

Universidad Peruana Cayetano Heredia



FACULTAD DE CIENCIAS Y FILOSOFÍA

**Comparación de modelos de aprendizaje automático
químicamente interpretativos en la clasificación de
moléculas de colorantes naturales de celdas solares
sensibilizadas por tintes basados en relaciones
estructura-propiedad**

Proyecto de tesis

Autor:

Bach. Dan Santivañez Gutarra

Asesora:

Dra. María Quintana Caceda

Lima - Perú

2022

Índice

1. Introducción	3
1.1. Problemática	3
1.2. Justificación	7
1.3. Antecedentes	7
2. Pregunta de investigación y objetivos	8
2.1. Pregunta de investigación	8
2.2. Objetivos	8
3. Marco Teórico	8
3.1. Celdas solares sensibilizadas por tintes (CSPT)	8
3.1.1. Componentes de las CSPT	8
3.1.2. Funcionamiento de las CSPT	8
3.1.3. Tipos de sensibilizantes	8
3.2. Colorantes naturales	8
3.2.1. Características físicas y químicas	8
3.2.2. Familias de colorantes naturales usados como sensibilizantes	8
3.3. Enfoque de investigación direccionado por datos	8
3.3.1. Tipos de enfoques de investigación en química	8
3.3.2. Tipos de estructuras de datos en química	8
3.3.3. Extracción y preprocesamiento de datos	8
3.3.4. Tratamiento de datos	8
3.3.5. Descubrimiento y análisis de características	8
3.3.6. Entrenamiento y evaluación de modelos	8
3.3.7. Validadores estadísticos de los modelos	8
3.4. Modelos de aprendizaje automático	8
3.4.1. Naturaleza de los modelos de aprendizaje automático	8
3.4.2. Interpretatividad de los modelos de aprendizaje automático	8
3.4.3. Clasificadores clásicos	8
3.4.4. Clasificadores ensamblados	8
3.4.5. Evaluadores de los resultados de clasificación	8
4. Materiales y métodos	8
4.0.1. Extracción de datos	8
4.0.2. Preprocesamiento de datos	8
4.0.3. Descubrimiento y análisis de características	8
4.0.4. Entrenamiento y evaluación del modelo 1	8
4.0.5. Entrenamiento y evaluación del modelo 2	8
4.0.6. Entrenamiento y evaluación del modelo 3	8
4.0.7. Comparación de modelos	8
4.1. Análisis estadístico	8
4.1.1. Pruebas de normalidad	8
5. Referencias bibliográficas	9
6. Cronograma de trabajo	11
7. Presupuesto y financiamiento	11

Resumen

Las celdas solares son dispositivos que convierten energía lumínica en energía eléctrica útil a través de fenómenos electroquímicos. El desarrollo de materiales sostenibles y con mayor eficiencia es un reto de investigación y también ambiental, ya que resolverlo conlleva explorar miles de millones de compuestos y hallar dicho tipos de materiales favorecerían el consumo de energías limpias. Esta exploración requiere recursos humanos y materiales que muchos investigadores no pueden proporcionarse, es entonces que las simulaciones computacionales y el enfoque dirigido por datos cobran importancia. El uso de experimentos *in silico* han ...

1. Introducción

1.1. Problemática

La dependencia de los combustibles fósiles traería consigo problemas como la inseguridad energética y el incremento de la temperatura global a causa del aumento de los gases de efecto invernadero. Las sociedades que concentran la producción de los combustibles fósiles podrían controlar geopolítica y económicamente a otras [1], esta inseguridad energética se evidenció en la crisis del petróleo de 1973 [2] y en la disputa entre Rusia y la Unión Europea por el suministro de gas en este año [3]. En contraste, el problema del incremento de la temperatura global es un problema mediáticamente más discreto pero no menos alarmante. Tanto así que, en el 2018, la *Intergovernmental Panel on Climate Change* (IPCC) emitió un informe sobre los impactos que causaría dicho incremento en 1.5°C con respecto a los niveles preindustriales para el 2040, que en resumidas cuentas, se prevé un detrimento crítico y sin retorno de la civilización y la biósfera [4]. A fin de hacer frente a estos problemas, la transición hacia una matriz energética mundial donde predominen fuentes energéticas menos contaminantes y descentralizadas es la solución.

