

## Un marco metodológico para desarrollar gemelos digitales en laboratorios autónomos

Nazarie, H.P.<sup>a</sup>, Oña, E.D.<sup>a</sup>, Rosas-Cervantes, V.<sup>b</sup>, de la Peña O'Shea, V. A.<sup>b</sup>, Copaci, D.<sup>a,\*</sup>

<sup>a</sup>Departamento de Ingeniería de Sistemas y Automática, Universidad Carlos III de Madrid, Avda. Universidad, no. 30, Leganés, 28911, Madrid, España.

<sup>b</sup>Unidad de Procesos Fotoactivados, IMDEA Energía, Ramón de la Sagra, 3, Móstoles, Madrid, España

### Resumen

Este trabajo propone una metodología progresiva para el desarrollo de gemelos digitales aplicados a laboratorios autónomos de descubrimiento de materiales, basada en una arquitectura modular sustentada en ROS2, Gazebo y herramientas de simulación multiescala. Aunque los *self-driving labs* integran robótica, inteligencia artificial y análisis de datos para cerrar el ciclo diseño-fabricación-medición-análisis, actualmente persisten desafíos importantes como la brecha *sim-to-real*, la falta de estandarización y la ausencia de marcos metodológicos estructurados. Para abordar esta carencia, se presenta una estrategia multinivel (I–VI) que abarca desde la definición conceptual del laboratorio y el modelado estructural hasta la integración de simulación multiescala, la orquestación experimental y la calibración *sim-to-real*. La metodología toma como base el laboratorio Brain Lab de IMDEA Energía, integrando en el entorno simulado robots manipuladores y móviles, así como distintos dispositivos y elementos del laboratorio. El entorno físico existente permitirá, en una fase posterior, la validación del gemelo digital. Los resultados preliminares demuestran la viabilidad del enfoque y su potencial para habilitar laboratorios científicos autónomos, escalables y reconfigurables.

**Palabras clave:** Sistemas robóticos autónomos, Robots móviles, Robots manipuladores, Sistemas ciberfísicos, Modelado

### A methodological framework for developing digital twins in autonomous laboratories

#### Abstract

This work proposes a progressive methodology for the development of digital twins applied to autonomous laboratories for materials discovery, based on a modular architecture supported by ROS2, Gazebo, and multiscale simulation tools. Although self-driving labs integrate robotics, artificial intelligence, and data analysis to close the design–fabrication–measurement–analysis loop, significant challenges still remain, including the sim-to-real gap, lack of standardization, and the absence of structured methodological frameworks. To address this gap, a multilevel strategy (Levels I–VI) is presented, covering conceptual definition and structural modeling of the laboratory, multiscale simulation integration, experimental orchestration, and sim-to-real calibration. The methodology is grounded on the Brain Lab at IMDEA Energía, integrating mobile and manipulator robots, as well as laboratory devices and infrastructure, within a simulated environment. The existing physical laboratory will enable future validation of the digital twin. Preliminary results demonstrate the feasibility of the approach and its potential to enable scalable, reconfigurable autonomous scientific laboratories.

**Keywords:** Autonomous robotic systems, Mobile robots, Robots manipulators, Cyber-Physical Systems, Modeling

### 1. Introducción

Los laboratorios autónomos y los sistemas de descubrimiento acelerado de materiales están transformando la investigación en química, materiales y robótica experimental. La integración de inteligencia artificial, automatización robótica y análisis de datos permite cerrar el ciclo diseño-fabricación-medición-análisis, reduciendo tiempos de desarrollo y mejo-

rando la reproducibilidad. Estos sistemas, conocidos como *self-driving labs* (SDL), representan un cambio hacia experimentación cerrada y basada en datos (Tom et al., 2024). Sin embargo, su desarrollo sigue dependiendo en gran medida de iteraciones físicas costosas y complejas. En este contexto, los gemelos digitales emergen como una herramienta clave para modelar y validar laboratorios completos antes de su despliegue real. No obstante, persisten desafíos significativos, como la brecha *sim-*

\*Autor para correspondencia: D. Copaci (dcopaci@ing.uc3m.es).

*to-real*, ausencia de marcos de referencia comunes, la elevada demanda computacional de modelos de alta fidelidad y las dificultades de integración entre hardware heterogéneo y plataformas digitales.

