

हिन्दी AI पुस्तकालय संस्करण

नई सामग्री डिज़ाइन और रॉकेट प्रणोदन इंजीनियरिंग के लिए कृत्रिम बुद्धिमत्ता

एआई पोर्टेंशियल, स्व-चालित
प्रयोगशालाएँ और
भौतिकी-सूचित मशीन लर्निंग
(PIML)

अधिवक्ता किम
क्यूंग-जिन

kimkj.com · AI पुस्तकालय · 2026

नई सामग्री डिज़ाइन और रॉकेट प्रणोदन इंजीनियरिंग के लिए कृत्रिम बुद्धिमत्ता

एआई पोर्टेबिलिटी, स्व-चालित प्रयोगशालाएँ और भौतिकी-सूचित मशीन लर्निंग (PIML)

अधिवक्ता कमि क्यूंग-जनि

एक परमाणु की गति सीखने वाले मशीन लर्निंग पोर्टेबिलिटी से शुरू होकर, पहले वांछित गुण तय करने और फिर क्रिस्टल संरचना को उलटी दिशा में बना देने वाले जनरेटिव मॉडल, रोबोट के अपने आप प्रयोग दोहराने वाली स्व-चालित प्रयोगशाला, रॉकेट के गर्म हिससों की रक्षा करने वाली उच्च-एन्ट्रॉपी मशीन धातु और सरिमिक कंपोजिट, धातु 3D प्रिंटिंग में दोषों की नगिरानी और थकान आयु की गारंटी, भौतिकी नियमों को लॉस फंक्शन में डालकर दहन की गणना करने वाली भौतिकी-सूचित मशीन लर्निंग, शीतलन मार्गों की डिज़ाइन, तरल रॉकेट इंजन के वास्तविक समय नदिन और सुदृढीकरण अधिगम नयित्रण तक, इन सबको दस अध्यायों में व्यवस्थित किया गया है। विज्ञान और प्रौद्योगिकी में रुचि रखने वाले सामान्य पाठकों के लिए इसे सूत्रों के बिना समझाया गया है, प्रत्येक अध्याय में सत्यापित आधार-सामग्री जोड़ी गई है, और यह दो कृत्रिम बुद्धिमत्ता समीक्षकों की मार्गदर्शक-प्राध्यापक जैसी आलोचना को प्रतिलिपि करने वाला जाँचा और संशोधित संस्करण है।

सार्वजनिक शोध सामग्री भंडार

यह पुस्तक कृत्रिम बुद्धिमत्ता की सहायता से व्यवस्थित और तैयार की गई है। इसमें दुनिया की प्रमुख भाषाओं में उपलब्ध सामग्री को इकट्ठा कर समेकित किया गया है। NotebookLM प्रश्न की भाषा को इस बात से सीमित नहीं करता कि सामग्री किस भाषा में लिखी गई है। पाठक उसी शोध सामग्री भंडार से अपनी भाषा में प्रश्न पूछ सकते हैं जिसका उपयोग इस पुस्तक को तैयार करने में किया गया है। कुछ सामग्री कोरियाई, अंग्रेज़ी या अन्य भाषाओं में हो, तब भी यही बात लागू होती है। NotebookLM में सेटिंग खोलकर आउटपुट भाषा को अपनी इच्छित भाषा पर सेट करने से उत्तर और उत्पन्न परिणाम उसी भाषा में मिलते हैं।

इस पुस्तक को तैयार करते समय उपयोग किया गया सार्वजनिक NotebookLM भंडार (AI for Materials Science and Rocket Engine Engineering, 129 सामग्रियाँ): <https://notebook.google.com/notebook/ac39e3ce-77a9-4e78-9aaf-b52c45c2934d>

इस पुस्तक का कोरियाई मूल संस्करण kimkj.com AI पुस्तकालय में है:
<https://kimkj.com/ai-library/?mod=document&uid=12453>

वर्षिय-सूची

प्रत्येक अध्याय के शीर्षक को दबाने पर संबंधित मुख्य पाठ पर जाया जा सकता है। शुरू से पढ़ना हो तो अध्याय 1 चुनें।

अध्याय 1. मटेरियल्स इंफॉर्मेटिक्स की बुनियाद और मशीन लर्निंग अंतर-परमाणु पोटेंशियल (MLIP) • 4

अध्याय 2. जनरेटिव AI और डिफ्यूजन मॉडल (Diffusion Models) पर आधारित क्रिस्टल संरचना पूर्वानुमान (CSP) और सामग्री का प्रतिलोम डिजाइन • 19

अध्याय 3. स्व-चालित प्रयोगशाला और वैज्ञानिक मल्टी-एजेंट प्रणाली • 34

अध्याय 4. उच्च-एनर्जी मशीन धातु (HEA) और सुपरअलॉय की भौतिक संगत भविष्यवाणी और संघटन अनुकूलन • 48

अध्याय 5. अंतरिक्ष-वमानन के लिए मशीन सामग्री (CMC) और अति-उच्च ताप सरिमिक्स (UHTC) की सूक्ष्म संरचना नियंत्रण और ताप जीवन मूल्यांकन • 63

अध्याय 6. धातु योज्य वर्णन (LPBF/DED) प्रक्रिया में तापीय तनाव मॉडलिंग और इन-सिटू (In-situ) दोष पहचान • 78

अध्याय 7. 3D प्रिंटेड एयरोस्पेस मशीन धातुओं की पोस्ट-प्रोसेसिंग और उच्च-चक्र थकान आयु की गारंटी • 92

अध्याय 8. भौतिकी-सूचित मशीन लर्निंग (PIML/PINNs) और ऑपरेटर लर्निंग (FNO) के माध्यम से गैस प्रतिक्रिया प्रवाह और दहन रसायन मॉडलिंग • 107

अध्याय 9. पुनर्योजी शीतलन चैनलों, फिल्म शीतलन छद्मों और इंड्यूसर का टोपोलॉजी-आधारित प्रतिलोम डिजाइन अनुकूलन • 122

अध्याय 10. तरल रॉकेट इंजन (LRE) का रियल-टाइम दोष निदान, डिजिटल ट्विन और सुदृढीकरण अधिगम आधारित प्रणोदन का रियल-टाइम अनुकूल नियंत्रण • 135

अध्याय 1. मटेरियल्स इन्फॉर्मेटिक्स की बुनियाद और मशीन लर्नगि अंतर-परमाणु पोटेंशियल (MLIP)

प्रस्तावना

हम जो भी वस्तु इस्तेमाल करते हैं, वह किसी न किसी सामग्री से बनती है। चम्मच धातु से बनता है और कप काँच से बनता है। रॉकेट इंजन का नोजल भी विशेष धातु और सरिमिक से बनता है। सामग्री बदलती है तो वस्तु के गुण भी बदलते हैं।

सामग्री के गुण आँखों से न देखने वाले छोटे कणों से शुरू होते हैं। ये कण परमाणु हैं। परमाणु पदार्थ की मूल इकाई है। परमाणु कैसे जुड़ते हैं और कैसे चलते हैं, इसी से धातु कभी कठोर होती है और कभी नरम।

रॉकेट बनाने वाला व्यक्ति परमाणुओं की यह गतिपिहले से जानना चाहता है। रॉकेट इंजन के भीतर तापमान कई हजार डिग्री तक चढ़ता है। दबाव भी बहुत अधिक होता है। ऐसी जगह धातु पघिले बनि टकि सकती है या नहीं, यह पहले से जानना पड़ता है। असली पुर्जे बनाकर जाँच करने में बहुत धन और समय लगता है। इसलिए वैज्ञानिक कंप्यूटर के भीतर परमाणुओं को चलाकर देखते हैं। यही परमाणु समिलेशन है।

कंप्यूटर से परमाणुओं को गति देने के लिए नयिमों की आवश्यकता होती है। क्योंकि यह जानना आवश्यक होता है कि प्रत्येक परमाणु पर कसि दशिया में और कतिना बल लग रहा है। इन नयिमों को सटीक रूप से बनाने और तेज़ी से बनाने के तरीके लंबे समय से एक-दूसरे से भिन्न थे। सटीक तरीका धीमा था और तेज़ तरीका अशुद्ध था। इन दोनों के बीच की दीवार को तोड़ने वाला नया मार्ग मशीन लर्नगि अंतर-परमाणु पोटेंशियल (Machine Learning Interatomic Potentials, MLIP) है। इसके बाद इस तकनीक को MLIP कहा जाएगा।

यह अध्याय धीरे-धीरे समझाता है कि MLIP क्या है और यह कैसे विकसित हुआ है। पहले परमाणु गणना की दो पुरानी विधियों को देखता है। फिर देखता है कि मशीन लर्नगि ने उनके बीच पुल कैसे बनाया। आरंभिक विधियों से लेकर नई विधियों तक क्रम से चलता है। अंत में यह बताता है कि इस तकनीक को रॉकेट सामग्री और नई सामग्री के शोध में इस्तेमाल करते समय कनि बातों का ध्यान रखना चाहिए। सूत्रों का उपयोग नहीं किया गया है। बात को ऐसे शब्दों में खोला गया है जिनसे चित्र मन में आ सके।

मटेरियल्स इन्फॉर्मेटिक्स शब्द भी यहाँ पहली बार आता है। इसका अर्थ सामग्री सूचना-विज्ञान है। यह वह अध्ययन है जिसमें सामग्री से जुड़े बहुत-से डेटा को इकट्ठा कर कंप्यूटर से विश्लेषण किया जाता है और नई सामग्री खोजी जाती है। MLIP इसके भीतर परमाणु स्तर की गणना करने वाला मुख्य औजार है।

पहले ही स्पष्ट कर दे कि यह कहानी रॉकेट से क्यों जुड़ती है। रॉकेट विकास को नई सामग्री खोजने के काम से अलग करना कठिन है। यदि कोई ऐसी धातु हो जो हल्की हो और अधिक गरम तापमान सह सके, तो रॉकेट का प्रदर्शन बढ़ता है। ऐसी सामग्री को प्रयोगशाला में एक-एक करके बनाकर जाँचने में कई वर्ष लगते हैं। यदि कंप्यूटर के भीतर परमाणु गणना से उम्मीदवारों को पहले छँट लिया जाए, तो यह समय घटता है। MLIP उस गणना को तेज और सही बनाने की कुंजी है। इस अध्याय को पढ़ने के बाद आप बड़ी रूपरेखा समझेंगे कि नई सामग्री कंप्यूटर के भीतर कैसे जन्म लेती है।

1. परिचय और पृष्ठभूमि: घनत्व फलनक सदिधांत (DFT) और मशीन लर्नगि का संयोजन

इस खंड में क्या आएगा

परमाणुओं को कंप्यूटर से समझने के लिए परमाणुओं के बीच की ऊर्जा और बल जानना पड़ता है। इन मानों को निकालने की दो मुख्य विधियाँ थीं। एक सही विधि है, जो इलेक्ट्रॉनों की गतिक की गणना करती है। दूसरी विधि पहले से तय सरल सूत्र से तेज गणना करती है। यह खंड बताता है कि ये दोनों विधियाँ क्या अच्छा करती हैं और क्या नहीं कर पाती।

फिर यह दोनों विधियों के बीच की पुरानी समस्या को देखता है। सही विधि बहुत धीमी है और तेज विधि अक्सर गलत होती है। इस समस्या को हल करने के लिए मशीन लर्नगि आई। यह खंड पहले उसकी बड़ी तस्वीर बनाता है।

इस खंड के कुछ शब्द आगे बार-बार आएँगे। वे ऊर्जा, बल और पोटेंशियल ऊर्जा सतह हैं। यदि अभी इनके अर्थ समझ लिए जाएँ, तो अगला खंड आसान हो जाता है। कठिन सूत्र नहीं हैं। केवल ऐसे शब्दों से समझाया गया है जिनसे चित्र मन में आ सके।

परमाणुओं से जुड़ी गणना में दो मुख्य मान ऊर्जा और बल हैं। ऊर्जा बताती है कि परमाणुओं की व्यवस्था कतिनी स्थिर है। ऊर्जा जतिनी कम होती है, वह व्यवस्था उतनी ही आरामदेह अवस्था में होती है। बल बताता है कि हर परमाणु कसि दशिया में धकेला जा रहा है। बल जान लेने पर यह गणना की जा सकती है कि परमाणु अगले क्षण कहाँ जाएगा।

ऊर्जा और बल वास्तव में अलग-अलग चलने वाले मान नहीं हैं। बल इस बात से नकिलता है कि स्थान के अनुसार ऊर्जा कतिनी तीव्रता से बदलती है। यदि ऊर्जा को जमीन की ऊँचाई-नीचाई माने, तो बल उस ढलान की तीव्रता है। गेद तीखी ढलान की ओर लुढ़कती है। परमाणु भी उस ओर धकेला जाता है जहाँ ऊर्जा घटती है। इसलिए ऊर्जा का नक्शा जान ले तो बल उस नक्शे की ढलान से मिलता है। यह संबंध आगे फरि महत्वपूर्ण होगा।

घनत्व फलनक सिद्धांत (Density Functional Theory, DFT) इलेक्ट्रॉनों के वितरण की गणना करके ऊर्जा और बल प्राप्त करने की एक विधि है। इसके बाद इसे DFT कहा जाएगा। इलेक्ट्रॉन परमाणु के चारों ओर चक्कर लगाने वाले बहुत छोटे आवेशित कण हैं। इलेक्ट्रॉन कहाँ और कतिने एकत्रित हैं, यही रासायनिक बंधों को निर्धारित करता है। DFT क्वांटम यांत्रिकी के सिद्धांतों से इस इलेक्ट्रॉन वितरण की गणना करता है। क्वांटम यांत्रिकी अत्यंत सूक्ष्म संसार के भौतिक नियम हैं। इसलिए DFT रासायनिक बंधों का सटीक चित्रण करता है।

DFT से निकले मान भी पूर्ण सत्य नहीं हैं। DFT इलेक्ट्रॉनों के बीच खिंचाव और धक्का को सन्निकट सूत्रों से संभालता है। यह सन्निकट सूत्र कैसे चुना जाता है, इस पर परिणाम थोड़ा-थोड़ा बदलता है। इसलिए DFT का मान वास्तविक सत्य से अधिक तय सेटिंग में मिला आधार मान है। मशीन लर्निंग इसी आधार मान को सीखती है। आगे जब DFT को सही उत्तर कहा जाए, तो उसे इसी अर्थ में समझना चाहिए।

समस्या गतकी है। DFT में परमाणुओं की संख्या बढ़ने पर गणना की मात्रा तेजी से बढ़ती है। परमाणु दोगुने हों तो गणना समय दोगुने से कहीं अधिक बढ़ जाता है। बड़े सुपरकंप्यूटर से भी आम तौर पर केवल कुछ सौ परमाणुओं तक काम हो पाता है। जसि समयावधि की गणना की जा सकती है, वह भी बहुत छोटे क्षण तक सीमित रहती है। रॉकेट सामग्री जैसी बड़ी वस्तु को लंबे समय तक देखने के काम के लिए यह ठीक नहीं है।

दूसरी ओर अनुभवजन्य बल क्षेत्र (Empirical Force Field) है। यह विधि परमाणुओं के बीच बल को पहले से तय सरल सूत्र से निकालती है। यह इलेक्ट्रॉनों को एक-एक करके नहीं गनिती। इसके बजाय परमाणुओं के बीच की दूरी जैसे कुछ मानों से बल तय करती है। गणना हल्की होती है, इसलिए लाखों परमाणुओं को भी संभाला जा सकता है। समय को भी कहीं अधिक लंबे समय तक देखा जा सकता है।

अनुभवजन्य बल क्षेत्र तेज है, पर उसकी कमजोरी है। जो बल क्षेत्र स्थायिक बंध मानकर चलता है, वह बंध टूटने और नया बंध बनने के क्षण को अच्छी तरह नहीं दिखा पाता। बाद में आए अभिक्रियाशील बल क्षेत्र या धातुओं के लिए बने बल क्षेत्र सीमित दायरे में बंध परिवर्तन और दोषों को कुछ हद तक संभालते हैं। फरि भी वस्तु पर स्थितियों में सहीपन बनाए रखना कठिन है। परमाणुओं के स्थान बहुत बदलने वाला अवस्था परिवर्तन भी कठिन है। रॉकेट इंजन जैसे गर्म और कठोर वातावरण में ऐसी घटनाएँ बार-बार होती हैं। इसलिए केवल सरल बल क्षेत्र से त्रुटि बढ़ जाती है।

यहाँ दोनों विधियों का अंतर जीवन की बात से समझा जा सकता है। DFT एक छात्र का गृहकार्य ध्यान से जाँचने जैसा है। यह सही है, पर पूरे विद्यालय के छात्रों का गृहकार्य जाँचना हो तो समय बहुत लगता है। अनुभवजन्य बल क्षेत्र उत्तरो को जल्दी-जल्दी देखकर सही है या नहीं, यह देखने जैसा है। यह तेज है, पर कठिन प्रश्नों में गलती करता है। वैज्ञानिकों को लंबे समय तक सहीपन और गति में से एक चुनना पड़ता था।

मशीन लर्निंग अंतर-परमाणु पोटेंशियल इस चयन की दीवार तोड़ने का प्रयास है। पोटेंशियल उस नक्शे जैसा है जो बताता है कि हर परमाणु व्यवस्था की ऊर्जा कतिनी है। इस नक्शे को पोटेंशियल ऊर्जा सतह कहा जाता है। MLIP उन आधार मानों को मशीन लर्निंग से सीखता है जिन्हें DFT ने गणना करके दिया है। मशीन लर्निंग वह गणना विधि है जो अनेक उदाहरणों से नियम स्वयं खोजती है। प्रयाप्त उदाहरण सीख लेने पर यह नई परमाणु व्यवस्था की ऊर्जा और बल का तेज अनुमान लगाती है।

MLIP कैसे सीखता है, इसे थोड़ा और खोलकर देखें। पहले DFT से कई परमाणु व्यवस्थाओं की ऊर्जा और बल की गणना की जाती है। ये गणना परिणाम उत्तर लिखी हुई अभ्यास-पुस्तिका जैसे हैं। मशीन लर्निंग मॉडल इस अभ्यास-पुस्तिका को देखकर नियम सीखता है। वह स्वयं समझने लगता है कि कौन-सी व्यवस्था में वैसी ऊर्जा क्यों है। प्रशिक्षण पूरा होने पर वह अभ्यास-पुस्तिका में न रही नई व्यवस्था को भी जल्दी हल करता है।

इस विधि का लक्ष्य साफ है। ऐसी गणना बनाना जो DFT जतिनी सही हो और अनुभवजन्य बल क्षेत्र जतिनी तेज हो। यदि यह लक्ष्य पूरा हो जाए, तो रॉकेट सामग्री को कंप्यूटर के भीतर बड़े पैमाने पर और लंबे समय तक जाँचा जा सकता है। उच्च तापमान पर धातु कैसे काँपती है और दरार कैसे फैलती है, यह परमाणु स्तर पर देखा जा सकता है। वास्तविक परीक्षण से पहले उम्मीदवार सामग्री छाँटी जा सकती है। इस अध्याय का बाकी भाग इसी लक्ष्य को पाने वाली कई तकनीकों की कहानी है।

एक बात पहले ही स्पष्ट कर देना आवश्यक है। MLIP पूरी तरह से DFT का स्थान नहीं लेता है। क्योंकि सीखने के लिए DFT द्वारा बनाए गए संदर्भ मान की आवश्यकता होती है। ये दोनों विधियाँ प्रतस्पर्धा नहीं करती, बल्कि एक जोड़ी बनाती है। DFT संदर्भ मान बनाता है और MLIP उस मान को तेजी से प्रसारित करता है। यह सहयोग बड़ी गणनाओं को संभव बनाता है।

2. शास्त्रीय वर्णनकर्ता-आधारित मशीन लर्निंग मॉडल

इस खंड में क्या आएगा

मशीन लर्निंग से परमाणु ऊर्जा सीखने के लिए पहले परमाणु के आसपास के आकार को संख्याओं में बदलना पड़ता है। कारण यह है कि कंप्यूटर चिंतन नहीं, संख्याएँ संभालता है। संख्याओं की इस सूची को वर्णनकर्ता (Descriptor) कहा जाता है। यह खंड आरंभिक MLIP में इस्तेमाल हुई तीन वर्णनकर्ता वधियों को देखता है।

तीनों वधियों की अपनी-अपनी विशेषता है। एक न्यूरल नेटवर्क का उपयोग करती है, एक तुलना करती है कदो वातावरण कतिने मलिते-जुलते हैं, और एक डीप लर्निंग से वर्णनकर्ता तक सीखती है। तीनों ने अच्छे परिणाम दिए, पर सीमाएँ भी सामने आईं। उन्हीं सीमाओं ने अगली पीढ़ी की तकनीक को बुलाया।

अच्छे वर्णनकर्ता को कुछ नियम मानने पड़ते हैं। नियम यह है कि वही पदार्थ हमेशा वही संख्या बनकर व्यक्त होना चाहिए। मेज़ को घुमा दिया जाए, तब भी मेज़ मेज़ ही रहती है। परमाणु संरचना को भी पूरा घुमाएँ या सरकाएँ तो स्थान बदलता है। फिर भी पदार्थ वही रहता है। वर्णनकर्ता को ऐसे परिवर्तन से डगमगाना नहीं चाहिए। इस गुण को अपरिवर्तनीयता (Invariance) कहा जाता है।

यदि अपरिवर्तनीयता न रहे तो समस्या पैदा होती है। मॉडल उसी पदार्थ को कई अलग पदार्थ समझ लेता है। तब वही बात कई बार अलग-अलग सीखनी पड़ती है। सीखना धीमा होता है और अनुमान अस्थिर हो जाता है। आरंभिक MLIP शोध ने इस अपरिवर्तनीयता को वर्णनकर्ता के भीतर हाथ से डालने पर बल दिया।

2.1 हर परमाणु की ऊर्जा अलग बाँटकर सीखने वाला न्यूरल नेटवर्क (BPNN)

बेहलर (Behler) और पारिनिलो (Parrinello) ने 2007 में एक महत्वपूर्ण वचिार प्रस्तुत किया। यह कुल ऊर्जा को प्रति-परमाणु ऊर्जा के योग में विभाजित करने का वचिार था। इस पद्धति को परमाणु ऊर्जा अपघटन कहा जाता है। प्रत्येक परमाणु केवल अपने आस-पास को देखता है और एक छोटा ऊर्जा मान देता है। सभी परमाणुओं के मानों को जोड़ने पर पूरी संरचना की ऊर्जा प्राप्त होती है। इस न्यूरल नेटवर्क को बेहलर-पारिनिलो न्यूरल नेटवर्क (Behler-Parrinello Neural Network, BPNN) कहा जाता है।

न्यूरल नेटवर्क मनुष्य के मस्तिष्क की कोशिकाओं के जुड़ाव से प्रेरित गणना संरचना है। यह इनपुट लेता है और कई चरणों से गुजरकर उत्तर देता है। अनेक उदाहरणों से प्रशिक्षण मिलने पर यह इनपुट और उत्तर के बीच का नियम सीखता है। BPNN परमाणु के आसपास के आकार को इनपुट के रूप में लेता है और उस परमाणु की ऊर्जा को उत्तर के रूप में देता है।

इस समय परमाणु के परिवेश को संख्याओं में बदलने वाला उपकरण परमाणु-केंद्रित सममिति फलन (Atom-Centered Symmetry Functions, ACSF) है। यह फलन एक परमाणु को केंद्र में रखता है। और एक निश्चित दूरी के भीतर स्थिति पड़ोसी परमाणुओं की जाँच करता है। यह पड़ोसियों तक की दूरी और पड़ोसियों द्वारा बनाए गए कोणों को संख्याओं के रूप में समेटता है। यह केवल दूरी को शामिल करने वाले भाग और कोण को भी शामिल करने वाले भाग में विभाजित होता है। इस प्रकार बनाई गई संख्याएँ संरचना को घुमाने या स्थानांतरित करने पर भी नहीं बदलती हैं।

यह वधि रॉकेट सामग्री शोध के लिए भी अर्थ रखती है। धातु गर्म होती है तो परमाणु अपनी जगह पर काफी हलिते हैं। पड़ोसियों तक की दूरी और कोण लगातार बदलते हैं। ACSF इन बदलावों को संख्या के रूप में पकड़ता है। इसलिए यह तापमान के अनुसार सामग्री की गति सीखने का पहला कदम बना।

पर सीमा साफ थी। तत्वों के प्रकार बढ़ते हैं तो जरूरी संख्याएँ तेजी से बढ़ती हैं। रॉकेट के लिए मशिर धातुओं में कई तत्व मिलाए जाते हैं। यदि पाँच प्रकार के तत्व हों तो तत्व-युग्मों के संयोजन बहुत बढ़ जाते हैं। कोणों को संभालने वाले तीन-परमाणु संयोजन और तेजी से बढ़ते हैं। प्रकार बढ़ने पर गणना का बोझ बढ़ने की इस समस्या को आयामों का अभिशाप कहा जाता है।

एक और सीमा यह थी कि वर्णनकर्ता मनुष्य को हाथ से रचना पड़ता था। कौन-सी दूरी और कोण कतिनी बारीकी से रखना है, यह मनुष्य तय करता है। यदि यह चयन गलत हो जाए, तो जरूरी सूचना छूट जाती है। अच्छा वर्णनकर्ता बनाना स्वयं कठिन काम था। इस बोझ को घटाने की कोशिश अगली वधियों तक पहुँची।

फिर भी इस वधि का छोड़ा हुआ अर्थ बड़ा है। कुल ऊर्जा को परमाणु-वार बाँटने का वचिार आज भी जीवित है। अधिकतर नए मॉडल भी इसी वधि के सिद्धांत का पालन करते हैं। हर परमाणु अपना आसपास देखकर मान देता है और फिर सबको जोड़ दिया जाता है। इस वधि के कारण परमाणु अधिक हों तब भी गणना बाँटकर की जा सकती है। बेहलर और पारिनिलो का वचिार MLIP की नींव बना।

2.2 दो परविशों की समानता मापने वाला पोटेंशियल (GAP)

बार्टोक (Bartók) और सानी (Csányi) आदि ने 2010 में एक अलग रास्ता चुना। न्यूरल नेटवर्क के बजाय, यह सीधे तुलना करने की एक वधि है कि दो परविश कितने समान हैं। इस वधिको गॉसियन सन्निकटन पोटेंशियल (Gaussian Approximation Potential, GAP) कहा जाता है। जब इसका सामना एक नए परमाणु परविश से होता है, तो यह इसकी तुलना पहले से सीखे गए परविशों से करता है। यदि समान परविश बहुत अधिक हों, तो यह उनकी ऊर्जा का संदर्भ लेकर उत्तर देता है।

इस तुलना का मुख्य उपकरण परमाणु स्थितियों का सुचारू अतव्यापन (Smooth Overlap of Atomic Positions, SOAP) है। SOAP परमाणु के परविश को कठोर बंदियों के बजाय एक सुचारू बादल के रूप में चित्रित करता है। यह प्रत्येक पड़ोसी परमाणु पर एक धुंधली गेंद रखने जैसा है। यदि दो परमाणु परविशों के बादल बहुत अधिक अतव्यापित होते हैं, तो इसे समान परविश माना जाता है। यह वधिघूर्णन के प्रति भी स्थिर रहने के लिए डिज़ाइन की गई है।

नरम बादल की तरह चित्रित करने का कारण है। परमाणु हमेशा थोड़ा-थोड़ा कांपते रहते हैं। यदि स्थान को केवल कठोर बंदि माना जाए, तो छोटी हलचल से भी मान बहुत उछल जाता है। बादल की तरह चित्रित करने पर छोटी हलचल सहज रूप से समा जाती है। इसलिए SOAP क्रिस्टल के भीतर दोषों या अव्यवस्थिति पदार्थों को संभालने में मजबूत रहा।

गॉसियन एप्रॉक्सिमेशन पोटेंशियल ने कम डेटा से भी उच्च सटीकता दी। यह बात उस स्थिति में बड़ी मदद करती है जहां DFT गणना महंगी होती है। इसका बहुत उपयोग क्रिस्टल दोषों, द्रव अवस्था और अव्यवस्थिति अमॉर्फस पदार्थों के अध्ययन में हुआ। रॉकेट सामग्री में भी दोष और अव्यवस्था महत्वपूर्ण विषय हैं। इसलिए यह वधिलंबे समय तक उद्धृत होने वाला मानक बनी।

सीमा तब दिखाई देती है जब डेटा बढ़ा होता है। यह वधि नए परविश की तुलना सीखे गए सभी परविशों से करती है। सीखने का डेटा जतिना बढ़ता है, तुलना के लक्ष्य भी उतने बढ़ते हैं। तब गणना और भंडारण का बोझ साथ-साथ बढ़ता है। आज की तरह लाखों से अधिक बड़े डेटा को संभालने के लिए इसमें गणना की मात्रा अधिक है।

इसलिए बड़े पैमाने की समस्याओं में इस वधि ने दूसरी संरचनाओं को जगह दी। बड़े डेटा से तेजी से सीखने के लिए डीप लर्निंग न्यूरल नेटवर्क अधिक उपयुक्त थे। इसका कारण यह है कि डीप लर्निंग डेटा बढ़ने पर अधिक प्रभावी होती है। फरि भी गॉसियन एप्रॉक्सिमेशन पोटेंशियल ने जो सटीकता का मानक बनाया था, वह आज भी जीवित है। नए मॉडल के प्रदर्शन को मापते समय इसे अक्सर तुलना के आधार के रूप में इस्तेमाल किया जाता है।

SOAP ने जो विचार छोड़ा, वह भी आगे चलता है। यह परमाणु के आसपास के क्षेत्र को नरम घनत्व के रूप में देखने का विचार है। यह विचार बाद में आए कई मॉडलों में समा गया। कठोर बंदि के बजाय नरम वितरण के रूप में संभालने पर गणना स्थिर होती है। कारण यह है कि छोटी हलचल से मान नहीं उछलता। रॉकेट सामग्री जैसी उच्च तापमान गणना में, जहां परमाणु बहुत कांपते हैं, यह स्थिरता मदद करती है।

2.3 डीपक्रिप्टर तक स्वयं सीखने वाला डीप लर्निंग (DeePMD)

झांग (Zhang) और कार (Car) आदि ने 2018 में डीप लर्निंग को परमाणु गणना में पूरी तरह से पेश किया। इस पद्धति को डीप पोटेंशियल आणविक गतिकी (Deep Potential Molecular Dynamics, DeePMD) कहा जाता है। आणविक गतिकी समय के साथ परमाणुओं की गति पर नज़र रखने वाला एक समिलेशन है। DeePMD इस समिलेशन में उपयोग किए जाने वाले बल की गणना डीप लर्निंग के माध्यम से करता है।

पहले की वधियों में वर्णनकर्ता मनुष्य ने बनाए थे। DeePMD ने इस बोझ को बहुत घटाया। न्यूरल नेटवर्क परमाणु के आसपास के निर्देशांकों को स्वयं अच्छे रूप में बदलता है। मनुष्य को दूरी और कोण एक-एक करके चुनने की जरूरत नहीं रहती। इसके साथ ही उसने घूर्णन और स्थानांतरण से न डगमगाने वाला गुण बनाए रखा।

डीप लर्निंग शब्द को यहां थोड़ा और खोलकर समझते हैं। डीप लर्निंग का अर्थ कई परतों से बने न्यूरल नेटवर्क से है। परतें गहरी हों तो जटिल नियम भी सीखे जा सकते हैं। उथला न्यूरल नेटवर्क केवल सरल नियम सीखता है। गहरा न्यूरल नेटवर्क परमाणुओं के बीच उलझे संबंधों तक को समेटता है। इसके बदले सीखने में बहुत डेटा और गणना लगती है। डीप शब्द परतों के गहरे होने से आया है।

इस वधिकी ताकत बढ़ा पैमाना है। डीप लर्निंग में परमाणुओं की संख्या अधिक होने पर भी गणना का बोझ बहुत अधिक नहीं बढ़ता। इसलिए DeePMD लाखों परमाणुओं की गति भी संभाल सकता है। इसका उपयोग पानी, धातु और अर्धचालक जैसे कई पदार्थों में हुआ। बड़े तंत्र को लंबे समय तक देखने के काम में इसने शक्ति दिखाई।

DeePMD का रॉकेट सामग्री अनुसंधान में भी अर्थ है। उच्च तापमान पर धातु का ढेला कैसे बदलता है, यह देखने के लिए बहुत परमाणु चाहिए। केवल छोटा टुकड़ा देखने पर पूरे व्यवहार को खो दिया जाता है। DeePMD बड़े टुकड़े को संभाल सकता है, इसलिए वह ऐसे अध्ययन के लिए उपयुक्त था।

फरि भी शुरुआती वर्णनकर्ता वधियों की साझा सीमा बची रही। ये वधियां तय दूरी के भीतर के पड़ोसियों को अलग-अलग देखती हैं। दूर स्थिति परमाणु के प्रभाव को समेटना हो तो देखने की दूरी बढ़ानी पड़ती है। तब पड़ोसियों की संख्या बहुत बढ़ती है और गणना का बोझ बढ़ता है। संरचना की दृष्टि से दूरस्थ अंतःक्रियाओं को समेटना कठिन था।

DeePMD ने एक और द्वार खोला। वह बड़े गणना औजारों के साथ जुड़ाव है। यह वधि बड़े सुपरकंप्यूटरों पर अरबों परमाणुओं को संभालने वाले अध्ययन तक पहुंची। कई तत्वों को मिलाकर बनी मशिर धातुओं की बड़े पैमाने पर गणना में भी इसका उपयोग होता है। रॉकेट के लिए उच्च तापमान मशिर धातु का अध्ययन ऐसी बड़ी गणना मांगता है। कारण यह है कि केवल छोटा टुकड़ा देखने पर छूट जाने वाला व्यवहार बड़े तंत्र में देखा जा सकता है।

इसी सीमा ने नया वचिर जन्म दिया। वचिर यह था कि केवल एक परमाणु को केंद्र में रखकर उसके आसपास देखने की पद्धति से आगे बढ़ा जाए। यदि परमाणु आपस में सूचना का आदान-प्रदान करे तो क्या होगा। सूचना कई बार आने-जाने पर दूर के परमाणु का प्रभाव भी आगे-आगे पहुंचता है। यही वचिर अगले खंड के ग्राफ न्यूरल नेटवर्क तक जाता है।

3. नवीनतम समपरवर्त्ती (Equivariant) ग्राफ न्यूरल नेटवर्क (GNN)

यह खंड आज के MLIP की मुख्यधारा बनी वधि पर चर्चा करता है। यह ग्राफ न्यूरल नेटवर्क (Graph Neural Network, GNN) है। यह वधि परमाणुओं को बढ़ि मानती है और परमाणुओं के बीच पड़ोसी संबंधों को रेखा मानती है। यहां रेखा का अर्थ स्वयं रासायनिक बंध नहीं है। इसका अर्थ है कि तय दूरी के भीतर के पड़ोसियों को जोड़ा गया है। यह रेखा गणना के दौरान भी बदल सकती है। यह वैसा ही है जैसे मेट्रो मानचित्र में स्टेशनों को बढ़ि और स्टेशनों के बीच के संपर्क को रेखा से दिखाया जाता है। बढ़ियों और रेखाओं के साथ सूचना का आदान-प्रदान करते हुए ऊर्जा की गणना की जाती है।

इस खंड का मुख्य शब्द सहपरवर्त्तनशीलता (Equivariance) है। यह पछिले खंड की अपरवर्त्तनशीलता के साथ जोड़ी बनाता है। पहले समझाया जाएगा कि सहपरवर्त्तनशीलता क्या है और परमाणु गणना में इसकी जरूरत क्यों है। फरि इस गुण को समेटने वाले प्रतनिधि मॉडलों को शुरुआती से नवीनतम तक क्रम से देखा जाएगा। अंत में उन बड़े मॉडलों तक चर्चा जाएगी जो वसितृत डेटा पहले से सीखते हैं।

ग्राफ न्यूरल नेटवर्क सूचना का आदान-प्रदान करके गणना करता है। हर परमाणु अपने पड़ोसियों को संदेश भेजता है। वह पड़ोसियों से आए संदेशों को इकट्ठा करके अपनी अवस्था को नया करता है। यह प्रक्रिया कई बार दोहराई जाती है। एक बार आदान-प्रदान करने पर ठीक बगल का परमाणु जाना जाता है। दो बार आदान-प्रदान करने पर पड़ोसी का पड़ोसी भी जाना जाता है। जतिना दोहराया जाता है, उतना दूर के परमाणुओं का प्रभाव आगे आता है। इस वधि को संदेश प्रेषण (Message Passing) कहा जाता है।

यह संरचना पछिले खंड की सीमा को कुछ हद तक हल करती है। देखने की दूरी जबरन बढ़ाने की जरूरत नहीं रहती। कारण यह है कि संदेश कई बार आने-जाने पर पड़ोसी से आगे की सूचना भी पहुंचती है। हालांकि यदि परतों की संख्या तय है, तो सूचना के पहुंचने की सीमा भी तय होती है। बहुत दूर की स्थैतिक वदियुत या प्रसरण बल जैसे प्रभाव केवल इस वधि से पूरी तरह समेटना कठिन है। ऐसे प्रभावों को अलग से बनाए गए दीर्घ-दूरी पद के रूप में जोड़ना पड़ता है। फरि भी ग्राफ न्यूरल नेटवर्क वसितृत दायरे की अंतःक्रियाओं को कुशलता से समेटने की बड़ी प्रगति थी।

3.1 घुमाने और पलटने पर भी लागू रहने वाली सममति

परमाणु जगत में कुछ सममतियों सुरक्षित रहती हैं। संरचना को पूरे रूप में खसिकाया या घुमाया जाए, तब भी भौतिक नियम वही रहते हैं। खसिकाने, घुमाने और पलटने को मिलाकर E3 कहा जाता है। इनमें केवल घूर्णनों के समूह को SO3 कहा जाता है। नाम कठिन है, पर अर्थ सरल है। यह खसिकाने, घुमाने और दर्पण की तरह पलटने का समूह है। घुमाना और पलटना अलग-अलग गतियां हैं। घूर्णन आकार को जस का तस घुमाता है, जबकि पलटना बाएं-दाएं बदल चुकी दर्पण-छवि बनाता है।

