

---

# Implementación de algoritmos de física granular con agentes robóticos móviles en la plataforma Robotat

---

Valerie Lorraine Sofía Valdez Trujillo



UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA

Facultad de Ingeniería



**Implementación de algoritmos de física granular con agentes  
robóticos móviles en la plataforma Robotat**

Trabajo de graduación presentado por Valerie Lorraine Sofía Valdez  
Trujillo para optar al grado académico de Licenciado en Ingeniería  
Mecatrónica

Guatemala,

2023

Vo.Bo.:

(f) \_\_\_\_\_  
Dr. Luis Alberto Rivera Estrada

Tribunal Examinador:

(f) \_\_\_\_\_  
Dr. Luis Alberto Rivera Estrada

(f) \_\_\_\_\_  
M.Sc. Miguel Enrique Zea Arenales

(f) \_\_\_\_\_  
Ing. Juan Pablo Rodas Martínez

Fecha de aprobación: Guatemala, 20 de enero de 2024.

---

## Prefacio

---

Quiero expresar mi profunda gratitud hacia mis padres, Mario Valdez y Ana María Trujillo, así como a mi hermano, Patrick Valdez, por el apoyo incondicional que me han brindado a lo largo de mi trayectoria académica. Han proporcionado herramientas y facilidades que han sido fundamentales para la realización de mis sueños. Sin su respaldo y cariño incondicional, alcanzar esta meta no habría sido posible, y por ello, les estoy enormemente agradecido.

Asimismo, deseo expresar mi sincero agradecimiento a mis amigos y compañeros de carrera por su apoyo y motivación. Son personas extraordinarias que han hecho que nuestro camino académico sea inolvidable. Nunca me negaron su respaldo y siempre me alentaron para dar lo mejor de mí en todo momento. Agradezco también a mis amigas del colegio y a los amigos que hice durante mi vida universitaria; su presencia y apoyo constante son invaluables. Son lo mejor.

Agradezco especialmente a mi asesor, el Dr. Luis Alberto Rivera Estrada, por permitirme llevar a cabo este trabajo de graduación bajo su valiosa supervisión. Su paciencia, disposición constante para brindarme ayuda y esfuerzo adicional para proporcionarme el mejor respaldo han sido fundamentales. Finalmente, mi agradecimiento se extiende a todos los profesores que me han extendido su mano y no han dudado en respaldarme con sus conocimientos. Su apoyo ha sido crucial no solo para la realización de este trabajo de graduación, sino también para abordar cualquier materia con confianza y éxito.

<b>Prefacio</b>	<b>III</b>
<b>Lista de figuras</b>	<b>VIII</b>
<b>Resumen</b>	<b>IX</b>
<b>Abstract</b>	<b>X</b>
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
<b>2. Antecedentes</b>	<b>3</b>
2.1. Física granular . . . . .	3
2.1.1. Algoritmos de física granular . . . . .	4
2.2. Robotat . . . . .	4
2.3. Algoritmos de enjambre . . . . .	5
<b>3. Justificación</b>	<b>7</b>
<b>4. Objetivos</b>	<b>8</b>
<b>5. Alcance</b>	<b>9</b>
<b>6. Marco teórico</b>	<b>11</b>
6.1. Comportamiento colectivo de partículas . . . . .	11
6.2. Dinámica granular computacional . . . . .	12
6.2.1. Dinámica molecular . . . . .	12
6.2.2. Algoritmo de Verlet . . . . .	16
6.2.3. Potencial de Lennard-Jones (LJP) . . . . .	17
6.2.4. Dinámica del cuerpo rígido (DCR) . . . . .	18
6.2.5. Partículas de bordes afilados compuestas por triángulos . . . . .	19
6.2.6. Simulación directa: Monte Carlo (DSMC) . . . . .	20
6.2.7. Modelo de Elementos Discretos (DEM) . . . . .	22
6.2.8. Método de Elementos Finitos (FEM) . . . . .	22
6.2.9. Características destacadas de cada algoritmo . . . . .	23

6.3.	Problema de cola fantasma . . . . .	26
6.3.1.	Control bilateral . . . . .	27
6.4.	Agentes robóticos móviles . . . . .	28
6.4.1.	Agentes Pololu 3Pi+ 32u4 OLED . . . . .	28
6.4.2.	Robot AlphaBot2 . . . . .	29
6.5.	OptiTrack . . . . .	29
6.6.	Controlador PID . . . . .	30
<b>7.</b>	<b>Simulaciones computarizadas de los algoritmos de física granular</b>	<b>32</b>
7.1.	Dinámica molecular . . . . .	33
7.1.1.	Simulaciones preliminares: tiro parabólico . . . . .	34
7.1.2.	Simulaciones preliminares: órbitas . . . . .	37
7.1.3.	Dinámica molecular en un sistema (2D) de partículas bajo la influencia del potencial de Lennard-Jones . . . . .	41
7.1.4.	Efectos del potencial de Lennard-Jones en 2 partículas . . . . .	43
7.1.5.	Simulación de 8 partículas 2D . . . . .	45
7.1.6.	Simulación de 8 partículas 3D . . . . .	46
<b>8.</b>	<b>Pruebas físicas de los algoritmos de física granular</b>	<b>51</b>
8.1.	Pruebas de validación Alphabot2 . . . . .	51
8.2.	Pruebas de validación del algoritmo de Dinámica Molecular . . . . .	53
8.2.1.	Suavizado de las trayectorias . . . . .	58
8.2.2.	Cantidad de puntos por trayectoria . . . . .	60
8.2.3.	Pruebas de validación con más agentes robóticos móviles . . . . .	67
<b>9.</b>	<b>Aplicaciones de la Dinámica Molecular</b>	<b>72</b>
9.1.	Fenómeno de cola fantasma en simulaciones computarizadas . . . . .	73
9.2.	Tránsito fantasma . . . . .	79
<b>10.</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>86</b>
<b>11.</b>	<b>Recomendaciones</b>	<b>88</b>
<b>12.</b>	<b>Bibliografía</b>	<b>89</b>
<b>13.</b>	<b>Anexos</b>	<b>92</b>
<b>14.</b>	<b>Glosario</b>	<b>93</b>

---

## Lista de figuras

---

1.	Ecosistema Robotat con cámaras de detección de movimiento OptiTrack. . . . .	5
2.	Círculo de prueba para la implementación de marcadores para reconocimiento de movimiento ArUco [7]. . . . .	6
3.	Diagrama del funcionamiento del algoritmo de dinámica molecular [13]. . . . .	15
4.	Comportamiento del potencial de Lennard-Jones [16]. . . . .	18
5.	Partículas de bordes afilados compuestas por diferentes cantidades de triángulos [13]. . . . .	20
6.	Simulación de un gas granular utilizando el DSMC [13]. . . . .	21
7.	Representación del tránsito fantasma: reducción repentina de velocidad por parte del vehículo verde [22]. . . . .	26
8.	Representación del tránsito fantasma: efecto en el comportamiento de los demás vehículos [22]. . . . .	26
9.	Agente Pololu 3Pi+ 32u4 [27]. . . . .	28
10.	Robot Alphabot2 [29]. . . . .	29
11.	Cámaras de alta resolución utilizadas en el sistema de seguimiento completo OptiTrack [31]. . . . .	30
12.	Tiro parabólico utilizando dinámica molecular. . . . .	35
13.	Tiro parabólico después de 15 pasos. . . . .	36
14.	Tiro parabólico después de 65 pasos. . . . .	36
15.	Tiro parabólico después de 100 pasos. . . . .	36
16.	Partícula dinámica orbita una estática utilizando dinámica molecular. . . . .	38
17.	Una partícula en estado dinámico orbitando alrededor de una estática. . . . .	39
18.	Partícula fuera de órbita. . . . .	39
19.	Tres partículas en estado dinámico orbitando alrededor de una estática luego de 7 pasos. . . . .	40
20.	Tres partículas en estado dinámico orbitando alrededor de una estática luego de 50 pasos. . . . .	40
21.	Tres partículas en estado dinámico orbitando alrededor de una estática luego de 150 pasos. . . . .	41
22.	Pseudocódigo del algoritmo de física granular: Dinámica Molecular. . . . .	42
23.	Distancia inicial entre las dos partículas. . . . .	43

24. Distancia de equilibrio del LJP para $\varepsilon$ y $\sigma$ equivalentes a 1. . . . .	44
25. Distancia de repulsión . . . . .	44
26. Distancia de equilibrio del LJP para $\varepsilon$ y $\sigma$ equivalentes a 1. . . . .	45
27. Dinámica molecular implementada a 8 partículas en un espacio bidimensional. . . . .	46
28. Dinámica molecular implementada a 8 partículas en un espacio tridimensional con vista isométrica. . . . .	47
29. Dinámica molecular implementada a 8 partículas en un espacio tridimensional con vista frontal. . . . .	47
30. Simulación de 100 partículas colocadas en distancias equidistantes. . . . .	48
31. Vista frontal de la simulación dinámica de 100 partículas distribuidas de forma arbitraria. . . . .	49
32. Vista isométrica de la simulación dinámica de 100 partículas distribuidas de forma arbitraria. . . . .	49
33. Agrupaciones iniciales en la simulación dinámica de 100 partículas distribuidas de forma arbitraria. . . . .	50
34. Simulación dinámica con el efecto del LJP para 100 partículas luego de 25 s. .	50
35. Despliegue de valores máximos y mínimos de los sensores infrarrojos. . . . .	52
36. Recreación de pruebas de seguimiento de línea con robot AlphaBot2. . . . .	53
37. Trayectoria computarizada (línea azul) y trayectoria seguida por el agente robótico (línea punteada). . . . .	54
38. Trayectoria computarizada y trayectoria seguida por el agente robótico luego de realizar el tuneo de las constantes. . . . .	55
39. Trayectoria computarizada y trayectoria seguida por el agente robótico a un ángulo de 54°. . . . .	56
40. Trayectoria computarizada y trayectoria seguida por el agente robótico a un ángulo de 64° aproximadamente. . . . .	56
41. Trayectoria computarizada y trayectoria seguida por el agente robótico a un ángulo de 80°. . . . .	57
42. Trayectoria computarizada y trayectoria seguida por el agente robótico a un ángulo de 103°. . . . .	57
43. Trayectoria computarizada y trayectoria seguida por el agente robótico a un ángulo de 136°. . . . .	58
44. Suavizado en la trayectoria . . . . .	59
45. Curva más suavizada para el recorrido del Pololu. . . . .	60
46. Trayectoria con 375 puntos. . . . .	61
47. ECM de cada punto de la trayectoria. . . . .	62
48. Trayectoria con 600 puntos. . . . .	62
49. ECM de cada punto de la trayectoria de 600 puntos. . . . .	63
50. Trayectoria con 1000 puntos. . . . .	64
51. ECM de cada punto de la trayectoria de 1000 puntos. . . . .	64
52. Trayectoria con 1500 puntos. . . . .	65
53. ECM de cada punto de la trayectoria de 1500 puntos. . . . .	66
54. Error cuadrático medio contra cantidad de puntos utilizados para generar la trayectoria. . . . .	66
55. Velocidad promedio contra cantidad de puntos utilizados para generar la trayectoria. . . . .	67
56. Dinámica molecular con dos agentes robóticos en un espacio reducido. . . . .	68

57.	Dinámica molecular con dos agentes robóticos. . . . .	69
58.	Dinámica molecular con tres agentes robóticos móviles. . . . .	70
59.	Tres Pololus utilizando el algoritmo de física granular. . . . .	70
60.	Comportamiento de las partículas al inicio de la simulación. . . . .	73
61.	Comportamiento de las partículas luego de 20 pasos de tiempo. . . . .	74
62.	Comportamiento de las partículas luego de 55 pasos de tiempo. . . . .	74
63.	Comportamiento de las partículas al inicio de la simulación. . . . .	75
64.	Comportamiento de las partículas luego de 20 pasos de tiempo. . . . .	75
65.	Comportamiento de las partículas luego de 55 pasos de tiempo. . . . .	75
66.	Comportamiento de las partículas luego de 2 pasos de tiempo. . . . .	76
67.	Comportamiento de las partículas luego de 30 pasos de tiempo. . . . .	76
68.	Comportamiento de las partículas luego de 200 pasos de tiempo. . . . .	77
69.	Comportamiento de las partículas luego de 2 pasos de tiempo. . . . .	78
70.	Comportamiento de las partículas luego de 20 pasos de tiempo. . . . .	78
71.	Comportamiento de las partículas luego de 70 pasos de tiempo. . . . .	79
72.	Comportamiento del sistema luego de 10 pasos de tiempo. . . . .	80
73.	Comportamiento del sistema luego de 50 pasos de tiempo. . . . .	80
74.	Comportamiento del sistema luego de 90 pasos de tiempo. . . . .	80
75.	Comportamiento del sistema luego de 10 pasos de tiempo. . . . .	81
76.	Comportamiento del sistema luego de 70 pasos de tiempo. . . . .	81
77.	Comportamiento del sistema luego de 155 pasos de tiempo. . . . .	82
78.	Comportamiento del sistema luego de 30 pasos de tiempo. . . . .	82
79.	Comportamiento del sistema luego de 63 pasos de tiempo. . . . .	83
80.	Comportamiento del sistema luego de 110 pasos de tiempo. . . . .	83
81.	Comportamiento del sistema luego de 180 pasos de tiempo. . . . .	84
82.	Comportamiento final del sistema al presenciar una desaceleración brusca durante 3 pasos de tiempo. . . . .	84
83.	Comportamiento del sistema al presenciar una desaceleración brusca durante 5 pasos de tiempo. . . . .	85

---

## Resumen

---

Este trabajo de graduación se enfoca en la investigación y aplicación de algoritmos de física granular en el contexto de la robótica móvil, utilizando la plataforma Robotat. Los algoritmos de física granular son herramientas numéricas esenciales para simular sistemas granulares, como materiales en polvo o granos, permitiendo la modelización de interacciones a nivel microscópico y la predicción del comportamiento del sistema. El objetivo principal de este estudio es evaluar y implementar algoritmos de física granular en agentes robóticos móviles, específicamente en los robots Pololu 3Pi+ 32u4 OLED en la plataforma Robotat. Este proceso se llevó a cabo en cuatro etapas interconectadas: primero, se investigaron y analizaron modelos y algoritmos de física granular; luego, se realizaron simulaciones computarizadas para evaluar el rendimiento de estos algoritmos; luego, se llevó a cabo una validación de resultados mediante experimentación física y por último se compararon estos resultados con los obtenidos computacionalmente.

El logro de estos objetivos no solo aporta con conocimientos en el campo de la física granular y la robótica móvil, sino que también permitió abordar problemas del mundo real, como el fenómeno de la cola fantasma enfocado en el tránsito vehicular. Este enfoque tiene un potencial significativo para mejorar la seguridad y la eficiencia en una variedad de aplicaciones cotidianas y destaca la relevancia de esta investigación en la resolución de desafíos prácticos.

---

## Abstract

---

This graduation work focuses on the research and application of granular physics algorithms in the context of mobile robotics, using the Robotat platform. Granular physics algorithms are essential numerical tools for simulating granular systems, such as powder materials or grains, allowing the modeling of interactions at the microscopic level and the prediction of system behavior. The main objective of this study is to evaluate and implement granular physics algorithms on mobile robotic agents, specifically on the Pololu 3Pi+ 32u4 OLED robots on the Robotat platform. This process was carried out in three interconnected stages: first, granular physics models and algorithms were investigated and analyzed; then, computer simulations were performed to evaluate the performance of these algorithms; Finally, a validation of results was carried out through physical experimentation.

The achieving of these objectives not only provides valuable insights into the field of granular physics and mobile robotics, but also allowed to address real-world problems such as the phenomenon of the phantom queue focusing on vehicular traffic. This approach has significant potential to improve safety and efficiency in a variety of everyday applications and highlights the relevance of this research in solving practical challenges.

# CAPÍTULO 1

---

## Introducción

---

En la investigación en física granular y el campo de la robótica, la interacción entre partículas sólidas y agentes robóticos móviles representa un desafío interesante y de gran relevancia. En esta época marcada por avances tecnológicos rápidos y significativos así como una creciente automatización, la fusión de la robótica y la física granular se presenta como un campo de investigación prometedor, con el potencial de transformar numerosos sectores como la industria. Este trabajo de tesis se centró en el objetivo de evaluar e implementar algoritmos de física granular en la plataforma Robotat, un laboratorio innovador que ofrece oportunidades únicas para la experimentación en robótica.

El propósito fundamental de esta investigación es abordar de manera sistemática el desafío de la física granular mediante un enfoque en cuatro etapas interconectadas y complementarias. Primero, se llevó a cabo una rigurosa investigación de modelos y algoritmos de física granular, con un énfasis en sus aplicaciones potenciales, en donde se recabó información de seis distintos. Posterior, se implementó computacionalmente el algoritmo de Dinámica Molecular, lo que permitió analizar el comportamiento de 2 hasta 100 partículas en un entorno controlado y permitió observar que las partículas tienden a agruparse como resultado de las interacciones del potencial de Lennard-Jones y la naturaleza estadística de las colisiones en un sistema con muchas partículas. Adicionalmente, se trascendió y la simulación computarizada se validó en un entorno físico real y finalmente, se compararon los resultados.

Para la parte de validación del algoritmo de forma física, se aprovechó la plataforma Robotat, que facilitó la experimentación con agentes robóticos móviles en escenarios de física granular. Con esto, se evaluó y comparó el rendimiento obtenido en las pruebas físicas y se obtuvo que al incrementar la cantidad de puntos que componen una trayectoria, de 375 a 1500, mejoró la precisión del seguimiento de la trayectoria por parte del robot Pololu en un 84.15 % para las coordenadas en *X* y un 86.34 % para las coordenadas en *Y*.

La interacción entre simulaciones computarizadas y experimentación física proporciona una base sólida para el análisis crítico y la mejora continua de estos algoritmos, lo que contribuye significativamente al avance del conocimiento en el campo de la robótica y la

física granular. Cabe mencionar que este trabajo de graduación representa un acercamiento hacia la comprensión más profunda de la dinámica de la física granular y su aplicación en el contexto de la robótica móvil, con el objetivo de impulsar futuros desarrollos tecnológicos y científicos en esta área de investigación en rápida evolución. Además, se busca extender el alcance de esta investigación para abordar problemas del mundo real que involucran la interacción de partículas sólidas, como el fenómeno de la cola fantasma en sistemas de transporte en donde se evidenció que la implementación de la Dinámica Molecular, proporcionó avances en la resolución del problema de la cola fantasma. Al utilizar el potencial de Lennard-Jones, las partículas logran estabilizarse a la distancia de equilibrio,  $r$ , permitiendo que continúen su trayectoria de manera constante.

# CAPÍTULO 2

---

## Antecedentes

---

### 2.1. Física granular

La física granular es una rama de la física que se enfoca en el estudio de materiales como arena, polvo, granos, entre otros. Estos muestran una variedad de comportamientos complejos y no lineales, a menudo impulsados por la interacción entre las partículas, que difieren en muchas maneras de otras sustancias. En determinadas situaciones, la conducta de los medios granulares exhibe similitudes con la de un sólido, mientras que en otras se asemeja a la de un líquido e, incluso, a la de un gas. Al igual que los líquidos, estos materiales fluyen y adoptan la forma del recipiente que los contiene. No obstante, a diferencia de la presión hidrostática, la presión en la base de un recipiente con una carga suficientemente alta es independiente de la altura alcanzada por los granos, ya que el peso de estos se redistribuye hacia las paredes del recipiente a través de la red de contactos.

Por otro lado, cuando el material presenta una baja densidad, su flujo está influenciado por las colisiones entre los granos, dando lugar a un comportamiento similar al de un gas. Finalmente, los granos confinados en un recipiente pueden formar estructuras compactas extremadamente estables, como arcos o bóvedas, capaces de soportar cargas significativas y de encerrar espacios sin granos, generando un comportamiento similar al de un sólido [1]. Esta complejidad hace que no sea fácil clasificarlos específicamente, y su comportamiento inusual ha dado lugar a una serie de nuevas teorías y a una nueva era de experimentación en sistemas granulares.

El propósito fundamental de esta rama de investigación es comprender los comportamientos emergentes y complejos que surgen en sistemas compuestos por una gran cantidad de partículas sólidas que interactúan entre sí [2]. Un ejemplo ilustrativo de este tipo de comportamientos es el de un enjambre de insectos, donde las acciones individuales de cada miembro pueden dar lugar a patrones y comportamientos colectivos que no son evidentes al observar a cada individuo de forma aislada. Algunos de los fenómenos estudiados en la física granular abarcan el flujo de granos, la congestión y el flujo granular denso, el colapso de pilas de granos, las propiedades mecánicas, el colapso de pilas de granos, entre otros.

### **2.1.1. Algoritmos de física granular**

Los algoritmos de física granular son métodos numéricos utilizados para simular el comportamiento de sistemas granulares. En general, modelan la interacción entre partículas individuales, lo que permite simular la dinámica del sistema a nivel microscópico con el fin de predecir su comportamiento [3]. Esta simulación puede ser de utilidad para optimizar el diseño y operación de sistemas industriales o para comprender procesos que involucren materiales granulares. No obstante, estos algoritmos también pueden ser utilizados en la simulación de sistemas granulares en estado estacionario, cuando las partículas del sistema han alcanzado un estado de equilibrio dinámico. De esta manera, se puede simular el comportamiento de partículas individuales en respuesta a fuerzas internas y externas, como la gravedad, la fricción, la cohesión y la elasticidad. Existen diferentes tipos de algoritmos de física granular, que utilizan diferentes modelos matemáticos para representar la interacción entre partículas. Algunos incluyen el método de elementos discretos, el método de partículas suaves y el método de redes de resortes [4].

Estos algoritmos tienen diversas aplicaciones, y una de ellas es resolver problemas como el de la cola fantasma. Este fenómeno se produce cuando objetos, robots o seres vivos que interactúan con materiales granulares dejan una “huella” o “cola” detrás de ellos, lo que puede alterar el comportamiento del material en el futuro. Un ejemplo de esto es un atasco de tránsito fantasma, que describe el resultado de una fila de vehículos que surge sin la presencia de un accidente u obstáculo en la carretera [5]. En teoría, si todos los conductores en la carretera mantuvieran la misma distancia entre carros y una velocidad constante, el tránsito fluiría sin problemas y sin interrupciones. No obstante, debido a errores humanos y reacciones tardías, incluso una pequeña perturbación puede desencadenar una reacción y resultar en una carretera congestionada.

## **2.2. Robotat**

En las instalaciones de la Universidad del Valle de Guatemala, se encuentra un laboratorio que alberga de un sistema de experimentación en el campo de robótica conocido como Robotat, el cual se ilustra en la Figura 1. Este laboratorio se inspira en el concepto del Robotarium desarrollado en el Instituto de Tecnología de Georgia, en Estados Unidos [6]. El Robotat está constituido por una plataforma de acero color blanco con dimensiones de  $4.8 \times 3.8$  m, que se encuentra rodeada por el sistema OptiTrack. Este sistema está compuesto por seis cámaras de captura de movimiento de alta precisión y baja latencia, lo que permite realizar seguimientos de movimiento en tiempo real. Estas cámaras son gestionadas por una computadora central. Cabe mencionar que este laboratorio ha sido utilizado para ejecutar pruebas de validación de distintos algoritmos, incluyendo sistemas de enjambre de robots. Además, cumple una función educativa importante, ya que brinda a los estudiantes de ingeniería mecatrónica la oportunidad de acceder y utilizar robots reales para sus proyectos académicos y actividades de aprendizaje práctico en el campo de la robótica.

El sistema OptiTrack utiliza piezas de plástico reflectivas conocidas como “marcadores”. En consecuencia a esta propiedad, los marcadores reflejan la luz infrarroja emitida por las cámaras Optitrack permitiendo su detección por parte del sistema. Estos marcadores pueden

adherirse y se utilizan para rastrear y registrar con precisión la posición y el movimiento de objetos o sujetos en un espacio tridimensional. Este conjunto se integra en una red inalámbrica WiFi a través de la cual los robots se comunican. Además, dentro del equipo de cómputo que administra el sistema de cámaras, se dispone de un código fuente para ejecutar un servidor que responda a solicitudes sobre la ubicación y características de los marcadores de prueba [7].



Figura 1: Ecosistema Robotat con cámaras de detección de movimiento OptiTrack.

### 2.3. Algoritmos de enjambre

Previamente, en la Universidad del Valle de Guatemala, se ha trabajado con diferentes agentes robóticos móviles, con el fin de implementar algoritmos de inteligencia computacional y robótica de enjambre con comportamientos emergentes que se basan en la interacción local entre los robots y no requieren un sistema centralizado para tomar decisiones. Esto los hace más robustos y escalables en comparación con los sistemas centralizados. En consecuencia, son muy útiles en aplicaciones de robótica de enjambre en tiempo real. Algunos algoritmos implementados han sido el *Ant Colony Optimization* (ACO) que está basado en el comportamiento de las hormigas y es utilizado como una técnica probabilística para encontrar caminos óptimos entre dos puntos. En un principio, se utilizó para resolver el problema del viajante de comercio. Este pretende determinar la trayectoria mínima que un comerciante debe seguir tiene para visitar  $n$  cantidad de ciudades intermedias partiendo del mismo origen y teniendo un mismo destino. Posteriormente, se utilizó para resolver diferentes problemas de optimización de alta dificultad [8].

También, se ha utilizado el algoritmo *Particle Swarm Optimization* (PSO), basado en el comportamiento de un enjambre de partículas que se desplazan hacia una solución óptima en un espacio de búsqueda. Los robots en un enjambre utilizan la información de los vecinos para ajustar su movimiento, permitiéndoles encontrar soluciones óptimas en conjunto y está

diseñado para partículas sin masa ni dimensiones físicas [9]. Incluso, Aldo Aguilar, graduado de Ingería Electrónica de la Universidad del Valle de Guatemala, diseñó el Algoritmo modificado de optimización de enjambre de partículas (MPSO) [10]. Este algoritmo debía tomar en cuenta las restricciones derivadas de las ecuaciones cinemáticas de robots diferenciales y dimensiones limitadas del espacio de búsqueda. El MPSO incluye un planeador de trayectorias que utiliza el PSO clásico ajustado con múltiples parámetros optimizados para robots diferenciales. Estos parámetros que fueron configurados por medio de simulaciones de enjambres de 200 partículas en MATLAB evaluadas en diversas funciones de costo. Las modificaciones realizadas al algoritmo clásico de PSO surgieron a causa de la necesidad de implementar dicho algoritmo de búsqueda a robots que no se comportaban como partículas, sino que se veían limitados por sus características físicas (dimensiones y limitaciones de movimiento).

En 2022, se llevó a cabo un proyecto de cooperación entre la Universidad del Valle de Guatemala y la Universidad de Navarro, España. El objetivo del proyecto era utilizar robots *Alphabot 2* para realizar pruebas de ejecución y validación de algoritmos de física granular estudiados por el Licenciado Juan Diego Robles. Por lo tanto, se construyó un sistema robótico que incluía una cámara de vídeo con brazo móvil articulado. La finalidad de este sistema era verificar la funcionalidad de la plataforma robótica *Alphabot 2* así como su capacidad de ejecutar tareas relacionadas al seguimiento de líneas pintadas en el suelo. Para ello, se diseñó un circuito de prueba, como se evidencia en la Figura 2, en el cual se evaluaron tres agentes que portaban un código identificador ArUco. Este código permitía utilizar herramientas de software para marcar el movimiento relativo de objetos y extraer datos relacionados a velocidades, orientaciones relativas, entre otros [11].



Figura 2: Circuito de prueba para la implementación de marcadores para reconocimiento de movimiento ArUco [7].

## CAPÍTULO 3

---

### Justificación

---

Como se mencionó anteriormente, se han realizado pruebas con plataformas y se han implementado diversos algoritmos de inteligencia computacional y robótica de enjambre con comportamientos emergentes. No obstante, las pruebas de ejecución y validación de algoritmos de física granular realizadas en el año 2022 fueron limitadas. Por lo tanto, se desea realizar más pruebas utilizando los agentes robóticos *Alphabot 2* y Pololu 3Pi+ 32u4 OLED para validar algoritmos y explorar diferentes escenarios en sistemas físicos y ambientes reales tales como el tránsito fantasma y la evacuación de las personas de una habitación en una emergencia.

Esta implementación y validación de los algoritmos en los agentes robóticos permitió incursionar en problemas como el de cola fantasma y abrió campo para la comprensión del comportamiento de agentes y seres al momento de evacuar una habitación. Asimismo, amplió las aplicaciones y usos potenciales que del Robotat.

# CAPÍTULO 4

---

## Objetivos

---

### Objetivo General

Evaluar e implementar algoritmos de física granular con agentes robóticos móviles en la plataforma Robotat.

### Objetivos Específicos

- Investigar modelos y algoritmos de física granular y sus aplicaciones.
- Evaluar los algoritmos de física granular por medio de simulaciones computarizadas.
- Validar los algoritmos desarrollados mediante experimentación con agentes robóticos móviles físicos en la plataforma Robotat.
- Evaluar el rendimiento obtenido en las pruebas de ejecución contra el esperado según las simulaciones realizadas.

## CAPÍTULO 5

---

### Alcance

---

Con la construcción de un nuevo edificio en la Universidad del Valle de Guatemala, se abrieron nuevas oportunidades para la experimentación. Entre estas, se destacó la creación de un entorno dedicado a proyectos de robótica que incluye una red inalámbrica habilitada con un sistema de cámaras de captura de movimiento conocido como OptiTrack. Esta iniciativa permitió la realización de pruebas que involucraron la integración de sistemas físicos y fomentaron la colaboración interinstitucional para llevar a cabo pruebas de validación de agentes robóticos móviles.

Estas pruebas abrieron la puerta a la implementación de algoritmos de física granular y a la exploración de problemas como el de la cola fantasma. Es así que se investigaron distintos algoritmos de física granular y se decidió incursionar con un algoritmo, este es Dinámica Molecular. Para esto, se llevaron a cabo múltiples simulaciones en las que se varió la cantidad de partículas desde un número mínimo de 2 hasta un máximo de 100 partículas, con el fin de identificar patrones de comportamiento específicos o tendencias en el sistema en general. Es importante destacar que, en estas simulaciones computarizadas, no se varió la cantidad de partículas más allá de 100, ya que el enfoque principal de este trabajo es comparar y validar estos resultados obtenidos en pruebas físicas.

En relación con la exploración del problema de la cola fantasma, se analizaron varios casos. En estos se incluye desde el estudio de una fila compuesta por 4 partículas, hasta la evaluación de cómo la velocidad inicial afecta la estabilización de todo el sistema. También se llevaron a cabo análisis más complejos, como el estudio de cuatro filas, cada una con 5 partículas, que experimentaron una desaceleración súbita de una de las partículas dentro de cada fila.

Por último, las pruebas físicas se restringieron al espacio de la plataforma Robotat que tiene una dimensión de  $4.8 \times 3.8$  m, y se validó la implementación del algoritmo de dinámica molecular en tres agentes robóticos móviles Pololu 3pi+ 32u4 OLED. A pesar de no utilizar más cantidad de agentes robóticos móviles debido a limitaciones de tiempo y uso de la plataforma y el servidor, los resultados obtenidos enriquecen significativamente la base de conocimientos disponible para la comunidad académica y profesional en el área de robótica.

y física granular, promoviendo la investigación y la colaboración interinstitucional en este campo de estudio.