En los últimos años, el concepto de gemelo digital ha cobrado relevancia como herramienta para integrar modelos físicos, datos experimentales y conocimiento científico en una representación virtual del laboratorio. Se han propuesto enfoques basados en redes de gemelos digitales apoyadas en grafos de conocimiento dinámicos para habilitar futuros científicos artificiales (Akroyd et al., 2021), así como entornos acelerados por GPU y motores físicos avanzados que permiten validación *sim-to-real* y evaluación de flujos experimentales antes de su despliegue físico (Darvish et al., 2025).

Un ejemplo reciente es MATTERIX, un marco multiescala acelerado por GPU que integra modelos físicos, semánticos y robóticos para construir gemelos digitales de laboratorios químicos completos, permitiendo diseñar *workflows* y entrenar políticas antes de su transferencia al entorno real (Darvish et al., 2025). Basado en simuladores como NVIDIA Isaac Sim e Isaac Lab e incorporando técnicas de aprendizaje por refuerzo, imitación y planificación jerárquica, el sistema amplía las capacidades de simulación robótica tradicional. No obstante, emplea modelos químicos semicuantitativos, mantiene desafíos en fidelidad *sim-to-real* y presenta elevados costes computacionales, lo que limita su adopción generalizada.

Rihm et al. (2024) proponen un marco basado en una red distribuida de gemelos digitales sustentados en modelos de conocimiento universales y grafos semánticos dinámicos, capaces de integrar infraestructura, dispositivos y conocimiento científico en una representación digital unificada del laboratorio. El denominado *Digital Lab Framework* emplea ontologías y *knowledge graphs* para construir gemelos interconectados y escalables, orientados a coordinar experimentos, orquestar robots y habilitar ecosistemas interoperables hacia un futuro *AI-scientist*. No obstante, el enfoque presenta limitaciones en interpretabilidad, capacidad de razonamiento automático e integración completa del conocimiento, además de requerir avances significativos en estandarización e interoperabilidad para cerrar la brecha tecnológica con los SDL plenamente autónomos.

Li et al. (2025) presentan una visión de laboratorios autónomos donde una representación digital del laboratorio, cercana a un gemelo digital operativo, coordina modelos predictivos, robótica experimental y gestión de datos en un flujo cerrado para el descubrimiento acelerado de materiales. Su arquitectura híbrida combina modelos computacionales (p. ej., DFT), plataformas robóticas automatizadas y técnicas de aprendizaje automático como *random forest*, redes neuronales y optimización

bayesiana. Asimismo, destacan la evolución hacia plataformas *end-to-end* impulsadas por modelos de lenguaje y agentes inteligentes capaces de generar hipótesis y ejecutar experimentos de forma autónoma.

En Lo et al. (2024), se introduce el concepto de *frugal twin* como una aproximación de bajo coste al gemelo digital para laboratorios autónomos, basada en *hardware* modular, *software* abierto y técnicas de optimización como aprendizaje automático y optimización bayesiana. Este enfoque permite implementar ciclos cerrados de diseño–medición–optimización en sistemas experimentales simplificados. Sin embargo, la reducción de costes conlleva menor fidelidad experimental y capacidades analíticas limitadas, lo que puede afectar la precisión y generalización de los resultados.

Seifrid et al. (2022) presentan una visión integral de los *self-driving laboratories* basada en plataformas de orquestación experimental como ChemOS, bases de datos estructuradas y algoritmos de planificación que coordinan experimentos autónomos en ciclos cerrados guiados por datos. El enfoque combina robótica de síntesis y caracterización con optimización bayesiana y aprendizaje automático multifidelidad, permitiendo explorar espacios químicos complejos y acelerar el descubrimiento de materiales.

Aunque los gemelos digitales y la inteligencia artificial prometen transformar la investigación experimental y la automatización científica, en la práctica muchos sistemas actuales permanecen en fases de planificación o en implementaciones limitadas. Su impacto real está condicionado por múltiples desafíos, entre ellos la fidelidad de las simulaciones, la disponibilidad y calidad de los datos, la falta de estandarización, las dificultades de integración *hardware–software* y las limitaciones en percepción y manipulación robótica (Oña et al., 2025). A ello se suma la complejidad de trasladar capacidades cognitivas humanas a sistemas autónomos, así como la escasa interpretabilidad y capacidad de generalización de numerosos modelos basados en enfoques *black-box*. Superar estas barreras requerirá avances coordinados en modelado físico, algoritmos de aprendizaje e infraestructuras digitales interoperables.