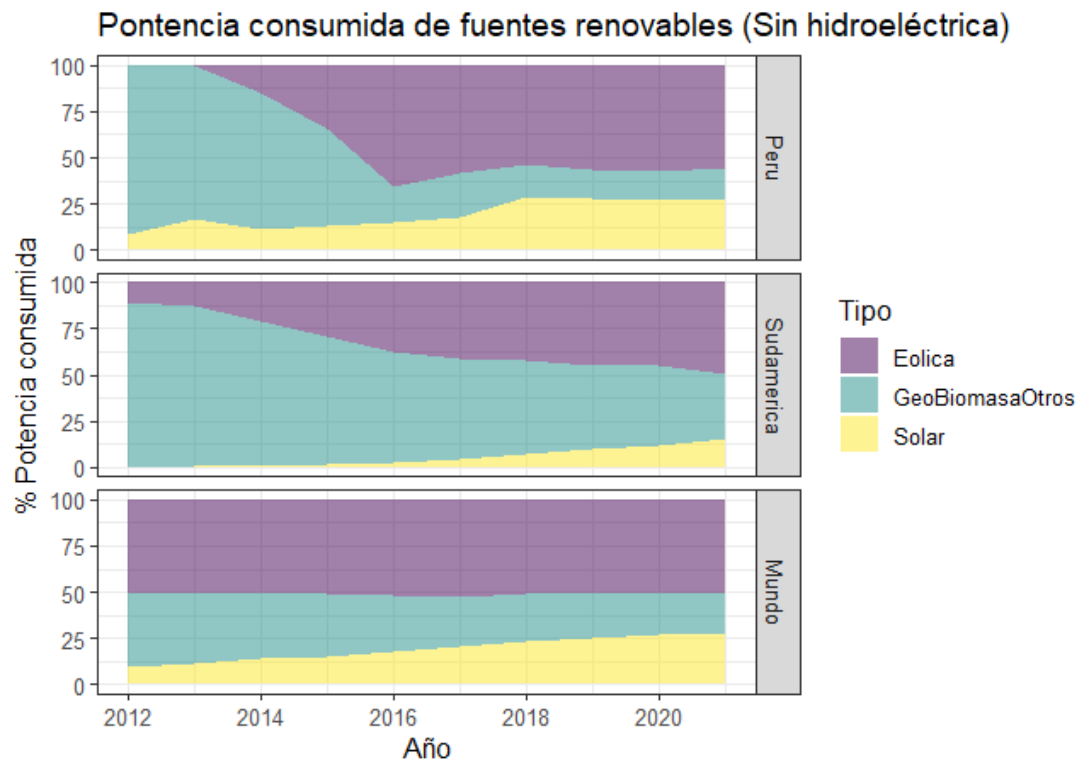


Figura 1: Comparación del porcentaje de la cantidad de potencia consumida por tipo de energía renovable sin considerar la hidroeléctrica. Fuente: Our World in Data [5]

Las fuentes renovables reúnen dichas características, por lo que muchos gobiernos y organizaciones han tomado acciones para aprovecharlas. En ese marco, la *International Renewable Energy Agency* (IRENA) realizó un análisis multisectorial en el 2020 donde propuso una hoja de ruta para que las energías renovables generen el 86 % de la electricidad global [6]. En ese docu-

mento también se menciona que esta cifra no se alcanzaría sin la investigación ni el desarrollo de tecnologías que aprovechen dichas fuentes para hacerlas sostenibles y comercialmente viables.

