

Universidad Peruana Cayetano Heredia



FACULTAD DE CIENCIAS Y FILOSOFÍA

**Uso de modelos de aprendizaje automático 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 | 4 |
| 1.3. Antecedentes | 4 |
| 2. Marco Teórico | 5 |
| 2.1. Celdas solares sensibilizadas por tintes | 5 |
| 2.2. Enfoque dirigido por datos | 5 |
| 3. Metodología | 5 |
| 3.1. Análisis estadístico | 5 |
| 3.1.1. Pruebas de normalidad | 5 |

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. Si bien la energía renovable con mayor potencia consumida es la hidroeléctrica, con más de 4 mil tera-vatios por hora (TWh) en el 2021, y que su vez es mayor que el total de potencia consumida por las otras energías renovables, cerca de 3.5 mil TWh, no es rentable la construcción de centrales hidroeléctricas en diversos territorios a diferencia de las termoeléctricas. En contraste a esta situación, las otras fuentes son menos costosas de implementar y sus unidades de generación energética son modulables pero el reto actual es incrementar su potencia de generación y su adaptación en el mercado. Entre dichas fuentes, resaltan la energía eólica y solar estas son las que más porcentaje de potencia de consumo han tenido en el 2021 a nivel mundial, pero la energía solar es la que más crecimiento mostró sobre todo en sudamérica y el Perú (ver Figura 1). Este hecho puede deberse a causas políticas, económicas y tecnológicas; pero hace evidente que serán una fuente renovable no hídrica preponderante en los próximos años.

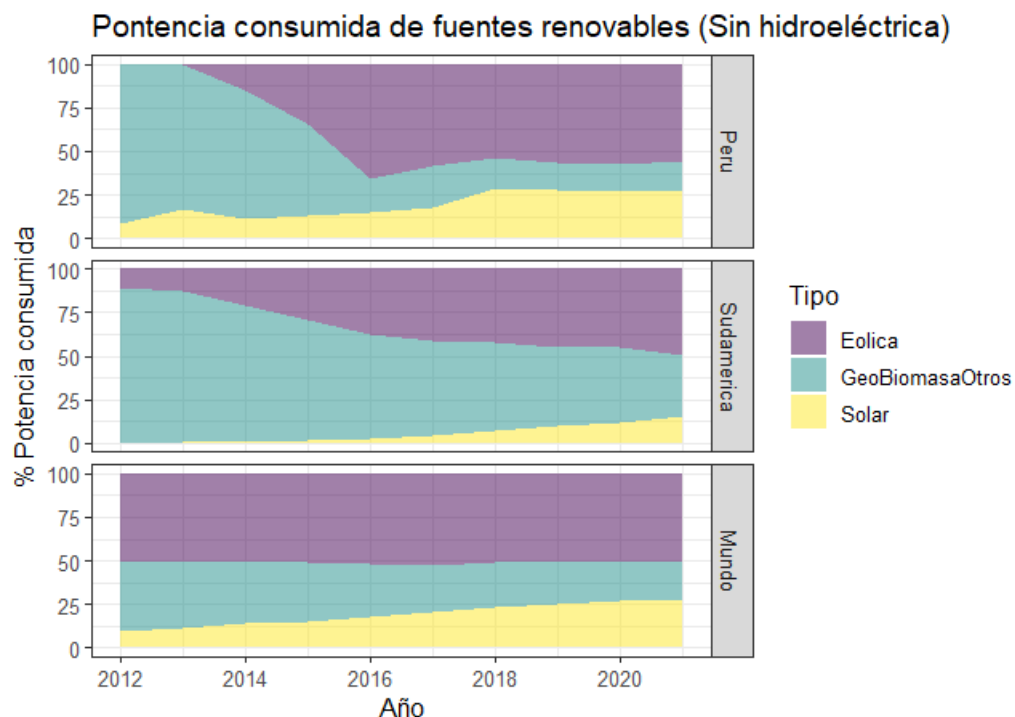


Figura 1: Comparación del porcentaje de la cantidad de potencia consumida por tipo de energía renovable sin considerar la hidroeléctrica. Fuente: Our World in Data [1]

La energía solar es de fácil acceso para todos los terrenos habitables y gracias a los 140 mil TWh/h que el sol genera se considera una fuente casi ilimitada [2]. 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 caliente 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 kilos-vatios 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. Si bien existen tecnologías que unen la termosolar y fotovoltaica, el presente trabajo se enfoca en resolver un problema dentro de la fotovoltaica.

Los sistemas fotovoltaicos llevan en el mercado cerca de 60 años, desde su **lanzamiento por Laboratorios Bell en 1963**. El centro funcional de estos dispositivos son las celdas solares, las cuales consisten en placas compuestas por láminas superpuestas de materiales que pueden transportar carga entre electrodos gracias al cambio de potencial que sufren en presencia de radiación solar. 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 [3], por otro lado Rathore y su equipo se basaron en la antigüedad comercial y madurez técnica de estas [4]. 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 construidas a base de obleas de silicio monocristalinas y policristalinas, las primeras se fabrican cortando ligotes de silicio grandes, estos lingotes de silicio recristalizado se hacen con el método de Czochralski [5] el cual encarece la producción [6]. Por otro lado, las celdas de silicio policristalino cortan su rendimientos mayores al 20 % [7]. La segunda generación

- 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 [8]

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 [9].

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. Ritchie H, Roser M y Rosado P. Energy. Our World in Data 2020. <https://ourworldindata.org/energy>
2. Hammarström L. Overview: capturing the sun for energy production. *Ambio* 2012; 41:103-7
3. Blakers A, Zin N, McIntosh KR y Fong K. High efficiency silicon solar cells. *Energy Procedia* 2013; 33:1-10
4. 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
5. Yu X y Yang D. Growth of crystalline silicon for solar cells: Czochralski Si. *Handbook of Photovoltaic Silicon* 2019 :129-74
6. 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
7. Gul M, Kotak Y y Muneer T. Review on recent trend of solar photovoltaic technology. *Energy Exploration & Exploitation* 2016; 34:485-526
8. 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
9. Eagar TW. Bringing new materials to Market. en. *ABI/INFORM Global* 1995; 98:42