

Modelo de diálogo con IA generativa *offline* como intermediario en la automatización de procesos en laboratorios de síntesis de materiales.

Avance de tesis doctoral

M.C. Alberto Esteban Reyes Peralta

Doctorado en Ingeniería del Lenguaje y del Conocimiento

Contenido

- Propósito del Proyecto
- Revisión del estado del arte
- Arquitectura propuesta
- Conclusiones

Propósito del proyecto

Diseñar e implementar un modelo de diálogo con IA generativa offline (LLM) como intermediario entre el investigador y los sistemas automatizados del Laboratorio de Síntesis de Materiales, elevando reproducibilidad, seguridad y productividad.

¿Por qué offline?: resguardo de datos sensibles, operación continua sin nube y reducción de costos operativos.

Revisión del estado del arte

Resultado esperado de la revisión: hoja de ruta de diseño y validación del prototipo con criterios de aceptación medibles.

Metodología de revisión

- Búsqueda sistemática (2019–2025) en tópicos: “offline generative AI”, “laboratory automation”, “conversational robotics”, “language models”.
- Criterio: aplicabilidad a diseño de un LLM offline intermediario, aunque no sea específico de síntesis de materiales.
- Clasificación en tres categorías: (1) LLMs/IA generativa, (2) Automatización y robótica, (3) Marcos de automatización y evaluación.

IA Generativa y LLMs

Artículo	Aplicación	Contribución	Rendimiento
Negrini & Lippi (2023)	Escritura científica	Diagnósticos troponina	Sensibilidad 93%, Especificidad 88%
Schmidgall et al. (2025)	Asistencia investigación	Agent Laboratory	92.8–95.7% éxito en subtareas
Zimmermann et al. (2025)	Ciencia de materiales	Prototipado rápido	Prototipos funcionales en 24 h
Kahng et al. (2019)	Visualización GAN	GAN Lab	Equilibrio de entrenamiento

Automatización y Robótica en Laboratorios

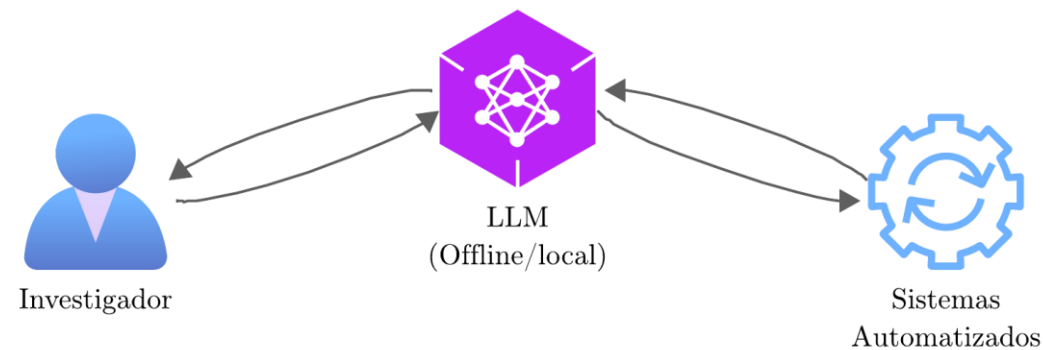
Artículo	Aplicación	Contribución	Rendimiento
Benjdira et al. (2025)	Control robótico.	Arquitectura PRM con LLM orquestador.	66% de precisión.
Conrad et al. (2025)	Automatización de laboratorio.	Brazo robótico con LLM.	reducción de tiempo en tareas repetitivas.
Inagaki et al. (2023)	Scripts biológicos.	Pipeline NL→Python sin necesidad de programar.	95% paso a paso; 71% meta-orientado (GPT-4).
Zeng et al. (2023)	Robótica (revisión).	Aplicaciones LLM.	Mejoras del 20–40% reportadas.
Zhang et al. (2025)	Manipulación robótica.	Modelos generativos.	Eficiencia de datos y trayectorias más naturales.

Marcos de Automatización y Evaluación

Artículo	Aplicación	Contribución	Rendimiento
Chandra (2025)	Pruebas automatizadas de LLM	LLMAutoE2E para generación de casos, ejecución, revisión y reporte	Cobertura ~95%
Del Río-Chanona et al. (2025)	Simulación de conducta humana	LLMs replican patrones en mercados	70% similitud con humanos
Mahadevan et al. (2024)	Comportamientos robóticos expresivos	GenEM: instrucciones NL→código de movimiento (few-shot)	Conductas competentes
Jabbour & Reddi (2024)	Seguridad de sistemas autónomos	Scorecard de riesgos para clasificar usos y comunicar peligrosidad	Marco de evaluación cualitativa por aplicaciones

Arquitectura propuesta

- Interfaz conversacional ↔ LLM offline ↔ Sistemas Automatizados.
 - Percepción/actuación
 - Herramientas
 - Memoria y bitácoras
- Validación humana en puntos críticos (human-in-the-loop).



