

Interdisciplinary Software Engineering for Chemical Laboratory Simulation: An AI-Enhanced Integrator Project

Abstract. This paper presents an integrator project currently under development during the first semester of 2026 in which Software Science students build open-source virtual laboratory simulators for Chemical Engineering, collaborating with Chemistry faculty as real clients. Four student teams develop 20 interactive experiments organized in four thematic areas, each implementing a five-layer architecture that replicates real laboratory conditions including measurement uncertainty, human error, and pedagogically designed error consequences. A seed-based system generates unique experimental datasets per student. Generative AI is employed as a learning accelerator under critical supervision. The project constitutes a potentially replicable model for computing education that bridges disciplinary boundaries.

Keywords: interdisciplinary education, software engineering, artificial intelligence, open source, laboratory simulation.

Ingeniería de Software Interdisciplinaria para la Simulación de Laboratorios Químicos: Un Proyecto Integrador con IA que Vincula Informática e Ingeniería Química

Resumen. Se presenta un proyecto integrador en desarrollo durante el primer cuatrimestre de 2026 en el que estudiantes de Ingeniería Informática construyen simuladores de laboratorio virtuales de código abierto para ingeniería química, con docentes de química como clientes reales. Cuatro equipos desarrollan 20 prácticas interactivas en cuatro ejes temáticos, cada una con una arquitectura de cinco capas que replica condiciones reales de laboratorio incluyendo incertidumbre de medición, error humano y consecuencias de error diseñadas pedagógicamente. Un sistema de semillas genera escenarios experimentales únicos por estudiante. La IA generativa se emplea como acelerador del aprendizaje bajo supervisión crítica. El proyecto constituye un modelo potencialmente replicable para la educación en Computación que cruza fronteras disciplinares.

Palabras clave: educación interdisciplinaria, ingeniería de software, inteligencia artificial, código abierto, simulación de laboratorio.

1 Introducción

Los cursos de Taller de Programación o Trabajos Integradores suelen proponer aplicaciones genéricas que raramente exigen el diálogo con un cliente no técnico o la comprensión de un dominio científico ajeno (López Rodríguez & García Fraile, 2012). Paralelamente, la enseñanza de la Ingeniería Química depende de laboratorios prácticos cuyo acceso puede ser limitado. La revisión de Chan et al. (2021) concluyó que los laboratorios virtuales, combinados con laboratorios reales, mejoran significativamente la comprensión conceptual. Sin embargo, la oferta de software libre orientado a la pedagogía de laboratorios de ingeniería química es escasa: los simuladores comerciales

resultan inaccesibles por su costo, y las alternativas libres como PhET (Universidad de Colorado) se limitan a contenidos introductorios de física y química general, sin cubrir las prácticas específicas de la disciplina.

La irrupción de los LLMs agrega una dimensión nueva. La revisión de Prather et al. (2025) concluyó que el campo superó la fase de pánico y optimismo utópico hacia una comprensión basada en evidencia. El desafío pedagógico no es prohibir la IA, sino alfabetizar en su uso crítico (Denny et al., 2024).

Este trabajo presenta un proyecto integrador en el que estudiantes de Ingeniería Informática desarrollan simuladores de laboratorio de química en colaboración con docentes de Ingeniería Química. La propuesta tiene cuatro ejes: (1) interdisciplinariedad genuina con clientes reales; (2) software libre; (3) uso pedagógico de la IA bajo supervisión crítica; y (4) dar oportunidad de profundización de temas de Química y Física para fortalecer la formación básica de los estudiantes.

2 Metodología

La experiencia se desarrolla en una materia de Taller de Programación de una carrera de Ingeniería Informática (8 horas semanales, un cuatrimestre). Se conformaron cuatro equipos de 4-5 estudiantes, cada uno responsable de un eje temático con cinco prácticas. Docentes de Química Física de la misma facultad actúan como clientes, con reuniones periódicas de validación de modelos.

El uso de IA generativa se estructura en cuatro fases: investigación de dominio (LLMs para comprensión inicial, contrastada con bibliografía), diseño arquitectónico, implementación (con revisión obligatoria en pull requests de todo código generado por IA) y testeo extensivo y validación contra soluciones analíticas conocidas.

La evaluación de cada equipo pondera tres dimensiones: la fidelidad del modelo fisicoquímico, la aplicación de buenas prácticas de software (control de versiones, pruebas y revisión de pull requests) y el cumplimiento de los requerimientos definidos por los docentes de química en su rol de clientes. Internamente, cada equipo reparte responsabilidades por capa de la arquitectura sobre un repositorio compartido. La validación de los modelos combina el contraste cuantitativo contra soluciones analíticas conocidas con la revisión cualitativa en las reuniones de cliente.

2.1 Arquitectura de software

Cada simulador implementa una arquitectura de cinco capas: Capa 1 (modelo fisicoquímico) con ecuaciones exactas y parámetros de literatura; Capa 2 (ruido) con tres componentes (instrumental, error humano y sesgo sistemático); Capa 3 (instrumentos) que modela precisión, drift y descalibración; Capa 4 (eventos) que genera datos incorrectos cuando el estudiante omite pasos del protocolo, e implementa gamificación con puntuación y logros desbloqueables; y Capa 5 (UI) con mesa de laboratorio interactiva.

El sistema de semillas asigna una semilla numérica por estudiante; un generador pseudoaleatorio determinista produce parámetros específicos (concentraciones, constantes cinéticas, niveles de ruido), generando escenarios únicos pero reproducibles y permitiendo una evaluación consistente.

