



**FACULTAD
DE INGENIERIA**

Universidad de Buenos Aires

Racionalización y sistematización de moléculas con alta eficiencia para el sensibilizado de TiO₂

Autor:

Freddy Mendoza Ticona

Director:

Dr. Diego Onna (UNSAM)

*Esta planificación fue realizada en el curso de Gestión de proyectos
entre el 24 de junio de 2021 y el 19 de agosto de 2021.*

Índice

1. Descripción técnica-conceptual del proyecto a realizar	5
2. Identificación y análisis de los interesados	7
3. Propósito del proyecto	8
4. Alcance del proyecto	8
5. Supuestos del proyecto.	9
6. Requerimientos	9
7. Historias de usuarios (<i>Product backlog</i>).	10
8. Entregables principales del proyecto	10
9. Desglose del trabajo en tareas	11
10. Diagrama de Activity On Node.	11
11. Diagrama de Gantt	12
12. Presupuesto detallado del proyecto	15
13. Gestión de riesgos	15
14. Gestión de la calidad	16
15. Procesos de cierre	17

Registros de cambios

Revisión	Detalles de los cambios realizados	Fecha
0	Creación del documento	24 de junio de 2021

Acta de constitución del proyecto

Buenos Aires, 24 de junio de 2021

Por medio de la presente se acuerda con el Ing. Freddy Mendoza Ticona que su Trabajo Final de la Carrera de Especialización en Inteligencia Artificial se titulará “Racionalización y sistematización de moléculas con alta eficiencia para el sensibilizado de TiO_2 ”, consistirá esencialmente en el desarrollo de un modelo basado de aprendizaje automático para la predicción de la eficacia de DSSC/DSPEC, y tendrá un presupuesto preliminar estimado de 600hs de trabajo y \$0.00, con fecha de inicio 24 de junio de 2021 y fecha de presentación pública 15 de mayo de 2022.

Se adjunta a esta acta la planificación inicial.

Ariel Lutenberg
Director posgrado FIUBA

Lic. Priscila Vensaus
UNSAM

Dr. Diego Onna
Director del Trabajo Final

1. Descripción técnica-conceptual del proyecto a realizar

En la actualidad, la mayor parte de la energía consumida globalmente deriva de combustibles fósiles: carbón, petróleo y gas natural. La energía obtenida de estas fuentes no renovables genera el aumento de los niveles de dióxido de carbono (CO_2), lo cual es responsable del calentamiento global. El desarrollo de las energías renovables y amigables con el medio ambiente surge como una necesidad clave para nuestra sociedad. En particular, sabemos que la energía solar tiene una potencialidad inmensa: en sólo un día llega a la tierra suficiente energía para alimentar a todo el mundo un año entero. Si bien ya existen desarrollos para captar y utilizar la luz solar, como las celdas solares de silicio que ya se comercializan, todavía tienen distintos puntos donde pueden mejorarse: la eficiencia es relativamente baja, y el proceso de producción no siempre es sustentable. Además, la energía que se obtiene de esta manera depende de las condiciones climáticas y del paso del día y la noche: sólo proveen energía mientras llega la luz del sol. Por lo que se torna importante encontrar una manera de guardar esta energía, por ejemplo, en forma de combustibles, y que estos sean además amigables con el medio ambiente.

Las celdas solares sensibilizadas por colorantes (DSSC, por sus siglas en inglés -dye sensitized solar cells-) y las celdas fotoelectroquímicas sensibilizadas (DSPEC) son una alternativa prometedora para el aprovechamiento de la luz solar (Figura 1), inspiradas en el proceso de fotosíntesis. Las primeras, se basan en la interacción de la luz solar con una molécula de colorante, que está adsorbida sobre un material semiconductor, típicamente dióxido de titanio (TiO_2). La molécula absorbe luz y pasa a un estado excitado, desde el cual transfiere un electrón al dióxido de titanio. Los electrones se mueven desde allí hasta el otro extremo del circuito, proveyendo así la energía eléctrica. En el otro electrodo, los electrones interactúan con la solución de electrolito, y mediante reacciones químicas son transportados hacia la molécula de colorante, llevándolo a su estado inicial. En el caso de las celdas fotoelectroquímicas sensibilizadas, el proceso es similar, pero en lugar de generarse energía eléctrica, esta se guarda en forma de enlaces químicos dentro de moléculas de combustible, por ejemplo, hidrógeno.