पहले देखी गई अपरवर्त्तनशीलता वह गुण है जिसमें इन गतियों के बाद भी मान नहीं बदलता। ऊर्जा अपरवर्त्ती राशि है। संरचना को घुमाने पर भी उस संरचना की ऊर्जा समान होनी चाहिए। लेकिन सभी मान अपरवर्त्ती नहीं होते। बल दशा वाला मान है। संरचना को घुमाने पर बल की दशा भी साथ में घूमनी चाहिए।

यही गुण सहपरवर्त्तनशीलता है। सहपरवर्त्तनशीलता वह गुण है जिसमें इनपुट घूमे तो आउटपुट भी उसी तरीके से घूमता है। बल सहपरवर्त्ती राशि है। संरचना को दाईं ओर घुमाने पर हर परमाणु पर लगने वाला बल भी दाईं ओर घूमता है। अपरवर्त्तनशीलता और सहपरवर्त्तनशीलता दोनों को बनाए रखना होगा, तभी परमाणु गणना भौतिक नियमों से मेल खाती है।

अपरवर्त्ती राशि और सहपरवर्त्ती राशि को एक वाक्य में अलग करते हैं। घुमाने पर भी मान जैसा का तैसा रहे तो वह अपरवर्त्ती राशि है। घुमाने पर मान भी साथ में घूमे तो वह सहपरवर्त्ती राशि है। ऊर्जा दशा रहति एक संख्या है, इसलिए अपरवर्त्ती राशि है। तापमान या घनत्व जैसे मान

भी दशा रहति हैं, इसलिए अपरविर्ती राश हैं। बल या वेग जैसे दशा वाले मान सहपरविर्ती राश हैं। मॉडल को जानना और संभालना चाहिए कि हर मान किस ओर का है।

यहां पछिले खंड में छोड़ी गई बात को आगे बढ़ाते हैं। कहा गया था कि बल ऊर्जा मानचित्र की ढाल है। अच्छा मॉडल बल को अलग से अंदाज लगाकर फिट नहीं करता। वह पहले ऊर्जा निकालता है और उस ऊर्जा मानचित्र की ढाल से बल प्राप्त करता है। इस क्रम को बनाए रखने का कारण है। यदि बल को मनमाने ढंग से आउटपुट किया जाए, तो ऐसा बल निकल सकता है जिसमें ऊर्जा सुरक्षित न रहे। ऐसे बल से लंबे समय तक गणना करने पर जो ऊर्जा थी ही नहीं, वह अपने आप बन या गायब हो सकती है। तब समिलेशन धीरे-धीरे फूल सकता है या ढह सकता है। ऊर्जा से ढाल लेकर बल प्राप्त करने पर ऐसी गड़बड़ी नहीं होती। भौतिकी में ऊर्जा से निकले ऐसे बल को संरक्षणी बल कहा जाता है।

इन दो गुणों को मॉडल के भीतर शुरू से डालने पर बड़ा लाभ होता है। मॉडल को एक ही पदार्थ को कई दशाओं से अलग-अलग सीखने की जरूरत नहीं रहती। एक बार सीखा गया नियम सभी दशाओं में अपने आप लागू होता है। इसलिए वह कम डेटा से भी स्थिर रूप से सीखता है। DFT गणना जतिनी महंगी है, उतना ही यह डेटा बचत बड़ी ताकत बनती है।

रॉकेट सामग्री में दशा महत्वपूर्ण होने वाली कई घटनाएं होती हैं। दरार किसी खास दशा में फैलती है। क्रिस्टल तल के साथ फसिलने वाला वरूपण भी दशा रखता है। ऑक्सीकरण प्रतिक्रिया भी सतह की दशा के अनुसार अलग होती है। यदि बल की दशा को सही तरह न संभाला जाए, तो ऐसी घटनाओं का चित्रण गलत होगा। सहपरविर्तनशीलता बनाए रखने वाला मॉडल इस दृष्टि से लाभ में है।

इस सममतिको थोड़ा आसान चित्र में बदलकर देखते हैं। मान लीजिए कि एक ही खलौना ब्लॉक संरचना की कई तस्वीरें ली जाती हैं। सामने से ली गई तस्वीर और बगल से ली गई तस्वीर अलग दखिती हैं। फिर भी ब्लॉक संरचना स्वयं वही है। मनुष्य यह बात तुरंत जानता है। लेकिन कंप्यूटर के लिए ये दो तस्वीरें अलग इनपुट हैं। जिस मॉडल में सममति नहीं डाली गई है, वह दो तस्वीरों को अलग पदार्थ मान सकता है। जिस मॉडल में सममति डाली गई है, वह दो तस्वीरों को एक ही पदार्थ मानता है। यही अंतर सीखने की दक्षता को बहुत अलग कर देता है।

सार रूप में, सममति सजावट नहीं, ढांचा है। सममति बनाए रखने वाला मॉडल डेटा बचाता है और भविष्यवाणी को स्थिर करता है। सममति तोड़ने वाला मॉडल भौतिक रूप से अजीब उत्तर दे सकता है। इसलिए आधुनिक MLIP अनुसंधान इस बात पर केंद्रित है कि इस गुण को अच्छी तरह कैसे समेटा जाए।

3.2 केवल दूरी देखने की वधि से दशा तक साझा करने की वधितिक

SchNet 2018 में आया शुरुआती ग्राफ न्यूरल नेटवर्क है। यह मॉडल परमाणुओं के बीच की केवल दूरी को संदेश के रूप में साझा करता है। दूरी दशा रहति मान है। इसलिए SchNet केवल अपरविर्ती सूचना संभालने वाला अपरविर्ती ग्राफ न्यूरल नेटवर्क है। इसकी संरचना साफ है और गणना तेज है।

केवल दूरी इस्तेमाल करने की वधि में कमजोरी है। दशा महत्वपूर्ण होने वाले बंधों को सीधे समेटना कठिन है। दूरी समान हो, पर कोण अलग हो, तो बंध अलग होता है। इस अंतर को छोड़ दिया जाए तो त्रुटि पैदा होती है। DimeNet ने इस बात की पूर्तिकरते हुए परमाणुओं के बीच के कोण को भी संदेश में शामिल किया। यह दशा सूचना को समेटने की कोशिश का आगे बढ़ना था।

बैटज़नर (Batzner) और कोज़िंस्की (Kozinsky) आदि ने 2022 में एक बड़ा कदम उठाया। यह NequIP नामक एक मॉडल है। यह मॉडल दूरी और कोण से आगे बढ़कर स्वयं दशा को संदेश के रूप में आदान-प्रदान करता है। यह दशा वाले मानों को वैसे ही संप्रेषित करता है और मिलाता है। यही सहपरविर्ती संदेश संचरण है। यह बल की दशा और परमाणु के परविश के 3-आयामी आकार को कहीं अधिक नष्टापूर्वक समेटता है।

NequIP का बड़ा लाभ डेटा दक्षता है। दशा सूचना को सिद्धांत के अनुसार समेटने के कारण यह कम उदाहरणों से भी अच्छी तरह सीखता है। प्रकाशित शोधपत्र बताता है कि इसने पुराने मॉडलों की तुलना में बहुत कम प्रशिक्षण डेटा से उच्च सटीकता प्राप्त की। जिस अध्ययन में DFT गणना की हर एक बार की लागत अधिक हो, वहां यह बचत वास्तविक लाभ है।

डेटा दक्षता क्यों महत्वपूर्ण है, इसे फिर देखते हैं। DFT गणना की एक बार में बहुत कंप्यूटर समय लगता है। यदि सीखने के लिए दसियों हजार गणनाएं चाहिए हों, तो गणना लागत बहुत बढ़ जाती है। NequIP बहुत कम संख्या से भी समान सटीकता देता है। तब उसी बजट से अधिक कठिन पदार्थों को संभाला जा सकता है। रॉकेट के लिए नई सामग्री में डेटा कम होने के मामले बहुत होते हैं। उच्च डेटा दक्षता वाला मॉडल ऐसी स्थिति में बहुत उपयोगी होता है।

यह विकास रॉकेट सामग्री गणना के लिए सीधे अर्थ रखता है। दरार, दोष और अवस्था परिवर्तन सभी दशा से जुड़े हैं। सहपरविर्ती मॉडल ऐसी दशा वाली घटनाओं को अधिक सही ढंग से चित्रित करता है। कम DFT डेटा से भी चरम वातावरण का व्यवहार सीखा जा सकता है। इसलिए NequIP के बाद सहपरविर्ती वधि इस क्षेत्र के मानक के करीब पहुंच गई।

NequIP के आसपास के समय में दक्षता बढ़ाने वाले अध्ययन भी जारी रहे। यह दशिया सूचना संभालते हुए गणना को हल्का करने का प्रयास है। हाल के एक अध्ययन ने दक्षता बढ़ाने वाला सहपरिवर्ती मॉडल प्रस्तुत किया और वह 2025 में एक जर्नल में प्रकाशित हुआ। यह सटीकता बनाए रखते हुए गणना का बोझ घटाने की दशिया है। ऐसे प्रयास जमा होते गए और सहपरिवर्ती वधि वास्तविक अनुसंधान में उपयोग योग्य बन गई।

फरि भी इसकी एक कीमत है। दशिया-सूचना को सदिधांत के अनुसार मलाने के लिए भारी गणतीय गणना करनी पड़ती है। इस गणना को टेसर गुणन कहा जाता है। यह सटीक है, लेकिन गणना और मेमोरी का बोझ बढ़ा है। यही बोझ बाद में फरि समस्या बनकर सामने आता है। यह बात धारा 5 में आगे जारी रहेगी।

3.3 एक साथ कई परमाणुओं के संबंधों को समेटने की वधि (MACE)

बटाटिया (Batatia) और चानी (Csányi) आदिने 2022 में MACE प्रस्तुत किया। इस मॉडल ने समवर्ती ग्राफ न्यूरल नेटवर्क को बहु-पडि प्रसार नाम की पुरानी भौतिकी सदिधांत से जोड़ा। बहु-पडि का अर्थ है कई परमाणुओं से मलिकर बनने वाला प्रभाव। किसी पदार्थ में केवल एक परमाणु और दूसरे परमाणु का संबंध ही महत्वपूर्ण नहीं होता। तीन परमाणुओं और चार परमाणुओं से मलिकर बनी व्यवस्था भी गुणों को बदलती है।

पहले के ग्राफ न्यूरल नेटवर्क ऐसे बहु-पडि प्रभावों को समेटने के लिए संदेशों का कई बार आदान-प्रदान करते थे। आदान-प्रदान की संख्या बढ़ने पर गणना का बोझ बढ़ता है और प्रशिक्षण धीमा हो जाता है। MACE ने दूसरा रास्ता खोजा। यह एक बार इकट्ठी की गई पड़ोसी जानकारी को आपस में गुणा करके कई परमाणुओं के प्रभाव को एक साथ बनाता है। इसलिए संदेश-प्रेषण की कम संख्या से ही चार या अधिक परमाणुओं के प्रभाव भी समेटे जाते हैं।

इस डिजाइन का लाभ यह है कि यह सटीकता और गति दोनों को साधता है। संदेश-प्रेषण कम करने से गणना हल्की हो जाती है। फरि भी बहु-पडि प्रभाव छूटते नहीं, इसलिए सटीकता बनी रहती है। बड़े क्रिस्टल या लंबे समय की आणविक गतिकी में यह लाभ और बढ़ा हो जाता है। इसलिए MACE कई अध्ययनों में एक शक्तिशाली मानक मॉडल के रूप में इस्तेमाल होता है।

MACE का इस्तेमाल रॉकेट सामग्री अनुसंधान में भी होता है। हाल के एक शोध दल ने एल्यूमिनियम, टाइटेनियम, क्रोमियम, मोलबिडेनम और टंगस्टन को मलिकर बनी उच्च-एनर्जी मशिर धातु का अध्ययन किया। यह मशिर धातु कई तत्वों को लगभग समान मात्रा में मलिकर बनी सामग्री है। शोध दल ने MACE से इस मशिर धातु का अंतर-परमाणु पोटेशियल बनाया। फरि तापमान के अनुसार फेज स्थिरता की जांच की। यह अध्ययन 2026 में भौतिकी की एक शोध पत्रिका में प्रकाशित हुआ। यह उच्च तापमान वाली मशिर धातु डिजाइन में MACE के इस्तेमाल का उदाहरण है। हालांकि इस अध्ययन ने फेज स्थिरता की गणना दिखाई। वास्तविक पुरजे की दरार या आयु तक को इस एक अध्ययन ने सत्यापित नहीं किया।

सीमाओं को भी साथ में देखना चाहिए। MACE भी दशिया-सूचना मलाने समय टेसर गुणन का उपयोग करता है। इसलिए कोणीय संवेग नाम की दशिया-सटीकता बढ़ाने पर गणना का बोझ तेजी से बढ़ता है। बहुत बड़े तंत्रों या बहुत लंबे समय के समिलेशन में यह बोझ अब भी समस्या है। इस बात को कम करने वाले अध्ययन आगे जारी हैं।

बहु-पडि प्रभाव को एक आसान उदाहरण से समझते हैं। कक्षा में केवल दो छात्रों को देखने से बस यह पता चलता है कि उनका आपसी संबंध कैसा है। तीन छात्र इकट्ठा हों तो माहौल बदल जाता है। चार छात्र इकट्ठा हों तो एक और तरह का प्रवाह बनता है। परमाणुओं के साथ भी यही बात है। केवल दो परमाणुओं के संबंध से सामग्री के सारे गुण नहीं समेटे जा सकते। कई परमाणुओं से मलिकर बनी व्यवस्था गुणों को बदलती है। MACE इन कई परमाणुओं के संबंधों को कम चरणों में समेटता है।

एक और कार्य सीखे गए दायरे से बाहर की स्थिति है। MACE कतिना भी सटीक हो, प्रशिक्षण में न रही अनजानी व्यवस्था में गलत हो सकता है। रॉकेट का वातावरण हमेशा चरम होता है और उसमें अनजानी घटनाएं अधिक होती हैं। इसलिए जतिना सटीक मॉडल हो, उतना ही उसे अपने अज्ञान के क्षण को स्वयं बताने की व्यवस्था चाहिए। यही व्यवस्था धारा 4 का सक्रिय अधिगम है।

3.4 व्यापक सामग्रियों को पहले से सीखे हुए बड़े मॉडल (CHGNet, MatterSim)

ऊपर के मॉडल आम तौर पर एक सामग्री या संकीर्ण दायरे को लक्ष्य बनाकर प्रशिक्षित किए जाते हैं। नई सामग्री मलाने पर उसके अनुरूप डेटा से फरि प्रशिक्षण करना पड़ता है। इस बोझ को घटाने की धारा फाउंडेशन पोटेशियल है। फाउंडेशन पोटेशियल बहुत व्यापक सामग्री डेटा पहले से सीख चुका बड़ा मॉडल है। यह कुछ वैसा है जैसे कई तरह के पकवान सीख चुका रसोइया नई सामग्री से भी ठीक से नपित लेता है।

CHGNet 2023 में जारी किया गया एक प्रमुख फाउंडेशन पोटेशियल है। इस मॉडल को मटेरियल्स प्रोजेक्ट (Materials Project) नामक एक बड़े कम्प्यूटेशनल डेटाबेस से प्रशिक्षित किया गया था। मटेरियल्स प्रोजेक्ट अनगिनत सामग्रियों के DFT गणना परिणामों को एकत्रित

करने वाला एक सार्वजनिक डेटा है। इसके अतिरिक्त, CHGNet आवेश और चुंबकीय अवस्था के संकेतों को भी साथ में सीखता है। इसलिए यह बैटरी सामग्रियों में लथियम की गतियां संक्रमण धातु ऑक्साइड के चरण परिवर्तन को अच्छी तरह से ट्रैक करता है।

CHGNet आवेश और चुंबकीय अवस्था क्यों सीखता है, इसका कारण है। बैटरी सामग्री में लथियम अंदर-बाहर जाता है और आवेश का आदान-प्रदान होता है। संक्रमण धातु ऑक्साइड में परमाणु की चुंबकीय अवस्था गुणों को बदलती है। इन बदलावों को छोड़ दिया जाए तो सामग्री के व्यवहार को गलत ढंग से चित्रित किया जाता है। CHGNet इन संकेतों को परमाणु वातावरण के नरूपण में साथ रखकर अधिक व्यापक सामग्रियों को समेटता है। हालांकि यह ऐसा वद्विद्युत-रासायनिक मॉडल नहीं है जो आवेश को संरक्षण मान के रूप में एक-एक कर ट्रैक करे। इसे इस रूप में समझना ठीक है कि यह सीखे हुए नरूपण से चुंबकीय अवस्था के सुराग समेटता है। रॉकेट सामग्री में भी ऑक्साइड और संक्रमण धातुओं का अक्सर उपयोग होता है, इसलिए यह क्षमता उपयोगी है।

MatterSim 2024 में सार्वजनिक किया गया एक और फाउंडेशन पोर्टेबिलिटी है। यह मॉडल तापमान और दबाव की बहुत व्यापक सीमा को लक्ष्य बनाता है। प्रकाशित शोधपत्र बताता है कि यह 0 केल्विन से 5000 केल्विन तक और 0 गीगापास्कल से 1000 गीगापास्कल तक को संभालता है। केल्विन परम तापमान की इकाई है और गीगापास्कल दबाव की इकाई है। इस सीमा में रॉकेट इंजन की गरम स्थितियां भी आती हैं। हालांकि प्रशिक्षण सीमा का मेल होना और वास्तव में ठीक भविष्यवाणी करना अलग बातें हैं। 1000 गीगापास्कल रॉकेट दहन कक्ष के दबाव से बहुत अधिक है। दहन गैस या ऑक्सीकरण सतह जैसी रॉकेट-वशिष्ट स्थितियों को अलग से सत्यापित करना होगा। इसलिए यह मॉडल चरम सामग्री अनुसंधान के आरंभिक बिंदु के रूप में ध्यान खींचता है। प्रकाशित शोधपत्र बताता है कि इस मॉडल ने बहुत डेटा बचाया। व्यापक स्थितियों पहले से सीखने के कारण यह नई सामग्री पर भी तेजी से प्रतिक्रिया देता है।

हाल में सटीकता और गति दोनों को बढ़ाने वाला नया फाउंडेशन पोर्टेबिलिटी भी आया। यह GRACE नाम का मॉडल है। इस मॉडल को ग्राफ एटॉमिक क्लस्टर एक्सपैशन नाम की रूपरेखा से बनाया गया। शोध दल ने सबसे बड़े सामग्री डेटा में गिने जाने वाले डेटा के एक हिस्से से इस मॉडल को प्रशिक्षित किया। प्रकाशित अध्ययन बताता है कि इस मॉडल ने सटीकता और दक्षता के बीच नई संतुलन रेखा बनाई। यह अध्ययन 2026 में सामग्री गणना की एक शोध पत्रिका में प्रकाशित हुआ। इसने दिखाया कि बड़े मॉडल को अच्छी तरह तराशने पर सटीकता बचाते हुए उसे किसी खास कार्य के अनुरूप बनाया जा सकता है।

फाउंडेशन पोर्टेबिलिटी अनुसंधान की पद्धति बदल रहे हैं। पहले हर सामग्री के लिए शुरू से मॉडल बनाया जाता था। अब पहले बड़े मॉडल का उपयोग किया जाता है और केवल जरूरी हिस्से सुधारे जाते हैं। इस तरह थोड़ा बदलकर इस्तेमाल करने की वधिकी सूक्ष्म-समायोजन कहा जाता है। नई मशीन धातु मलिन पर भी कम डेटा से तेजी से प्रतिक्रिया दी जा सकती है।

ऐसे बड़े मॉडलों की नष्टिषक्ष तुलना करने के प्रयास भी साथ-साथ बढ़ रहे हैं। कई फाउंडेशन पोर्टेबिलिटी आने से यह तय करना कठिन हो गया कि कौन सा बेहतर है। इसलिए समान शर्तों पर प्रदर्शन मापने वाला खुला मूल्यांकन मंच बना। कई शोध दलों ने जो बेचमार्क प्लेटफॉर्म बनाए, वही इसका उदाहरण है। ऐसे मंच सटीकता, गति और स्थिरता की साथ-साथ तुलना करते हैं। उपयोगकर्ता अपनी समस्या के अनुरूप मॉडल चुन सकता है।

फिर भी सावधानी की जरूरत है। फाउंडेशन पोर्टेबिलिटी हर स्थिति में अपने आप सही नहीं बैठता। प्रशिक्षण डेटा में दुर्लभ रही मशीन धातु या सतह अभिक्रिया में त्रुटि बिड़ी हो सकती है। इसलिए अच्छा मॉडल जतिना हो, सत्यापन भी उतना ही करना चाहिए। अनजानी संरचना को DFT से फिर गणना कर जांचना चाहिए। यही जांच प्रक्रिया अगले खंड का विषय है।

4. सक्रिय अधिगम (Active Learning) लूप और त्रुटि एवं अनिश्चितता मूल्यांकन

मॉडल कतिना भी अच्छा हो, न सीखी गई स्थिति में गलत हो सकता है। समस्या तब होती है जब मॉडल गलत होते हुए भी आत्मविश्वास से उत्तर देता है। तब मनुष्य के लिए त्रुटि पहचानना कठिन हो जाता है। यह खंड मॉडल को अपने अज्ञान के क्षण स्वयं बताने की वधि पर चर्चा करता है।

यह वधिसक्रिय अधिगम (Active Learning) है। सक्रिय अधिगम एक चक्रीय प्रक्रिया है जिसमें मॉडल उन संरचनाओं को चुनता है जिन पर उसे भरोसा नहीं होता और उन्हें फिर सटीक रूप से गणना करता है। यह चक्र कैसे चलता है और भरोसा न होने को संख्या में कैसे मापा जाता है, इसे देखते हैं। यह भी देखते हैं कि रॉकेट सामग्री जैसे चरम और अनजाने वातावरण में यह प्रक्रिया सुरक्षा-व्यवस्था क्यों है।

अन्तर्वेशन और बहर्वेशन को जीवन के उदाहरण से समझते हैं। पछिले कई वर्षों का तापमान पता हो तो आज का तापमान अनुमानित किया जाता है। पहले से अनुभव की गई सीमा के भीतर अनुमान लगाना अन्तर्वेशन है। लेकिन यदि पहले कभी न आई लू आ जाए तो अनुमान चूक जाता है। अनुभूत सीमा में जाना बहर्वेशन है। मॉडल भी इसी तरह अनुभव की गई सीमा के भीतर ठीक बैठता है और बाहर डगमगाता है।

मॉडल जिस जगह सुरक्षिति रूप से भविष्यवाणी करता है, वह प्रशिक्षण डेटा के भीतर होती है। इस क्षेत्र को अंतर्वेशन क्षेत्र कहा जाता है। प्रशिक्षण डेटा से घेरि अंदरूनी क्षेत्र में भविष्यवाणी भरोसेमंद होती है। लेकिन उससे बाहर निकलते ही स्थिति अलग हो जाती है। इस बाहरी भाग को बहर्वेशन क्षेत्र कहा जाता है। बहर्वेशन क्षेत्र में मॉडल देखने में सही लेकिन गलत उत्तर दे सकता है।

बहर्वेशन क्षेत्र की त्रुटि खतरनाक होती है। समिलेशन के दौरान परमाणु एक-दूसरे पर चढ़ सकते हैं या संरचना अजीब ढंग से टूट सकती है। यदि ऐसा चुपचाप हो जाए तो पूरे परणाम पर भरोसा नहीं किया जा सकता। रॉकेट का वातावरण हमेशा चरम होता है, इसलिए बहर्वेशन अक्सर होता है। उच्च तापमान, तीव्र टक्कर, ऑक्सीकरण और दरार प्रशिक्षण डेटा में दुर्लभ घटनाएं हैं। इसलिए इन क्षेत्रों को पकड़ने की व्यवस्था आवश्यक है।

सक्रिय अधिगम लूप चार चरणों में घूमता है। पहले छोटे DFT डेटा से मॉडल को प्रशिक्षित किया जाता है। फिर इस मॉडल से परमाणुओं की गति की तेज गणना की जाती है। गणना के दौरान यदि मॉडल को किसी संरचना पर भरोसा नहीं होता, तो उसे चिह्नित किया जाता है। केवल उसी संरचना को चुनकर DFT से फिर सटीक गणना की जाती है। नए परणाम को डेटा में जोड़ा जाता है और मॉडल सुधारा जाता है। इन चरणों को दोहराने से मॉडल धीरे-धीरे अधिक व्यापक स्थितियों सीखता है। यह अनजाने रास्ते पर हर मोड़ पर नक्शा फिर जांचने जैसा है।

इस लूप का मुख्य बटु आत्मविश्वास की कमी को एक संख्या के रूप में मापना है। इस संख्या को अनश्चितता (Uncertainty) कहा जाता है। अनश्चितता को मापने के कई तरीके हैं। अगले उप-अनुभाग में हम प्रमुख तरीकों पर एक नज़र डालेंगे।

4.1 मॉडल के अज्ञान के क्षण को संख्या में मापना (UQ)

अनश्चितता मापने की पहली विधि बहर्वेशन डिग्री का उपयोग करना है। मोमेंट टेंसर पोटेंशियल (Moment Tensor Potential, MTP) नाम का मॉडल यह विधि इस्तेमाल करता है। यह मॉडल मापता है कि मौजूदा परमाणु व्यवस्था प्रशिक्षण डेटा से कितनी अलग है। इस संख्या को बहर्वेशन डिग्री कहा जाता है। बहर्वेशन डिग्री कम हो तो व्यवस्था परिचित होती है और भविष्यवाणी सुरक्षिति होती है। बहर्वेशन डिग्री अधिक हो तो व्यवस्था अनजानी है, इसलिए फिर गणना करनी चाहिए।

दूसरी विधि कई मॉडलों के उत्तरों की तुलना करना है। समान डेटा से थोड़ा-थोड़ा अलग तरह से प्रशिक्षित कई मॉडल बनाए जाते हैं। इस समूह को एंसेबल कहा जाता है। नई संरचना पर इन मॉडलों के उत्तर आपस में मिलते-जुलते हों तो वे सामान्यतः भरोसेमंद होते हैं। उत्तर बहुत अलग हों तो वह संरचना खतरे का संकेत है। हालांकि समान डेटा से सीखे मॉडल अनजाने इनपुट पर साथ-साथ गलत भी हो सकते हैं। इसलिए एंसेबल की सहमत केवल संदर्भ संकेतक है, पूर्ण गारंटी नहीं। यह कई लोगों से वही सवाल पूछने पर उत्तर अलग-अलग आने को कठिनि समस्या मानने जैसा है।

तीसरी विधि मॉडल से स्वयं त्रुटि-सीमा निकलवाना है। हाल के शोध ने इस दिशा में प्रगति की है। एक शोध दल ने साक्ष्य-आधारित डीप लर्निंग नाम की विधि को अंतर-परमाणु पोटेंशियल से जोड़ा। यह विधि भविष्यवाणी मान के साथ यह भी बताती है कि उस मान पर कितना भरोसा किया जा सकता है। अलग-अलग कई मॉडल चलाने की जरूरत नहीं रहती, इसलिए गणना हल्की होती है। यह अध्ययन 2025 में एक शोध पत्रिका में प्रकाशित हुआ।

अनश्चितता को सक्रिय अधिगम से और गहराई से जोड़ने वाले अध्ययन भी सामने आ रहे हैं। एक विधिसमिलेशन को स्वयं अनश्चित स्थानों की ओर जाने देती है। परमाणुओं की गति को उन व्यवस्थाओं की ओर ले जाया जाता है जिन पर मॉडल को भरोसा नहीं होता। तब नए सीखने योग्य ढांचों को जल्दी इकट्ठा किया जा सकता है। यह अनजानी स्थितियों को कुशलता से भरने की विधि है।

यह प्रक्रिया रॉकेट सामग्री अनुसंधान में सुरक्षा बनाए रखने का ढांचा है। चरम वातावरण में अप्रत्याशित व्यवस्थाएं हमेशा सामने आती हैं। अनश्चितता व्यवस्था न हो तो गलत परणाम को सच मानने का खतरा रहता है। अनश्चितता व्यवस्था हो तो खतरनाक क्षण पर गणना रोक दी जाती है और जांच की जाती है। इसी से परणाम पर अधिक भरोसा किया जा सकता है।

अनश्चितता संभालने की विधियां अब भी नई-नई आ रही हैं। हाल में ऐसे अध्ययन भी हैं जो गलत ढंग से डिजाइन किए गए मॉडल तक को संभालते हैं। यदि मॉडल की मूल धारणाएं ही गलत हों तो अनश्चितता भी गलत निकलती है। इस समस्या को उठाने वाला अध्ययन 2025 में एक शोध पत्रिका में प्रकाशित हुआ। इसका अर्थ है कि अनश्चितता मापना उतना ही कठिनि काम है। फिर भी इस दिशा की प्रगति चरम सामग्री गणना की सुरक्षा को सहारा देती है।

इस चक्रीय प्रक्रिया का एक और लाभ डेटा बचाना है। DFT गणना महंगी होती है। इसलिए किसी भी संरचना की अंधाधुंध गणना करने से बहुत बर्बादी होती है। सक्रिय अधिगम केवल उन संरचनाओं को चुनकर गणना करता है जिनसे सीखने का मूल्य अधिक है। समान बजट में अधिक उपयोगी डेटा इकट्ठा होता है। इसी से बेहतर मॉडल जल्दी मिलता है।

इस वधि की तुलना परीक्षा की तैयारी से की जा सकती है। जनि प्रश्नों को जानते हैं उन्हें फरि हल करना समय की बर्बादी है। केवल गलत प्रश्न चुनकर हल करने से कौशल जल्दी बढ़ता है। सक्रिय अधगम भी मॉडल के कमजोर हिस्सों को चुनकर भरता है। यह कम गणना से बड़ा सुधार पाने की वधि है। रॉकेट सामग्री अनुसंधान में गणना बजट हमेशा तंग रहता है। इसलिए यह बचत वास्तविक विकास में बल देती है।

फरि भी अनश्चितता को सही ढंग से मापना अपने-आप में कठिन काम है। कुछ तरीकों में गणना का बोझ बढ़ा होता है, और कुछ तरीकों में सटीकता घट जाती है। यदि मॉडल शुरू से ही गलत बनाया गया हो, तो अनश्चितता भी गलत निकल सकती है। हाल के समय में भी इस समस्या पर शोध जारी है। अनश्चितता का परिमाणीकरण अभी पूरी हो चुकी तकनीक नहीं है, बल्कि विकासशील क्षेत्र है।

5. टेसर गुणन को कम करने वाले ज्यामितीय न्यूरल नेटवर्क: गणनात्मक दक्षता और वक्र की चकिनाई

समतुल्य मॉडल सटीक होते हैं, पर उन पर अधिक गणना का बोझ होता है। इस बोझ का बड़ा कारण वही टेसर गुणन है जिसका ऊपर उल्लेख किया गया। यह खंड बताता है कि टेसर गुणन इतना भारी क्यों है, और इसे घटाने या हटाने के लिए हाल के शोध क्या कर रहे हैं।

यहां एक और महत्वपूर्ण बात वक्र की चकिनाई है। परमाणु गणना का परिणाम ऊर्जा का मानचित्र, यानी पोटेंशियल ऊर्जा सतह होता है। यदि यह सतह ऊबड़-खाबड़ हो, तो बल की गणना उछलती है और समिलेशन टूट जाता है। यह खंड समझाता है कि कैसे त्रिकोणीय गति और चकिनाई दोनों को साथ पकड़ने की कोशिश कैसे करते हैं।

टेसर गुणन दशा वाले मानों को सदिशों के अनुसार मलाने वाली गणितीय क्रिया है। समतुल्य मॉडल इस क्रिया से दशा की जानकारी को सही ढंग से संभालते हैं। समस्या यह है कि दशा की सूक्ष्मता बढ़ाने पर इस क्रिया का बोझ तेजी से बढ़ता है। गणना समय और मेमरी दोनों बढ़ते हैं। बड़े तंत्र या लंबे समय के समिलेशन में यह बोझ दीवार बन जाता है।

टेसर गुणन को थोड़े आसान शब्दों में समझते हैं। दशा वाली जानकारी मलाने समय नियम कठिन होते हैं। दो दशा-मानों को बस जोड़ना या गुणा करना पर्याप्त नहीं है। उन्हें भौतिक नियमों के अनुरूप जोड़ा और मलाया जाना चाहिए। टेसर गुणन यह कठिन जोड़ी बनाना सही ढंग से करता है। पर सटीकता की कीमत पर जोड़ों की संख्या दशा की सूक्ष्मता के साथ तेजी से बढ़ती है। इसलिए सूक्ष्मता थोड़ी भी बढ़ाने पर गणना का बोझ बढ़ जाता है।

इस दीवार को पार करने के लिए कई दशाओं में शोध हो रहा है। एक दशा टेसर गुणन की तेज गणना करने वाले विशेष प्रोग्राम बनाना है। हाल के एक अध्ययन ने इस तरीके से आणविक गतिकी गणना को बहुत तेज किया। यह अध्ययन 2026 में एक शोध पत्रिका में प्रकाशित हुआ। यह रास्ता टेसर गुणन को बनाए रखता है, पर गणना को अनुकूलित करता है।

5.1 टेसर गुणन का बलिकूल उपयोग न करने वाला नया डिजाइन

दूसरी दशा टेसर गुणन का बलिकूल उपयोग न करना है। Geodite नामक अध्ययन ने यही रास्ता चुना। इस अध्ययन का शीर्षक टेसर गुणन के बिना समतुल्य अंतर-परमाणु पोटेंशियल है। यह दशा मलाने वाली भारी क्रिया को दूसरे तरीके से बदलता है। फरि भी यह घूर्णन सममिति को सदिशों के अनुसार बचाए रखता है।

यह तरीका टेसर गुणन की जगह कैसे लेता है, इसे संक्षेप में देखते हैं। भारी जोड़ी बनाने वाली क्रिया के बदले स्थानीय निर्देशांक तंत्र बनाया जाता है। इसका अर्थ है कि हर परमाणु के आसपास संदर्भ दशा का ढांचा तय किया जाता है। इस ढांचे पर जानकारी संभालने से दशा को हल्की गणना से बचाया जा सकता है। सममिति वैसी ही रहती है, पर बोझ घटता है।

इस अध्ययन ने दो उपलब्धियां बताईं। पहली गति है। प्रकाशित सार बताता है कि यह समान सटीकता वाले मॉडलों से तीन से पांच गुना तेज है। दूसरी सटीकता का दायरा है। सामग्री स्थिरता अनुमान, ऊष्मा चालकता, जाली कंपन, और नैनोसेकंड पैमाने की आणविक गतिकी में इसने पहले के मॉडलों के बराबर सटीकता दिखाई। इसका अर्थ है कि गति बहुत बढ़ाते हुए सटीकता बचाई गई। यह अध्ययन सहकर्म समीक्षा से पहले का प्रारंभिक शोध है। इसलिए इसे तय मानक नहीं, बल्कि आशाजनक उम्मीदवार तकनीक माना जाता है।

टेसर गुणन हटाने से केवल गति बेहतर नहीं होती। इससे वक्र की चकिनाई में भी मदद मिलती है। टेसर गुणन में दशा की सूक्ष्मता काटने पर सतह पर छोटे तरंग-जैसे निशान बन सकते हैं। ये तरंग बल की गणना को उछालती हैं। टेसर गुणन का उपयोग न करने वाला डिजाइन ऐसी तरंगों से बचने के लिए बनाया जाता है। बंध बनने और टूटने वाले हिस्सों में भी वक्र चकिना रहता है।

यह चकिनाई रॉकेट सामग्री गणना में महत्वपूर्ण है। उच्च ताप पर परमाणु बहुत हलिते हैं और बंध अक्सर टूटते हैं। यदि वक्र खुरदरा हो, तो ऐसे हिस्सों में बल उछलता है और समिलेशन ढह जाता है। चकिना वक्र चरम स्थितियों में भी गणना को स्थिर रखता है। इसलिए चकिनाई सटीकता जितनी ही महत्वपूर्ण विशेषता है।

इसी लक्ष्य वाले दूसरे अध्ययन भी हैं। एक अध्ययन दशिया की जानकारी को गोलकीय ग्रुडि पर फैलाकर हल्के न्यूरल नेटवर्क से मिलाता है। यह तरीका भी टेसर गुणन से तेज है और अभिव्यक्ति क्षमता बनाए रखता है। कटऑफ दूरी को स्थितिके अनुसार धीरे-धीरे बदलने वाला शोध भी आया है। ये सभी अध्ययन अभी प्रारंभिक शोध चरण में हैं। कई दल एक ही लक्ष्य की ओर अलग-अलग रास्ते आजमा रहे हैं।

चकिनाई इतनी महत्वपूर्ण क्यों है, इसे थोड़ा और देखते हैं। बल ऊर्जा सतह की ढाल से आता है। सतह चकिनी हो तो ढाल भी चकिनी तरह बदलती है। यदि सतह पर छोटी लहरें हों, तो ढाल अचानक उछलती है। उछलता बल परमाणुओं को गलत दशिया में धकेलता है और समिलेशन खराब करता है। इसलिए सटीक ऊर्जा जतिनी जरूरी है, उतनी ही चकिनी सतह भी जरूरी है। बाहर देखने वाली तरुटि छोटी हो, फरि भी सतह खुरदरी हो तो लंबी गणना में समस्या बढ़ती है।

इस प्रवाह का अर्थ साफ है। समतुल्य मॉडल की सटीकता बचाते हुए गणना का बोझ घटाना लक्ष्य है। गणना हल्की हो तो बड़े तंत्र को अधिक समय तक देखा जा सकता है। यह रॉकेट पुरजों जैसी बड़ी सामग्री को लंबे समय तक देखने में सीधे मदद करता है। फरि भी अभी प्रमाण जमा हो रहे हैं, इसलिए सत्यापन को साथ देखना होगा।

