

## 多粒子有限要素法を用いた粉体圧縮成形プロセスと 成形体の圧壊強度試験の数値解析

大崎 修司\*, 今吉 優輔, 小川 航輝, 仲村 英也, 綿野 哲

### Numerical Analysis of Powder Compaction and Tensile Test by Using Multi Particle Finite Element Method

Shuji Ohsaki\*, Yusuke Imayoshi, Koki Ogawa, Hideya Nakamura and Satoru Watano

Received 30 April 2024; Accepted 24 June 2024

In this study, basic research was conducted to develop numerical models for filling behavior, compaction process, and tensile test of compacts. Numerical calculations of the filling behavior using distinct element method were performed. The calculated results got a good agreement with experimental one, enabling us to perform the numerical analysis of the filling process. The powder compaction process was also performed using multi particle finite element method (MP-FEM) with the information on the particle position and radius obtained from the DEM calculations. The compaction pressures of the same order as the experimental results were obtained, suggesting that the powder compaction process was successfully analyzed numerically. Furthermore, using the compact geometry obtained from the compaction calculations, tensile tests were numerically calculated using the MP-FEM when a load was applied in the radial direction of the compact. The crushing process of the powder layer was successfully represented. It was shown that the tensile strength can be calculated from the numerical analysis. The particle filling behavior using DEM and the compaction and crushing processes using MP-FEM were successfully calculated numerically in a series.

**Keywords:** Powder filling, Powder compression, Tensile test, Distinct element method, Multi particle finite element method.

### 1. 緒 言

粉体の圧縮成形は、医薬、化学、食品、粉末冶金などのさまざまな分野でもっとも多用される生産プロセスの1つである[1]。製造・輸送時の衝撃や構造体として用いられる場合の荷重に耐えられる適切な強度が求められる。圧縮成形プロセスは、充填・圧縮成形・排出の3つの工程で構成されており、それぞれの工程は最終的な成形体強度をコントロールする上で非常に重要である。また、原料となる粉体は粒子径や剛性の異なる粒子により構成されており、それらの粉体特性も成形体強度に大きく影響する。さらに、充填・圧縮成形のプロセスにおいて、異なるサイズや剛性の粒子を用いた場合、空隙が粉体層内において偏析することにより不均質となり、成形体の局所的な応力集中の発生や亀裂の発生に影響をおよぼすことがわかっている[2–4]。以上のように、圧縮成形プロ

セスでは原料粉体の物性、およびそれぞれのプロセスが相互に影響し成形体強度を決定している。しかしながら、製品に求められる強度を持つ成形体を得るためには、実験的に原料粉体の組成の調製や充填・圧縮成形のプロセスパラメータの最適化を行い、得られた成形体の圧壊強度測定を行うといった一連の作業を何度も繰り返さなければならず、膨大な資源と時間を要する。そこで、数値計算を用いて、圧縮成形プロセスとさらには得られる成型体の評価を一連で計算することができれば、数値シミュレーションによる成形体の圧壊強度予測が可能となり、大幅なコスト削減に貢献できる。

粉体圧縮プロセスについて、粒子間の相互作用や微細構造を評価できる離散要素法 (Discrete Element Method; DEM) や、粉体層を連続体とみなし巨視的な変形挙動を評価できる有限要素法 (Finite Element Method; FEM) を用いた検討が多数行われている。Stregeらは粉体圧縮時の3次元微細構造について、高解像度X線マイクロトモグラフィーを用いた実験的な検討とDEMによる数値計算的な検討を行い、充填時の粉体層の密度分布が圧縮後に均一になることを明らかにした[5]。また、われわれのグループにおいても、圧縮挙動において付着性微粒子であっても粒径比を増加させることで空隙率を低下させる

粉体工学会 2023 年度秋期研究発表会, 2023 年 10 月 10 日, インテックス大阪, BP 賞受賞  
大阪公立大学大学院 工学研究科 化学工学分野  
(〒 599-8531 大阪府堺市中区学園町 1-1)  
Department of Chemical Engineering, Osaka Metropolitan University  
(1-1 Gakuen-cho, Naka-ku, Sakai, Osaka 599-8531, Japan)  
\* Corresponding Author shuji.ohsaki@omu.ac.jp