Requisitos para operación offline

Optimización de modelos para hardware local.

Gestión y protección de datos sensibles.

Orquestación robusta de herramientas.

Mecanismos de caché y recuperación local de conocimiento técnico.

Telemetría local y trazabilidad para reproducibilidad.

Métricas y evaluación

Exactitud técnica, tasa de éxito por tarea.

Reproducibilidad (% repetición, desviación en resultados).

Eficiencia: tiempo de ciclo.

Costos: uso de reactivos/consumibles, horas-persona.

Seguridad: cumplimiento, incidentes, exposición a datos.

Riesgos y mitigaciones

- IA: plan inseguro / alucinaciones.
- Fallo de equipo o comunicación.
- Peligros químicos/físicos
- Fuga o pérdida de datos
- Confianza excesiva en la IA

Conclusiones

- Los LLM habilitan automatización conversacional útil en laboratorios.
- Operar offline es factible con optimización y buenas prácticas de seguridad.
- Adoptar un modelo híbrido (LLM + humano-en-el-bucle) para tareas críticas.
- Iniciar pilotos controlados con indicadores clave de desempeño claros y escalamiento progresivo.

Referencias

- Benjdira, B., Koubaa, A., & Ali, A. M. (2025). Prompting Robotic Modalities (PRM): A structured architecture for centralizing language models in complex systems. *Future Generation Computer Systems*, 166, 107723. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.future.2025.107723>
- Chandra, R. (2025). Automation Frameworks for End-to-End Testing of Large Language Models (LLMs). *Journal of Information Systems Engineering and Management*, 10, 464–472. <https://doi.org/10.52783/jisem.v10i43s.8400>
- Conrad, S., Auth, P., Masselter, T., & Speck, T. (2025). Lowering the Entrance Hurdle for Lab Automation: An Artificial Intelligence Supported, Interactive Robotic Arm for Automated, Repeated Testing Procedures. *Advanced Intelligent Systems*. <https://doi.org/10.1002/aisy.202401086>
- del Rio-Chanona, R. M., Pangallo, M., & Hommes, C. (2025). *Can Generative AI agents behave like humans? Evidence from laboratory market experiments*.
- Inagaki, T., Kato, A., Takahashi, K., Ozaki, H., & Kanda, G. N. (2023). *LLMs can generate robotic scripts from goal-oriented instructions in biological laboratory automation*.
- Jabbour, J., & Janapa Reddi, V. (2025). Generative AI Agents in Autonomous Machines: A Safety Perspective. In *Proceedings of the 43rd IEEE/ACM International Conference on Computer-Aided Design*. Association for Computing Machinery.

Referencias

- Kahng, M., Thorat, N., Chau, D. H. (Polo), Viégas, F. B., & Wattenberg, M. (2019). GAN Lab: Understanding Complex Deep Generative Models using Interactive Visual Experimentation. *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics*, 25(1), 310–320. <https://doi.org/10.1109/TVCG.2018.2864500>
- Mahadevan, K., Chien, J., Brown, N., Xu, Z., Parada, C., Xia, F., Zeng, A., Takayama, L., & Sadigh, D. (2024). Generative Expressive Robot Behaviors using Large Language Models. *Proceedings of the 2024 ACM/IEEE International Conference on Human-Robot Interaction*, 482–491. <https://doi.org/10.1145/3610977.3634999>
- Negrini, D., & Lippi, G. (2023). Generative Artificial Intelligence in (laboratory) medicine: friend or foe? *Biochimica Clinica*. https://doi.org/10.19186/BC_2023.025
- Schmidgall, S., Su, Y., Wang, Z., Sun, X., Wu, J., Yu, X., Liu, J., Moor, M., Liu, Z., & Barsoum, E. (2025). *Agent Laboratory: Using LLM Agents as Research Assistants*.
- Zhang, K., Yun, P., Cen, J., Cai, J., Zhu, D., Yuan, H., Zhao, C., Feng, T., Wang, M. Y., Chen, Q., Pan, J., Zhang, W., Yang, B., & Chen, H. (2025). *Generative Artificial Intelligence in Robotic Manipulation: A Survey*.
- Zimmermann, Y., Bazgir, A., Al-Feghali, A., Ansari, M., Bocarsly, J., Brinson, L. C., Chiang, Y., Circi, D., Chiu, M.-H., Daelman, N., Evans, M. L., Gangan, A. S., George, J., Harb, H., Khalighinejad, G., Khan, S. T., Klawohn, S., Lederbauer, M., Mahjoubi, S., ... Blaiszik, B. (2025). *34 Examples of LLM Applications in Materials Science and Chemistry: Towards Automation, Assistants, Agents, and Accelerated Scientific Discovery*.