6. इलेक्ट्रॉन घनत्व मॉडलिंग और हल्के उपकरण संचालन के लिए संरचनात्मक प्रूनगि

बड़े मॉडल सटीक होते हैं, पर उनका बोझ अधिक होता है और वे बड़े गणना उपकरण मांगते हैं। यह खंड बड़े मॉडल को हल्का बनाते हुए भौतिक नियम बचाने के तरीकों को देखता है। यहां दो विचार देखे जाते हैं। पहला कम महत्वपूर्ण गणना मार्गों को काटने की प्रूनगि है। दूसरा इलेक्ट्रॉनों के वितरण के संकेतों को मॉडल में डालने का तरीका है। इस खंड का मुख्य विचार है कि मॉडल को हल्का बनाया जाए, पर मनमाने ढंग से न काटा जाए। परमाणु गणना में कई भौतिक गुण बचाने होते हैं। ये सममिति, बल की दशिया, और ऊर्जा तथा बल की संगति हैं। यह खंड बताता है कि इन गुणों को बचाते हुए मॉडल को कैसे घटाया जाए।

प्रूनगि (Pruning) न्यूरल नेटवर्क में कम महत्वपूर्ण मार्गों को घटाने का तरीका है। न्यूरल नेटवर्क में जानकारी ढोने वाले मार्गों को चैनल कहा जाता है। सभी चैनल समान रूप से महत्वपूर्ण नहीं होते। कम उपयोग होने वाले चैनल घटाने से गणना हल्की हो जाती है। यह वैसा ही है जैसे बैग से कम काम आने वाला सामान निकाल देने पर बैग हल्का हो जाता है।

समस्या यह है कि कोई भी चैनल काट देने से भौतिक नियम डगमगा जाते हैं। समतुल्य मॉडल में चैनल दशिया से जुड़े होते हैं। यदि एक ही दशिया-समूह के चैनलों को बखिरकर काटा जाए, तो बल की दशिया अजीब हो जाती है। यहां एक भ्रम ठीक कर देना चाहिए। यदि मॉडल पहले ऊर्जा देता है और बल उसकी ढाल से निकाला जाता है, तो चैनल घटाने पर भी ऊर्जा और बल का संबंध अपने-आप बना रहता है। प्रूनगि सीधे इस संबंध को नहीं तोड़ती। पर दशिया संभालने की सूक्ष्मता और अनुमान की सटीकता बगिड़ सकती है। इसलिए प्रूनगि सावधानी से करनी चाहिए।

6.1 भौतिक संगति बचाने वाली संरचनात्मक प्रूनगि

संरचनात्मक प्रूनगि (Structured Pruning) चैनलों को दशिया-समूह की इकाई में काटने का तरीका है। उन्हें एक-एक करके बखिरकर नहीं काटा जाता, बल्कि पूरे समूह के रूप में संभाला जाता है। तभी दशिया का संतुलन नहीं टूटता। स्केलर चैनल और वेक्टर चैनल का अनुपात भी बचाया जाता है। स्केलर दशिया-रहति मान है और वेक्टर दशिया वाला मान है। इस अनुपात को बचाने पर ही सममिति और बल की दशिया सही रहती है।

समूह के रूप में काटना क्यों जरूरी है, इसे चित्र की तरह समझते हैं। कम्पास की सुई को पूर्व, पश्चिम, उत्तर और दक्षिण को साथ दिखाना होता है, तभी उसका अर्थ बनता है। यदि केवल उत्तर-दक्षिण छोड़कर पूर्व-पश्चिम काट दिए जाएं, तो दशिया बगिड़ जाती है। समतुल्य मॉडल के दशिया चैनल भी ऐसे ही हैं। एक समूह के भीतर के मान साथ हों, तभी दशिया सही दिखती है। उनमें से कुछ को बखिरकर काटने पर बल की दशिया चूक जाती है। इसलिए काटते समय समूह को ही इकाई बनाना चाहिए।

कौन सा चैनल काटना है, यह महत्व से तय होता है। हर चैनल परणाम में कतिना योगदान देता है, इसे मापा जाता है। छोटे योगदान वाले चैनल पहले घटाए जाते हैं। इस समय भी दशिया-समूह को इकाई बनाया जाता है। एक समूह के भीतर के मानों को साथ देखकर नरिणय लिया जाता है। ऐसा करने से जानकारी ढोने वाला ढांचा बचता है और अनावश्यक हिस्सा ही घटता है।

हाल में एक शोध दल ने यह तरीका फाउंडेशन पोर्टेशियल पर लागू किया। इस अध्ययन का शीर्षक संरचनात्मक प्रूनगि से बना घना SO3 समतुल्य परमाणु मॉडल है। प्रकाशति सार बताता है कि पैरामीटर कई गुना घटाए गए। पैरामीटर मॉडल द्वारा सीखे जाने वाले मानों की संख्या है। पूर्व-प्रशिक्षण में लगने वाली गणना भी कई गुना घटी। फरि भी फाइन-ट्यूनिंग के बाद ऊर्जा और बल की तरुटि उलटे कम हुई, ऐसा सार में बताया गया। यह 2026 में प्रकाशति प्रारंभिक शोध है। यह सहकर्मि समीक्षा से नहीं गुजरा, इसलिए इसे तय परणाम नहीं माना जाता।

इस अध्ययन का लक्ष्य हल्के उपकरणों पर भी सटीक गणना चलाना है। बड़े मॉडल आम तौर पर कई उच्च-प्रदर्शन उपकरण मांगते हैं। यदि मॉडल को ठीक से घटाया जाए, तो छोटे उपकरणों पर भी मलित-जुलती गणना की जा सकती है। शोध की दहलीज कम हो तो अधिक शोधकर्ता सामग्री गणना में भाग ले सकते हैं। फरि भी कौन से उपकरण तक यह संभव है, इसकी आगे और पुष्टि करनी होगी।

रॉकेट सामग्री शोध में भी यह दशा अर्थ रखती है। चरम वातावरण का लंबे समय तक समिलेशन करने के लिए गणना बार-बार दोहरानी पड़ती है। मॉडल हल्का हो तो उसी उपकरण से अधिक प्रयोग चलाए जा सकते हैं। इससे उम्मीदवार सामग्री को जल्दी छांटने में मदद मिलती है। सटीकता बचाते हुए गतिमान मुख्य बात है।

पूरनगि जैसे लक्ष्य वाला एक और तरीका भी है। यह बड़े मॉडल का ज्ञान छोटे मॉडल में ले जाने का तरीका है। इसे ज्ञान आसवन कहा जाता है। अच्छी तरह सीखा हुआ बड़ा मॉडल छोटे मॉडल का शिक्षक बनता है। छोटा मॉडल शिक्षक के उत्तरों की नकल करते हुए सीखता है। तब छोटा आकार होते हुए भी वह बड़े मॉडल के पास की क्षमता दिखाता है। पूरनगि और ज्ञान आसवन दोनों बड़े मॉडल को हल्के रूप में ले जाने के रास्ते हैं।

ध्यान रखने की बात यह है कि भौतिक सत्यापन छोड़ा नहीं जाना चाहिए। पूरनगि से मिला हल्का मॉडल भी अवश्य जांचना चाहिए। ऊर्जा और बल की संगति, बल की दशा, सममिति, और अनश्चितता संकेत को साथ जांचा जाता है। ये गुण बचे तभी हल्के मॉडल पर भरोसा किया जा सकता है। केवल तेज मॉडल चरम गणना में जोखिम भरा है।

6.2 इलेक्ट्रॉन घनत्व संकेत जोड़ने का तरीका

मॉडल घटाने पर अभिव्यक्ति क्षमता भी साथ घटने का खतरा रहता है। इस नुकसान को भरने का एक विचार इलेक्ट्रॉन घनत्व डालना है। इलेक्ट्रॉन घनत्व वह मानचित्र है जो बताता है कि इलेक्ट्रॉन अंतरिक्ष में कितने फैले हैं। मूल रूप से यह DFT द्वारा संभाली जाने वाली बुनियादी भौतिक राशि है। यह विचार इस संकेत को सीधे मॉडल में डालकर कम हुई अभिव्यक्ति क्षमता को सहारा देना चाहता है। अलग-अलग जानकारी को इस तरह मिलाने के तरीके को हाइब्रिड कहा जाता है।

यहां बंध के प्रकारों को थोड़ी देर देखते हैं। आयनिक बंध इलेक्ट्रॉन देने और लेने से बनने वाला बंध है। नमक इसी बंध से बना है। धात्विक बंध वह बंध है जिसमें इलेक्ट्रॉन कई परमाणुओं के बीच स्वतंत्र रूप से बहते हैं। इसी बंध के कारण लोहा बजिली अच्छी तरह चलाता है। सहसंयोजक बंध वह बंध है जिसमें इलेक्ट्रॉन आपस में साझा किए जाते हैं। इस तरह हर बंध में इलेक्ट्रॉन का आकार अलग होता है।

इलेक्ट्रॉन घनत्व की जानकारी बंध के प्रकार अलग करने में मदद करती है। सामग्री के भीतर कई प्रकार के बंध होते हैं। आयनिक बंध, धात्विक बंध और सहसंयोजक बंध एक-दूसरे से अलग हैं। इलेक्ट्रॉन कहां और कितने जमा हैं, यह देखने से यह अंतर समझा जा सकता है। इस संकेत को मॉडल में डालने से बंध का चरित्र बेहतर पकड़ा जा सकता है।

यह तरीका दूर तक फैलने वाले प्रभावों को फरि से पकड़ने में भी उपयोगी हो सकता है। इलेक्ट्रॉन का प्रभाव पास के पड़ोसियों से आगे भी जाता है। मॉडल को हल्का घटाने पर ऐसे दूर के प्रभाव छूटना आसान है। उम्मीद है कि इलेक्ट्रॉन घनत्व संकेतों का अच्छा उपयोग करने से इन दूर के प्रभावों को कुछ हद तक समेटा जा सकता है। फरि भी इलेक्ट्रॉन घनत्व डाल देने से दूरस्थ वैद्युतस्थैतिक बल और वक्रपण बल अपने-आप हल नहीं होते। कौन सा घनत्व कसि तरीके से डाला जाए और उसका सत्यापन कैसे हो, इस पर अभी शोध जमा हो रहा है। इसलिये इस दशा को तय समाधान नहीं, बल्कि प्रस्ताव के रूप में समझना ठीक है।

रॉकेट सामग्री में बंधों के प्रकार अक्सर जटिल रूप से मिले होते हैं। धातु और सरिमिक साथ उपयोग होते हैं और ऑक्साइड परत बनती है। ऐसी सामग्री संभालने के लिए बंध के चरित्र को सही ढंग से अलग करना जरूरी है। इलेक्ट्रॉन घनत्व डालने का तरीका इस अंतर को समझने में मदद कर सकता है और चरम सामग्री गणना को सहारा दे सकता है।

बड़े पैमाने की गणना की संभावना भी साथ खुलती है। हाल में एक शोध दल ने कई तत्वों को मिलाकर बनी मशिर धातु का दस लाख परमाणुओं के पैमाने पर समिलेशन किया। उन्होंने कई घटकों को संभालने वाले अंतर-परमाणु पोटेशियल का उपयोग कर बड़े तंत्र को संभाला। यह 2026 में प्रकाशित प्रारंभिक शोध है। उच्च-एनर्जी मशिर धातु रॉकेट के लिए उच्च ताप सामग्री का महत्वपूर्ण उम्मीदवार है। जितना बड़ा तंत्र संभाला जाता है, उतना ही वास्तविक पुरजे के करीब व्यवहार देखा जा सकता है।

इस खंड की बात को रॉकेट विकास की वास्तविकता से जोड़कर देखते हैं। कई रॉकेट कंपनियों और शोध संस्थानों के पास पर्याप्त गणना संसाधन नहीं होते। यदि बड़े मॉडल केवल कई उपकरणों पर चल सकें, तो दहलीज ऊंची हो जाती है। मॉडल हल्का हो तो अधिक दल परमाणु गणना शुरू कर सकते हैं। वे उम्मीदवार सामग्री को जल्दी छांटकर वास्तविक परीक्षण के लक्ष्य घटाते हैं। गणना और प्रयोग के बीच चलने वाला यह चक्र विकास अवधि घटाता है।

इस खंड के दोनों वचिर एक ही लक्ष्य की ओर जाते हैं। सटीकता बचाते हुए गणना को हल्का करना। परन्तु अनावश्यक हिसा घटाती है और इलेक्ट्रॉन घनत्व संकेत कम अभिव्यक्ति क्षमता को भरते हैं। दोनों को साथ उपयोग करने पर छोटे उपकरणों से भी उपयोगी मॉडल बनाया जा सकता है। यह दशा अभी विकास में है और सत्यापन जमा होने का चरण है।

सारांश

यह अध्याय कंप्यूटर से परमाणुओं को संभालने के नियमों की कहानी था। यही नियम अंतर-परमाणु पोटेंशियल है। बहुत पहले से वैज्ञानिकों को सटीक तरीके और तेज तरीके में से एक चुनना पड़ता था। DFT सटीक है, लेकिन धीमा है। अनुभवजन्य बल क्षेत्र तेज है, लेकिन असटीक है। मशीन लर्निंग अंतर-परमाणु पोटेंशियल इन दोनों के बीच की दीवार गिराने का उपकरण है।

इस यात्रा को संक्षेप में फिर से देखते हैं। शुरुआत में मनुष्य ने परमाणु के आसपास की स्थितियों को संख्याओं में बदला। फिर मॉडल ने उन संख्याओं को खुद सीखा। उसके बाद परमाणुओं को एक-दूसरे से जानकारी लेने-देने दी गई। अब व्यापक सामग्री को पहले से सीख चुके बड़े मॉडल भी आ गए हैं। हर कदम पर मनुष्य का हाथ कम हुआ और डेटा की शक्ति बढ़ी। यही MLIP विकास की मुख्य धारा है।

प्रारंभिक MLIP ने परमाणु के आसपास के आकार को मनुष्य द्वारा बनाई गई संख्याओं में बदला। इस वर्णनकर्ता पद्धति में BPNN, गॉसियन अप्रॉक्सिमेशन पोटेंशियल और DeePMD थे। इनसे बड़ी उपलब्धियाँ मिलीं, लेकिन सीमाएँ भी सामने आईं। तत्वों की संख्या बढ़ने पर गणना का बोझ बढ़ गया और लंबी दूरी के प्रभावों को समेटना कठिन था।

अगली पीढ़ी समपरिवर्ती ग्राफ न्यूट्रल नेटवर्क है। यह वर्धिपरमाणुओं को बटुओं के रूप में और पड़ोसी संबंधों को रेखाओं के रूप में देखती है और जानकारी का आदान-प्रदान करती है। घूर्णन और स्थानांतरण के अनुरूप सममतिको मॉडल में शामिल करके डेटा की बचत की गई। SchNet से NequIP और MACE तक आगे बढ़ते हुए, सटीकता और दक्षता दोनों में वृद्धि हुई। CHGNet, MatterSim और GRACE जैसे फाउंडेशन पोटेंशियल व्यापक सामग्रियों को पहले से सीखे हुए बड़े मॉडल के रूप में स्थापित हुए।

सटीक मॉडल में भी कमजोरी होती है। जसि अजनबी स्थितियों को उसने नहीं सीखा, उसमें वह गलत हो सकता है। इसलिए सक्रिय अधिगम और अनिश्चितता परमाणीकरण की जरूरत होती है, जिनसे मॉडल खुद बता सके कि वह कब नहीं जानता। रॉकेट का वातावरण हमेशा चरम होता है और उसमें अनजानी घटनाएँ बहुत होती हैं। यह सुरक्षा उपाय होना चाहिए, तभी चरम सामग्री की गणना पर भरोसा किया जा सकता है।

हाल की शोध गति, चिकनाई और हल्केपन को साथ-साथ पाने की कोशिश करती है। टेसर गुणन को घटाकर या हटाकर गणना को तेज किया जाता है। संरचनात्मक छंटाई से मॉडल छोटा किया जाता है और इलेक्ट्रॉन घनत्व के संकेतों से अभिव्यक्ति क्षमता पूरी की जाती है। इन तरीकों में से कई अभी सहकर्म समीक्षा से नहीं गुजरे शुरुआती अध्ययन हैं। वे आशाजनक हैं, लेकिन उन्हें तय मानक मानना अभी जल्दी है।

इस अध्याय को पढ़ने वाले सामान्य पाठक के लिए याद रखने योग्य बातों को पांच बटुओं में समेटा जा सकता है। परमाणु गणना में सटीकता और गति के बीच लंबे समय से अदला-बदली रही है। मशीन लर्निंग ने इस अदला-बदली को कम करने वाला पुल बनाया। सममतिकी रक्षा करना अच्छे मॉडल का केंद्र है। कोई भी अच्छा मॉडल हो, उसे अपने न जानने के क्षण को खुद बताना चाहिए, तभी वह सुरक्षित है। और नई तकनीक का बड़ा हिसा अभी जांच में चल रही शुरुआती शोध है।

ये पांच बातें आगे आने वाले अध्यायों पर भी ज्यों की त्यों लागू होती हैं। क्रिस्टल संरचना बनाना, मशीन धातु डिजाइन करना और सरिमिक को संभालना, ये सब इसी परमाणु गणना पर टिके हैं। सटीक परमाणु गणना न हो तो उसके ऊपर का डिजाइन भी डगमगा जाता है। इसलिए इस अध्याय की सामग्री पूरी पुस्तक की आधारशिला है।

एक संतुलित दृष्टि भी छोड़नी चाहिए। MLIP शक्तिशाली उपकरण है, लेकिन सर्वशक्तिमान नहीं है। प्रशिक्षण डेटा की गुणवत्ता खराब हो तो पूर्वानुमान भी खराब होता है। सत्यापन में लापरवाही हो तो देखने में ठीक लगने वाली त्रुटि धोखा दे सकती है। इसलिए यह तकनीक मनुष्य के निर्णय और प्रयोग की जगह नहीं लेती। गणना उम्मीदवारों को सीमित करती है और अंतिम पुष्टि प्रयोग करता है। यही सहयोग नई सामग्री को सुरक्षित रूप से दुनिया में लाने का रास्ता है।

इन सभी तकनीकों का लक्ष्य एक ही जगह आकर मिलता है। वह है रॉकेट सामग्री और नई सामग्री को कंप्यूटर के भीतर बड़े पैमाने पर और लंबे समय तक, सटीक और सुरक्षित ढंग से जांचना। वास्तविक प्रोजेक्ट बनाने से पहले उम्मीदवारों को छंट लिया जाए तो धन और समय बचता है। अगले अध्याय से हम इस तरह तैयार की गई परमाणु गणना के आधार पर नई सामग्री सीधे बनाने की कहानी की ओर बढ़ेंगे।

संबंधित आधार-सामग्री

Kohn, W., & Sham, L. J. (1965). Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical Review*, 140, A1133-A1138. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.140.A1133>

Behler, J., & Parrinello, M. (2007). Generalized neural-network representation of high-dimensional potential-energy surfaces. *Physical Review Letters*, 98, 146401. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.98.146401>

- Bartók, A. P., Payne, M. C., Kondor, R., & Csányi, G. (2010). Gaussian approximation potentials: The accuracy of quantum mechanics, without the electrons. *Physical Review Letters*, 104, 136403. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.104.136403>
- Bartók, A. P., Kondor, R., & Csányi, G. (2013). On representing chemical environments. *Physical Review B*, 87, 184115. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.87.184115>
- Zhang, L., Han, J., Wang, H., Car, R., & E, W. (2018). Deep potential molecular dynamics: A scalable model with the accuracy of quantum mechanics. *Physical Review Letters*, 120, 143001. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.120.143001>
- Schütt, K. T., Sauceda, H. E., Kindermans, P. J., Tkatchenko, A., & Müller, K. R. (2018). SchNet: A deep learning architecture for molecules and materials. *Journal of Chemical Physics*, 148, 241722. <https://doi.org/10.1063/1.5019779>
- Gasteiger, J., Groß, J., & Günnemann, S. (2020). Directional message passing for molecular graphs (DimeNet). *International Conference on Learning Representations*. <https://arxiv.org/abs/2003.03123>
- Batzner, S., Musaelian, A., Sun, L., Geiger, M., Mailoa, J. P., Kornbluth, M., Molinari, N., Smidt, T. E., & Kozinsky, B. (2022). E(3)-equivariant graph neural networks for data-efficient and accurate interatomic potentials (NequIP). *Nature Communications*, 13, 2453. <https://doi.org/10.1038/s41467-022-29939-5>
- Batatia, I., Kovács, D. P., Simm, G. N. C., Ortner, C., & Csányi, G. (2022). MACE: Higher order equivariant message passing neural networks for fast and accurate force fields. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 35, 11423-11436. <https://arxiv.org/abs/2206.07697>
- Batatia, I., Batzner, S., Kovács, D. P., Musaelian, A., Simm, G. N. C., Drautz, R., Ortner, C., Kozinsky, B., & Csányi, G. (2025). The design space of E(3)-equivariant atom-centred interatomic potentials. *Nature Machine Intelligence*, 7, 56-67. <https://doi.org/10.1038/s42256-024-00956-x>
- Deng, B., Zhong, P., Jun, K., Riebesell, J., Han, K., Bartel, C. J., & Ceder, G. (2023). CHGNet as a pretrained universal neural network potential for charge-informed atomistic modelling. *Nature Machine Intelligence*, 5, 1031-1041. <https://doi.org/10.1038/s42256-023-00716-3>
- Yang, H., Hu, C., Zhou, Y., Liu, X., Shi, Y., Li, J., et al. (2024). MatterSim: A deep learning atomistic model across elements, temperatures and pressures. *arXiv:2405.04967*. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2405.04967>
- Deringer, V. L., Caro, M. A., & Csányi, G. (2021). Machine learning interatomic potentials as emerging tools for materials science. *Advanced Materials*, 33, 1902765. <https://doi.org/10.1002/adma.201902765>
- Shapeev, A. V. (2016). Moment tensor potentials: A class of systematically improvable interatomic potentials. *Multiscale Modeling and Simulation*, 14, 1153-1173. <https://doi.org/10.1137/15M1054183>
- Podryabinkin, E. V., & Shapeev, A. V. (2017). Active learning of linearly parametrized interatomic potentials. *Computational Materials Science*, 140, 171-180. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2017.08.031>
- Lysogorskiy, Y., Bochkarev, A., & Drautz, R. (2026). Graph atomic cluster expansion for foundational machine learning interatomic potentials (GRACE). *npj Computational Materials*, 12, 114. <https://doi.org/10.1038/s41524-026-01979-1>
- Reschützegg, T., Aykent, S., Perin, G. J., Nunes, B. H., Cipcigan, F., Ferreira, R. N. B., Steiner, M., & Thiemann, F. L. (2026). Equivariant interatomic potentials without tensor products (Geodite). *arXiv:2601.15492*. प्रीप्रिट, अभी सहकर्म-समीक्षित नहीं. <https://arxiv.org/abs/2601.15492>
- Wang, C., Hu, S., Tan, G., & Jia, W. (2026). Compact SO(3) equivariant atomistic foundation models via structural pruning. *arXiv:2605.08885*. प्रीप्रिट, अभी सहकर्म-समीक्षित नहीं. <https://arxiv.org/abs/2605.08885>
- Tan, C. W., Descoteaux, M. L., Kotak, M., de Miranda Nascimento, G., Kavanagh, S. R., Zichi, L., Wang, M., Saluja, A., Hu, Y. R., Smidt, T. E., Johansson, A., Witt, W. C., Kozinsky, B., & Musaelian, A. (2026). High-performance training and inference for deep equivariant interatomic potentials. *Digital Discovery*, 5, 1558-1567. <https://doi.org/10.1039/d5dd00423c>
- Miklaucic, N., Wei, L., Dong, R., Fu, N., Ome, S. S., Li, Q., Dey, S., Fung, V., & Hu, J. (2025). Facet: Highly efficient E(3)-equivariant networks for interatomic potentials. *arXiv:2509.08418*. प्रीप्रिट, अभी सहकर्म-समीक्षित नहीं. <https://arxiv.org/abs/2509.08418>
- Han, K., Cong, H., Deng, B., & Barati Farimani, A. (2026). Smooth dynamic cutoffs for machine learning interatomic potentials. *arXiv:2601.21147*. प्रीप्रिट, अभी सहकर्म-समीक्षित नहीं. <https://arxiv.org/abs/2601.21147>
- Xu, H., Cui, T., Tang, C., Ma, J., Zhou, D., Li, Y., Gao, X., Gong, X., Ouyang, W., Zhang, S., & Su, M. (2025). Evidential deep learning for interatomic potentials. *Nature Communications*, 16, 937. <https://doi.org/10.1038/s41467-025-67663-y>

- Kulichenko, M., Barros, K., Lubbers, N., Li, Y. W., Messerly, R., Tretiak, S., Smith, J. S., & Nebgen, B. (2023). Uncertainty-driven dynamics for active learning of interatomic potentials. *Nature Computational Science*, 3, 230-239. <https://doi.org/10.1038/s43588-023-00406-5>
- Perez, D., Subramanyam, A. P. A., Maliyov, I., & Swinburne, T. D. (2025). Uncertainty quantification for misspecified machine learned interatomic potentials. *npj Computational Materials*, 11, 263. <https://doi.org/10.1038/s41524-025-01758-4>
- Yang, Z., Wang, X., Li, Y., Lv, Q., Chen, C. Y.-C., & Shen, L. (2025). Efficient equivariant model for machine learning interatomic potentials. *npj Computational Materials*, 11, 49. <https://doi.org/10.1038/s41524-025-01535-3>
- Shuang, F., Ying, P., Liu, K., Wei, Z., Liu, F., Fan, Z., Jiang, M., & Dey, P. (2026). Benchmarking chemically scalable machine-learning interatomic potentials for large-scale simulations of multicomponent alloys. *arXiv:2604.01642*.
प्रीप्रिंट, अभी सहकर्मी-समीक्षा नहीं. <https://arxiv.org/abs/2604.01642>
- Arnold, J. E., Woodgate, C. D., Hafizi, R., Harris, M. J., Mottura, A., García Fuentes, G., & Gurrutxaga-Lerma, B. (2026). Thermodynamics and phase stability of the AlTiCrMoW high-entropy alloy simulated using machine-learned interatomic potentials. *Physical Review Materials*, 10, 073605. <https://doi.org/10.1103/5tz1-zg9z>
- Chiang, Y., Kreiman, T., Zhang, C., Kuner, M. C., Weaver, E. J., Amin, I., Park, H., Lim, Y., Kim, J., Chrzan, D., Walsh, A., Blau, S. M., & Asta, M. (2025). MLIP Arena: Advancing fairness and transparency in machine learning interatomic potentials via an open, accessible benchmark platform. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 38. <https://arxiv.org/abs/2509.20630>

अध्याय 2. जनरेटिव AI और डिफ्यूजन मॉडल (Diffusion Models) पर आधारित क्रिस्टल संरचना पूर्वानुमान (CSP) और सामग्री का प्रतिलोम डिज़ाइन

आरंभ में

जब हम कोई वस्तु बनाते हैं, तो आम तौर पर पहले सामग्री चुनते हैं। मान लें कि हमें एक बर्तन बनाना है। पहले लोहे या एल्युमिनियम को चुनते हैं। फिर मोटाई और आकार तय करते हैं। अंत में उसे आग पर रखकर देखते हैं कि उसमें कौन-से गुण दिखाई देते हैं।

नई सामग्री खोजने का पुराना तरीका भी इससे मेलता-जुलता है। पहले पहले से ज्ञात किसी पदार्थ को चुना जाता है। फिर कंप्यूटर या प्रयोग से उसके गुण मापे जाते हैं। अच्छा हो तो रखा जाता है, खराब हो तो छोड़ दिया जाता है। यह तरीका भरोसेमंद है। लेकिन हर चीज़ को एक-एक कर जांचना पड़ता है, इसलिए इसकी गति धीमी है।

समस्या यह है कि पदार्थों की दुनिया बहुत बड़ी है। तत्वों के प्रकार बहुत हैं। परमाणुओं की संख्या भी बदली जा सकती है। परमाणु कहाँ रखे जाते हैं और जालक का आकार कितना है, यह भी बदला जा सकता है। इन सबको मिलाकर संभावनाओं की संख्या आसमान के तारों जैसी बढ़ जाती है। मनुष्य यदि एक-एक कर परीक्षण करे, तो इसका अंत देखना लगभग असंभव है।

यह अध्याय सोच की दिशा को उलटने की कहानी है। इसमें सामग्री को पहले नहीं चुना जाता। पहले इच्छित गुण तय किए जाते हैं। यह तय किया जाता है कि बिजली अच्छी तरह चलाने वाला ठोस इलेक्ट्रोलाइट चाहिए। यह तय किया जाता है कि गिरम रॉकेट नोज़ल में टकिने वाला उत्प्रेरक चाहिए। तब कृत्रिम बुद्धिमत्ता उस गुण के अनुरूप क्रिस्टल संरचना स्वयं बना देती है। इस तरीके को सामग्री प्रतिलोम डिज़ाइन (Inverse Design) कहते हैं।

प्रतिलोम डिज़ाइन क्यों महत्वपूर्ण है, इसे खाना पकाने से समझा जा सकता है। पुराना तरीका फ्रिज में रखी सामग्री से भोजन बनाने जैसा है। सामग्री तय है, इसलिए बनने वाला भोजन भी तय हो जाता है। प्रतिलोम डिज़ाइन पहले यह तय करने जैसा है कि कौन-सा भोजन खाना है। फिर उस भोजन के लिए जरूरी सामग्री उल्टे क्रम में खोजी जाती है। जो सामग्री फ्रिज में नहीं है, उसे भी नया लाया जाता है। ऐसा करने पर हम फ्रिज की सामग्री में बंधे नहीं रहते और कल्पना किए हुए भोजन के करीब पहुँचते हैं।

यहाँ मुख्य पात्र जनरेटिव कृत्रिम बुद्धिमत्ता (Generative AI) है। चित्र बनाने वाली कृत्रिम बुद्धिमत्ता को याद करें तो बात आसान हो जाती है। वह धुंधले बटुओं के समूह से शुरू करती है। शोर को थोड़ा-थोड़ा हटाती है। अंत में मनुष्य का चेहरा या दृश्य उभर आता है। सामग्री प्रतिलोम डिज़ाइन का सिद्धांत भी यही है। यह धुंधले परमाणु समूह से शुरू करता है। शोर हटाते हुए नियमित क्रिस्टल बनाता है। शोर हटाने की इस पद्धति को डिफ्यूजन मॉडल (Diffusion Model) कहा जाता है।

इस अध्याय में हम एक-एक कर देखते हैं कि डिफ्यूजन मॉडल क्रिस्टल कैसे बनाता है। हम देखते हैं कि सिममेट्री नियमों को कैसे नभिया जाता है। हम गणना तेज करने वाली फ्लो मैचिंग (Flow Matching) तकनीक देखते हैं। हम खाली जगह भरने वाले इनपेंटिंग और मरिज परमाणु जैसे नए विचार भी देखते हैं। हम सुदृढीकरण अधिगम से अच्छी संरचना की ओर ले जाने का तरीका भी देखते हैं। अंत में बैटरी के ठोस इलेक्ट्रोलाइट, उत्प्रेरक और अंतरिक्ष-वैमिनन मशीन धातुओं में इस तरीके के वास्तविक उपयोगों को देखते हैं। रॉकेट और नई सामग्री को इस तकनीक की जरूरत क्यों है, इसे एक-एक कर समझते हैं।

1. सामग्री पहले चुनने के तरीके से गुण पहले तय करने वाले प्रतिलोम डिज़ाइन तक

इस खंड में हम देखते हैं कि सामग्री खोज की दिशा कैसे बदली है। पुराना तरीका पहले सामग्री चुनता है और बाद में गुण जांचता है। नया तरीका पहले गुण तय करता है और बाद में सामग्री बनाता है। यह बदलाव क्यों जरूरी है और रॉकेट तथा नई सामग्री के लिए इसका क्या अर्थ है, इसे देखते हैं।

पुरानी पद्धति को फॉरवर्ड प्रॉपर्टी स्क्रीनिंग (Forward Property Screening) कहा जाता है। फॉरवर्ड का अर्थ है सामग्री से गुणों की दिशा में आगे बढ़ना। स्क्रीनिंग का कार्य कई उम्मीदवारों में से उपयुक्त को छांटना है। शोधकर्ता पहले से ज्ञात क्रिस्टल डेटाबेस से उम्मीदवारों को निकालते हैं। इसके दो प्रमुख भंडार हैं: मटेरियल्स प्रोजेक्ट (Materials Project) और इनऑर्गेनिक क्रिस्टल स्ट्रक्चर डेटाबेस (ICSD)।

उम्मीदवारों को निकालने के बाद उनके गुणों की गणना की जाती है। इस समय घनत्व फलनक सिद्धांत (Density Functional Theory, DFT) नामक भौतिक गणना का उपयोग किया जाता है। यह गणना परमाणुओं के भीतर इलेक्ट्रॉनों की गति को हल करके ऊर्जा और गुणों को

प्राप्त करती है। इसके परिणाम सटीक होते हैं। लेकिन गणना की मात्रा बहुत अधिक होती है। कंप्यूटर को लंबे समय तक चलना पड़ता है। इसलिए एक दिन में जांचे जा सकने वाले उम्मीदवारों की संख्या कम होती है।

इस तरीके की मूल सीमा यह है कि यह संकरे घेरे में बंद है। जांच केवल पहले से ज्ञात पदार्थों पर होती है। जो नई सामग्री डेटाबेस में नहीं है, वह शुरू से ही उम्मीदवार नहीं बनती। यदि कोई अज्ञात पदार्थ बहुत अच्छे गुण रखता हो, तब भी वह हमारी पहुँच से बाहर रहता है। इस तरह पुराने तरीके में नया बनाने की शक्ति कम है।

सामग्री प्रतिलोम डिज़ाइन इस घेरे को तोड़ता है। यह क्रम को उलट देता है। पहले लक्ष्य गुण तय किए जाते हैं। यह तय किया जाता है कि आयन चालकता अधिक होनी चाहिए। यह तय किया जाता है कि ऊष्मागतिकीय रूप से स्थिर होना चाहिए। फिर कृत्रिम बुद्धिमत्ता उन शर्तों को पूरा करने वाली संरचना सीधे बनाती है। वह डेटाबेस में न रही संरचनाएँ भी बना देती है। सामग्री खोज का भार जांच से सृजन की ओर खसिकता है।

संभावनाओं की संख्या कतिनी बढ़ी है, इसे एक उदाहरण से देखें। प्रकृति में लगभग 90 तत्व उपयोग किए जा सकते हैं। मान लें कि किसी डबिबे में केवल दस परमाणु रखने हैं। हर जगह पर कौन-सा तत्व रखना है, यह चुना जाता है। परमाणुओं की स्थिति भी थोड़ी-थोड़ी बदली जा सकती है। केवल इस संयोजन को गणि, तो संख्या खगोलीय हो जाती है। समुद्र किनारे की रेत से भी अधिक उम्मीदवार बनते हैं। मनुष्य यदि एक-एक कर गणना करे, तो पूरी उम्र लगाने पर भी अंत नहीं आएगा।

एक गणना में लगने वाला समय भी कम नहीं है। DFT गणना में परमाणुओं की संख्या बढ़ने पर समय बढ़ता है। परमाणुओं की संख्या दोगुनी हो जाए तो गणना कई गुना बढ़ जाती है। एक बड़ी संरचना हल करने में कंप्यूटर कई दिनों तक चलता है। इसलिए अंधाधुंध अधिक उम्मीदवारों की गणना नहीं की जा सकती। उम्मीदवारों को पहले ही अच्छी तरह चुनना पड़ता है। कौन-सा उम्मीदवार पहले गणना के लिए लेना है, यह समझ कृत्रिम बुद्धिमत्ता देती है।

एक क्रिस्टल बनाना तीन चीजों को साथ-साथ तय करना है। पहले जालक (Lattice) तय किया जाता है। जालक वह आकार और माप है जिसमें परमाणु रखे जाते हैं। फिर परमाणुओं की जगह तय की जाती है। यानी डबिबे के भीतर परमाणु कहाँ रखे जाएंगे। अंत में परमाणु का प्रकार तय किया जाता है। यानी उस जगह कौन-सा तत्व बैठेगा। इन तीनों का आपस में मेल होना चाहिए, तभी वास्तविक क्रिस्टल बनता है। इनमें से एक भी बगिड़े तो परमाणु टकरा सकते हैं या संरचना ढह सकती है।

इन तीनों को एक साथ संभालना कठिन है। जालक लंबाई और कोण वाले सतत मानों से बना है। परमाणु की जगह भी सतत मान है। लेकिन परमाणु का प्रकार अलग-अलग कटा हुआ मान है। क्लोरीन के बाद आधा क्लोरीन जैसा कोई तत्व नहीं होता। इस तरह अलग प्रकृति वाले मानों को साथ संभालना पड़ता है। डिफ्यूजन मॉडल यह कठिन काम करता है। वह सतत मानों और अलग-अलग मानों को शोर से साथ-साथ फरि जीवित करता है।

डिफ्यूजन मॉडल के सिद्धांत को थोड़ा और खोलकर देखें। सीखने की दो दिशाएँ हैं। पहले आगे की दिशा में साफ क्रिस्टल में थोड़ा-थोड़ा शोर जोड़ा जाता है। कई बार जोड़ने पर क्रिस्टल अव्यवस्थिति बढ़ि समूह में बदल जाता है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता इस प्रक्रिया को उलटे क्रम में लौटाना सीखती है। वह शोर-भरी अवस्था से मूल क्रिस्टल का अनुमान लगाने का अभ्यास करती है। यह अभ्यास पूरा होने पर वह अव्यवस्थिति बढ़िओं से नया क्रिस्टल बनाती है।

इस तरीके की शक्ति इस बात में है कि यह डेटा से अच्छी तरह सीखता है। दुनिया में ज्ञात हजारों क्रिस्टल मॉडल को दिखाए जाते हैं। मॉडल सीखता है कि कौन-सी व्यवस्था संभव लगती है। वह परमाणुओं के बीच रखी जाने वाली दूरी सीखता है। वह सीखता है कि कौन-सा तत्व कसि जगह अच्छी तरह बैठता है। उस सीखी हुई समझ से वह नया क्रिस्टल सुझाता है। मनुष्य को नियम एक-एक कर लिखकर देने की जरूरत नहीं होती। मॉडल स्वयं सीखता है।