ことができることを明らかにしている[6]。以上のようにDEMによる解析では粒子間の相互作用や局所的な微細構造の評価を行うことができる。その一方、粒子の変形を球のオーバーラップで模擬するため、粒子の変形について評価することができない。これに対しFEMでは粉体層を連続体とみなし巨視的な変形挙動を再現できる。FEMにおいては粉体挙動を模倣するにあたってDPC (Drucker-Prager Cap) モデルが用いられることが多く、粉体の緻密化、硬化、粒子間摩擦を表現することができる[7]。Wuらはシミュレーションにより除荷時の密度分布を調べ、局所的なせん断領域とキャッピングの破断位置が近く、DPCモデルによるキャッピング予測が可能であることを示している[8]。Furukawaらは圧縮力の違いにより塑性ひずみが生じる位置が異なることでキャッピングが発生することを明らかにしている[9]。Hayashiらは、DPCモデルを用い、ヤング率、ポアソン比、内部摩擦角、塑性変形パラメータ、初期密度といったシミュレーションパラメータが残留応力に与える影響を報告している[10]。また、われわれも粉体圧縮プロセスにおける圧縮速度を考慮可能な新規モデルを提案している[11]。以上のように、FEMを用いた数値計算による圧縮プロセスの検討は多数行われてきたが、粒子情報が失われるというデメリットは無視できない問題である。かつ、FEMでは粉体層が均質な連続体であるという前提のもとに成り立っており、成形体強度に多大な影響を与える要素である不均質性の考慮ができない。そこで近年では、DEMとFEMの両方の利点を併せ持つ多粒子有限要素法 (Multi Particle FEM; MP-FEM) が提案されている。Jiaらはタングステン粉末について粒子径、初期充填構造、成形圧力が成形体におよぼす影響を二次元的に検討している[12]。Loidoltらは付着性単分散粒子の粉体層が、50個の粒子が含まれる周期的な代表体積要素により構成されているとし、付着性が低い場合は降伏面がDPCモデルに帰着するが、付着性が高い場合は楕円形の降伏面を持つことや[13]、要素のひずみと粒子の異方性の関係を明らかにした[14]。このようにMP-FEMでは、粒子の移動と変形の両方を調べることができるものの、計算負荷が大きく微視的な領域での評価にとどまっている。

圧縮成形による成形体の力学物性評価には一般的に径方向に荷重をかける圧壊試験から算出される引張強度が用いられ、その挙動についてDEM、FEMを用いた数値解析による検討が多数行われている。Heらは鉄鉱石微粉末を用いた実験的検討と、DEMを用いた数値計算的検討から、成形体の脆性破壊がせん断応力と引張応力によって粒子間結合が破壊されることにより引き起こされることを明らかにした[15]。Yohannesらは粒度分布が成形体強度におよぼす影響を検討した結果、金型直径の1/6以上の直径の粒子が存在すると、粒子間の接触力や結合力が不均一になり、引張強度にばらつきが生じることを報告している[2]。Martinらは2種類の球形金属粉末を混合した2峰性粉体について実験・数値解析的検討を行い、成形体強度がバイモーダリティに依存することを明らか

にした[16]。Shangらは錠剤の圧壊力を予測するために、修正DPCモデルと最大主応力を用いた破壊基準が有用であることを明らかにしている[17]。Misraは皮質骨からなる円盤試験片について、実験と計算の両面から検討し、局所的な体積変化やひずみ、異方性の進展が破壊に寄与することを明らかにした[18]。Al-Sabbaghらは3種類の医薬品賦形剤からなる錠剤の強度の包括的な特性評価を行い、錠剤の破損力を予測する手法を開発した[19]。Mazelらは扁平形状の錠剤について径方向圧縮を行い、扁平形状では最大引張ひずみと最大応力の両方が錠剤の中心部に位置することを数値計算から明らかにし、デジタル画像相関法を用いた実験によってその妥当性を確認した[20]。以上のように、引張強度を求める径方向の圧壊試験の数値解析は広く行われているものの、いずれもDEMもしくはFEMを用いた解析であり、DEMでは厳密な粒子変形の考慮が困難であり、FEMでは粒子情報が失われるという課題は克服できていない。

本研究では、充填・圧縮成形プロセスの数値解析と、圧縮成形体の圧壊強度予測を目的とした基礎的研究を目的とした。具体的には、DEMを用いた数値計算による充填プロセスの検討、MP-FEMを用いた数値計算による圧縮成形プロセスと圧壊プロセスの検討を行った。特に、小粒子を混合した粉体層に対する充填・圧縮・成型体の引張強度の評価試験の数値解析モデルの構築を目指した。

## 2. 方 法

### 2.1 実験

本研究では、モデル粒子として質量基準50%粒子径165、430  $\mu\text{m}$ の球状の微結晶セルロース (旭化成) を、それぞれを小粒子、大粒子として用いた。Fig. 1にモデル粒子として用いた微結晶セルロースの粒度分布を示す。粒度分布測定にはレーザー回折式測定装置 (SALD-2100, 島津製作所) を用いた。粒子密度はピクノメータを用いて測定した結果1513  $\text{kg}/\text{m}^3$ であった。このとき、セルロースは水を吸収し膨潤性があるため、有機溶媒としてオクタノールを用いた。また、自作のFeed Shoeに大小混合粉体を小粒子割合が0、25、50、75、100%となるように1.2g初期充填し、50  $\text{mm}/\text{s}$ でボックスを水平移動さ