A pesar de los avances recientes, persiste una carencia significativa en la literatura: la ausencia de un marco metodológico estructurado que guíe, de forma progresiva, la construcción de gemelos digitales para laboratorios autónomos. Esta falta de directrices dificulta la transición desde plataformas automatizadas aisladas hacia ecosistemas científicos autónomos, interoperables y escalables. Asimismo, continúa existiendo una brecha respecto a los niveles avanzados de autonomía —particularmente el denominado nivel 5 (Tom et al., 2024)— basado en la integración de inteligencia artificial para la toma de decisio-

Tabla 1: Comparación de enfoques de gemelos digitales en laboratorios autónomos.

Trabajo	Gemelo estructural	Simulación multiescala	Sim-to-real	Autonomía IA	Marco metodológico
Darvish et al.	✓	✓	Parcial	×	×
Rihm et al.	✓	×	Conceptual	×	×
Tom et al.	✓	×	×	×	×
Li et al.	✓	Parcial	×	✓	×
Lo et al.	✓	Limitada	×	Basica	×
Este trabajo	✓	✓	Propuesto	Propuesto	✓

nes científicas autónomas, cuya implementación sistemática en *hardware* real aún no se ha materializado.

A diferencia de trabajos previos centrados principalmente en entornos de simulación de alta fidelidad o en marcos conceptuales semánticos, este trabajo propone una hoja de ruta incremental y reproducible, validada sobre infraestructura real. Para abordar estas limitaciones (véase Tabla 1), se presenta una metodología para el desarrollo progresivo de un gemelo digital aplicado a un laboratorio autónomo, sustentada en una arquitectura robótica modular que integra *middleware* de control, simulación física y modelado multiescala. El objetivo es proporcionar un marco conceptual y técnico que permita planificar de manera estructurada la evolución hacia laboratorios científicos autónomos, reconfigurables y preparados para la integración futura de inteligencia artificial avanzada.

El resto del artículo se organiza de la siguiente manera: la Sección 2 presenta la metodología propuesta, estructurada en seis niveles. La Sección 3 describe la implementación en el laboratorio Brain Lab y los resultados preliminares obtenidos. Finalmente, la Sección 4 recoge las conclusiones y líneas futuras de trabajo.

## 2. Metodología

La metodología se estructura en niveles incrementales ( ver Fig. 1) que permiten desarrollar el gemelo digital de forma gradual, asegurando validación progresiva, interoperabilidad entre simulación y sistema físico, y escalabilidad hacia arquitecturas cognitivas más complejas.

Para materializar esta metodología, la infraestructura del gemelo digital se fundamenta en una arquitectura robótica modular sustentada en ROS2 Macenski et al. (2022), entornos de simulación física de alta fidelidad como Gazebo Koenig and Howard (2004) y herramientas de modelado multiescala de acuerdo con la aplicación final. El objetivo principal es facilitar la transición desde sistemas automatizados convencionales hacia plataformas científicas autónomas capaces de integrar simulación, experimentación física y toma de decisiones basada en inteligencia artificial dentro de un ciclo cerrado de diseño-fabricación-medición-análisis.

### 2.1. Nivel I – Definición del alcance y modelado conceptual

La primera etapa consiste en definir el alcance funcional del laboratorio autónomo, incluyendo la identificación de activos físicos (robots, estaciones experimentales, instrumentos de caracterización y sistemas de almacenamiento), variables experimentales y métricas de evaluación. En esta fase se establecen los requisitos de trazabilidad de datos y se formalizan los flujos de trabajo experimentales siguiendo el paradigma *design–make–test–analyze* (DMTA). Este nivel proporciona una representación conceptual del laboratorio que sirve como base para la posterior implementación del gemelo digital.

### 2.2. Nivel II – Gemelo estructural, simulación física y arquitectura middleware

En la segunda etapa se construye un gemelo estructural del laboratorio mediante modelos geométricos y cinemáticos, utilizando motores de simulación física y arquitecturas de *middleware* robótico (ROS2, YARP, OROCOS, LCM, Apollo Cyber

RT, etc.). Los robots y dispositivos se representan mediante descripciones estandarizadas (como, por ejemplo, formatos URDF/Xacro o USD) que permiten simular la interacción física, la detección de colisiones y la planificación de trayectorias. Los sensores y controladores virtuales replican el comportamiento básico del sistema físico, facilitando la validación temprana de configuraciones robóticas y *layouts* experimentales sin necesidad de intervención directa sobre el *hardware* real. Este nivel permite validar aspectos de seguridad, accesibilidad y coordinación entre dispositivos, constituyendo la primera capa funcional del gemelo digital.