प्रतिलोम डिज़ाइन केवल नियमि क्रिस्टलों तक सीमि नहीं रहता। काँच जैसे पदार्थ भी हैं जिनमें परमाणु बखिरे रहते हैं। ऐसे पदार्थ को अमॉर्फस (Amorphous) कहा जाता है। 2025 में प्रकाशित एक शोध ने डिफ्यूजन मॉडल से अमॉर्फस संरचना बनाई। उसने इसे पुराने गणना तरीके से हजारों गुना तेज बनाया। संरचना और प्रक्रिया शर्तों को बदलते हुए कई तरह की संरचनाएँ निकालीं। यानी प्रतिलोम डिज़ाइन की पहुँच क्रिस्टल के बाहर भी फैलती है।

प्रतिलोम डिज़ाइन मॉडल रसायन के नियम भी सीखता है। हर परमाणु अपने पड़ोसियों से बना सकने वाले बंधों की एक संख्या रखता है। इस संख्या को वैलेंस (Valence) कहा जाता है। वैलेंस नियम टूटे तो असंभव संरचना निकलती है। 2026 में प्रकाशित एक शोध ने इस वैलेंस नियम को निर्माण प्रक्रिया में शामिल किया। इसके परिणामस्वरूप उसने केवल वास्तविक रूप से संभव पदार्थ चुने। मॉडल में भौतिकी और रसायन की सामान्य समझ बैठाने की धारा आगे बढ़ रही है।

रॉकेट और नई सामग्री में इस बदलाव का अर्थ बड़ा है। रॉकेट चरम वातावरण सहने वाली सामग्री मांगता है। दहन कक्ष गरम होता है। नोज़ल तेज गैस से घसिता है। बैटरी हल्की और सुरक्षित होनी चाहिए। ऐसी सभी शर्तों को पूरा करने वाले पदार्थ प्रकृति में आम नहीं हैं। इसलिए जो

नहीं है, उसे नया बनाकर देखाने वाला प्रतिलोम डिज़ाइन जरूरी है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता मनुष्य की ओर से उस पदार्थ-स्थान में चलती है जहाँ मनुष्य नहीं गया।

2. क्रिस्टल के सममति नियमों को नभाने वाले जनरेटिव मॉडल

इस खंड में क्रिस्टल के सममति नियमों पर चर्चा है। क्रिस्टल परमाणुओं को कहीं भी फेंककर बना ढेर नहीं है। यह नियमों के अनुसार दोहराने वाली परमाणु व्यवस्था है। यदि कृत्रिम बुद्धिमत्ता इस नियम को न जाने, तो वह नकली क्रिस्टल बना देती है। सममतिको मॉडल के भीतर कैसे रखा जाता है, इसे दो पीढ़ियों के मॉडलों में बाँटकर देखते हैं।

क्रिस्टल को समझने के लिए पहले सममति शब्द को समझना होगा। सममतिविह गुण है जिसमें कोई क्रिया करने पर भी आकार वैसा ही रहता है। कागज़ को आधा मोड़ने पर दोनों ओर मेल खाएँ, तो यह बाएँ-दाएँ सममति है। क्रिस्टल में ऐसी सममति कई परतों में जमा होती है। उसे बगल में खसिकाएँ तो भी वही, घुमाएँ तो भी वही, और प्रतबिंबित करे तो भी वही।

इन सममति नियमों को इकट्ठा करके बनाई गई वर्गीकरण प्रणाली को स्पेस ग्रुप (Space Group) कहते हैं। 3D क्रिस्टलों में ठीक 230 स्पेस ग्रुप होते हैं। हर क्रिस्टल इन 230 में से किसी एक में आता है। यह वर्गीकरण आदर्श 3D आवर्ती क्रिस्टलों पर लागू होता है। काँच जैसे अमॉर्फस पदार्थ या क्वाज़ी-क्रिस्टल इससे बाहर आते हैं। स्पेस ग्रुप जान लेने का अर्थ है उस क्रिस्टल के दोहराव और घूर्णन नियमों को जान लेना।

स्पेस ग्रुप के भीतर परमाणुओं के बैठने की तय जगहें होती हैं। इन जगहों के समूह को वाइकॉफ स्थिति (Wyckoff Position) कहा जाता है। वाइकॉफ स्थितिकोई एक जगह नहीं, बल्कि सममतिसे बंधा जगहों का समूह है। यदि एक जगह परमाणु रखा जाए, तो सममतिनियम उसके जोड़ीदार स्थानों पर भी वही परमाणु बैठाते हैं। यह वैसा ही है जैसे शीशे के सामने गेंद रखने पर शीशे के भीतर भी गेंद दिखाई देती है। इसलिए एक स्थान तय करने पर कई परमाणुओं के स्थान साथ-साथ तय हो जाते हैं। इस समूह से जुड़ी जगहों की संख्या को बहुगुणता (Multiplicity) कहा जाता है। यदि जनरेटिव मॉडल इस नियम को प्राप्त करे, तो परमाणुओं के एक-दूसरे पर चढ़ने से बच सकता है।

स्पेस ग्रुप की शक्तिम जानकारी से पूरी संरचना बनाने में है। जनि क्रिस्टलों में सममति अधिक होती है, उनमें केवल कुछ परमाणु तय करने पड़ते हैं। बाकी जगह सममतिनियम स्वयं भर देते हैं। हमिकण को याद करे तो बात आसान होती है। उसकी छह दशाओं में फैली आकृतिसमान होती है। एक दशा बना दी जाए, तो बाकी पाँच घुमाकर मलि जाती हैं। क्रिस्टल भी इसी तरह छोटे टुकड़े से पूरा रूप तय करता है।

यदि जनरेटिव मॉडल इस नियम को न जाने, तो समस्या पैदा होती है। मान ले कि कृत्रिम बुद्धिमत्ता परमाणुओं को एक-एक कर स्वतंत्र रूप से रखती है। छोटी गणना-जनति गड़बड़ी भी सममति तोड़ देती है। जसि क्रिस्टल में लगभग कोई सममति नहीं होती, उसे P1 कहा जाता है। P1 भी एक पूर्ण औपचारिक स्पेस ग्रुप है। वास्तव में P1 से संबंधित पदार्थ भी मौजूद हैं। इसलिए केवल P1 होने से उसे नकली नहीं कहा जा सकता। समस्या तब होती है जब उच्च सममतिवाला क्रिस्टल P1 में ढह जाता है। ऐसे समय परमाणुओं के बीच की दूरी, ऊर्जा और स्थिरता को अलग से जांचना पड़ता है।

इसलिए ताजा शोध सममति नियमों को मॉडल में पहले से रखना चाहता है। परमाणुओं को एक-एक कर रखने के बजाय अलग क्रम अपनाया जाता है। पहले सममतिसे भरी छोटी मूल इकाई बनाई जाती है। फिर सममतिनियम लागू करके पूरा क्रिस्टल फैलाया जाता है। ऐसा करने पर नर्मति परिणाम में सममतिबने रहने की संभावना बढ़ती है।

सममतिसिंभालने का एक अच्छा तरीका इक्विवेरिएंस (Equivariance) नामक गुण है। इक्विवेरिएंस वह गुण है जिसमें इनपुट को घुमाने पर आउटपुट भी साथ घूमता है। दस्ताने का उदाहरण ले तो बात आसान है। दाएँ हाथ का दस्ताना उलट दे तो वह बाएँ हाथ का दस्ताना बन जाता है। हाथ और दस्ताना साथ उलटते हैं। यदि क्रिस्टल मॉडल में इक्विवेरिएंस हो, तो संरचना घुमाने पर भी गुण वही रहते हैं। सममतिको जबरन मलाने की जरूरत नहीं पड़ती। वह अपने आप नभित है।

इस इक्विवेरिएंस वाले न्यूरल नेटवर्क का उपयोग करने पर सीखना आसान हो जाता है। क्योंकि मॉडल स्वयं सममतिको जानता है। एक ही संरचना को कई कोणों से देखाने की जरूरत नहीं होती। डेटा कम हो तब भी वह अच्छी तरह सीखता है। इसलिए नए क्रिस्टल जनरेटिव मॉडल इक्विवेरिएंस को महत्वपूर्ण और मानते हैं। यह गुण आगे आने वाले फ्लो मैचिंग मॉडल में भी मुख्य भूमिका नभिता है।

2026 में प्रकाशित क्रिस्टल जनरेटिव मॉडलों की एक समग्र समीक्षा इस प्रवाह को अच्छी तरह व्यवस्थित करती है। समीक्षा बताती है कि सममतिनभाने की क्षमता अच्छे क्रिस्टल जनरेटिव मॉडल की मुख्य शर्त है। उसका मत है कि सममतिनभाने वाले मॉडल स्थिर उम्मीदवार अधिक बनाते हैं। यह समीक्षा डिफ़्यूजन मॉडल और फ्लो मैचिंग मॉडल की साथ-साथ तुलना करती है।

2.1 क्रिस्टल जनरेशन डिफ्यूजन का प्रारंभिक बट्टा (CDVAE)

क्रिस्टल जनरेशन डिफ्यूजन शोध एक आरंभिक मॉडल से शुरू हुआ। इस मॉडल का नाम CDVAE है। इसने क्या अच्छा किया और क्या अधूरा रहा, इसे एक-एक कर देखते हैं।

CDVAE क्रिस्टल डिफ्यूजन वेरिएशनल ऑटोएन्कोडर (Crystal Diffusion Variational Autoencoder) का संक्षिप्त रूप है। यह मॉडल 2022 में प्रस्तुत किया गया था और इसने इस क्षेत्र के द्वार खोले। इसने क्रिस्टल लैटिस, परमाणु स्थितियों और परमाणु प्रकारों को एक साथ संभालने वाला पहला डिफ्यूजन ढांचा स्थापित किया।

CDVAE का बड़ा योगदान आवधिक सीमा स्थितियों (Periodic Boundary Condition) को ध्यान में रखना है। आवधिक सीमा स्थिति का अर्थ है कि क्रिस्टल एक ही आकार में अंतहीन रूप से दोहराया जाता है। वॉलपेपर के पैटर्न की कल्पना करना आसान है। एक टुकड़ा ऊपर-नीचे और दाएं-बाएं जुड़कर पूरी दीवार को ढक लेता है। क्रिस्टल भी छोटी इकाइयों को दोहराकर एक बड़ा समूह बनाते हैं।

यह मॉडल परमाणुओं की स्थितियों को लांजवाँ गतिकी (Langevin Dynamics) नामक वधि से थोड़ा-थोड़ा बदलता है। इस समय परमाणु को धकेलने की दिशा उस प्रायिकता की ढाल होती है जिस मॉडल ने सीखा है। यह वास्तविक परमाणुओं के बीच के बल या मुक्त ऊर्जा से अलग है। इसलिए केवल इस प्रक्रिया से स्थिर संरचना की गारंटी नहीं मिलती। पहले जनरेशन से ढांचा बनाया जाता है, फिर DFT से संरचना को फिर से सुधारा जाता है। इन दो चरणों को अलग-अलग देखना चाहिए।

लेकिन CDVAE की स्पष्ट सीमाएँ हैं। यह स्पेस ग्रुप सममतिको सीधे स्थिर नहीं कर सकता। परमाणुओं को स्वतंत्र रूप से हटाने-सरकाने से सममिति आसानी से टूट जाती है। इसके परिणामस्वरूप बनी संरचना अक्सर सममति खोकर P1 अवस्था में ढह जाती थी। जिन क्रिस्टलों में सममति आवश्यक होती है, उनमें अलग से अधिक सत्यापन करना पड़ता था।

एक और सीमा यह है कि परमाणुओं की संख्या पहले से तय करनी पड़ती है। यह मॉडल पहले परमाणुओं की संख्या का अनुमान लगाता है, फिर उसी संख्या के अनुसार संरचना बनाता है। संख्या तय हो जाए तो लचीलापन घट जाता है। किसी परमाणु के हटने या और जुड़ने की स्थितियों को संभालना कठिन होता है। यह सीमा आगे आने वाली मरिज परमाणु वधि से हल होती है।

ये कमियाँ दोष नहीं, बल्कि आगे बढ़ने की सीढ़ियाँ हैं। CDVAE ने जो काम सामने रखा, वही अगली पीढ़ी के मॉडलों का लक्ष्य बना। सममति को कैसे बचाया जाए। परमाणुओं की संख्या को स्वतंत्र रूप से कैसे संभाला जाए। इन्हीं दो प्रश्नों ने आगे के शोध को दिशा दी। शुरुआती मॉडल की सीमाओं को जानना ही विकास की शुरुआत है।

2.2 सममतिको समझने वाला श्रृतीय प्रसार मॉडल

अगली पीढ़ी के मॉडलों ने शुरू से ही सममतिके नियमों का पालन करने की कोशिश की। मलिते-जुलते नाम वाले दो अध्ययनों में भ्रम न हो, इसलिए उन्हें अलग-अलग समझाया जाता है। प्रदर्शन के आँकड़ों को केवल सत्यापित सीमा के भीतर सावधानी से लिया जाता है।

सममतिको समझने वाले मॉडल का मुख्य विचार सरल है। यह परमाणुओं को एक-एक करके स्वतंत्र रूप से नहीं रखता। पहले असममति इकाई (Asymmetric Unit) बनाई जाती है। असममति इकाई परमाणुओं का वह सबसे छोटा समूह है जिससे सममति नियमों के आधार पर पूरा क्रिस्टल बनाया जा सकता है। इस छोटे बीज पर स्पेस ग्रुप की सममतिक्रियाएँ लागू की जाती हैं। इन क्रियाओं से बीज पूरा क्रिस्टल बनकर फैल जाता है।

इस तरीके का लाभ यह है कि सममति अपने आप बनी रहती है। बीज को सममति नियमों से फैलाया गया है, इसलिए परिणाम में सममति सिमाई रहती है। परमाणुओं को अलग से मिलाने की आवश्यकता नहीं होती। इसे कागज मोड़कर काटने से समझना आसान है। एक बार मोड़कर काटें तो खोलने पर बायाँ और दायाँ भाग समान निकलता है। सममति-सचेत मॉडल क्रिस्टल को इसी तरह काटकर बनाता है।

यहाँ मलिते-जुलते नाम वाले दो अध्ययनों को अलग करना चाहिए। एक SymmCD है। यह सममतिको सुरक्षित रखने वाला क्रिस्टल जनरेशन प्रसार मॉडल है। लेवी (Levy) आदि ने इसे 2025 में अंतरराष्ट्रीय शक्तिषण नरूपण सम्मेलन (ICLR) में प्रस्तुत किया। यह सहकर्मि समीक्षा से गुजरा औपचारिक शोधपत्र है। इस शोधपत्र की पहचान संख्या arXiv:2502.03638 है।

दूसरा वायकॉफ स्थिति से संबंधित एक अलग शोध है। यह इशी (Ishii) आदि द्वारा 2026 में प्रकाशित एक प्रीप्रिंट (preprint) है। प्रीप्रिंट वह प्रारंभिक शोध होता है जिसकी अभी तक सहकर्मि समीक्षा नहीं हुई होती है। यह शोधपत्र WyckoffDiff-Adaptor नामक एक वधिकी प्रस्ताव करता है। इसकी पहचान संख्या arXiv:2601.08115 है। दोनों शोधपत्रों का लक्ष्य समान है, लेकिन वधियाँ और लेखक अलग हैं। यह पुस्तक दोनों शोधों को आपस में मिलाए बिना अलग-अलग प्रस्तुत करती है।

CDVAE और सममति-सचेत मॉडल के बीच एक मध्य सेतु भी है। उनमें से एक DiffCSP है। यह मॉडल लैटिस और भिन्नात्मक निर्देशांकों को साथ-साथ प्रसार से बनाता है। भिन्नात्मक निर्देशांक उस सापेक्ष स्थितियों को कहते हैं जब डबिबे के आकार को 1 माना जाता है। DiffCSP ने

CDVAE की तुलना में सममतिको बेहतर बचाया। इसने उन अगली पीढ़ी के मॉडलों का रास्ता तैयार किया जिनमें सममतिको सीधे शामिल किया गया। इस तरह मॉडल एक-एक पीढ़ी में कमियाँ भरते हुए आगे बढ़ते हैं।

प्रदर्शन के आँकड़ों को संभालते समय सावधानी चाहिए। सममति-संरक्षण दर 98 प्रतिशत से अधिक होने का आँकड़ा मलित है, लेकिन मूल पाठ में यह नश्वर नहीं है। इसलिए यह पुस्तक किसी विशेष संख्या को नश्वर प्रदर्शन की तरह नहीं लिखती। इसके बजाय इसे दशिया के रूप में समझती है। सममति-संचेत मॉडल पुराने मॉडलों की तुलना में सममतिको बेहतर बचाते हैं। इसके परिणामस्वरूप वे वास्तविक क्रिस्टलों के अधिक नकिट उम्मीदवार अधिक संख्या में देते हैं।

सममति-संचेत मॉडल शर्तीय जनरेशन को भी अच्छी तरह संभालते हैं। शर्तीय जनरेशन (Conditional Generation) वह तरीका है जिसमें इच्छित गुण को शर्त के रूप में दिया जाता है। मान लें कि बैडगैप नामक मान तय किया गया है। बैडगैप वह ऊर्जा सीमा है जो अर्धचालक के गुणों को निर्धारित करती है। मॉडल उसी बैडगैप से मेल खाने वाले क्रिस्टलों को चुनकर बनाता है। इस तरह शर्त लगाने से लक्ष्य के अनुकूल उम्मीदवार ही इकट्ठे होते हैं। इससे नरिथक उम्मीदवार चुनने की बर्बादी बहुत घटती है।

2026 में आए एक प्रीप्रिंट ने इस शर्तीय जनरेशन को और आगे बढ़ाया। उसने क्रिस्टल संरचना और इलेक्ट्रॉनिक गुणों को साथ-साथ बनाया। इलेक्ट्रॉनिक गुणों को साथ सीखने से लक्ष्य गुणों का मलान बेहतर हुआ। बैडगैप और नरिमाण ऊर्जा को शर्त के रूप में देने वाली परीक्षा में सफलता दर बढ़ी। स्थिर और नए उम्मीदवारों का अनुपात भी बढ़ा। सममति और शर्त को साथ संभालने की प्रवृत्ति जारी है।

देखते हैं किनई सामग्री के लिए यह तकनीक क्यों आवश्यक है। सममति-पिदार्थ के गुणों से गहराई से जुड़ी है। जिस नकली संरचना की सममति टूट गई हो, उसके गुणों का अनुमान भी गलत हो जाता है। अंतरिक्ष-वमिनन मशिर् धातु या बैटरी सामग्री का अर्थ तभी है जब वे वास्तविक संश्लेषण तक पहुँचें। सममतिको बचाने वाला जनरेशन मॉडल नरिथक उम्मीदवारों को घटाता है। इससे प्रयोग तक ले जाए जाने वाले उम्मीदवारों की गुणवत्ता उतनी ही बढ़ती है।

3. क्रिस्टल को अधिक तेजी से बनाने वाला फ्लो मैचिंग

प्रसार मॉडल सटीक होते हैं, लेकिन कई कदमों के कारण धीमे होते हैं। फ्लो मैचिंग कदमों की संख्या घटाकर गति बढ़ाता है। साथ ही हम यह भी देखते हैं कि क्रिस्टल जसि वक्स् स्थान में रहता है, उसे कैसे संभाला जाता है।

पहले यह समझना चाहिए कि प्रसार मॉडल धीमे क्यों होते हैं। प्रसार मॉडल शोर को थोड़ा-थोड़ा हटाते हुए संरचना बनाते हैं। वे एक बार में केवल थोड़ा सा ही शोर हटाते हैं। इसलिए पूर्णता तक पहुँचने के लिए सैकड़ों से हजारों कदम चाहिए। कदम अधिक हों तो गणना में लंबा समय लगता है। एक उम्मीदवार बनाने में समय लगता है। सामग्री खोज में, जहाँ बहुत से उम्मीदवार निकालने पड़ते हैं, यह समय बोझ बन जाता है।

फ्लो मैचिंग (Flow Matching) इस समस्या को दूसरे कोण से हल करता है। शोर को थोड़ा-थोड़ा हटाने के बजाय यह शॉर्टकट सीखता है। यह शुरुआती अवस्था से लक्ष्य अवस्था तक सीधे जाने का रास्ता सीखता है। इसे नदी के प्रवाह से समझना आसान है। जलधारा तय हो जाए तो पत्ता उसी रास्ते बहता है। फ्लो मैचिंग पानी के बहने वाली इसी धारा को सीखता है।

यदि जलधारा को सूत्र में व्यक्त करें तो वह साधारण अवकल समीकरण बनती है। साधारण अवकल समीकरण (Ordinary Differential Equation) वह समीकरण है जो मान में होने वाले परिवर्तन को लिखता है। यह दिखाता है कि समय के साथ मान कैसे बदलता है। फ्लो मैचिंग इस समीकरण का अनुसरण करते हुए आरंभ बिंदु से अंत बिंदु तक जाता है। प्रसार हर कदम पर यादृच्छिक रूप से हलित है, लेकिन यह मार्ग ऐसा नहीं है। आरंभ बिंदु तय हो जाए तो अंत तक तय रास्ते से जाता है। इसलिए रास्ता सीधा होता है और कदम कम होते हैं। हालांकि आरंभ बिंदु स्वयं अब भी यादृच्छिक रूप से चुना जाता है। मार्ग तय हो जाने से लैटिस के कोण और आयतन का वरूपण अपने आप कम नहीं होता।

प्रसार और फ्लो मैचिंग के अंतर की तुलना पहाड़ से उतरने से की जा सकती है। प्रसार धुंध में एक-एक कदम टटोलते हुए नीचे उतरता है। यह सावधान है, लेकिन धीमा है। फ्लो मैचिंग पहले से सीखे हुए पर्वतीय रास्ते से नीचे उतरता है। रास्ता पता होने के कारण वह तेज कदमों से चलता है। दोनों तरीके पहाड़ के नीचे लक्ष्य तक पहुँचते हैं, लेकिन लगने वाला समय अलग होता है।

क्रिस्टल से निपटते समय एक कठिनाई यह होती है कि स्थान समतल नहीं होता है। लैटिस की अपनी लंबाई और कोण होते हैं। परमाणु नरिदेशांक दोहराए जाने वाले बॉक्स के भीतर के स्थान हैं। ऐसा स्थान कागज की तरह समतल नहीं होता, बल्कि गेंद की तरह घुमावदार होता है। इस घुमावदार स्थान को रीमानियन मैनफोल्ड (Riemannian Manifold) कहा जाता है।

यदि वक्स् स्थान को सपाट कागज की तरह संभालें तो त्रुटि होती है। यह वैसा ही है जैसे ग्लोब को सपाट नक्शे में फैलाने पर क्षेत्रफल वकृत हो जाता है। ध्रुवीय क्षेत्र वास्तविकता से बड़े दिखते हैं। क्रिस्टल में भी यही होता है। लैटिस के कोण और आयतन मुड़-बगिड़ जाते हैं। इसलिए फ्लो मैचिंग शुरू से ही वक्स् स्थान का मापदंड इस्तेमाल करता है। इस मापदंड को रीमानियन मीट्रिक (Riemannian Metric) कहते हैं। वक्स् स्थान को वक्स् रूप में ही संभालने से वरूपण घटता है।

3.1 वक्र स्थान पर शॉर्टकट खोजना

प्रतनिधि मॉडलों से देखते हैं कि फ्लो मैचिंग वक्र स्थान को कैसे संभालता है। चर्चा सत्यापित शोधपत्रों पर केंद्रित है।

वक्र स्थान में शॉर्टकट खोजना पृथ्वी पर उड़ान भरने जैसा है। सधोल से न्यूयॉर्क जाने का शॉर्टकट नक्शे पर सीधी रेखा नहीं होता। कारण यह है कि पृथ्वी गोल है। वास्तविक शॉर्टकट पृथ्वी की सतह के साथ मुड़ी हुई वक्र रेखा है। ऐसी वक्र रेखा को भू-देशिक (Geodesic) कहा जाता है। क्रिस्टल जनरेशन भी वक्र स्थान पर भू-देशिक के साथ चलता है।

इस विचार को क्रिस्टलों पर पहली बार अच्छी तरह लागू करने वाला मॉडल FlowMM है। FlowMM रिमानियन फ्लो मैचिंग को क्रिस्टलों के अनुरूप वसितारति मॉडल है। यह क्रिस्टलों की विशिष्ट सममिति को भी साथ ध्यान में रखता है। यह पार्श्व वसिस्थापन, घूर्णन, परमाणु क्रम बदलना और आवर्ती सीमा शर्त, सभी को संभालता है। इस मॉडल ने स्थिर पदार्थ खोजने में कदमों की संख्या बहुत घटाई। प्रकाशित शोधपत्र बताता है कि उसने मौजूदा विधियों की तुलना में लगभग तीन गुना कम कदमों में स्थिर उम्मीदवार खोजे।

FlowMM दो कार्य करता है। पहला कार्य संघटन (Composition) निर्धारित होने पर स्थिर संरचना का अनुमान लगाना है। दूसरा कार्य नए संघटन और उसकी संरचना का एक साथ प्रस्ताव देना है। पहले कार्य को क्रिस्टल संरचना भविष्यवाणी (Crystal Structure Prediction) कहा जाता है। दूसरा कार्य वास्तव में नए पदार्थों की खोज है। फ्लो मैचिंग दोनों कार्यों को तेजी से पूरा करता है। इसलिये सामग्री अन्वेषण के विभिन्न क्षेत्रों में इसका व्यापक उपयोग किया जाता है।

एक अन्य सत्यापित उदाहरण CrystalFlow है। यह शोध 2025 में नेचर कम्युनिकेशंस (Nature Communications) में प्रकाशित हुआ था। यह सहकर्म समीक्षा से गुजरा हुआ एक औपचारिक शोधपत्र है। CrystalFlow फ्लो-आधारित जनरेटिव मॉडल के साथ क्रिस्टलीय सामग्री उत्पन्न करता है। यह लैटिस और परमाणु व्यवस्था को एक साथ उत्पन्न करता है। इसने दिखाया कि फ्लो मैचिंग डिफ्यूजन मॉडल की तुलना में सीखने को आसान बनाता है।

फ्लो मैचिंग जैविक क्रिस्टलों में भी इस्तेमाल होता है। 2026 में आए एक प्रीप्रिंट ने यूनिट सेल फ्लो मैचिंग (Unit Cell Flow Matching) का उपयोग किया। इस विधि से जैविक क्रिस्टल संरचनाओं का तेजी से पूर्वानुमान किया गया। यह अध्ययन केवल अकार्बनिक क्रिस्टलों के लिए बना मॉडल नहीं है। इसलिये इसे अकार्बनिक सामग्री के परिणामों तक फैलाकर इस्तेमाल करने में सावधानी चाहिए। फरि भी यह दिखाता है कि फ्लो मैचिंग कई प्रकार के क्रिस्टलों में उपयोगी है।

गतिकीय महत्वपूर्ण है, इसे रॉकेट से जोड़कर देखते हैं। सामग्री रिवर्स इंजिनिंग में बहुत से उम्मीदवार बनाकर छोटने पड़ते हैं। दस हजार उम्मीदवार निकालने पर भी उपयोगी केवल कुछ ही हो सकते हैं। यद्यपि उम्मीदवार बनाने में लंबा समय लगे तो पूरी खोज रुक जाती है। फ्लो मैचिंग इस बाधा को दूर करता है। यह समान समय में अधिक उम्मीदवार निकालता है। अंतरिक्ष-विमानन सामग्री जैसे कठोर शर्तों वाले क्षेत्रों में यह गतिअधिक उपयोगी होती है।

फ्लो मैचिंग कदमों की संख्या कतिनी घटाता है। FlowMM शोधपत्र बताता है कि स्थिर उम्मीदवार खोजने के कदम लगभग तीन गुना घटे। प्रसार मॉडल जसि रास्ते पर चलता था, उसे यह कम कदमों में तय करता है। एक उम्मीदवार बनाने का समय उतना ही छोटा हो जाता है। सौ गुना कमी या एक घंटे का समय कुछ मिनट में घटने जैसे बड़े आँकड़ों का आधार नहीं है। केवल रिपोर्ट किए गए मानों को देखें तो भी उम्मीदवार अधिक निकालने पर बचा हुआ समय जमा होता जाता है।

फ्लो मैचिंग के सामने अभी भी काम बचे हैं। शॉर्टकट सीखने के लिए लक्ष्य वितरण को अच्छी तरह जानना चाहिए। प्रशिक्षण डेटा कम हो तो मॉडल गलत रास्ता सीखता है। वक्र स्थान की गणना भी अब भी कठिन है। इसलिये फ्लो मैचिंग सभी प्रसार मॉडलों की जगह नहीं लेता। समस्या के अनुसार दोनों विधियों में से एक चुनी जाती है। सटीकता अधिक जरूरी हो तो प्रसार इस्तेमाल किया जाता है, और गतिअधिक जरूरी हो तो फ्लो मैचिंग इस्तेमाल किया जाता है।

4. केवल कुछ भाग फरि से बनाना और परमाणुओं की संख्या स्वयं तय करना

क्रिस्टल को हमेशा खाली पन्ने से बनाने की आवश्यकता नहीं है। मौजूदा संरचना से केवल कुछ भाग बदलने का रास्ता भी है। खाली स्थान और दोष भरने वाली इनपेंटिंग ऐसी ही विधि है। परमाणुओं की संख्या तय न हो ऐसे प्रश्नों को संभालने के लिए मरिज परमाणु का विचार भी है।

पहले इनपेंटिंग (Inpainting) शब्द को समझना चाहिए। इनपेंटिंग खाली हिस्से को स्वाभाविक रूप से भरने की तकनीक है। इसे फोटो संपादन में अक्सर देखा जाता है। फोटो में बजिली का खंभा मटि दें तो वहाँ जगह खाली हो जाती है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता आसपास के आकाश को देखकर खाली जगह भर देती है। क्रिस्टल संरचना में भी यही काम किया जाता है। क्रिस्टल में यह खाली परमाणु स्थलों और दोष स्थलों को स्वाभाविक रूप से भर देती है।

खाली पन्ने से क्रिस्टल बनाना और इनपेंटिंग अलग है। खाली पन्ने से जनरेशन एक भी परमाणु रखे बिना शुरू होती है। इनपेंटिंग पहले से मौजूद संरचना से शुरू होती है। केवल कुछ भाग खाली किया जाता है और वही भाग फरि से बनाया जाता है। बाकी भाग वैसे ही रहते हैं। दोनों तरीकों के

उपयोग अलग है। पूरी तरह नया पदार्थ खोजते समय खाली पन्ने से जनरेशन इस्तेमाल होती है। अच्छी सामग्री को सुधारते समय इनपेंटिंग इस्तेमाल होती है।

सामग्री अनुसंधान में इस तकनीक की जरूरत का कारण है। व्यवहार में पूरे क्रिस्टल को नए सरि से बनाने का काम कम होता है। कई बार पहले से अच्छा होस्ट मैट्रिक्स (Host Matrix) मौजूद होता है। उसमें किसी दूसरे तत्व को थोड़ा डालकर या हटाकर गुण बदले जाते हैं। इस तरह कुछ परमाणुओं को दूसरे परमाणुओं से बदलने को डोपिंग (Doping) कहा जाता है। परमाणु के गायब होने या दूसरी जगह फंस जाने की अवस्था को दोष (Defect) कहा जाता है।

डोपिंग वह तरीका है जिससे अर्धचालक उद्योग लंबे समय से इस्तेमाल करता आया है। शुद्ध सिलिकॉन बजिली को अच्छी तरह नहीं चलाता। इसमें फॉस्फोरस या बोरॉन बहुत कम मात्रा में डाला जाता है। तब इसके वदियुत गुण बहुत बदल जाते हैं। स्मार्टफोन के भीतर की चपि इसी सदिधांत पर चलती है। क्रिस्टल इनपेंटिंग इस डोपिंग डिजाइन को कृत्रिम बुद्धिमत्ता को सौंपती है। मॉडल सुझाव देता है कि किस स्थान पर कौन-सा तत्व डाला जाए।

यह छोटा बदलाव गुणों को बहुत बदल देता है। यह वैसा ही है जैसे नमक में किसी और पदार्थ को थोड़ा मिला देने से स्वाद बदल जाता है। क्रिस्टल में एक परमाणु बदलकर डालने से वदियुत चालकता बदल जाती है। उत्प्रेरक प्रदर्शन बदल जाता है। इसलिए यह ठीक-ठीक डिजाइन करना पड़ता है कि कहां क्या डाला जाए। इनपेंटिंग इस सूक्ष्म डिजाइन में मदद करती है। होस्ट मैट्रिक्स को वैसी ही रखा जाता है और केवल बदलने वाली जगह फरि से बनाई जाती है।

इनपेंटिंग खाली पन्ने से नरिमाण करने की तुलना में अधिक व्यावहारिक है। अच्छा होस्ट क्रिस्टल खोजने में ही लंबा समय लगता है। यदि पहले से परखा हुआ होस्ट मौजूद है, तो उसी पर सुधार करना तेज होता है। यह मजबूत घर को नए सरि से बनाने के बजाय केवल एक कमरे की मरम्मत करने जैसा है। नींव नहीं हलित, इसलिए जोखिम कम होता है। इसी कारण व्यवहारिक शोधकर्ता इनपेंटिंग वधि को पसंद करते हैं।

खाली जगह भरने के लिए आसपास के परमाणुओं को ध्यान से देखना पड़ता है। कोई भी तत्व डाल देने से संरचना टूट जाती है। उसका आकार पड़ोसी परमाणुओं से मेल खाना चाहिए। वदियुत संतुलन भी सही होना चाहिए। कृत्रिम बुद्धिमत्ता होस्ट मैट्रिक्स के नियम सीखकर इन शर्तों को पूरा करती है। मास्किंग (Masking) नामक तरीके से केवल बदलने वाली जगह को ढका जाता है। केवल ढकी हुई जगह फरि से बनाई जाती है और बाकी को स्थिर रखा जाता है।

4.1 परमाणुओं की संख्या स्वयं तय करने वाला मरिज एटम डिफ्यूजन (MiAD)

परमाणुओं की संख्या को स्वतंत्र रूप से संभालने की एक वधिके रूप में MiAD नामक प्रीप्रटि मॉडल है। हम देखते हैं कि मरिज एटम का विचार क्यों उपयोगी है।

MiAD मरिज एटम डिफ्यूजन (Mirage Atom Diffusion) का संक्षिप्त रूप है। यह 2025 के अंत में जारी एक प्रीप्रटि है। यह सहकर्मि समीक्षा से पहले का प्रारंभिक शोध है। इसका आधिकारिक शीर्षक शुरुआत से नए क्रिस्टल बनाने वाले डिफ्यूजन मॉडल का अर्थ समाहित करता है। इसकी पहचान संख्या arXiv:2511.14426 है।

इस मॉडल का मुख्य विचार मरिज एटम है। मरिज का अर्थ मृगतृष्णा है। मरिज एटम एक काल्पनिक स्थान है जो वास्तविक परमाणु भी बन सकता है और गायब भी हो सकता है। मॉडल पहले एक डबिबे के भीतर पर्याप्त संख्या में काल्पनिक स्थान भरता है। फरि डिफ्यूजन प्रक्रिया में यह तय करता है कि हर स्थान वास्तविक परमाणु है या खाली जगह। जो स्थान सचमुच बचेगा, वहां तत्व बैठेगा, और जो नहीं बचेगा वह गायब हो जाएगा।

इस वधिके लाभ यह है कि परमाणुओं की संख्या पहले से तय नहीं करनी पड़ती। पुराने मॉडल पहले परमाणुओं की संख्या तय करते थे और फरि संरचना बनाते थे। MiAD काल्पनिक स्थानों को चालू और बंद करते हुए संख्या स्वयं तय करता है। इस ने वास्तव में जो दिखाया, वह परमाणुओं की संख्या स्वयं तय करने वाला नरिमाण है। यह दोष सांद्रता, डोपिंग स्थान या गैर-स्टॉइकियोमेट्री तक सत्यापित शोध नहीं है। फरि भी परमाणुओं की संख्या बदलती रहने वाली सामग्री पर इस वधिके लागू करने की संभावना है।

जिस पदार्थ में तत्वों का अनुपात ठीक-ठीक पूर्णांक जैसा नहीं बैठता, उसे गैर-स्टॉइकियोमेट्रिक यौगिक कहा जाता है। ऐसे पदार्थ वास्तविक सामग्री में आम हैं। एक परमाणु के गायब होने से बनी खाली जगह गुणों को बदल देती है। कई दोष मलिकर दोष-समूह भी बनाते हैं। अतिरिक्त जगह में परमाणु घुस जाने वाली इंटरस्टिशियल अवस्था भी होती है। यह सूक्ष्म अव्यवस्था चालकता और मजबूती को तय करती है। परमाणुओं की संख्या को स्वतंत्र रूप से संभालने वाली नरिमाण वधि ऐसी अव्यवस्था को व्यक्त करने का सुराग बनती है।

MiAD ने बैचमार्क परीक्षण में परिणाम बताए। इसमें व्यापक रूप से इस्तेमाल होने वाले MP-20 परीक्षण सेट का उपयोग किया गया। स्थिर, अद्वितीय और नए क्रिस्टलों के अनुपात को देखाने वाले सूचक को SUN अनुपात कहा जाता है। ने इस सूचक पर एक नश्चिति प्रदर्शन बताया। पर यह मान प्रीप्रटि चरण का आंकड़ा है। इसलिए इसे पक्का प्रदर्शन नहीं, बल्कि प्रारंभिक परिणाम माना जाना चाहिए।

अब देखते हैं कि इस तकनीक का रॉकेट और नई सामग्री के लिए क्या अर्थ है। वास्तविक अंतरिक्ष-एयरोस्पेस सामग्री पूरी तरह नियमिती नहीं होती। उसमें कुछ परमाणुओं के गायब होने या स्थान बदलने जैसे दोष हमेशा रहते हैं। यही दोष मजबूती और चालकता को तय करते हैं। परमाणुओं की संख्या को स्वतंत्र रूप से संभालने वाला मॉडल ऐसी वास्तविक संरचना को बेहतर व्यक्त करता है। इस कारण वह प्रयोगशाला परिणामों के अधिक निकट उम्मीदवार देता है। पर यह विधि अभी प्रीप्रिंट चरण में है, इसलिए दोष डिजाइन की क्षमता को और सत्यापित करना होगा।