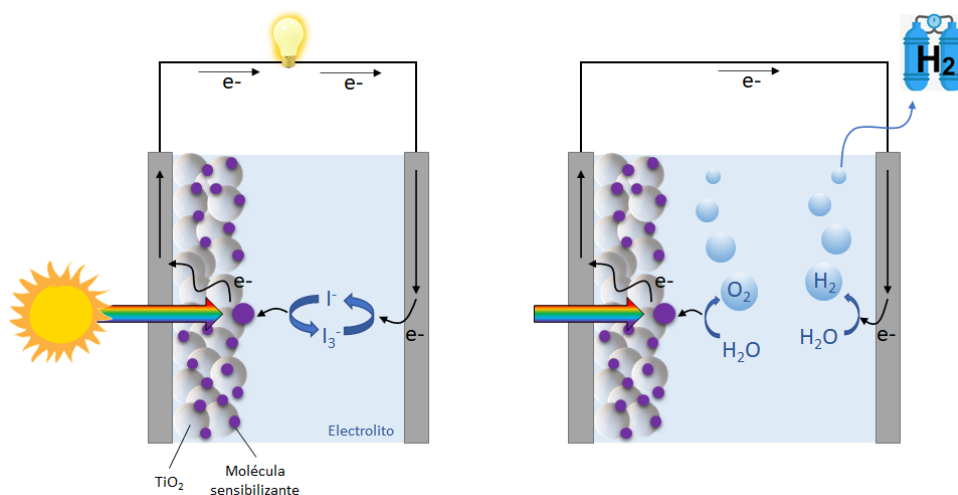


Figura 1. Izquierda: Celda solar sensibilizada por colorante. Derecha: celda fotoelectroquímica sensibilizada por colorante.

El objetivo general de este proyecto es identificar y clasificar moléculas con aplicación en celdas solares sensibilizadas y/o fotoelectrocatalíticas en electrodos de dióxido de titanio (TiO_2) mediante modelos cuantitativos que lleven a definir de forma integral qué características deben tener para ser eficientes. La hipótesis es la existencia de una función desconocida que relaciona

las variables fisicoquímicas y estructurales con el funcionamiento de los dispositivos y que es posible aproximarla usando aprendizaje automático.

El desafío es obtener modelos interpretables que establezcan correlaciones entre eficiencia del proceso con las variables del sistema. Sobre esta base, se espera llegar a un modelo que prediga o clasifique el resultado de un dispositivo a partir de condiciones iniciales determinadas.

Objetivos específicos:

- Construir una base de datos a partir de resultados previos (grupo de trabajo y datos bibliográficos).
- Generar visualizaciones que permitan hacer una exploración inicial de los datos.
- Relacionar las variables del sistema con el rendimiento de los dispositivos a partir de modelos estadísticos y de aprendizaje automático.

En la Figura 2 se presenta un diagrama de bloques general de los pasos a seguir para alcanzar un modelo estadístico y usando métodos de aprendizaje automático, que nos ayude a predecir y/o clasificar la eficiencia del proceso en celdas solares sensibilizadas y/o fotoelectrocatalíticas en electrodos de dióxido de titanio (TiO_2).

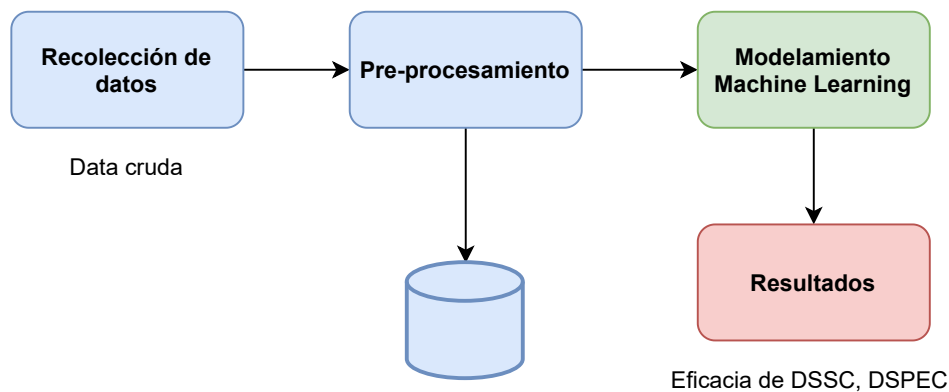


Figura 2. Diagrama de bloques de los pasos a desarrollar

El objetivo es que el lector en una o dos páginas entienda de qué se trata el proyecto y cuáles son sus desafíos, su motivación y su importancia.