Figura 1: Metodología progresiva multinivel para el desarrollo de un gemelo digital en laboratorios autónomos de descubrimiento de materiales.

### 2.3. Nivel III – Gemelo funcional de procesos e instrumentación

En la tercera etapa, el gemelo digital se amplía mediante la incorporación de modelos funcionales de los dispositivos experimentales, tales como hornos, sistemas de dosificación, bancos de pruebas o equipos de caracterización. Estos elementos se implementan como módulos de *software* independientes que reproducen el comportamiento operativo de los dispositivos físicos a través de interfaces de comunicación homogéneas y estandarizadas (empleando, por ejemplo, patrones de publicación/suscripción, llamadas a servicios o arquitecturas orientadas a eventos). En la simulación se pueden introducir fuentes de incertidumbre, como ruido sensorial, retardos de comunicación o variabilidad experimental, con el objetivo de aproximar el comportamiento real del laboratorio. Este enfoque permite ejecutar *workflows* experimentales completos en simulación y evaluar estrategias de control antes de su despliegue físico.

### 2.4. Nivel IV – Orquestación experimental y gestión de datos

El siguiente nivel integra mecanismos de orquestación experimental capaces de coordinar robots, instrumentos y modelos digitales dentro de flujos de trabajo reproducibles. La planificación puede implementarse mediante arquitecturas jerárqui-

cas, máquinas de estados o árboles de comportamiento, mientras que la capa de datos registra eventos, parámetros experimentales y resultados en repositorios estructurados compatibles con principios FAIR (*Findable, Accessible, Interoperable and Reusable*). Esta capa convierte el gemelo digital en una infraestructura operativa capaz de ejecutar campañas experimentales virtuales con trazabilidad completa, facilitando el entrenamiento de algoritmos de inteligencia artificial y la validación de estrategias experimentales.

### 2.5. Nivel V – Integración de simulación multiescala

Una característica clave de la metodología propuesta es la incorporación progresiva de modelos multiescala que permiten representar fenómenos físicos y materiales a diferentes niveles de fidelidad. En la escala macroscópica se incluyen modelos de proceso simplificados, por ejemplo, perfiles térmicos o cinéticas aproximadas, mientras que en niveles superiores se integran modelos *surrogate* basados en aprendizaje automático o simulaciones de alta fidelidad bajo demanda. La combinación de modelos de distinta complejidad permite equilibrar precisión y coste computacional, habilitando la planificación experimental informada por predicciones digitales sin comprometer la eficiencia del sistema.

### 2.6. Nivel VI – Calibración *sim-to-real* y autonomía científica

La etapa final consiste en la calibración del gemelo digital mediante campañas experimentales controladas que alinean el comportamiento simulado con el sistema físico. Este proceso incluye la identificación de parámetros críticos, el análisis de errores sistemáticos y la validación de métricas como reproducibilidad, tiempo de ciclo o tasa de fallos. Una vez calibrado, el gemelo digital puede integrarse con algoritmos de aprendizaje automático y planificación experimental, permitiendo la toma de decisiones autónoma basada en optimización bayesiana, aprendizaje activo o razonamiento basado en datos. Este nivel representa la transición hacia laboratorios científicos autónomos donde el gemelo digital no solo replica el entorno físico, sino que también actúa como motor cognitivo del proceso experimental.

Una vez que el gemelo digital alcanza la paridad funcional con el laboratorio físico, se actualiza a un circuito cerrado de real a digital, donde los resultados experimentales reales se registran como transiciones de aprendizaje automático (RL). Las políticas se entrenan primero *offline* (RL por lotes) y solo después se perfeccionan *online* bajo restricciones de seguridad, mientras que la identificación continua del sistema actualiza el gemelo para reducir la brecha entre simulación y realidad.

## 3. Desarrollo y resultados

La propuesta metodológica presentada en este trabajo toma como caso de estudio la implementación del laboratorio Brain Lab del Instituto IMDEA Energía (Madrid). Esta plataforma robotizada, orientada a la síntesis y caracterización de materiales, actúa como banco de pruebas para materializar de forma progresiva el marco arquitectónico propuesto hacia un gemelo digital completo, orientado a la autonomía científica y a la integración de inteligencia artificial. La implementación práctica

de la metodología se ha desarrollado mediante una infraestructura híbrida que combina diferentes dispositivos e instrumentos de laboratorio, robótica móvil y manipuladores de doble brazo, permitiendo validar tanto aspectos logísticos como tareas de manipulación compleja.