# CAPÍTULO 6

---

## Marco teórico

---

### 6.1. Comportamiento colectivo de partículas

El comportamiento colectivo en la física granular se refiere al estudio de cómo un gran número de partículas sólidas interactúan y se organizan en un sistema, lo que conduce a la emergencia de patrones y fenómenos colectivos que no son evidentes cuando se observa una sola partícula de manera aislada. Este campo de estudio es similar en muchos aspectos a la física de sistemas complejos, donde se investiga cómo las interacciones entre múltiples componentes simples pueden dar lugar a comportamientos globales interesantes. El estudio del comportamiento colectivo en la física granular es relevante en una variedad de campos, incluyendo la geología (para comprender la formación de estructuras en suelos granulares), la industria de la manipulación de materiales a granel (para mejorar la eficiencia de transporte y procesamiento), y la física fundamental (para comprender las propiedades emergentes en sistemas granulares fuera del equilibrio) [12]. Algunas características principales del comportamiento colectivo en la física granular son:

1. Formación de patrones: En sistemas granulares, las partículas tienen la capacidad de auto-organizarse en patrones o estructuras específicas. Por ejemplo, en un sistema de partículas sometidas a vibración, las partículas pueden formar patrones ondulatorios o hexagonales. La formación de estos patrones puede atribuirse a interacciones atractivas o repulsivas entre las partículas, siendo de particular interés en investigaciones de materiales granulares y geología.
2. Flujo y congestión: En sistemas granulares densos, las partículas pueden exhibir comportamientos colectivos sorprendentes durante el flujo y la congestión. Por ejemplo, en una corriente de partículas, puede ocurrir la “fase de flujo” en la que las partículas se mueven libremente, seguida de una “fase de congestión” en la que se forman atascos o estructuras de arcos debido a interacciones mutuas.
3. Segregación y mezcla: Las partículas en sistemas granulares pueden separarse o mezclarse debido a diferencias en tamaño, densidad o propiedades. Este fenómeno de

segregación y mezcla es fundamental en aplicaciones de mezclado de materiales y tamizado.

4. Transiciones de fase: Los sistemas granulares pueden experimentar transiciones de fase que resultan en cambios drásticos en su comportamiento colectivo. Un ejemplo es la transición de un sistema de partículas granulares de un estado fluido a un estado sólido cuando se somete a vibraciones controladas.
5. Comportamiento fuera del equilibrio: Muchos sistemas granulares están lejos del equilibrio termodinámico y, por lo tanto, pueden exhibir comportamientos colectivos dinámicos y no lineales. Esto incluye fenómenos como oscilaciones de densidad y fluctuaciones de velocidad en sistemas granulares vibrantes.

## 6.2. Dinámica granular computacional

Las simulaciones computacionales juegan un papel fundamental en la investigación teórica de materiales granulares. Esto se debe a la ausencia de una teoría integral que prevea con precisión el comportamiento de estos materiales en dispositivos técnicos. Asimismo, los experimentos con dispositivos de ingeniería suelen ser costosos en recursos económicos y tiempo, e incluso pueden ser peligrosos. En este contexto, las simulaciones numéricas surgen como una herramienta valiosa para complementar y, en cierta medida, sustituir los experimentos. Su capacidad de predecir y optimizar el rendimiento de la maquinaria en tecnología de polvos resulta especialmente útil antes de la construcción real del dispositivo.

Por lo tanto, la dinámica granular computacional se enfoca en la física granular para realizar simulaciones por computadora para estudiar y modelar el comportamiento de sistemas granulares. Cuando se presentan sistemas granulares complejos que involucran grandes cantidades de partículas con interacciones complejas de describir analíticamente, es conveniente utilizar esta técnica. En ella se utilizan algoritmos de simulación y métodos numéricos, basados en principios físicos fundamentales como las leyes de la mecánica newtoniana y las fuerzas de contacto entre partículas, para modelar el movimiento y las interacciones entre materiales granulares [13].

La dinámica molecular computacional permite predecir el comportamiento de sistemas granulares en diferentes condiciones incluyendo la congestión, el flujo, la segregación y la formación de patrones. También permiten comprender los fenómenos fundamentales en la física granular como el comportamiento fuera de equilibrio, las propiedades emergentes de grupos de partículas y la transición de fase de sistemas granulares. Asimismo, estas simulaciones se pueden comparar para validarse con resultados experimentales, en situaciones controladas, para garantizar que los modelos computacionales representan precisamente los comportamientos de los sistemas granulares reales.

### 6.2.1. Dinámica molecular

La dinámica molecular (DM) es un método determinístico, lo que significa que, a partir de los valores de los parámetros iniciales, es capaz de predecir el estado futuro de un sis-

tema en un momento dado. Este enfoque permite la simulación de sistemas de partículas en situaciones tanto dinámicas como estáticas, incluyendo casos de contacto entre múltiples partículas. Es así que se puede utilizar para estudiar el comportamiento de átomos y moléculas en sistemas a nivel molecular y atómico, para comprender y predecir el comportamiento de materiales y sistemas químicos en escalas de tiempo y longitud que no son fácilmente accesibles mediante experimentos de laboratorio o para simular, en cortos períodos de tiempo, un sistema de billones de partículas. Este tiene muchas aplicaciones, no obstante al momento de desarrollarse, la DM tenía el fin de realizar únicamente simulaciones numéricas de gases moleculares y líquidos para comprender sus comportamientos.

Cabe mencionar que la interacción de estas partículas es considerada peculiar, en consecuencia a que estas ejercen fuerzas entre sí solo cuando están en contacto mecánico. Sin embargo, dado que las partículas granulares son rígidas, su fuerza de interacción repulsiva incrementa con la compresión una vez que las partículas se encuentran muy cercanas entre sí. Para obtener resultados fiables, la dureza de las partículas granulares requiere un tiempo de integración pequeño para el cálculo de trayectorias, por lo que se obtiene un método de simulación computacionalmente costoso [13].

En DM, se modelan las partículas en un sistema como puntos en el espacio. Cada partícula tiene propiedades como masa, carga y posición inicial. El objetivo es calcular la trayectoria de cada partícula que compone un material granular mediante la integración numérica en función del tiempo de las ecuaciones de movimiento de Newton. Estas ecuaciones se resuelven numéricamente mediante métodos de integración, como el algoritmo de Verlet, para predecir la posición y velocidad de las partículas en incrementos de tiempo sucesivos. Adicionalmente, en este algoritmo se consideran las interacciones entre las partículas las cuales se describen utilizando potenciales de energía, como el potencial de Lennard-Jones para las interacciones de Van der Waals y potenciales electrostáticos para las interacciones electrostáticas.

En consecuencia a utilizar una solución numérica intensiva en tiempo, la aplicación de la DM se encuentra limitada a un tamaño de sistema relativamente pequeño. No obstante, bajo ciertas condiciones iniciales, la DM puede simplificarse. Esto ocurre cuando, en cada instante de tiempo, ninguna de las partículas está en contacto mecánico con más de una otra partícula. Como resultado, un sistema de muchas partículas puede reducirse al estudio de pares de partículas. Esta suposición es válida si el lapso entre dos colisiones sucesivas de una partícula es, en promedio, significativamente mayor que la duración de una colisión [13]. Para el caso de contactos multipartículas, se requiere conocer las fuerzas ( $F$ ) y los torques ( $M$ ) que actúan entre las partículas en contacto como funciones de las posiciones de las partículas, sus velocidades, su orientación angular y sus velocidades angulares. Matemáticamente se refiere a  $F_{ij}(r_i, r_j, v_i, v_j, \phi_i, \phi_j, \omega_i, \omega_j)$  y  $M(r_i, r_j, v_i, v_j, \phi_i, \phi_j, \omega_i, \omega_j)$ .

Para aplicar la DM, se deben hacer ciertas suposiciones sobre las fuerzas de interacción de las partículas en contacto. En algunos casos, las fuerzas (como funciones de la partícula posiciones y velocidades) tienen que determinarse con un enfoque empírico, de tal manera que el los resultados de la simulación concuerden lo más posible con el experimento. Asimismo, las simulaciones de DM siempre se basan en la evaluación de fuerzas de interacción. Por lo tanto, es adecuado para simular partículas perfectamente rígidas sin la necesidad de especificar una cierta ley de fuerza-deformación, únicamente con el potencial para describir la interacción entre partículas

Por otro lado, los materiales granulares consisten de un gran número de partículas cuyo tamaño varía desde micrómetros a centímetros. Estas partículas interactúan a través de fuerzas de corto alcance (contacto mecánico). Como se mencionó con anterioridad, la dinámica de un material granular, se fundamenta en la ecuación de movimiento de Newton para las coordenadas del centro de masa y los ángulos de Euler de sus partículas  $i$ , donde  $i = 1, \dots, N$ .

$$\frac{\partial^2 \vec{r}_i}{\partial t^2} = \frac{1}{m_i} \vec{F}_i(\vec{r}_j, \vec{v}_j, \vec{\varphi}_j, \vec{\omega}_j) \quad (1)$$

$$\frac{\partial^2 \vec{\varphi}_i}{\partial t^2} = \frac{1}{J_i} \vec{M}_i(\vec{r}_j, \vec{v}_j, \vec{\varphi}_j, \vec{\omega}_j) \quad (2)$$

Donde:  $\vec{F}$  es la Fuerza,  $\vec{M}$  es el Torque,  $m$  es la Masa,  $J$  es el tensor de inercia,  $\vec{r}$  es la posición de la partícula,  $\vec{\varphi}$  es la orientación angular,  $\vec{v}$  es la velocidad tangencial, y  $\vec{\omega}$  es la velocidad angular

En donde el cálculo de las fuerzas y torques es la parte central de cada simulación de dinámica molecular. En general, el sistema de ecuaciones diferenciales no lineales acopladas (1) y (2) no puede solucionarse de forma analítica, y la solución numérica aproximada de estas se llama dinámica molecular ya que realizan el cálculo de las trayectorias de todas las partículas del sistema.

Las condiciones iniciales en este método definen el valor de las coordenadas, velocidades, ángulos de Euler y velocidades angulares. Para el caso de partículas esféricas las fuerzas de interacción son independientes de la orientación espacial de las partículas, de modo que, no se necesitan condiciones iniciales para  $\vec{\varphi}$ . Cabe mencionar que este modelo de partículas esféricas presenta la gran ventaja de la eficiencia numérica debido a que detecta si dos partículas se encuentran a una distancia muy cercana entre ellas, y por ende, ejercen fuerzas de repulsión entre sí. Para esto, es suficiente comparar las distancia de sus centros con la suma de sus radios. Esta comparación puede realizarse en dos y tres dimensiones a bajos costos computacionales así que es posible realizar simulaciones de miles de partículas, permitiendo la investigación numérica detallada de los sistemas granulares.

Según [13], la simulación de la dinámica molecular se ejecuta de la siguiente manera:

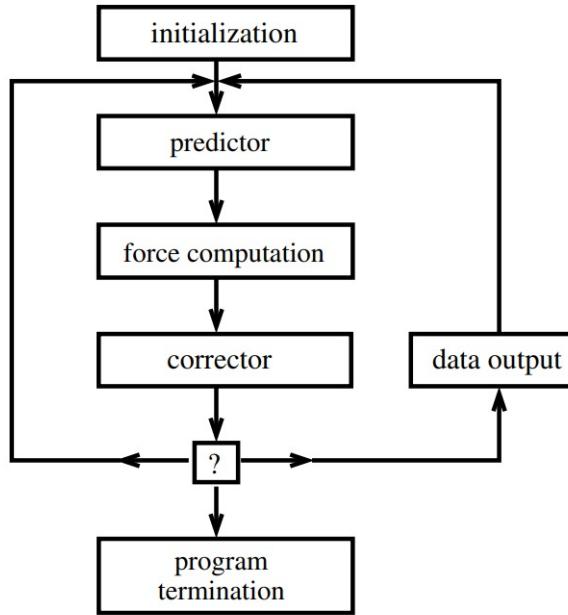


Figura 3: Diagrama del funcionamiento del algoritmo de dinámica molecular [13].

1. Inicialización (*Initialization*): De este paso se obtienen las coordenadas  $(\vec{r}_i, \vec{\varphi}_i)$  de la partícula, sus derivados del tiempo y el tipo de partícula a utilizar (partícula de material granular o de pared)
2. Predicción (*predictor*): Se calculan las coordenadas y los derivados del tiempo de las partículas en  $t + \Delta t$  como una expansión de Taylor de los valores en el tiempo presente  $t$ .
3. Fuerzas (*forces*): Se seleccionan los pares de interacción y se realizan cálculos de las fuerzas de interacción por pares entre las partículas y entre las partículas y las paredes basadas en las predicciones de las coordenadas y las velocidades.
4. Corrección (*corrector*): Se corrige las coordenadas predichas y los derivados del tiempo utilizando las fuerzas computadas en el paso 3.
5. Extracción de datos (*Data extractor*): Los datos de interés se registran en un intervalo de tiempo predefinido o en ocurrencia de eventos. Aquí existen dos procedimientos fundamentales: los valores son computados por la simulación de dinámica molecular o las coordenadas y las velocidades de todas las partículas se registran en un archivo en ciertos intervalos de tiempo y los datos se procesan posteriormente.
6. Finalización del programa: El programa finaliza en un momento predefinido o al ocurrir un evento específico, de lo contrario la simulación continúa al paso numero 2 y así sucesivamente.

### 6.2.2. Algoritmo de Verlet

Para resolver las ecuaciones de movimiento de Newton para cada una de las partículas que conforman el sistema granular a simular es posible utilizar métodos de integración, para computar de manera eficiente las fuerzas. En DM, se utiliza el algoritmo de Verlet, que fue usado por primera vez en 1976. Este está basado en una propiedad dinámica de partículas en donde la relación de vecindad entre partículas cambia únicamente de forma lenta, esto quiere decir que dos partículas que se encuentren cercanas una a la otra en un tiempo dado, permanecerán como vecinos cercanos al menos en los siguientes pasos de tiempo. Por lo tanto, al inicial el algoritmo, se calculan las distancias de todos los pares de partículas cercanas (relaciones de vecindad). Para llamar a dos partículas vecinas, la distancia de sus superficies debe ser menor que una constante predefinida [13]. Es así que, el principio general de los algoritmos de Verlet, consiste en resolver las ecuaciones de movimiento de cada una de las partículas que pueden incluir diferentes tipos de interacciones (gravitacional, de colisión, eléctrica, entre otras) entre las partículas, ya sea del mismo o diferentes tipos. La suma de todas las interacciones de todas las partículas, junto con los campos exteriores, sobre una partícula elegida resultará en la fuerza neta que actúa, por un instante (dado que todas las partículas se encuentra en movimiento continuo), sobre esta [14].

Dado  $dt$ , en una dimensión, se tiene

$$dx = vdt$$

En caso se tengan dos o tres dimensiones, se tendrá

$$d\vec{r} = \vec{v}dt$$

En donde  $\vec{r}$  es un vector constante que representa la velocidad de la partícula mientras que  $d\vec{r} = \vec{r}(t + dt) - \vec{r}(t)$  es la diferencia de posiciones en el espacio entre el instante  $t$  y el instante  $t + dt$ . Por lo tanto,

$$\vec{r}(t + dt) = \vec{r}(t) + \vec{v}dt$$

permite encontrar la posición en el tiempo de  $t + dt$  en términos de la posición en el tiempo  $t$  y de la velocidad de la partícula  $\vec{v}$ . Esta forma de calcular las posiciones sucesivas de un objeto, en pequeños pasos discretos de tiempo  $dt$ , es una aplicación del método de Euler de primer orden. Una aproximación que se puede emplear cuando la velocidad  $\vec{v}$  no es constante, resulta en considerar la expansión de la serie de Taylor de las cantidades  $\vec{r}(t + dt)$  y  $\vec{r}(t - dt)$ :

$$\vec{r}(t + dt) = \vec{r}(t) + dt \frac{d}{dt} \vec{r}(t) + \frac{dt^2}{2} \frac{d^2}{dt^2} \vec{r}(t) + \dots \quad (3)$$

$$\vec{r}(t - dt) = \vec{r}(t) - dt \frac{d}{dt} \vec{r}(t) + \frac{dt^2}{2} \frac{d^2}{dt^2} \vec{r}(t) - \dots \quad (4)$$

Al sumar las ecuaciones (3) y (4) y truncando la serie obtenida a partir de los términos de cuarto orden, se obtiene:

$$\vec{r}(t + dt) = 2\vec{r}(t) - \vec{r}(t - dt) + \vec{a}(t)dt^2, \quad (5)$$

donde

$$\vec{a} = \frac{d}{dt}\vec{v}(t) = \frac{d^2}{dt^2}\vec{r}(t)$$

Adicional una buena aproximación para la velocidad (a segundo orden de precisión) se obtiene mediante la resta de las ecuaciones (3) y (4)

$$\vec{v}(t) = \frac{[\vec{r}(t + dt) - \vec{r}(t - dt)]}{2dt} \quad (6)$$

Donde  $\vec{v} = \frac{d}{dt}\vec{r}(t)$ . Sustituyendo en el tiempo  $t \rightarrow t + dt$  esta expresión equivale a

$$\vec{v}(t + dt) = \frac{[\vec{r}(t + 2dt) - \vec{r}]}{2dt} \quad (7)$$

### 6.2.3. Potencial de Lennard-Jones (LJP)

El LJP fue propuesto por Edward Lennard-Jones en 1924. Esta función matemática describe la interacción entre dos partículas en un sistema y se utiliza comúnmente en la modelización de interacciones entre partículas neutras atractivas y repulsivas. Este potencial regula la intensidad de la atracción y repulsión entre dos átomos,  $i$  y  $j$ , que se encuentran en las posiciones  $r_i$  y  $r_j$ , respectivamente. Determina sus aceleraciones y fuerzas en relación con su distancia de separación,  $r$ .

La siguiente ecuación (8), describe la fuerza ejercida sobre una partícula  $j$  por una partícula  $i$ . Este modelo, está compuesto por dos términos importantes: el término  $(\frac{\sigma}{r_{ij}})^{12}$  describe una repulsión a corta distancia extremadamente fuerte entre las partículas. Esta repulsión se debe a la superposición de electrones y núcleos en las partículas y evita que las partículas colapsen unas sobre otras; y el término  $(\frac{\sigma}{r_{ij}})^6$  que describe una interacción atractiva a corta distancia entre las partículas. Esta atracción se debe a fuerzas de dispersión de London (fuerzas de Van der Waals) y representa la tendencia de las partículas a acercarse una a la otra debido a la formación de dipolos instantáneos [15].

Adicionalmente, en esta ecuación se evidencia la tercera Ley de Newton que implica que  $F_{ji}$  es igual a  $-F_{ij}$  por lo que la fuerza, sobre la partícula  $i$  procedente de la interacción por pares  $u(r_{ij})$  tiene la dirección opuesta a la fuerza sobre la partícula  $j$ . El LJP se utiliza en diversos contextos, incluyendo la simulación de sistemas de partículas en física molecular. Es especialmente útil para modelar el comportamiento de gases, líquidos y sólidos, así como para comprender la estructura y las propiedades de las fases condensadas de la materia. También es fundamental en la descripción de propiedades termodinámicas y estructurales de sustancias en condiciones no extremas, como la ecuación de estado de gases ideales y no ideales.

$$\vec{F}_{ji} = -24\epsilon \left[ 2\left(\frac{\sigma}{rij}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{rij}\right)^6 \right] \frac{rij}{r^2ij} \quad (8)$$

Donde:  $\vec{F}_{ji}$  es la energía potencial entre dos partículas en función de la distancia ( $r$ ) entre ellas,  $\epsilon$  es la profundidad del potencial que representa la fuerza de atracción entre partículas,  $\sigma$  es el parámetro de distancia en el cual el potencial es igual a cero. Por otro lado, a una distancia  $R$ , el potencial alcanza un equilibrio en una magnitud  $\epsilon$ . Al incrementar la distancia a partir de ese punto, las partículas comienzan a atraerse y el potencial alcanza magnitudes cercanas a 0 cuando la distancia tiende al infinito.

La Figura 4 describe el comportamiento característico del LJP. En el eje X se representa la distancia que existe entre dos partículas, mientras que el eje Y se muestra la energía de atracción entre partículas. Cuando la distancia entre las partículas es cercana a cero, prevalece un efecto repulsivo significativo que tiende al infinito, lo que explica por qué las partículas no colisionan entre sí. Como se mencionó con anterioridad,  $\sigma$  es el parámetro de distancia en el cual el potencial es igual a cero. Por otro lado, a una distancia  $R$ , el potencial alcanza un equilibrio en una magnitud  $\epsilon$ . Al incrementar la distancia a partir de ese punto, las partículas comienzan a atraerse y el potencial alcanza magnitudes cercanas a 0 cuando la distancia tiende al infinito.

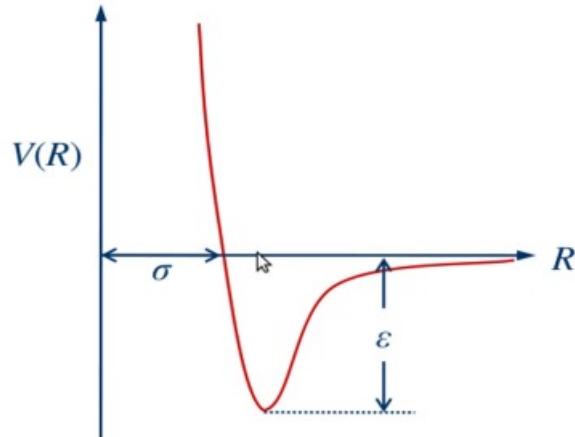


Figura 4: Comportamiento del potencial de Lennard-Jones [16].

#### 6.2.4. Dinámica del cuerpo rígido (DCR)

La Dinámica de Cuerpos Rígidos (DCR) o también conocida como dinámica de contacto, es un algoritmo utilizado en la mecánica, que permite el estudio del movimiento y las interacciones de objetos físicos rígidos. Un cuerpo rígido se define como un objeto cuyas dimensiones y formas relativas no varían [17]. Este algoritmo es adecuado para simular partículas perfectamente rígidas sin la necesidad de especificar una cierta ley de fuerza-deformación, como es el caso de materiales granulares, donde las fuerzas de fricción, contactos, y comportamientos no lineales son prominentes.

En lugar de calcular fuerzas internas basadas en la deformación de partículas, la DCR recurre a fuerzas y momentos de contacto generados por restricciones cinemáticas, evitando

así deformaciones mutuas entre las partículas. Además, la evolución temporal de las variables cinemáticas y dinámicas de los cuerpos rígidos se describe mediante ecuaciones de movimiento que siguen los principios de las leyes de Newton, similar a lo que se realiza en dinámica molecular.

Para realizar simulaciones con este algoritmo, es esencial derivar las fuerzas que actúan sobre las partículas en las direcciones normal y tangencial de cuatro condiciones específicas:

1. Las fuerzas de contacto deben elegirse de tal manera que se evite la deformación mutua de las partículas en contacto.
2. Una fuerza de contacto desaparece cuando se rompe el contacto.
3. No hay fuerzas normales atractivas.
4. Las fuerzas de fricción actúan paralelas al plano de contacto, es decir, perpendicular a la fuerza normal o de contacto.

El uso de la DCR presenta diversas ventajas, una de ellas es la capacidad de simular la fricción, un aspecto esencial en muchos sistemas físicos. Aunque la simulación de la fricción puede ser un desafío, la DCR aborda este problema modelando de manera precisa las fuerzas de fricción estática y cinética. Esto proporciona una representación precisa del comportamiento de los cuerpos sólidos, ya sea en reposo o en movimiento. Además, la DCR ofrece beneficios en términos de estabilidad numérica, facilitando la simulación de la deformación elástica de partículas rígidas, especialmente cuando las cargas aplicadas resultan en deformaciones elásticas insignificantes [13].

Este algoritmo es una herramienta versátil que permite abordar problemas complejos relacionados con el movimiento y la interacción de objetos sólidos, proporcionando un enfoque eficiente y estable para la simulación de diversos sistemas físicos. Su aplicación se evidencia en distintas áreas, como en el estudio de materiales granulares. Un ejemplo claro es el balasto ferroviario, donde las partículas son irregulares y la fricción juega un papel crucial. También se utiliza en ingeniería estructural para simular y analizar el comportamiento de estructuras rígidas bajo diversas cargas y condiciones, proporcionando una comprensión detallada de las fuerzas y momentos que actúan sobre los componentes estructurales. Asimismo, su capacidad para modelar sistemas de partículas rígidas la convierte en una herramienta valiosa para la simulación del movimiento e interacción de partículas en una variedad de escenarios, desde aplicaciones industriales hasta investigaciones académicas.

#### **6.2.5. Partículas de bordes afilados compuestas por triángulos**

La simulación de casos específicos requiere modelos de partículas más realistas que una simple esfera. Por lo tanto, se ha desarrollado un modelo que permite realizar simulaciones de partículas granulares con formas arbitrarias y bordes afilados de forma realista pero computacionalmente eficiente. Este nuevo modelo se deriva del algoritmo de dinámica molecular existente y descrito con anterioridad.

El modelo propuesto genera partículas compuestas por triángulos elásticos conectados por resortes de viga deformables. Estas vigas permanecen fijas a los centros de masa de los triángulos, otorgando flexibilidad al modelo de partículas. Esta característica posibilita la representación de una extensa variedad de formas para las partículas, tal como se ilustra en la Figura 5 en donde se representan tres figuras distintas.



Figura 5: Partículas de bordes afilados compuestas por diferentes cantidades de triángulos [13].

Como se mencionó previamente, este algoritmo se deriva de la dinámica molecular, lo que implica que el movimiento de cada una de las partículas se rige por las ecuaciones de movimiento de Newton. La diferencia radica en la simulación de colisiones e interacciones entre partículas. En este modelo, la interacción entre las partículas se produce a través de los contactos entre los triángulos los cuales pueden clasificarse en 6 tipos (A-F). Estos contactos pueden resultar en deformaciones que afectan la respuesta global del sistema granular. Es así que para comprender cómo la deformación creada por la colisión afecta a la interacción entre partículas se debe calcular las fuerzas en las vigas que conectan los triángulos.

Las vigas, actuando como enlaces entre triángulos, experimentan deformaciones inducidas por fuerzas normales, tangenciales y momentos de flexión. Sin embargo, la interacción entre dos partículas compuestas puede simplificarse considerando solo la interacción entre sus triángulos constituyentes. Los triángulos que forman parte de una misma partícula compuesta interactúan exclusivamente a través de las vigas correspondientes, mientras que los triángulos pertenecientes a partículas compuestas diferentes interactúan mediante su mutua deformación, caracterizada mediante un área aparentemente superpuesta de los triángulos en contacto. La fuerza repulsiva entre los triángulos en contacto depende del tamaño y la forma de esta área de superposición [13].

Al representar partículas con triángulos, se pueden estudiar propiedades específicas de los materiales granulares, como la resistencia a la compresión, la conductividad térmica y la dilatación, según las características geométricas y mecánicas de los triángulos.

#### 6.2.6. Simulación directa: Monte Carlo (DSMC)

La simulación directa de Monte Carlo fue desarrollado por Graeme Bird a finales de la década de 1960 para simulaciones a escala cinética. Específicamente para la simulación del comportamiento de gases rarificados, en donde individualmente, el movimiento de cada partícula se aproxima mediante estadística. Así que, en vez de simular cada partícula de un gas, se divide el espacio en celdas y se asigna a cada una una cierta cantidad de partículas virtuales, también llamadas unidades probabilísticas, las cuales se mueven y colisionan según distribuciones estadísticas y probabilidades [18].

A pesar de no computar las trayectorias de las partículas, este método describe diversas

observaciones experimentales para sistemas en equilibrio y sin equilibrio. Para esto, este método se basa en la cinética de los gases. El estado de un gas molecular o granular se describe mediante la función de distribución de una partícula  $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$  que cuantifica el número infinitesimal de partículas que se encuentran en un volumen, también infinitesimal. Por lo que, la idea principal del método DSMC es determinar la función de distribución dependiente del tiempo por medio de una simulación de cuasipartículas. La dinámica de esta función de distribución es fundamentada en la ecuación de Boltzmann, pero esta ecuación no describe el movimiento de partículas tal y como la ecuación de Newton lo hace pero si determina el flujo dependiente del tiempo de probabilidad. En consecuencia, estas cuasipartículas son unidades probabilísticas (cuantos de probabilidad) en lugar de partículas reales.

En su mayoría, este método se utiliza para modelar y simular las propiedades y el comportamiento estadístico de un gas [13]. Cada partícula real de un sistema contribuye al campo de probabilidad  $f(r, v, t)$ , según sus coordenadas y su velocidad. Así, la ecuación de Boltzmann puede, por un lado, derivarse de la dinámica de las partículas y por otro lado, se puede transformar en una dinámica para quasi-partículas. Así que como se observa en la Figura 6, se puede aplicar este algoritmo para simular un gas. Se puede observar tanto el comportamiento de miles de partículas como el comportamiento de un gas rarificado.

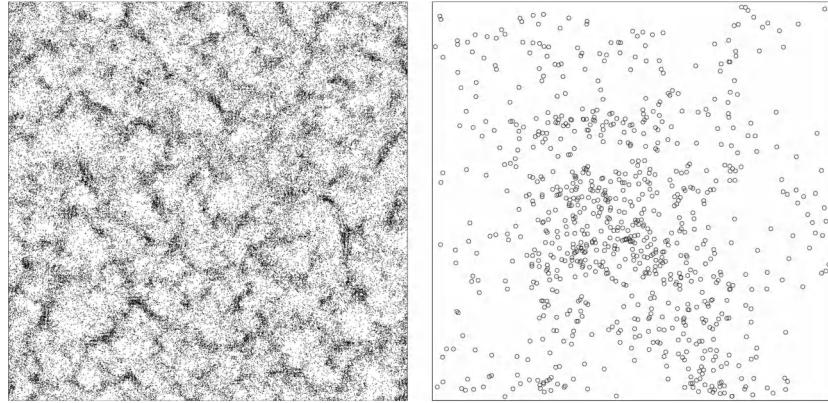


Figura 6: Simulación de un gas granular utilizando el DSMC [13].

En dinámica molecular, el movimiento molecular exacto se calcula a partir de la intermolecular fuerzas entre las partículas. Aunque esto puede hacerse eficientemente para líquidos, en los que las moléculas interactúan directamente con solo unas pocas moléculas vecinas, en un gas diluido una molécula tiene miles de posibles compañeros de colisión. El DSMC supera la ineficiencia de la DM al reemplazar el movimiento determinista con una aproximación estocástica para el proceso de colisión. DSMC es capaz avanzar en pasos de tiempo comparables al tiempo libre medio entre colisiones y seguir siendo precisos en el nivel de la ecuación de Boltzmann. A diferencia de MD, DSMC siempre es numéricamente estable independientemente del paso de tiempo.

### **6.2.7. Modelo de Elementos Discretos (DEM)**

Este método numérico simula el comportamiento mecánico de un medio compuesto por un conjunto de partículas que interactúan entre sí a través de sus puntos de contacto. La posición y distribución de estas partículas en el sistema no siguen un patrón predecible, sino que ocurren aleatoriamente. Esto posibilita la formación de medios con diferentes tamaños de partículas distribuidos a lo largo del conjunto, contribuyendo a la heterogeneidad del medio y permitiendo una idealización de la naturaleza granular para facilitar el estudio y la simulación de medios granulares en términos más generales [19].