5. सुदृढीकरण अधगम से अच्छे उम्मीदवारों की ओर ले जाना

जनरेटिव मॉडल बहुत से उम्मीदवार बनाता है। पर वे सभी उपयोगी नहीं होते। सुदृढीकरण अधगम से दशिया अच्छे उम्मीदवारों की ओर तय की जाती है। हम देखते हैं कि सुदृढीकरण अधगम कैसे मार्गदर्शन करता है और उसके सिद्धांत व सुरक्षा उपाय क्या हैं।

सुदृढीकरण अधगम (Reinforcement Learning) पुरस्कारों को देखकर अपने व्यवहार को सुधारने वाला अधगम है। कुतूहल के प्रशिक्षण की कल्पना करना आसान है। यदि वह अच्छा करता है, तो उसे दावत दी जाती है। यदि अच्छा नहीं करता, तो नहीं दी जाती। कुतूहल दावत पाने वाले व्यवहार को बढ़ाता जाता है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता भी उच्च पुरस्कार प्राप्त करने वाले कार्यों को बढ़ाती है।

सामग्री निर्माण में अच्छी संरचना को अधिक इनाम दिया जाता है। स्थिर और अच्छे गुणों वाले क्रिस्टल को बड़ा अंक दिया जाता है। जनि संरचनाओं में परमाणु टकराते हैं या जो अस्थिर हैं, उन्हें कम अंक दिया जाता है। मॉडल अधिक अंक वाली दशिया में अपनी निर्माण आदत बदलता है। इसलिए परीक्षण दोहराने पर उपयोगी उम्मीदवार बढ़ते जाते हैं।

जनरेटिव मॉडल और सुदृढीकरण अधगम की भूमिकाएं अलग हैं। जनरेटिव मॉडल संभावित उम्मीदवारों को व्यापक रूप से फैलाता है। सुदृढीकरण अधगम उन उम्मीदवारों को लक्ष्य की ओर धकेलता है। यह वैसा है जैसे बीज बोने वाला हाथ और पानी की राह खोलने वाला हाथ अलग होते हैं। अच्छे फल के लिए दोनों हाथों को साथ चलना पड़ता है। केवल निर्माण से भी कमी रहती है और केवल सुदृढीकरण अधगम से भी। दोनों को जोड़ने पर वांछित गुणों के निकट पहुंचा जाता है।

इस विधिकी जरूरत का कारण है। जनरेटिव मॉडल संभावित उम्मीदवार अच्छी तरह बनाता है। पर संभावित दखिना और वास्तव में स्थिर होना अलग बातें हैं। बाहर से अच्छी दखिने पर भी कई संरचनाएं ऊष्मागतिकी के आधार पर टूट जाती हैं। इसलिए केवल निर्माण पर्याप्त नहीं है। स्थिरता, नवीनता और संश्लेषण की संभावना को साथ देखना पड़ता है। सुदृढीकरण अधगम इन तीनों को इनाम में रखकर मॉडल का मार्गदर्शन करता है।

संश्लेषण की संभावना संभालने में कठिनी लक्ष्य है। कागज पर स्थिर पदार्थ भी प्रयोगशाला में नहीं बन सकता। बनाने का रास्ता बहुत कठिनी हो सकता है या कच्चा माल उपलब्ध नहीं हो सकता। इसलिए केवल स्थिरता देखना पर्याप्त नहीं है। यह भी साथ देखना चाहिए कि उसे सचमुच बनाया जा सकता है या नहीं। सुदृढीकरण अधगम का इनाम इन वास्तविक शर्तों को भी शामिल करने की कोशिश करता है। तभी प्रयोगशाला तक ले जाए जा सकने वाले उम्मीदवार निकलते हैं।

सुदृढीकरण अधगम को सामग्री निर्माण से जोड़ने के कई तरीके हैं। एक प्रतिनिधित्विक प्रॉक्सिमल पॉलिसी ऑप्टिमाइजेशन (Proximal Policy Optimization) है। यह तकनीक नीतिको एक बार में थोड़ा-थोड़ा ही बदलती है। कारण यह है कि अचानक बड़ा बदलाव करने पर अधगम अस्थिर हो जाता है। यह सावधानी से थोड़ा-थोड़ा आगे बढ़ते हुए इनाम बढ़ाती है। इसलिए यह स्थिर रूप से प्रदर्शन सुधारती है। यह तकनीक भाषा मॉडल को परिष्कृत करने में भी व्यापक रूप से इस्तेमाल होती है।

2025 में आए एक प्रीप्रिंट ने इस दशिया को अच्छी तरह दिखाया। उसने डिफ्यूजन मॉडल को सुदृढीकरण अधगम से फाइन-ट्यून करके रिवर्स डिजाइन की सफलता दर बढ़ाई। उसने लक्ष्य गुणों के अनुकूल अधिक संरचनाएं बनाईं। स्थिरता, अद्वितीयता और नवीनता की शर्तें पूरी करने वाला अनुपात भी बढ़ा। यह शोध प्रारंभिक चरण में है। इसलिए औद्योगिक उपयोग के लिए DFT गणना और प्रयोगात्मक संश्लेषण की और जरूरत है।

5.1 सुदृढीकरण अधगम के सुरक्षा उपाय और प्रदर्शन सूचक

सुदृढीकरण अधगम में दो सुरक्षा उपाय हैं। एक उपाय मॉडल को बहुत दूर भटकने से रोकता है। दूसरा उपाय अच्छे उम्मीदवारों को सहेजकर फरि से इस्तेमाल करता है। साथ में हम प्रदर्शन मापने वाले सूचक भी देखते हैं।

सुदृढीकरण अधगम में छपि जोखिम है। केवल इनाम का पीछा करने पर मॉडल विचित्र संरचनाओं की ओर झुक जाता है। वह अधिक अंक देने वाले संकरे क्षेत्र में फंस जाता है। विधि उम्मीदवार खो देता है और एक ही उत्तर दोहराता है। इस घटना को मोड कोलैप्स (Mode Collapse) कहा जाता है। कोलैप्स आने पर खोज रुक जाती है।

इसे रोकने वाला उपाय KL रेग्युलराइजेशन (KL Regularization) है। KL यह मापने का पैमाना है कि दो वितरण कितने अलग हैं। यह उपाय फाइन-ट्यून किए गए मॉडल को उसके मूल सीखे हुए वितरण से बहुत दूर नहीं जाने देता। यह रबर बैंड से बंधे होने जैसा है। मॉडल नई दशा में बढ़ता है, पर जड़ से बहुत दूर जाने पर खिंचा जाता है। इसलिए अच्छे उम्मीदवार खोजते हुए भी विविधता बची रहती है।

दूसरा उपाय एक्सपीरियंस रप्ले (Experience Replay) है। अच्छे उम्मीदवारों को फेंका नहीं जाता, बल्कि सहेजा जाता है। सहेजे गए उम्मीदवारों को फिर निकालकर अधिगम में इस्तेमाल किया जाता है। यह वैसा है जैसे परीक्षा में अच्छे आए प्रश्नों को अभ्यास कॉपी में जमा कर फिर हल करना। इससे कठिनाई से मेली अच्छी संरचना भूली नहीं जाती। अधिगम अधिक स्थिर रूप से आगे बढ़ता है।

प्रदर्शन मापते समय अक्सर इस्तेमाल होने वाला सूचक SUN अनुपात है। SUN स्थिर (Stable), अद्वितीय (Unique) और नया (Novel) क्रिस्टल दर्शाता है। यह उन उम्मीदवारों का अनुपात है जो तीनों शर्तें पूरी करते हैं। स्थिर होने का अर्थ है कि वह आसानी से दूसरे पदार्थों में नहीं टूटता। अद्वितीय होने का अर्थ है कि बिने हुए पदार्थ आपस में दोहराते नहीं। नया होने का अर्थ है कि वह डेटाबेस में पहले से मौजूद पदार्थ नहीं था।

स्थिरता मापते समय एनर्जी अबव हल (Energy above Hull) नामक मान देखा जाता है। यह मान DFT से परम शून्य ताप पर गणना किया गया मान है। मान जितना कम हो, गणना के आधार पर वह उतना स्थिर है। मान 0 के निकट हो तो गणना के भीतर वह अच्छी तरह टकित है। पर वास्तविक तापमान और दबाव, पानी और ऑक्सीजन, तथा अभिक्रिया की गति इसमें शामिल नहीं होते। गणना की त्रुटि भी होती है। इसलिए इस मान को गणना के आधार पर स्थिर उम्मीदवार बताने वाले सूचक के रूप में पढ़ना चाहिए। सुदृढीकरण अधिगम का इनाम इस मान को महत्वपूर्ण सामग्री के रूप में इस्तेमाल करता है।

इनाम कई लक्ष्यों को एक तराजू पर साथ रखता है। केवल स्थिरता का पीछा करने पर फीके गुणों वाला पदार्थ निकलता है। केवल गुणों का पीछा करने पर ऐसा पदार्थ निकलता है जिसका संश्लेषण कठिन है। इसलिए स्थिरता, गुण और नवीनता को अलग-अलग भार दिया जाता है। कसि लक्ष्य को कितना महत्व देना है, इसे भार से समायोजित किया जाता है। यह भार समायोजन डिजाइनर का काम है। लक्ष्य के अनुरूप तराजू मलाने पर उम्मीदवार वांछित दशा में जमा होते हैं।

अब देखते हैं कि इन सुरक्षा उपायों का रॉकेट सामग्री डिजाइन के लिए क्या अर्थ है। अंतरिक्ष-एयरोस्पेस सामग्री का अर्थ तभी है जब उसे वास्तव में संश्लेषित किया जा सके। केवल कागज पर अच्छी संरचना उपयोगी नहीं है। सुदृढीकरण अधिगम संश्लेषण की संभावना को इनाम में रखता है। KL रेग्युलराइजेशन और एक्सपीरियंस रप्ले खोज को स्थिर रखते हैं। इसके परिणामस्वरूप प्रयोगशाला तक ले जाए जा सकने वाले उम्मीदवारों का अनुपात बढ़ता है।

6. रिवर्स डिजाइन पाइपलाइन के व्यवहारिक उपयोग के उदाहरण

ऊपर की तकनीकें वास्तविक शोध में कैसे इस्तेमाल हुईं। हम बैटरी ठोस इलेक्ट्रोलाइट, उत्प्रेरक और अंतरिक्ष-एयरोस्पेस मशीन धातुओं को देखते हैं। आधार सत्यापित नवीनतम शोध को बनाया जाता है। हम देखते हैं कि निर्माण, गणना और प्रयोग कैसे एक-दूसरे से जुड़ते हैं।

ऊपर देखी गई तकनीकों को सचमुच इस्तेमाल करने के लिए कई औजारों को जोड़ना पड़ता है। डिफ्यूजन मॉडल और फ्लो मैचिंग उम्मीदवार बनाते हैं। सममिति पहचान और इनपेटींग उम्मीदवारों की गुणवत्ता बढ़ाते हैं। सुदृढीकरण अधिगम उम्मीदवारों को लक्ष्य की ओर ले जाता है। जब ये औजार एक ही प्रवाह में जुड़ते हैं, तब वे प्रभाव दिखाते हैं। इस प्रवाह को रिवर्स डिजाइन पाइपलाइन (Pipeline) कहा जाता है। पाइपलाइन का अर्थ है कई प्रक्रियाओं को नली की तरह जोड़ना।

व्यवहारिक रिवर्स डिजाइन सामान्यतः तीन चरणों से गुजरता है। पहले निर्माण चरण में कृत्रिम बुद्धिमत्ता लक्ष्य गुणों के अनुकूल उम्मीदवार संरचना बनाती है। फिर गणना सत्यापन चरण में DFT और मशीन लर्निंग अंतर-परमाणु पोटेंशियल (MLIP) स्थिरता और गुणों की गणना करते हैं। अंत में प्रयोगात्मक संश्लेषण चरण में स्व-चालित प्रयोगशाला या शोधकर्ता उसे सचमुच बनाकर जांचता है।

ये तीन चरण केवल एक दशा में नहीं बहते। प्रयोग से मिला परिणाम फिर जनरेटिव मॉडल को लौटाए जाते हैं। मॉडल इस प्रतिक्रिया से अगले उम्मीदवार को बेहतर बनाता है। इस तरह प्रतिक्रिया चक्र चलने की विधिको एक्टिव लर्निंग (Active Learning) कहा जाता है। 2025 में आए एक शोध ने एक्टिव लर्निंग से रिवर्स डिजाइन की दक्षता बहुत बढ़ाई। उसने उम्मीदवार निर्माण और सत्यापन को दोहराकर लक्ष्य गुणों के निकट पहुंचा।

अब दूसरे चरण, यानी गणना सत्यापन को थोड़ा और देखें। जनरेटिव मॉडल द्वारा बनाया गया उम्मीदवार अभी कागज पर बनी तस्वीर है। यह तस्वीर सचमुच स्थिर है या नहीं, इसे गणना से परखा जाता है। DFT सटीक है, पर धीमा है। इसलिए पछिले अध्याय में देखे गए मशीन लर्निंग अंतर-परमाणु पोटेंशियल को साथ इस्तेमाल किया जाता है। यह विधि DFT के निकट सटीकता बहुत तेज गति से देती है। यह बड़ी संख्या में उम्मीदवारों को जल्दी छान देती है। उनमें से केवल थोड़े से आशाजनक उम्मीदवारों को DFT से फिर जांचा जाता है।

यही सहयोग खोज की गतिविधि करता है। निर्माण कतिना भी तेज हो, यदि सत्यापन धीमा है तो लाभ नहीं होता। सत्यापन बाधा बन जाए तो उम्मीदवार जमा ही होते जाते हैं। तेज निर्माण और तेज सत्यापन का साथ जुड़ना जरूरी है। इसलिए नवीनतम शोध तीनों चरणों को एक स्वचालित प्रवाह में जोड़ता है। अगले अध्याय में देखी जाने वाली स्व-चालित प्रयोगशाला इस प्रवाह का अंतिम भाग संभालती है।

6.1 ऑल-सॉलिड-स्टेट बैटरी के लिए हैलाइड ठोस इलेक्ट्रोलाइट डिजाइन

पहला उदाहरण बैटरी ठोस इलेक्ट्रोलाइट डिजाइन है। हम देखते हैं कि यह सामग्री क्यों महत्वपूर्ण है और AI कैसे मदद करता है। हम सत्यापन संख्याओं को केंद्र में रखकर देखते हैं।

ऑल-सॉलिड-स्टेट बैटरी (All-Solid-State Battery) ठोस इलेक्ट्रोलाइट का उपयोग करने वाली बैटरी है। सामान्य बैटरी में इलेक्ट्रोलाइट तरल होता है। तरल इलेक्ट्रोलाइट में आग लगने का खतरा होता है। ठोस इलेक्ट्रोलाइट इस खतरे को घटाता है। लेकिन ठोस होने से वह हमेशा सुरक्षित नहीं हो जाता। वह लिथियम धातु, नमी या इलेक्ट्रोड से प्रतिक्रिया भी कर सकता है। सल्फाइड वर्ग और कुछ हैलाइड वर्ग हानिकारक अपघटन पदार्थ छोड़ते हैं, या इंटरफेस पर प्रतिक्रिया और दरारे बनती हैं। फेरि भी रसाव और आग लगने के खतरे को घटाने का लाभ बढ़ा है, इसलिए इसमें बहुत रुचि है।

ठोस इलेक्ट्रोलाइट से अपेक्षित गुण कठिन हैं। लिथियम आयनों को ठोस के भीतर तेजी से गुजरना चाहिए। आयन कतिनी अच्छी तरह गुजरते हैं, इसे आयनिक चालकता (Ionic Conductivity) कहते हैं। मान जतिना ऊंचा हो, उतना अच्छा है। साथ ही उसे ऊंचे वोल्टेज पर टिकना चाहिए। उसे ज्यादा नरम नहीं होना चाहिए और अच्छी तरह चपिकना चाहिए। इन सभी शर्तों को पूरा करना कठिन है।

हैलाइड ठोस इलेक्ट्रोलाइट (Halide Solid Electrolyte) एक आशाजनक उम्मीदवार माना जाता है। हैलाइड का तात्पर्य क्लोरीन, ब्रोमीन और आयोडीन जैसे तत्वों से है। यह श्रेणी उच्च वोल्टेज पर अपेक्षाकृत स्थिर होती है। इसमें कोमलता और चालकता के बीच संतुलन भी अच्छा है। इसलिए इस पर सक्रिय रूप से शोध हो रहा है। इसके प्रतिनिधि पदार्थ के रूप में लिथियम, इट्रियम और क्लोरीन से बना यौगिक शामिल है।

कृत्रिम बुद्धिमत्ता इस सामग्री डिजाइन में कई तरीकों से मदद करती है। 2025 में आए एक शोध ने मशीन लर्निंग और DFT गणना को जोड़ा। उसने कई गुणों का एक साथ पूर्वानुमान करके अच्छे हैलाइड उम्मीदवारों को छांटा। उसने आयनिक चालकता, प्रत्यासूयता गुणांक और वद्युत-रासायनिक स्थिरता खड़िकी का साथ-साथ पूर्वानुमान किया। इस तरह कई गुणों को एक साथ देखने वाले दृष्टिकोण ने व्यावहारिकता बढ़ाई।

2026 में आए दूसरे शोध ने डेटा से नियम निकालने की विधि का उपयोग किया। उसने आयनिक चालकता को नियंत्रित करने वाली मुख्य रासायनिक विशेषताएं खोजीं। इन विशेषताओं के आधार पर नई संरचनाएं डिजाइन की गईं। शोधकर्ता ने बताया कि डिजाइन किए गए एक पदार्थ ने कमरे के तापमान पर लगभग 12 मिलीसीमेंस प्रतिसेंटीमीटर की आयनिक चालकता दिखाई। यह मान इस वर्ग में ऊंचा माना जाता है। यह डेटा से नियम निकालकर उन्हें डिजाइन से जोड़ने का प्रवाह दिखाता है।

आयन ठोस के भीतर कैसे गुजरते हैं, इसकी गणना कठिन है। लिथियम आयन एक स्थान से दूसरे स्थान पर कूदकर चलते हैं। इस कूद की दहलीज कम होनी चाहिए, तभी चालकता ऊंची होती है। इस दहलीज की गणना के लिए परमाणुओं की गतिकी लंबे समय तक देखना पड़ता है। यहां भी मशीन लर्निंग अंतर-परमाणु पोटेंशियल (MLIP) का उपयोग होता है। 2025 के शोध ने बताया कि यह विधि ठोस आयन चालकों की गणना में उपयोगी हो सकती है। पहले जनन से उम्मीदवार बनाए जाते हैं और फिर इस विधि से आयन गतिकी जांच की जाती है।

अब अंतरिक्ष और रॉकेट में इस सामग्री का अर्थ देखते हैं। उपग्रह और अन्वेषण यान बैटरी पर बहुत निर्भर करते हैं। सूरज न होने के समय वे संग्रहित बजिली से चलते हैं। यदि बैटरी अस्थिर हो, तो पूरा मिशन डगमगा जाता है। सुरक्षित और हल्की ऑल-सॉलिड-स्टेट बैटरी यह खतरा घटाती है। AI आधारित प्रतिलोम डिजाइन ऐसी बैटरी सामग्री को तेजी से खोजने में मदद करता है।

6.2 पानी को विभाजित करने वाले उत्प्रेरक खोजने का डिजाइन

अगला उदाहरण उत्प्रेरक डिजाइन है। हम देखेंगे कि उत्प्रेरक क्या है और AI अच्छे उत्प्रेरक को कैसे खोजता है। हम रोबोट प्रयोगशाला से जुड़े नवीनतम उदाहरण को देखेंगे।

उत्प्रेरक (Catalyst) रासायनिक प्रतिक्रिया को तेज करने में मदद करने वाला पदार्थ है। वह स्वयं लगभग नहीं बदलता। फेरि भी वह केवल प्रतिक्रिया की गति बढ़ाता है। पानी से हाइड्रोजन और ऑक्सीजन बनाने वाली युक्तियों में उत्प्रेरक जरूरी है। इस युक्ति को जल-वद्युत अपघटन यंत्र कहा जाता है। अच्छा उत्प्रेरक हो, तो उतनी ही बजिली से अधिक हाइड्रोजन मिलती है।

उत्प्रेरक का प्रदर्शन सतह पर परमाणुओं की व्यवस्था से तय होता है। प्रतिक्रिया उत्प्रेरक की सतह पर होती है। प्रतिक्रियाशील पदार्थ सतह से चपिकते और अलग होते हुए बदलते हैं। पदार्थ का सतह से चपिकना अधिशोषण (Adsorption) कहलाता है। बहुत मजबूती से

चपिकना भी समस्या है। वह अच्छी तरह अलग नहीं होता और प्रतिक्रिया रुकती है। बहुत कमजोर चपिकना भी समस्या है। प्रतिक्रिया होने से पहले ही वह अलग हो जाता है। अच्छा उत्प्रेरक उचित मजबूती से पकड़ता है।

अधिशोषण की मजबूती सतह के परमाणुओं की व्यवस्था तय करती है। परमाणुओं के बीच दूरी थोड़ी भी बदल जाए, तो मजबूती बदल जाती है। इसलिए सतह को कैसे सजाया जाता है, यह महत्वपूर्ण है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता सतह पर परमाणुओं के स्थान बदलते हुए अधिशोषण की मजबूती मिलाती है। वह प्रतिक्रिया के मध्यवर्ती पदार्थों को उचित रूप से पकड़ने वाली व्यवस्था खोजती है। यही व्यवस्था अच्छे उत्प्रेरक का रहस्य है।

ऑक्सीजन बनाने की प्रतिक्रिया कठिन होती है। इस प्रतिक्रिया को ऑक्सीजन विकास प्रतिक्रिया (Oxygen Evolution Reaction) कहा जाता है। इस प्रतिक्रिया को कराने के लिए सैद्धांतिक रूप से आवश्यक वोल्टेज से अधिक वोल्टेज लगाना पड़ता है। उस अतिरिक्त वोल्टेज को ओवरपोटेंशियल (Overpotential) कहा जाता है। ओवरपोटेंशियल प्रतिक्रिया दर की बाधा मानी जाने वाली सक्रियण ऊर्जा से भिन्न अवधारणा है। ओवरपोटेंशियल जितना कम होगा, उत्प्रेरक उतना ही बेहतर होगा। कम ओवरपोटेंशियल का अर्थ है कम बजिली का उपयोग। इसलिए ओवरपोटेंशियल को कम करना उत्प्रेरक डिजाइन का एक प्रमुख लक्ष्य है।

2026 में आए एक शोध ने जनरेटिव AI से उत्प्रेरक का प्रतिलोम डिजाइन किया। इस शोध ने कई तत्वों को मिलाकर बने उच्च-एन्ट्रॉपी उत्प्रेरक (High-Entropy Catalyst) का अध्ययन किया। उसने स्पेक्ट्रोस्कोपिक जानकारी, जनन मॉडल और रोबोट प्रयोग उपकरण को एक साथ जोड़ा। रोबोट ने उम्मीदवार बनाए, प्रदर्शन मापा और परिणाम मॉडल को लौटाए। इस प्रतियुक्ति चक्र को तेजी से चलाया गया।

इस शोध ने जो संख्याएं बताईं, वे व्यावहारिकता दिखाती हैं। एक नमूना बनाने और मापने में लगने वाला समय बहुत घट गया। लगभग 20 घंटे लगने वाले काम को 78 मिनट कर दिया गया। और मल्लि सर्वाश्रेष्ठ उम्मीदवार का अतिवोल्टेज 32 मिलीवोल्ट और घटा। यह उदाहरण अकादमिक शोध है और साथ ही रोबोट स्वचालन भी दिखाता है। इससे पता चलता है कि जनन मॉडल और प्रयोग मलिकर गतिक्रिती बढ़ा सकते हैं।

यह प्रवाह मनुष्य के काम को बदलता है। पहले शोधकर्ता पूरा दिन एक नमूना बनाते थे। अब रोबोट यह काम दिन-रात करता है। मनुष्य सोचता है कि कौन सा लक्ष्य तय करना है। वह तय करता है कि कौन सा परिणाम अर्थपूर्ण है। काम हाथ से करने से सोच से करने की ओर जाता है। मनुष्य की जगह समाप्त नहीं होती, बल्कि ऊपर खिसकती है। अगले अध्याय में इस स्व-चालित प्रयोगशाला पर विस्तार से चर्चा होगी।

कई तत्वों को मिलाकर बने उच्च-एन्ट्रॉपी उत्प्रेरक पर ध्यान जाने का कारण है। कई तत्व मिलाने से सतह पर तरह-तरह के स्थान बनते हैं। उनमें से प्रतिक्रिया के लिए उपयुक्त स्थान निकालने की संभावना बढ़ती है। लेकिन संयोजनों की संख्या इतनी अधिक है कि मनुष्य सबकी जांच नहीं कर सकता। जनन मॉडल इस विशाल क्षेत्र को उसके बदले छानता है। वह अच्छी संरचनाओं को सीमित करके प्रयोगों की संख्या घटाता है। रोबोट उन उम्मीदवारों को तेजी से बनाकर जांचता है।

अब रॉकेट और अंतरिक्ष अन्वेषण में उत्प्रेरक का अर्थ देखते हैं। लंबे अंतरिक्ष मशिन में पानी और हवा स्वयं बनानी पड़ती है। पानी को विभाजित कर ऑक्सीजन प्राप्त करने में उत्प्रेरक का उपयोग होता है। ईंधन बनाने में भी उत्प्रेरक का उपयोग होता है। अच्छा उत्प्रेरक उतनी ही बजिली से अधिक ऑक्सीजन और ईंधन बनाता है। इससे अंतरिक्ष यान का लदा हुआ भार हल्का हो जाता है। AI आधारित प्रतिलोम डिजाइन ऐसे उत्प्रेरकों को जल्दी सामने लाता है।

हाइड्रोजन रॉकेट ईंधन के रूप में भी उपयोग होती है। तरल हाइड्रोजन मजबूत प्रणोदन पैदा करती है। यदि पानी को विभाजित करके हाइड्रोजन पाने की तकनीक विकसित हो, तो ईंधन उत्पादन आसान हो जाता है। इस समय भी उत्प्रेरक प्रतिक्रिया की कुंजी पकड़े रहता है। सस्ते तत्वों से अच्छा उत्प्रेरक बने, तो लागत घटती है। लक्ष्य है कि टिट्रलुम प्लैटिनम का कम उपयोग हो। जनरेटिव AI ऐसे गैर-महंगी धातु उत्प्रेरकों की खोज में ताकत दिखाता है।

6.3 अंतरिक्ष-एयरोस्पेस मशीन धातु और सुपरएलॉय का प्रतिलोम डिजाइन

अंतिम उदाहरण रॉकेट इंजन के लिए मशीन धातु डिजाइन है। हम देखेंगे कि नई मशीन धातु क्यों चाहिए। हम देखेंगे कि जनन मॉडल मशीन धातु की संरचना कैसे खोजता है। आधार के रूप में सत्यापित नवीनतम शोध का उपयोग किया जाएगा।

रॉकेट इंजन को चरम ताप सहना पड़ता है। दहन कक्ष के भीतर तापमान हजारों डिग्री तक गर्म होता है। नोजल तेज गैस से घसिता है। लंबे समय तक नकिल-आधारित सुपरएलॉय (Superalloy) ने यह भूमिका निभाई। सुपरएलॉय ऐसी मशीन धातु है जो ऊंचे तापमान पर भी अपनी ताकत नहीं खोती। लेकिन नकिल सुपरएलॉय की भी तापमान सीमा है। अधिक गर्म वातावरण में वह पघिलती या नरम होती है।

इसके विकल्प के रूप में उच्च-एन्ट्रॉपी मशीन धातु (High-Entropy Alloy) सामने आईं। सामान्य मशीन धातु में एक मुख्य तत्व में थोड़ी मात्रा में दूसरे तत्व मिलाए जाते हैं। उच्च-एन्ट्रॉपी मशीन धातु में कई तत्व लगभग समान मात्रा में मिलाए जाते हैं। इस तरह मिलाने पर संरचना

अप्रत्याशति रूप से स्थिर हो जाती है। उनमें से ऊंचे गलनांक वाले तत्वों से बनी धातु को अपवर्त्य उच्च-एन्ट्रॉपी मशिर् धातु (Refractory HEA) कहा जाता है। यह मशिर् धातु 1100 डिग्री से अधिक वातावरण में नकिल सुपरएलॉय का विकल्प मानी जाती है।

उच्च-एन्ट्रॉपी मशिर् धातु के स्थिर होने का कारण अव्यवस्था में है। कई तत्व समान रूप से मल्लि, तो व्यवस्थाओं की संभावनाएं बढ़ती हैं। ये अनेक संभावनाएं संरचना को थामे रखती हैं। इस गुण को उच्च वन्यासीय अव्यवस्था कहा जाता है। अव्यवस्था ही उलटे व्यवस्था को बचाती है। इसी गुण के कारण यह चरम वातावरण में भी अच्छी तरह टिकती है। रॉकेट नोजल और दहन कक्ष ऐसे टिकाव की मांग करने वाले प्रमुख स्थान हैं।

समस्या यह है कि संयोजनों की संख्या फरि से आकाश के तारों जैसी अधिक है। केवल पांच तत्व मलाने पर भी अनुपातों की संभावनाएं अनगणित हो जाती हैं। उन्हें एक-एक करके बनाकर परखना कठिन है। यहां जनन मॉडल सामने आता है। लक्ष्य गुण तय करने पर वह उसके अनुरूप संरचना उलटी दशा से खोजता है। ताकत और तन्यता मान को शर्त के रूप में दिया जाता है। मॉडल उन मानों को पैदा कर सकने वाले तत्व अनुपात सुझाता है।

2026 में आए कई शोध इस दशा को दिखाते हैं। एक शोध ने मशिर् धातु संरचना बनाने की कई जनन वधियों को व्यवस्थित किया। उसने वैरिशनल ऑटोएनकोडर, जनरेटिव एडवर्सेरियल न्यूरोल नेटवर्क और प्रसार मॉडल को साथ देखा। दूसरे शोध ने साहित्य और डेटा को इकट्ठा कर उच्च ताप उच्च-एन्ट्रॉपी सुपरएलॉय उम्मीदवारों को सीमिति करने का प्रवाह दिखाया। उसने लक्ष्य गुणों के अनुरूप संरचनाएं चुनकर परीक्षण के उम्मीदवार घटाए। दोनों शोध वास्तविकि पुरजे बनाने के चरण में नहीं, बल्कि उम्मीदवार सीमिति करने के चरण में हैं।

मशिर् धातु के गुण केवल संरचना से तय नहीं होते। समान संरचना होने पर भी बनाने की वधिसे गुण बदलते हैं। गर्म करना और ठंडा करना कैसे किया जाता है, इससे सूक्ष्म संरचना बदलती है। सूक्ष्म संरचना क्रिस्टल दानों का आकार और व्यवस्था है। इसलिए मशिर् धातु डिजाइन में संरचना और प्रक्रिया को साथ देखना चाहिए। जनन मॉडल भी इन दोनों को साथ संभालने की दशा में बढ़ रहे हैं। अगले अध्यायों में इस प्रक्रिया की चर्चा और होगी।

लेकिन सावधानी की बात है। अपवर्त्य उच्च-एन्ट्रॉपी मशिर् धातु को अभी कुछ दीवारे पार करनी हैं। कमरे के तापमान पर आसानी से टूटने का गुण अभी बाकी है। ऊंचे तापमान पर ऑक्सीजन से प्रतिक्रिया करके सतह खराब भी हो सकती है। इसलिए प्रयोगशाला के वादे और वास्तविकि पुरजों के बीच दूरी है। जनन मॉडल उम्मीदवारों को सीमिति कर दे, तब भी इन दो दीवारों को प्रयोग से पार करना होगा। कमरे के तापमान की भंगुरता और उच्च ताप ऑक्सीकरण को नयित्ति करना अगला काम है।

6.4 जनन मॉडलों की तुलना और सत्यापन का महत्व

कई जनन मॉडलों की तुलना कैसे की जाए। हम देखेंगे कि उन्हें कनि सूचकों से मापा जाता है। हम देखेंगे कि सत्यापन परणाम से अधिक महत्वपूर्ण क्यों है। यह भी स्पष्ट होगा कि अपुष्ट संख्याओं से सावधान क्यों रहना चाहिए।

जनन मॉडलों की तुलना करते समय कई कसौटियों को साथ देखते हैं। एक कसौटी स्थिरता है, जिसमें देखा जाता है कि बिना क्रिस्टल स्वयं टिकिता है या नहीं। नवीनता भी देखी जाती है। जांचा जाता है कि वह डेटाबेस में न रहा पदार्थ है या नहीं। परमाणु दूरी की उचितता भी मापी जाती है। देखा जाता है कि परिमाणु बहुत पास तो नहीं हैं। सममिति संरक्षण भी देखा जाता है। जांचा जाता है कि क्रिस्टल सममिति बिनी रही या नहीं। अंतमि कसौटी गति है, जिसमें एक उम्मीदवार बनाने में लगने वाला समय भी साथ मापा जाता है।

केवल एक सूचक अच्छा हो, तो मॉडल अच्छा नहीं कहलाता। गति तेज हो पर स्थिरता कम हो, तो उपयोग कम है। सममिति अच्छी रहे पर नवीनता न हो, तो अर्थ कम हो जाता है। इसलिए कई सूचकों का संतुलन देखा जाता है। समस्या के अनुसार महत्वपूर्ण सूचक बदलते हैं। बैटरी सामग्री हो, तो स्थिरता और चालकता पहले आती हैं। यदति तेज खोज जरूरी हो, तो गति पहले आती है।

नष्टिपक्ष तुलना के लिए समान परीक्षा-पत्र चाहिए। क्रिस्टल जनन क्षेत्र में व्यापक रूप से उपयोग होने वाले परीक्षण सेट हैं। MP-20 प्रतनिधि है। यह Materials Project से निकाले गए लगभग बीस हजार क्रिस्टलों का संग्रह है। केवल पेरोव्स्काइट क्रिस्टलों का सेट भी है। सभी मॉडलों की परीक्षा समान सेट से की जाती है। तभी तुलना की जा सकती है कि कौन सा मॉडल बेहतर है। परीक्षा-पत्र अलग हो, तो अंकों को साथ रखकर नहीं देखा जा सकता।

यहां सावधानी की बात है। कई मॉडलों के प्रदर्शन को साथ लिखने वाली संख्याएं अक्सर मूल स्रोत में पुष्टि नहीं होतीं। इसलिए यह पुस्तक असत्यापित तालिकाओं की संख्याओं का उपयोग नहीं करती। अपुष्ट संख्याएं लोगों को गलत दशा में ले जाती हैं।

इसके बजाय हम एक सत्यापित परणाम से समझ बनाते हैं। यह माइक्रोसॉफ्ट (Microsoft) का 2025 में नेचर (Nature) में प्रकाशित जनन मॉडल शोध है। इस मॉडल का नाम मैटरजेन (MatterGen) है। यह मॉडल तत्वों की आवर्त सारणी के व्यापक दायरे में अकार्बनिक पदार्थ बनाता है। उसे लक्ष्य गुणों के अनुरूप सूक्ष्म समायोजित भी किया जा सकता है। शोधपत्र ने बताया कि इस मॉडल के उत्पन्न पदार्थ पुराने मॉडल की तुलना में दोगुनी बार स्थिर और नए निकले। उसने यह भी बताया कि वे ऊर्जा न्यूनतम बंधु के दस गुना अधिक निकट थे।

यह मॉडल कई शर्तों के अनुसार फरि से सीख सकता है। यदविह प्रत्यास्थता मानों के अनुसार सीखे, तो कठोर पदार्थ देता है। यदविह चुंबकीय मानों के अनुसार सीखे, तो चुंबकीय पदार्थ देता है। उसे केवल इच्छति तत्वों का उपयोग करना भी सखाया जा सकता है। यह एक आधार मॉडल को कई लक्ष्यों के अनुसार सुधारने की वधि है। इस वधि को सूक्ष्म समायोजन (Fine-tuning) कहा जाता है। आधार को फरि से नहीं बनाया जाता, केवल लक्ष्य बदलकर लगाया जाता है।

यह शोध प्रयोगात्मक सत्यापन तक आगे बढ़ा। लक्ष्य आयतन प्रत्यास्थता मापांक 200 गीगापास्कल रखा गया और नई पदार्थ संरचना बनाई गई। इस पदार्थ को वास्तव में संश्लेषति कया गया। पर संश्लेषति पदार्थ ऐसा ठोस वलियन था जसिमें परमाणु अव्यवस्थति रूप से मलि हुए थे। शोधकर्ताओं ने नैनो-इंडेंटेशन से यंग मापांक मापा और गणना से प्राप्त मान का उपयोग करके आयतन प्रत्यास्थता मापांक का अनुमान लगाया। इस तरह प्राप्त अनुमानति मान चार बार में अधिकतम 169 गीगापास्कल था, और औसत 158 ± 11 गीगापास्कल था। मापे गए मान और रूपांतरति मान, तथा गणनात्मक संरचना और संश्लेषति संरचना को अलग-अलग पढ़ना चाहिए। फरि भी यह उत्पादन से संश्लेषण तक जुड़ा एक दुर्लभ प्रत्यक्ष प्रमाण है।

पूर्व-प्रकाशन लेखों को संभालते समय और सावधानी चाहिए। इस अध्याय में परिचित कराए गए कई मॉडल पूर्व-प्रकाशन लेख के चरण में हैं। पूर्व-प्रकाशन लेख सहकर्म समीक्षा से पहले का लेख होता है। परिणाम बाद में बदल सकते हैं। इसलिए यह पुस्तक पूर्व-प्रकाशन लेखों को प्रारंभिक शोध बताकर पेश करती है। उत्कृष्ट संख्याएँ भी सत्यापन से पहले निश्चति परिणाम के रूप में नहीं लिखी जाती। यही रवैया पाठक को गलत विश्वास से बचाता है।

अब देखते हैं कि सत्यापन परिणाम से अधिक महत्वपूर्ण क्यों है। जनरेटिव मॉडल अनंत उम्मीदवार बना सकता है। पर केवल बना देने से सब वास्तविक नहीं हो जाते। उन्हें गणना से छँटना पड़ता है। प्रयोग से पुष्टिकरनी पड़ती है। सामग्री प्रतिलोम डिज़ाइन तभी अर्थ रखता है जब उत्पादन, गणना और प्रयोग साथ चलते हैं। एयरोस्पेस सामग्री जैसे सुरक्षा से जुड़े क्षेत्रों में यह सदिधांत और कठोर होना चाहिए। गणनात्मक सत्यापन और प्रयोगात्मक संश्लेषण के बाद ही किसी उम्मीदवार पर भरोसा कया जा सकता है।