### 3.1. Definición de la infraestructura física (Nivel I)

En cuanto a la definición de los activos físicos del laboratorio correspondientes al Nivel I, estos se han estructurado en cinco categorías funcionales principales para facilitar su integración sistemática en el gemelo digital: (1) elementos consumibles e insumos, (2) mecanismos y mobiliario de soporte, (3) instrumentación científica, (4) sistemas de percepción y (5) sistemas robóticos. Dentro de esta última categoría, se considera indispensable la incorporación de manipuladores robóticos debido a la complejidad de las tareas requeridas en este tipo de entornos experimentales. Operaciones como la transferencia de muestras entre estaciones no integradas en la mesa de trabajo y el manejo de instrumentación científica demandan un elevado grado de destreza y precisión. Por ello, el gemelo digital integra dos plataformas robóticas complementarias que cubren las necesidades de manipulación estacionaria y logística móvil del laboratorio. Asimismo, el entorno físico contempla los principales elementos experimentales ubicados sobre la mesa de trabajo, diseñados para la evaluación de materiales. Entre los componentes físicos e infraestructuras consideradas se encuentran:

- Infraestructura experimental (BRAIN-Lab): Está integrada por dos plataformas interconectadas: 1) una celda electroquímica para la multisíntesis de materiales, dotada de posicionamiento automatizado de muestras mediante un sistema de rotación controlado que permite su alineación precisa frente al sistema de medida sin intervención manual directa; y 2) un sistema de evaluación compuesto por 32 celdas estandarizadas y automatizadas para la realización masiva de ensayos (foto)electroquímicos.
- Bancos de almacenamiento de muestras: Constituidos por *racks* pasivos destinados a la organización de las muestras. Su manipulación y transferencia entre estaciones se realiza de forma completamente robótica, asegurando la repetibilidad y trazabilidad en el flujo experimental.
- Banco de pruebas instrumentado: Orientado a la preparación, caracterización y evaluación electroquímica de materiales aplicados a reacciones de interés energético y sostenible. Registra principalmente variables de corriente, voltaje, temperatura y formación de productos, integrando una capa física de comunicación basada en el protocolo Modbus.
- Yaskawa Motoman SDA10F Martínez et al. (2017); ROS-Industrial Consortium (2026): Se ha modelado e integrado este robot de doble brazo con 15 grados de libertad (7 por brazo más un eje de rotación en la cintura). Su configuración cinemática redundante es ideal para tareas de síntesis química complejas que requieren destreza similar a la humana.

- PAL Robotics TIAGo Pages et al. (2016); Tiago-Harmonic Contributors (2026): Para las tareas de logística y transporte de muestras entre estaciones, se ha incorporado el robot móvil manipulador TIAGo. Su integración en Gazebo incluye la simulación de sus sensores de navegación (LIDAR, cámaras RGB-D) y su base diferencial, permitiendo validar algoritmos de navegación autónoma dentro del entorno virtual del laboratorio antes de su despliegue físico.

Todos estos elementos, tras ser definidos conceptualmente en el Nivel I, se encuentran actualmente en fase de desarrollo y optimización de su modelado estructural dentro del entorno de simulación, garantizando una representación fidedigna para las siguientes fases del proyecto.

### 3.2. Implementación del gemelo estructural y funcional (Nivel II)

Para construir el gemelo digital descrito en el Nivel II, se ha instanciado la arquitectura agnóstica propuesta utilizando herramientas específicas de simulación y *middleware*. Las pruebas de rendimiento y la validación del entorno virtual se ejecutaron en una plataforma de *hardware* estándar, equipada con un procesador Intel Core i5-8250U (1.60 GHz), 32 GB de memoria RAM y gráficos integrados Intel UHD Graphics 620, operando bajo el sistema operativo Ubuntu 24.04 LTS. Para garantizar la sostenibilidad del desarrollo a largo plazo y la compatibilidad con los últimos estándares de robótica, se ha seleccionado ROS 2 Jazzy Jalisco (Macenski et al., 2022) como *middleware* de comunicación. Esta versión, al ser una de soporte a largo plazo (LTS, por sus siglas en inglés de *long term support*), ofrece la estabilidad y el soporte extendido necesarios para proyectos de infraestructura crítica como un laboratorio autónomo.