Hace un año, la energía hidroeléctrica generó más de 4 mil tera-vatios por hora (TWh) en el mundo, lo que representó más del 50 % de la generación de todas las renovables [7]. No obstante, no es posible extender la construcción de centrales hidroeléctricas dado que muchas comunidades no cuentan cuencas hidrográficas o caídas de agua que puedan aprovecharse. Sin contar esta fuente, las energías eólica y solar son las que encabezan la producción energética. Con el propósito de contextualizar el crecimiento del uso de estas fuentes renovables geográfica y temporalmente se muestra la Figura 1. En ella se visualizan los porcentajes de potencia consumida provenientes de tres grupos de fuentes renovables no hidroeléctricas: La eólica, solar y otras (*GeoBiomasaOtros*). Estos porcentajes se distribuyen desde el 2012 hasta el 2021 y se comparan las tendencias en el Perú, Sudamérica y el mundo. Se aprecia el aumento del consumo energético de la eólica y solar sobre las demás, y de entre estas dos la eólica es superior. No obstante, también es evidente que la energía solar ha tenido un crecimiento sostenido y esto se debe, entre otras razones, a la disponibilidad de nuevas tecnologías que la aprovechan.

Existen dos tipos de tecnologías que aprovechan la energía solar: La termosolar y la fotovoltaica [8]. En la primera se usa la energía térmica de un fluido calentado por concentradores solares para generar electricidad por medio de generadores electromagnéticos. Pese a los esfuerzos por reducir los costos de construcción y mantenimiento de las centrales termosolares, solo países con alta demanda energética industrial y geografía apta pueden hacer rentables estas tecnologías [9].

En contraste a la termosolar, la fotovoltaica aprovecha directamente la radiación solar mediante fenómenos fotoeléctricos y de transporte de cargas, mimetizando la fotosíntesis. Si las plantas tienen a las células con clorofila en sus hojas como unidades generadoras de energía, en los sistemas estas serían las celdas solares. La estructura de una celda solar depende de los mecanismos de generación eléctrica y transporte de carga, y estos a su vez, de la naturaleza de los materiales donde suceden estos mecanismos. Usar estas celdas solares para fines domésticos o industriales representaría una reducción de emisiones de CO_2/kWh cerca del 90 % en comparación al gas natural [10].

Las celdas solares llevan en el mercado más de 60 años, desde su descubrimiento en los Laboratorios Bell en 1954 [11] y su primer uso comercial en el satélite Vanguard [12] en 1958, estos se han diversificado composición por ende también en su eficiencia de conversión energética y estabilidad. Según la clasificación del *National Renewable Energy Laboratories* (NREL) los tipos de celdas se pueden agrupar en cinco familias: Cristalinas de silicio, de unión simple de galio (Ga) y arsénico (As), de unión múltiple, basadas en películas delgadas y emergentes [13]. Los puntos en común de estas familias son la similitud de sus componentes, arquitecturas y/o coetaneidad [14]. Cabe mencionar que en adelante solo se tomarán en cuenta tecnologías fotovoltaicas que no tengan concentradores.

En primer lugar se encuentra la familia de las celdas basadas en cristales de silicio que congrega a las celdas de monocristal, multicristal, con heteroestructuras de silicio y con películas delgadas de silicio cristalino. Segundo, las celdas de unión simple (Ga-As) en donde están las que se basan en cristales y las de películas delgadas. Tercero, las celdas de unión múltiple que tienen celdas con arquitecturas con dos, tres y cuatro a más uniones. Cuarto, en las celdas basadas en películas delgadas están las celdas de cobre-indio-galio-selenio (CIGS), cadmio-teluro (CdTe) y silicio amorfo hidrogenado (a-Si:H). Y en quinto lugar, las celdas emergentes, que se caracteriza por agrupar las tecnologías que llevan menos tiempo siendo investigadas tales como las celdas sensibilizadas por tintes (CSPT), las inorgánicas basadas en kesterita $Cu_2ZnSn(S,Se)_4$ (CZTSSe), las celdas orgánicas, orgánicas tipo *sándwich*, las celdas perovskitas, perovskitas-CIGS monolítica tipo *sándwich*, perovskitas-SI monolítica tipo *sándwich* y celdas con *quantum-dots*.