En este enfoque, se consideran las partículas como elementos discretos, es decir, que considera cada partícula individualmente en lugar de tratar el material granular en su conjunto como un medio continuo. Por lo tanto, se realiza un seguimiento individual de cada partícula en términos de su posición, velocidad, masa y otras propiedades relevantes. Para este propósito, se emplea la mecánica del cuerpo rígido, considerando las partículas como elementos rígidos en sí. Este enfoque discreto es necesario porque los materiales granulares, como la arena, los granos de café o los polvos, están compuestos por partículas sólidas que interactúan de manera discontinua. A diferencia de un fluido, donde se puede asumir un comportamiento continuo en función de las propiedades macroscópicas como la densidad y la viscosidad, los materiales granulares pueden comportarse de manera muy diferente debido a las fuerzas de fricción entre partículas individuales y las colisiones.

Como se mencionó anteriormente, abordar las partículas como elementos discretos implica resolver las ecuaciones de movimiento de cada una por separado y calcular las fuerzas de interacción entre ellas, como se ejecuta en DM. Esto permite modelar de manera más precisa y detallada el comportamiento de sistemas granulares en diversas situaciones, como el flujo de arena, la compactación de polvos o la formación de pilas de gránulos. Adicionalmente, este enfoque es útil para estudiar fenómenos locales, como la formación de arcos en silos o la segregación de partículas de diferentes tamaños. En resumen, el método modela los cuerpos como partículas individuales que interactúan mediante fuerzas y momentos, permitiendo simular el movimiento y la colisión de partículas en sistemas granulares.

### **6.2.8. Método de Elementos Finitos (FEM)**

El método de elementos finitos es una técnica numérica utilizada en diversos campos como ingeniería y ciencias aplicadas para resolver problemas de análisis estructural, térmico, electromagnético y en dinámica de fluidos. El FEM es utilizado para aproximar y resolver ecuaciones diferenciales parciales (EDP) complejas que modelan el comportamiento de sistemas físicos en diversas aplicaciones. Este se basa en utilizar elementos finitos (unidades geométricas simples) que componen el dominio o estructura del problema. Estos se describen mediante ecuaciones matemáticas sencillas y se conecta a través de nodos o puntos en los elementos finitos donde se calculan las soluciones. Luego, el método se utiliza para discretizar y aproximar las ecuaciones diferenciales en todo el dominio al convertirlas en un sistema algebraico de ecuaciones. Así que, en resumen, el FEM funciona dividiendo un dominio continuo en elementos finitos, aproximando las soluciones en estos elementos y luego ensamblando las soluciones para obtener una solución global [20].

A continuación se describe su funcionamiento de forma segmentada:

1. Discretización del dominio: primero se divide el dominio del problema en elementos finitos con formas geométricas simples, para el caso de física granular se utilizan esferas para representar las partículas.
2. Definición de nodos: en cada elemento finito, se definen nodos o puntos donde se calculan las soluciones aproximadas.
3. Funciones de forma: se utilizan funciones matemáticas para describir la variación de las soluciones dentro de cada elemento en función de los valores en los nodos. Estas funciones son polinomios que se ajustan a las condiciones en los nodos.
4. Formulación variacional: mediante el principio de energía potencial mínima o el método de los residuos ponderados, las ecuaciones diferenciales parciales se transforman en un problema variacional o de optimización. Aquí se minimiza una cantidad de energía o se satisface una relación de residuos ponderados.
5. Matriz de rigidez y vector de carga: se derivan las ecuaciones matriciales que relacionan las fuerzas y desplazamientos en el sistema.
6. Resolución del sistema de ecuaciones: se resuelve el sistema algebraico resultante para obtener los desplazamientos nodales y, en consecuencia, las soluciones aproximadas en todo el dominio.
7. Postprocesamiento: una vez que se obtienen los desplazamientos y otras cantidades de interés, se pueden realizar análisis adicionales, como calcular tensiones, deformaciones y otros resultados relevantes.
8. Convergencia: se verifica la convergencia del método asegurándose de que la solución aproximada se vuelva más precisa al aumentar la cantidad de elementos y nodos.

En relación a física granular, este método puede simular y analizar sistemas granulares y se utiliza para resolver problemas relacionados con el comportamiento mecánico y la dinámica de estos sistemas. También se utiliza para analizar el comportamiento de partículas individuales en un sistema granular y modelar las interacciones que existen entre ellas. Esto puede incluir el estudio de cómo las partículas se deforman, colisionan, compactan o fluyen bajo la influencia de fuerzas externas y la simulación de fuerzas de fricción, repulsión eléctrica, adhesión y otras fuerzas que afectan la dinámica de las partículas.

#### **6.2.9. Características destacadas de cada algoritmo**

En este capítulo, se exploraron exhaustivamente seis algoritmos fundamentales en el ámbito de la física granular. Cada uno de estos algoritmos desempeña un papel crucial en el modelado y simulación de sistemas de partículas en constante interacción. Ahora, con el fin de proporcionar una visión consolidada y comparativa, se resumieron las características más destacadas de cada algoritmo en el Cuadro 1. Este análisis detallado se presenta de manera concisa destacando las fortalezas y peculiaridades de cada enfoque. Este recurso

visual permite obtener una comprensión rápida y comparativa de los algoritmos, facilitando así una apreciación más profunda de sus aplicaciones y limitaciones.

Cuadro 1: Tabla de comparación de las características principales de los algoritmos investigados.

Algoritmo	Características
Dinámica molecular	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ Método determinístico, a partir de las condiciones iniciales se puede predecir de manera precisa el estado futuro del sistema en cualquier momento.</li> <li>■ Las interacciones entre partículas se modelan mediante potenciales de energía.</li> <li>■ Permite el modelado detallado de sistemas granulares, proporcionando información sobre el comportamiento de partículas en contacto y colisión.</li> </ul>
Simulación directa de Monte Carlo (DSMC)	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ Enfoque estadístico para modelar el movimiento de las partículas.</li> <li>■ En lugar de rastrear las trayectorias individuales de las partículas, el espacio se divide en celdas.</li> <li>■ La simulación se basa en la función de distribución de una partícula.</li> <li>■ Aplicación directa a gases granulares.</li> </ul>
Dinámica del cuerpo rígido (DCR)	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ Algoritmo en la mecánica para estudiar el movimiento e interacciones de objetos físicos rígidos.</li> <li>■ Permite simular partículas perfectamente rígidas, evitando la necesidad de especificar leyes de fuerza-deformación, útil en situaciones como materiales granulares con fuerzas de fricción y comportamientos no lineales.</li> <li>■ La evolución temporal de movimiento de las partículas se describe mediante ecuaciones de movimiento que siguen los principios de las leyes de Newton.</li> </ul>

Continúa en la siguiente página

**Cuadro 1 – Continuación de la página anterior**

Algoritmo	Características
Dinámica de cuerpo rígido: Partículas de bordes afilados compuestas por triángulos	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Simular el movimiento y las interacciones de cuerpos rígidos en un entorno tridimensional.</li> <li>▪ Se pueden representar partículas con geometrías más complejas y detalladas.</li> <li>▪ Partículas compuestas por triángulos elásticos conectados mediante resortes de viga deformables.</li> <li>▪ Se utilizan modelos de interacción que describen cómo las partículas se deforman y transmiten fuerzas entre ellas.</li> </ul>
Modelo de elementos Discretos (DEM)	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Método numérico que considera cada partícula individualmente en lugar de tratar el material granular en su conjunto como un medio continuo.</li> <li>▪ Se resuelven las ecuaciones de movimiento de cada partícula por separado.</li> <li>▪ Permite un análisis detallado de eventos específicos y su impacto en el comportamiento global del sistema.</li> </ul>
Método de elementos finitos (FEM)	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Resuelve ecuaciones diferenciales parciales que describen el comportamiento de sistemas continuos.</li> <li>▪ El dominio del problema se divide en elementos finitos, y las soluciones se aproximan de manera continua en todo el dominio.</li> <li>▪ Permite analizar estructuras complejas y sistemas continuos.</li> <li>▪ Utilizado para estudiar cómo las fuerzas y deformaciones afectan a una estructura completa.</li> </ul>

### 6.3. Problema de cola fantasma

El problema de cola fantasma es un fenómeno que se produce cuando objetos, robots o seres vivos interactúan con materiales granulares, dejando una especie de “rastro” o “cola” detrás de ellos. Esto puede tener un impacto en el comportamiento futuro del material [21]. Un ejemplo notable de este fenómeno es el atasco de tránsito fantasma, que describe una congestión de tránsito que se produce sin causa aparente como un accidente o una obstrucción en la carretera. En las Figuras 7 y 8 se ilustra el impacto del vehículo verde al reducir su velocidad de manera abrupta. Esto conduce a una disminución rápida del espacio entre el vehículo rojo, lo que provoca que este también frene repentinamente. Este patrón se repite, generando el problema conocido como cola fantasma, el cual persiste hasta que la velocidad y el espacio entre todos los vehículos se estabilizan nuevamente. Como se observó, estos atascos son resultado del manejo imperfecto de los conductores, que provoca variaciones en la velocidad y la distancia entre los autos. Este fenómeno se desencadena debido a reacciones súbitas de frenado o aceleración por parte de un solo conductor.

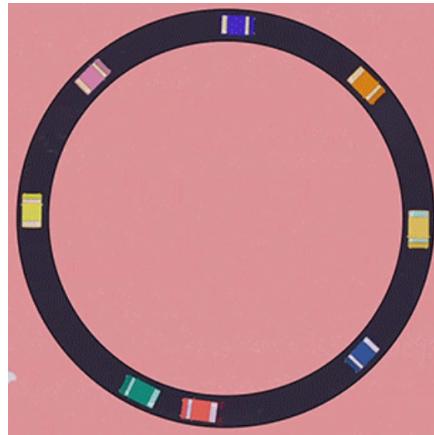


Figura 7: Representación del tránsito fantasma: reducción repentina de velocidad por parte del vehículo verde [22].

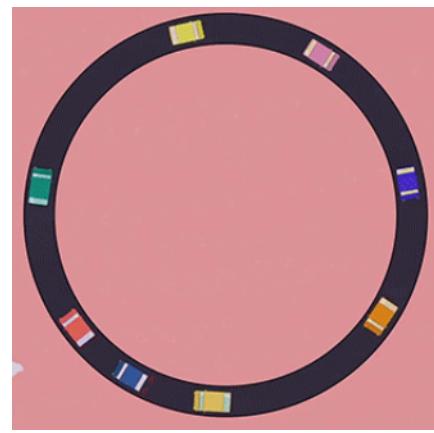


Figura 8: Representación del tránsito fantasma: efecto en el comportamiento de los demás vehículos [22].

Para abordar el problema de los atascos de tráfico fantasma y minimizar sus efectos, se puede enfocarse tanto en la causa de la perturbación como en la metaestabilidad del flujo del tráfico. Se han propuesto diversas soluciones para ambas, que van desde mejoras en la infraestructura vial y la concientización de los conductores hasta la implementación de diseños de carreteras más eficientes y una señalización adecuada. Esto incluye la promoción de la importancia de mantener una distancia constante y segura entre los vehículos, evitando frenazos y aceleraciones bruscas. Además, se han propuesto soluciones tecnológicas, como la incorporación de sistemas de control de velocidad adaptativos en los vehículos, como el control bilateral, para reducir las variaciones en las velocidades.

### 6.3.1. Control bilateral

Como se mencionó con anterioridad, la congestión del tráfico, a menudo causada por el flujo común de paradas y arranques, puede resultar en la formación de un fenómeno conocido como tránsito fantasma. Este fenómeno emerge como propiedad de un sistema compuesto por una cadena acoplada de automóviles con conductores. Se ha demostrado que la inestabilidad del tráfico intermitente puede prevenirse mediante el uso de un enfoque conocido como control bilateral. A diferencia de las tecnologías convencionales como el seguimiento de automóviles y el control de crucero adaptativo, el control bilateral implica una interacción bidireccional entre un controlador y un sistema.

Originado por la necesidad de proporcionar al operador información útil para tareas remotas de manipulación, el control bilateral se caracteriza por la retroalimentación de diversas formas de información, como fuerzas, sonidos y gráficos. Estos esquemas de control avanzados incluyen dos bucles, uno para el operador y otro en la zona remota del robot. La calidad y robustez de estos esquemas son cruciales para el rendimiento del operador al ejecutar tareas remotas [23]. En este tipo de control se utiliza la distancia y la velocidad relativa del vehículo principal y del vehículo siguiente a este para obtener la aceleración de cada uno de los vehículos.

En este enfoque, no solo el controlador influye en el sistema, sino que el sistema también puede influir en el controlador. Esta comunicación bidireccional permite una adaptación más dinámica y precisa a las condiciones cambiantes. Por ejemplo, en sistemas de control bilateral aplicados a la teleoperación de robots, el operador no solo envía comandos al robot, sino que también recibe retroalimentación sensorial del entorno a través del robot. Este enfoque crea una conexión más inmersiva y facilita una toma de decisiones más informada por parte del operador.

En [24], se visualiza el control bilateral de forma macroscópica, por lo que se utilizan densidades y tasas de flujo. Lo que conlleva a la ecuación amortiguada en la cuál está basado el tráfico bajo control bilateral. Esta ecuación permite determinar la velocidad de propagación de las perturbaciones y la tasa de decaimiento. También es útil para ajustar los parámetros de los sistemas de control bilateral. En general, al utilizar control bilateral, cada vehículo intenta tener la mitad de la distancia entre el primer y siguiente, y estos se pueden modelar como masas conectadas por resortes y amortiguadores.

## 6.4. Agentes robóticos móviles

La palabra robot proviene del checo “robota” que significa labor o servidumbre [25] y por definición un robot es una máquina programable capaz de realizar una serie de acciones o tareas que pueden ser automatizadas o complejas para los seres humanos [26] con diferentes niveles de autonomía. Estos pueden ser autónomos, semiautónomos o no autónomos dependiendo de sus capacidades y funcionalidad. Los autónomos consiguen elaborar respuestas, encontrar soluciones y predecir comportamientos debido al uso de algoritmos que utilizan técnicas de inteligencia artificial como redes neuronales, aprendizaje automático, lógica confusa, entre otros. Suelen ser sistemas móviles capaces de “percibir” el entorno circundante (a través de diversos sensores), moverse en diferentes entornos y tomar acciones y decisiones en función del contexto en el que se mueven y operan. Por otro lado, los no autónomos son los que son controlados de forma remota por seres humanos o mediante software, siguiendo las instrucciones de un programa predefinido, por lo que se define lo que el agente debe realizar y no tienen la capacidad de tomar decisiones independientes. Estos son utilizados usualmente para tareas específicas como de exploración o producción industrial [26]. A continuación, se describen los dos agentes robóticos que se utilizaron en este trabajo de graduación.

### 6.4.1. Agentes Pololu 3Pi+ 32u4 OLED

El agente Pololu 3Pi+ 32u4 OLED (Pololu) es un robot versátil, de alto rendimiento con un microcontrolador ATmega32U4 AVR de Microchip que mide solo 9.7 cm de diámetro. Cuenta con una interfaz USB y viene precargado con un gestor de arranque compatible con Arduino. Este dispositivo incluye codificadores de cuadratura dobles para control de posición o velocidad de circuito cerrado, sensores de línea, sensores de golpes frontales, una unidad de medición inercial completa (acelerómetro, magnetómetro y giroscopio de 3 ejes). Asimismo, cuenta con dos controladores de motor de puente H, cinco sensores de reflectancia orientados hacia abajo para seguimiento de línea o detección de bordes, sensores de impacto izquierdo y derecho a lo largo de la cara frontal del robot, una pantalla OLED gráfica de 128 × 64 cm, un zumbador e indicadores LED que permiten obtener retroalimentación por parte del robot [27]. Para acceder a detalles del funcionamiento, adjunto en el anexo se encuentra el manual [28].



Figura 9: Agente Pololu 3Pi+ 32u4 [27].

#### 6.4.2. Robot AlphaBot2

AlphaBot2 es una plataforma robótica desarrollada por la empresa China Waveshare Electronics. Como se observa en la Figura No. 1, el kit comercial posee una placa de circuito impreso como base del chasis y sobre ella, una segunda placa que funciona como adaptador que es compatible con Arduino, Raspberry Pi 3 Model B y Raspberry Pi Zero W. Cabe mencionar que incluye funciones como el seguimiento de linea, evitación de obstáculos, control remoto vía Bluetooth, e incluye diferentes sensores como infrarrojo, WIFI, entre otros [29]. Para acceder a detalles del funcionamiento, adjunto en el anexo se encuentra el manual [30].



Figura 10: Robot Alphabot2 [29].

#### 6.5. OptiTrack

OptiTrack es una empresa que se especializa en sistemas de captura de movimiento óptico, ofreciendo soluciones para diversas aplicaciones como: animación e investigación. Su amplia gama de productos incluye sistemas de captura de movimiento completo diseñados para realizar seguimiento preciso y registro de movimiento en tiempo real en un espacio determinado. Estos sistemas integrales de Optitrack incluyen un kit con herramientas de calibración, marcadores y un conjunto de cámaras especializadas, que se muestran en la Figura 11. Estas cámaras utilizan tecnología de seguimiento óptico, por lo que capturan imágenes de alta velocidad y resolución. Su función principal es rastrear marcadores que pueden ser colocados en objetos o personas en movimiento permitiendo realizar un seguimiento detallado. La posición y orientación de estos marcadores se obtienen debido a estas cámaras, requiriendo una disposición cuidadosa alrededor del área de captura [31]. Los marcadores pueden ser activos (emisores de luz) o pasivos (retroreflejores), siendo útiles en situaciones que demandan un seguimiento preciso incluso en condiciones de iluminación difíciles.



Figura 11: Cámaras de alta resolución utilizadas en el sistema de seguimiento completo OptiTrack [31].

Este sistema de seguimiento completo cuenta con un software de captura y análisis de movimiento, que permite calibrar el sistema de cámaras, configurar los marcadores, capturar los datos de movimiento en tiempo real y realizar análisis detallados. De esta manera, el software se convierte en una herramienta esencial para configurar y calibrar el sistema, garantizando la alineación de las cámaras y el reconocimiento preciso de los marcadores en el espacio de captura. Cabe destacar que este sistema es altamente escalable, por lo que se puede adaptar a diferentes necesidades y tamaños de espacio [31], como se evidenció con la plataforma Robotat. A pesar de que Optitrack es conocido por ser un sistema de captura preciso y robusto, es fundamental considerar algunos aspectos para reducir la incertidumbre asociada:

1. Calibración del sistema: un proceso de calibración preciso y regular es necesario para garantizar mediciones precisas.
2. Oclusión: la falta de visibilidad de los marcadores ante las cámaras puede introducir incertidumbre en las mediciones. Sin embargo, la disposición y configuración adecuada del sistema pueden mitigar este inconveniente.
3. Frecuencia de muestreo: la tasa de captura de cuadros por segundo a la que se capturan las imágenes puede afectar a la precisión de las mediciones.
4. Ambiente de grabación: factores como la iluminación ambiental, reflejos e interferencia electromagnética pueden afectar la precisión del sistema. Considerar y controlar estos elementos contribuye a mejorar la calidad de las mediciones [31].

## 6.6. Controlador PID

Un controlador proporcional, integral y derivativo es un dispositivo que permite regular sistemas dinámicos que se encuentran en lazo cerrado para que alcance el estado de salida deseado [32]. Su objetivo principal es mantener la variable de proceso (como la posición, velocidad o temperatura) en un valor determinado. Como dice su nombre, se conforma de tres partes que pretenden ajustar el sistema y minimizar el error entre la variable de proceso y el valor determinado:

1. Control proporcional (P): parte del controlador que responde a la diferencia actual entre la variable de proceso y un valor deseado o *setpoint*. Calcula un valor proporcional a esta diferencia y aplica una corrección en función de esta proporción. Cuanto mayor sea la diferencia, mayor será la corrección proporcional aplicada al sistema.
2. Control integral (I): El componente integral toma en cuenta el error acumulado a lo largo del tiempo. Si el sistema no alcanza el *setpoint* durante un período prolongado, el controlador integral aumenta la corrección de manera gradual para reducir el error acumulado. Esto ayuda a eliminar los errores persistentes a largo plazo.
3. Control derivativo (D): El control derivativo considera la tasa de cambio del error actual. Si el error está cambiando rápidamente, el control derivativo aplica una corrección para prevenir oscilaciones bruscas o cambios abruptos en la variable de proceso. Esto mejora la estabilidad del sistema.

Al reunir las tres acciones de control se consigue la rapidez de respuesta de sus partes proporcional y derivativa, y la anulación del error estacionario de su parte integral. La ecuación de un controlador PID se obtiene mediante:

$$u(t) = K_p e(t) + \frac{K_p}{T_i} \int_0^t e(\tau) d\tau + K_p T_p \frac{de(t)}{dt} \quad (9)$$

## CAPÍTULO 7

---

### Simulaciones computarizadas de los algoritmos de física granular

---

En este capítulo se destaca el algoritmos de física granular: dinámica molecular. Este fue seleccionado para realizar diversas simulaciones y así comprender cómo interactúan las partículas en un sistema y evolucionan con el tiempo. Para lograr esto, se aplican principios fundamentales de la física, como la Segunda Ley de Newton, que relaciona el cambio en el momento cinético con las fuerzas que actúan sobre las partículas. Sin embargo, debido a la naturaleza discreta del tiempo en las simulaciones, se recurre a métodos numéricos para calcular las posiciones y velocidades en momentos futuros.

En estas pruebas iniciales, se implementó el algoritmo de dinámica molecular para simular el movimiento de partículas en un entorno bidimensional. Se observaron resultados como trayectorias de tiro parabólico y órbitas alrededor de partículas estáticas. Además, se exploraron las implicaciones de cambiar las condiciones iniciales y cómo esto afecta las trayectorias resultantes. Una parte fundamental de estas simulaciones es la consideración del potencial del LJP, que modela las interacciones entre partículas. Se demostró que el comportamiento de las partículas está influenciado por las fuerzas atractivas y repulsivas del LJP, lo que puede dar lugar a cambios notables en las trayectorias.

A medida que se avance en el capítulo, se evidencia que se examinaron simulaciones más complejas, incluyendo sistemas tridimensionales y configuraciones con un mayor número de partículas. Estas simulaciones dinámicas contribuyeron a comprender cómo las interacciones entre partículas pueden dar lugar a agrupamientos y patrones emergentes. En síntesis, en este capítulo se explora las simulaciones de sistemas granulares utilizando el algoritmo de dinámica molecular. Para obtener los resultados de las simulaciones, se desarrollaron múltiples códigos utilizando el software MATLAB. Asimismo, se proporcionaron explicaciones y diagramas de flujo de los algoritmos para identificar y comprender con mayor facilidad las partes esenciales de cada una de las simulaciones.

## 7.1. Dinámica molecular

Como se evidenció en el capítulo anterior, se investigaron diversos algoritmos y simulaciones de física granular de los cuales únicamente la dinámica molecular será utilizada. Las pruebas preliminares son una representación gráfica de un sistema cuyas propiedades varían en el tiempo. Cada sistema posee variables que definen el estado en el que se encuentran en cada momento ese sistema y se conocen como variables de estado. En este caso se analizó el comportamiento mecánico de las partículas ya que lo importante es el movimiento (cinemática) y la causa de ese movimiento (dinámica).

Según la Segunda Ley de Newton, la variación del momento cinético de una partícula en un instante equivale a la suma de fuerzas que actúan sobre ella en ese mismo instante. El momento cinético, representado como  $p$ , es el producto de la masa  $m$  de la partícula por su velocidad  $v$ . Dado que la velocidad es un vector, el momento cinético también lo es. También se considera que la masa de la partícula es constante [33]. De esta manera, la Segunda Ley de Newton se formula como se muestra a continuación:

$$F(x, \vec{v}) = \frac{d\vec{p}}{dt} = m \frac{(d\vec{v})}{dt} \quad (10)$$

Donde  $\vec{v} = \frac{d\vec{x}}{dt}$  y la derivada del tiempo describe la variación instantánea.

Para cada instante de tiempo, la posición de una partícula varía en función de su velocidad, la cual cambia de acuerdo con la fuerza que actúa sobre la partícula y su masa. Sin embargo, cuando se desea calcular las múltiples posiciones y velocidades que una partícula puede tener entre dos momentos dados, es importante tener en cuenta que dentro de cualquier intervalo de tiempo existen infinitos momentos. Esto implica que también habrá un número infinito de velocidades y posiciones intermedias entre los extremos de dicho intervalo. Por lo tanto, es necesario considerar el tiempo como una variable discreta en lugar de una continua para abordar esta situación. Al realizar estas pruebas, se adquieren las posiciones y velocidades en un conjunto finito de momentos temporales, y a partir de estos datos se calculan los valores correspondientes para el siguiente instante temporal basándose en el estado actual y futuro.

Para determinar la magnitud de la velocidad y la posición en el estado siguiente con base en las condiciones actuales, se emplean métodos numéricos en contraposición a métodos analíticos que proporcionarían una solución explícita de la posición en función del tiempo. Como se mencionó anteriormente, el tiempo se considera una variable discreta en lugar de continua, lo que implica que las demás variables, como la velocidad y la posición, tampoco cambian de manera continua. En su lugar, se calculan en intervalos finitos de tiempo durante la simulación, denominados  $h$ . Si, por ejemplo,  $h$  es igual a 1 segundo, esto significa que las posiciones y velocidades se calculan cada segundo. Cuanto más pequeño sea este paso de tiempo, más instantes se tendrán en cuenta y mayor será la precisión. No obstante, también se traducirá en un mayor tiempo de cálculo y posibles desafíos de estabilidad en los métodos numéricos empleados.

### 7.1.1. Simulaciones preliminares: tiro parabólico

Teniendo en cuenta lo explicado anteriormente, las primeras pruebas tienen como objetivo implementar el algoritmo de dinámica molecular. Para ello, se llevaron a cabo varias simulaciones de una partícula en un entorno bidimensional (2D). La primera simulación aborda un sistema dinámico con condiciones iniciales que resultan en un tiro parabólico. En este caso, solo se requiere aplicar una fuerza constante conocida como fuerza gravitatoria. En general, la fuerza representa la suma de todas las fuerzas que actúan sobre la partícula, y es una función de la velocidad y de la posición tal y como se describe en 11. No obstante, por como fue determinada en esta simulación, solo depende de dos constantes, la masa y la gravedad. En consecuencia, la fuerza es constante en toda la simulación.

$$F = mg \quad (11)$$

Como se evidencia en la Figura 12, al iniciar el algoritmo se inicializan las variables y se establecen las condiciones iniciales de la partícula. Para este caso físico de caída libre, se utilizó la masa de la partícula  $m$ , la aceleración de la gravedad  $g$  (considerado como un vector de dos componentes), y el paso de integración  $h$ . Asimismo, se declararon las variables de dos componentes a utilizar, las cuales serán utilizadas también en otras simulaciones. Dos de estas variables son variables de estado: posición y velocidad mientras que la restante es una externa que corresponde a la fuerza. Las condiciones iniciales para esta prueba se establecen de la siguiente forma: la posición inicial se encuentra en el origen  $(0, 0)$  m, mientras que la velocidad presenta una componente horizontal cercana a cero y una componente vertical mayor para evidenciar un tiro parabólico  $(0.1, 4)$  m/s.

Posteriormente, se ejecuta la parte principal del código, la iteración. En esta, se actualizan los valores de posición y velocidad para la partícula en cada paso (*step*). De modo que, para cada uno de los pasos, se tienen variables temporales que almacenan el valor que acaba de ser obtenido y lo utilizan en la siguiente iteración como un valor pasado para calcular el valor futuro de la posición y velocidad. Para obtener este valor futuro, se utiliza el método de integración del punto medio. Primero se calcula la posición y velocidad en el punto medio predicho por el método Euler explícito ( $x_{pm}; v_{pm}$ ) y después, con esos valores, se calcula la nueva posición y velocidad ( $x; v$ ). Esto se realiza 100 veces ya que esta es la cantidad de pasos establecida. Por último, se grafica el resultado de la trayectoria computada. La simulación del movimiento de la partícula se obtiene debido a que se redibuja continuamente la posición de la partícula.

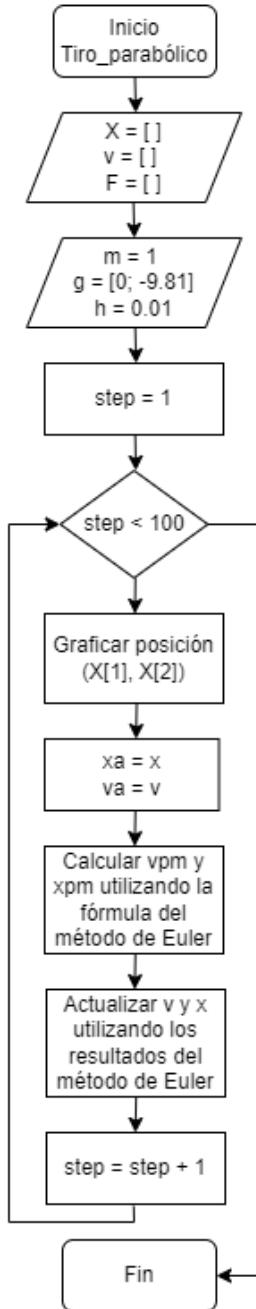


Figura 12: Tiro parabólico utilizando dinámica molecular.

A medida que transcurre cada paso de tiempo, la trayectoria de la partícula evoluciona. En el instante inicial, la partícula se ubica en la posición inicial; en el siguiente paso de tiempo, se recalcula la posición y velocidad, y dado que la velocidad inicial no es igual a cero, la posición difiere de la actual, llevando a la partícula a su siguiente posición. Este proceso se repite hasta alcanzar la cantidad predefinida de pasos de tiempo. Mientras la partícula se desplaza y el paso de tiempo aumenta, se deja un rastro en la trayectoria para evidenciar el comportamiento a lo largo del tiempo, como se muestra en la Figura 13 hasta la Figura 15.

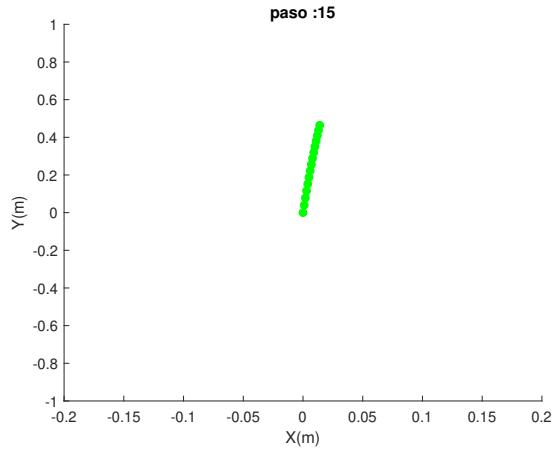


Figura 13: Tiro parabólico después de 15 pasos.

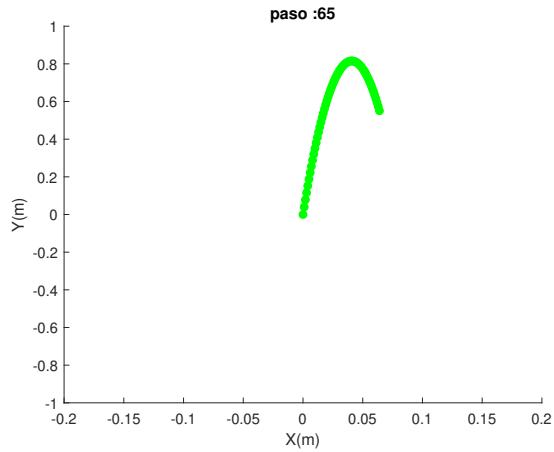


Figura 14: Tiro parabólico después de 65 pasos.