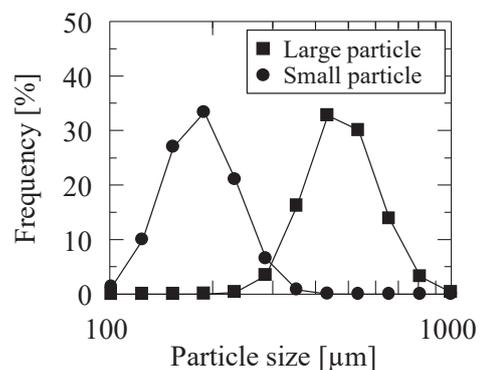


Fig. 1 Particle size distributions of model samples

せることで白に粉体を充填し、充填率を測定した。さらに、圧縮試験機 (Powder Compression Machine, ダルトン製) を用いて、成形体の径方向に加圧し圧壊時の荷重と変位を測定した。

## 2.2 数値解析

### 2.2.1 粒子充填挙動の数値解析

自作の Feed Shoe を模擬した粒子の充填挙動を、DEM を用いて計算した。DEM における粒子の運動に関する基礎式は、以下に示す Newton の並進および回転運動方程式によって表される。

$$m_p \frac{dv}{dt} = F_{cn} + F_{ct} + m_p g \quad (1)$$

$$I \frac{d\omega}{dt} = -\mu_r F_{cn} \frac{\omega}{|\omega|} + r \times F_{ct} \quad (2)$$

ここで、 $m_p$ ,  $v$ ,  $F_{cn}$ ,  $F_{ct}$ ,  $g$ ,  $I$ ,  $\omega$ ,  $r$  と  $\mu_r$  はそれぞれ粒子質量、粒子速度、法線方向の接触力、せん断方向の接触力、重力加速度、粒子の回転慣性モーメント、粒子の角速度、粒子の重心から接触点までの距離および転がり摩擦係数である。本研究では、Johnson-Kendall-Roberts (JKR) モデルを基に結合剤による付着力を表現した。これまでに、JKR モデルを用いて、実験と計算における粒子の運動挙動を解析した報告例がある [21,22]。Hertz-Mindlin と JKR モデルを組み合わせ、法線方向の接触力  $F_{cn}$  は次式で表される。

$$F_{cn} = F_{JKR} + F_{cn,d} \quad (3)$$

$$F_{JKR} = \frac{4E^*}{3R^*} a^3 - \sqrt{4\pi\gamma E^*} a^{\frac{3}{2}} \quad (4)$$

$E^*$ ,  $R^*$ ,  $\gamma$ , と  $a$  はそれぞれ換算ヤング率、換算粒子半径、表面エネルギーおよび接触面半径である。Eq. (4) の第 1 項と第 2 項は Hertz-Mindlin 理論に基づく法線方向の接触力と JKR 理論に基づく付着力をそれぞれ表している。せん断方向の接触力  $F_{ct}$  および法線方向の減衰力  $F_{cn,d}$  は Hertz-Mindlin モデルに従って使用した。なお、計算には商用ソフトウェアである EDEM (Altair Engineering Inc.) を利用し、計算条件を Table 1 にまとめた。

### 2.2.2 粉体圧縮プロセスの数値解析

粉体の圧縮挙動を、MP-FEM を用いて解析した。MP-FEM では、DEM 解析で得られた粒子充填解析の結果を、形状作成ソフトウェア (ANSYS Space Claim, ANSYS Inc.) に取り込み、陽解法シミュレーションソフトウエ

ア (Ansys LS-DYNA, ANSYS Inc.) による圧縮解析を行うことで、多粒子の圧縮挙動を計算した。なお、計算系のスケールが大きいほどタイムステップが大きくなり計算負荷が小さくなるため、本研究の MP-FEM 計算では計算系のスケールを 1000 倍の相似な系に拡大した。予備検討として、実際サイズの系と 1000 倍のサイズの系での成形圧を比較したところ、異なるスケールでも成形圧は同程度であることを確認している。Fig. 2 (a) に、使用した計算系を示す。白および上下杵は剛体と定義し、粉体層には弾塑性モデルの 1 つである Bilinear isotropic hardening model を適用した。Bilinear isotropic hardening model では、降伏応力と塑性領域の接線勾配を設定することで弾性領域と塑性領域を区別する。また、降伏関数  $F$  には、Eq. (5) に示すミーゼスの降伏関数を使用した。

$$F = \frac{1}{2} \sigma'_{ij} \sigma'_{ij} - Y^2 \quad (5)$$

$\sigma'_{ij}$  は偏差応力、 $Y$  は材料モデルにより定義した降伏応力である。材料パラメータの算出には、単一粒子の圧縮試験 (粒子強度測定装置 GRANO, 岡田精工) を行い、得