Para contrastar dichas tecnologías se pueden usar las mejores eficiencias de conversión energéti-

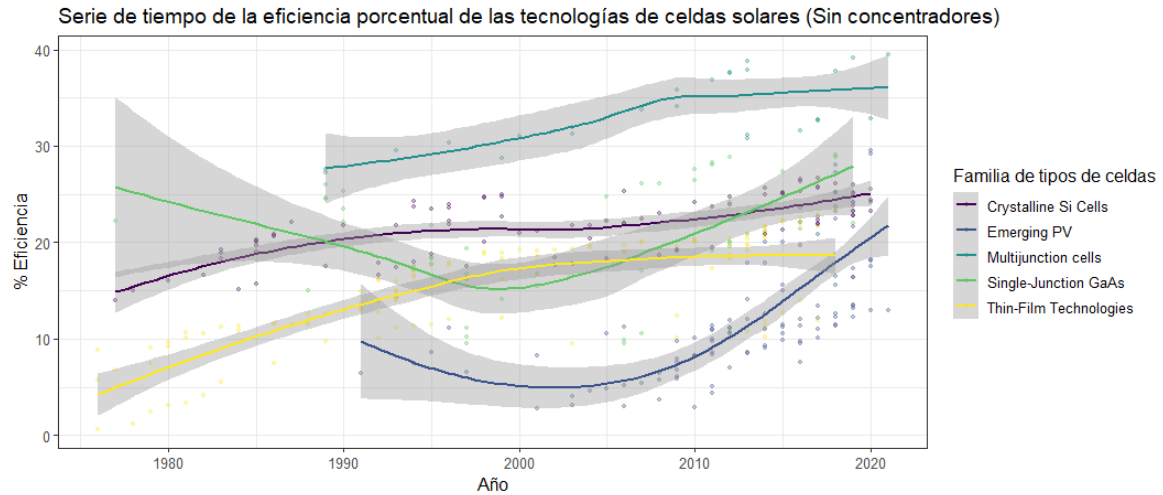


Figura 2: Serie de tiempo de las mejores eficiencias obtenidas en la investigación de las celdas solares según la agrupación dada por NREL. Fuente: *National Renewable Energy Laboratory* [13]

ca de estos dispositivos obtenidos en el laboratorio recopilados por la NREL en varios años, tal como se puede visualizar en la Figura 2. En esa gráfica se observa que las tecnologías con mayor rendimiento han sido las celdas de unión múltiple, esto se debe a que sus arquitecturas fueron diseñadas para que haya un efecto sinérgico gracias a la apilación de los mejores materiales fotoeléctricos y de transporte de carga que existían en su época, no obstante, estos serían más costosos que los demás por la mayor cantidad y diversidad de materiales que se demandan para fabricarlos. También se aprecia que las tecnologías

de la tendencia

Blakers cita a la *National Renewable Energy Laboratories* (NREL) con el propósito de describir la clasificación que esta institución hace a varios tipos de celdas según los mejores rendimientos que mostraron en sus fases experimentales [14], por otro lado Rathore y su equipo se basaron en la antigüedad comercial y madurez técnica de estas [15]. Por fines prácticos se hace uso de esta última para describir las tres generaciones que engloban varios tipos de celdas así como sus características principales.

En la primera generación están las celdas construídas a base de obleas de silicio monocristalinas y policristalinas. Las monocristalinas han alcanzado rendimientos mayores al 20% [16], no obstante su fabricación es costosa [17] debido al "recristalizado" de silicio por el método de Czochralski [18] para formar lingotes de monocristal que luego se cortan. Frente a esto, el uso de diferentes policristales en las celdas abarató el costo gracias a que se fabrican con procesos de enfriamiento simples, además sus eficiencias de conversión energética oscilan de entre 12-14%, por lo que estas características le permiten ser el tipo de celda con más prevalencia en el mercado [19].

