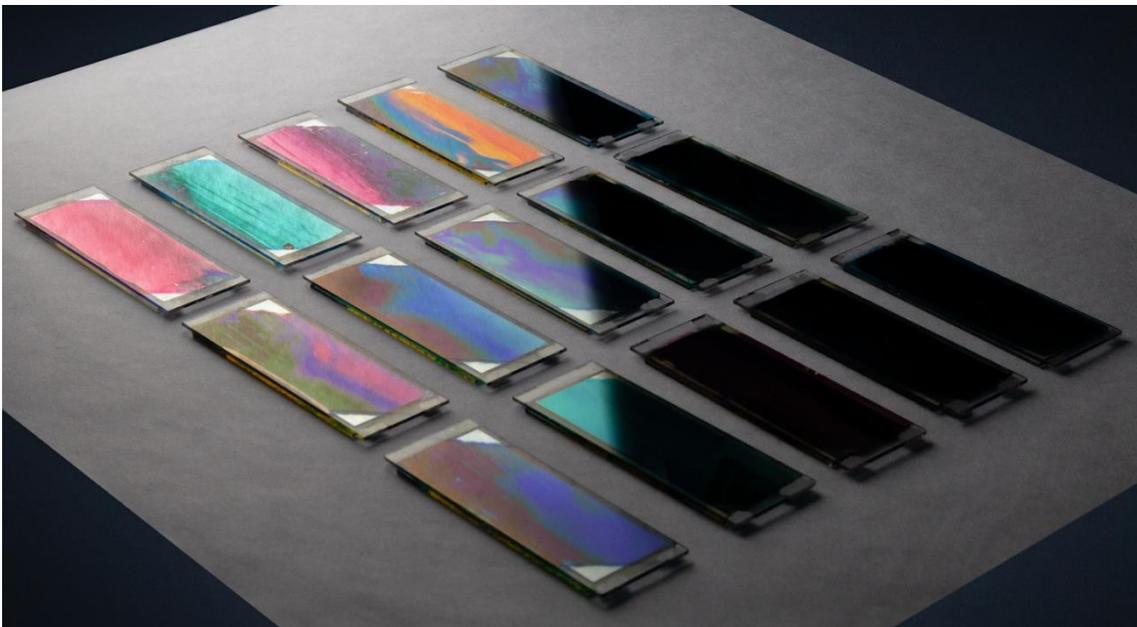




Barcelona / Madrid, jueves 28 de enero de 2021

Inteligencia artificial para predecir el rendimiento de las células solares orgánicas

- Investigadores del ICMAB-CSIC crean un sistema capaz de estimar el comportamiento de cada célula solar según su composición y diseño
- El trabajo emplea modelos de aprendizaje automático para aprender de conjuntos de datos anteriores y predecir el rendimiento de más materiales



Muestras de células solares orgánicas basadas en gradientes. / ICMAB

Investigadores del Instituto de Ciencia de Materiales de Barcelona (ICMAB) del Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC), han desarrollado un sistema que predice cómo será el rendimiento de las células solares orgánicas en función de su composición específica y su diseño. Este avance ha sido posible gracias a la colaboración entre el ICMAB-CSIC, especializado en materiales para aplicaciones energéticas, y un equipo de investigadores de la Universitat Rovira i Virgili especializado en inteligencia artificial (IA).

Asimismo, este estudio cuenta con la colaboración de químicos sintéticos del Imperial College de Londres, que proveyeron materiales fotovoltaicos orgánicos de última generación. Los resultados del estudio han sido publicados en la revista *Energy & Environmental Science*.

Los investigadores del ICMAB-CSIC, dirigidos por el investigador Mariano Campoy-Quiles, han generado múltiples conjuntos de datos utilizando un nuevo método experimental que les permite disponer de un gran número de muestras en un solo sustrato, lo que acelera el proceso en comparación con los métodos convencionales. A continuación, se utilizan modelos de aprendizaje automático (*machine learning*) para aprender de esos conjuntos de datos y predecir el rendimiento de más materiales.