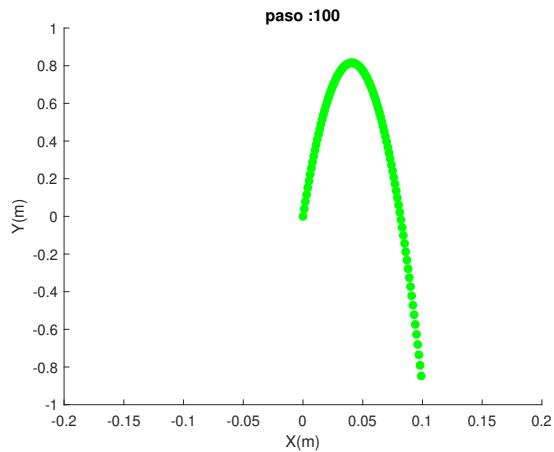


Figura 15: Tiro parabólico después de 100 pasos.

### 7.1.2. Simulaciones preliminares: órbitas

Para la segunda simulación se deseaba ampliar las posibilidades de aplicación del algoritmo base mediante la combinación de distintos números de partículas, dimensiones espaciales y tipos de fuerzas. El objetivo era experimentar y descubrir nuevas aplicaciones de la base del algoritmo previamente implementado. En este contexto, la prueba se centró en simular el movimiento de una partícula dinámica que orbita alrededor de una partícula estática. El algoritmo utilizado en esta simulación se basa en gran medida en el enfoque anterior, tal y como se observa en la Figura 16, ya que inicialmente se configuran los parámetros y se inicializan las variables. Sin embargo, se introdujeron dos nuevos parámetros esenciales:  $m$  (representando la masa de la partícula en movimiento) y  $M$  (que denota la masa de la partícula estática). Es importante destacar que el valor de  $M$  es superior al de  $m$ , lo cual compensa la simplificación de simular únicamente una partícula en movimiento. Además de estos parámetros, las condiciones iniciales también incluyen la posición y velocidad iniciales de las partículas, las cuales desempeñan un papel crucial en la determinación de la trayectoria de la partícula en movimiento.

Para acercar aún más la simulación a la implementación completa del algoritmo de dinámica molecular, se realizó una modificación en la fuerza. Anteriormente, esta fuerza era constante, pero ahora esta se rige por la ley gravitacional universal de Newton, que establece que la fuerza entre dos masas es directamente proporcional al producto de sus masas e inversamente proporcional al cuadrado de la distancia entre ellas. La fórmula matemática para esta fuerza se evidencia en 12:

$$F = \frac{G \cdot m1 \cdot m2}{r^2} \cdot \vec{r} \quad (12)$$

Donde:  $F$  es la fuerza gravitacional,  $G$  es la constante de gravitación universal,  $m1$  y  $m2$  son las masas de las dos partículas,  $r$  es la distancia entre los centros de las masas de las dos partículas y  $\vec{r}$  es el vector unitario que apunta desde  $m1$  hacia  $m2$ .

En el algoritmo se calcula la magnitud del vector de posición  $x$ , mediante la función  $norm(x)$ . Mientras que la fuerza,  $F$ , se calcula de acuerdo con la fórmula de la ley de gravedad universal y se multiplica por -1 para que actúe en dirección opuesta al vector de posición. Esta fuerza se utiliza luego en las ecuaciones de movimiento para actualizar la velocidad y la posición de la partícula en cada paso de tiempo.

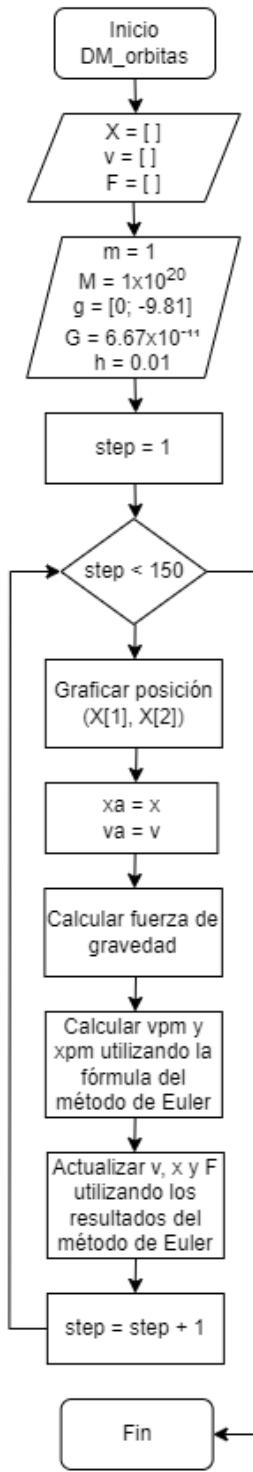


Figura 16: Partícula dinámica orbita una estática utilizando dinámica molecular.

Al ejecutar este algoritmo, en la Figura 17, se evidencia cómo la partícula verde, de menor masa, orbita por completo a la amarilla, de mayor masa debido a la influencia de la fuerza de gravedad, que está modelada como una fuerza atractiva que actúa entre ambas partículas.

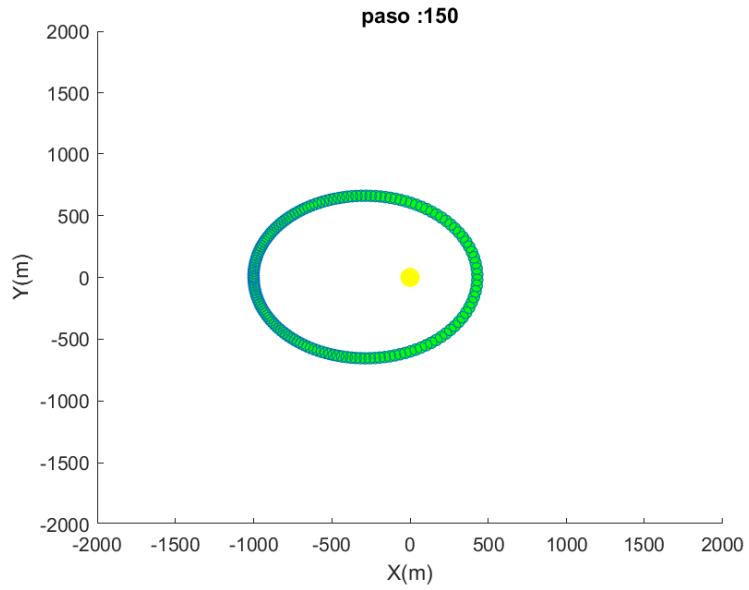


Figura 17: Una partícula en estado dinámico orbitando alrededor de una estática.

Luego de obtener el resultado de la simulación anterior, se modificaron las condiciones iniciales para observar cuál sería el comportamiento de la partícula en movimiento. Inicialmente, la partícula se ubicó en  $[-1 \times 10^3, 0]$  m con una velocidad inicial equivalente a  $[-2 \times 10^3, 0]$  m/s. Después de simular con estas condiciones, se mantuvo la misma posición pero se redujo la velocidad a  $[-1 \times 10^3; -1 \times 10^3]$  para obtener el comportamiento mostrado en la Figura 18. Estas modificaciones ocasionaron que la partícula en movimiento se distanciara lo suficiente de la partícula estática. Como consecuencia, la fuerza gravitacional dejó de atraerla, dando lugar al fenómeno de desorbitación.

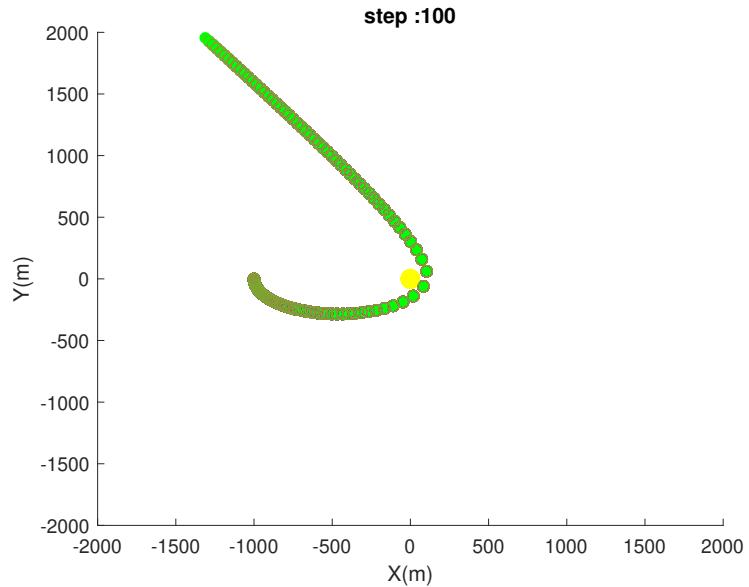


Figura 18: Partícula fuera de órbita.

Por otro lado, también es posible incrementar la cantidad de partículas presentes en la simulación. Es así que se añadieron 2 partículas dinámicas a la siguiente simulación, dando como resultado 3 partículas orbitando alrededor de una estática. Cada una de las partículas muestra una trayectoria distinta debido a que presentan distintas condiciones iniciales. Es así que, al igual que en la simulación previa, se utiliza el diagrama mostrado en la Figura 16 para ejecutar el algoritmo, lo único que debe añadirse son las variables para la masa, posición y velocidad de cada una de las partículas extras. El resultado de esta simulación se muestra de la Figura 19 hasta la Figura 21.

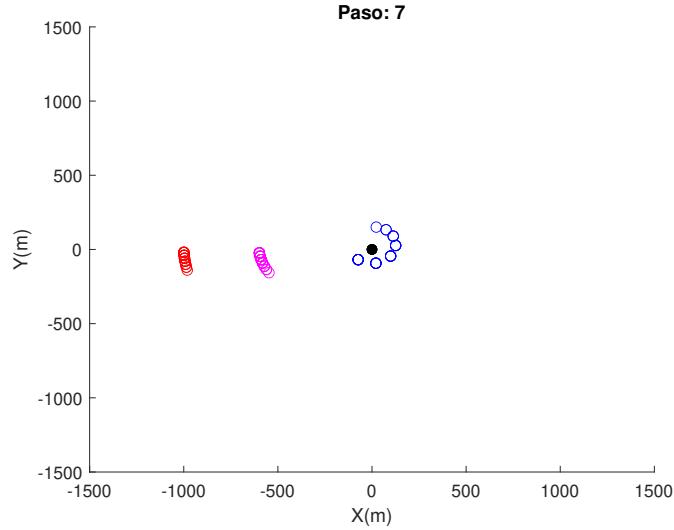


Figura 19: Tres partículas en estado dinámico orbitando alrededor de una estática luego de 7 pasos.

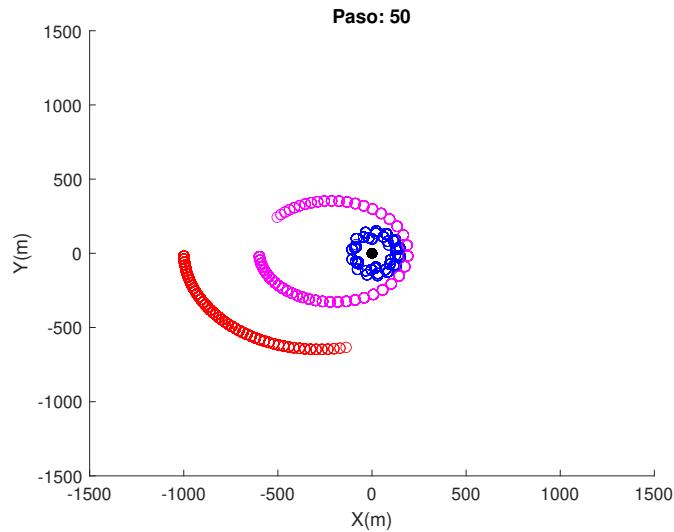


Figura 20: Tres partículas en estado dinámico orbitando alrededor de una estática luego de 50 pasos.

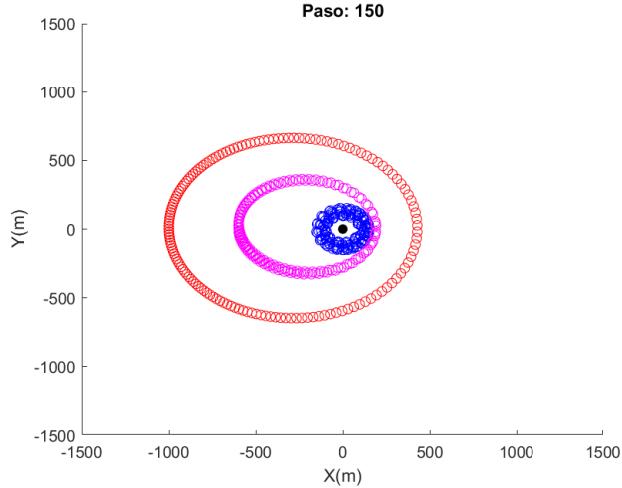


Figura 21: Tres partículas en estado dinámico orbitando alrededor de una estática luego de 150 pasos.

Posterior a realizar estas pruebas, se tuvo un mejor entendimiento de cómo las variables interactuaban entre sí y qué efectos tenía la fuerza como una constante y como una variable. No obstante, para implementar por completo el algoritmo de dinámica molecular, se debía integrar los resultados obtenidos en la segunda prueba con el algoritmo de Verlet para resolver las ecuaciones de Movimiento para Newton para cada una de las partículas que conforman el sistema granular y, también integrar el LJP para describir la interacción entre dos partículas neutras atractivas y repulsivas. Es así que se implementó el código *100PDinamicaMolecular* encontrado en el Anexo 1, y se obtuvo una simulación de dinámica molecular en un sistema bidimensional (2D) de partículas bajo la influencia del potencial de Lennard-Jones.

### 7.1.3. Dinámica molecular en un sistema (2D) de partículas bajo la influencia del potencial de Lennard-Jones

En primer lugar, se establecieron los parámetros de simulación. Se seleccionó la cantidad de partículas a simular, la masa de cada una (en este caso serán iguales) y se definió un espacio de simulación de  $2 \times 2$  m. Se fijó el tiempo de simulación en 30 segundos, junto con las magnitudes de las constantes  $\varepsilon$  y  $\sigma$  que rigen el potencial de Lennard-Jones. Por último, se colocaron las condiciones iniciales aleatorias para la velocidad y la posición para cada una de las partículas, en estas primeras pruebas.

Como se evidencia en la Figura 22, el algoritmo ejecuta un bucle para calcular las trayectorias de las partículas en función del tiempo. En cada paso de tiempo, se efectúan los cálculos de la fuerza entre todas las partículas utilizando el LJP. Asimismo, se calcula la aceleración y se actualizan las velocidades y posiciones mediante el algoritmo de Verlet. Luego se verifica si alguna partícula ha alcanzado el límite del espacio, y en caso de colisión con el límite o la pared, se produce una colisión elástica, resultando en una inversión de la velocidad de la partícula. Asimismo, se almacenan las coordenadas de posición de cada una de las partículas para trazar las trayectorias y por último, se grafican dichas trayectorias.

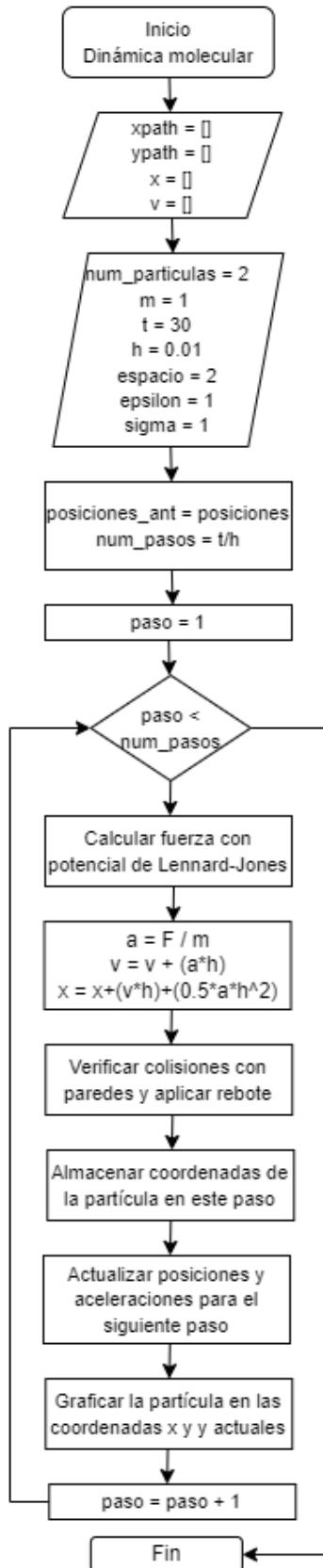


Figura 22: Pseudocódigo del algoritmo de física granular: Dinámica Molecular.

#### 7.1.4. Efectos del potencial de Lennard-Jones en 2 partículas

Para verificar que el efecto que tenía el potencial de Lennard-Jones en simulación se adecuaba a la teoría, se realizó la primera prueba. En esta se colocaron dos partículas a una distancia  $r$  equivalente a 1 m aproximadamente entre los centros de las masas de las dos partículas, tal y como se evidencia en la Figura 23. Como se explicó en la subsección 6.2.3, a distancia corta, las partículas se repelen fuertemente. En conceptos físicos, esto se debe a la repulsión electroestática entre los electrones de las partículas. Mientras que, al observar la expresión 8, la función  $r^{12}$  en el término  $(\frac{\sigma}{r_{ij}})^6$  hace que la energía potencial aumente muy rápidamente a medida que las partículas se acercan, modelando una fuerte repulsión. En consecuencia, las partículas al encontrarse a una distancia menor a donde la energía potencial es igual a cero ( $\sigma$ ), las partículas comienzan a repelerse.

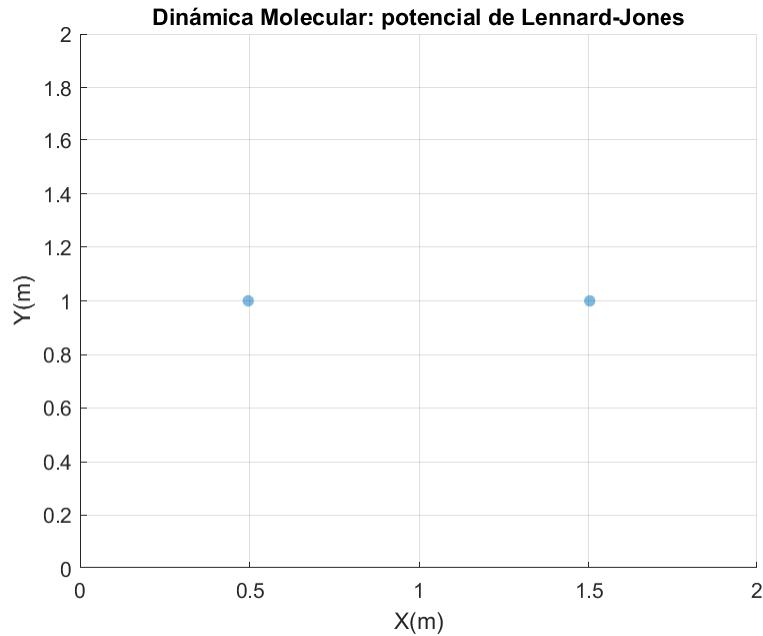


Figura 23: Distancia inicial entre las dos partículas.

Luego de 115 pasos de tiempo, las partículas alcanzan una distancia  $r$  equivalente a 1.72 m aproximadamente (Figura 24). En esta posición, ambas partículas alcanzan una energía potencial que tiende a 0. No obstante, como su distancia,  $r$ , es mayor a  $\sigma$ , la función  $r^{-6}$  en el término  $(\frac{\sigma}{r_{ij}})^6$  domina, lo que hace que las partículas comiencen a atraerse.

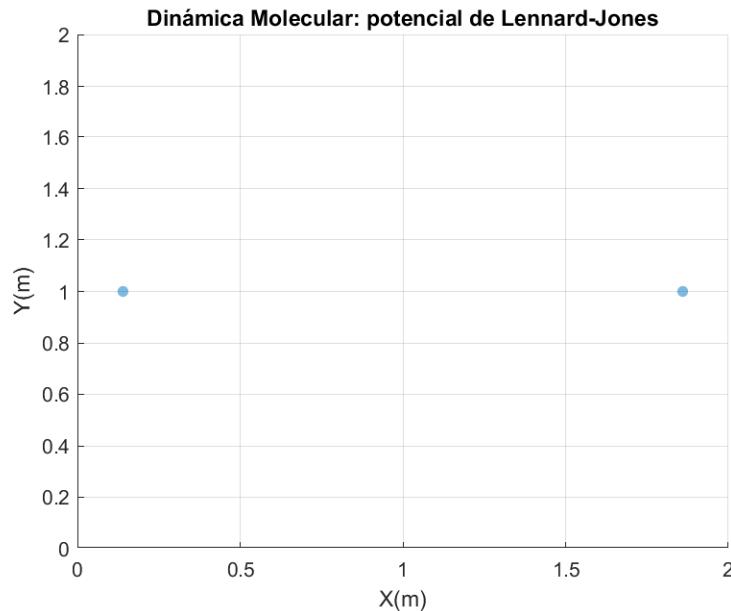


Figura 24: Distancia de equilibrio del LJP para  $\varepsilon$  y  $\sigma$  equivalentes a 1.

Es así que las partículas se atraen nuevamente hasta alcanzar una distancia 1.03 m (Figura 25). Esta es la distancia las partículas presentan un potencial tan grande que nuevamente, hace que las partículas comiencen a repelerse.

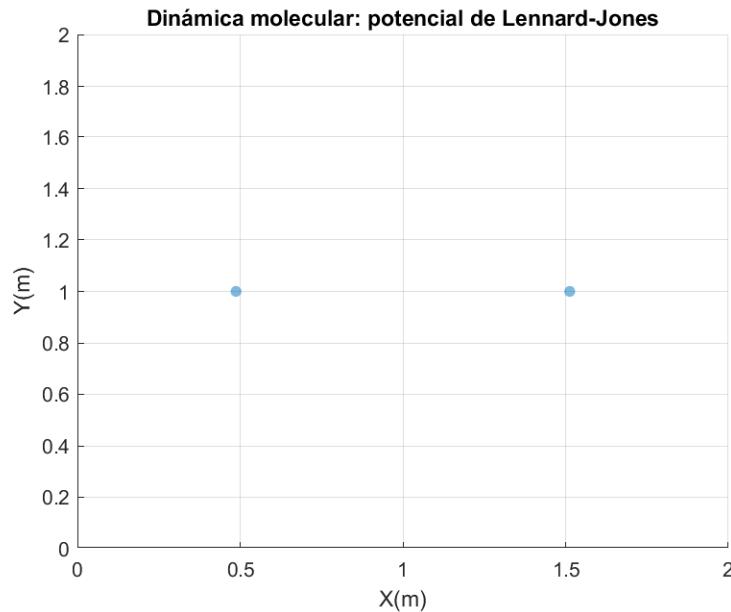


Figura 25: Distancia de repulsión

Este proceso se sigue repitiendo, no obstante, entre cada vuelta, se pierde potencial, causando que poco a poco la distancia  $r$  se reduzca hasta alcanzar la distancia que

equivale a  $\varepsilon$ . Esta distancia es considerada como la distancia de equilibrio y, a partir de este punto, la energía potencial comienza a reducirse. Esta distancia se puede observar en la Figura 26

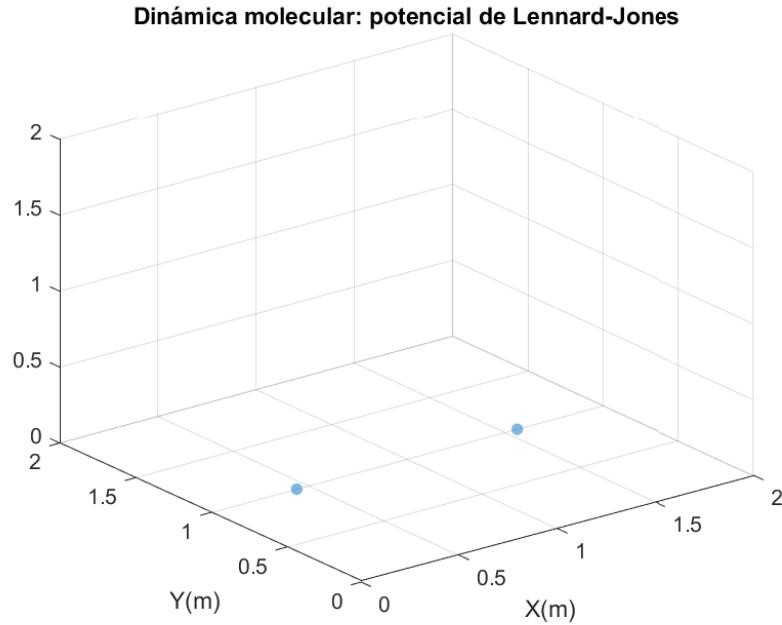


Figura 26: Distancia de equilibrio del LJP para  $\varepsilon$  y  $\sigma$  equivalentes a 1.

### 7.1.5. Simulación de 8 partículas 2D

Para continuar probando el algoritmo de dinámica molecular, se incrementó la cantidad de partículas dentro de la simulación a 8 y el espacio de simulación a  $10 \times 10$  m. Las posiciones y velocidades iniciales de cada una de las partículas se establecieron de forma arbitraria. Como se evidencia en la Figura 27, este algoritmo grafica las trayectorias en función del tiempo de cada una de las partículas, y diferencia la posición inicial de posición final, el círculo representa el inicio mientras que la estrella el final. Adicionalmente, este algoritmo simula cómo cada una de las partículas interactúa entre sí bajo la influencia de fuerzas intermoleculares modeladas por el potencial de Lennard-Jones y muestra las trayectorias de cada una de las partículas.

Como se evidencia, las trayectorias o líneas de color celeste, corinta y amarillo, son las trayectorias que presentan más irregularidades. Estas no son constantes como la trayectoria roja o verde que se encuentran en la parte superior del gráfico. Esto se debe a que en los puntos de irregularidades, las partículas presenciaron los efectos directos del LJP. Al tener una distancia  $r$  menor a  $\sigma$  se atraen, pero al acercarse lo suficiente, se repelen, tal y como se evidenció en la primera prueba con dos partículas.

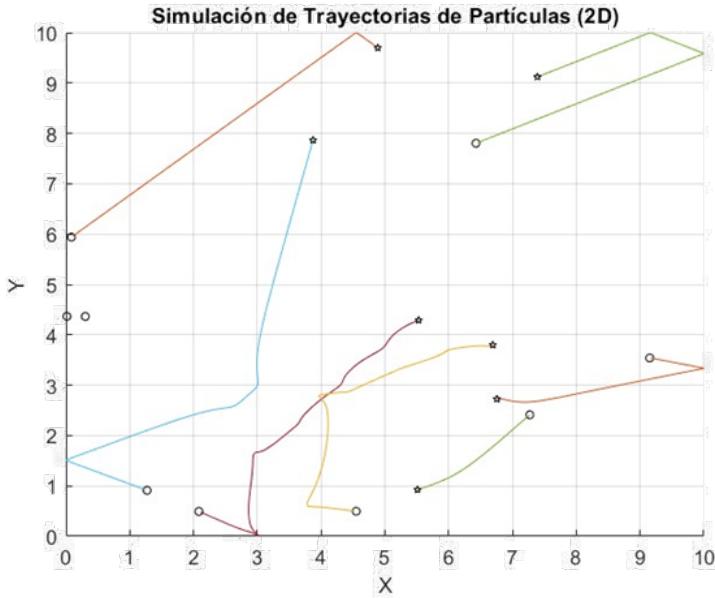


Figura 27: Dinámica molecular implementada a 8 partículas en un espacio bidimensional.

#### 7.1.6. Simulación de 8 partículas 3D

En la Figuras 28 y 29 se muestran las trayectorias de las partículas en un entorno de tridimensional. Como se observa, se tienen igual 8 partículas con trayectorias más constantes o rectas que en la simulación en 2D. Al incrementar una dimensión, y mantener la misma proporción de espacio que en la simulación anterior, las partículas tienen un mayor espacio de desplazamiento. Esto reduce la probabilidad de que las partículas se acerquen lo suficiente para experimentar repulsión y se encuentren los suficientemente alejadas para no experimentar atracción.

En otras palabras, la distancia,  $r$ , a la que se encuentran las partículas no es lo suficientemente corta para que la fuerza de interacción de repulsión entre ellas sea dominante provocando una alteración sustancial en sus trayectorias. En cambio, en un espacio más reducido, las posibilidades de estar a una distancia  $r$  suficientemente corta aumentan y, en consecuencia, las trayectorias presentan más cambios en dirección ya que se existen más variaciones en la fuerza de interacción de las partículas.

**Simulación de Trayectorias de Partículas (3D)**

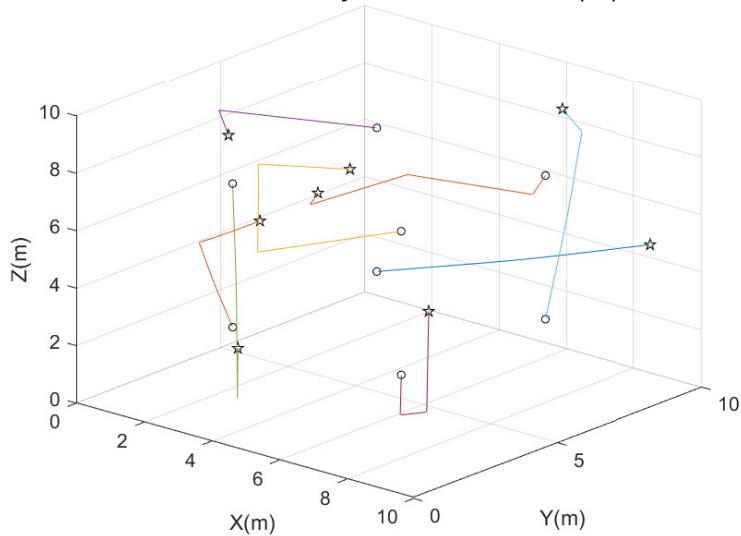


Figura 28: Dinámica molecular implementada a 8 partículas en un espacio tridimensional con vista isométrica.

**Simulación de Trayectorias de Partículas (3D)**

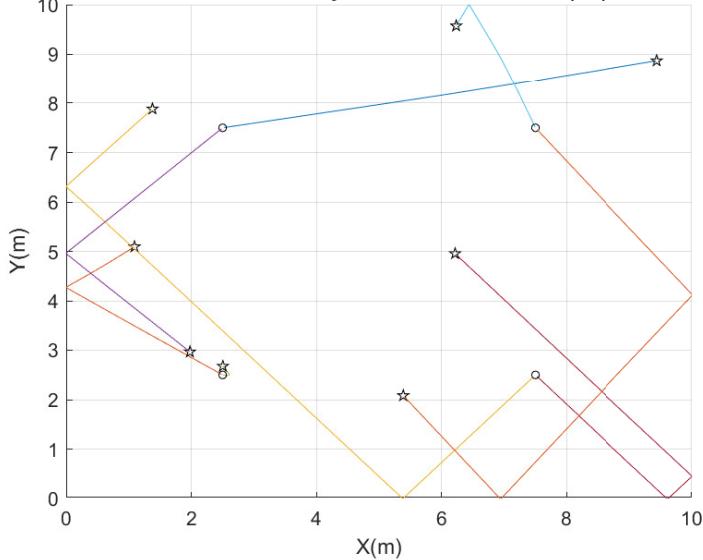


Figura 29: Dinámica molecular implementada a 8 partículas en un espacio tridimensional con vista frontal.

