

Universidad Peruana Cayetano Heredia



FACULTAD DE CIENCIAS Y FILOSOFÍA

Uso de modelos de machine learning en la clasificación de
moléculas de colorante según su desempeño en las celdas
solares orgánicas sensibilizadas por tintes naturales

Tesis

Autor:

Bach. Dan Santivañez Gutarra

Asesora:

Dra. María Quintana Caceda

Julio 2022

Índice

1. Introducción	3
1.1. Problemática	3
1.2. Justificación	3
1.3. Antecedentes	3
2. Marco Teórico	4
2.1. Celdas solares sensibilizadas por tintes	4
2.2. Enfoque dirigido por datos	4
3. Metodología	4
3.1. Análisis estadístico	4
3.1.1. Pruebas de normalidad	4

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

Muchas sociedades en esta última década han estado esforzándose por dejar de depender de combustibles fósiles y sus derivados debido a potenciales riesgos geopolíticos, económicos y ambientales. La energía solar es una de las fuentes de energía alternativas de mayor interés por su fácil acceso y casi ilimitado suministro. Sin embargo, el aprovechamiento de esta energía requiere de dispositivos que deben ser capaces de capturar, transformar y almacenar la mayor cantidad de energía lumínica en trabajo útil en rangos de tiempo variantes a causa del tiempo atmosférico y los estadios solares. La tecnología termosolar condensa el haz solar en un contenedor de un fluido de tal manera que este se calienta y mueva un alternador eléctrico, mientras que la energía fotovoltaica convierte la radiación solar en energía electroquímica directamente por medio de fenómenos fotovoltaicos que se accionan gracias a materiales receptores, transformadores y transportadores de carga. Las centrales termosolares tienen el potencial de generar miles de kilovatios por hora (KWh) no obstante existen desventajas que limitan la difusión de su uso tales como su alto costo en la instalación, mantenimiento y distribución por cableado eléctrico, así como la gran cantidad de energía desperdiciada en los procesos de transferencia de calor. Estos problemas están casi ausentes en los sistemas fotovoltaicos ya que se usan paneles y módulos que facilitan su uso, sin embargo aún es un reto equiparar la eficiencia de estos dispositivos con los termosolares.

Los sistemas fotovoltaicos llevan en el mercado cerca de 60 años, desde su **lanzamiento por Laboratorios Bell**. El corazón funcional de estos dispositivos son las celdas solares que son placas compuestas por materiales ordenados en forma de láminas y que tienen diferente composición y estructura física. En las diferencias

- Cerca del 80% de la población mundial viven de las importaciones de combustibles fósiles son vulnerables a sufrir crisis energéticas debido a problemas geopolíticas y económicas. (IRENA)
- Las fuentes de energías

1.2. Justificación

La referencia es citada en [1]

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 [2].

La ciencia de materiales dirigida por datos

1.3. Antecedentes

En los antecedentes se

2. Marco Teórico

2.1. Celdas solares sensibilizadas por tintes

2.2. Enfoque dirigido por datos

3. Metodología

3.1. Análisis estadístico

3.1.1. 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).

Referencias

1. 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
2. Eagar TW. Bringing new materials to Market. en. ABI/INFORM Global 1995; 98:42