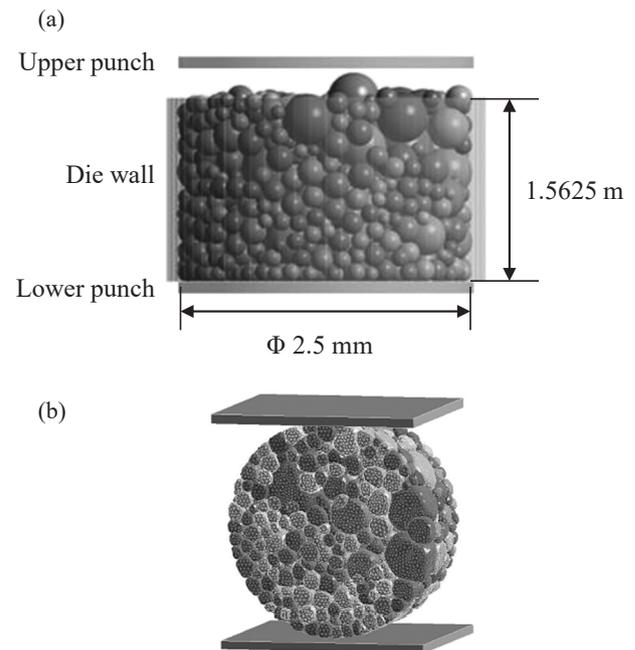


Fig. 2 Calculation geometries of MP-FEM for (a) powder compaction process and (b) tensile test

Table 1 Calculation conditions for DEM

Property		
Coefficient of restitution [-]		3.5
Coefficient of friction [-]		0.5
Coefficient of rolling friction [-]	Large particle	0.01195
	Mixture of large and fine particles	0.008586
	Fine particle	0.006169
Surface energy [J/m <sup>3</sup> ]	Large particle	0.002219
	Mixture of large and fine particles	0.001966
	Fine particle	0.001742

られた応力-ひずみ曲線から、降伏応力を 40.2 MPa、接線勾配を 0.403 Pa・mm とした。なお、本計算では、粒子のサイズによらず物性はすべて同値とした。そして、異なる大小粒子混合粉体を対象に粉体層を圧縮した。この時、実験検討より得られた成型体と同等の相対密度になるまで、上杵を降下させて粉体層を圧縮した。

### 2.2.3 成型体の引張強度の評価試験に関する数値解析

圧縮プロセスの数値解析より得られた粉体層のジオメトリを使用し、成型体の引張強度を評価するための径方向の圧壊試験を模擬した数値解析を行った。Fig. 2 (b) に、作製した計算モデルを示す。なお、初期状態では、上下杵を成型体と接触に近い状態を作り出すため、成型体からの距離が 0.1 mm 以下になるまで接近させた。上杵および下杵は剛体と定義し、粉体層には、粉体圧縮の数値解析と同様に Bilinear isotropic hardening model を使用した。また、粉体層の圧壊挙動を模擬するために、粒子間の接触面に対して、1 MPa を超える垂直またはせん断応力が生じた際に粒子の接触面が分離するよう、結合力を設定した。

## 3. 実験結果および考察

### 3.1 粒子充填挙動の DEM 計算

異なる小粒子割合の大小混合粉体を用いて、直径 8 mm の臼に対して自作の Feed Shoe による充填実験を行った。また、粒子充填挙動を模擬した DEM 計算を行った。異なる小粒子割合の大小混合粒子を充填した時の充填率の実験値と計算値を Fig. 3 に示す。いずれの場合も、小粒子割合 50% で充填率が最大になることがわかった。大粒子間隙を小粒子が埋めることで充填率が上がったと考えられるものの、既往の報告例では小粒子割合が 20~30% で充填率が最大なることがよく知られている[23,24]。得られた傾向は、実験および数値解析による既往の報告例と同様である。本研究では、モデル粒子の小粒子に対する大粒子の粒径比は 2.6 程度である。われわれの既往の報告例[6]によると、粒径比が 2 の場合は小粒子添加割合が 0.3 から 0.5 ではほぼ同程度であり、実験的にも粒径比 2 の場合では、小粒子を添加することでわずかに空隙率が下がることが報告されている。すなわち、粒径比が 2.6