Se debe destacar claramente cuál es el valor que agrega el proyecto a realizar. “El presente proyecto se destaca especialmente por incorporar tal cosa... Esto lo diferencia de otros sistemas similares en que ...”

Puede ser útil incluir en esta sección la respuesta a alguna de estas preguntas:

- ¿Cómo se vincula este proyecto con la misión de la organización?
- ¿Cómo se inserta este proyecto en el modelo de negocio de la organización?
- ¿Ayuda a la explicación si se incluye un lienzo Canvas del Modelo de Negocio?
- ¿En qué estado del ciclo de vida está el producto que se desea reemplazar o mejorar?
- ¿Cuáles son las necesidades que debe satisfacer?

■ ¿Por dónde pasa la innovación?

La descripción técnica-conceptual **debe incluir al menos un diagrama en bloques del sistema** y una frase como la siguiente: “En la Figura 3 se presenta el diagrama en bloques del sistema. Se observa que...”. Luego recién más abajo de haber puesto esta frase, se pone la figura. La regla es que las figuras nunca pueden ir antes de ser mencionadas en el texto, porque sino el lector no entiende por qué de pronto aparece una figura.

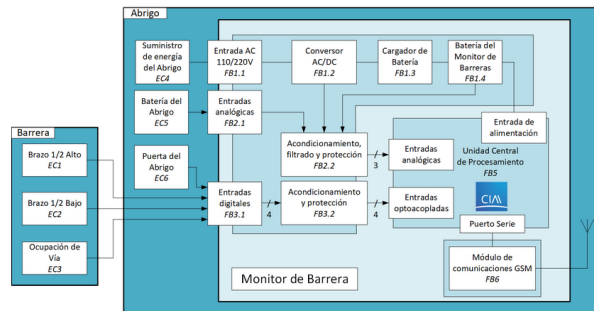


Figura 3. Diagrama en bloques del sistema

El tamaño de la tipografía en TODAS las figuras debe ser adecuado para que NO pase lo que ocurre acá, donde el lector debe esforzarse para poder leer el texto. Los colores usados en el diagrama deben ser adecuados, tal que ayuden a comprender mejor el diagrama, preferentemente en la gama de colores pastel.

2. Identificación y análisis de los interesados

Rol	Nombre y Apellido	Organización	Puesto
Cliente	Lic. Priscila Vensaus	UNSAM	
Responsable	Freddy Mendoza Ticona	FIUBA	Alumno
Colaboradores	Dr. Adrian Roitberg Dr. Sebastian Fernández Alberti	UFI - USA UNQ	-
Orientador	Dr. Diego Onna	UNSAM	Director Trabajo final
Usuario final	Instituto de Química, Física de Materiales, Medio Ambiente y Energía - FCEN - UBA e Instituto de Nanosistemas - UNSAM	-	-

Es inusual que una misma persona este en mas de un rol, incluso en proyectos chicos. Si se considera que una persona cumple dos o mas roles, entonces solo dejarla en el rol mas importante. Por ejemplo: Si una persona es Cliente pero también colabora u orienta, dejarla solo como Cliente. Si una persona es el Responsable, no debe ser colocado también como Miembro del equipo. Pero en cambio sí es usual que el Cliente y el Auspiciante sean el mismo, por ejemplo.

El Director suele ser uno de los Orientadores.

No dejar celdas vacías; si no hay nada que poner en una celda colocar un signo “-”.

No dejar filas vacías; si no hay nada que poner en una fila entonces eliminarla.

Es deseable listar a continuación las principales características de cada interesado.

Por ejemplo:

- Auspiciante: es riguroso y exigente con la rendición de gastos. Tener mucho cuidado con esto.
- Equipo: Juan Perez, suele pedir licencia porque tiene un familiar con una enfermedad. Planificar considerando esto.
- Orientador: María Gómez va a poder ayudar mucho con la definición de los requerimientos.

3. Propósito del proyecto

¿Por qué se hace el proyecto? ¿Qué se quiere lograr?

Se recomienda que sea solo un párrafo que empiece diciendo “El propósito de este proyecto es...”.