Como se mencionó, se observaron bastante bien los efectos producidos por el LJP, pero se quería evaluar el efecto de incrementar todavía más el número de partículas. Además, se colocaron distribuidas en el espacio a una misma distancia entre partículas. Para evidenciar cuál sería el resultado, se colocaron 100 partículas en un espacio bidimensional y posterior, en un espacio tridimensional. En la simulación de la Figura 30, se colocaron 100 partículas en 20 grupos de 5. En cada grupo, cada una de las partículas tenían la misma posición inicial. Esto

ocasionó que el potencial entre las partículas tendiera a infinito, por ende, las 5 partículas en cada grupo presentaron fuerzas de repulsión a corta distancia extremadamente grandes. De modo que a los primeros pasos de tiempo, las partículas fueron separadas velozmente.

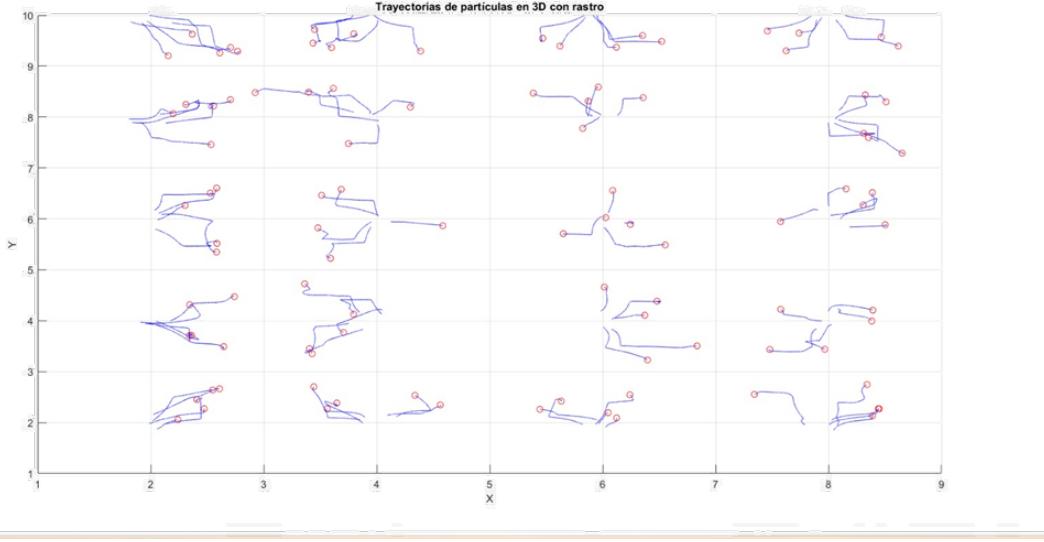


Figura 30: Simulación de 100 partículas colocadas en distancias equidistantes.

No obstante, en este tipo de simulación, a la cual se le llamará simulación de trayectorias estática, no es posible observar con claridad si en un momento dado, dos partículas se encuentran muy cercanas con direcciones dirigidas una hacia la otra. En consecuencia a que, únicamente, se muestran las trayectorias seguidas por las partículas y no es posible observar el movimiento de cada una en tiempo real. Por lo tanto, se realizaron simulaciones dinámicas, esto se refiere a que la simulación muestra en tiempo real la forma en la que se desplazan las partículas a través del espacio establecido. Si se desean observar los resultados de estas, se colocaron en una carpeta llamada “GIFs” con cada una de las simulaciones dinámicas realizadas. Esta se encuentra en el enlace al repositorio en línea proporcionado en el Anexo 1.

Diferentes capturas de una de las simulaciones realizadas se presentan desde la Figura 31 hasta la Figura 34. Esta simulación contiene 100 partículas distribuidas equidistantes unas de las otras en un espacio de igual tamaño que las simulaciones anteriores. Esta disposición puede observarse en la Figura 31 que muestra una vista de los ejes Z y X de la simulación, y la Figura 32, que presenta una vista tridimensional isométrica.

Al inicio de la simulación, las partículas comienzan a desplazarse de manera aleatoria. Debido a esta dinámica y al hecho que las partículas se encuentran en un espacio limitado, con el tiempo, se espera que algunas partículas se aproximen entre sí. En esta simulación se establecieron unas constantes  $\sigma$  y  $\varepsilon$  equivalentes a 1. Lo que quiere decir que, al tener una distancia  $r$  entre partículas menor a 1 se experimentarán efectos del potencial de Lennard-Jones.

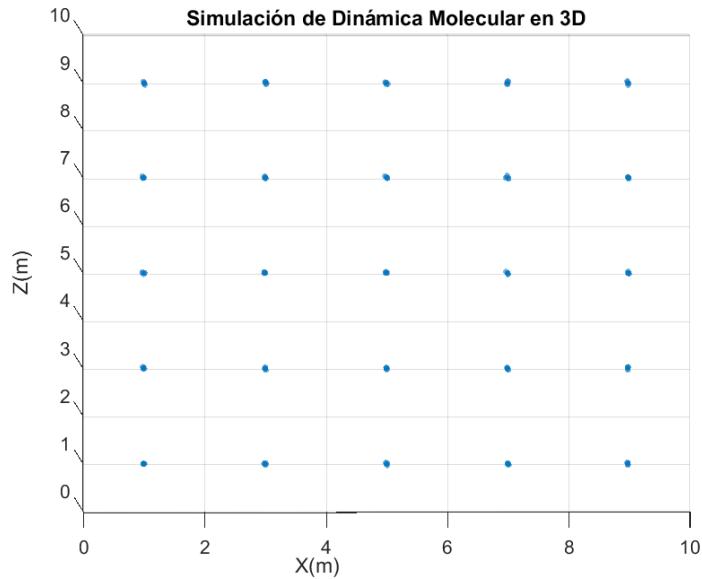


Figura 31: Vista frontal de la simulación dinámica de 100 partículas distribuidas de forma arbitraria.

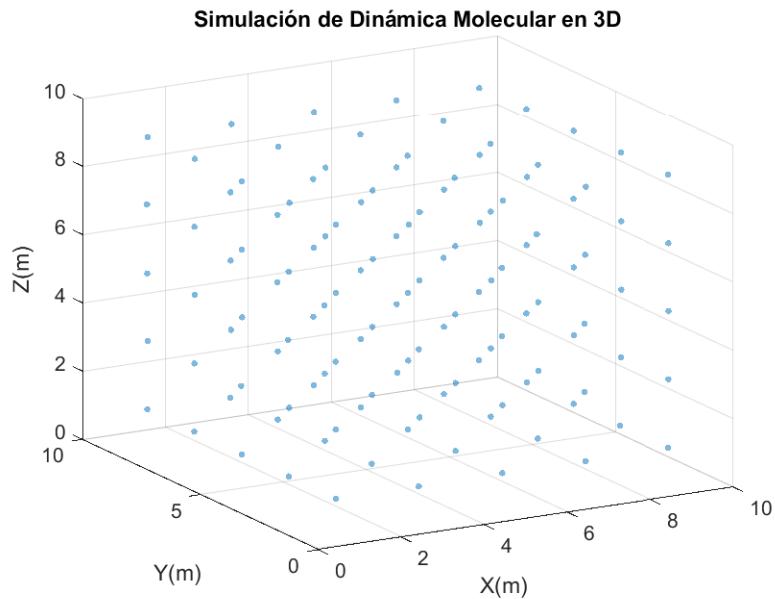


Figura 32: Vista isométrica de la simulación dinámica de 100 partículas distribuidas de forma arbitraria.

Con el transcurso de la simulación, se evidencian comportamientos interesantes. Cuando algunas partículas comienzan a acercarse, se forman pequeños grupos o agregados tal y como se muestra en la Figura 33. En donde los círculos rojos muestran pequeñas agrupaciones creadas al pasar 10 segundos en la simulación. Una vez que algunas partículas se agrupan debido a las interacciones atractivas, esto presenta un efecto en cadena. Es decir, las partículas que inicialmente no estaban tan cerca de las otras se ven atraídas hacia el grupo formado, lo que hace que el agrupamiento se amplíe y termine viéndose como la Figura 34.

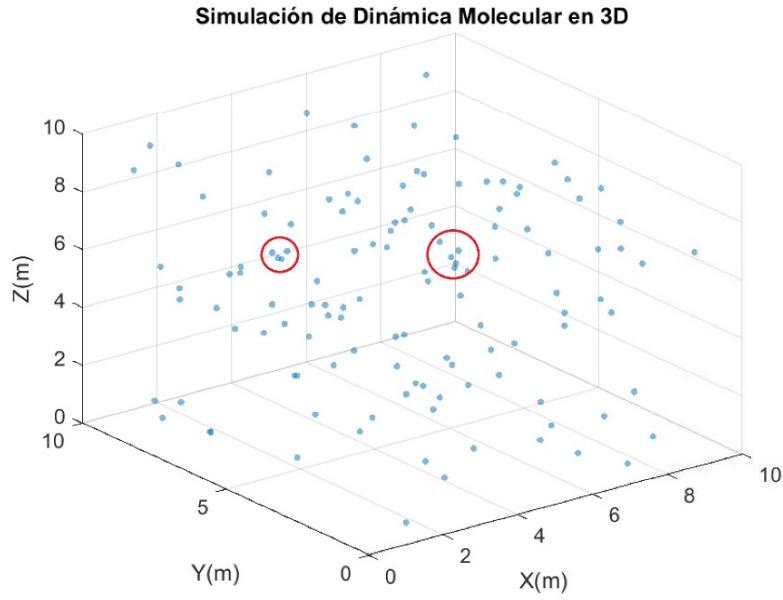


Figura 33: Agrupaciones iniciales en la simulación dinámica de 100 partículas distribuidas de forma arbitraria.

Es así que a partir de distintas pruebas, se evidencia que una distribución inicial aleatoria de las partículas puede llevar a que algunas de ellas se encuentren en proximidad al inicio de la simulación, lo que aumenta la probabilidad de que se atraigan mutuamente. Asimismo, las condiciones iniciales y las velocidades iniciales aleatorias también pueden influir en cómo se desarrolla la simulación. Si algunas partículas tienen velocidades iniciales que las acercan a otras, esto puede contribuir a un agrupamiento mayor en menor tiempo.

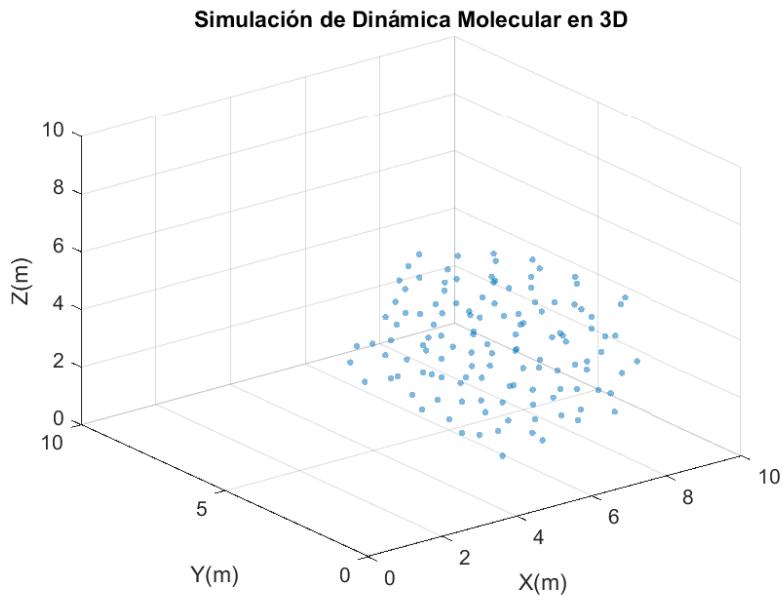


Figura 34: Simulación dinámica con el efecto del LJP para 100 partículas luego de 25 s.

# CAPÍTULO 8

---

## Pruebas físicas de los algoritmos de física granular

---

En este capítulo se presenta una detallada exploración de las pruebas de validación realizadas en dos etapas cruciales del proyecto: las pruebas de validación Alphabot2 y las pruebas de validación de los algoritmos de física granular en un entorno físico. En primer lugar, se aborda el proceso de replicación de las pruebas del seguidor de línea, basadas en el trabajo previo realizado en 2022 por Luis Nij y el Lic. Juan Diego Robles. Estas pruebas involucraron el uso de agentes robóticos móviles Alphabot 2, aprovechando su sistema mecánico de movimiento y sensores infrarrojos.

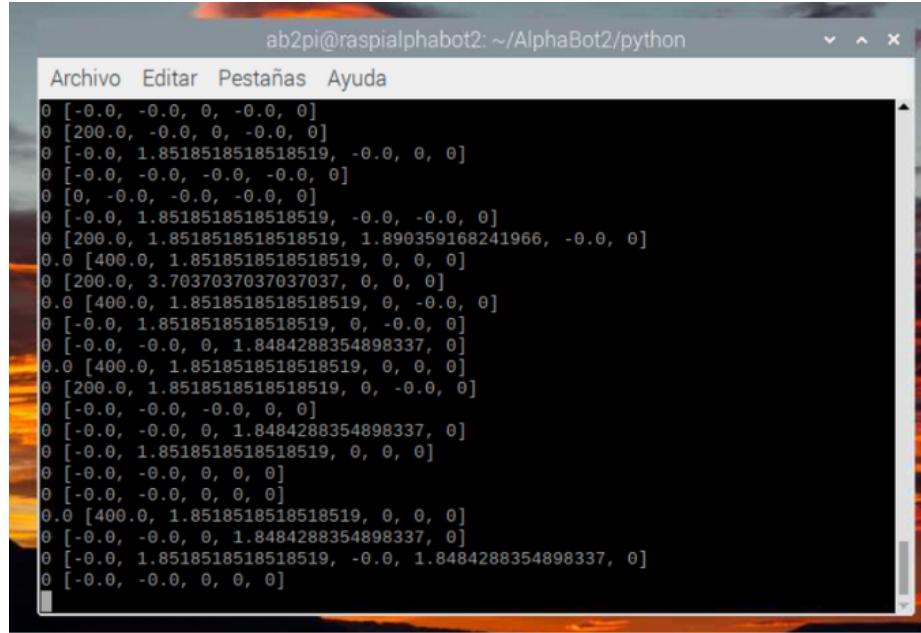
La segunda parte de este capítulo se centra en las pruebas de validación del algoritmo de Dinámica Molecular, una fase esencial en la implementación de algoritmos de física granular en agentes robóticos móviles. Estas pruebas implicaron el uso de los agentes Pololu 3Pi+ 32u4 OLED en conjunto con la plataforma Robotat. Se detallan las pruebas preliminares, la adaptación del algoritmo al entorno físico y la reducción del espacio de trabajo para evitar colisiones y daños al equipo prestado. Este capítulo ofrece un acercamiento a las pruebas de validación que respaldan la implementación exitosa de algoritmos de física granular en agentes robóticos móviles.

### 8.1. Pruebas de validación Alphabot2

Para replicar la prueba del seguidor de linea realizada en 2022 por Luis Nij y el Lic. Juan Diego Robles, se utilizaron nuevamente los agentes robóticos móviles Alphabot 2. De estos se utilizó el sistema mecánico de movimiento del agente y los sensores infrarrojos. Como apoyo del correcto funcionamiento del robot, se utilizó el Manual de usuario del mismo el cual se encuentra en el Anexo 2 para identificar los pines a los que los componentes electrónicos a utilizar iban a estar conectados. La idea de utilizar los sensores infrarrojos, los cuales tienen emisores y receptores que pueden detectar la reflexión de la luz infrarroja en el suelo

y mediante programación, el robot a programar sigue la línea.

Para realizar el código se importaron diferentes librerías, incluyendo RPi.GPIO para el control y manejo de pines GPIO en una Raspberry Pi, AlphaBot2 para controlar el robot AlphaBot2, rpiws281x para controlar la tira de LEDs RGB, y TRSensors para manejar los sensores infrarrojos. Luego, se establecieron algunos parámetros iniciales, como el número de LEDs en la tira (LEDCOUNT), el pin GPIO utilizado para controlar los LEDs (LEDPIN), la frecuencia de la señal de los LEDs (LEDFREQHZ), entre otros. Posteriormente se realizó la calibración de los sensores, por lo que se muestra los valores mínimos y máximos de cada uno de los sensores tal y como se muestra en la Figura 35. El programa entra en un bucle principal que ejecuta la lógica de seguimiento de línea. Utiliza la salida de los sensores infrarrojos para calcular una diferencia de potencia que se utiliza para controlar los motores del robot y mantenerlo en la línea. La función *Wheel* se utiliza para cambiar el color de la tira de LEDs RGB mientras el robot sigue la línea.



A terminal window titled "ab2pi@raspialphabot2: ~/AlphaBot2/python" displaying sensor data. The data consists of a series of lines, each starting with a value (0 or 0.0) followed by a list of four numbers representing sensor readings. The values fluctuate between -0.0 and 1.8518518518519.

```

ab2pi@raspialphabot2: ~/AlphaBot2/python
Archivo Editar Pestañas Ayuda
0 [-0.0, -0.0, 0, -0.0, 0]
0 [200.0, -0.0, 0, -0.0, 0]
0 [-0.0, 1.8518518518519, -0.0, 0, 0]
0 [-0.0, -0.0, -0.0, -0.0, 0]
0 [0, -0.0, -0.0, -0.0, 0]
0 [-0.0, 1.8518518518519, -0.0, -0.0, 0]
0 [200.0, 1.8518518518519, 1.890359168241966, -0.0, 0]
0.0 [400.0, 1.8518518518519, 0, 0, 0]
0 [200.0, 3.7037037037037037, 0, 0, 0]
0.0 [400.0, 1.8518518518519, 0, -0.0, 0]
0 [-0.0, 1.8518518518519, 0, -0.0, 0]
0 [-0.0, -0.0, 0, 1.8484288354898337, 0]
0.0 [400.0, 1.8518518518519, 0, 0, 0]
0 [200.0, 1.8518518518519, 0, -0.0, 0]
0 [-0.0, -0.0, -0.0, 0, 0]
0 [-0.0, -0.0, 0, 1.8484288354898337, 0]
0 [-0.0, 1.8518518518519, 0, 0, 0]
0 [-0.0, -0.0, 0, 0, 0]
0 [-0.0, -0.0, 0, 0, 0]
0.0 [400.0, 1.8518518518519, 0, 0, 0]
0 [-0.0, -0.0, 0, 1.8484288354898337, 0]
0 [-0.0, 1.8518518518519, -0.0, 1.8484288354898337, 0]
0 [-0.0, -0.0, 0, 0, 0]

```

Figura 35: Despliegue de valores máximos y mínimos de los sensores infrarrojos.

Posterior a realizar el código, se creó la trayectoria de la Figura 36 utilizando hojas en blanco y un marcador para trazar la línea, y se ejecutaron las pruebas. Las primeras pruebas mostraron un control variante, ya que en ciertas pruebas el agente robótico seguía la línea, mientras que en otras, se desfasaba del camino. Para mejorar estos resultados, se modificaron los parámetros del controlador PID implementado y se obtuvo un comportamiento más estable.

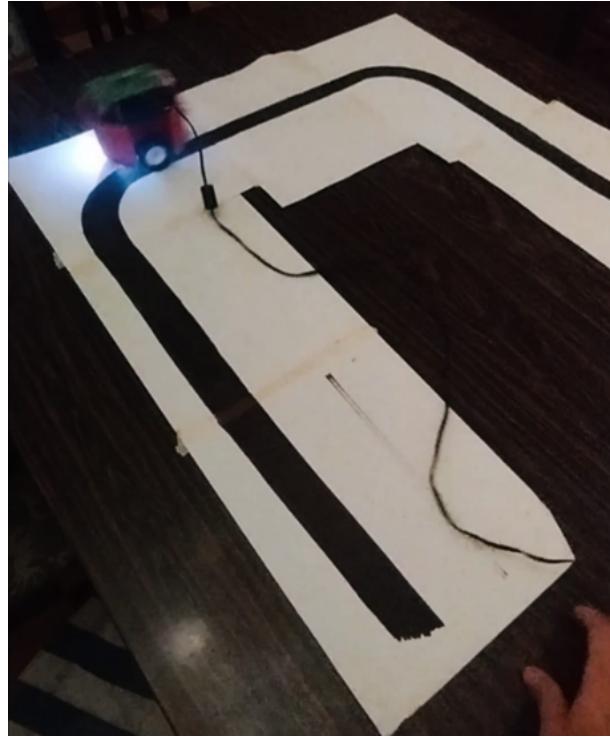


Figura 36: Recreación de pruebas de seguimiento de línea con robot AlphaBot2.

Estas pruebas de validación fueron esenciales para determinar cuáles agentes robóticos eran los más convenientes para utilizar en las pruebas físicas destinadas a la implementación de los algoritmos de física granular. Los agentes Pololu cuentan con un controlador para las velocidades de los motores que permiten andar a una velocidad estable y solicitada. Están configurados para conectarse como cliente al servidor Robotat, y por medio de un socket, obtienen los datos enviados. Es así que aceptan datos de Wifi desde cualquier dispositivo. A diferencia de los Alphabot2, los Pololu ya han sido probados y validados para mantener esa velocidad constante. Adicionalmente, se tienen múltiples agentes configurados de la misma manera con buena autonomía y permiten realizar múltiples pruebas durante largos períodos de tiempo. En consecuencia, los agentes robóticos seleccionados son los Pololu.

## 8.2. Pruebas de validación del algoritmo de Dinámica Molecular

Estas pruebas de validación requieren de la implementación del algoritmo de física granular en un entorno físico. Para llevar a cabo esta implementación, se emplearon los agentes robóticos móviles Pololu junto con la plataforma Robotat. En esta experimentación, la plataforma juega un papel esencial, ya que proporciona datos cruciales, como las coordenadas de posición y velocidad. Estos datos, que en las simulaciones computarizadas debían calcularse, ahora se obtienen directamente de la plataforma, lo que simplifica un poco el proceso experimental. Es así que el bucle de la simulación computarizada mostrada en la Figura 22, únicamente utiliza una función para obtener las coordenadas de cada uno de los robots, a

los cuales se les adhiere un marcador, y a partir de ello, se realiza un pequeño cálculo y se obtiene la velocidad de cada uno.

Para implementar el algoritmo en un entorno físico, se realizaron pruebas preliminares con un único agente. Se corroboró que se obtuvieran las coordenadas, velocidad y aceleración de forma correcta y luego, se evidenció que el funcionamiento al momento de implementar el algoritmo fuera acorde a lo esperado. Asimismo, en la implementación física se redujo el espacio físico a utilizar. Para evitar colisiones reales con las paredes de la plataforma y los robots, se redujo las dimensiones del espacio. Es así que en vez de utilizar las dimensiones de  $3.8 \times 4.8$  m, se redujo el espacio y se limitó a las dimensiones de  $1 \times 1$  m tal y como se evidencia en la Figura 37. Esta decisión fue realizada para probar poco a poco la implementación del algoritmo en los agentes y prevenir el daño del equipo prestado.

La Figura 37 muestra dos trayectorias. La línea de color azul representa la trayectoria computada, mientras que la representada por puntos de colores, es la seguida por el agente robótico. Con esta Figura se demostró que la trayectoria no fue seguida de la mejor forma posible. Existen ciertas partes en donde la trayectoria realizada por el agente se encuentra desviada de la original. Por lo que para arreglar esto, se simplificó la trayectoria computada y se tunearon los valores de las constantes  $Kpo$ ,  $kpi$  y  $alpha$  del controlador PID.

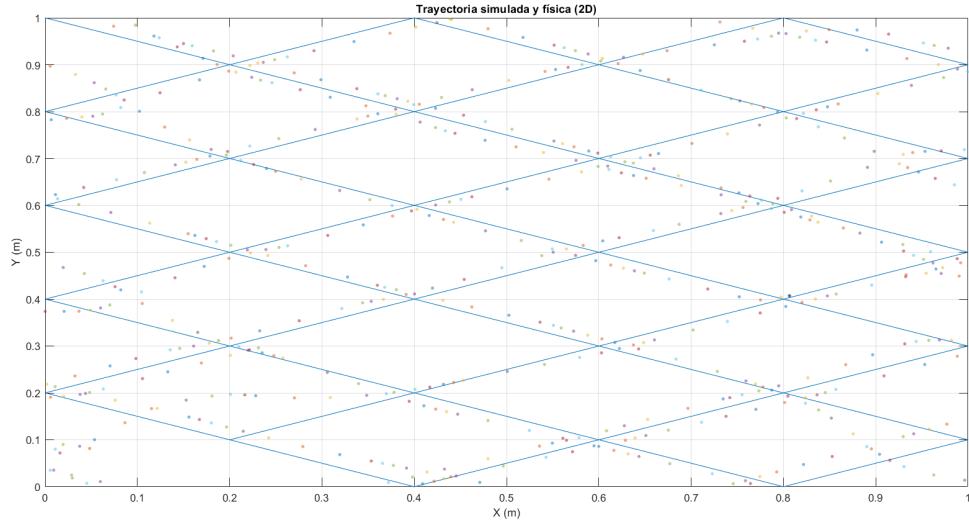


Figura 37: Trayectoria computarizada (línea azul) y trayectoria seguida por el agente robótico (línea punteada).

Luego de realizar diversas pruebas y, modificar las constantes del controlador se obtuvo el mejor resultado que se evidencia en la Figura 38. Para esta prueba se utilizó un  $Kpo$ , un  $kpi$  y un  $alpha$  equivalentes a 12, 0.0002 y 0.95 respectivamente, con un error de acercamiento de 1 cm. Cabe mencionar que el controlador PID utilizado es un controlador punto a punto, esto significa que al momento en el que el agente esté lo suficientemente cerca al punto de meta, se actualiza el siguiente punto. En este caso, la actualización de este punto se realiza utilizando el algoritmo de dinámica molecular implementado y la distancia suficientemente cercana es indicada por el parámetro de error (eP) entre punto a punto.

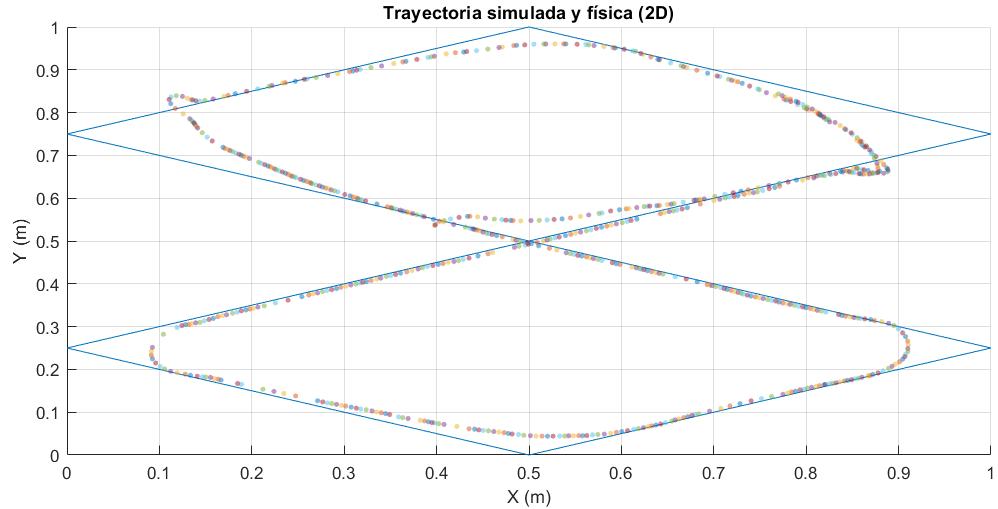


Figura 38: Trayectoria computarizada y trayectoria seguida por el agente robótico luego de realizar el tuneo de las constantes.

Como se observa en las partes más constantes de la trayectoria, se presenta un seguimiento bastante acertado. No obstante, cuando se hace referencia a las colisiones elásticas que las partículas experimentan con el límite del espacio establecido, se evidencia que la trayectoria seguida por el robot no llega correctamente al punto exacto de impacto. En cambio, realiza un giro aproximadamente 10 cm antes de alcanzar dicho punto. Este comportamiento puede atribuirse al error punto a punto del controlador. Debido al ángulo extremadamente agudo, la distancia desde el punto que el robot debe seguir se ajusta de tal manera que se cumple el error de aproximación antes de llegar al punto exacto de colisión. Esta situación ocasiona la generación prematura del siguiente punto antes de alcanzar la distancia teórica deseada, provocando que el robot inicie su giro antes de lo previsto.

En consecuencia a este inconveniente, se llevaron a cabo cinco pruebas para evaluar el comportamiento de la trayectoria del robot al variar el ángulo en el que la partícula colisiona con el límite del espacio. En la primera prueba, se estableció un ángulo de  $54^\circ$  aproximadamente, como se muestra en la Figura 39. Este equivale al ángulo generado por la trayectoria computarizada de la Figura anterior (38) y, al igual que en esa trayectoria, el Pololu realizó el giro 10 cm previo al punto donde se genera la colisión.

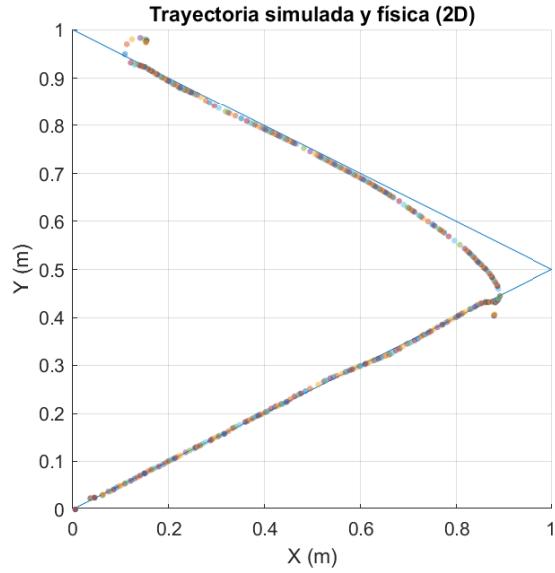


Figura 39: Trayectoria computarizada y trayectoria seguida por el agente robótico a un ángulo de  $54^\circ$ .

Posterior a esta prueba, el ángulo de rebote con el límite del espacio se incrementó cuatro veces más, obteniendo  $64^\circ$ ,  $80^\circ$ ,  $103^\circ$  y  $136^\circ$ . Estos pueden observarse en las Figuras 40, 41, 42 y 43 respectivamente. A partir de estas pruebas, se evidencia que al incrementar el ángulo, se obtiene un mejor seguimiento de trayectoria por parte del robot ya que el ángulo de giro no es tan agudo, y la diferencia entre el punto exacto de la colisión y el giro dado por el robot se redujo de 10 cm a 4.5 cm aproximadamente.