En la segunda generación se encuentran las celdas en base películas delgadas de silicio amorfo (a-Si) [20], cadmio-teluro (CdTe) [21] y cobre-indio-galio-selenio (CIGS) [22], la característica principal de estas celdas es que son económicas en comparación con las de otras generaciones [15], sin embargo sus limitaciones son la inestabilidad de la eficiencia [23] así como los impactos negativos en el ambiente y a la salud que causan sus materiales, como el cadmio por ejemplo [22].

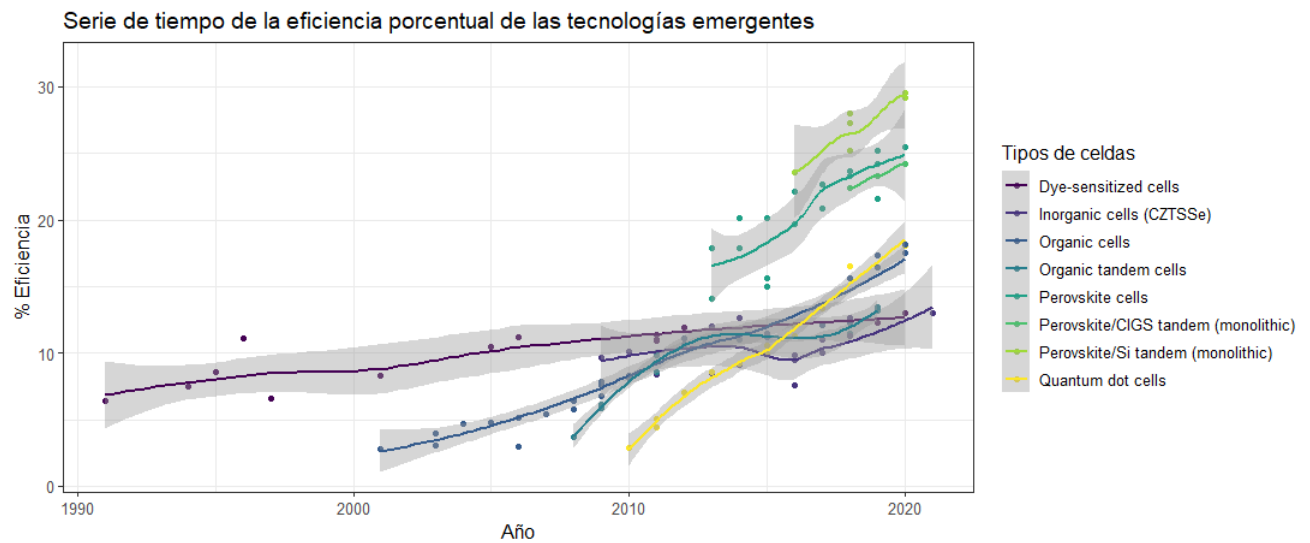


Figura 3: Serie de tiempo de las mejores eficiencias obtenidas en la investigación de las tecnologías emergentes de celdas solares. Fuente: *National Renewable Energy Laboratory* [5]