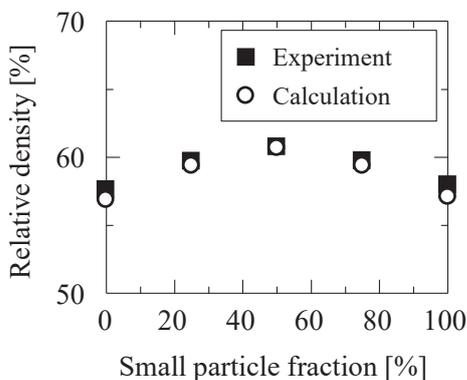


Fig. 3 Experimental and calculated relative densities during filling process as a function of small particle fraction

程度と小さかったため、小粒子割合 50% で充填率が最大になったと考えられる。また、実験と計算から得られた充填率はともにすべての小粒子割合においておおむね一致したことから、本研究における DEM 計算で設定した物性値やモデルが適切であることが示唆された。

粉体圧縮プロセスの数値解析における計算負荷軽減のため、実サイズと同等の充填状態となる最小の計算系サイズを探索するために、異なる径の臼に対する粒子充填挙動を DEM 計算した。Fig. 4 に臼径と充填率の関係を示す。臼径 2 mm 以下では、臼径 8 mm の充填率よりも 10% 以上の差がみられる一方で、2.5 mm 以上では誤差 5% 以下であった。これは、臼径が小さくなるほど、粉体層に対する臼壁面における空隙の影響が大きくなるためと考えられる。なお、臼径が 2.5 mm の方が 3.0 mm よりも充填率がわずかに大きくなっているものの、臼径 2.5 mm の計算結果において、粒子に働く力やオーバーラップ量など不自然な点は見られないことを確認している。本計算の結果には充填時に乱数に基づいた粒子生成に起因するランダム性を含むことを踏まえると、臼径が 2.5 mm の方が 3.0 mm よりも充填率がわずかに大きくなっているのは誤差範囲であるといえる。以上より、実験での充填状態を十分模擬できるもっとも小さい 2.5 mm の臼を用いて、以降の圧縮粉体圧縮プロセスと成型体の引張強度を評価する圧壊試験の数値解析を行った。

### 3.2 粉体圧縮プロセスの MP-FEM 計算

まず、材料パラメータを算出するために、単一粒子の圧縮試験を 5 回行った。測定結果から算出した粒子の応力-ひずみ曲線の傾きからヤング率を算出したところ、6.18 GPa であり、粒子のヤング率として MP-FEM による粉体圧縮プロセスの解析に用いた。また、異なる小粒子割合での粉体圧縮成型を実験的にを行った。Fig. 5 に小粒子割合と成型体相対密度の関係を示す。小粒子割合が 50% の時に相対密度が最大となった。このことから Fig. 3 に示したように、充填時にもっとも密な状態になった粉体層が圧縮時にもっとも密な状態になり、相対密度が大きくなったと考えられる。MP-FEM による粉体圧縮プロセスの解析では、実験と同様の相対密度を得るために必要なだけ杵を移動させた。

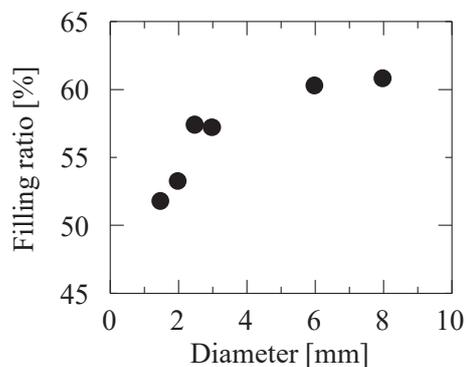


Fig. 4 Relationship between die diameter and filling ratio in DEM calculation

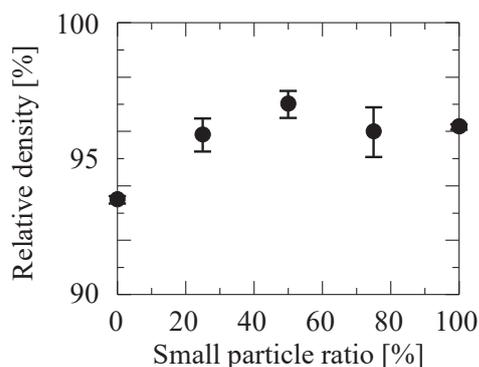


Fig. 5 Relationship between small particle fraction and relative density of powder layer after experimental compression process. Error bars indicate standard deviation of three experiments