El propósito del proyecto es el de desarrollar un modelo o varios modelos, basados en aprendizaje automático, con la capacidad de predecir la corriente generada por (TiO_2) sensibilizado con diferentes moléculas, es decir, la eficacia producida en una celda solar sensibilizada por colorante (DSSC) y celda fotoelectroquímica sensibilizada por colorante (DSPEC). La finalidad de alcanzar dicho modelo de predicción, es tener un método mejorado en el proceso de diseño/fabricación de dichas celdas.

4. Alcance del proyecto

Para la realización de este trabajo se realizarán los modelos de aprendizaje automático, desarrollo de algoritmos de software, y la comparación de dichos modelos para identificar cual se ajusta más al experimento.

El presente proyecto incluye los siguientes aspectos:

- Recolección de datos experimentales y almacenarlos en una base de datos.
- Desarrollo de los modelos de aprendizaje automático usando python o algún lenguaje de programación.
- Entrenamiento y validación de los modelos de predicción.
- Mostrar visualizaciones de los datos y resultados obtenidos por el modelo.
- Comparación de los resultados de los modelos con datos de experimentos reales.

El presente proyecto NO incluye los siguientes aspectos:

- Montar el modelo desarrollado en producción, es decir, instalarlo en una nube o servidor.
- Desarrollo de una aplicación web o sistema para el fácil uso de los modelos ya desarrollado.

¿Qué se incluye y que no se incluye en este proyecto?

Se refiere al trabajo a hacer para entregar el producto o resultado especificado.

Explicitar todo lo quede comprendido dentro del alcance del proyecto.

Explicitar además todo lo que no quede incluido (“El presente proyecto no incluye...”)

5. Supuestos del proyecto

Para el desarrollo del presente proyecto se supone que:

- Se contará con los recursos de hardware suficientes para el desarrollo de los algoritmos (laptop).
- Se contará con los datos experimentales generados por el cliente y/o colaboradores.
- Se contará con datos simulados generados por el cliente y/o colaboradores.

Por ejemplo, se podrían incluir supuestos respecto a disponibilidad de tiempo y recursos humanos y materiales, sobre la factibilidad técnica de distintos aspectos del proyecto, sobre otras cuestiones que sean necesarias para el éxito del proyecto como condiciones macroeconómicas o reglamentarias.

6. Requerimientos

Los requerimientos deben numerarse y de ser posible estar agruparlos por afinidad, por ejemplo:

1. Requerimientos funcionales
 - 1.1. El sistema debe...
 - 1.2. Tal componente debe...
 - 1.3. El usuario debe poder...
2. Requerimientos de documentación
 - 2.1. Requerimiento 1
 - 2.2. Requerimiento 2 (prioridad menor)
3. Requerimiento de testing...
4. Requerimientos de la interfaz...

5. Requerimientos interoperabilidad...

6. etc...

Leyendo los requerimientos se debe poder interpretar cómo será el proyecto y su funcionalidad.

Indicar claramente cuál es la prioridad entre los distintos requerimientos y si hay requerimientos opcionales.

No olvidarse de que los requerimientos incluyen a las regulaciones y normas vigentes!!!

Y al escribirlos seguir las siguientes reglas:

- Ser breve y conciso (nadie lee cosas largas).
- Ser específico: no dejar lugar a confusiones.
- Expresar los requerimientos en términos que sean cuantificables y medibles.

7. Historias de usuarios (*Product backlog*)

Descripción: En esta sección se deben incluir las historias de usuarios y su ponderación (*history points*). Recordar que las historias de usuarios son descripciones cortas y simples de una característica contada desde la perspectiva de la persona que desea la nueva capacidad, generalmente un usuario o cliente del sistema. La ponderación es un número entero que representa el tamaño de la historia comparada con otras historias de similar tipo.

El formato propuesto es: como [rol] quiero [tal cosa] para [tal otra cosa].”

Se debe indicar explícitamente el criterio para calcular los *story points* de cada historia

8. Entregables principales del proyecto

Los entregables del proyecto son (ejemplo):

- Manual de uso
- Diagrama de circuitos esquemáticos
- Código fuente del firmware
- Diagrama de instalación
- Informe final
- etc...