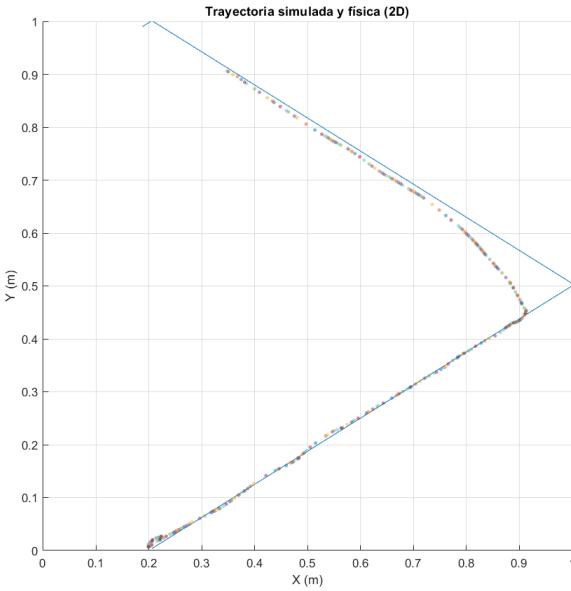


Figura 40: Trayectoria computarizada y trayectoria seguida por el agente robótico a un ángulo de  $64^\circ$  aproximadamente.

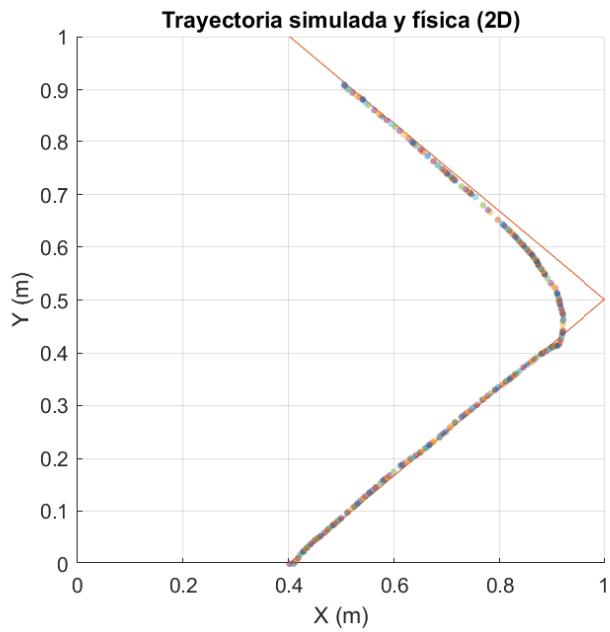


Figura 41: Trayectoria computarizada y trayectoria seguida por el agente robótico a un ángulo de  $80^\circ$ .

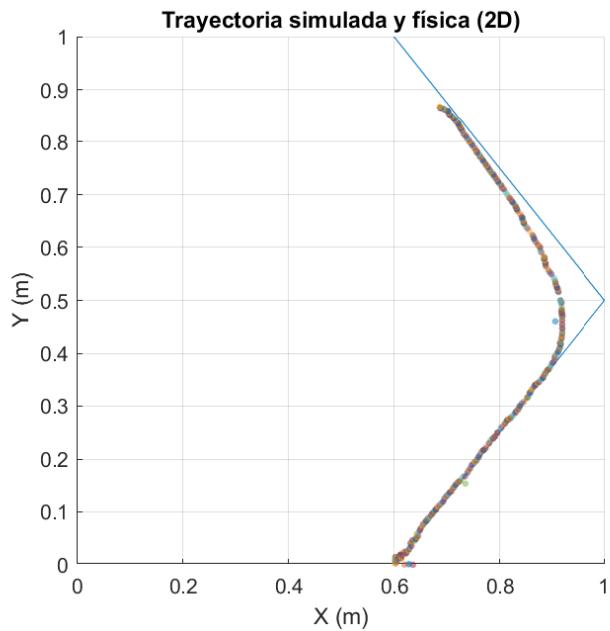


Figura 42: Trayectoria computarizada y trayectoria seguida por el agente robótico a un ángulo de  $103^\circ$ .

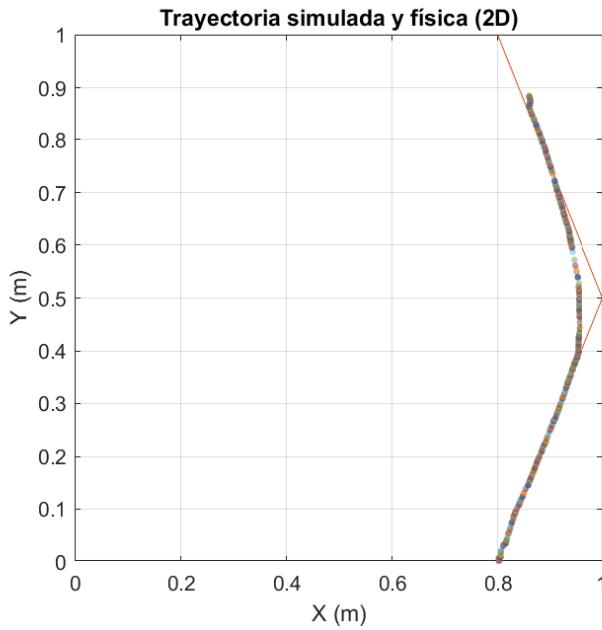


Figura 43: Trayectoria computarizada y trayectoria seguida por el agente robótico a un ángulo de  $136^\circ$ .

### 8.2.1. Suavizado de las trayectorias

Los resultados previos motivaron la exploración de una solución para mitigar el error generado por el robot al no llegar completamente a los puntos donde ocurren las colisiones elásticas con la pared. Esta solución implica la suavización de las trayectorias generadas. Para esto se utilizó la función *bsplinepolytraj* de MATLAB para establecer trayectorias B-splines cúbicas por tramos que se ajustan al polígono de control definido por los puntos de control (*controlPoints*). La trayectoria se discretiza de manera uniforme entre los tiempos de inicio y fin especificados en el intervalo de tiempo (*tInterval*). La función devuelve las posiciones, velocidades y aceleraciones en las muestras de tiempo especificadas en *tSamples*. Además, proporciona la representación polinómica por tramos (*pp*) de la trayectoria en función del tiempo [34].

En la Figura 44, se representaron gráficamente dos trayectorias: la trayectoria computarizada original de color verde, y la trayectoria suavizada de color amarillo. Ambas trayectorias comienzan en la marca circular roja, y finalizan en la marca con forma de estrella negra. Adicional a estas marcas, se evidencia que la suavización de la trayectoria es útil y sigue una curva a 3 cm del punto de colisión.

**Suavizado en la simulación de Trayectorias de Partículas (2D)**

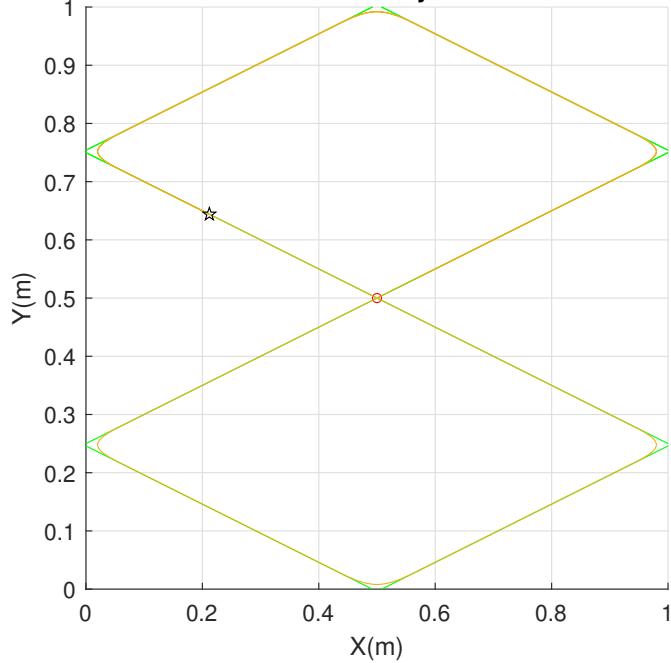


Figura 44: Suavizado en la trayectoria

Tras lograr un suavizado bastante sutil, se deseó verificar si era posible alcanzar un suavizado más pronunciado. Como se demostró en las pruebas con diferentes ángulos, se esperaba que un ángulo más amplio contribuyera a una representación física más precisa de las colisiones de las partículas. Con este objetivo en mente, se optó por seleccionar un número reducido de puntos en la trayectoria. Por lo que se seleccionó un punto cada 8 puntos, para definir la trayectoria de control B-spline. Al reducir la cantidad de puntos a seleccionar, se generan segmentos más largos y la interpolación no sigue la trayectoria original de manera tan estricta debido a la menor cantidad de puntos seleccionados. Esto resulta en una curva más suavizada, aunque también más “exagerada” que se encuentra aproximadamente a 10 cm del punto de colisión, como se muestra en la Figura 45.

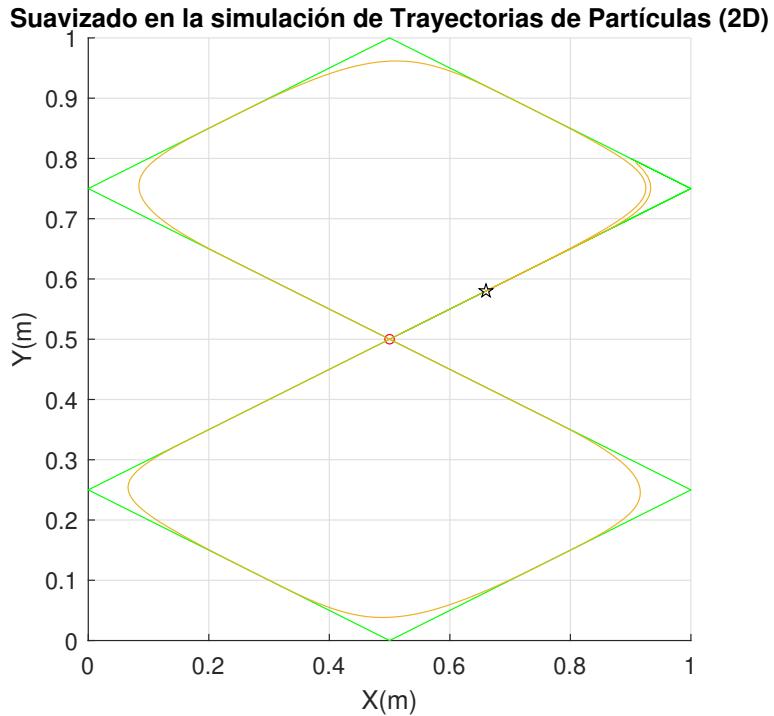


Figura 45: Curva más suavizada para el recorrido del Pololu.

### 8.2.2. Cantidad de puntos por trayectoria

Durante la ejecución del proceso de suavizado de trayectoria, fue necesario ajustar la cantidad de puntos seleccionados para lograr una trayectoria con un suavizado más pronunciado. Esto generó la inquietud de evaluar el impacto que implica alterar la cantidad de puntos en la precisión de la trayectoria seguida por el robot Pololu. Como respuesta a esta inquietud, se llevaron a cabo cuatro pruebas distintas, en las cuales se generó computacionalmente una trayectoria que posteriormente el agente robótico debía seguir. Es importante señalar que la trayectoria generada computacionalmente se representará como una línea amarilla, mientras que la línea punteada representará la trayectoria seguida por el agente.

En la primera prueba, se generó una trayectoria con 375 puntos, que se muestra en la Figura 46. A primera instancia, la trayectoria del agente robótico, generada con estos puntos, presenta similitudes en su forma. Sin embargo, se observa una significativa discrepancia en las esquinas de la figura, lo que motivó la realización de un análisis estadístico detallado.

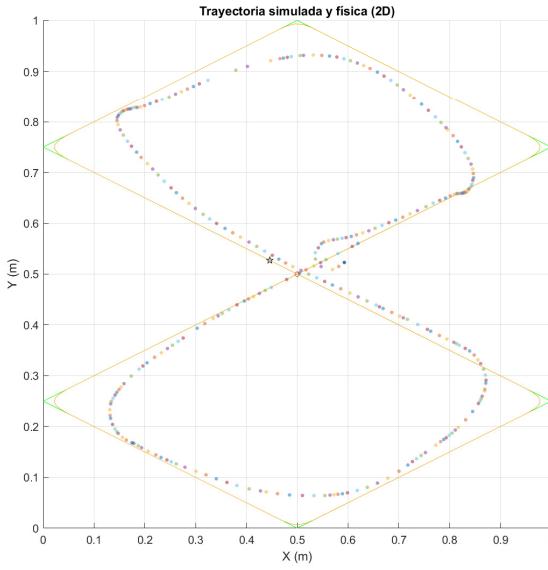


Figura 46: Trayectoria con 375 puntos.

La utilización del Error Cuadrático Medio (ECM) y su contraparte más interpretable, la Raíz del Error Cuadrático Medio (RMSE), proporciona una evaluación integral de la precisión de las trayectorias generadas. El ECM, al proporcionar una medida promedio de la discrepancia cuadrática entre los valores observados y los valores predichos, brinda una indicación general de la calidad del ajuste del modelo para cada eje.

En el eje  $X$ , el ECM de  $1.55 \times 10^{-2} \text{ m}^2$  sugiere que, en promedio, las predicciones difieren cuadráticamente de los valores observados. Sin embargo, para una interpretación más intuitiva, se calculó el (RMSE), que resultó en una magnitud de 0.1245 m. Este valor indica que el promedio del error en el eje  $X$  equivale a 12.45 cm. En comparación, en el eje  $Y$ , el ECM de  $1.33 \times 10^{-2} \text{ m}^2$  indica una discrepancia promedio cuadrática. Al calcular el RMSE, se obtuvo una magnitud de 0.1153 m, lo que refleja que la magnitud promedio del error en este eje equivale a 11.53 cm. Siendo este 7.39 % menor al error presentado en el eje  $X$ .

Adicionalmente, se realizó un análisis detallado del ECM para cada uno de los puntos de las trayectorias. En la Figura 47, se muestran dos series de datos distintos una en azul correspondiente al eje  $X$  y otra en naranja al eje  $Y$ . Cabe mencionar que estos colores de series se mantendrán constantes en las 4 pruebas. Ambas series exhiben un comportamiento altamente fluctuante en donde parte del error generado en los primeros puntos se debe a que, al momento de iniciar la trayectoria, el robot realizó un giro y luego ejecutó la trayectoria. Además, al observar la Figura, se identifican cuatro segmentos específicos en los cuales la variación es significativa, visualizados como picos en el gráfico. Estos picos, identificados en los intervalos 19-37, 91-109, 237-267 y 297-337, señalan áreas específicas a lo largo de la trayectoria donde se registraron las mayores discrepancias entre los valores predichos y los observados. Su presencia resalta regiones críticas donde el modelo presenta un rendimiento menos preciso, como por ejemplo, los cambios de dirección de la partícula de la Figura 46 al colisionar elásticamente contra los límites de espacio del eje  $X$ .

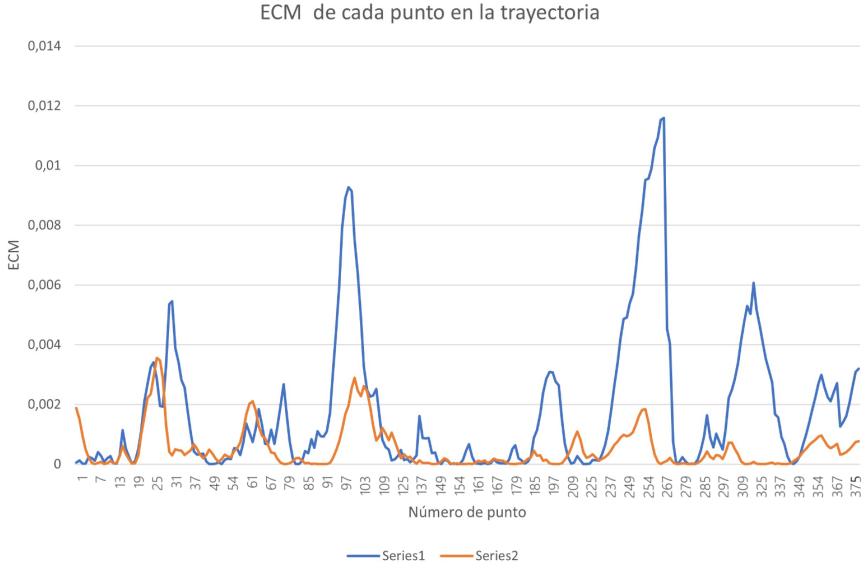


Figura 47: ECM de cada punto de la trayectoria.

En la segunda prueba, se generó una trayectoria con 600 puntos, la cual se presenta en la Figura 48. Cualitativamente, se observó una leve mejora en la trayectoria seguida. Al analizar cuantitativamente la trayectoria, se obtuvo un ECM en el eje  $X$  de  $1.88 \times 10^{-3} \text{ m}^2$ , con un RMSE de 0.04336 m. En comparación con los resultados obtenidos en el eje  $X$  de la prueba anterior, se logró una mejora del 65.17 %. Por otro lado, en el eje  $Y$ , se obtuvo un ECM de  $6.38 \times 10^{-4} \text{ m}^2$  y un RMSE de 0.0253 m. En contraste con los resultados obtenidos en el eje  $Y$  previamente, en esta prueba se logró una mejora del 77.94 %.

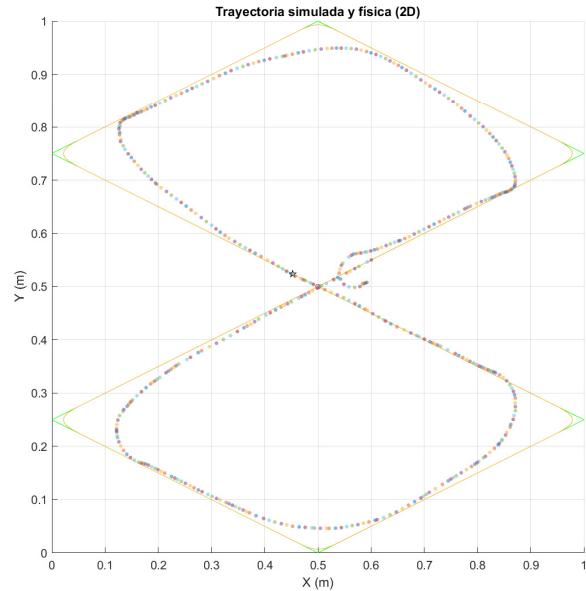


Figura 48: Trayectoria con 600 puntos.

Para esta prueba, el análisis del ECM para cada uno de los puntos de las trayectorias se evidencia en la Figura 49. Al analizar los resultados, se evidencia que el comportamiento del ECM presenta menos fluctuaciones que en la prueba anterior. No obstante, se siguen identifican cuatro segmentos de color azul específicos en los cuales la variación es significativa. Estos picos, identificados en los intervalos 28-86, 198-231, 332-387 y 487-529, señalan estas áreas donde se registraron las mayores discrepancias entre los valores predichos y los observados. Al igual que en la prueba anterior, su presencia resalta en donde se realizan los cambios de dirección de la partícula de la Figura 48 al colisionar elásticamente contra el límite de espacio del eje  $X$ . Cabe destacar que, para la serie naranja, se presentan 6 picos distintivos, los cuales hacen referencias a las 6 colisiones que tuvo la partícula con los límites del eje  $X$  y eje  $Y$ .

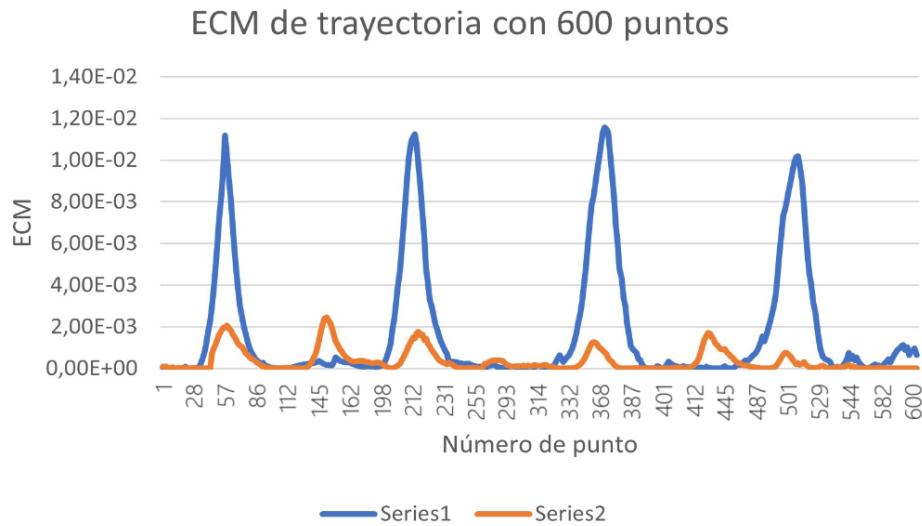


Figura 49: ECM de cada punto de la trayectoria de 600 puntos.

En la tercera prueba, se generó una trayectoria con 1000 puntos, la cual se presenta en la Figura 50. Cualitativamente, se observó una leve mejora de la trayectoria de la prueba dos con la trayectoria seguida en esta prueba. Al analizar cuantitativamente la trayectoria, se obtuvo un ECM en el eje  $X$  de  $1.37 \times 10^{-3} \text{ m}^2$ , con un RMSE de 0.03701 m. En comparación con los resultados obtenidos en el eje  $X$  de la primera prueba, se logró una mejora del 70.15 %. Por otro lado, en el eje  $Y$ , se obtuvo un ECM de  $6.20 \times 10^{-4} \text{ m}^2$  y un RMSE de 0.02488 m. En contraste con los resultados obtenidos en el eje  $Y$  de la primera prueba, se logró una mejora del 78.40 %.

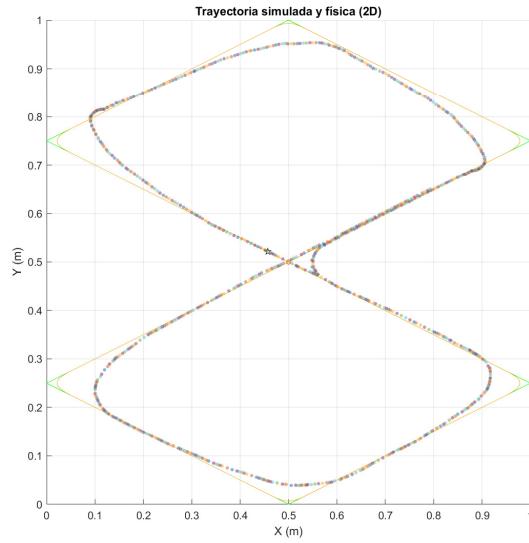


Figura 50: Trayectoria con 1000 puntos.

Para esta prueba, el análisis del ECM para cada uno de los puntos de las trayectorias se evidencia en la Figura 51. En esta prueba se evidencia que tanto el eje  $X$  como el  $Y$  presentan fluctuaciones prominentes. De igual forma, destacan 4 picos en la serie de color azul. Estos picos, identificados en los intervalos 56-100, 298-375, 512-546 y 723-789 resaltan en donde se realizaron los cambios de dirección de la partícula de la Figura 50 al colisionar elásticamente contra el límite de espacio del eje  $X$ . Adicionalmente, para la serie naranja, se distinguen 4 picos distintivos y 2 menos pronunciados, que hacen referencias a las 6 colisiones que tuvo la partícula con los límites del eje  $X$  y eje  $Y$ .

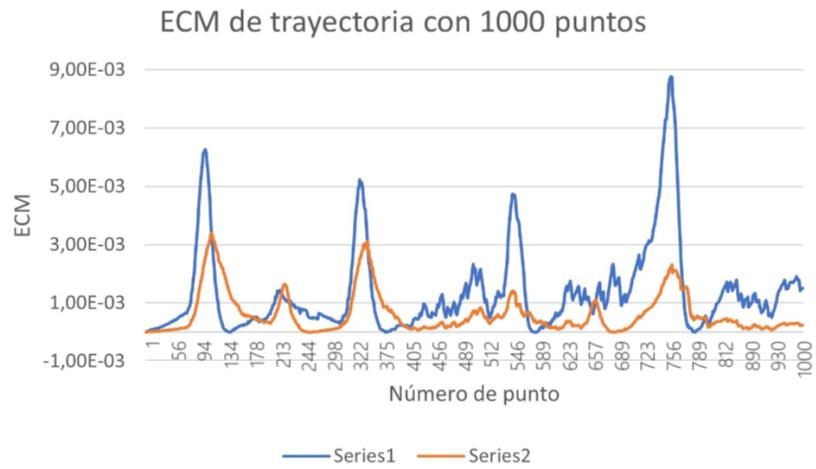


Figura 51: ECM de cada punto de la trayectoria de 1000 puntos.

Para la última prueba, se generó una trayectoria con 1500 puntos, que se puede observar en la Figura 52. Esta es la prueba que presenta un mejor seguimiento de trayectoria, y por

ende, un menor error cuadrático medio. En el eje  $X$  se obtuvo un ECM de  $3.88 \times 10^{-4} \text{ m}^2$ , con un RMSE de 0.01969 m. En comparación con los resultados obtenidos en el eje  $X$  de la primera prueba, se obtuvo una mejora del 84.15 %. Por otro lado, en el eje  $Y$ , se obtuvo un ECM de  $2.48 \times 10^{-4} \text{ m}^2$  y un RMSE de 0.01574 m. En contraste con los resultados obtenidos en el eje  $Y$  de la primera prueba, en esta prueba se obtuvo una mejora del 86.34 %.

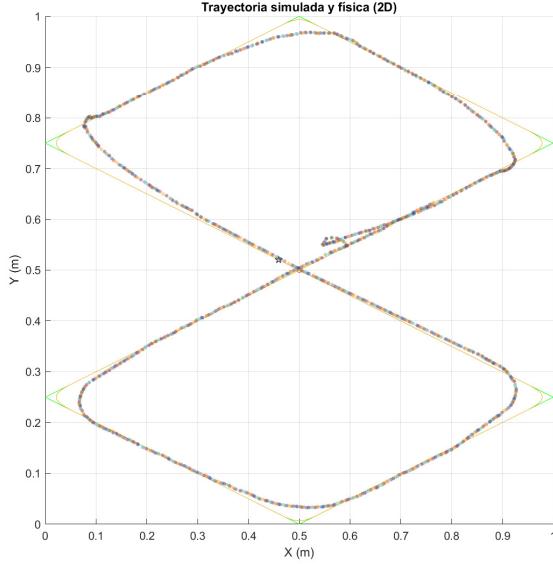


Figura 52: Trayectoria con 1500 puntos.

Para esta prueba, el análisis del ECM para cada uno de los puntos de las trayectorias se evidencia en la Figura 53. En esta prueba se tienen menos fluctuaciones en momentos donde la partícula de la Figura 52 presenta una trayectoria constante. Sin embargo, se siguen identificando cuatro picos de color azul en los intervalos 58-93, 312-345, 542-623 y 789-812. Asimismo, se identifican 6 picos de color naranja en los intervalos 58-93, 189-234, 312-345, 542-595, 700-723 y 789-800. Cabe resaltar que el último pico no es tan prominente y definido como los demás, no obstante, se continúa identificando que es una región donde la partícula presenció una colisión con el límite de espacio del eje  $Y$ .

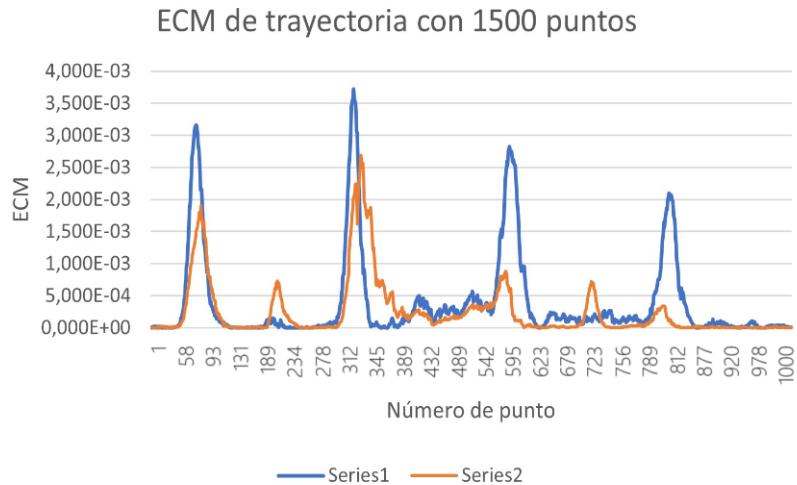


Figura 53: ECM de cada punto de la trayectoria de 1500 puntos.

Al finalizar el análisis individual de cada una de las pruebas, se analizó la tendencia de los ECM promedio de cada una de las pruebas. En la Figura 54, se evidencia que al utilizar una mayor cantidad de puntos para generar las trayectorias, menor será el error cuadrático medio obtenido por cada una de las trayectorias y más precisa será la representación física de la forma esperada. Esto se debe a que cuando se tiene más puntos de control en la trayectoria, se proporciona al modelo más información sobre cómo debería comportarse la trayectoria entre esos puntos. Esto permite una representación más detallada de la forma de la trayectoria. En esencia, cada punto de control actúa como una restricción para la representación, guiando la forma de la trayectoria entre puntos adyacentes. En cambio, si se tiene menos puntos de control, la representación será menos detallada, ya que hay menos restricciones para la forma de la trayectoria.

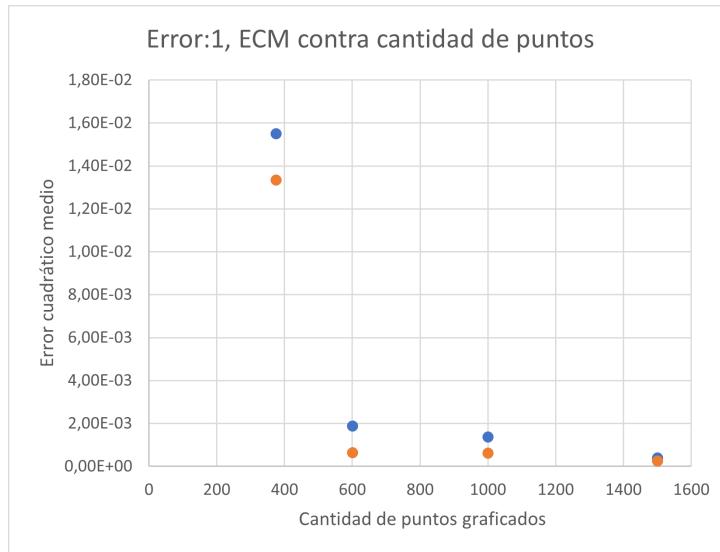


Figura 54: Error cuadrático medio contra cantidad de puntos utilizados para generar la trayectoria.

A parte de reducir el error cuadrático medio, la variación en la cantidad de puntos conlleva otras consecuencias, las cuales se reflejan en la velocidad del Pololu. En la Figura 55 se muestra como la velocidad promedio del agente robótico disminuye conforme se aumenta la cantidad de puntos. En la primera prueba la velocidad promedio es de 63 rpm, mientras que en la última se reduce a 16 rpm. Es así que a pesar de tener una alta precisión, se reduce significativamente la velocidad a la cual los Pololu ejecutan la trayectoria creada por el algoritmo.