DEMによる粒子充填挙動の解析によって得られた粒子の位置情報を用いて、異なる小粒子割合の粉体層の圧縮プロセスをMP-FEMによって解析した。小粒子割合0, 50, 100%の条件で得られた圧縮成型体の断面図をFig. 6に示す。なお、相当応力のコンター図として示した。いずれの条件においても、粉体層内の各粒子は圧縮前には球形粒子であったが、すべての粒子が変形していることが見てとれる。変形後の粒子形状はそれぞれ異なっており、これは、圧縮成型時において存在する、粉体層内の応力分布によるものと考えられる。なお、実験において杵荷重から算出した成形圧(約250 MPa)と数値計算における成形圧(約400 MPa)を比較すると、実験と数値計算の成形圧は同じオーダーであることを確認しており、MP-FEMによる粉体圧縮プロセスの数値解析は妥当であったと判断した。実験と計算の値の違いは粒子剛性の決定法にあると考えられる。

### 3.3 MP-FEMによる成型体の引張強度の評価試験に関する数値解析

まず、粉体圧縮プロセスによって得られた成型体の径方向の圧壊試験を実験的にを行い、引張強度を算出した。杵が成型体に接触してから圧壊が起こるまでに、0.2 mm程度変位したことがわかり、この変位量は成型体直径8 mmに対して2.5%であった。得られた結果を基に、MP-FEMによる成型体の引張強度の評価試験に関する数値解析を行った。このとき、数値計算における圧縮成型体の直径に対して2.5%だけ上杵を変位させた。小粒子割合0, 50, 100%の条件での、MP-FEMによる計算で得られ

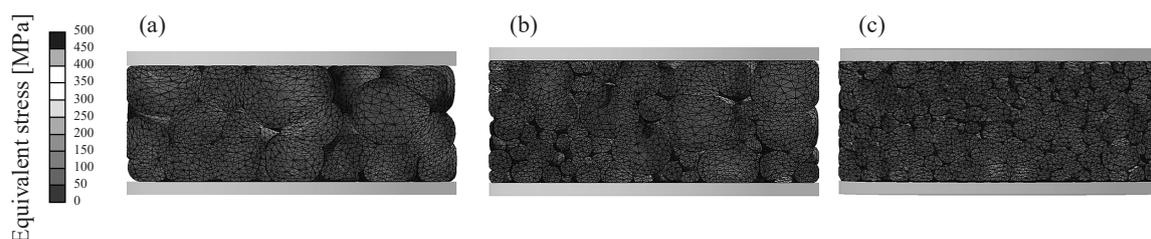


Fig. 6 Contour maps of equivalent stress in powder layer after compression process. Small particle fraction of (a) 0, (b) 50, and (c) 100%

た成型体の断面図をFig. 7に示す。なお、相当応力のコンター図として示した。青色はほぼ応力がかかっておらず、水色、緑色、黄緑色の順により大きく応力が生じていることを示す。いずれの小粒子割合条件においても、上下杵と接触している粒子が緑色や黄緑色になっており、応力が生じていることが見てとれる。さらに、杵と接触している粒子の鉛直方向に接触している粒子も応力が生じていることがわかった。また、小粒子割合が0, 100%と比較して、50%の条件のほうが応力のよりかかっている領域(黄緑色)が狭く、緑色や水色の領域が広がっていることがわかった。これは、粉体層の相対密度が大きいためと考えられる。言い換えれば、小粒子割合が0, 100%の条件で得られる相対密度の低い粉体層では、杵と接触している点で応力が集中しているといえる。ここで、小粒子割合50%の粉体層に対するMP-FEMの計算結果から算出した、上杵の変位量と上杵荷重の関係をFig. 8に示す。変位量の増加に伴い上杵荷重が増加し、最大値に達した後に減少することがわかる。したがって、上杵荷重のピーク値で圧壊が起こり、杵にかかる荷重が減少したと考えられる。異なる小粒子割合の条件においても同様の解析を行った。Fig. 8における上杵荷重のピーク値と小粒子割合の関係をFig. 9に示す。小粒子割合が50%の時に圧壊荷重がもっとも大きいことがわかった。小粒子割合50%で成型体の粒子はもっとも相対密度が大きく、接触面が大きくなったことで圧壊強度も最大になったと考えられる。以上のように、MP-FEMを用いることで粉体層の引張強度を評価する圧壊試験の数値解析が可能であることが示された。

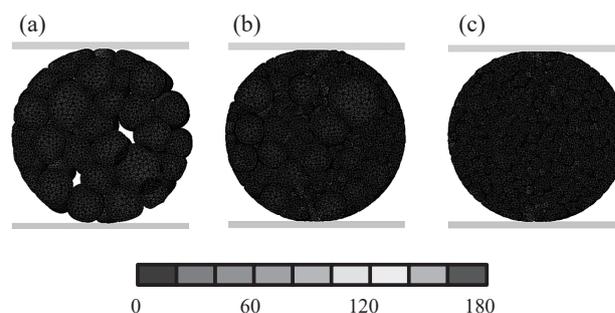


Fig. 7 Contour maps of equivalent stress in powder layer after tensile test. Small particle fraction of (a) 0, (b) 50, and (c) 100%