Uno de los aspectos clave de este estudio es que los investigadores son capaces de generar grandes conjuntos de datos estadísticamente significativos y con un mínimo esfuerzo experimental. Este es un aspecto importante para realizar con éxito la modelización del aprendizaje automático para obtener modelos y predicciones precisas y fiables.

Los investigadores han utilizado una metodología basada en el cribado combinatorio en la que generan muestras con gradientes en los parámetros que más afectan al rendimiento de las células solares orgánicas, como su composición y su grosor.

"Cuando se utiliza un método convencional, una muestra proporciona información sobre un solo punto. Sin embargo, utilizando nuestra metodología podemos obtener entre 10 y 1.000 veces más puntos. Esto permite, por un lado, evaluar el potencial fotovoltaico de un material unas 50 veces más rápido que con los métodos convencionales. Por otro lado, proporciona gran cantidad de estadísticas y un enorme conjunto de datos (cientos de miles de puntos) que nos permiten entrenar de forma fiable diferentes algoritmos de IA", dice Mariano Campoy-Quiles, investigador del ICMAB-CSIC y coautor de este estudio.

"Dentro del amplio campo de la IA aplicamos el aprendizaje automático, que es un término que recoge todo tipo de algoritmos que confieren a las máquinas la capacidad de aprender a partir de un determinado conjunto de datos, pero no necesariamente de tomar decisiones autónomas. Aquí explotamos la visión más estadística de la IA para extraer modelos predictivos de nuestros amplios conjuntos de datos experimentales", explica Xabier Rodríguez-Martínez, investigador del ICMAB-CSIC y primer autor del estudio.

Los algoritmos de IA en el campo de la ciencia de materiales se utilizan principalmente para buscar patrones de comportamiento y así desarrollar modelos predictivos del comportamiento de una familia de materiales para una aplicación determinada. Para ello, primero se entrena un algoritmo exponiéndolo a datos reales para generar un algoritmo modelo. El modelo es entonces validado con otros puntos no utilizados para crear el modelo, pero de la misma categoría de materiales. Una vez validado, el algoritmo se aplica para predecir el comportamiento de otros materiales similares que no forman parte del conjunto de entrenamiento ni de validación.

En este estudio específico, los algoritmos de IA se entrenan con miles de puntos obtenidos con un método experimental de alto rendimiento para evaluar y predecir los diferentes factores que determinan la eficiencia de una célula solar orgánica.

"El uso de algoritmos de IA fue particularmente desafiante en este caso", explica Roger Guimerà, profesor ICREA de la Universitat Rovira i Virgili y coautor del estudio, "por el volumen y la complejidad de los datos y porque el objetivo final es extrapolar a nuevos materiales que no se han probado nunca".

Logros y futuros retos

Este estudio representa dos grandes logros. Por un lado, el desarrollo de modelos de IA que predicen cómo la eficiencia depende de muchos de los parámetros de las celdas solares orgánicas. El grado de predicción es muy alto incluso para los materiales que no han sido utilizados en el conjunto inicial de entrenamiento del algoritmo.

"El segundo punto importante es que, gracias a la IA, hemos determinado cuáles son los parámetros físicos que afectan en mayor medida dicho comportamiento", dice Mariano Campoy-Quiles. "En particular, hemos visto que los parámetros más críticos que determinan la composición óptima son la banda electrónica prohibida de cada material, así como lo balanceado que sea el transporte de carga en cada uno", añade.

Los investigadores creen que los resultados y la metodología desarrollada en este estudio son claves para orientar a los investigadores teóricos sobre qué tener en cuenta a la hora de desarrollar futuros modelos analíticos que intenten determinar la eficiencia de un sistema determinado.

"Nuestro próximo reto es entender sistemas mucho más complejos. Cuanto más complejo sea el sistema, más útil puede llegar a ser el empleo de la IA", concluye el investigador.

Xabier Rodríguez-Martínez, Enrique Pascual-San-José, Zhuping Fei, Martin Heeney, Roger Guimerà and Mariano Campoy-Quiles. **Predicting the photocurrent-composition dependence in organic solar cells.** *Energy & Environmental Science*, 2021. [DOI: 10.1039/D0EE02958K](https://doi.org/10.1039/D0EE02958K)

Anna May ICMAB-CSIC Comunicación