सारांश

यह अध्याय सामग्री खोज की दशा उलटने की कहानी था। पुराने तरीके में पहले सामग्री चुनी जाती थी और गुण बाद में मापे जाते थे। नए तरीके में पहले गुण तय कए जाते हैं और सामग्री बाद में खींची जाती है। इस नए तरीके को सामग्री प्रतिलोम डिज़ाइन कहा जाता है। केवल दशा बदलने से खोज की शक्ति बहुत बदल जाती है। ऐसे पदार्थों को रचने का रास्ता खुलता है जो पहले मौजूद नहीं थे।

प्रतिलोम डिज़ाइन का मुख्य पात्र जनरेटिव कृत्रिम बुद्धिमत्ता है। प्रसार मॉडल धुंधले परमाणु समूह से शोर हटाते हुए क्रिस्टल गढ़ता है। इसका सदिधांत चति बनाने वाली AI से मलिता-जुलता है। क्रिस्टल निर्माण अधिक कठिन है। इसका कारण यह है कि जालक, परमाणु स्थिति और परमाणु प्रकार को साथ-साथ मलाना पड़ता है।

क्रिस्टल में सममतिनाम का कठोर नियम होता है। 3-आयामी क्रिस्टल 230 प्रकार के स्पेस ग्रुप में से किसी एक में आता है। शुरुआती मॉडल CDVAE सममतिको सीधे स्थिर नहीं कर पाता था, इसलिए संरचना टूट जाती थी। सममतिको जानने वाला शर्तीय प्रसार मॉडल छोटा बीज बनाता है और उसे सममतिसे फैलाकर इस समस्या को घटाता है। मलिते-जुलते नामों वाले शोधों को मलए बनिा अलग-अलग देखना महत्वपूर्ण है।

गतबढ़ाने के प्रयास भी जारी रहे। फ्लो मैचिंग शोर को थोड़ा-थोड़ा हटाने के बजाय छोटा रास्ता सीखती है। FlowMM और CrystalFlow इसके प्रमुख उदाहरण हैं। ये वक्र स्थान पर जयिडेसकि रेखा के साथ तेजी से क्रिस्टल बनाते हैं। सामग्री खोज में, जहाँ बहुत से उम्मीदवार निकालने होते हैं, यह गतिबहुत काम आती है।

केवल कुछ भाग बदलने की तकनीक भी आगे बढ़ी। इनपेटीग रिक्त स्थान और दोष भरती है। मरिज परमाणु प्रसार परमाणुओं की संख्या को स्वतंत्र रूप से संभालता है। यह ऐसे आभासी स्थान रखता है जो हो भी सकते हैं और नहीं भी, और संख्या स्वयं तय करता है। इससे वास्तविक सामग्री की दोष संरचना बेहतर ढंग से व्यक्त होती है।

सुदृढीकरण अधगिम जनरेटिव मॉडल को अच्छे उम्मीदवारों की ओर ले जाता है। स्थरिता, नवीनता और संश्लेषण की संभावना को पुरस्कार में रखा जाता है। KL नियमितीकरण और अनुभव पुनरावर्तन खोज को स्थरि बनाए रखते हैं। प्रदर्शन को SUN अनुपात और हल के ऊपर ऊर्जा से मापा जाता है।

व्यावहारिक उदाहरण दिखाते हैं कि यह तकनीक केवल कागज की बात नहीं है। हैलाइड ठोस इलेक्ट्रोलाइट डिज़ाइन में डेटा विश्लेषण और डिज़ाइन एक-दूसरे से जुड़े। उच्च-एन्ट्रॉपी उत्प्रेरक डिज़ाइन में रोबोट प्रयोग और जनरेटिव मॉडल जुड़कर समय को बहुत कम कर गए। माइक्रोसॉफ्ट (Microsoft) के जनरेटिव मॉडल ने डिज़ाइन कए गए पदार्थ को वास्तव में संश्लेषति कया और उसके गुणों की पुष्टिकी।

इस अध्याय से गुजरने वाला वचिर एक ही है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता वसित पदार्थ क्षेत्र में हमारी ओर से चलने वाला मार्गदर्शक है। यह कुछ दनों में उन रास्तों को देख लेती है जहाँ मनुष्य जीवन भर नहीं जा सकता। यह अच्छे लगने वाले उम्मीदवार चुनकर सामने रखती है। पर उन उम्मीदवारों पर भरोसा करना है या नहीं, यह गणना और प्रयोग तय करते हैं। मार्गदर्शक रास्ता संकरा करता है और मनुष्य अंतमि दरवाजा खोलता है।

अंत में सत्यापन के सदिधांत को फरि देखते हैं। जनरेटिवि मॉडल अनंत उम्मीदवार नकिलता है। पर केवल बना देने से सब वास्तविकि नहीं हो जाते। अपुष्ट संख्याएँ नहीं लखी जाती। गणना से छाँटना और प्रयोग से पुष्टिकरना जरूरी है। सामग्री प्रतलिम डज़ाइन तभी अर्थ रखता है जब उत्पादन, गणना और प्रयोग साथ चलते हैं। रॉकेट और अंतरिक्ष अन्वेषण जैसे सुरक्षा से जुड़े क्षेत्रों में यह सदिधांत और कठोर होना चाहिए। AI द्वारा खींची गई संरचना अंतमि उत्तर नहीं, बल्कि अच्छी तरह चुना गया प्रयोग उम्मीदवार है।

संबंधति आधार-सामग्री

- Xie, T., Fu, X., Ganea, O. E., Barzilay, R., & Jaakkola, T. (2022). Crystal diffusion variational autoencoder for periodic material generation. *International Conference on Learning Representations*. <https://arxiv.org/abs/2110.06197>
- Jiao, R., Huang, W., Lin, P., Han, J., Chen, P., Lu, Y., & Liu, Y. (2023). Crystal structure prediction by joint equivariant diffusion. *Advances in Neural Information Processing Systems*. <https://openreview.net/forum?id=DNdN26m2Jk>
- Merchant, A., Batzner, S., Schoenholz, S. S., Aykol, M., Cheon, G., & Cubuk, E. D. (2023). Scaling deep learning for materials discovery. *Nature*, 624, 80-85. <https://doi.org/10.1038/s41586-023-06735-9>
- Zeni, C., Pinsler, R., Zugner, D., Fowler, A., Horton, M., Fu, X., et al. (2025). A generative model for inorganic materials design. *Nature*, 639, 624-632. <https://doi.org/10.1038/s41586-025-08628-5>
- Levy, D., Panigrahi, S. S., Kaba, S. O., Zhu, Q., Lee, K. L. K., Galkin, M., Miret, S., & Ravanbakhsh, S. (2025). SymmCD: Symmetry-preserving crystal generation with diffusion models. *International Conference on Learning Representations*. <https://arxiv.org/abs/2502.03638>
- Ishii, T., Hisama, K., & Shinohara, K. (2026). Symmetry-aware conditional generation of crystal structures using diffusion models. *arXiv*. <https://arxiv.org/abs/2601.08115>
- Okhotin, A., Nakhodnov, M., Kazeev, N., Lazarev, M., Ustyuzhanin, A. E., & Vetrov, D. (2025). MiAD: Mirage atom diffusion for de novo crystal generation. *arXiv*. <https://arxiv.org/abs/2511.14426>
- Chen, J., Guo, J., Fako, E., & Schwaller, P. (2025). Accelerating inverse materials design using generative diffusion models with reinforcement learning. *arXiv*. <https://arxiv.org/abs/2511.03112>
- Miller, B. K., Chen, R. T. Q., Sriram, A., & Wood, B. M. (2024). FlowMM: Generating materials with Riemannian flow matching. *Proceedings of Machine Learning Research*, 235. <https://arxiv.org/abs/2406.04713>
- Luo, X., Wang, Z., Wang, Q., Shao, X., Lv, J., Wang, L., Wang, Y., & Ma, Y. (2025). CrystalFlow: A flow-based generative model for crystalline materials. *Nature Communications*, 16, 9267. <https://doi.org/10.1038/s41467-025-64364-4>
- Lo, A., Mucko, L., Cheng, A. H., Cai, A., Price, A. J. A., & Matusik, W. (2026). Fast organic crystal structure prediction with unit cell flow matching. *arXiv*. <https://arxiv.org/abs/2606.03199>
- Lipman, Y., Chen, R. T. Q., Ben-Hamu, H., Nicklas, M., & Le, M. (2022). Flow matching for generative modeling. *International Conference on Learning Representations*. <https://openreview.net/forum?id=PqvMRDCJT9t>
- Hoogeboom, E., Satorras, V. G., Vignac, C., & Welling, M. (2022). Equivariant diffusion for molecule generation in 3D. *International Conference on Machine Learning*, 8867-8887. <https://arxiv.org/abs/2203.17003>
- Schulman, J., Wolski, F., Dhariwal, P., Radford, A., & Klimov, O. (2017). Proximal policy optimization algorithms. *arXiv*. <https://arxiv.org/abs/1707.06347>
- Metni, H., Ruple, L., Walters, L. N., Torresi, L., Teufel, J., Schopmans, H., Ceder, G., & Friederich, P. (2026). Generative models for crystalline materials. *Advanced Materials*, 38(18), e23620. <https://doi.org/10.1002/adma.202523620>
- Mal, S., Ahmed, N., Jami, J., Mishra, S., & Sen, P. (2025). DiffCrysGen: A generative diffusion model for accelerated design of inorganic crystalline materials. *arXiv:2510.12329*. <https://arxiv.org/abs/2510.12329>
- Okuda, I., Takahara, I., & Mizoguchi, T. (2026). Inverse materials design via joint generation of crystal structures and local electronic descriptors. *arXiv:2605.01286*. <https://arxiv.org/abs/2605.01286>
- Yang, K., & Schwalbe-Koda, D. (2025). A generative diffusion model for amorphous materials. *npj Computational Materials*, 12(1), 29. <https://doi.org/10.1038/s41524-025-01901-1>
- Han, X.-Q., Guo, P.-J., Gao, Z.-F., Sun, H., & Lu, Z.-Y. (2025). InvDesFlow-AL: Active learning-based workflow for inverse design of functional materials. *npj Computational Materials*, 11(1), 364. <https://doi.org/10.1038/s41524-025-01830-z>

- Cheng, M., Luo, W., Tang, H., Yu, B., Cheng, Y., Xie, W., Li, J., Kulik, H. J., & Li, M. (2026). Enhancing materials discovery with valence-constrained design in generative modeling. *Nature Computational Science*.
<https://doi.org/10.1038/s43588-026-01037-2>
- Choong, L. Y. A., Chen, Z., & Ng, M.-F. (2025). Discovery of effective halide solid electrolytes for solid-state rechargeable batteries via machine learning and DFT calculations. *ACS Applied Energy Materials*, 9(1), 507-520.
<https://doi.org/10.1021/acsaem.5c03277>
- Li, D., Lin, Z., Luo, F., Xiao, C., Dai, Z., Ye, Z., Wang, Q., Guo, Y.-G., & Yang, C. (2026). Data-driven chemical feature extraction and material design for halide solid-state electrolytes. *eScience*, 100590.
<https://doi.org/10.1016/j.esci.2026.100590>
- Zhou, D., Yang, R., Jia, Z., Cai, Y., Zhao, L., Guo, L., Ye, G., Wang, S., Chen, L., Liu, D., Smith, P. E. S., Huang, Y., Zhu, Q., & Jiang, J. (2026). A practical inverse design approach for high-entropy catalysts using generative AI. *Nature Synthesis*, 5(5), 730-739. <https://doi.org/10.1038/s44160-025-00983-5>
- Li, C., Xian, Y., Zhou, Y., Ding, X., Sun, J., & Xue, D. (2026). Generative design for alloys: Harnessing generative models for faster discovery. *Advanced Materials*, 38(29), e20478. <https://doi.org/10.1002/adma.202520478>
- Rousseau, F., Belmonte, T., Sur, F., & Nominé, A. (2026). Inverse design of high-entropy superalloys using machine learning and generative artificial intelligence. *Materials & Design*, 266, 116097.
<https://doi.org/10.1016/j.matdes.2026.116097>
- Du, H., Hui, J., Zhang, L., & Wang, H. (2025). Universal machine learning interatomic potentials are ready for solid ion conductors. *arXiv:2502.09970*. <https://arxiv.org/abs/2502.09970>

अध्याय 3. स्व-चालति प्रयोगशाला और वैज्ञानिक मल्टी-एजेंट प्रणाली

भूमिका

घर में रोटी पकाने का दृश्य सोचकर देखें। आटे और पानी की मात्रा तय की जाती है। आटा गूंथा जाता है और ओवन का तापमान मिलाया जाता है। पक चुकी रोटी काटकर उसका स्वाद देखा जाता है। अगर वह बहुत सख्त हो, तो पानी बढ़ाया जाता है और तापमान घटाया जाता है। अगली बार कुछ बेहतर रोटी बनती है। इस तरह सामग्री तय करने, बनाने, स्वाद देखने और सुधारने का काम कई बार दोहराया जाता है।

नई सामग्री खोजने का शोध भी इससे मिला-जुलता है। शोधकर्ता घटकों का अनुपात तय करता है। पाउडर मिलाता है और उसे ऊंचे तापमान पर पकाता है। बनी हुई सामग्री की संरचना और गुण मापता है। परणाम खराब हो, तो शर्तें बदलता है। यह प्रक्रिया सैकड़ों बार दोहरानी पड़ती है, तब जाकर एक अच्छी सामग्री मिलती है।

समस्या समय की है। अगर मनुष्य यह काम हाथ से करे, तो दैनिक केवल कुछ ही बार कर सकता है। रात में प्रयोग रुक जाता है। घटकों को थोड़ा-थोड़ा बदलते हुए बड़े क्षेत्र में खोज करने में कई वर्ष लगते हैं। रॉकेट में इस्तेमाल होने वाली सामग्री को कठिन परिस्थितियों सहनी पड़ती है। इसलिए उम्मीदवार पदार्थों की संख्या बहुत अधिक होती है और उन्हें केवल मनुष्य के हाथों से पूरा परखना कठिन है।

स्व-चालति प्रयोगशाला (Self-Driving Laboratory) वह शोधशाला है जो इस दोहराव को मशीनों को सौंपती है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता (AI) अगली परीक्षा की शर्तें चुनती है। रोबोट पाउडर तौलता है, मिलाता है और पकाता है। विश्लेषण उपकरण परणाम मापता है। वह परणाम फिर कृत्रिम बुद्धिमत्ता तक लौटता है। मनुष्य हर बार निर्देश न दे, तब भी प्रयोग अपने आप आगे बढ़ता है। जैसे रोबोट वैक्यूम क्लीनर अकेले सफाई करता है, वैसे ही प्रयोगशाला पूरी रात अपने आप चलती रहती है।

जिस संरचना में परणाम फिर अगली पसंद तक लौटता है, उसे बंद-लूप (Closed-loop) कहा जाता है। बंद-लूप का अर्थ है अंगूठी की तरह बंद परिपथ। प्रयोग, मापन, सीखना और अगला प्रयोग बना टूटे घूमते रहते हैं। यह अध्याय बताता है कि यह स्व-चालति प्रयोगशाला कैसे चलती है। यह देखता है कि कृत्रिम बुद्धिमत्ता अगला प्रयोग कैसे चुनती है। यह देखता है कि मशीन शोधपत्रों के वाक्यों को कैसे पढ़ती है। यह समझता है कि रोबोट और कृत्रिम बुद्धिमत्ता सुरक्षा ढंग से कैसे बातचीत करते हैं। अंत में यह दुनिया के अलग-अलग स्थानों की वास्तविक स्व-चालति प्रयोगशालाओं के उदाहरण देखता है।

यह भी देखना जरूरी है कि स्व-चालति प्रयोगशाला अभी क्यों उभर रही है। हाल की कृत्रिम बुद्धिमत्ता सामग्री के गुणों का तेजी से अनुमान लगाती है। गणना से एक दिन में हजारों अच्छे उम्मीदवार निकाले जाते हैं। लेकिन उन्हें सचमुच बनाकर जांचने की गतिधीमी है। अनुमान तेज हो गए हैं, पर सत्यापन साथ नहीं दे पा रहा है। इस अंतर को भरने वाली चीज स्व-चालति प्रयोगशाला है। गणना से निकले उम्मीदवारों को रोबोट जल्दी बनाकर जांचता है। यह अनुमान और सत्यापन की गति मिलाने वाला पुल है।

इस अध्याय में आने वाली कई प्रणालियाँ अभी प्रारंभिक शोध की अवस्था में हैं। कुछ ऐसे प्रीप्रिंट भी हैं जो अभी-अभी सम्मेलन में प्रस्तुत हुए हैं। प्रीप्रिंट वह प्रारंभिक शोध है जो सहकर्मी समीक्षा से नहीं गुज़रा है। इसलिए यह अध्याय प्रदर्शन के आंकड़ों का दावा करने के बजाय सिद्धांत और सीमाओं को साथ देखता है। स्व-चालति प्रयोगशाला का लक्ष्य तेज़ प्रयोग नहीं, बल्कि भरोसेमंद प्रयोग है।

3.1 स्व-चालति प्रयोगशाला कनि भागों से चलती है

इस खंड में क्या देखा जाएगा

यह खंड देखता है कि पूरी स्व-चालति प्रयोगशाला कनि भागों से बनी होती है। मोटे तौर पर चार भाग हैं। अगला प्रयोग तय करने वाला मसतषिक, वास्तव में बनाने वाला हाथ, परणाम मापने वाली आंख और सीखी हुई बात को अद्यतन करने वाली स्मृति। ये चारों भाग अंगूठी की तरह जुड़े रहते हैं और प्रयोग के परणाम को अगले प्रयोग तक पहुंचाते हुए चलते हैं।

पहले बंद-लूप शब्द का अर्थ फिर से समझते हैं। उसके बाद हर भाग का काम एक-एक करके देखते हैं। अंत में देखते हैं कि रॉकेट सामग्री अनुसंधान में यह संरचना क्यों जरूरी है।

स्व-चालति प्रयोगशाला चार भागों के मेल से चलती है। योजना स्तर में कृत्रिम बुद्धिमत्ता अगली बार परखे जाने वाले घटक और प्रक्रिया की शर्तें चुनती है। यहां प्रक्रिया की शर्तों से मतलब पकाने का तापमान, रोके रखने का समय, गरम करने की गति और वातावरण गैस से है। क्रियान्वयन स्तर में रोबोट पाउडर तौलता है, मिलाता है और दबाकर दाने बनाता है। फिर उसे वदियुत भट्ठी में डालकर पकाता है। मापन स्तर में एक्स-रे विवर्तन उपकरण जैसे औजार बनी हुई सामग्री की संरचना मापते हैं। सीखने के स्तर में मापन परणाम कृत्रिम बुद्धिमत्ता मॉडल में जाता है और ज्ञान को अद्यतन करता है।

इन चार भागों को जोड़ने वाली चीज सूचना का प्रवाह है। योजना स्तर क्रियान्वयन स्तर को कार्य-विवरण भेजता है। कार्य-विवरण वह निर्देश-पत्र है जो बताता है कि क्या, कतिना और कैसे करना है। क्रियान्वयन स्तर बने हुए नमूने को मापन स्तर तक भेजता है। मापन स्तर फेज शुद्धता और लैटसि स्थिरता जैसे मान सीखने के स्तर को भेजता है। फेज शुद्धता का अर्थ है कि वांछित क्रिस्टल कतिना शुद्ध बना है। सीखने का स्तर उन मानों से अगली योजना को सुधारता है। इस तरह सूचना का एक चक्कर पूरा हो जाए, तो एक प्रयोग समाप्त होता है।

बंद-लूप की शक्ति तेज दोहराव में है। एक प्रयोग असफल हो जाए, तब भी डेटा बचता है। असफल शर्तें भी बताती हैं कि क्या काम नहीं करता। कृत्रिम बुद्धिमत्ता सफलता और असफलता दोनों से सीखती है। इसलिए अगली शर्तें धीरे-धीरे बेहतर होती हैं। मनुष्य कुछ दिनों में एक बार केवल बड़ी दशा देखता है, और बारीक दोहराव मशीन संभालती है।

अब देखते हैं कि रॉकेट सामग्री में यह संरचना क्यों जरूरी है। रॉकेट नोजल और दहन कक्ष चरम परस्थितियां सहते हैं। तापमान कई हजार डिग्री तक बढ़ता है। दबाव और कंपन भी बढ़े होते हैं। ऐसी जगह इस्तेमाल होने वाली सामग्री की शर्तें बहुत कठिन होती हैं। घटक थोड़ा भी बदले, तो गुण बहुत बदल जाते हैं। इसलिए परखे जाने वाले उम्मीदवारों की संख्या दसियों हजार होती है। मनुष्य के हाथों से इतने बड़े क्षेत्र की पूरी खोज नहीं हो सकती। स्व-चालित प्रयोगशाला इस बड़े क्षेत्र को तेजी से छोटा कर सकती है।

2026 में, स्व-चालित प्रयोगशाला को एक कदम और आगे ले जाने वाले शोध जारी रहे। रॉयल सोसाइटी ऑफ केमिस्ट्री (Royal Society of Chemistry) ने 'स्व-चालित प्रयोगशाला 2.0' की अवधारणा को रेखांकित किया। पहली पीढ़ी की स्व-चालित प्रयोगशाला ने केवल एक निर्धारित समस्या को हल किया था। अगली पीढ़ी विभिन्न प्रकार के उपकरणों और समस्याओं को लचीले ढंग से संभालने का प्रयास करती है। स्व-चालित प्रयोगशालाओं का व्यापक अवलोकन करने वाला 2025 का एक व्यापक शोध पत्र भी प्रकाशित हुआ। यह शोध पत्र तकनीक की परिपक्वता और अभी भी बची हुई बाधाओं दोनों को इंगित करता है। अमेरिकन केमिकल सोसाइटी (American Chemical Society) का मीडिया बताता है कि स्व-चालित प्रयोगशालाएं रसायनज्ञों के काम करने के तरीके को बदल रही हैं।

इस संरचना की सीमाएं भी साफ हैं। उपकरण जुटाने में बहुत पैसा लगता है। रोबोट और विश्लेषण उपकरणों को जोड़ना भी कठिन है। पाउडर को ठीक-ठीक तौलना भी आसान नहीं है। असफल प्रयोग को अपने आप पहचानना भी कठिन है। इसलिए आज की स्व-चालित प्रयोगशाला केवल कुछ खास सामग्री समूहों पर अच्छी तरह फिट होती है। अभी ऐसी सर्वशक्तिमान प्रयोगशाला नहीं है जो हर सामग्री को संभाल सके। इस अध्याय के बाकी खंड देखते हैं कि इन बाधाओं को एक-एक करके कैसे पार किया जाता है।

3.1.1 अगला प्रयोग चुनने वाला बेज़ियन सक्रिय अधिगम

यह उपखंड स्व-चालित प्रयोगशाला के मस्तष्क से जुड़े भाग को देखता है। मुख्य बात यह है कि कृत्रिम बुद्धिमत्ता अगला प्रयोग कैसे चुनती है। यहां इस्तेमाल होने वाली विधि बेज़ियन सक्रिय अधिगम है। यह विधि क्या है और प्रयोगों की संख्या क्यों घटाती है, इसे आसान भाषा में समझाया जाता है।

परकल्पना यह विचार है कि अगला प्रयोग क्यों अच्छा होगा। अच्छी स्व-चालित प्रयोगशाला अच्छी परकल्पना बनाती है। कोई भी शर्त अंधाधुंध परखने से समय बर्बाद होता है। जहां संभावना हो, वहां चुनकर परीक्षण करना चाहिए। बेज़ियन सक्रिय अधिगम (Bayesian Active Learning) इस चुनाव में मदद करने वाली विधि है। सक्रिय अधिगम का अर्थ है कि मशीन सीखने के लिए डेटा खुद चुनती है।

यह विधि पहले एक प्रतिनिधि मॉडल (Surrogate Model) बनाती है। प्रतिनिधि मॉडल महंगे प्रयोग की नकल करने वाला छोटा गणनात्मक मॉडल है। अब तक मल्लि प्रयोग परिणामों से यह मॉडल बनाया जाता है। प्रतिनिधि मॉडल अभी न परखी गई शर्तों के गुणों का अनुमान लगाता है। अनुमान में दो मान साथ आते हैं। एक अपेक्षित प्रदर्शन है। दूसरा यह है कि वह अनुमान कतिना अनिश्चित है।

इन दोनों मानों को साथ देखना ही मुख्य बात है। जहां अपेक्षित प्रदर्शन ऊंचा हो, वहां परीक्षण का मूल्य है। जहां अनिश्चितता बड़ी हो, वहां भी परीक्षण का मूल्य है। क्योंकि किम ज्ञात जगह में अप्रत्याशित अच्छी सामग्री छिपी हो सकती है। केवल प्रदर्शन के पीछे जाने पर पहले से ज्ञात जगहों के आसपास ही चक्कर लगते हैं। केवल अनिश्चितता के पीछे जाने पर बेकार जगहों में भटकना पड़ता है। अच्छी विधि इन दोनों प्रवृत्तियों का संतुलन बनाती है। इसे अन्वेषण और उपयोग का संतुलन कहा जाता है। यहां अन्वेषण का अर्थ अज्ञात स्थानों को देखना है, और उपयोग का अर्थ ज्ञात स्थानों को गहराई से खोजना है।

इस संतुलन को संख्याओं में मापना अधिग्रहण फलन (Acquisition Function) कहलाता है। अधिग्रहण फलन प्रत्येक उम्मीदवार स्थिति को अंक देता है। जब अंकों के उच्च क्रम में पंक्तिबद्ध किया जाता है, तो सबसे आगे आने वाला विकल्प अगला प्रयोग बन जाता है। एक प्रमुख अधिग्रहण फलन अपेक्षित सुधार (Expected Improvement) है। अपेक्षित सुधार यह मापता है कि अगला प्रयोग अब तक के सर्वश्रेष्ठ परिणाम से कतिना बेहतर होगा। एक अन्य विधि ऊपरी विश्वास सीमा (Upper Confidence Bound) है। यह विधि उच्च प्रदर्शन और अज्ञात क्षेत्र दोनों पर एक साथ विचार करने देती है। स्व-चालित प्रयोगशाला इन अंकों के आधार पर अगले घटक, तापमान और समय को निर्धारित करती है।

रॉकेट सामग्री में यह वधि कियों अहम है, यह देखते हैं। अतः-उच्च तापमान सरिमकि या वशिष मशिर् धातु में हर प्रयोग पर बड़ा खर्च आता है। महंगे कच्चे पदार्थ लगते हैं और लंबे समय तक पकाना पड़ता है। इसलिए प्रयोगों की संख्या घटाना ही धन और समय बचाना है। बेजियिन सक्रिय अधगिम केवल संभावनाशील शर्तों को चुनकर परखता है। अंधाधुंध सभी परीक्षण करने की तुलना में प्रयोगों की संख्या बहुत घट जाती है। कुछ स्व-चालित प्रयोगशालाओं ने बताया है कि ज़रूरी प्रयोगों की संख्या कई दर्जन गुना घट गई।

वास्तविक उदाहरणों में इसका प्रभाव दखिता है। 2026 में एक शोध दल ने पतली फ़िल्म को स्वचालित रूप से उगाने वाली प्रयोगशाला बनाई। पतली फ़िल्म परमाणुओं को एक-एक परत जमाकर बनाई जाती है। इस प्रयोगशाला ने इलेक्ट्रॉन विवर्तन पैटर्न को रियल-टाइम कैमरे से पढ़ा। विवर्तन पैटर्न संकेत देता है कि परमाणु ठीक से जम रहे हैं या नहीं। कृत्रिम बुद्धिमत्ता ने इस पैटर्न को देखते हुए अगली शर्तें चुनीं। परिणामस्वरूप ज़रूरी प्रयोगों की संख्या बहुत घट गई। शोधकर्ताओं ने बताया कि शर्तों को एक-एक करके पूरा छानने की तुलना में यह संख्या तीस गुना से अधिक घटी। अच्छी शर्तें कहीं अधिक जल्दी मिलीं। यह शोध भी प्रारंभिक अवस्था में है, पर दशा अच्छी तरह दखिता है।

2026 में इस वधिको स्व-चालित प्रयोगशाला के अनुरूप सुधारने पर शोध सक्रिय रहा। एक प्रीप्रिंट ने स्व-चालित सामग्री प्रयोगशाला के लिए बेजियिन अनुकूलन को व्यवस्थित किया। वह एल्गोरिदम से वास्तविक प्रयोग प्रवाह तक जोड़कर समझाता है। दूसरे प्रीप्रिंट ने खोज क्षेत्र को अपने आप छोटा करने की वधि दी। उसने सक्रिय अधगिम से उम्मीदवार क्षेत्र को लगभग आधा घटाया, फरि भी अच्छे हलों का अधिकांश भाग बचाए रखा। ऐसा करने से अच्छी सामग्री जल्दी मिलती है। प्रयोगात्मक विज्ञान के लिए बेजियिन अनुकूलन की व्यावहारिक मार्गदर्शिका भी 2026 में आई।

इस वधिकी भी सीमाएं हैं। प्रतनिधि मॉडल के पास शुरू में डेटा कम होता है, इसलिए उसका अनुमान खुरदरा होता है। पहले कुछ प्रयोग गलत दशा पकड़ सकते हैं। अगर घटक-क्षेत्र बहुत बड़ा हो, तो गणना की मात्रा बढ़ जाती है। मापन में शोर अधिक हो, तो अनुमान डगमगा जाता है। इसलिए मनुष्य प्रतनिधि मॉडल के अनुमान पर ज्यों का त्यों भरोसा नहीं करता। वह अनुमान को संदर्भ के रूप में लेता है, पर वास्तविक मापन से हमेशा पुष्टि करता है। स्व-चालित प्रयोगशाला में भी मनुष्य की निगरानी बनी रहती है।

3.2 शोधपत्रों में लखी संश्लेषण वधि निकालकर सुरक्षति योजना में बदलना

इस खंड में क्या देखा जाएगा

यह खंड दो बातों को देखता है। एक है शोधपत्रों में लखी संश्लेषण वधिको मशीन से पढ़वाना। दूसरी है उस वधिको ऐसी योजना में बदलना जसि रोबोट सुरक्षति रूप से चला सके।

मनुष्य शोधपत्र पढ़कर प्रयोग का क्रम अपने मन में बना लेता है। मशीन ऐसा नहीं कर सकती। इसलिए वाक्यों को ऐसे रूप में बदलना पड़ता है जसि मशीन संभाल सके। यह खंड उस अनुवाद प्रक्रिया और सुरक्षति योजना को देखता है।

शोधपत्रों में संश्लेषण वधि वाक्यों में लखी होती है। कौन सा पाउंडर कतिनी मात्रा में मिलाना है, यह लखा होता है। कतिने डगिरी पर कतिने घंटे पकाना है, यह लखा होता है। कसि गैस में उपचार करना है, यह लखा होता है। दशकों से जमा शोधपत्रों में ऐसी लाखों वधियां हैं। यह ज्ञान नई सामग्री अनुसंधान की बड़ी पूंजी है। लेकिन इसका अधिकांश भाग मनुष्य की भाषा में बखिरा हुआ है।

समस्या यह है कि ये वाक्य हर व्यक्ति में अलग होते हैं। कोई शोधपत्र लखिता है कि रात भर पकाया गया। कोई शोधपत्र केवल इतना लखिता है कि ऊंचे तापमान पर उपचार किया गया। रात भर कतिने घंटे है, या ऊंचा तापमान कतिने डगिरी है, यह ठीक-ठीक नहीं लखा होता। मनुष्य अनुभव से यह खाली जगह भरता है। मशीन ऐसा नहीं कर सकती। इसलिए बखिरे वाक्यों को सटीक संख्याओं में बदलना ज़रूरी है।

रॉकेट सामग्री अनुसंधान में यह काम मूल्यवान है। अतः-उच्च तापमान सरिमकि और वशिष मशिर् धातुओं की संश्लेषण वधियां पुराने शोधपत्रों में बखिरी हुई हैं। मनुष्य उन्हें पूरा पढ़कर व्यवस्थित करे, तो बहुत समय लगेगा। अगर मशीन वाक्यों को अपने आप निकालकर व्यवस्थित करे, तो बहुत समय बचता है। स्व-चालित प्रयोगशाला इस तरह जुटाई गई वधियों को तुरंत रोबोट निर्देशों में बदलती है और शोधपत्र से प्रयोग तक की दूरी घटाती है।

यदि यह ज्ञान बखिरा रहे, तो दोहरावाला शोध पैदा होता है। कोई दूसरा शोधकर्ता पहले से असफल शर्तों को फरि परखता है। पहले से सफल वधिनि जानने के कारण शुरू से फरि खोजता है। शोधपत्रों में लखी वधियों को एक जगह जमा करने से ऐसी बर्बादी घटती है। मनुष्य के लिए लाखों शोधपत्र पूरा पढ़ना कठिन है। इसलिए मशीन से वाक्य निकलवाकर उन्हें व्यवस्थित करना मूल्यवान है। अच्छी तरह व्यवस्थित वधि स्व-चालित प्रयोगशाला का अच्छा आरंभ बढि बनती है।

यहां दो चरण हैं। एक है वाक्य से वधि निकालना। यह काम बड़ा भाषा मॉडल (Large Language Model) करता है। बड़ा भाषा मॉडल वह कृत्रिम बुद्धिमत्ता है जो मनुष्य के लेखन को सीखती और संभालती है। दूसरा है निकाली गई वधिको सुरक्षति योजना में बदलना। यह काम योजना भाषा करती है। अगले दो उपखंडों में हर चरण को विस्तार से देखते हैं।

3.2.1 शोध पत्रों से संश्लेषण योजना बनाने वाला भाषा मॉडल (MSP-LLM)

यह उपखंड शोधपत्रों से संश्लेषण वधिनिकालने की पद्धति पर चर्चा करता है। प्रतिनिधि उदाहरण के रूप में MSP-LLM अध्ययन को देखते हैं। यह देखते हैं कि यह अध्ययन किस समस्या को हल करना चाहता है और कनि चरणों में आगे बढ़ता है।

MSP-LLM सामग्री संश्लेषण योजना बनाने पर आधारित एक बड़ा भाषा मॉडल अध्ययन है। इसका नाम पूर्ण सामग्री संश्लेषण योजना के लिए एकीकृत बड़े भाषा मॉडल फ्रेमवर्क शीर्षक से आया है। यह 2026 में प्रकाशित किया गया प्रारंभिक अध्ययन है। शोधकर्ता नो ही-उंग, ना क्यंग-सू, ली नाम-क्यंग और पार्क चान-यंग हैं। यह अध्ययन एक सम्मेलन में प्रस्तुत प्रीप्रिंट शोधपत्र है। इसलिए इसे क्षेत्र का मानक नहीं, बल्कि एक अग्रिम प्रयास माना जाता है।

यह अध्ययन जिस समस्या को हल करता है, वह संश्लेषण योजना है। संश्लेषण योजना लक्ष्य सामग्री बनाने की पूरी क्रम-व्यवस्था तैयार करने का काम है। यह काम दो छोटी समस्याओं में बँटता है। एक है पूर्वद्रव्य का अनुमान। पूर्वद्रव्य वह कच्चा माल है जिससे लक्ष्य सामग्री बनाने के लिए शुरुआत में डाला जाता है। दूसरी है संश्लेषण क्रिया का अनुमान। संश्लेषण क्रिया मलाने, पकाने और ठंडा करने जैसी क्रियाओं का क्रम है। दोनों समस्याएँ साथ हल हो तभी पूरी योजना बनती है।

MSP-LLM इन दोनों समस्याओं को एक ही प्रवाह में जोड़ता है। पहले यह तय करता है कि लक्ष्य सामग्री किस प्रकार की है। यह प्रकार बीच का नरिण्य मानदंड बनाता है। उसके बाद उस प्रकार के अनुकूल पूर्वद्रव्य चुने जाते हैं। अंत में उन पूर्वद्रव्यों के अनुकूल क्रियाओं का क्रम बनाया जाता है। इस तरह प्रकार से कच्चे माल तक और कच्चे माल से क्रम तक जाने वाली श्रृंखला बनती है। श्रृंखला से जोड़ने पर रासायनिक रूप से आगे-पीछे मेल खाने वाली योजना बनती है।

इस प्रवाह को एक आसान उदाहरण से देखते हैं। कौन-सा व्यंजन बनाना है, यह तय करना लक्ष्य सामग्री का प्रकार तय करने जैसा है। यह मानो कमिची स्ट्यू बनाने का नरिण्य है। उसके बाद क्या खरीदना है, यह तय करना पूर्वद्रव्य अनुमान है। यह मानो कमिची, सूर का मांस और टोफू चुनना है। अंत में किस क्रम में पकाना है, यह तय करना क्रिया अनुमान है। यह मानो भूनने, पानी डालने और उबालने का क्रम बनाना है। MSP-LLM इन तीन चरणों को जोड़कर योजना पूरी करता है।

रॉकेट सामग्री में ऐसी स्वचालित योजना क्यों मूल्यवान है, इसे देखते हैं। नई मशिन धातु या सरिमिक बनाना हो तो कच्चा माल चुनना ही कठिन होता है। लक्ष्य समान हो तब भी कच्चा माल बदलने से परिणाम बदल जाता है। पकाने का क्रम बदलने से भी परिणाम बदल जाता है। मनुष्य को इन सभी संयोजनों पर विचार करना हो तो बहुत समय लगता है। स्वचालित योजनाकार शोधपत्रों के ज्ञान के आधार पर अच्छा आरंभिक बटु जल्दी देता है। स्व-चालित प्रयोगशाला इसी आरंभिक बटु से प्रयोग शुरू कर सकती है।