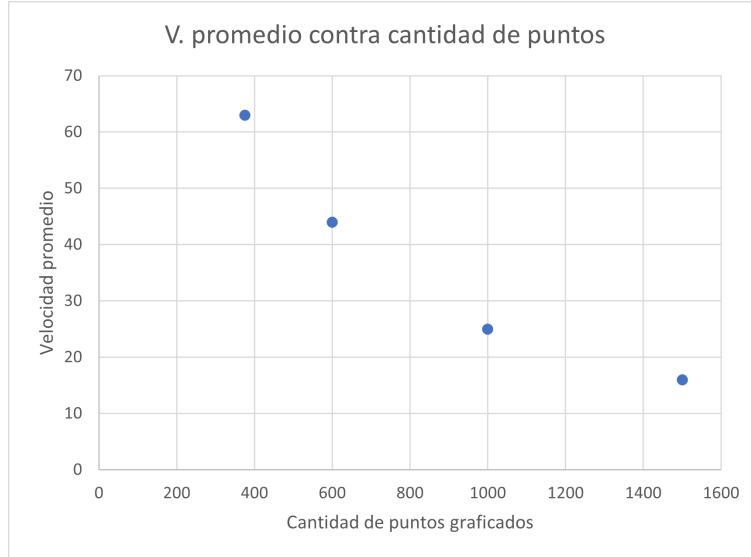


Figura 55: Velocidad promedio contra cantidad de puntos utilizados para generar la trayectoria.

### 8.2.3. Pruebas de validación con más agentes robóticos móviles

Posterior a implementar el algoritmo de dinámica molecular en un agente robótico móvil, realizar el tuneo y las pruebas pertinentes para verificar de qué forma se reduce el error al seguir la trayectoria, se incrementó la cantidad de Pololus de uno en uno. Para estas pruebas de validación se incrementó el espacio delimitado a  $2 \times 2$  m ya que, por el LJP, se requiere que las partículas tengan más espacio para movilizarse. Por ejemplo, en la subsección 7.1.4, se evidenció que las constantes  $\varepsilon$  y  $\sigma$  establecen la distancia entre centros de dos partículas mínima y máxima para experimentar los efectos de repulsión y atracción respectivamente. Es así que, si se tiene un espacio delimitado por  $1 \times 1$  m, y unas constantes equivalentes a 1, el espacio será insuficiente. Las partículas se repelerán y atraerán repetidamente, pero estas estarán ubicadas en los límites del espacio causando que la simulación tenga fallos y se vea como en la Figura 56. Es así que entre mayor cantidad de partículas a probar, será necesario aumentar el tamaño del espacio y reducir la magnitud de las constantes del potencial para observar correctamente el funcionamiento de la simulación y el comportamiento de las partículas.

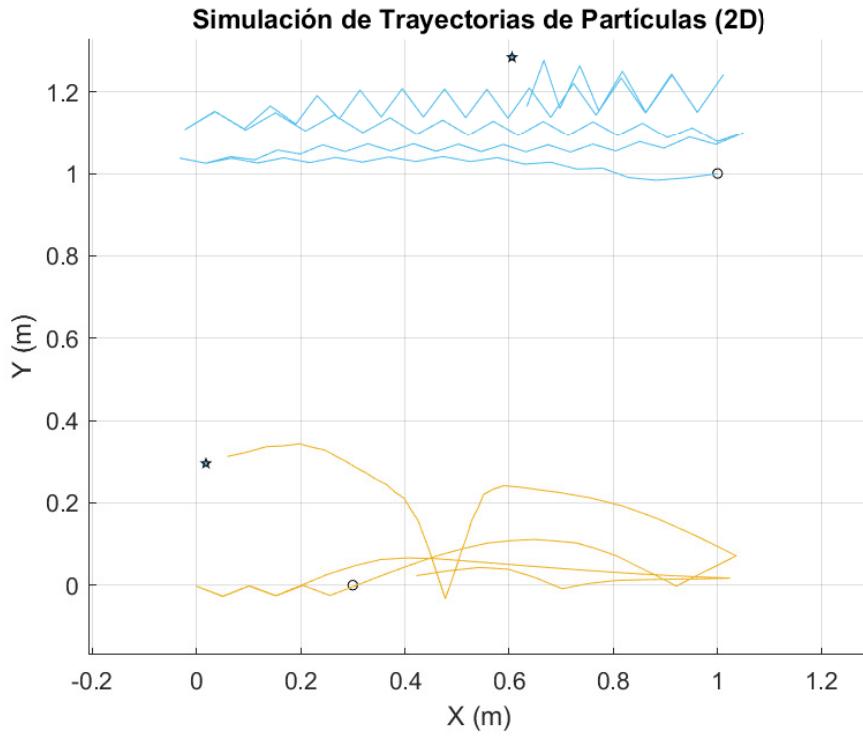


Figura 56: Dinámica molecular con dos agentes robóticos en un espacio reducido.

En la Figura 57 se colocaron a los dos agentes en posiciones iniciales aleatorias dentro del espacio delimitado. Se establecieron las constantes del LJP equivalentes a 0.5, es decir, que tendrán efectos de repulsión si su distancia entre centros  $r$  es menor a 0.5 m y de atracción si  $r$  es mayor a 0.5 pero menor a 1 m. Asimismo, se estableció una velocidad inicial de (3, 0.5) m/s lo que dio como resultado las dos trayectorias mostradas en la figura. Ambas trayectorias fueron replicadas bastante bien por el agente robótico y esto se debe a que se establecieron las mismas constantes del controlador vistas en las pruebas de tuneo y se realizaron las trayectorias utilizando 1,000 puntos.

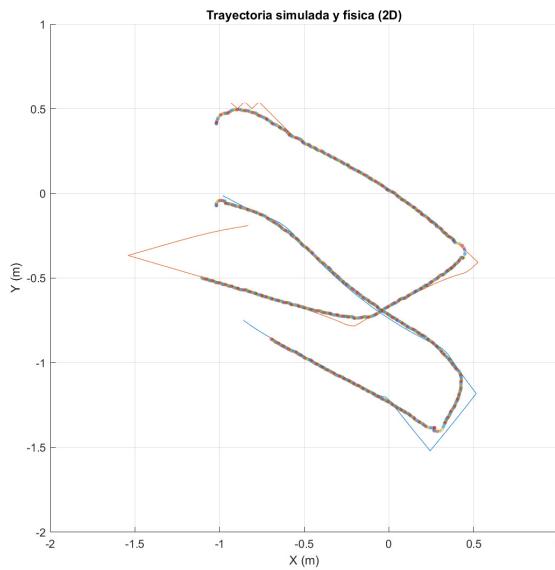


Figura 57: Dinámica molecular con dos agentes robóticos.

Posterior a ejecutar distintas trayectorias con dos agentes, se corroboró el funcionamiento del algoritmo utilizando 3 agentes. La primera prueba se evidencia en la Figura 58. Aquí se evidencia que para la trayectoria de la línea amarilla, el agente no replicó precisamente los quiebres que presenta esta. Como se discutió anteriormente, al presentar un tramo recto muy corto y ángulos de giro muy bruscos. Es así que el agente robótico tuvo dificultades al recrearlo debido al error punto a punto del controlador y las dimensiones del mismo robot. Adicionalmente, el robot que debía recrear la trayectoria de la línea celeste no terminó, esto se debe a que la velocidad del mismo agente no era lo suficientemente alta para realizar la trayectoria previo a que el tiempo de ejecución de la prueba finalizara.

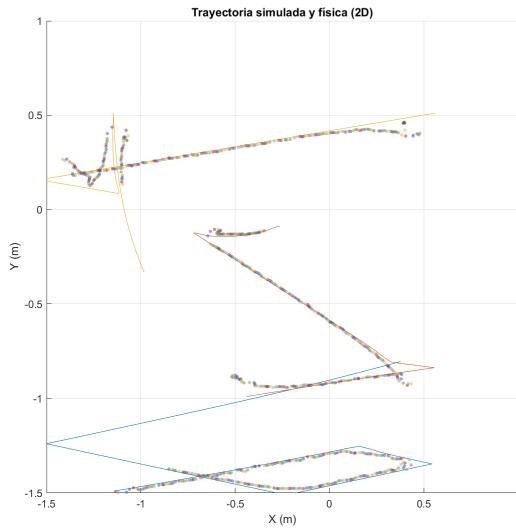


Figura 58: Dinámica molecular con tres agentes robóticos móviles.

Es así que en la siguiente prueba se incrementó el tiempo de ejecución de la prueba y se modificó la posición inicial de la partícula que traza la trayectoria celeste para evidenciar cómo variaba la trayectoria de todas las partículas. Al contrastar la prueba pasada con esta, se evidencia que se obtuvieron trayectorias con ángulos de colisión menos agudos. Lo que permitió que los agentes replicaran de mejor forma las trayectorias. Con estas pruebas se validó la correcta implementación del algoritmo de física granular: dinámica molecular, en tres agentes robóticos móviles.

??

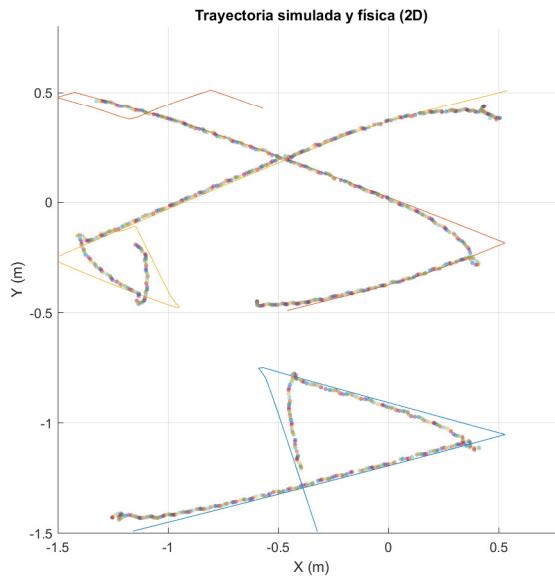


Figura 59: Tres Pololus utilizando el algoritmo de física granular.

Adicionalmente, al terminar estas pruebas se corroboró que el LJP es indicado para realizar pruebas con agentes robóticos móviles, ya que además de representar la realidad, permite cuidar el material proporcionado para asegurar la longevidad y correcto funcionamiento del mismo. La razón es la misma que se vio en la explicación del potencial, donde se evidencia que para que exista una colisión entre dos partículas, o en este caso, dos robots móviles, se requiere una magnitud de potencial que tiende al infinito, en otras palabras, no es posible que estos colisiones entre ellos.

## CAPÍTULO 9

---

### Aplicaciones de la Dinámica Molecular

---

En este capítulo, se desea aplicar los conocimientos adquiridos al investigar, simular y validar el algoritmo de física granular: Dinámica Molecular, a fenómenos que suceden recurrentemente en la vida real. En consecuencia, se aborda el fenómeno de la cola fantasma en simulaciones computarizadas de tránsito, centrándose en la estabilidad del flujo vehicular. Se llevan a cabo cuatro simulaciones con cuatro partículas en fila, utilizando la DM y estableciendo un valor constante para las variables del LJP. En la primera prueba, todas las partículas mantienen una velocidad constante, resultando en un sistema equilibrado. Las pruebas siguientes exploran escenarios donde una partícula inicia en reposo, evidenciando fenómenos complejos de repulsión y atracción.

Posteriormente, se amplía el sistema a cuatro filas con cinco partículas cada una, manteniendo las mismas constantes y asignando una velocidad constante de  $1 \text{ m/s}$ . Se observa cómo las filas avanzan, experimentando interacciones de atracción y repulsión entre partículas, pero logran estabilizarse al final del trayecto. Adicionalmente, se simula un tráfico más realista asignando velocidades iniciales constantes y aplicando desaceleraciones bruscas a una partícula de cada fila en un paso de tiempo específico. En estas simulaciones, se evidencian oscilaciones y efectos de repulsión y atracción entre partículas, culminando en la reducción de velocidad de la última partícula de la tercera fila.

Finalmente, se exploran casos de desaceleración prolongada, observando cómo las últimas partículas de algunas filas no logran reincorporarse al flujo principal, demostrando la sensibilidad del sistema a la duración de las desaceleraciones. Estos hallazgos son fundamentales para comprender y modelar el comportamiento del tráfico en situaciones realistas.

## 9.1. Fenómeno de cola fantasma en simulaciones computarizadas

Como se mencionó en la subsección 6.3, para abordar el problema de los atascos de tráfico fantasma y minimizar sus efectos, es posible centrarse tanto en la causa de la perturbación como en la estabilidad del flujo del tráfico. En este caso, se opta por focalizarse en la estabilidad. Por lo tanto, todo el conocimiento adquirido en este trabajo de graduación fue utilizado para verificar la posibilidad de desarrollar una solución tecnológica a este problema utilizando algoritmos de física granular.

Al inicio, se llevaron a cabo cuatro simulaciones utilizando cuatro partículas. Estas se colocaron en fila y se asignaron constantes  $\varepsilon$  y  $\sigma$  equivalentes a 0.08, con la finalidad de reducir la distancia  $r$  a la cual las partículas experimentarían los efectos del LJP. Es importante destacar que, para el análisis, las partículas se numeraron del 1 al 4, comenzando con aquella que se encuentra más alejada del origen (de arriba para abajo). Para la primera simulación, a todas las partículas se les proporcionó la misma velocidad inicial, la cual es equivalente a 1  $m/s$ . Como se evidencia en las Figuras 60 a 62, la distancia entre cada una de las partículas es constante manteniéndose a 0.8963 m a lo largo del trayecto. Esto significa que existe un equilibrio en el sistema, por lo tanto, no existe repulsión ni atracción entre las partículas, permitiendo que mantengan una misma velocidad hasta el final de la simulación.

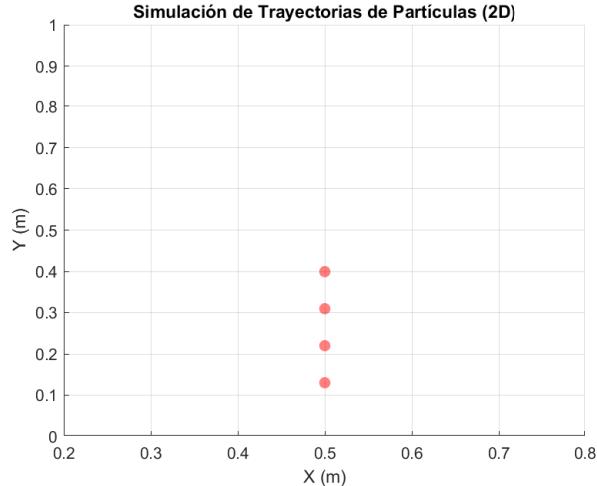


Figura 60: Comportamiento de las partículas al inicio de la simulación.

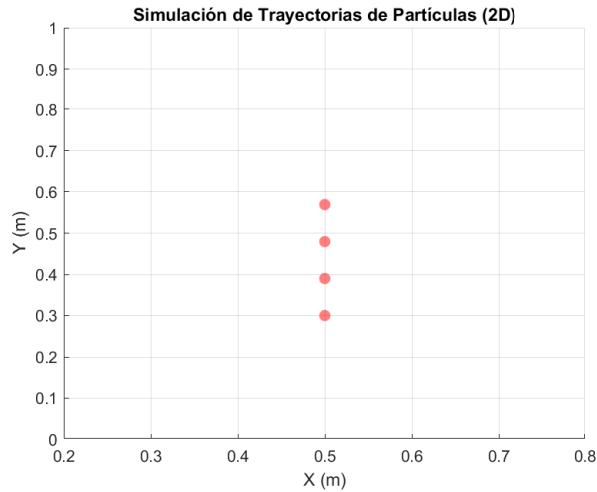


Figura 61: Comportamiento de las partículas luego de 20 pasos de tiempo.

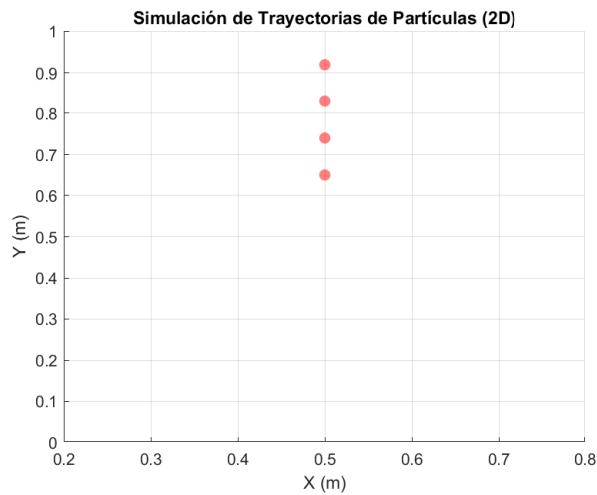


Figura 62: Comportamiento de las partículas luego de 55 pasos de tiempo.

En la segunda prueba, se mantuvo constante la velocidad de tres de las partículas, utilizando la misma magnitud que en la prueba anterior. Mientras tanto, para la partícula más cercana al eje  $X$ , se fijó una velocidad inicial equivalente a 0. Es así que, en las Figuras 63 a 65 se evidencia como la partícula en reposo presenta un leve desplazamiento equivalente a 0.019 m, debido a la fuerza de atracción que experimenta con la partícula frente a ella. No obstante, luego de unos cuantos pasos de tiempo, la partícula desacelera hasta alcanzar nuevamente el reposo.

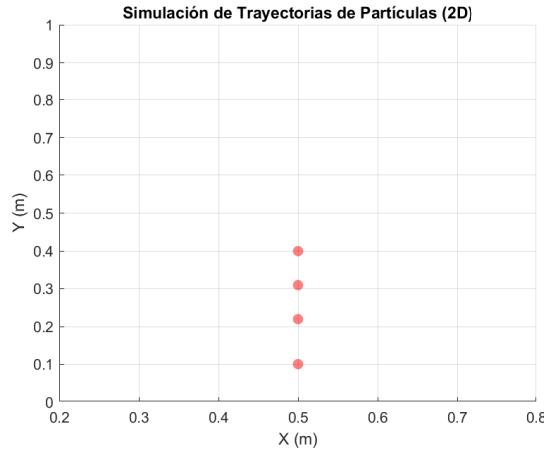


Figura 63: Comportamiento de las partículas al inicio de la simulación.

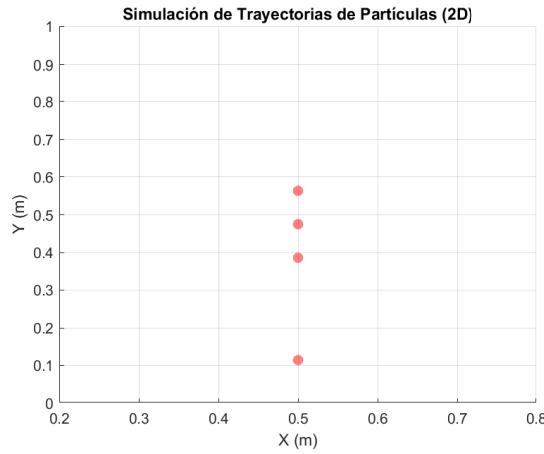


Figura 64: Comportamiento de las partículas luego de 20 pasos de tiempo.

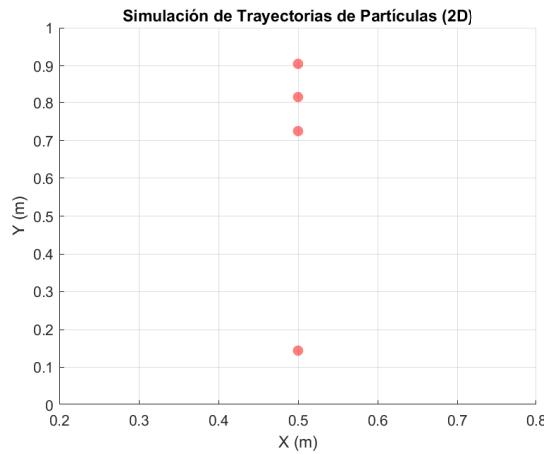


Figura 65: Comportamiento de las partículas luego de 55 pasos de tiempo.

En la tercera prueba, se buscó verificar los resultados obtenidos en la prueba anterior, pero reduciendo la magnitud de la velocidad inicial de las otras tres partículas a 0.2 m/s. Al iniciar la simulación, todas las partículas presentan una distancia  $r$  entre ellas de 0.0897 m. Después de dos pasos de tiempo (ver Figura 66), esta distancia aumenta a 0.0935 m. Al llegar a los 10 pasos, la distancia entre las primeras tres partículas se reduce, pero se mantiene constante en 0.9195 m. Mientras tanto, la distancia entre la tercera y la cuarta partícula disminuye aún más, alcanzando 0.0884 m. Esta reducción repentina en la distancia entre la tercera y cuarta partícula provoca que, entre los pasos 10 y 30, las primeras tres partículas experimenten una fuerza de repulsión que aumenta momentáneamente su velocidad y distancia  $r$  entre ellas.

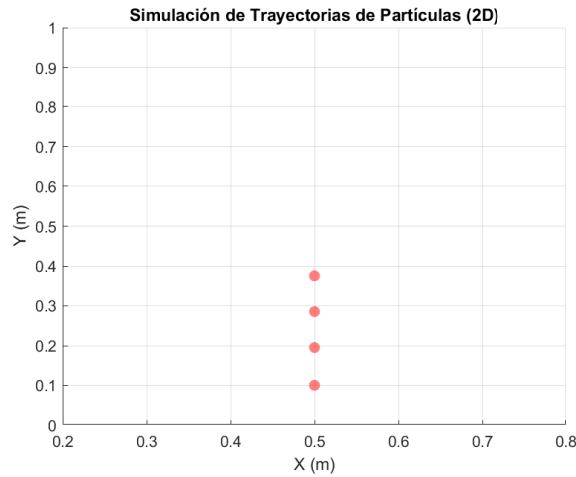


Figura 66: Comportamiento de las partículas luego de 2 pasos de tiempo.

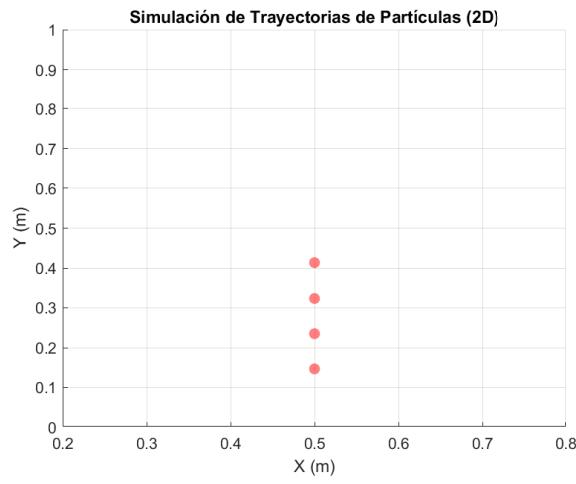


Figura 67: Comportamiento de las partículas luego de 30 pasos de tiempo.

Entre los pasos 30 y 150, se observa un comportamiento equivalente a un movimiento armónico amortiguado en las partículas. Como se mencionó anteriormente, durante los pasos 10 a 30, se experimentó una fuerza de repulsión. A medida que se incrementa la distancia

$r$  entre las partículas, se supera la distancia de equilibrio del LJP, cambiando la fuerza de repulsión a una fuerza de atracción. Este patrón de comportamiento se repite, pero debido a la disminución de la energía en el sistema, las oscilaciones se reducen. Finalmente, al llegar al paso 200 (ver Figura 68), el sistema alcanza un estado de equilibrio, y la distancia entre las partículas se mantiene constante para cada una.

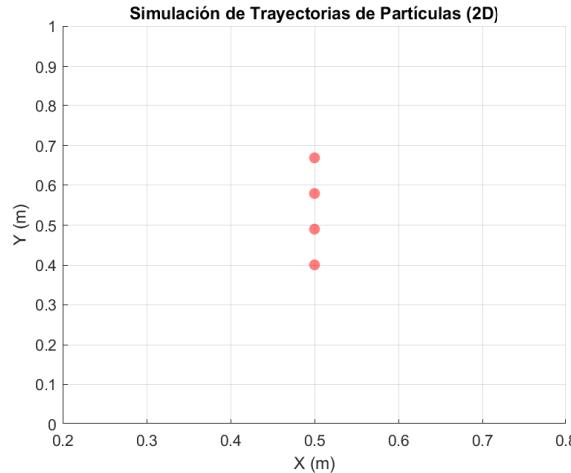


Figura 68: Comportamiento de las partículas luego de 200 pasos de tiempo.

Las pruebas dos y tres revelaron que la magnitud de la atracción dependerá de la velocidad relativa de las otras partículas y de la distancia inicial. La interacción entre la energía cinética y la energía potencial en el sistema influye en el movimiento de las partículas bajo el LJP. Si la velocidad de las primeras tres partículas es lo suficientemente baja, la partícula en reposo experimentará atracción hacia el grupo y adoptará la velocidad promedio del conjunto. No obstante, como se demostró en la segunda prueba, si la velocidad de las otras partículas es alta, la partícula en reposo puede carecer de la energía necesaria para integrarse completamente al grupo antes de que las otras partículas se alejen, lo que provoca su detención nuevamente.

En base en estos resultados, se deduce que si se repite el experimento, pero esta vez la tercera partícula, en lugar de la última, inicia en reposo en la simulación, se observará un comportamiento oscilatorio que, con el tiempo, alcanzará el equilibrio y mantendrá una velocidad constante. Para poner a prueba esta hipótesis, se llevó a cabo una cuarta prueba en la cual las dos primeras y la última partícula iniciaron con una velocidad de 1 m/s, mientras que la tercera partícula partió desde el reposo.

Como se evidencia en la Figura 69, después de dos pasos, las primeras dos y las últimas dos partículas mantienen una distancia constante  $r$  entre ellas. Sin embargo, la distancia entre la segunda y la tercera partícula se incrementa, alcanzando los 0.10534 m. Posteriormente, entre los pasos 2 y 20, se observa cómo las primeras dos partículas mantienen una velocidad constante, mientras que las últimas dos experimentan diferentes efectos del LJP. La Figura 70 muestra cómo la distancia  $r$  entre la segunda y la tercera partícula aumenta a 0.1216 m, así como la distancia  $r$  entre la tercera y la cuarta a 0.1512 m.

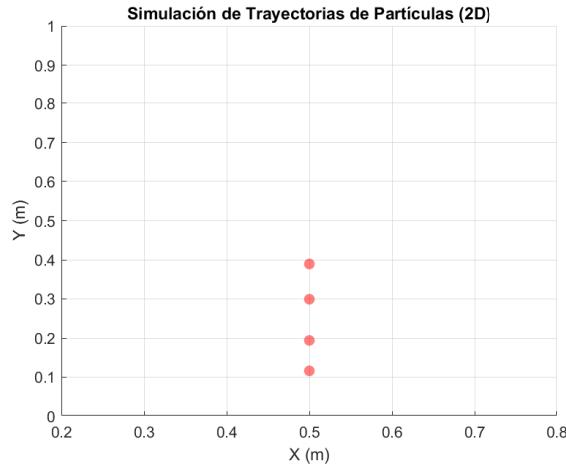


Figura 69: Comportamiento de las partículas luego de 2 pasos de tiempo.

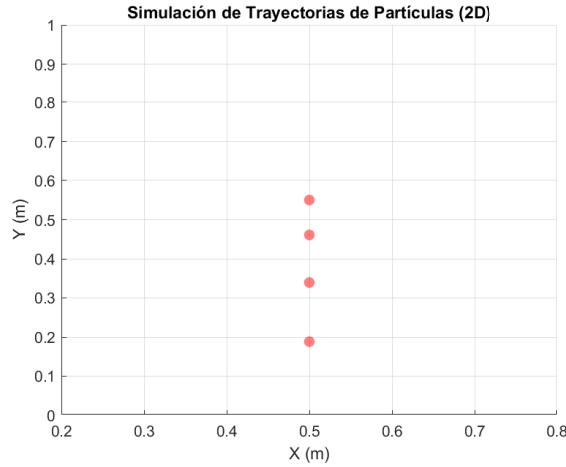


Figura 70: Comportamiento de las partículas luego de 20 pasos de tiempo.

Después de transcurrir 20 pasos de tiempo y llegar a los 30 pasos, la distancia  $r$  entre la tercera y última partícula experimentó un incremento significativo, alcanzando los 0.1919 m. Este valor supera aproximadamente la distancia de equilibrio del potencial por 0.101 m. Simultáneamente, la distancia entre la segunda y tercera partícula se redujo a 0.11092 m. En este punto, la última partícula pierde la fuerza de atracción que mantenía con la tercera partícula, mientras que la tercera partícula se encuentra a una distancia donde la fuerza de atracción con la segunda partícula es lo suficientemente alta como para reintegrarse. Entre los pasos 50 y 70, el sistema, ahora compuesto por tres partículas, logra estabilizarse.

Este comportamiento obtenido se asemeja al observado en la segunda prueba, donde la energía de la última partícula no era suficiente para incorporarse al grupo y generar un equilibrio en el sistema. Sin embargo, en este caso, la última partícula no fue la que tenía la velocidad inicial equivalente a 0, sino que era la tercera. Inicialmente, la penúltima partícula no tiene energía cinética, experimentando así una fuerza de atracción hacia la segunda partícula y una de repulsión de la última partícula. Al sentir ambas fuerzas, las distancias

entre las partículas vecinas aumentan. Después de cierto tiempo, la última partícula pierde velocidad debido a la falta de energía o a la resistencia generada por la repulsión de las partículas anteriores. Esto conduce a una disminución de la fuerza de atracción, resultando en que la última partícula termine en reposo. Además, la tercera partícula, al perder la repulsión de la última partícula y encontrar una posición adecuada en relación con las otras partículas, logra incorporarse al sistema, lo que lleva a la estabilización mostrada en la Figura 71.

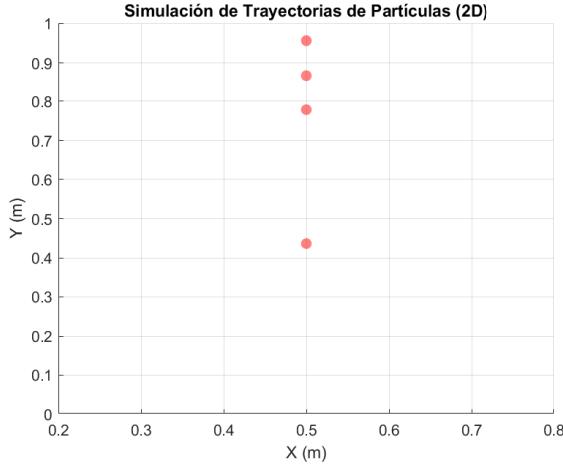


Figura 71: Comportamiento de las partículas luego de 70 pasos de tiempo.

Cabe mencionar que, si la velocidad inicial de las partículas se reduce de  $1 \text{ m/s}$  a  $0.6 \text{ m/s}$  se obtendrá el mismo resultado evidenciado en la tercera prueba. Las partículas experimentarán un movimiento armónico amortiguado hasta alcanzar los 60 pasos de tiempo, en donde a partir de ese punto, el sistema se estabilizará y continuará en una velocidad constante.

## 9.2. Tránsito fantasma

Después de realizar las pruebas descritas en la sección anterior, se decidió ampliar el tamaño del sistema. Se añadieron tres filas adicionales, cada una con una partícula extra, resultando en un total de cuatro filas con cinco partículas cada una. En esta primera simulación, se mantuvieron las mismas constantes de  $\varepsilon$  y  $\sigma$  que en las pruebas previas de la sección anterior. Además, se fijó una velocidad de  $1 \text{ m/s}$  para cada una de las partículas.