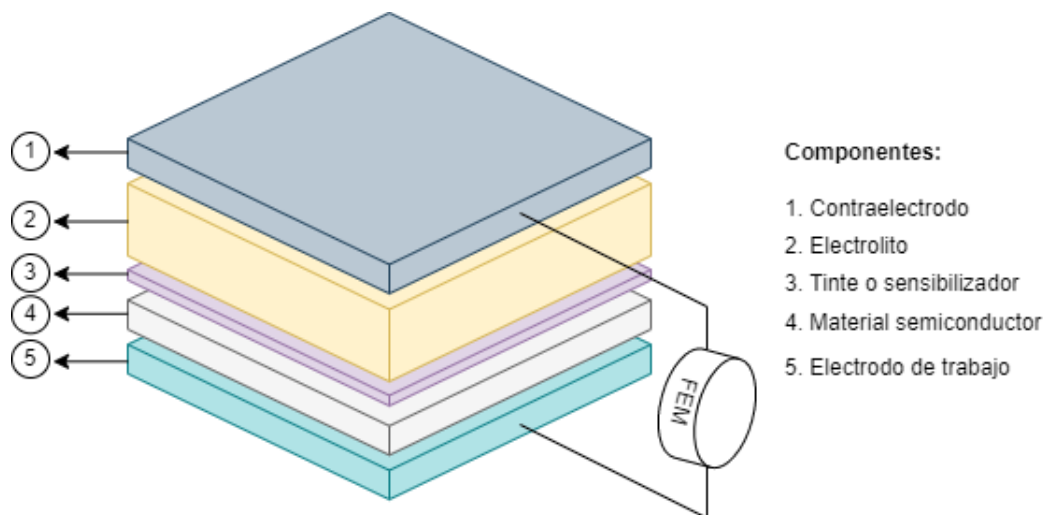


Figura 4: Serie de tiempo de las mejores eficiencias obtenidas en la investigación de las celdas solares según la agrupación dada por NREL. Fuente: *National Renewable Energy Laboratory* [5]

Finalmente, la tercera generación agrupa a las celdas más recientes tales como aquellas basadas en concentradores, nano cristales, polímeros y sensibilizadas por tintes. Las celdas por concentradores son dispositivos rígidos que aprovechan la radiación y el calor que se generan en al incidir luz en lentes convexas [21], si bien tiene viabilidad comercial se demandan mejoras en los materiales fotovoltaicos. Las celdas basadas en nano cristales o *quantum dots* (QD) pueden capturar mejor la luz mientras suprimen fenómenos de recombinación además de tener un rendimiento estable por encima del 20 % [24], no obstante no son comercialmente viables porque son

costosos de fabricar [25]. Por el contrario, las celdas de polímero se caracterizan por su flexibilidad pero sus rendimientos están en promedio por debajo del 10 % y a su vez son inestables porque son sensibles a cambios de temperatura y presión [26]. Por último, las celdas sensibilizadas por tintes son dispositivos que tienen semiconductores fotosensibilizados y ensamblados a un sistema electrolítico que permite un flujo continuo de electrones [27], se caracterizan por su construcción versátil y de bajo costo gracias a la diversidad de materiales de sus componentes, sin embargo sus rendimientos aún no se equiparan a las comerciales de silicio [28].

Las celdas sensibilizadas por tintes (CSPT) pueden ser

... debido a todas estas razones, la investigación de nuevos materiales y procesos de fabricación para celdas solares sensibilizadas por tintes más costo eficientes cobran relevancia.

La estructura de las celdas solares

Es claro que deben validarse experimentalmente los resultados obtenidos por los métodos computacionales, pero estos pueden discriminar cientos de candidatas

pero dado un grado de precisión razonable en la predicción de la propiedad del material, estos modelos computacionales aceleran el proceso de elegir mejores estructuras o moléculas candidatas con la correcta combinación de propiedades necesarias para cumplir satisfactoriamente con el propósito para las que fueron hechas *Leon R. Devereux*.

1.2. Justificación

La referencia es citada en [29]

Los procesos en el descubrimiento de celdas solares con mayor eficiencia de producción energética y sostenibilidad tales como el diseño, la prospección, la construcción son lentos, costosos y poco eficientes. Y el tiempo que toma que estas nuevas celdas solares tengan rentabilidad comercial para las partes que financiaron la investigación es reducido [30].