9. Desglose del trabajo en tareas

El WBS debe tener relación directa o indirecta con los requerimientos. Son todas las actividades que se harán en el proyecto para dar cumplimiento a los requerimientos. Se recomienda mostrar el WBS mediante una lista indexada:

1. Grupo de tareas 1

- 1.1. Tarea 1 (tantas hs)
- 1.2. Tarea 2 (tantas hs)
- 1.3. Tarea 3 (tantas hs)

2. Grupo de tareas 2

- 2.1. Tarea 1 (tantas hs)
- 2.2. Tarea 2 (tantas hs)
- 2.3. Tarea 3 (tantas hs)

3. Grupo de tareas 3

- 3.1. Tarea 1 (tantas hs)
- 3.2. Tarea 2 (tantas hs)
- 3.3. Tarea 3 (tantas hs)
- 3.4. Tarea 4 (tantas hs)
- 3.5. Tarea 5 (tantas hs)

Cantidad total de horas: (tantas hs)

Se recomienda que no haya ninguna tarea que lleve más de 40 hs.

10. Diagrama de Activity On Node

Armar el AoN a partir del WBS definido en la etapa anterior.

Indicar claramente en qué unidades están expresados los tiempos. De ser necesario indicar los caminos semicríticos y analizar sus tiempos mediante un cuadro. Es recomendable usar colores y un cuadro indicativo describiendo qué representa cada color, como se muestra en el siguiente ejemplo:

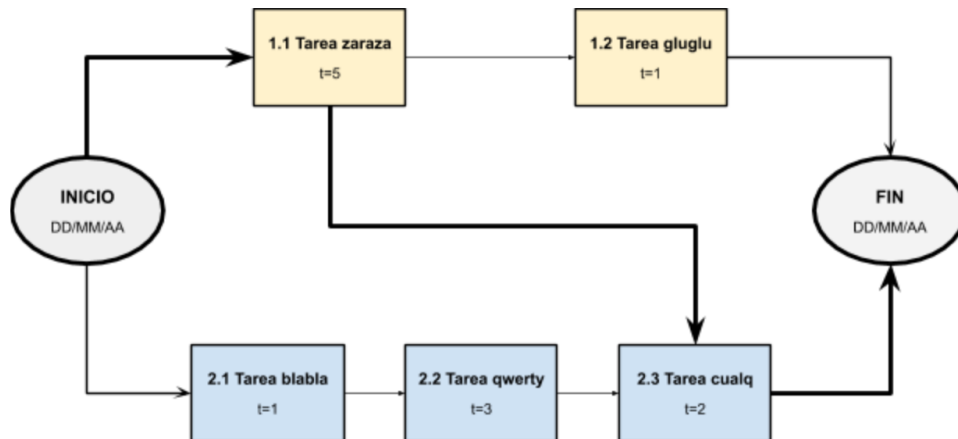


Figura 4. Diagrama en *Activity on Node*

11. Diagrama de Gantt

Existen muchos programas y recursos *online* para hacer diagramas de gantt, entre los cuales destacamos:

- Planner
- GanttProject
- Trello + *plugins*. En el siguiente link hay un tutorial oficial:
<https://blog.trello.com/es/diagrama-de-gantt-de-un-proyecto>
- Creately, herramienta online colaborativa.
<https://creately.com/diagram/example/ieb3p3ml/LaTeX>
- Se puede hacer en latex con el paquete *pgfgantt*
<http://ctan.dcc.uchile.cl/graphics/pgf/contrib/pgfgantt/pgfgantt.pdf>

Pegar acá una captura de pantalla del diagrama de Gantt, cuidando que la letra sea suficientemente grande como para ser legible. Si el diagrama queda demasiado ancho, se puede pegar primero la “tabla” del Gantt y luego pegar la parte del diagrama de barras del diagrama de Gantt.

Configurar el software para que en la parte de la tabla muestre los códigos del EDT (WBS).
Configurar el software para que al lado de cada barra muestre el nombre de cada tarea.
Revisar que la fecha de finalización coincida con lo indicado en el Acta Constitutiva.

En la figura 5, se muestra un ejemplo de diagrama de gantt realizado con el paquete de *pgfgantt*. En la plantilla pueden ver el código que lo genera y usarlo de base para construir el propio.