इस वधि की सीमाएँ भी स्पष्ट हैं। बड़ा भाषा मॉडल कभी-कभी ऐसी बातें गढ़ देता है जो मौजूद नहीं होतीं। इसे हैलुसिनेशन कहा जाता है। गढ़े हुए कच्चे माल या शर्तों पर सीधे प्रयोग करने से संसाधन नष्ट होते हैं। यह खतरनाक संयोजन भी दे सकता है। इसलिए निकाली गई योजना की जाँच मनुष्य या किसी दूसरे सत्यापन उपकरण से अनिवार्य रूप से की जाती है। पहले यह देखा जाता है कि वह रासायनिक नियमों से मेल खाती है या नहीं और सुरक्षित है या नहीं। स्वचालित योजना मनुष्य की सहायता करने का उपकरण है, मनुष्य को हटाने का उपकरण नहीं है।

3.2.2 योजना भाषा से रोबोट की दुर्घटनाओं को रोकना (PDDL)

यह उपखंड निकाली गई संश्लेषण वधिको सुरक्षित रोबोट योजना में बदलने का काम देखता है। यहाँ इस्तेमाल होने वाला उपकरण योजना भाषा PDDL है। यह भाषा रोबोट दुर्घटना को कैसे रोकती है, इसे आसान शब्दों में समझते हैं।

प्रयोग योजना केवल क्रम-सूची नहीं है। हर क्रिया के लिए पहले से पूरी होनी वाली शर्तें होती हैं। वदियुत भट्टी खाली हो तभी नमूना डाला जाता है। वदियुत भट्टी ठंडी हो तभी नमूना निकाला जाता है। पाउडर का वजन पूरा हो तभी मशिरण किया जाता है। ऐसी आगे-पीछे की शर्तें तोड़ी जाएँ तो दुर्घटना होती है। यदि रोबोट गर्म वदियुत भट्टी का दरवाजा मनमाने ढंग से खोल दे तो खतरा होता है।

PDDL (Planning Domain Definition Language) ऐसी योजनाओं को लिखने की एक भाषा है। इसका अर्थ योजना डोमेन परिभाषा भाषा है। यह भाषा प्रत्येक क्रिया के लिए दो बातें लिखती है। पहली है पूर्व-शर्त। यह लिखती है कि इस क्रिया को करने से पहले क्या सत्य होना चाहिए। दूसरी है निष्पादन प्रभाव। यह लिखती है कि इस क्रिया को करने पर क्या बदलता है। उदाहरण के लिए, बेकगि क्रिया की पूर्व-शर्त यह है कि वदियुत भट्टी स्टैंडबाय स्थिति में हो और तापमान कम हो। और इस क्रिया को पूरा करने पर निष्पादन प्रभाव यह है कि नमूना ऊष्मा-उपचारित हो जाता है।

इस तरह शर्तें लिखने पर मशीन सुरक्षित क्रम अपने-आप खोजती है। जनि क्रियाओं की शर्तें पूरी नहीं होतीं, वे निष्पादित नहीं होतीं। गर्म वदियुत भट्टी के लिए पहुँच आदेश रोक दिया जाता है। जिसका वजन पूरा नहीं हुआ, वह नमूना मशिरण चरण में नहीं जाता। यह नियम रोबोट की दुर्घटना पहले से रोकने वाली बाड़ बनता है। यह मानो मनुष्य द्वारा पालन किए जाने वाले प्रयोगशाला सुरक्षा नियमों को मशीन भाषा में बदलना है।

लेकिन यह बाड़ अपने-आप सुरक्षा की गारंटी नहीं देती। पूर्वशर्तें मनुष्य को एक-एक करके सही ढंग से लिखनी होती हैं, तभी वे काम करती हैं। कोई शर्त छूट जाए या गलत लिखी जाए तो बाड़ में छेद बनता है। इसलिए PDDL सुरक्षित क्रियान्वयन की गारंटी देने वाला साधन नहीं है। यह ऐसा उपकरण है जिससे मनुष्य जोखिम को पहले से सोचकर नियमों में बदलता है। नियमों की बारीकी उतनी ही होती है जितनी मनुष्य के नर्णय की बारीकी होती है।

इस योजना को चित्र में दिखाया जा सकता है। हर क्रिया को एक बटु की तरह रखकर आगे-पीछे के संबंधों को तीर से जोड़ा जाता है। ऐसे चित्र को दशिति अचक्रीय ग्राफ कहा जाता है। इसका अर्थ है कतिर केवल एक दशा में बहते हैं और वापस नहीं लौटते। इस चित्र को देखकर पता चलता है कि कौन-से काम साथ-साथ किए जा सकते हैं। उदाहरण के लिए एक नमूना पकते समय दूसरे नमूने के पाउडर का वजन किया जाता है। एक-दूसरे में बाधा न डालने वाले कामों को समानांतर करने से पूरी प्रयोगशाला उतनी ही तेजी से चलती है।

रॉकेट सामग्री प्रयोग में यह सुरक्षा योजना मूल्यवान है। अत-उच्च तापमान वाली वदियुत भट्टी को गलत ढंग से संभालना बहुत खतरनाक हो सकता है। अधिक प्रतिक्रियाशील कच्चे माल को हवा से नहीं छूना चाहिए। कई उपकरण एक ही प्रयोगशाला में साथ-साथ चलते हैं। बर्ना मनुष्य के रात भर चलने वाली प्रयोगशाला में दुर्घटना रोकने वाले नियम अनिवार्य हैं। PDDL जैसी योजना भाषा इन नियमों को बारीकी से गढ़ती है। स्व-चालित प्रयोगशाला की गतिकेवल इसी सुरक्षा साधन के आधार पर अर्थ रखती है।

इस पद्धतिकी भी सीमा है। संसार की सभी शर्तों को नियमों में पूरी तरह लिखना कठिन है। ऐसी स्थितिसिचमुच आ सकती है जिससे पहले लिखा न गया हो। नियम बहुत अधिक हों तो योजना खोजने की गणना बढ़ जाती है। अप्रत्याशित खराबी को केवल नियमों से नहीं रोका जा सकता। इसलिए केवल योजना भाषा पर्याप्त नहीं है। उपकरणों की स्थतिको वास्तविक समय में देखने वाला दूसरा साधन साथ होना चाहिए, और उस साधन पर अगले खंड में चर्चा की जाएगी।

3.3 कृत्रिम बुद्धिमत्ता और प्रयोग उपकरण को जोड़ने वाला मानक संचार(MCP)

यह खंड बताता है कि कृत्रिम बुद्धिमत्ता और प्रयोग उपकरण आपस में कैसे संवाद करते हैं। भाषा मॉडल वाक्यों को संभालता है। तराजू, वदियुत भट्टी और रोबोट भुजा सटीक आदेश मांगते हैं। इन दोनों के बीच जोड़ने वाली मध्य परत चाहिए। यह खंड उसी मध्य परत को देखता है। मानक संचार नियम और उसके ऊपर रखे जाने वाले सुरक्षा साधन को साथ देखते हैं।

भाषा मॉडल मनुष्य के लिखे पाठ को अच्छी तरह संभालता है। वह तापमान धीरे-धीरे बढ़ाने वाला वाक्य भी समझता है। लेकिन वदियुत भट्टी वाक्य नहीं समझती। वदियुत भट्टी को यह बताने वाला सटीक संकेत चाहिए कि प्रतिक्रिया कतिने डिग्री तापमान बढ़ाना है। तराजू और रोबोट भुजा भी ऐसे ही हैं। इसलिए वाक्य को उपकरण की भाषा में बदलने वाला दुभाषिया चाहिए।

पहले यह दुभाषिया हर उपकरण के लिए अलग बनाया जाता था। तराजू के लिए दुभाषिया, वदियुत भट्टी के लिए दुभाषिया और रोबोट के लिए दुभाषिया अलग-अलग बनाए जाते थे। एक उपकरण बदलने पर दुभाषिया भी नया बनाना पड़ता था। कई प्रयोगशालाएँ वही काम दोहराती थीं। यह बड़ा अपव्यय था। मानक न होने से एक-दूसरे का कोड साझा करना भी कठिन था।

इस समस्या को हल करने की कोशिश मानक संचार नियम करता है। मानक नियम हो तो हर उपकरण को एक ही तरीके से जोड़ा जाता है। नया उपकरण भी नियमों से मेल खा जाए तो तुरंत जुड़ जाता है। प्रयोगशालाओं के बीच कोड साझा करना भी आसान हो जाता है। हाल के स्व-चालित प्रयोगशाला अध्ययन इस मानक को मॉडल कॉन्टेक्स्ट प्रोटोकॉल में खोजते हैं।

मॉडल कॉन्टेक्स्ट प्रोटोकॉल (Model Context Protocol) नामक एक खुला नियम है। संक्षेप में इसे MCP कहा जाता है। प्रोटोकॉल संचार का एक पारस्परिक रूप से सहमत तरीका है। MCP कृत्रिम बुद्धिमत्ता और सॉफ्टवेयर उपकरणों को जोड़ने वाला नियम है। यह मानक तरीके से कृत्रिम बुद्धिमत्ता को बताता है कि कौन से उपकरण उपलब्ध हैं। कृत्रिम बुद्धिमत्ता उन उपकरणों को स्वतः पहचानती है और उन्हें कॉल करती है।

यहाँ एक बात पर ध्यान देना चाहिए, जिससे लेकर भ्रम हो सकता है। MCP सॉफ्टवेयरों को जोड़ने वाला ऊपरी नियम है। यह तराजू और वदियुत भट्टी जैसे वास्तविक उपकरणों को सीधे नहीं चला सकता। मोटर और वाल्व चलाने का काम हर उपकरण के अलग ड्राइवर के जम्मे होता है। ड्राइवर वह नचिला प्रोग्राम है जो उपकरण संकेतों को सीधे संभालता है। MCP इसी ड्राइवर के ऊपर रखकर कृत्रिम बुद्धिमत्ता से जोड़ता है। इसलिए केवल MCP से उपकरण तुरंत नहीं जुड़ते। MCP न तो औद्योगिक वास्तविक-समय नियंत्रण मानक है और न सुरक्षा मानक। उपकरण जोड़ने के लिए उसके नीचे अलग ड्राइवर परत रखनी होती है।

इस नियम को स्व-चालित प्रयोगशाला में लाने का उदाहरण NIMO कंट्रोलर है। यह 2026 में प्रकाशित किया गया प्रारंभिक अध्ययन है। शोधकर्ता योशिकावा नारुकी (Yoshikawa Naruki) और तमुरा र्यो (Tamura Ryo) हैं। यह अध्ययन स्व-चालित प्रयोगशाला के कई कार्यों को MCP सर्वर के रूप में सामने लाता है। यहाँ NIMO अगला प्रयोग तय करने वाला नर्णय इंजन है। कंट्रोलर उस इंजन और कई उपकरणों को MCP से जोड़ने वाली समन्वय परत है। इस उदाहरण में कृत्रिम बुद्धिमत्ता ने रंग मिलाने वाली स्व-चालित प्रयोगशाला को

संभाला। लक्ष्य रंग मलिन तक उसने घटकों को स्वयं बदलकर प्रयोग किया। इस अध्ययन ने वास्तव में यही समन्वय और रंग मलिन प्रयोग दिखाया।

इस अध्ययन में बताए गए NIMO का उद्देश्य स्पष्ट है। स्व-चालित प्रयोगशाला में कई अनुकूलन वधियाँ होती हैं। कई प्रकार के उपकरण भी होते हैं। वधियों और उपकरणों को एक-एक करके जोड़ना बड़ा अवरोध है। NIMO कंट्रोलर इन दोनों को साझा तरीके से जोड़ता है। मनुष्य को कोड लिखे बिना भी प्रयोग प्रवाह बनाया जा सकता है। यह स्क्रीन पर उपकरण चुनकर उन्हें जोड़ने की पद्धति है। लेकिन यह अध्ययन अभी प्रारंभिक चरण में है, इसलिए इसे व्यापक रूप से इस्तेमाल होने वाला मानक मानना जल्दबाजी होगी।

रॉकेट सामग्री प्रयोगशाला में यह संचार परत क्यों महत्वपूर्ण है, इसे देखते हैं। सामग्री प्रयोगशाला में अलग-अलग कंपनियों के उपकरण मलि-जुले होते हैं। तराजू, वदियुत भट्टी और वविरुतन उपकरणों के निर्माता अलग-अलग होते हैं। एक कृत्रिम बुद्धिमत्ता को इन सबको संभालना हो तो साझा भाषा चाहिए। मानक संचार नियम इन कई उपकरणों को एक प्रवाह में बाँधता है। नया उपकरण लाने पर भी बड़े बदलाव के बिना जोड़ा जा सकता है। प्रयोगशाला को फैलाना या बदलना आसान हो जाता है।

मानक संचार का एक और लाभ है। मनुष्य को कोड न आता हो तब भी वह प्रयोग बना सकता है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता स्वयं पहचानती है कि कौन-से उपकरण उपलब्ध हैं। वह उन उपकरणों को स्क्रीन पर सजा सकती है। मनुष्य को बस उपकरण चुनकर क्रम से जोड़ना होता है। तराजू से मापने, मलिन, पकाने और वविरुतन से मापने का प्रवाह चित्र की तरह बनाया जाता है। प्रयोग बनाने की दहलीज कम हो तो अधिक शोधकर्ता स्व-चालित प्रयोगशाला का उपयोग करते हैं।

इस परत की सीमाएँ भी हैं। संचार नियम अभी नए हैं और स्थापित हो रहे हैं। उपकरण कंपनियों के नियम पालन की मात्रा अलग-अलग है। पुराने उपकरणों को नियमों के अनुरूप बनाना कठिन है। संचार टूट जाए या संकेत देर से आए तो प्रयोग बगिड़ जाता है। इसलिए संचार परत को भी सुरक्षा साधन चाहिए। यह साधन आदेश को तुरंत नष्टपादित नहीं करता, पहले उसकी जाँच करता है। यही स्थिति मिश्रीन है।

3.3.1 स्थिति मिश्रीन द्वारा सुरक्षित अंतर्निहित सुरक्षा रेखा

यह उपखंड उपकरणों की सुरक्षा बचाने वाली स्थिति मिश्रीन पर चर्चा करता है। यह देखते हैं कि स्थिति मिश्रीन क्या है और वह खतरनाक आदेशों को कैसे रोकती है। स्व-चालित प्रयोगशाला में यह साधन अंतर्निहित सुरक्षा रेखा क्यों है, इसे देखते हैं। यहाँ देखी जाने वाली स्थिति मिश्रीन कोई ऐसी विशेषता नहीं है जो किसी खास उत्पाद में पहले से पूरी तरह मौजूद हो। ऊपर देखा गया NIMO कंट्रोलर उपकरणों को जोड़ने वाले समन्वय पर केंद्रित अध्ययन है। स्थिति मिश्रीन और इंटरलॉक को ऐसे समन्वय के ऊपर अलग से रखना पड़ता है। यह पुस्तक इस सुरक्षा डिज़ाइन को स्व-चालित प्रयोगशाला के लिए आवश्यक परत मानती है।

स्थिति मिश्रीन उपकरण की वर्तमान स्थिति को निर्धारित खानों में बाँटने की पद्धति है। सीमित स्थिति मिश्रीन (Finite State Machine) संभावित खानों को पहले से तय कर देती है। उदाहरण के लिए प्रतीक्षा, तैयारी, वजन, स्थानांतरण, प्रतिक्रिया, विश्लेषण, त्रुटि और आपात रोक जैसे खाने होते हैं। उपकरण हमेशा इन्हीं खानों में से किसी एक में होता है। एक खाने से अगले खाने तक जाने का मार्ग भी पहले से तय किया जाता है।

मुख्य बात यह है कि किसी स्थिति में केवल अनुमत क्रियाएँ ही नष्टपादित होती हैं। प्रतिक्रिया स्थिति में वदियुत भट्टी गर्म होती है। ऐसे समय रोबोट भुजा द्वारा वदियुत भट्टी का दरवाजा खोलने का आदेश रोक जाता है। दरवाजा तभी खुलता है जब तापमान सुरक्षित मान से नीचे ठंडा होने का संकेत मलि। यह संकेत सेसर से सत्यापित किया जाता है। पुष्टि संकेत आने से पहले आदेश स्थिति मिश्रीन के चरण में अवरोध हो जाता है। ऐसे अवरोध को इंटरलॉक कहा जाता है। इंटरलॉक वह सुरक्षा ताला है जो शर्त पूरी न होने पर बंद हो जाता है।

यह तरीका सुरक्षित क्यों है, इसे आसान उदाहरण से देखते हैं। माइक्रोवेव ओवन का दरवाजा खुलते ही वह चलना बंद कर देता है। वह तभी चलता है जब दरवाजा बंद हो। दरवाजा खुला हो तो बटन कतिना भी दबाएँ, वह चालू नहीं होता। यह स्थिति के अनुसार क्रिया सीमा है। स्व-चालित प्रयोगशाला की स्थिति मिश्रीन भी इसी सिद्धांत पर चलती है। खतरनाक स्थिति में खतरनाक आदेश बिल्कुल नष्टपादित नहीं होता।

कृत्रिम बुद्धिमत्ता के वाक्य आदेश को इस नियम से होकर अवश्य गुजरना चाहिए। कृत्रिम बुद्धिमत्ता कतिना भी आत्मविश्वास से आदेश दे, नियम पहले आते हैं। केवल नियम पास करने वाला आदेश उपकरण ड्राइवर तक जाता है। ड्राइवर वास्तविक मोटर और वाल्व चलाने वाला प्रोग्राम है। नियम में अटकने वाला आदेश नष्टपादित नहीं होता और केवल रिकॉर्ड रह जाता है। यह रिकॉर्ड बाद में कारण खोजने का आधार बनता है।

रॉकेट सामग्री प्रयोगों में यह सुरक्षा रेखा मूल्यवान है। कारण यह है कि इसमें अत्यंत उच्च तापमान वाली वदियुत भट्टी और प्रतिक्रियाशील कच्चे पदार्थों को संभालना पड़ता है। छोटी गलती भी बड़े हादसे में बदल सकती है। बिना व्यक्तिवाली रात में खतरा और बढ़ जाता है। स्टेट मशीन कृत्रिम बुद्धिमत्ता और उपकरणों के बीच अंतर्निहित सुरक्षा द्वार है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता गलती करे, तब भी उपकरण खतरनाक क्रिया नहीं करता। स्व-चालित प्रयोगशाला की स्वतंत्रता केवल इस द्वार के भीतर ही दी जाती है।

इस यंत्र की भी सीमाएँ हैं। पहले से तय न की जा सकी अवस्थाओं को संभालना कठिन है। अप्रत्याशित खराबी तय खानों में ठीक से नहीं बैठती। यदिसेंसर गलत संकेत भेजे, तो नर्णय भी गलत होता है। इसलिए केवल स्टेट मशीन पर्याप्त नहीं है। साथ में ऐसी आँख चाहिए जो वास्तविक समय में उपकरण को देखे और असामान्यता पहचान ले। वह आँख अगले खंड में देखने वाला सेंसर फ्यूजन है।

3.4 बखिरे हुए प्रयोग वातावरण को सहने वाला रोबोट नष्टिपादन ढाँचा (PUDA)

यह खंड उन कठिनाइयों को देखता है जिनका सामना रोबोट वास्तविक प्रयोग वातावरण में करता है। प्रयोगशाला कारखाने से अलग होती है। पाउडर बहता है, गुच्छे बनाता है और स्थैतिक बजिली धारण करता है। क्रूसबिल थोड़ा-थोड़ा खसिकता है। सेंसर में शोर मल जाता है। यह खंड ऐसे बखिरे हुए वातावरण को सहने वाले रोबोट नष्टिपादन ढाँचे को देखता है। प्रतनिधि उदाहरण के रूप में PUDA अध्ययन को देखता है।

प्रयोगशाला रोबोट को कारखाना रोबोट से कठिन काम मिलते हैं। कारखाने में वही पुरजे तय जगह पर आते हैं। प्रयोगशाला में पाउडर का गुण हर बार अलग होता है। कोई पाउडर अच्छी तरह बहता है। कोई पाउडर गुच्छे बनाकर नोजल बंद कर देता है। कोई पाउडर स्थैतिक बजिली के कारण इधर-उधर चपिक जाता है। क्रूसबिल भी हर बार रखने पर थोड़ा-थोड़ा अपनी जगह से हट जाता है।

ऐसी अव्यवस्था को बाहरी व्यवधान कहा जाता है। बाहरी व्यवधान योजना में न आया हुआ अवरोध है। बाहरी व्यवधान हो तो तय क्रिया भर से काम नहीं होता। रोबोट को आँख और संवेदना से लैस होना पड़ता है। आँख कैमरा है और संवेदना बल सेंसर है। रोबोट यह जानकारी वास्तविक समय में पढ़ते हुए अपनी क्रिया सुधारता है।

PUDA ऐसे रोबोट नष्टिपादन वातावरण को संभालने का एक उदाहरण है। इसके पूरे नाम का अर्थ भौतिक एकीकृत उपकरण वास्तुकला (Physical Unified Device Architecture) है। इसे स्व-चालित प्रयोगशाला के लिए AI-अनुकूल हार्डवेयर हार्नेस भी कहा जाता है। हार्नेस कई उपकरणों को एक साथ जोड़कर प्रबंधित करने का एक ढांचा है। यह 2026 में प्रकाशित एक प्रारंभिक शोध है। शोध दल में ज़ेनकुन रेन (Zhenkun Ren), होंगझाओ तान (Hongzhao Tan), जियाएन यी (Jiaen Yi), और केंदार हपिपलगांवकर (Kedar Hippalgaonkar) हैं। इस शोध ने वास्तव में जो दिखाया, वह AI के लिए उपयोग में आसान कमांड-लाइन नष्टिपादन वातावरण और उसके भीतर की रिकॉर्डिंग प्रणाली है। नीचे देखा जाने वाला सेंसर संलयन और त्रुटि पुनर्प्राप्ति नहीं है जनिहें इस शोध पत्र ने प्रदर्शन के रूप में सदिध किया है। यह वह दशा है जिसमें ऐसा नष्टिपादन ढांचा भविष्य में आगे बढ़ना चाहता है।

PUDA की पद्धति पहले के सिस्टमों से थोड़ी अलग है। यह मनुष्यों के लिए बने स्क्रीन को आगे नहीं रखती। इसके बजाय यह ऐसा कमांड-लाइन वातावरण बनाती है जसि कृत्रिम बुद्धिमत्ता एजेंट आसानी से संभाल सके। हर उपकरण कमांड-लाइन में मल सकने वाले औजार के रूप में सामने आता है। आदेश और उत्तर मानक अभिलेख के रूप में बचते हैं। कसि नमूने को कौन सा आदेश गया और क्या परिणाम निकला, यह सब कड़ी की तरह जुड़ता है। इस इतिहास को प्रोवेनेंस कहा जाता है। प्रोवेनेंस का अर्थ है किडेटा कहाँ से और कैसे आया, इसका इतिहास।

रॉकेट सामग्री अनुसंधान में यह इतिहास अभिलेख क्यों मूल्यवान है, इसे देखते हैं। एयरोस्पेस पुरजों में गुणवत्ता का पता लगाना कठोर होता है। कसि कच्चे पदार्थ से कनि शर्तों में बनाया गया, यह सब बचाना पड़ता है। बाद में समस्या हो तो इसी अभिलेख से कारण खोजा जाता है। PUDA जैसा सिस्टम यह इतिहास अपने आप छोड़ता है। व्यक्त के हाथ से लिखने की तुलना में छूट कम होती है। स्व-चालित प्रयोगशाला से बने डेटा को भी भरोसे से इस्तेमाल किया जा सकता है।

PUDA ने कमांड-लाइन पद्धति इसलिए चुनी। मनुष्यों के लिए बना स्क्रीन देखने में अच्छा होता है। पर कृत्रिम बुद्धिमत्ता एजेंट के लिए उसे संभालना असुविधाजनक होता है। स्क्रीन के भीतर बटन को मशीन के लिए दबाना कठिन है। कमांड-लाइन औजार को कृत्रिम बुद्धिमत्ता सीधे बुला सकती है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता स्थिति देखती है, नर्णय लेती है और आदेश देती है। उपकरण उस आदेश को सटीक और वापस पलट सकने योग्य ढंग से चलाता है। मानो व्यक्त के प्रयोग योजना बनाने वाले मस्तिष्क और उपकरण चलाने वाले हाथ को अलग कर दिया गया हो। इस तरह बॉटने पर मस्तिष्क बदला जाए, तब भी हाथ वैसे ही इस्तेमाल होता है।

इस पद्धतिकी भी सीमाएँ हैं। कमांड-लाइन वातावरण व्यक्त को तुरंत देखने में असुविधाजनक होता है। हर उपकरण के लिए नया कमांड-लाइन औजार बनाना पड़ता है। पुराने उपकरणों को ऐसे ढाँचे में बैठाना कठिन है। मानक अभिलेख छोड़ने के लिए भंडारण और प्रबंधन में मेहनत लगती है। यह अध्ययन भी अभी प्रारंभिक चरण में है। कई प्रयोगशालाओं में व्यापक रूप से इस्तेमाल होने के लिए और समय चाहिए।

3.4.1 कई सेंसर जोड़कर नर्णय लेना और वफिलता को वापस सुधारना

यह उपखंड कई सेंसरों की जानकारी जोड़कर नर्णय लेने वाले सेंसर फ्यूजन को देखता है। और वफिलता को स्वयं वापस सुधारने की पुनर्प्राप्ति प्रक्रिया देखता है। यह देखता है कि ये दोनों कार्य प्रयोग की गुणवत्ता क्यों बचाते हैं। ये दोनों कार्य रोबोटिक्स में व्यापक रूप से शोधित पद्धतियाँ हैं। पछिले खंड के PUDA जैसा नष्टिपादन ढाँचा इन पद्धतियों को रखने वाला पात्र है। यहाँ कसि एक सिस्टम की उपलब्धि नहीं, बल्कि पद्धतिकी सदिधांत देखा जाता है।

सेंसर फ्यूजन कई सेंसरों की जानकारी जोड़कर नरिणय लेना है। कैमरा स्थान और आकार देखता है। बल सेंसर रोबोट की कलाई पर लगने वाला बल देखता है। तापमान सेंसर और दबाव सेंसर देखते हैं कि उपकरण सुरक्षित है या नहीं। केवल एक तरह का सेंसर देखने पर बहुत कुछ छूट जाता है। कई सेंसर साथ देखने पर नरिणय सटीक होता है।

एक उदाहरण के रूप में रोबोट के कूरुसबिल पकड़ने का दृश्य देखते हैं। कैमरा ढक जाए तो स्थान नहीं देख पाता। तब बल सेंसर टक्कर पकड़ता है। यदि बल छोटा हो और आभास न हो, तो कैमरा पाउडर का गरिना देखता है। अलग-अलग सेंसर एक-दूसरे की कमी भरते हैं। यह वैसा ही है जैसे मनुष्य हाथ और आँख साथ इस्तेमाल करता है। अँधेरे कमरे में हाथ से टटोलता है, और उजली जगह में आँख से देखता है।

जब रोबोट किसी चीज से टकराता है, तो बल सेंसर का मान बहुत उछलता है। तय सीमा से ऊपर जाने पर रोबोट तुरंत क्रिया रोकता है। रुकने के बाद वह स्थितिको फरि देखता है। कैमरे से जाँचता है कि पाउडर गरि है या कूरुसबिल फसिला है। यही पुनः जाँच प्रक्रिया तुरंत पुनर्प्राप्ति की शुरुआत है।

तुरंत पुनर्प्राप्ति सामान्यतः तीन चरणों में चलती है। पहले यह पता लगाया जाता है कि क्या गलत हुआ। फरि रोबोट को वफिलता से ठीक पहले की सुरक्षित अवस्था में लौटाया जाता है। अंत में पकड़ने की जगह या बल थोड़ा बदलकर एक बार और कोशिश की जाती है। इन तीन चरणों से छोटी गलती व्यक्तिके बनि भी पार हो जाती है।

तुरंत पुनर्प्राप्ति प्रयोग की गुणवत्ता के लिए भी जरूरी है। गलत मापे गए नमूने को वैसे ही आगे बढ़ाया जाए, तो खराब डेटा जमा होता है। खराब डेटा कृत्रिम बुद्धिमत्ता मॉडल को गलत दशिया में ले जाता है। इसलिए स्व-चालित प्रयोगशाला वफिलता को छपाती नहीं, बल्कि दर्ज करती है। दर्ज वफिलता अगले अधिगम का डेटा बनती है। यदि पिता हो कि कहीं और क्यों वफिलता हुई, तो अगली बार उस गलती से बचा जाता है।

इस कार्य की भी सीमाएँ हैं। सेंसर मानों में भी शोर मलित है। शोर को गलती से असामान्यता पढ़ लिया जाए, तो ठीक प्रयोग भी रुक जाता है। बहुत बार रुकने पर प्रयोग धीमा होता है। उलट, यदि सीमा मान ढीला रखा जाए, तो असली हादसा छूट जाता है। इसलिए इस यंत्र की संवेदनशीलता ठीक से मलितनी पड़ती है। यह समायोजन अभी भी व्यक्तिके अनुभव पर बहुत नरिभर करता है। स्व-चालित पुनर्प्राप्ति व्यक्तिको हटाने का यंत्र नहीं है। यह खतरनाक दोहराव घटाने और जरूरत पड़ने पर व्यक्तिको बुलाने का यंत्र है।

3.5 वास्तव में संचालित स्व-चालित प्रयोगशाला, बर्कले A-Lab

यह खंड वास्तव में संचालित स्व-चालित प्रयोगशाला के एक प्रमुख उदाहरण को देखता है। यह संयुक्त राज्य अमेरिका की लॉरेंस बर्कले नेशनल लेबोरेटरी (Lawrence Berkeley National Laboratory) की A-Lab है। यह जांचता है कि इस उदाहरण ने क्या हासिल किया और कनि बाधाओं का सामना किया। यह भी बताता है कि प्रदर्शन के आंकड़ों को कैसे समझा जाना चाहिए।

A-Lab लॉरेंस बर्कले नेशनल लेबोरेटरी द्वारा बनाई गई स्व-चालित अकार्बनिक सामग्री संश्लेषण प्लेटफॉर्म है। अकार्बनिक सामग्री धातु और ऑक्सीजन जैसे तत्वों से बनी सामग्री है। ऑक्साइड या फॉस्फेट इसमें आते हैं। A-Lab ने गणना डेटा से बनाए जा सकने वाले उम्मीदवार चुने। फरि रोबोट से पाउडर संभाला और ऊष्मा उपचार किया। एक्स-रे विवर्तन उपकरण से परिणाम की पुष्टि की। इस प्रक्रिया को व्यक्तिके हाथ लगभग हटाकर आगे बढ़ाया गया।

उपलब्धिके आँकड़ों को सही पढ़ना जरूरी है। A-Lab 2023 में नेचर (Nature) शोधपत्र के रूप में प्रकाशित हुआ। पहले घोषित सफलता संख्या बाद में फरि जाँची गई और घटाई गई। अन्य सामग्री रसायनविदों ने विवर्तन पैटर्न का फरि विश्लेषण किया। 2026 में नेचर ने संशोधन प्रकाशित किया। संशोधन के बाद संख्या सत्तावन लक्ष्यों में छत्तीस है। यह पुस्तक संशोधित संख्या को आधार बनाती है। आरंभ की अधिक ऊँची संख्या इस्तेमाल नहीं करती।

यह संशोधन प्रक्रिया अपने आप में मूल्यवान सीख है। संशोधन का केंद्र दो बातें हैं। एक स्वचालित विश्लेषण की गलत नरिणय-प्रक्रिया है। सफलता का नरिणय स्वचालित एक्स-रे विवर्तन विश्लेषण ने किया। इस विश्लेषण ने प्रतिक्रिया न कर बचे कच्चे पदार्थ के संकेत को लक्ष्य नए पदार्थ के संकेत के रूप में गलत पढ़ा। बाहर से ऐसा लगा मानो नया क्रिस्टल बन गया हो। जब व्यक्तिके विवर्तन पैटर्न को फरि खोलकर देखा, तभी यह गलत नरिणय सामने आया। दूसरी बात नए पदार्थ शब्द का अर्थ है। पहले ऐसा पढ़ा गया मानो दुनिया में पहले न रहा पदार्थ बनाया गया हो। फरि देखने पर पता चला कि कई मामलों में अर्थ यह था कि वह पदार्थ इस प्रयोगशाला के डेटा में नहीं था। यह पूरी वैज्ञानिक दुनिया में पहली बार मलित पदार्थ से अलग है। संशोधन ने बताया कि रिपोर्ट की गई सफलता को व्यक्तिके फरि जाँचा और कुछ को अनिश्चित छोड़ा। इसलिए स्व-चालित प्रयोगशाला का नरिणय अंत में उत्तर नहीं है। सूक्ष्म विश्लेषण और पुनरुत्पादन परीक्षण से गुजरने पर ही वास्तविक सफलता बनती है। स्व-चालित प्रयोग तेज है, इसलिए जाँच छोड़ दी जाए, तो उलटे गलतियाँ जमा होती हैं।

रॉकेट सामग्री अनुसंधान में इस उदाहरण का अर्थ देखते हैं। A-Lab ने दिखाया कि स्व-चालित संश्लेषण प्रयोगशाला के बाहर की कल्पना नहीं है। ऑक्साइड और सरिमिक वर्ग रॉकेट के ताप अवरोधक पदार्थों से जुड़े हैं। ऐसी सामग्रियों को व्यक्तिके तेज खोजने का रास्ता खुला।

पर सफलता नरिणय की कठोरता भी साथ चलनी चाहिए। एयरोस्पेस पुरजों में छोटी अशुद्धि भी बड़ी समस्या बन सकती है। इसलिए गति जतिनी जरूरी है, जाँच भी उतनी ही जरूरी है।

A-Lab ने तीन स्पष्ट दीवारें दिखाईं। अगले उपखंड में हर दीवार को वसितार से देखते हैं। ये दीवारें अन्य स्व-चालित प्रयोगशालाओं के सामने भी आती हैं। दीवार को सही जानना अगले सस्टिम को बनाने की बुनियाद बनता है।

3.5.1 सस्टिम की संरचना और संचालन उपलब्धि

यह उपखंड देखता है कि A-Lab कनि भागों से बना था। और यह देखता है कि वे भाग कैसे जुड़कर चले। स्व-चालित प्रयोगशाला का वास्तविक रूप ठोस रूप में चित्रित किया जाता है।

A-Lab की संरचना को तीन भागों में बाँटा जा सकता है। गणना स्तर उम्मीदवार पदार्थ और संश्लेषण विधि चुनता है। नष्टिपादन स्तर में रोबोट और उपकरण वास्तव में नमूना बनाते हैं। मापन स्तर में एक्स-रे विवर्तन उपकरण परणाम की पुष्टि करता है। ये तीन स्तर गणना से नष्टिपादन, और नष्टिपादन से मापन तक जुड़कर एक चक्र पूरा करते हैं।

गणना परत ने एक बड़े डेटाबेस से उम्मीदवारों का चयन किया। इसने मटेरियल्स प्रोजेक्ट (Materials Project) नामक खुले डेटा का उपयोग किया। इसके साथ ही गूगल के गणना डेटा का भी उपयोग किया गया। ये डेटा ऊष्मागतिकीय रूप से स्थिर रहने वाले संभावित पदार्थों की भविष्यवाणी करते हैं। स्थिर होने का अर्थ है कि वह पदार्थ आसानी से विघटित नहीं होता और अपनी स्थिति बनाए रखता है। A-Lab ने इस प्रकार अनुमानित पदार्थों को अपना लक्ष्य बनाया।

नष्टिपादन स्तर में कई रोबोट भुजाएँ थीं। रोबोट नमूने को पाउडर तौलने की जगह, मलाने की जगह, दबाने की जगह और पकाने की जगह के बीच ले गया। पाउडर को सटीक तौला गया और बॉल मिल से मलिया गया। बॉल मिल वह यंत्र है जो छोटी गेंदों वाले पात्र में पाउडर को पीसकर मलियाता है। मलित हुए पाउडर को दबाकर छोटे दाने बनाए गए। उन दानों को ऊँचे तापमान वाली विद्युत भट्ठी में पकाया गया।

मापन स्तर का मुख्य उपकरण एक्स-रे विवर्तन यंत्र है। एक्स-रे विवर्तन (X-ray Diffraction) एक्स-रे डालकर क्रिस्टल संरचना देखने की विधि है। हर क्रिस्टल में एक्स-रे के नकिलने का पैटर्न अलग होता है। यह पैटर्न पदार्थ की उँगली की छाप जैसा है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता इस पैटर्न को पढ़कर नरिणय करती है कि लक्ष्य पदार्थ बना है या नहीं। पैटर्न लक्ष्य से मलित, तो उसे सफलता गनि जाता है।

A-Lab ने इस प्रक्रिया को कई दिनों तक चलाया। रात में व्यक्तियों के सोने के दौरान भी प्रयोग चलते रहे। इससे पता चलता है कि स्व-चालित प्रयोगशाला शोधपत्र के विचार से वास्तविक उपकरण में बदली। कई लक्ष्य पदार्थ व्यक्तियों के हस्तक्षेप के बिना बनाए गए। यह उपलब्धि स्व-चालित सामग्री संश्लेषण का दरवाजा खोलने वाले उदाहरण के रूप में बची है।

पर यह पूरी तरह मानव-रहित संचालन नहीं था। मानव शोधकर्ता ने सस्टिम तैयार किया और उसकी निगरानी की। विफल प्रयोगों को व्यक्तियों ने साथ देखकर जाँचा। सफलता नरिणय की भी बाद में व्यक्तियों ने फिर पुष्टि की। स्व-चालित प्रयोगशाला व्यक्तियों का काम घटाती है, व्यक्तियों को मटाती नहीं। व्यक्तियों के स्तर का नरिणय और जाँच संभालता है। सूक्ष्म दोहराव मशीन संभालती है। यही श्रम-विभाजन अभी स्व-चालित प्रयोगशाला का वास्तविक रूप है।

3.5.2 A-Lab ने दिखाई तीन दीवारें

यह उपखंड A-Lab द्वारा दिखाई तीन दीवारों को एक-एक कर देखता है। ये दीवारें स्व-चालित प्रयोगशाला की साझा चुनौतियाँ हैं। समस्या को सही जानना जरूरी है, तभी अगला सस्टिम ठीक से बनता है।