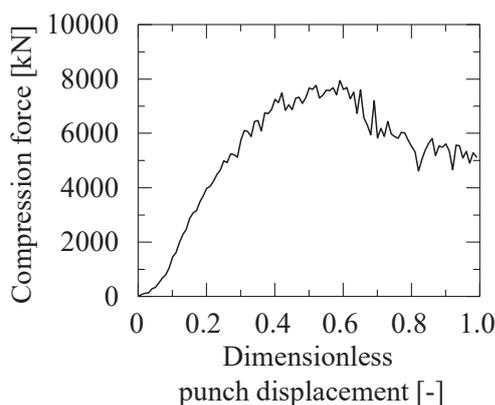


Fig. 8 Relationship between upper punch displacement and upper punch load in during tensile test

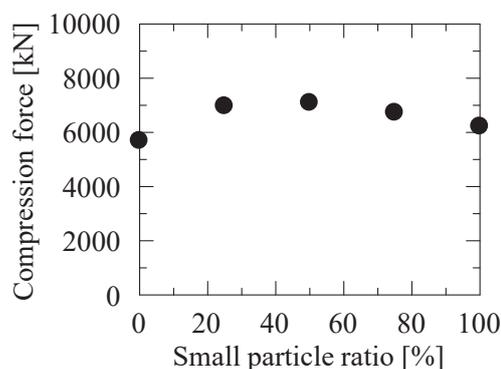


Fig. 9 Relationship between small particle fraction and crushing load in tensile test

#### 4. 結 言

本研究では、充填挙動、圧縮成形プロセス、成形体の圧壊試験の数値解析モデルの構築に向けた基礎的研究を行った。DEMを用いた充填挙動の数値計算を行い、実験結果にきわめて近い結果が得られ、充填プロセスの数値解析が可能となった。また、DEMの計算結果から取得した粒子の位置座標と半径の情報を用いて、MP-FEMを用いた粉体圧縮プロセスの数値計算を行った。その結果、実験結果と同じオーダーの成形圧が得られ、粉体圧縮プ

ロセスの数値解析に成功した。さらに、圧縮計算から得られた成形体ジオメトリを用いて、成形体の径方向に荷重をかけた時の圧壊試験をMP-FEMを用いた数値計算を行った。その結果、粉体層の圧壊過程を表現することに成功し、引張強度を数値解析から算出可能であることを示した。より、厳密に実現象を再現するためには材料パラメータの精密化などをする必要があると考えられるものの、DEMを用いた粒子充填挙動、MP-FEMを用いた圧縮および圧壊プロセスを一連で数値計算することに成功した。

#### Nomenclature

$a$	: contact surface radius	[m]	$r$	: distance from center of gravity of particle to the contact point	[m]
$E^*$	: equivalent Young's modulus	[Pa]	$R^*$	: equivalent radius	[m]
$F$	: Mises yield function	[-]	$Y$	: yield stress	[Pa]
$F_{cn}$	: normal contact force	[N]	$t$	: time	[s]
$F_{cn,d}$	: normal damping force	[N]	$v$	: particle velocity	[m/s]
$F_{ct}$	: tangential contact force	[N]	$\sigma_{ij}'$	: deviatoric stress	[Pa]
$F_{JKR}$	: JKR adhesion force	[N]	$\gamma$	: surface energy	[m <sup>2</sup> /s]
$g$	: gravity acceleration	[m/s <sup>2</sup> ]	$\mu_r$	: coefficient of rolling friction	[-]
$I$	: moment of inertia of particle	[kg·m <sup>2</sup> ]	$\omega$	: angular velocity	[rad/s]
$m_p$	: particle mass	[kg]			