Como entorno de simulación física se ha optado por Gazebo Harmonic Koenig and Howard (2004); Open Robotics (2023). La elección de Harmonic responde a su integración nativa y optimizada con ROS 2 Jazzy. Esta combinación permite una interoperabilidad fluida, facilitando la transferencia de mensajes, transformadas (TF) y datos sensoriales entre el planificador del robot y el entorno simulado con latencias mínimas. Esto es crucial para cumplir con los requisitos del Nivel II de la metodología, donde la validación cinemática y la detección de colisiones dependen de la precisión del motor de física.

La integración del manipulador Motoman SDA10F presenta un desafío arquitectónico significativo, ya que sus controladores y descripciones oficiales están desarrollados para ROS 1 (Noetic), un entorno soportado nativamente solo en Ubuntu 20.04, mientras que el gemelo digital opera con ROS 2 (Jazzy) sobre Ubuntu 24.04. Para superar esta incompatibilidad a nivel de sistema operativo y compilar un puente de comunicación (*ros1\_bridge*) funcional, se ha empleado un entorno de construcción aislado basado en Docker disponible en repositorios públicos (Chang, 2024). Este contenedor utiliza repositorios PPA comunitarios (ROS for Jammy Team (2024)) para instalar las dependencias de ROS 1 simultáneamente a las de ROS 2. Disponer de ambos ecosistemas permitió compilar el puente desde el código fuente e integrar un archivo de reglas de mapeo dinámico. Esta compilación a medida es estrictamente necesaria para traducir de forma explícita campos de datos renombrados entre distribuciones y evitar la pérdida de paquetes

en mensajes de control y servidores de acciones complejas, una limitación inherente a los binarios genéricos.

### 3.3. Resultados Preliminares

Actualmente, el desarrollo se encuentra consolidado en el Nivel II (Gemelo estructural) de la metodología propuesta. Los esfuerzos se han centrado en la creación fidedigna del entorno y la optimización de los activos digitales (*asset optimization*) (Fig. 2).

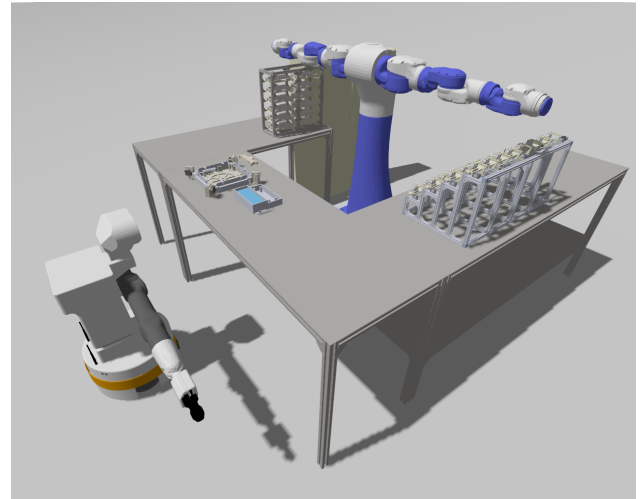


Figura 2: Representación del gemelo estructural del Brain Lab en Gazebo Harmonic, mostrando la integración de los robots TIAGo y Motoman SDA10F.

La importación directa de modelos CAD de ingeniería mecánica generaba archivos excesivamente pesados para el simulador; el entorno original presentaba mallas con más de 3,1 millones de polígonos y un tamaño de 361 MB. Mediante un proceso de decimado y simplificación de geometrías (*convex hull decomposition*), se logró reducir el recuento de caras a 50 000 y el tamaño a 4,9 MB, lo que supone una reducción de la huella de memoria superior al 98 %.