La ciencia de materiales dirigida por datos

1.3. Antecedentes

En los antecedentes se

2. Pregunta de investigación y objetivos

2.1. Pregunta de investigación

2.2. Objetivos

3. Marco Teórico

3.1. Celdas solares sensibilizadas por tintes (CSPT)

3.1.1. Componentes de las CSPT

3.1.2. Funcionamiento de las CSPT

3.1.3. Tipos de sensibilizantes

3.2. Colorantes naturales

3.2.1. Características físicas y químicas

3.2.2. Familias de colorantes naturales usados como sensibilizantes

3.3. Enfoque de investigación direccionado por datos

3.3.1. Tipos de enfoques de investigación en química

3.3.2. Tipos de estructuras de datos en química

3.3.3. Extracción y preprocesamiento de datos

3.3.4. Tratamiento de datos

3.3.5. Descubrimiento y análisis de características

3.3.6. Entrenamiento y evaluación de modelos

3.3.7. Validadores estadísticos de los modelos

3.4. Modelos de aprendizaje automático

3.4.1. Naturaleza de los modelos de aprendizaje automático

3.4.2. Interpretatividad de los modelos de aprendizaje automático

3.4.3. Clasificadores clásicos

3.4.4. Clasificadores ensamblados

3.4.5. Evaluadores de los resultados de clasificación

4. Materiales y métodos

4.0.1. Extracción de datos

4.0.2. Preprocesamiento de datos

4.0.3. Descubrimiento y análisis de características

4.0.4. Entrenamiento y evaluación del modelo 1

4.0.5. Entrenamiento y evaluación del modelo 2

4.0.6. Entrenamiento y evaluación del modelo 3

4.0.7. Comparación de modelos

4.1. Análisis estadístico

4.1.1. Pruebas de normalidad

La verificación de la normalidad de la distribución de un conjunto de datos se puede obtener a través de técnicas gráficas y por pruebas.

En primer lugar, aquellas basadas en gráficas tienen como

Data

La cien Actualmente, cerca del 50 % de las nuevas publicaciones de artículos son de acceso abierto y estimaciones hechas por (Ref 33 Y 34) indican que estás casi en su totalidad lo serán también para el 2040.

Herramientas de libre acceso

El software de acceso abierto es el conjunto de herramientas computacionales que permiten las operaciones de la ciencia de datos basada en datos. Este tipo de software adquiere importancia desde la aparición pública del internet y el sistema operativo LINUX en 1990, cuyos desarrollos fueron netamente colaborativos. Adicionalmente, el nacimiento de herramientas de control de versiones y lenguajes de programación de alto nivel permitieron el nacimiento de repositorios proyectos científicos (46), notebooks electrónicos (47), paquetes de simulación y experimentos(49) y librerías de aprendizaje automático y ciencia de datos (50).

5. Referencias bibliográficas

Referencias

1. Mayer A. Fossil fuel dependence and energy insecurity. *Energy, Sustainability and Society* 2022; 12:1-13
2. Vernon R. Oil Crisis. 1976
3. Rodriguez-Fernandez L, Carvajal ABF y Tejada VF de. Improving the concept of energy security in an energy transition environment: Application to the gas sector in the European Union. *The Extractive Industries and Society* 2022; 9:101045
4. Guilyardi E, Lescarmontier L, Matthews R, Point SP, Rumjaun AB, Schlüpmann J y Wilgenbus D. IPCC Special Report “Global Warming of 1.5° C”: Summary for Teachers. 2018
5. Ritchie H, Roser M y Rosado P. Energy. *Our World in Data* 2020. <https://ourworldindata.org/energy>
6. Asmelash E, Prakash G, Gorini R y Gielen D. Role of IRENA for global transition to 100 % renewable energy. *Accelerating the transition to a 100 % renewable energy era*. Springer, 2020 :51-71
7. IRENA. Renewable Energy Statistics 2022. Renewable Energy Target Setting, Abu Dhabi, UAE 2022
8. Hammarström L. Overview: capturing the sun for energy production. *Ambio* 2012; 41:103-7
9. Xu Y, Pei J, Yuan J y Zhao G. Concentrated solar power: technology, economy analysis, and policy implications in China. *Environmental Science and Pollution Research* 2022; 29:1324-37
10. Tawalbeh M, Al-Othman A, Kafiah F, Abdelsalam E, Almomani F y Alkasrawi M. Environmental impacts of solar photovoltaic systems: A critical review of recent progress and future outlook. *Science of The Total Environment* 2021; 759:143528
11. Green MA. The path to 25 % silicon solar cell efficiency: History of silicon cell evolution. *Progress in photovoltaics: research and applications* 2009; 17:183-9
12. Singh GK. Solar power generation by PV (photovoltaic) technology: A review. *Energy* 2013; 53:1-13