3 Simuladores desarrollados

La suite abarca 20 prácticas organizadas en cuatro ejes temáticos (Cuadro 1).

Cuadro 1. Prácticas de laboratorio por grupo de desarrollo.

Grupo	Eje temático	Prácticas
1	Cinética y catálisis	Reloj de yodo, cristal violeta, cinética enzimática (Michaelis-Menten), descomposición de H_2O_2 , adsorción (Langmuir/Freundlich)
2	Electroquímica	Celdas galvánicas (Nernst), titulación conductimétrica, voltamperometría cíclica, titulación potenciométrica, corrosión (Butler-Volmer/Tafel)
3	Termodinámica	Calorimetría de neutralización, Clausius-Clapeyron, descenso crioscópico, diagrama de fases sólido-líquido, equilibrio líquido-vapor (Raoult)
4	Espectroscopía y transporte	Beer-Lambert, espectroscopía IR del HCl, fluorescencia (Stern-Volmer), viscosimetría de Ostwald, difusión en gel (Fick)

Cuadro 2. Comparación con alternativas existentes.

Característica	PhET	DWSIM	Labster	Esta suite
Código abierto	Sí	Sí (GPL)	No	Sí (MIT)
Ruido experimental	No	Complejo	No	Sí (3 comp.)
Consecuencias de error	No	No	Parcial	Sí
Semillas por estudiante	No	No	No	Sí
Gamificación	No	No	Sí	Sí

4 Discusión

La suite ocupa un nicho no cubierto por las alternativas existentes (Cuadro 2). Se diferencia en tres aspectos: la arquitectura de cinco capas garantiza realismo sin complejidad operativa excesiva; el sistema de semillas genera escenarios únicos y reproducibles; y el motor de consecuencias de error convierte los errores de procedimiento en oportunidades de aprendizaje. A modo de ejemplo, el simulador puede contemplar que los alumnos se olviden de diluir una solución para frenar una reacción (error procedimental) y eso traducirse en un resultado sesgado.

El principal desafío es la asimetría de conocimiento entre los estudiantes de informática y el dominio químico. La IA acelera notablemente el aprendizaje, pero no elimina la necesidad de diálogo con los especialistas. En el uso de LLMs se observaron límites recurrentes: parámetros fisicoquímicos plausibles pero incorrectos, ecuaciones aplicadas fuera de su rango de validez y llamadas a bibliotecas con APIs desactualizadas. Estos casos refuerzan el sentido de las salvaguardas ya descritas (revisión de pull requests, contraste con bibliografía y validación analítica): ningún resultado generado

por IA se incorpora sin verificación. La organización en cuatro grupos temáticos demostró ser efectiva: cada equipo desarrolla coherencia de dominio y reutiliza patrones entre las cinco prácticas de su eje.

Del lado docente, la modalidad demanda una mayor dedicación del equipo de cátedra. Los tutores debieron incorporar conocimientos de dominios nuevos y diseñar actividades de evaluación específicas; además, la existencia de múltiples enunciados, frente al enunciado único habitual, dificulta sostener un criterio homogéneo entre evaluadores, aunque hasta el momento no se observaron asimetrías notables. Cada tutor vela también por los estándares de calidad de software y por que las soluciones de cada grupo cubran los tópicos de la asignatura.

El modelo tiene potencial de replicabilidad: la estructura de cuatro ejes (cliente real, software libre, IA supervisada, profundización de saberes) es transferible a otras cátedras que establezcan un vínculo análogo con otra carrera. No obstante, la efectividad deberá ser validada en contextos distintos. La experiencia se limita a cuatro equipos en una única institución, y los resultados de aprendizaje en los estudiantes de Ingeniería Química (los usuarios finales de los simuladores) aún no han sido medidos, pero se pondrán en práctica durante el segundo cuatrimestre.

5 Conclusiones

Se presentó un proyecto integrador interdisciplinario en el que estudiantes de Ingeniería Informática desarrollan 20 simuladores de laboratorio de ingeniería química con docentes de esa disciplina como clientes reales. La propuesta combina realismo experimental por capas, escenarios únicos por semillas, un motor de consecuencias de error con gamificación y el uso supervisado de IA. Como trabajo futuro se prevé completar las 20 prácticas, probar la suite con estudiantes de ingeniería química, y diseñar un estudio cuasiexperimental para medir el impacto en el aprendizaje. De manera preliminar, se contemplan variables como la comprensión conceptual (con instrumentos pre y post), la capacidad de detección de errores experimentales y el nivel de involucramiento, junto con dimensiones pedagógicas como la transferencia entre teoría y práctica y la autonomía en el uso crítico de la IA.

Referencias

- Denny, P., et al. (2024). Computing education in the era of generative AI. *Communications of the ACM*, 67(2), 56–67. <https://doi.org/10.1145/3624720>
- Chan, P., Van Gerven, T., Dubois, J-L, & Bernaerts, K.. (2021). Virtual chemical laboratories: A systematic literature review. *Computers and Education: Open*, 2, 100053. <https://doi.org/10.1016/j.caeo.2021.100053>
- López Rodríguez, N. M., & García Fraile, J. A. (2012). Proyectos integradores para la formación y desarrollo de competencias profesionales. *Revista de Formación e Innovación Educativa Universitaria*, 5(3), 112–125.
- Prather, J., et al. (2025). Beyond the hype: A comprehensive review of current trends in generative AI research, teaching practices, and tools. *Proc. ITiCSE-WGR*, 1–55. ACM. <https://doi.org/10.1145/3689187.3709614>