En paralelo a la optimización geométrica, se ha desarrollado un flujo de trabajo sistemático para la extracción precisa de parámetros dinámicos e inerciales del manipulador Motoman SDA10F. Esta tarea fue estrictamente necesaria debido a que los archivos URDF de los repositorios oficiales carecen de propiedades dinámicas (masa, centros de masa y tensores de inercia). Habitualmente, los fabricantes industriales omiten estos datos por confidencialidad o porque la planificación cinemática estándar no los requiere, delegando los cálculos dinámicos a sus propios controladores físicos cerrados. Para resolver esta carencia a partir de las mallas de superficie disponibles, se aplicó un método de referenciación a cero (*origin zeroing*) en software CAD, alineando el origen global del programa con los requerimientos de coordenadas locales de las articulaciones en URDF. Asimismo, para compensar la suposición de solidez volumétrica del CAD frente a la realidad de los eslabones robóticos huecos, se introdujo una aproximación de densidad geométrica. Empleando las propiedades del Aluminio 6061 ( $\approx 2,7 \text{ g/cm}^3$ ) como línea base, se escaló la matriz de inercia para que el peso total del ensamblaje coincidiera exactamente con los 220 kg nominales especificados por el fabricante (Yaskawa Motoman,

n.d.). Esta parametrización inercial realista es vital para habilitar estrategias de control de dinámica inversa y minimizar la brecha *sim-to-real*.

Esta simplificación geométrica ha tenido un impacto dual muy revelador en el rendimiento. Por un lado, redujo drásticamente la carga de renderizado en la GPU, logrando una mejora notable en la fluidez visual al interactuar con la interfaz gráfica y la cámara de Gazebo. Esta fluidez es un factor indispensable para que los investigadores puedan supervisar visualmente las trayectorias sin latencia gráfica. Por otro lado, la carga del motor de física o factor de tiempo real (RTF, por sus siglas en inglés de *real time factor*) experimentó una mejora marginal, pasando de 0,51 a 0,54. Este resultado empírico demuestra que, en laboratorios híbridos complejos, el verdadero cuello de botella computacional no reside en el cálculo de colisiones del entorno estático, sino en la resolución continua de la dinámica de los manipuladores (con múltiples grados de libertad combinados) y en las altas frecuencias de actualización de los controladores.

A pesar de este límite actual en la velocidad de la física, la integración operativa de los robots TIAGo y Motoman (Fig. 2) se ha completado con éxito. A través de descripciones cinemáticas estandarizadas, el gemelo estructural permite planificar trayectorias libres de colisiones y validar la disposición espacial (*layout*) de los experimentos en simulación antes de enviar comandos al *hardware* físico, cerrando la brecha inicial *sim-to-real* y sentando las bases para la orquestación en los niveles superiores.

#### 4. Conclusiones

En este trabajo se ha presentado un marco metodológico progresivo para el desarrollo de gemelos digitales aplicados a laboratorios autónomos de descubrimiento de materiales, estructurado en seis niveles que abarcan desde la definición conceptual hasta la calibración *sim-to-real* y la integración de inteligencia artificial. La principal contribución radica en la sistematización del proceso de construcción del gemelo digital, proporcionando una hoja de ruta clara que facilita la transición desde entornos automatizados aislados hacia infraestructuras científicas autónomas y reproducibles.

La implementación del Nivel II en el Brain Lab del Instituto IMDEA Energía ha permitido validar la viabilidad técnica de la arquitectura basada en ROS2 y Gazebo, demostrando la integración coherente de robótica móvil, manipulación dual e instrumentación experimental dentro de un entorno simulado funcional. Los resultados preliminares confirman la idoneidad del enfoque estructural como base para la incorporación progresiva de modelos funcionales, simulación multiescala y estrategias de orquestación experimental.

De este modo, el enfoque propuesto resulta altamente reproducible y puede ser adoptado por otros centros de investigación para mitigar el riesgo tecnológico inherente a la implementación de estas tecnologías.

La validación experimental de los niveles III–VI constituye trabajo en curso, incorporando modelos funcionales de instrumentación, el análisis dinámico de la interacción física, calibración sistemática *sim-to-real* y mecanismos de aprendizaje autónomo orientados a la toma de decisiones científicas de nivel avanzado.

#### Agradecimientos

Este trabajo ha sido realizado parcialmente gracias al apoyo del Proyecto "FotoArt 5.0-CM, Laboratorios Inteligentes para la Ciencia del Futuro: Descubrimiento de materiales avanzados para la Fotosíntesis Artificial - TEC-2024/TEC-308", financiado por el Programa de Actividades de I+D en Tecnologías de la Comunidad de Madrid.