13. NREL. National Renewable Energy Laboratory Best Research-Cell Efficiency Chart. Available from: <https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency.html> [Accessed on: 2022 Sep 26]
14. Blakers A, Zin N, McIntosh KR y Fong K. High efficiency silicon solar cells. *Energy Procedia* 2013; 33:1-10
15. Rathore N, Panwar NL, Yettou F y Gama A. A comprehensive review of different types of solar photovoltaic cells and their applications. *International Journal of Ambient Energy* 2021; 42:1200-17
16. Gul M, Kotak Y y Muneer T. Review on recent trend of solar photovoltaic technology. *Energy Exploration & Exploitation* 2016; 34:485-526
17. Srinivas B, Balaji S, Nagendra Babu M y Reddy Y. Review on present and advance materials for solar cells. *International Journal of Engineering Research-Online* 2015; 3:178-82
18. Yu X y Yang D. Growth of crystalline silicon for solar cells: Czochralski Si. *Handbook of Photovoltaic Silicon* 2019 :129-74
19. Sharma S, Jain KK, Sharma A y col. Solar cells: in research and applications—a review. *Materials Sciences and Applications* 2015; 6:1145
20. Kaur M y Singh H. A review: comparison of silicon solar cells and thin film solar cells. *Int. J. Core Eng. Manag.(IJCEM)* 2016; 3:15-23
21. Bertolli M. Solar Cell Materials. Course: Solid State II. Department of Physics, University of Tennessee 2008
22. Bagher AM, Vahid MMA y Mohsen M. Types of solar cells and application. *American Journal of optics and Photonics* 2015; 3:94-113
23. Gul M, Kotak Y y Muneer T. Review on recent trend of solar photovoltaic technology. *Energy Exploration & Exploitation* 2016; 34:485-526
24. Kim M, Jeong J, Lu H, Lee TK, Eickemeyer FT, Liu Y, Choi IW, Choi SJ, Jo Y, Kim HB y col. Conformal quantum dot-SnO₂ layers as electron transporters for efficient perovskite solar cells. *Science* 2022; 375:302-6
25. Jean J, Xiao J, Nick R, Moody N, Nasilowski M, Bawendi M y Bulović V. Synthesis cost dictates the commercial viability of lead sulfide and perovskite quantum dot photovoltaics. *Energy & Environmental Science* 2018; 11:2295-305
26. Gusain A, Faria RM y Miranda PB. Polymer solar cells—Interfacial processes related to performance issues. *Frontiers in chemistry* 2019; 7:61
27. Suhaimi S, Shahimin MM, Alahmed Z, Chyskỳ J y Reshak A. Materials for enhanced dye-sensitized solar cell performance: Electrochemical application. *Int. J. Electrochem. Sci* 2015; 10:2859-71
28. Sharma K, Sharma V y Sharma S. Dye-sensitized solar cells: fundamentals and current status. *Nanoscale research letters* 2018; 13:1-46
29. Wen Y, Fu L, Li G, Ma J y Ma H. Accelerated Discovery of Potential Organic Dyes for Dye-Sensitized Solar Cells by Interpretable Machine Learning Models and Virtual Screening. *Solar RRL* 2020; 4:2000110
30. Eagar TW. Bringing new materials to Market. en. *ABI/INFORM Global* 1995; 98:42

6. Cronograma de trabajo
7. Presupuesto y financiamiento