#### References

- [1] C.-Y. Wu, DEM simulations of die filling during pharmaceutical tableting, *Particuology* 6 (2008) 412–418.
- [2] B. Yohannes, X. Liu, G. Yacobian, A. M. Cuitiño, Particle size induced heterogeneity in compacted powders: Effect of large particles, *Adv. Powder Technol.* 29 (2018) 2978–2986.
- [3] F. Gao, D. Stead, D. Elmo, Numerical simulation of microstructure of brittle rock using a grain-breakable distinct element grain-based model, *Computers and Geotechnics* 78 (2016) 203–217.
- [4] T. Yano, A. Oshiro, S. Ohsaki, H. Nakamura, S. Watano, A method for the tensile strength prediction of tablets with differing powder plasticities, *Chem. Pharm. Bull.* 72 (2024) 374–380.
- [5] S. Strege, A. Weuster, H. Zetzener, L. Brendel, A. Kwade, D. E. Wolf, Approach to structural anisotropy in compacted cohesive powder, *Granular Matter* 16 (2013) 401–409.
- [6] T. Yano, S. Ohsaki, H. Nakamura, S. Watano, Numerical study on compression processes of cohesive bimodal particles and their packing structure, *Adv. Powder Technol.* 32 (2021) 1362–1368.
- [7] L. H. Han, J. A. Elliott, A. C. Bentham, A. Mills, G. E. Amidon, B. C. Hancock, A modified Drucker-Prager Cap model for die compaction simulation of pharmaceutical powders, *Int. J. Solids. Struct.* 45 (2008) 3088–3106.
- [8] C. Y. Wu, O. M. Ruddy, A. C. Bentham, B. C. Hancock, S. M. Best, J. A. Elliott, Modelling the mechanical behaviour of pharmaceutical powders during compaction, *Powder Technol.* 152 (2005) 107–117.
- [9] R. Furukawa, Y. Chen, A. Horiguchi, K. Takagaki, J. Nishi, A. Konishi, Y. Shirakawa, M. Sugimoto, S. Narisawa,

- Numerical evaluation of the capping tendency of microcrystalline cellulose tablets during a diametrical compression test, *Int. J. Pharm.* 493 (2015) 182–191.
- [10] Y. Hayashi, S. Otaguro, T. Miura, Y. Onuki, Y. Obata, K. Takayama, Effect of process variables on the Drucker-Prager cap model and residual stress distribution of tablets estimated by the finite element method, *Chem. Pharm. Bull.* 62 (2014) 1062–1072.
- [11] S. Ohsaki, K. Kushida, Y. Matsuda, H. Nakamura, S. Watano, Numerical study for tableting process in consideration of compression speed, *Int. J. Pharm.* 575 (2020) 118936.
- [12] Q. Jia, X. An, H. Zhao, H. Fu, H. Zhang, X. Yang, Compaction and solid-state sintering of tungsten powders: MPFEM simulation and experimental verification, *J. Alloys and Compd.* 750 (2018) 341–349.
- [13] P. Loidolt, M. H. Ulz, J. Khinast, Modeling yield properties of compacted powder using a multi-particle finite element model with cohesive contacts, *Powder Technol.* 336 (2018) 426–440.
- [14] P. Loidolt, M. H. Ulz, J. Khinast, Prediction of the anisotropic mechanical properties of compacted powders, *Powder Technol.* 345 (2019) 589–600.
- [15] Y. He, Z. Wang, T. J. Evans, A. B. Yu, R. Y. Yang, DEM study of the mechanical strength of iron ore compacts, *Int. J. Miner. Process.* 142 (2015) 73–81.
- [16] C. L. Martin, D. Bouvard, Isostatic compaction of bimodal powder mixtures and composites, *Int. J. Mech. Sci.* 46 (2004) 907–927.
- [17] C. Shang, I. C. Sinka, J. Pan, Modelling of the break force of tablets under diametrical compression, *Int. J. Pharm.* 445 (2013) 99–107.
- [18] A. Misra, R. Sarikaya, Computational analysis of tensile damage and failure of mineralized tissue assisted with experimental observations, *Proc. Inst. Mech. Eng. H.* 234 (2020) 289–298.
- [19] M. Al-Sabbagh, P. Polak, R. J. Roberts, G. K. Reynolds, I. C. Sinka, Methodology to estimate the break force of pharmaceutical tablets with curved faces under diametrical compression, *Int. J. Pharm.* 554 (2019) 399–419.
- [20] V. Mazel, S. Guerard, B. Croquelois, J. B. Kopp, J. Girardot, H. Diarra, V. Busignies, P. Tchoreloff, Reevaluation of the diametral compression test for tablets using the flattened disc geometry, *Int. J. Pharm.* 513 (2016) 669–677.
- [21] R. L. Stewart, J. Bridgwater, Y. C. Zhou, A. B. Yu, Simulated and measured flow of granules in a bladed mixer—a detailed comparison, *Chem. Eng. Sci.* 56 (2001) 5457–5471.
- [22] M. Matsushita, S. Ohsaki, S. Nara, H. Nakamura, S. Watano, Effect of fill level in continuous twin-screw granulator: A combined experimental and simulation study, *Adv. Powder Technol.* 33 (2022) 103822.
- [23] A. E. R. Westman, H. R. Hugill, The packing of particles1, *J. Am. Ceram. Soc.* 13 (2006) 767–779.
- [24] Predication of packing and sintered density for bimodal powder mixtures, *Met. Powder Rep.* 48 (1993) 42–43.