#### Referencias

- Akroyd, J., Mosbach, S., Bhawe, A., Kraft, M., 2021. Universal digital twin - a dynamic knowledge graph. *Data-Centric Engineering* 2, e14. DOI: 10.1017/dce.2021.10
- Chang, T., 2024. ros-jazzy-ros1-bridge-builder. <https://github.com/TommyChangUMD/ros-jazzy-ros1-bridge-builder>, accessed: 2026-02-26.
- Darvish, K., Sohal, A., Mandal, A., Fakhrudeen, H., Radulov, N., Zhou, Z., Veeramani, S., Choi, J., Han, S., Zhang, B., et al., 2025. Matterix: toward a digital twin for robotics-assisted chemistry laboratory automation. *Nature computational science*, 1–16.
- Koenig, N., Howard, A., 2004. Design and use paradigms for gazebo, an open-source multi-robot simulator. In: 2004 IEEE/RSJ International Conference on Intelligent Robots and Systems (IROS) (IEEE Cat. No.04CH37566). Vol. 3. pp. 2149–2154. DOI: 10.1109/IROS.2004.1389727
- Li, J., Ding, C., Liu, D., Chen, L., Jiang, J., 2025. Autonomous laboratories in china: an embodied intelligence-driven platform to accelerate chemical discovery. *Digital Discovery*.
- Lo, S., Baird, S. G., Schrier, J., Blaiszik, B., Carson, N., Foster, I., Aguilar-Granda, A., Kalinin, S. V., Maruyama, B., Politi, M., et al., 2024. Review of low-cost self-driving laboratories in chemistry and materials science: the "frugal twin" concept. *Digital Discovery* 3 (5), 842–868.
- Macenski, S., Foote, T., Gerkey, B., Lalancette, C., Woodall, W., 2022. Robot operating system 2: Design, architecture, and uses in the wild. *Science robotics* 7 (66), eabm6074.
- Martinez, C., Barrero, N., Hernandez, W., Montañó, C., Mondragón, I., 2017. Setup of the yaskawa sda10f robot for industrial applications, using ros-industrial. In: *Advances in Automation and Robotics Research in Latin America: Proceedings of the 1st Latin American Congress on Automation and Robotics*, Panama City, Panama 2017. Springer, pp. 186–203.
- Open Robotics, 2023. Gazebo sim: Harmonic release. <https://gazebo.org/>, accessed: 2026-02-22.
- Oña, E. D., Mena, L., Copaci, D. S., 2025. Desafíos en manipulación robótica inteligente en laboratorios autónomos. *Jornadas de Automática* 46. URL: [https://revistas.udc.es/index.php/JA\\_CEA/article/view/12244/9112](https://revistas.udc.es/index.php/JA_CEA/article/view/12244/9112) DOI: 10.17979/ja-cea.2025.46.12244
- Pages, J., Marchionni, L., Ferro, F., 2016. Tiago: the modular robot that adapts to different research needs. In: *International workshop on robot modularity*, IROS. Vol. 290. sn, p. 98.
- Rihm, S. D., Bai, J., Kondinski, A., Mosbach, S., Akroyd, J., Kraft, M., 2024. Transforming research laboratories with connected digital twins. *Nexus* 1 (1).
- ROS for Jammy Team, 2024. ROS for Jammy (Ubuntu Noble archive). <https://launchpad.net/~ros-for-jammy/+archive/ubuntu/noble>, accessed: 2026-02-26.
- ROS-Industrial Consortium, 2026. Motoman ros-industrial support repository. <https://github.com/ros-industrial/motoman/tree/noetic-devel>, accessed: 2026-02-22.
- Seifrid, M., Pollice, R., Aguilar-Granda, A., Morgan Chan, Z., Hotta, K., Ser, C. T., Vestfrid, J., Wu, T. C., Aspuru-Guzik, A., 2022. Autonomous chemical experiments: Challenges and perspectives on establishing a self-driving lab. *Accounts of Chemical Research* 55 (17), 2454–2466.
- Tiago-Harmonic Contributors, 2026. Tiago harmonic ros 2 simulation repository. [https://github.com/Tiago-Harmonic/tiago\\_harmonic/tree/jazzy](https://github.com/Tiago-Harmonic/tiago_harmonic/tree/jazzy), accessed: 2026-02-22.
- Tom, G., Schmid, S. P., Baird, S. G., Cao, Y., Darvish, K., Hao, H., Lo, S., Pablo-García, S., Rajaonson, E. M., Skreta, M., et al., 2024. Self-driving laboratories for chemistry and materials science. *Chemical Reviews* 124 (16), 9633–9732.
- Yaskawa Motoman, n.d. Motoman SDA10F Datasheet. [Robots.com](https://www.yaskawamotoman.com), accessed: 2026-02-26.