Universitas Indonesia Library >> UI - Skripsi Membership

Pengimplementasian Machine Learning Untuk Menemuakan Material Photovoltaic Berbasis Perovskite ABX3 Baru yang Efisien Sebagai Solar Panel = Implementatation Of Machine Learning To Discover Ner Efficient ABX3 Perovskite-Based Photovoltaic Materials For Solar Panels

Shabrina Kamiliya Wiyana, author

Deskripsi Lengkap: https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920564680&lokasi=lokal

---

Abstrak

Indonesia memiliki potensi energi surya yang besar. Material perovskite merupakan material yang dipakai untuk pembuatan solar panel, material ini memiliki variasi komposisi dan konfigurasi yang kompleks, sehingga proses pengembangannya membutuhkan waktu dan sumber yang besar. Oleh sebab itu penelitian ini bertujuan untuk menemukan material perovskite ABX3 baru untuk pembuatan solar panel dengan mengombinasikan hasil perhitungan dan simulasi Density Functional Theory (DFT) dengan Machine Learning. Penelitian ini juga menguji beberapa kelompok deskriptor yang mampu menghasilkan prediksi yang akurat terhadap nilai band gap, deskriptor yang digunakan diantaranya adalah Gao, Magpie, dan Hybrid (Gao-Magpie). Deskriptor Hybrid yang diajukan pada penelitian ini memberikan nilai pearson’s r tertinggi, yaitu 0.923 dibandingkan dua deskriptor lainnya. Selain itu, tiga model machine learning, yaitu XGBoost, Random Forest, dan Support Vector Regression dilatih dan diuji dengan data yang didapatkan melalui database Materials Project, kemudian ketiga model diuji berdasarkan R^2, RMSE, dan pearson’s r. XGBoost memberikan performa yang paling baik diantara dua model lainnya, dengan $R^2 = 0.838$ pada data testing dan RMSE = 0.2796 pada hasil validasi dengan perhitungan DFT. Penelitian ini membuktikan bahwa, model machine learning mampu memprediksi band gap dengan kesalahan error yang kecil terhadap prediksi menggunakan DFT dan dapat digunakan dalam penelitian ilmu material. Melalui penelitian ini, TiSnO3 dan FeSnO3 dipilih sebagai kandidat yang menjanjikan untuk pembuatan photovoltaic karena efisiensi dan stabilitasnya dalam solar panel. Penelitian selanjutnya diharapkan untuk melakukan penambahan pada data training dan memperbaiki model untuk meningkatkan kemampuan prediksi band gap.

.....Indonesia has great solar energy potential. Perovskite materials are used in the production of solar panels, and these materials have complex compositions and configurations, making their development process time-consuming and resource-intensive. Therefore, this study aims to discover new ABX3 perovskite materials for solar panel production by combining the results of Density Functional Theory (DFT) calculations and simulations with Machine Learning. This research also tests several groups of descriptors that can produce accurate predictions of band gap values, including Gao, Magpie, and Hybrid (Gao-Magpie) descriptors. Proposed descriptor in this study, The Hybrid descriptor provides the highest Pearson’s r value of 0.923 compared to the other two descriptors. Furthermore, three machine learning models—XGBoost, Random Forest, and Support Vector Regression—were trained and validated with data obtained from the Materials Project database. The models were then tested based on R^2, RMSE, and Pearson’s r. XGBoost performed the best among the three models, with an R^2 of 0.838 on the testing data and an RMSE of 0.2796 on the validation results compared to DFT calculations. This study demonstrates that machine learning models can predict the band gap with a small error compared to DFT predictions and

can be used in materials science research. From this study $TiSnO_3$ and $FeSnO_3$ is proposed because it stability and efficiency for solar panel application. Future research will focus on enhancing the training data and improving the model to increase band gap prediction accuracy.