkeley
- Simon, O. y Guigon, P. 2003. Correlation between powder-packing properties and roll press compact heterogeneity. *Powder technology*, 130, 257-264
- Song, Y., Turton, R., Kayihan, F. 2005. Contact detection algorithms for DEM Simulation of tablet-shaped particles. *Powder technology*, 161, 32-40

- Suzzi, D., Toschkoff, G., Radl, S., Machold, D., Fraser, S.D., Glasser, B.J., Khinast, J.G. 2011. Chemical engineering science, 69 (2012), 107-121
- Tabor, D. 1995. The mechanics of rolling friction II. The elastic range. Proc. R. Soc London, nº 229, p. 198-220
- Ting, J.M., Meachum, L., Rowell, J.D. 1995. Effect of particle shape on the strength and deformation mechanisms of ellipse-shaped granular assemblages. Engineering computations, vol. 12, 99-108
- Walker, E.E. 1923. The properties of powders. Part VI: the compressibility of powders. Trans Faraday Soc. 73-82
- 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
- Wang, J., Wen, H., Desai, D. 2010. Lubrication in tablet formulations. European journal of pharmaceutics and biopharmaceutics, 75, 1-15
- Wensrich, C.M., Katterfeld, A. 2011. Rolling friction as a technique for modelling particle shape in DEM. Powder technology, 219, 409-417
- Williams J.R., Hocking G., Mustoe G.G.W. 1985. The theoretical basis of the discrete element method. In: NUMETA '85, Balkema, Rotterdam
- Xu, B.H. y Yu, A.B. 1997. Numerical simulation of the gas-solid flow in a fluidized bed by combining discrete particle method with computational fluid dynamics. Chemical engineering science, vol. 52, nº 16, 2758-2809
- Zavaliangos, A. 2003. A numerical study of the development of tensile principal stresses during die compaction. Particulate Science and technology, 21, 105-115
- Zhong, W., Yu, A., Liu, X., Tong, Z, Zhang, H. 2016. Dem/CFD-DEM Modelling of Non-spherical particulate systems: Theoretical developments and applications. Powder technology, 302, 108-152