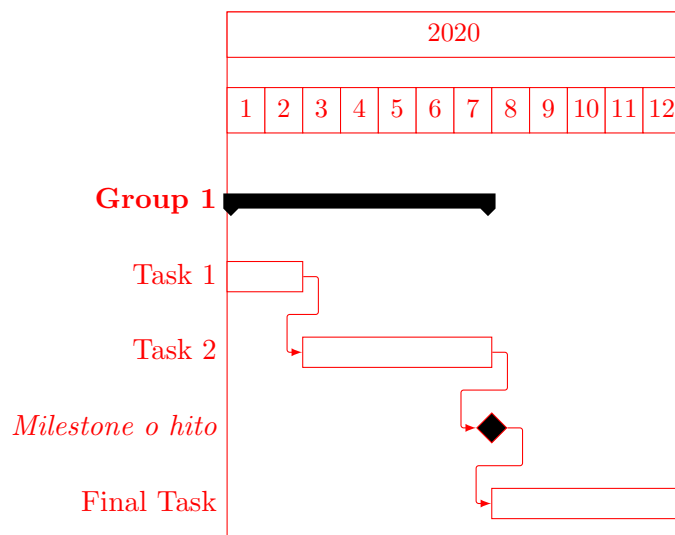


Figura 5. Diagrama de gantt de ejemplo

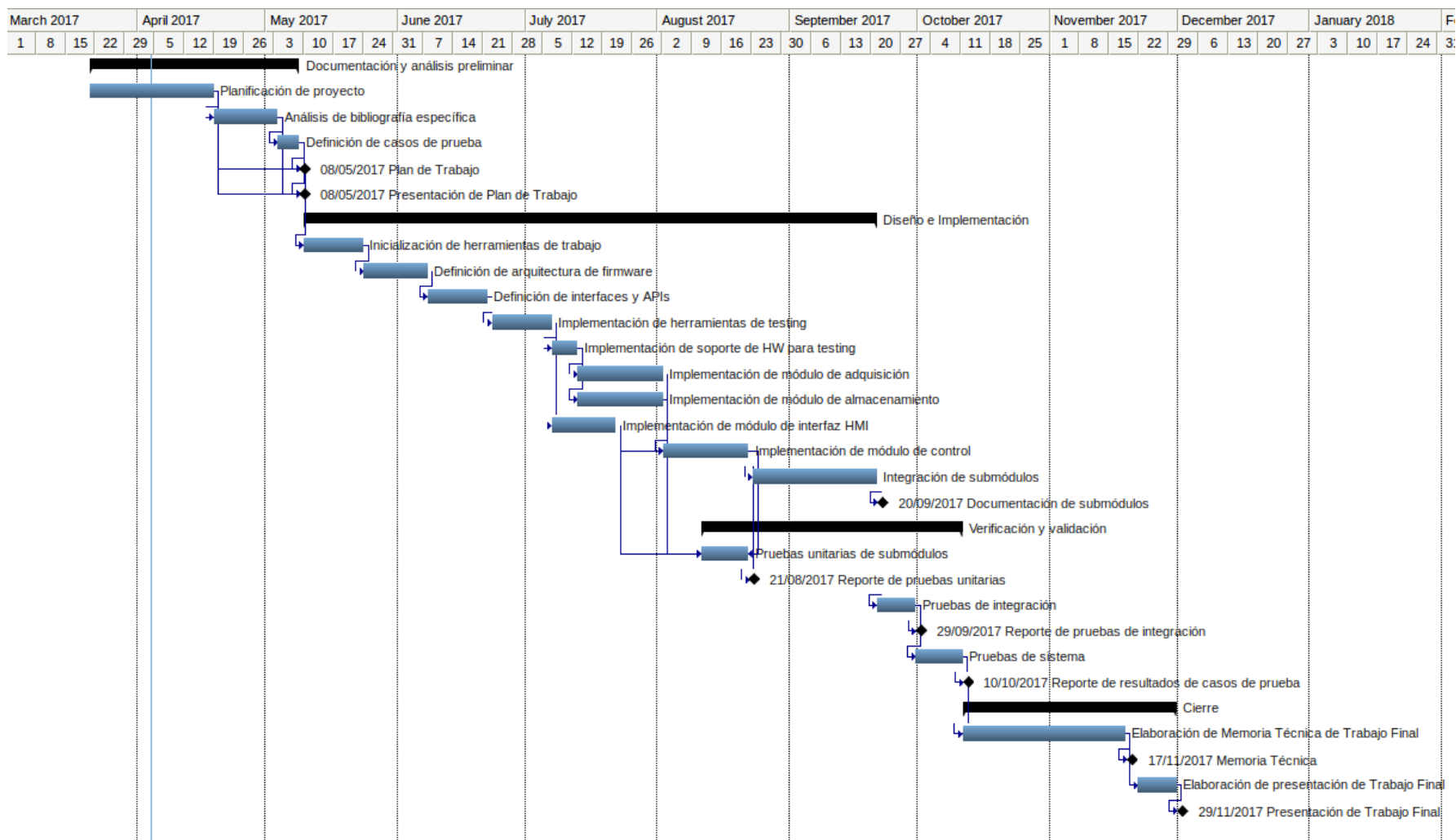


Figura 6. Ejemplo de diagrama de Gantt rotado

12. Presupuesto detallado del proyecto

Si el proyecto es complejo entonces separarlo en partes:

- Un total global, indicando el subtotal acumulado por cada una de las áreas.
- El desglose detallado del subtotal de cada una de las áreas.

IMPORTANTE: No olvidarse de considerar los **COSTOS INDIRECTOS**.

COSTOS DIRECTOS			
Descripción	Cantidad	Valor unitario	Valor total
SUBTOTAL			
COSTOS INDIRECTOS			
Descripción	Cantidad	Valor unitario	Valor total
SUBTOTAL			
TOTAL			

13. Gestión de riesgos

a) Identificación de los riesgos (al menos cinco) y estimación de sus consecuencias:

Riesgo 1: detallar el riesgo (riesgo es algo que si ocurre altera los planes previstos de forma negativa)

- Severidad (S): mientras más severo, más alto es el número (usar números del 1 al 10). Justificar el motivo por el cual se asigna determinado número de severidad (S).
- Probabilidad de ocurrencia (O): mientras más probable, más alto es el número (usar del 1 al 10). Justificar el motivo por el cual se asigna determinado número de (O).

Riesgo 2:

- Severidad (S):
- Ocurrencia (O):

Riesgo 3:

- Severidad (S):

■ Ocurrencia (O):

b) Tabla de gestión de riesgos: (El RPN se calcula como $RPN=S \times O$)

Riesgo	S	O	RPN	S*	O*	RPN*

Criterio adoptado: Se tomarán medidas de mitigación en los riesgos cuyos números de RPN sean mayores a...

Nota: los valores marcados con (*) en la tabla corresponden luego de haber aplicado la mitigación.

c) Plan de mitigación de los riesgos que originalmente excedían el RPN máximo establecido:

Riesgo 1: plan de mitigación (si por el RPN fuera necesario elaborar un plan de mitigación). Nueva asignación de S y O, con su respectiva justificación: - Severidad (S): mientras más severo, más alto es el número (usar números del 1 al 10). Justificar el motivo por el cual se asigna determinado número de severidad (S). - Probabilidad de ocurrencia (O): mientras más probable, más alto es el número (usar del 1 al 10). Justificar el motivo por el cual se asigna determinado número de (O).

Riesgo 2: plan de mitigación (si por el RPN fuera necesario elaborar un plan de mitigación).

Riesgo 3: plan de mitigación (si por el RPN fuera necesario elaborar un plan de mitigación).

14. Gestión de la calidad

Para cada uno de los requerimientos del proyecto indique:

- Req #1: copiar acá el requerimiento.
 - Verificación para confirmar si se cumplió con lo requerido antes de mostrar el sistema al cliente. Detallar
 - Validación con el cliente para confirmar que está de acuerdo en que se cumplió con lo requerido. Detallar

Tener en cuenta que en este contexto se pueden mencionar simulaciones, cálculos, revisión de hojas de datos, consulta con expertos, mediciones, etc. Las acciones de verificación suelen considerar al entregable como “caja blanca”, es decir se conoce en profundidad su funcionamiento interno. En cambio, las acciones de validación suelen considerar al entregable como “caja negra”, es decir, que no se conocen los detalles de su funcionamiento interno.

15. Procesos de cierre

Establecer las pautas de trabajo para realizar una reunión final de evaluación del proyecto, tal que contemple las siguientes actividades:

- Pautas de trabajo que se seguirán para analizar si se respetó el Plan de Proyecto original:
- Indicar quién se ocupará de hacer esto y cuál será el procedimiento a aplicar.
- Identificación de las técnicas y procedimientos útiles e inútiles que se emplearon, y los problemas que surgieron y cómo se solucionaron: - Indicar quién se ocupará de hacer esto y cuál será el procedimiento para dejar registro.
- Indicar quién organizará el acto de agradecimiento a todos los interesados, y en especial al equipo de trabajo y colaboradores: - Indicar esto y quién financiará los gastos correspondientes.