Para esta simulación, las filas de partículas se encuentran separadas a la distancia  $r$  de equilibrio del potencial de Lennard-Jones (LJP) con el fin de comprobar el comportamiento global. Las Figuras 72 a 74 muestran cómo las cuatro filas avanzan constantemente hasta que la primera partícula alcanza los  $1.4 \text{ m}$  en el eje  $Y$ . A pesar de haber separado las partículas en  $x$  a la misma distancia que la distancia de equilibrio del LJP, las partículas, entre filas, a lo largo del trayecto experimentan fuerzas de atracción y repulsión que provocan pequeños desplazamientos en el eje  $X$ . No obstante, al finalizar la simulación, las cuatro filas se estabilizan nuevamente a la distancia de equilibrio del sistema.

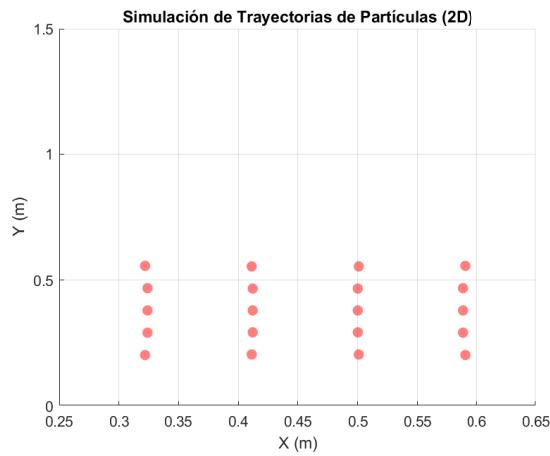


Figura 72: Comportamiento del sistema luego de 10 pasos de tiempo.

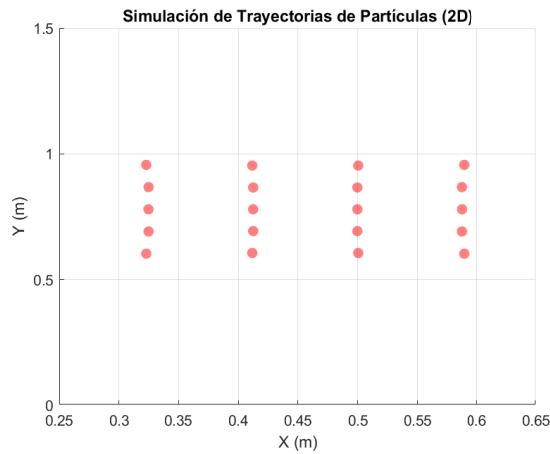


Figura 73: Comportamiento del sistema luego de 50 pasos de tiempo.

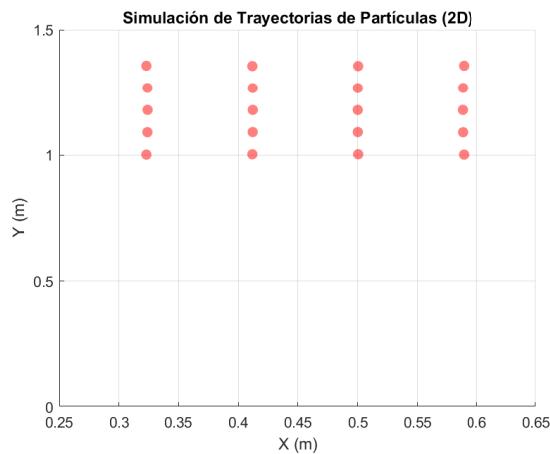


Figura 74: Comportamiento del sistema luego de 90 pasos de tiempo.

En consecuencia a los resultados obtenidos en la simulación anterior, se separaron las filas de partículas a una distancia de 0.5 m, evitando así cualquier efecto del potencial entre filas. En la simulación mostrada en las Figuras 75 a 77, se implementaron las pruebas realizadas anteriormente, donde cada partícula de la fila tenía una velocidad inicial, excepto una de ellas. En cada fila, se seleccionó una partícula diferente para evidenciar el comportamiento de manera global. La partícula que parte desde el reposo en la primera fila, de izquierda a derecha, es la tercera. En la segunda fila, es la penúltima partícula. En la tercera fila, es la última; y en la cuarta fila, es la segunda partícula.

Como se aprecia en la secuencia de imágenes, en la segunda y tercera fila, la última partícula no pudo incorporarse al grupo por falta de energía. Además, desde la Figura 76, que representa los 70 pasos de tiempo, todas las filas, exceptuando la primera, ya se habían estabilizado. Por otro lado, en la Figura 77, se evidencia que, además de tener dos partículas con energía cinética igual a 0, la velocidad de la fila se ve afectada dependiendo del caso. La tercera fila, donde la última partícula no pudo incorporarse inicialmente, fue la primera en llegar al final del espacio en el eje Y a la estabilización. Mientras que la primera fila, que presentó la mayor cantidad de oscilaciones para estabilizarse, fue la más lenta.

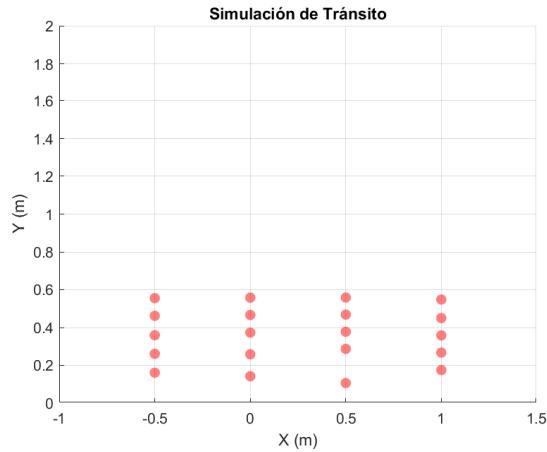


Figura 75: Comportamiento del sistema luego de 10 pasos de tiempo.

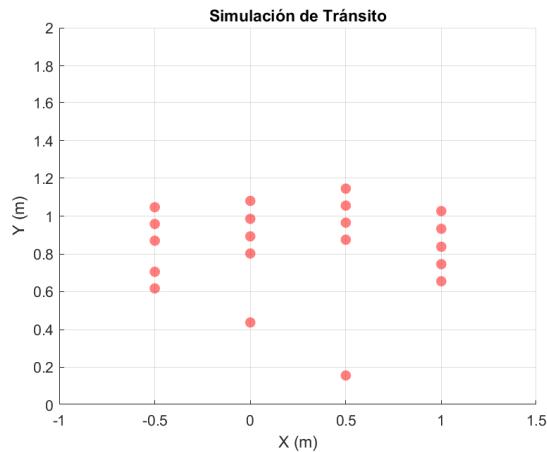


Figura 76: Comportamiento del sistema luego de 70 pasos de tiempo.

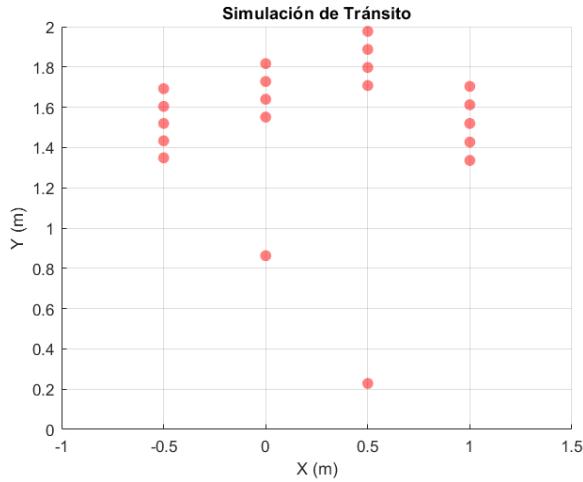


Figura 77: Comportamiento del sistema luego de 155 pasos de tiempo.

Con el fin de realizar una simulación más realista al tránsito vehicular, se asignó una velocidad inicial constante a todas las partículas. Al llegar al paso 60, durante un solo paso de tiempo, se detiene repentinamente una partícula de cada fila para simular una desaceleración brusca de un vehículo. Durante los primeros 30 pasos de tiempo, todas las partículas se desplazan a una velocidad constante de  $1 \text{ m/s}$ , lo cual se refleja en su comportamiento, como se muestra en la Figura 78. Posteriormente, en el paso 60, las partículas señaladas con una flecha en la Figura 79 reducen su velocidad a  $0 \text{ m/s}$ .

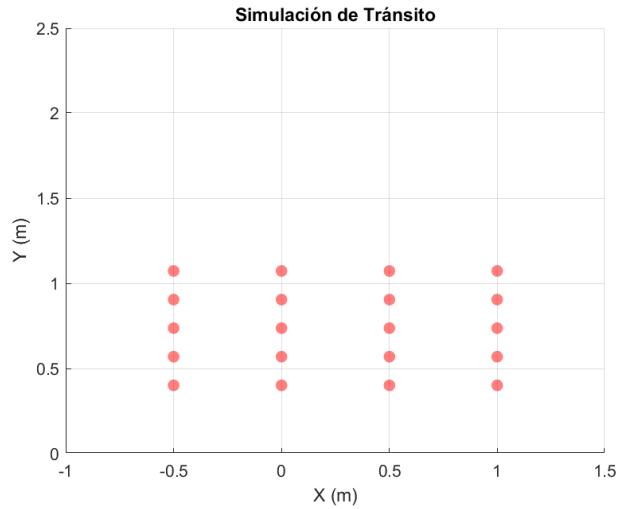


Figura 78: Comportamiento del sistema luego de 30 pasos de tiempo.

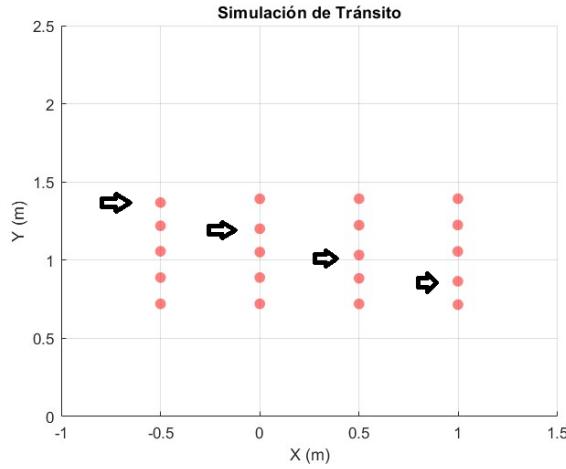


Figura 79: Comportamiento del sistema luego de 63 pasos de tiempo.

La Figura 79 ilustra cómo, en los siguientes 3 pasos de tiempo, la separación  $r$  entre las partículas que han detenido su movimiento y las que las rodean experimenta ligeros cambios. De particular interés es la interacción entre las partículas que se detuvieron repentinamente y las que las preceden y suceden, evidenciando los efectos de repulsión y atracción ya observados en pruebas anteriores.

Entre los pasos 63 y 110 (Figura 80), se observan pequeñas oscilaciones, siendo las últimas dos filas las más afectadas, debido a la considerable separación entre la última partícula y la siguiente. Esta discrepancia en la distancia provoca efectos más pronunciados de repulsión y atracción. Al llegar al paso 180 (ver Figura 81), la partícula de la última fila carece de la energía suficiente para reincorporarse a la fila y, como resultado, experimenta una reducción de velocidad hasta alcanzar el reposo. En contraste, la última partícula de la tercera fila logra reincorporarse y restablecer el equilibrio en el sistema.

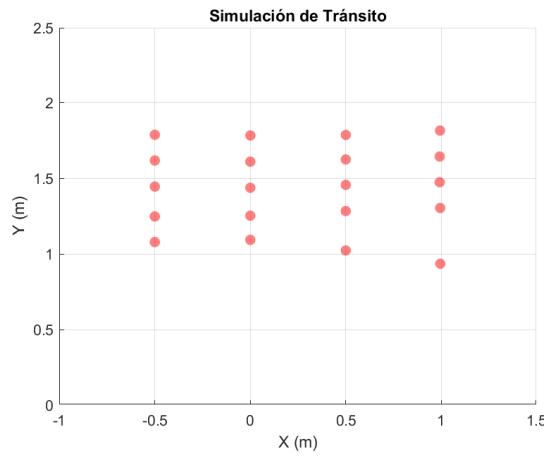


Figura 80: Comportamiento del sistema luego de 110 pasos de tiempo.

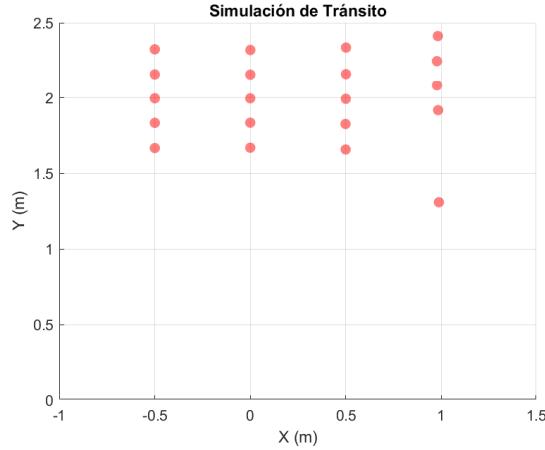


Figura 81: Comportamiento del sistema luego de 180 pasos de tiempo.

Finalmente, se exploraron escenarios en los que la desaceleración brusca se extiende por algunos pasos de tiempo adicionales. Se simuló el caso en el que las mismas partículas señaladas en la Figura 79, mantienen una velocidad nula durante 3 pasos de tiempo consecutivos. En la Figura 82 se evidencia que después de 200 pasos de tiempo, las primeras dos filas alcanzan un equilibrio perfecto. En contraste, las últimas partículas de la tercera y cuarta fila no poseen la energía necesaria para reincorporarse, quedando rezagadas.

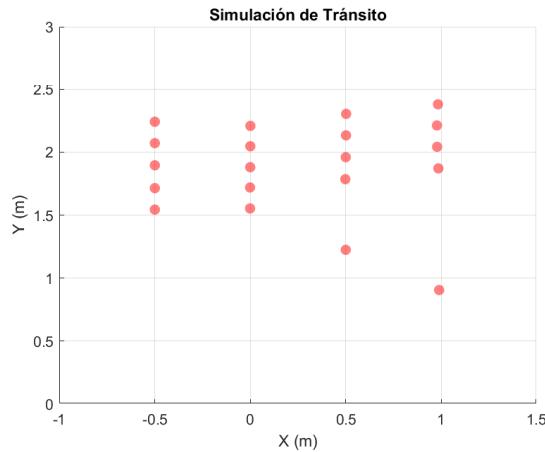


Figura 82: Comportamiento final del sistema al presenciar una desaceleración brusca durante 3 pasos de tiempo.

Asimismo, se llevó a cabo una simulación en la que las mismas partículas señaladas en la Figura 79 experimentaron una desaceleración súbita, manteniendo una velocidad nula durante 5 pasos de tiempo consecutivos. En este escenario ilustrado en la Figura 83, se observa que todas las partículas de las últimas dos filas redujeron su velocidad hasta alcanzar el reposo. Sin embargo, en este caso, la energía de ambas partículas no fue suficiente para permitir su reincorporación al flujo principal.

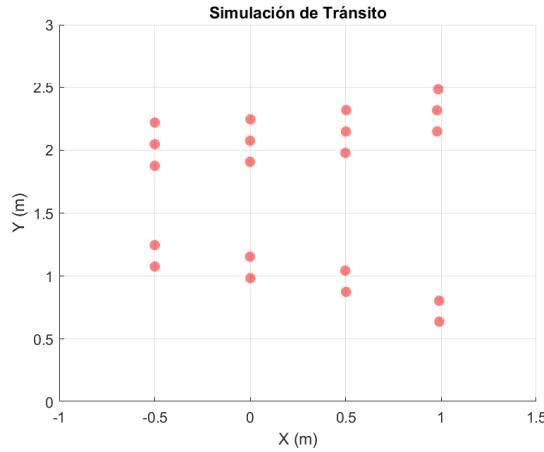


Figura 83: Comportamiento del sistema al presenciar una desaceleración brusca durante 5 pasos de tiempo.

En conclusión, se observa que mediante la Dinámica Molecular es posible simular un flujo de tránsito y replicar el fenómeno de la cola fantasma. Este algoritmo también facilita la estabilización del sistema. No obstante, es crucial tener en cuenta tanto la velocidad relativa de las partículas como la duración de una desaceleración repentina de una partícula en el sistema. Esto se debe a que, como se evidenció en las distintas simulaciones, existen casos en los que no todas las partículas se reincorporarán a las filas, lo que con el tiempo puede resultar en una reducción de velocidad y eventual reposo de esas partículas en específico.

# CAPÍTULO 10

---

## Conclusiones

---

1. Se investigaron seis algoritmos de física granular en los que se incluye la Dinámica Molecular, la Simulación Directa de Monte Carlo, Dinámica del Cuerpo Rígido, partículas de bordes afilados compuestos por triángulos, el Modelo de Elementos Discretos y el Método de Elementos Finitos.
2. El algoritmo de Dinámica Molecular fue sometido a pruebas computarizadas, las cuales fueron posteriormente validadas físicamente a través de la plataforma Robotat y el sistema de captura OptiTrack. Se llevaron a cabo estas pruebas con la participación de hasta tres agentes robóticos móviles, obteniendo resultados satisfactorios.
3. El potencial de Lennard-Jones es indicado para realizar pruebas con agentes robóticos móviles. No solo logra representar fielmente la realidad, sino que también permite preservar el material proporcionado, asegurando su longevidad y correcto funcionamiento. Como se señaló previamente, para que se produzca una colisión entre dos partículas, o en este contexto, dos robots móviles, se requiere una magnitud de potencial que tienda al infinito. En otras palabras, estas colisiones entre ellos son imposibles de ocurrir.
4. Al utilizar la Dinámica Molecular en una simulación en 2D con las mismas restricciones de dimensiones que una simulación en 3D, se observan cambios más bruscos en las trayectorias debido a que las partículas tienen una mayor probabilidad de acercarse lo suficiente como para experimentar una interacción repulsiva entre ellas cuando la distancia  $r$  es lo suficientemente corta.
5. En las simulaciones dinámicas empleando el algoritmo de Dinámica Molecular, la partículas tienden a agruparse como resultado de las interacciones del potencial de Lennard-Jones y la naturaleza estadística de las colisiones en un sistema con muchas partículas.
6. Al ubicar varias partículas en la misma posición inicial, surge una energía potencial que tiende a infinito, generando así una alta fuerza repulsiva. Esta fuerza repulsiva provoca un rápido aumento en las velocidades individuales de cada partícula, resultando en una rápida separación entre ellas.

7. Los resultados de las pruebas de validación del algoritmo indicaron que aumentar la cantidad de puntos que componen una trayectoria, de 375 a 1500, mejoró la precisión del seguimiento de la trayectoria por parte del robot Pololu en un 84.15 % para las coordenadas en  $X$  y un 86.34 % para las coordenadas en  $Y$ .
8. A pesar de mejorar la precisión del seguimiento de trayectoria por parte del robot Pololu, el Error Cuadrático Medio (ECM) tiende a ser mayor en las regiones donde la partícula simulada experimenta una colisión con el límite del espacio en alguno de los ejes.
9. La implementación de la Dinámica Molecular, proporcionó avances en la resolución del problema de la cola fantasma. Al utilizar el potencial de Lennard-Jones, las partículas logran estabilizarse a la distancia de equilibrio,  $r$ , permitiendo que continúen su trayectoria de manera constante.
10. Cuando se utiliza Dinámica Molecular para analizar el fenómeno de la cola fantasma, es esencial considerar la velocidad relativa de las partículas y la duración de desaceleraciones repentinhas. Las simulaciones revelaron casos en los que no todas las partículas se reincorporaron a las filas, lo que a largo plazo resultó en una disminución de velocidad y eventual reposo de esas partículas específicas.

# CAPÍTULO 11

---

## Recomendaciones

---

1. Para seguir incursionando en soluciones del problema de cola fantasma, se recomienda investigar a profundidad sobre el control bilateral ya que se ha empezado a implementar en diferentes compañías como Toyota para reducir los efectos ocasionados por este fenómeno.
2. Si se tiene disponibilidad de más agentes robóticos móviles Pololu3pi+ 32u4 OLED, se recomienda realizar pruebas de validación con más cantidad de agentes robóticos para evidenciar el comportamiento que estos tendrían al ser mayor cantidad.
3. Se recomienda verificar que la calibración y condiciones ambientales como la iluminación sean las óptimas para ejecutar pruebas físicas en la plataforma Robotat para evitar reducir la precisión en el sistema de captura y obtener mediciones alejadas de lo real.
4. Se recomienda expandir las aplicaciones y llevar a cabo pruebas con el fin de observar cómo se comportan los agentes o partículas en situaciones de emergencia, como, por ejemplo, durante la evacuación de una habitación debido a una emergencia como un incendio o un temblor.
5. En el caso de desear realizar experimentos similares a los presentados en este trabajo de graduación utilizando un algoritmo distinto a la Dinámica Molecular, se sugiere iniciar con el modelo de elementos discretos. Este modelo trata cada partícula como un cuerpo individual, calculando explícitamente las fuerzas y momentos entre ellas. Este enfoque resulta beneficioso para investigar el comportamiento de sistemas en los que las interacciones granulares desempeñan un papel fundamental.

## CAPÍTULO 12

---

### Bibliografía

---

- [1] M. Aguirre, “Estabilidad y dinámica en materiales granulares: comportamiento aislado y colectivo de granos,” 2001. dirección: [https://bibliotecadigital.exactas.uba.ar/download/tesis/tesis\\_n3387\\_Aguirre.pdf](https://bibliotecadigital.exactas.uba.ar/download/tesis/tesis_n3387_Aguirre.pdf).
- [2] Jaeger y Sidney, *Physics of the Granular State*, 2011. dirección: <https://pdodds.w3.uvm.edu/teaching/courses/2009-08UVM-300/docs/others/everything/jaeger1992a.pdf>.
- [3] N. Sidney, “Physics of Granular state,” 1992. dirección: <https://pdodds.w3.uvm.edu/teaching/courses/2009-08UVM-300/docs/others/everything/jaeger1992a.pdf>.
- [4] L. Wang y B. Horn, *On the stability analysis of mixed traffic with vehicles under car-following and bilateral control*, 2019. dirección: <https://s3-us-west-2.amazonaws.com/ieeeshutpages/xplore/xplore-shut-page.html>.
- [5] T. Metcalfe, ‘*Phantom’ Traffic Jams Are Real and Scientists Know How to Stop Them*, 2018. dirección: <https://www.livescience.com/61862-why-phantom-traffic-jams-happen.html>.
- [6] J. Maderer, *Robotarium: A Robotics Lab Accessible to All*, 2017. dirección: <https://news.gatech.edu/archive/features/robotarium-robotics-lab-accessible-all.shtml>.
- [7] P. Barrera, *El Robotat, el hábitat donde interactúan los robots en el CIT*, 2022. dirección: <https://noticias.uvg.edu.el-robotat-el-habitat-donde-interactuan-los-robots-en-el-cit/>.
- [8] A. Tam, “Aplicaciones prácticas para algoritmos de inteligencia y robótica de enjambre,” 2022. dirección: <https://repositorio.uvg.edu.gt/handle/123456789/4256>.
- [9] D. Baldizón, “A gentle introduction to particle Swarm Optimization,” 2021. dirección: <https://machinelearningmastery.com/a-gentle-introduction-to-particle-swarm-optimization/>.
- [10] A. Aguilar, “Algoritmo modificado de optimización de enjambre de partículas (MPSO),” 2019. dirección: <https://repositorio.uvg.edu.gt/handle/123456789/3443>.

- [11] L. Nij, “Evaluación y validación de plataformas móviles para aplicaciones prácticas de robótica,” 2022. dirección: <https://drive.google.com/drive/u/0/folders/1Iluqcd77KztsevXLYBS1m8kBzAv0Sk9I>.
- [12] I. Aranson, “Patterns and Collective Behavior in Granular Media: Theoretical Concepts.,” *Review of Modern Physics*, 2008.
- [13] T. Schwager, “Computational Granular Dynamics,” vol. 221, n.º 1-2, pág. 13, 2005.
- [14] F. Rojas, *Mecánica 3D: Python y el algoritmo de Verlet*, 2013. dirección: <https://www.scielo.org.mx/pdf/rmfe/v60n1/v60n1a5.pdf>.
- [15] L. Zammataro, *The Lennard-Jones potential*, 2020. dirección: <https://towardsdatascience.com/the-lennard-jones-potential-35b2bae9446c>.
- [16] A. Campos, *Adsorción Física de moléculas diatómicas*, SF. dirección: <http://ri.uaemex.mx/bitstream/handle/20.500.11799/65550/Adsorci%F3n+f%EDsica+de+mol%E9culas+diat%F3micas.pdf;jsessionid=CDFA416890ABD8C62CDB6EB77141BFF?sequence=1>.
- [17] J. Perez, *Definición de cuerpo rígido*, 2021. dirección: [https://definicion.de/cuerpo-rigido/#google\\_vignette](https://definicion.de/cuerpo-rigido/#google_vignette).
- [18] A. Garcia, *Direct Simulation Monte Carlo: Theory, Methods, and Open Challenges*, 2011. dirección: <https://apps.dtic.mil/sti/pdfs/ADA582772.pdf>.
- [19] M. Morales, *Formulación de elementos finitos y elementos discretos*, 2013. dirección: [https://cimat.repositorioinstitucional.mx/jspui/bitstream/1008/468/1/TE\\_1523.pdf](https://cimat.repositorioinstitucional.mx/jspui/bitstream/1008/468/1/TE_1523.pdf).
- [20] A. Harish, *FEM and FEA Explained*, 2023. dirección: <https://www.simscale.com/blog/what-is-finite-element-method/>.
- [21] S. Wismans, *Phantom Jam Avoidance Through In-car Speed advice*, 2015. dirección: [https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2352146515001337?ref=cra\\_js\\_challenge&fr=RR-1](https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2352146515001337?ref=cra_js_challenge&fr=RR-1).
- [22] S. N, *Traffic Flow and Phantom Jams*, 2020. dirección: <https://fyfluidynamics.com/2020/06/traffic-flow-and-phantom-jams/>.
- [23] J. Bogado, *Control bilateral de robots teleoperados por convergencia de estados*, 2007. dirección: <https://oa.upm.es/934/>.
- [24] B. Horn, *Wave equation of suppressed traffic flow instabilities*, 2018. dirección: <https://ieeexplore.ieee.org/document/8166801>.
- [25] Anónimo, *Hombre o robot*, S.F. dirección: [https://www.madrid.org/cs/Satellite?cid=1354488949285&language=es&pagename=PortalLector%2FPage%2FPLEC\\_contenidoFinalNavegable#:~:text=Aunque%20los%20griegos%20ya%20ten%C3%ADan,significa%20servidumbre%20o%20trabajo%20forzado..](https://www.madrid.org/cs/Satellite?cid=1354488949285&language=es&pagename=PortalLector%2FPage%2FPLEC_contenidoFinalNavegable#:~:text=Aunque%20los%20griegos%20ya%20ten%C3%ADan,significa%20servidumbre%20o%20trabajo%20forzado..)
- [26] Anónimo, *Robots: qué son, funcionamiento y modelos*, 2022. dirección: <https://www.innovaciondigital360.com/i-a/robots-que-son-como-funcionan-y-los-modelos-disponibles/>.
- [27] Anónimo, *Pololu 3Pi+ 32u4 OLED robot*, 2021. dirección: <https://www.pololu.com/product/4975>.
- [28] P. Corporation, *Pololu 3pi+ 32u4 user's guide*, 2021. dirección: [https://www.pololu.com/docs/pdf/0J83/3pi\\_plus\\_32u4.pdf](https://www.pololu.com/docs/pdf/0J83/3pi_plus_32u4.pdf).

- [29] W. Electronics, *Alphabot Robot*. dirección: <https://www.waveshare.com/product/raspberry-pi/robots/mobile-robots/alphabot-robot.htm>.
- [30] Waveshare, *Alphabot2 User Manual*, 2017. dirección: <https://www.mouser.com/pdfdocs/Alphabot2-user-manual-en.pdf>.
- [31] D. OptiTrack, *OptiTrack for robotics*, 2023. dirección: <https://optitrack.com/applications/robotics/>.
- [32] V. Mazzone, *Controladores PID*, 2002. dirección: <https://www.eng.newcastle.edu.au/~jhb519/teaching/caut1/Apuntes/PID.pdf>.
- [33] U. N. de Colombia, *Las leyes de movimiento*, SF. dirección: [https://repositorio.unal.edu.co/bitstream/handle/unal/2885/184\\_-\\_10\\_Capi\\_9.pdf?sequence=9&isAllowed=y](https://repositorio.unal.edu.co/bitstream/handle/unal/2885/184_-_10_Capi_9.pdf?sequence=9&isAllowed=y).
- [34] Matlab, *bsplinepolytraj*, 2019. dirección: <https://la.mathworks.com/help/robotics/ref/bsplinepolytraj.html>.
- [35] R. Ramos, *Conceptualización: Curvas B-spline*, 2016. dirección: <http://funes.uniandes.edu.co/11653/1/Ramos2016Conceptualizacion.pdf>.
- [36] U. S. Tomás, *Modelos matemáticos determinísticos/estocásticos*, SF. dirección: [https://soda.ustadistancia.edu.co/enlinea/invoperaciones2/deterministicos\\_estocasticos.html](https://soda.ustadistancia.edu.co/enlinea/invoperaciones2/deterministicos_estocasticos.html).
- [37] I. Zuriguel, *Flujo y atascos de un medio granular en la descarga de silos*, 2005. dirección: <https://dialnet.unirioja.es/servlet/tesis?codigo=67167>.
- [38] U. de Málaga, *El interfaz Socket*, S.F. dirección: [http://www.lcc.uma.es/~eat/services/i\\_socket/i\\_socket.html](http://www.lcc.uma.es/~eat/services/i_socket/i_socket.html).

# CAPÍTULO 13

---

## Anexos

---

1. Enlace al repositorio en línea de GitHub que contiene los códigos, fotografías y algunas referencias utilizadas en el trabajo de graduación, así como formatos de intercambio de gráficos (GIF) de las simulaciones dinámicas.
2. Enlace al repositorio en línea que contiene el Manual del agente robótico Alphabot2
3. Enlace a la carpeta en drive que contiene videos de las pruebas de validación del algoritmo de dinámica molecular.

# CAPÍTULO 14

---

## Glosario

---

**B-splines** También llamada línea polinómica suave básica es una secuencia de segmentos de curva que se conectan entre sí para formar una sola curva continua que tenga el mínimo soporte con respecto a un determinado grado, suavidad y partición del dominio [35]. 58

**balasto ferroviario** capa de piedras ubicada bajo los rieles.. 19

**colapso de pilas de granos** ocurre cuando se agregan o retiran partículas en la parte superior de una pila de granos [2]. 3

**colapso de pilas de granos** se refiere a la emergencia de patrones y comportamientos colectivos en grupos de partículas [2]. 3

**control de crucero adaptativo** tecnología avanzada de asistencia al conductor que se utiliza en vehículos automotores para mejorar la comodidad y la seguridad durante la conducción en autopistas y carreteras [23]. 27

**determinístico** Modelo matemático que tiene certeza de los valores de los parámetros iniciales, las cuales producirán invariablemente los resultados o salidas, no contemplándose en la existencia de azar [36]. 12

**flujo granular denso** las partículas se empaquetan y se mueven en condiciones de alta densidad, formando arcos o atascos [2]. 3

**silos** recipiente cilíndrico con una base plana en cuyo centro hay un orificio [37]. 22

**socket** Canales de comunicación que permiten que procesos no relacionados intercambien datos localmente y entre redes [38]. 53