पहली दीवार संश्लेषण परणाम का नरिणय करने की कठिनाई है। सफलता गनि गए कुछ पदार्थ एकल-फेज नहीं थे। एकल-फेज वह अवस्था है जिसमें केवल वांछित एक क्रिस्टल शुद्ध रूप से होता है। कुछ नमूनों में प्रतिक्रिया न किए हुए कच्चे पदार्थ बचे रहे। कुछ नमूनों में द्वितीयक फेज भी था। द्वितीयक फेज लक्ष्य से अलग क्रिस्टल है। विवर्तन पैटर्न लक्ष्य से मलित-जुलता हो, तब भी अशुद्धि मिल सकती है। इसलिए एकल-फेज है या नहीं, इसकी कठोर पुष्टि करनी चाहिए।

दूसरी दीवार पाउडर को संभालना है। हर पाउडर की प्रकृति अलग होती है। कुछ पाउडर स्थैतिक बजिली से आवेशित हो जाते हैं। टाइटेनियम डाइऑक्साइड या नैनो पाउडर ऐसे ही होते हैं। ऐसे पाउडर नोजल के अंदर चपक जाते हैं। तब मापने वाला नोजल बंद हो जाता है। नमी को आसानी से सोखने वाले कच्चे पदार्थ भी संभालना कठिन होता है। स्वचालित मापक यंत्र ऐसे अलग-अलग पाउडर के सामने अक्सर रुक जाते हैं। जो काम मनुष्य हाथ से हल्का-सा ठकठका कर आगे बढ़ा देता है, वही काम मशीन में अटक जाता है।

तीसरी दीवार पर्यावरण नियंत्रण है। A-Lab खुले वातावरण में चलती थी। हवा में ऑक्सीजन और नमी होती है। ऑक्सीजन और नमी के प्रतिक्रिया कमजोर सामग्री को ऐसे वातावरण में नहीं संभाला जा सकता। क्योंकि बिनते ही उसके गुण बदल सकते हैं या वह टूटकर विघटित हो सकती है।

सर्व-ठोस बैटरी के लिए सल्फाइड और हैलाइड सामग्री इसी समस्या से टकराती है। ऐसी सामग्री हवा के संपर्क में आते ही अनुपयोगी हो जाती है। इसलिए खुले वातावरण वाली A-Lab से इस सामग्री की खोज नहीं हो सकी।

ये दीवारें अच्छी तरह दिखाती हैं कि स्वचालन कठिन क्यों है। मनुष्य आंख और हाथ के अनुभव से ऐसी समस्याओं को पार करता है। पाउडर जम जाए तो वह डबिबे को हल्का-सा ठकठकाता है। नमूना अजीब लगे तो गंध और रंग से पहचान लेता है। मशीन को यह अनुभव एक-एक करके सखाना पड़ता है। मनुष्य जो काम बना सोचे करता है, वह मशीन के लिए कठिन होता है। स्व-चालित प्रयोगशाला का विकास ऐसी छोटी संवेदनाओं को मशीन में उतारने की प्रक्रिया है।

ये तीनों दीवारें आपस में जुड़ी हुई हैं। पाउडर ठीक से न संभले तो माप गलत होता है। माप गलत हो तो परिणाम का नरिणय भी डगमगाता है। पर्यावरण नियंत्रण न हो तो कुछ सामग्री बनाई ही नहीं जा सकती। स्व-चालित प्रयोगशाला का दायरा बढ़ाना हो तो इन दीवारों को साथ-साथ पार करना होगा। केवल एक को ठीक करने से बड़ी प्रगतिकठिन है।

रॉकेट सामग्री अनुसंधान में ये दीवारें और बड़ी दिखाई देती हैं। रॉकेट में इस्तेमाल होने वाली नई बैटरी सामग्री या विशेष यौगिक अक्सर बहुत प्रतिक्रियाशील होते हैं। हवा के प्रतिक्रियाशील सामग्री भी बहुत होती हैं। ऐसी सामग्री संभालनी हो तो पहले पर्यावरण नियंत्रण चाहिए। खुले वातावरण वाली प्रयोगशाला से इस सामग्री समूह पर काम करना कठिन है। इसलिए पर्यावरण नियंत्रण नाम की तीसरी दीवार रॉकेट सामग्री अनुसंधान में खास तौर पर बड़ी बाधा बनती है।

इस दीवार को पार करने की कोशिश अगली धारा का विषय है। हवा के प्रतिक्रियाशील सामग्री संभालनी हो तो बंद वातावरण चाहिए। वही वातावरण ग्लोवबॉक्स है। अगली धारा बंद वातावरण में चलने वाली स्व-चालित प्रयोगशाला को देखती है। यह A-Lab की तीसरी दीवार को सीधे नशाना बनाने वाली प्रणाली है।

3.6 सीलबंद वातावरण में वायु-संवेदनशील सामग्रियों की खोज (A-Lab GPSS)

यह धारा बंद वातावरण में चलने वाली स्व-चालित प्रयोगशाला पर चर्चा करती है। यह पछिली धारा में देखी गई तीसरी दीवार को पार करने की प्रणाली है। इसमें हवा के प्रतिक्रियाशील सामग्री संभालने की विधि देखी जाती है।

ग्लोवबॉक्स दस्ताने लगा हुआ बंद डबिबा है। डबिबे की दीवार पर मोटे रबर के दस्ताने लगे होते हैं। मनुष्य बाहर से दस्तानों में हाथ डालकर अंदर काम करता है। डबिबे के अंदर आम तौर पर आर्गन जैसी निष्क्रिय गैस भरी जाती है। निष्क्रिय गैस वह गैस है जो दूसरे पदार्थों से आसानी से प्रतिक्रिया नहीं करती। इसलिए डबिबे के अंदर ऑक्सीजन और नमी लगभग नहीं होती।

इस प्रणाली का नाम A-Lab GPSS है। GPSS का अर्थ ग्लोवबॉक्स संरक्षित संश्लेषण प्रणाली है। यह खुले वातावरण वाली A-Lab की सीमा पार करने के लिए बनाई गई अगली पीढ़ी है। अति-उच्च शुद्धता वाले आर्गन से भरे बड़े ग्लोवबॉक्स के भीतर उपकरण रखे गए। नमी और ऑक्सीजन को दस लाख में एक भाग से नीचे रखा जाता है। इसी के भीतर कच्चे पदार्थ का भंडारण, माप, आकार देना, सील करना और ऊष्मा उपचार सब होता है। मुख्य बात यह है कि नमूने का हवा से संपर्क होने का क्षण ही हटा दिया जाए।

यह उदाहरण 2026 के प्रीप्रिंट से पुष्ट होता है। शोध दल में फेइयू (Feiyu) आदि शामिल हैं। यह हवा के प्रतिक्रियाशील लिथियम हैलाइड स्पिनल चालक पर आरंभिक शोध है। लेख बताता है कि 352 नमूने बनाए गए। संभावित धातु-युग्म संयोजन 171 थे। इनमें से 72 प्रतिलिपि से परखा गया। यहां 72 प्रतिलिपि सफलता दर नहीं है। यह संभावित संयोजनों में से प्रयोग द्वारा ढके गए हिस्से का अनुपात है। इस संख्या को सफलता दर समझकर नहीं पढ़ना चाहिए।

लेख बताता है कि प्रयोग आगे बढ़ने के साथ परिणाम बेहतर हुए। पहले 75 नमूनों में अच्छे परिणामों का अनुपात कम था। अंत में 75 नमूनों में वह अनुपात बढ़ा। कृत्रिम बुद्धिमत्ता ने पहले प्रयोगों से सीखकर बाद के प्रयोगों को सुधारा। यह दिखाता है कि बंद-लूप अधिगम सचमुच काम करता है। फरि भी यह शोध आरंभिक चरण का है, इसलिए इसे व्यापक निष्कर्ष में नहीं फैलाना चाहिए।

अब देखते हैं कि रॉकेट उद्योग में यह बंद स्व-चालित प्रयोगशाला क्यों मूल्यवान है। अंतरिक्ष यान को अच्छे प्रदर्शन वाली बैटरी चाहिए। सर्व-ठोस बैटरी सुरक्षित और अधिक ऊर्जा वाली उम्मीदवार है। उसका मूल भाग ठोस इलेक्ट्रोलाइट है। लेकिन अच्छे ठोस इलेक्ट्रोलाइट अक्सर हवा के प्रतिक्रियाशील होते हैं। बंद स्व-चालित प्रयोगशाला ऐसी सामग्री को सुरक्षित रूप से खोजती है। बहुत प्रतिक्रियाशील रॉकेट सामग्री अनुसंधान में भी वही वातावरण इस्तेमाल होता है।

3.6.1 हवा के प्रतिक्रियाशील लिथियम हैलाइड ठोस इलेक्ट्रोलाइट

यह उपधारा यहां चर्चा की जा रही सामग्री को विस्तार से देखती है। यह आसान भाषा में समझाती है कि लिथियम हैलाइड ठोस इलेक्ट्रोलाइट क्या है। यह देखती है कि यह सामग्री हवा के प्रतिक्रियाशील क्यों है और मूल्यवान क्यों है।

पहले बैटरी के भीतर के शब्दों को समझते हैं। लथियम आयन बैटरी के अंदर वद्युत आवेश ढोने वाला छोटा कण है। बैटरी चार्ज और डिसिचार्ज होते समय ये आयन आते-जाते हैं। इलेक्ट्रोलाइट वह रास्ता है जिससे ये आयन गुजरते हैं। आम बैटरियां तरल इलेक्ट्रोलाइट इस्तेमाल करती हैं। तरल रसि सकता है या आग पकड़ सकता है।

ठोस इलेक्ट्रोलाइट इस रास्ते को ठोस से बनाता है। ठोस इलेक्ट्रोलाइट को लथियम आयन अच्छी तरह भेजने चाहिए। लेकिन उसे इलेक्ट्रॉनों को अच्छी तरह रोकना चाहिए। जिस ठोस में आयन गुजरे और इलेक्ट्रॉन रुके, वही अच्छा इलेक्ट्रोलाइट है। ठोस रसिता नहीं और आग के प्रतिकूल होता है। इसलिए सर्व-ठोस बैटरी को अधिक सुरक्षित बैटरी माना जाता है।

लथियम हैलाइड इलेक्ट्रोलाइट वह ठोस इलेक्ट्रोलाइट है जिसमें हैलोजन तत्व होते हैं। हैलोजन में क्लोरीन, ब्रोमीन और आयोडीन जैसे तत्व आते हैं। रासायनिक सूत्र में लथियम, धातु और हैलोजन निश्चित अनुपात में जुड़े होते हैं। इस सामग्री के उच्च-वोल्टेज इलेक्ट्रोड के साथ अच्छी तरह मेल खाने की संभावना है। वोल्टेज ऊंचा हो तो समान आकार में अधिक ऊर्जा रखी जा सकती है। इसलिए यह अगली पीढ़ी की बैटरी सामग्री के रूप में ध्यान खींचती है।

समस्या यह है कि यह सामग्री पानी के प्रति बहुत कमजोर है। इस गुण को द्रवीभवनशीलता कहा जाता है। द्रवीभवनशीलता हवा की नमी सोखकर स्वयं घुलने का गुण है। थोड़ी-सी नमी लगने पर भी अवस्था विघटित हो जाती है। विघटन के समय हाइड्रोजन क्लोराइड जैसी हानिकारक गैस निकल सकती है। इसलिए कच्चे पदार्थ का भंडारण, संश्लेषण और मापन सब बंद वातावरण में करना पड़ता है।

यही शर्त स्व-चालित प्रयोगशाला को कठिन बनाती है। बंद डब्बे के अंदर जगह कम होती है और काम करना असुविधाजनक होता है। रोबोट को संकरे स्थान में सही ढंग से चलना पड़ता है। हवा के संपर्क को एक क्षण के लिए भी अनुमति नहीं दी जा सकती। कृत्रिम बुद्धिमत्ता उम्मीदवार संरचना और संश्लेषण शर्तें सुझाती हैं। रोबोट हवा से संपर्क कराए बिना वही प्रक्रिया दोहराता है। विश्लेषण उपकरण आयन चालकता और क्रिस्टल अवस्था को तेजी से जांचता है। ये सारे काम बंद वातावरण के भीतर एक-दूसरे से जुड़कर चलते हैं।

आयन चालकता मापना भी महत्वपूर्ण है। आयन चालकता वह मान है जो बताता है कि लथियम आयन कतिनी अच्छी तरह गुजरते हैं। यह मान ऊंचा होना चाहिए ताकि बैटरी अच्छी शक्ति दे सके। स्व-चालित प्रयोगशाला बनाए गए नमूने की चालकता तुरंत मापती है। फिर उस मान को कृत्रिम बुद्धिमत्ता का लक्ष्य बनाती है। वह अधिक चालकता वाली संरचना की ओर अगला प्रयोग चुनती है। क्रिस्टल अवस्था और चालकता को साथ देखकर अच्छे इलेक्ट्रोलाइट को धीरे-धीरे सीमिति करती है।

इस सामग्री खोज में सीमाएं भी बची रहती हैं। बंद वातावरण में उपकरण अंदर-बाहर करना कठिन है। संकरे स्थान के कारण इस्तेमाल किए जा सकने वाले उपकरण सीमिति होते हैं। द्रवीभवनशील सामग्री थोड़ी-सी गलती से भी अनुपयोगी हो जाती है। इसलिए हर प्रयोग सावधानी मांगता है। स्वचालन गति बढ़ा दे, तब भी यह सावधानी कम नहीं होती। बंद स्व-चालित प्रयोगशाला अभी कम प्रकार की सामग्री ही संभालती है।

3.6.2 आगमन और अपहरण के बीच चलने वाला दोहरा लूप

यह उपधारा स्व-चालित प्रयोगशाला में इस्तेमाल होने वाली सोच की दो विधियों पर चर्चा करती है। ये आगमन और अपहरण हैं। यह देखती है कि इन दोनों को बारी-बारी इस्तेमाल करने से खोज तेज क्यों होती है। यह विधि इस धारा के A-Lab GPSS शोध में सामने आई तर्क संरचना है।

आगमन कई प्रयोग परणामों से साझा नियम खोजने की सोच है। विवर्तन पैटर्न और चालकता मापन परणाम इकट्ठे किए जाते हैं। देखा जाता है कि कौन-सी संरचना अच्छी तरह बनी। कई नमूनों को साथ रखकर रुझान पढ़ा जाता है। जालक बढ़ने पर चालकता कैसे बदलती है, यह देखा जाता है। इस तरह जमा नियम अगले प्रयोग की नींव बनते हैं।

अपहरण वह सोच है जिसमें अप्रत्याशित परणाम मलिन पर उसका कारण खोजा जाता है। अपहरण वह तर्क है जो अजीब परणाम को अच्छी तरह समझाने वाला कारण चुनता है। मान लें कि किसी नमूने में अप्रत्याशित अशुद्ध अवस्था निकली। तब देखा जाता है कि कच्चा पदार्थ कम प्रतिक्रिया कर पाया या तापमान कम था। उनमें से सबसे संभावित कारण चुनकर अगला प्रयोग बदला जाता है। अपहरण एक आश्चर्यजनक परणाम से सीधे अगला कदम खोजता है। इसका रुख आगमन से अलग है, जो कई परणामों से नियम निकालता है।

स्व-चालित प्रयोगशाला इन दो सोचों को बारी-बारी इस्तेमाल करती है। घनत्व फलनक सिद्धांत (Density Functional Theory) की गणना संभावित उम्मीदवारों को पहले ही सीमिति करती है। यह गणना परमाणु स्तर पर पदार्थ की ऊर्जा निकालती है। यहां चुने गए उम्मीदवारों को प्रयोग जांचता है। प्रयोग परणाम जमा हों तो आगमन नियम खोजता है। अप्रत्याशित परणाम आए तो अपहरण कारण पकड़कर दिशा बदलता है। इस तरह गणना और प्रयोग एक-दूसरे को सुधारते हैं। सोच केवल एक दिशा में नहीं बहती, बल्कि घेरा बनाकर घूमती है।

इस विधिको आसान उदाहरण से देखते हैं। किसी अनजान शहर में रास्ता खोजने का दृश्य सोचें। कई बार चलकर छोटे रास्ते का नियम खोजना आगमन है। अचानक रास्ता बंद हो जाए तो कारण का अनुमान लगाकर घूमकर जाना अपहरण है। केवल नियम पर भरोसा करें तो अप्रत्याशित

स्थिति में रुक जाते हैं। केवल कारण के अनुमान के पीछे चले तो बड़ा चित्र खो जाता है। दोनों को साथ इस्तेमाल करें तो मंजिल जल्दी मिलती है। स्व-चालित प्रयोगशाला भी दोनों सोचों को साथ इस्तेमाल करके अच्छी सामग्री तक जल्दी पहुंचती है।

रॉकेट सामग्री अनुसंधान में यह दोहरा लूप क्यों मूल्यवान है, इसे देखते हैं। नई सामग्री को केवल गणना से पूरी तरह नहीं जाना जा सकता। गणना आदर्श स्थितियां मानती है। वास्तविक संश्लेषण में अशुद्धियां और शोर होता है। केवल प्रयोग से भी सब नहीं जाना जा सकता। प्रयोग में समय और लागत अधिक लगती है। दोनों वधियों को जोड़ने से गणना से दायरा सीमित होता है और प्रयोग से पुष्टि होती है। महंगी रॉकेट सामग्री खोज में यह संयोजन बड़ी शक्ति देता है।

इस वधि की भी सीमा है। गणना और प्रयोग की भाषा अलग-अलग है। गणना परिणाम को प्रयोग परिणाम से मिलाता कठिन है। गणना गलत हो तो गलत उम्मीदवारों पर प्रयोग व्यर्थ होते हैं। प्रयोग का शोर बड़ा हो तो गणना को गलत ढंग से सुधारा जाता है। इसलिए दोनों लूपों को जोड़ने वाला पुल ठीक से बनाना पड़ता है। यह पुल बनाना अभी भी मनुष्य के नरिणय पर काफी निर्भर है।

3.6.3 कई कृत्रिम बुद्धिमत्ताएं भूमिका बांटकर सहयोग करती हैं

यह उपधारा उस तरीके पर चर्चा करती है जिसमें कई कृत्रिम बुद्धिमत्ताएं भूमिका बांटकर सहयोग करती हैं। इसे मल्टी-एजेंट कहा जाता है। यह देखती है कि एक कृत्रिम बुद्धिमत्ता से कई क्यों बेहतर हो सकती हैं और उनमें कौन-सा जोखिम है।

मल्टी-एजेंट वह संरचना है जिसमें कई कृत्रिम बुद्धिमत्ताएं भूमिकाएं बांटती हैं। एजेंट कृत्रिम बुद्धिमत्ता की वह इकाई है जो स्वयं नरिणय लेकर कार्य करती है। यह वैसा ही है जैसे एक व्यक्ति सारे काम करे, इसकी जगह टीम काम बांटकर करे। स्व-चालित प्रयोगशाला में ऐसी भूमिका-वभाजन स्वाभाविक है। क्योंकि प्रयोग में रसायन ज्ञान, योजना, सुरक्षा और विश्लेषण सब चाहिए।

भूमिका बांटने पर हर एजेंट एक काम पर ध्यान देता है। रसायन एजेंट देखता है कि अभिक्रिया समीकरण सही है या नहीं। वह जांचता है कि द्रव्यमान संरक्षण है या नहीं और ऑक्सीकरण संख्या सही है या नहीं। वह यह भी देखता है कि किच्चा पदार्थ क्लूसबिल से खराब प्रतिक्रिया तो नहीं करता। योजना एजेंट उपकरणों का क्रम बनाता है। वह लंबे ऊष्मा उपचार जैसे अवरोधक कार्यों को पहले से बांटता है। वह यह भी तय करता है कि कौन-से काम साथ-साथ किए जा सकते हैं।

सुरक्षा एजेंट प्रयोगशाला की रक्षा करने वाली आंख है। वह ग्लोवबॉक्स के भीतर ऑक्सीजन और नमी की सांद्रता देखता है। वह दबाव परिवर्तन और विद्युत भट्ठी के ठंडे पानी के प्रवाह को भी देखता है। वह बहुत छोटे अंतराल पर इन मानों को बार-बार जांचता है। कोई अजीब मान देखे तो चेतावनी देता है और रिकॉर्ड छोड़ता है। लेकिन वास्तविक आपात रोक यह एजेंट सीधे नहीं लगाता। क्योंकि जिनरेटिव एजेंट का उत्तर देर से आ सकता है या उसका नरिणय गलत हो सकता है। ऑक्सीजन या दबाव खतरनाक मान तक पहुंचते ही स्वतंत्र सेंसर और सत्यापित सुरक्षा नियंत्रक तुरंत उपकरण रोकते हैं। यह हार्डवेयर इंटरलॉक भाषा मॉडल के नरिणय की प्रतीक्षा नहीं करता। एजेंट नगिरानी और रिकॉर्ड का काम संभालता है, और रोकने का काम सत्यापित सुरक्षा उपकरण संभालता है। विश्लेषण एजेंट मापन परिणामों की व्याख्या करता है। वह विवरण पैटर्न को डेटाबेस से मिलाता है। वह अशुद्धि की मात्रा को संख्या में बदलता है। उस संख्या को अधिगम प्रणाली के लक्ष्य मान में डालता है।

2026 में इस प्रकार की मल्टी-एजेंट प्रयोगशाला पर शोध बहुत बढ़ा। एक अध्ययन ने कई कृत्रिम बुद्धिमत्ता एजेंटों को एक समन्वयक के नीचे जोड़ा। हर एजेंट ने अलग-अलग उपकरण बांटकर इस्तेमाल किए। वे ज्ञान खोजने वाले समूह, डिजाइन को कार्य प्रक्रिया में बदलने वाले समूह, रोबोट संभालने वाले समूह और डेटा की व्याख्या करने वाले समूह में बंटे। इस तरह समूह बनाकर बंद-लूप सामग्री खोज की गई। दूसरे शोध ChatMat ने कई एजेंटों से पदार्थ-गुण पूर्वानुमान की प्रक्रिया को अपने-आप जोड़ा। स्व-चालित प्रयोगशाला प्रबंधन में मल्टी-एजेंट के अर्थ पर एक लेख भी आया।

भूमिका बांटने के लाभ स्पष्ट हैं। हर एजेंट का काम साफ दखता है। समस्या हो तो यह खोजना आसान होता है कि वह किस चरण में हुई। एक एजेंट को सुधारने पर पूरी प्रणाली बदलनी नहीं पड़ती। नया उपकरण जोड़ना भी आसान होता है। यह मनुष्यों की टीम के सहयोग में मिलने वाले लाभ जैसा है।

मल्टी-एजेंट विज्ञान के तरीके को भी बदलता है। पहले मानव शोधकर्ता हर प्रयोग को अलग-अलग दर्ज करता था। अब एजेंट अपनी नरिणय प्रक्रिया को डेटा के रूप में छोड़ता है। यह दर्ज रहता है कि उसने यह शर्त क्यों चुनी और इस परिणाम को सफलता क्यों माना। यह रिकॉर्ड बाद में शोध को पीछे मुड़कर देखने में काम आता है। लेकिन कृत्रिम बुद्धिमत्ता का नरिणय हमेशा पारदर्शी नहीं होता। मनुष्य के लिए यह पूरी तरह जानना कठिन है कि उसने ऐसा नरिणय क्यों लिया। यह अपारदर्शिता आगे हल किए जाने वाले काम के रूप में बची रहती है।

लेकिन जोखिम भी साथ-साथ बढ़ता है। बड़े भाषा मॉडल ऐसे तथ्य गढ़ सकते हैं जो मौजूद नहीं होते। एक एजेंट की गलती दूसरे एजेंट तक फैल सकती है। यदि कई एजेंट एक-दूसरे पर भरोसा करके आगे बढ़ा दें, तो गलती पकड़ी नहीं जाती। इसलिए अंतिम अधिकार सुरक्षा नियमों और मानव पर्यवेक्षक के पास होना चाहिए। कृत्रिम बुद्धिमत्ता आत्मविश्वास से बोले, तब भी उपकरण खतरनाक हो सकते हैं। एजेंट जतिने बढ़ते हैं, मानव द्वारा परस्पर जाँच और हार्डवेयर सुरक्षा उपकरण उतने ही महत्वपूर्ण हो जाते हैं।

सारांश

इस अध्याय में देखा गया कि स्व-चालित प्रयोगशाला कैसे चलती है। इसका केंद्र बंद-लूप नाम की चक्राकार संरचना है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता अगला प्रयोग चुनती है। रोबोट उसे बनाता है। उपकरण उसे मापता है। परिणाम फिर कृत्रिम बुद्धिमत्ता के पास लौटता है। यह चक्र दिन-रात चलता है और व्यापक सामग्री-क्षेत्र को तेजी से संकरा करता है।

कृत्रिम बुद्धिमत्ता अगला प्रयोग चुनने के लिए बेजियन सक्रिय अधिगम का उपयोग करती है। यह तरीका अपेक्षित प्रदर्शन और अनिश्चितता को साथ देखता है। यह संभावनाशील जगहों और अज्ञात जगहों को संतुलित ढंग से चुनता है। इसलिए कम प्रयोगों से अच्छी सामग्री तक पहुँचा जा सकता है। महंगी रॉकेट सामग्री की खोज में यह बात बड़ी शक्तिबिनी है।

शोधपत्रों में मौजूद संश्लेषण वधियाँ बड़े भाषा मॉडल निकालते हैं। MSP-LLM जैसे अध्ययन यह काम करते हैं। निकाली गई वधि PDDL जैसी योजना भाषा में सुरक्षित रूप से बदली जाती है। योजना भाषा रोबोट की दुर्घटना को पहले से रोकने वाली बाड़ बनती है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता और उपकरण मॉडल कॉन्टेक्स्ट प्रोटोकॉल जैसे मानकों से जुड़ते हैं। NIMO कंट्रोलर इसका उदाहरण है। स्टेट मशीन जोखिम भरे आदेशों को अंत में रोकने वाला द्वार है।

रोबोट को अव्यवस्थित प्रयोग वातावरण को सहना पड़ता है। कई सेंसर्स को साथ पढ़ने वाला सेंसर फ्यूजन इसमें मदद करता है। असफलता को स्वयं वापस मोड़ने वाली तुरंत पुनर्प्राप्ति भी साथ चलती है। PUDA जैसी प्रणालियाँ आदेश और परिणाम को रिकॉर्ड के रूप में छोड़ती हैं। यह रिकॉर्ड एयरोस्पेस पुरजों की गुणवत्ता का पता लगाने में मूल्यवान है।

वास्तविक उदाहरण के रूप में A-Lab और A-Lab GPSS को देखा गया। A-Lab ने सत्रह दिनों में सत्तावन लक्ष्यों में से छत्तीस बनाए। यह संख्या 2026 में संशोधन के बाद की संख्या है। यह उदाहरण दिखाता है कि स्व-चालित प्रयोगशाला के निर्णय को भी मानव पुनरीक्षण की जरूरत होती है। A-Lab GPSS ने बंद वातावरण में हवा के प्रतिक्रियात्मक सामग्रियों को संभाला। उसने तीन सौ बावन नमूनों से संभावित धातु-युग्म संयोजनों के बहत्तर प्रतित को ढक लिया। यह संख्या सफलता दर नहीं, बल्कि संयोजन कवरेज है।

2026 में यह क्षेत्र तेजी से फैलने लगा। कई कृत्रिम बुद्धिमत्ताएँ भूमिका बाँटती हैं, ऐसी मल्टी-एजेंट प्रयोगशालाएँ बढ़ीं। मानक संचार से उपकरणों को जोड़ने के प्रयास भी जारी रहे। प्रयोग प्रवाह के अनुकूल बेजियन अनुकूलन को सुधारने वाले अध्ययन भी सक्रिय रहे। स्व-चालित प्रयोगशाला को व्यापक रूप से देखने वाले समीक्षा शोधपत्र और मार्गदर्शिकाएँ भी सामने आईं। बड़ा प्रवाह स्पष्ट है। दशा यह है कि मनुष्य के हाथ को बारीक दोहराव से हटाया जाए। लेकिन निर्णय और सत्यापन की जगह अब भी मनुष्य के पास रहती है।

इस अध्याय की प्रणालियाँ अधिकतर प्रारंभिक शोध हैं। प्रीप्रिंट बहुत हैं और क्षेत्रीय मानक अभी कम हैं। इसलिए प्रदर्शन संख्याओं को आगे रखने के बजाय सिद्धांत और सीमाएँ साथ देखी गईं। स्व-चालित प्रयोगशाला मनुष्य को मटिने का उपकरण नहीं है। खतरनाक दोहराव मशीन को सौंपा जाता है और मनुष्य निर्णय और सत्यापन संभालता है। स्व-चालित प्रयोगशाला का असली अर्थ तेज प्रयोग नहीं, बल्कि भरोसेमंद प्रयोग है। इसी सिद्धांत पर रॉकेट सामग्री शोध का स्वचालन सुरक्षित रूप से बढ़ता है।

संबंधित आधार-सामग्री

- King, R. D., Rowland, J., Oliver, S. G., Young, M., Aubrey, W., Byrne, E., Liakata, M., Markham, M., Pir, P., Soldatova, L. N., Sparkes, A., Whelan, K. E., & Clare, A. (2009). The automation of science. *Science*, 324(5923), 85-89. <https://doi.org/10.1126/science.1165620>
- MacLeod, B. P., Parlange, F. G. L., Morrissey, T. D., Häse, F., Roch, L. M., Dettelbach, K. E., Moreira, R., Yunker, L. P. E., Rooney, M. B., Deeth, J. R., Lai, V., Ng, G. J., Situ, H., Zhang, R. H., Elliott, M. S., Haley, T. H., Dvorak, D. J., Aspuru-Guzik, A., Hein, J. E., & Berlinguette, C. P. (2020). Self-driving laboratory for accelerated discovery of thin-film materials. *Science Advances*, 6(20), eaaz8867. <https://doi.org/10.1126/sciadv.aaz8867>
- Szymanski, N. J., Rendy, B., Fei, Y., Kumar, R. E., He, T., Milsted, D., McDermott, M. J., Gallant, M., Cubuk, E. D., Merchant, A., Kim, H., Jain, A., Bartel, C. J., Persson, K. A., Zeng, Y., & Ceder, G. (2023). An autonomous laboratory for the accelerated synthesis of inorganic materials. *Nature*, 624(7990), 86-91. <https://doi.org/10.1038/s41586-023-06734-w>
- Szymanski, N. J., Rendy, B., Fei, Y., Kumar, R. E., He, T., Milsted, D., McDermott, M. J., Gallant, M., Cubuk, E. D., Merchant, A., Kim, H., Jain, A., Bartel, C. J., Persson, K. A., Zeng, Y., & Ceder, G. (2026). Author correction: An autonomous laboratory for the accelerated synthesis of inorganic materials. *Nature*, 650, E1. <https://doi.org/10.1038/s41586-025-09992-y>
- Merchant, A., Bätzner, S., Schoenholz, S. S., Aykol, M., Cheon, G., & Cubuk, E. D. (2023). Scaling deep learning for materials discovery. *Nature*, 624(7990), 80-85. <https://doi.org/10.1038/s41586-023-06735-9>
- McDermott, M. J., Dwaraknath, S. S., & Persson, K. A. (2021). A graph-based network for predicting chemical reaction pathways in solid-state materials synthesis. *Nature Communications*, 12, 3097. <https://doi.org/10.1038/s41467-021-23339-x>

- Tom, G., Schmid, S. P., Baird, S. G., Cao, Y., Darvish, K., Hao, H., Lo, S., Pablo-García, S., Rajaonson, E. M., Skreta, M., Yoshikawa, N., Corapi, S., Akkoc, G. D., Strieth-Kalthoff, F., Seifrid, M., & Aspuru-Guzik, A. (2024). Self-driving laboratories for chemistry and materials science. *Chemical Reviews*, 124(16), 9633-9732. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.4c00055>
- Boiko, D. A., MacKnight, R., Kline, B., & Gomes, G. (2023). Autonomous chemical research with large language models. *Nature*, 624, 570-578. <https://doi.org/10.1038/s41586-023-06792-0>
- Noh, H., Na, G. S., Lee, N., & Park, C. (2026). MSP-LLM: A unified large language model framework for complete material synthesis planning. arXiv preprint, arXiv:2602.07543. <https://arxiv.org/abs/2602.07543>
- Yoshikawa, N., & Tamura, R. (2026). NIMO Controller: a self-driving laboratory orchestrator based on the Model Context Protocol. arXiv preprint, arXiv:2605.15227. <https://arxiv.org/abs/2605.15227>
- Tamura, R., & Yoshikawa, N. (2026). NIMO: A software platform for closed-loop materials exploration with diverse AI algorithms. arXiv preprint, arXiv:2606.15522. <https://arxiv.org/abs/2606.15522>
- Ren, Z., Tan, H., Yee, J., & Hippalgaonkar, K. (2026). PUDA: An AI-native hardware harness for self-driving laboratories. arXiv preprint, arXiv:2607.26464. <https://arxiv.org/abs/2607.26464>
- Fei, Y., Rendy, B., Yang, X., Woo, J., Huang, X., Li, C., Wang, S., Milsted, D., Zeng, Y., & Ceder, G. (2026). Agentic LLM reasoning in a self-driving laboratory for air-sensitive lithium halide spinel conductors. arXiv preprint, arXiv:2604.11957. <https://arxiv.org/abs/2604.11957>
- Kusne, A. G., & McDannald, A. (2026). Managing autonomous materials labs with multi-agent AI and its implications for the science of science. *Communications Materials*, 7, 173. <https://doi.org/10.1038/s43246-026-01219-5>
- Lv, S., Peng, L., Jiao, S., Yao, Y., Wu, W., & Hu, W. (2026). ChatMat: a multi-agent chemist for autonomous material prediction and exploration. *Digital Discovery*, 5(7), 2886-2898. <https://doi.org/10.1039/d5dd00582e>
- Lee, H., Yoo, H. J., Jang, H. S., Park, B., Park, Y. J., & Han, S. S. (2026). Toward self-driving laboratory 2.0 for chemistry and materials discovery. *Materials Horizons*, 13(10), 4712-4739. <https://doi.org/10.1039/d5mh01984b>
- Zhu, J., Zhang, L., Zhu, Y., Lin, X., Wu, Y., Di, S., Liu, B., Luo, Y., & Zhang, T. (2026). A survey of agentic materials science and engineering: where are we and where are we going? *Journal of Materials Informatics*, 6, 7. <https://doi.org/10.20517/jmi.2026.07>
- Tobias, A. V., & Wahab, A. (2025). Autonomous 'self-driving' laboratories: a review of technology and policy implications. *Royal Society Open Science*, 12(7), 250646. <https://doi.org/10.1098/rsos.250646>
- Wakabayashi, Y. K., & Otsuka, T. (2026). Bayesian optimization for self-driving materials laboratories: From algorithms to physics-informed workflows. arXiv preprint, arXiv:2608.26016. <https://arxiv.org/abs/2608.26016>
- Ntagiantas, A., Tsilimidos, P., Giannakopoulos, G., Rekatsinas, C., & Krokidas, P. (2026). Active learning guided design space refinement for scalable multi-objective Bayesian optimization in materials discovery. arXiv preprint, arXiv:2608.04651. <https://arxiv.org/abs/2608.04651>
- He, C., Singull, M., & Jacobsson, T. J. (2026). Bayesian optimisation for the experimental sciences: A practical guide to data-efficient optimisation of laboratory workflows. *Advanced Intelligent Systems*, 8(5), e202501149. <https://doi.org/10.1002/aisy.202501149>
- Liang, H., Sun, Y., Paxson, R., Lee, C.-Y., Hall, A. T., Warecki, Z., Cumings, J., Koinuma, H., Kusne, A. G., Lippmaa, M., & Takeuchi, I. (2026). Autonomous epitaxial atomic-layer synthesis via real-time computer vision of electron diffraction. arXiv preprint, arXiv:2602.20432. <https://arxiv.org/abs/2602.20432>
- Anthropic. (2025). Model Context Protocol specification (version 2025-06-18). <https://modelcontextprotocol.io/specification/2025-06-18>
- Anthropic. (2024). Introducing the Model Context Protocol. <https://www.anthropic.com/news/model-context-protocol>

अध्याय 4. उच्च-एन्ट्रॉपी मशिर धातु (HEA) और सुपरअलॉय की भौतिक संगत भविष्यवाणी और संघटन अनुकूलन

प्रस्तावना

रसोई में एक बर्तन को लंबे समय तक इस्तेमाल किया जाए तो उसका तला काला पड़ जाता है। आग से बार-बार छूने वाला हस्तिष्क पहले खराब होता है। धातु जतिनी गरम होती है, उतनी नरम और कमजोर होती जाती है। गर्मी से कमजोर होने का यह गुण सभी धातुओं में समान रूप से होता है।

रॉकेट इंजन इस समस्या को किसी भी मशीन से अधिक गंभीर रूप में झेलता है। दहन कक्ष के भीतर ईंधन जलता है और हजारों डिग्री की गैस बनती है। वह गैस नोजल नामक संकरे रास्ते से तेज गति से बाहर निकलती है। नोजल की दीवार को इस गरम गैस को बिल्कुल पास से सहना पड़ता है। यह बर्तन के तले से तुलना न की जा सकने वाली कठोर जगह है।

वायुमंडल में फरि से प्रवेश करने वाले विमान को भी यही चिंता होती है। जब वह तेज गति से हवा को धकेलते हुए आगे बढ़ता है, तो हवा संकुचति होकर गरम हो जाती है। विमान का अगला भाग लाल होकर तपने लगता है। यदविह इस गर्मी को न सह सके, तो संरचना पघिल जाती है या टूट जाती है।

इस वायु-तापन को हथेली से महसूस किया जा सकता है। साइकलि तेज चलाने पर हवा चेहरे से जोर से टकराती है। हाथ को खड़िकी से बाहर निकाले तो हवा हाथ को धकेलती है। विमान उसी हवा को हजारों गुना तेज गति से झेलता है। धकेली गई हवा संकुचति होकर गरम होती है और वह गर्मी आगे के भाग तक पहुंचती है। पुनः प्रवेश सतह के स्थरिता बढि का तापमान 1,600 डिग्री सेल्सियस से ऊपर चला जाता है।

हाइपरसोनिक विमान भी वही गर्मी झेलता है। हाइपरसोनिक गति ध्वनि से पांच गुना से भी अधिक तेज गति है। इस गति से उड़ने पर आगे के पंख का सरि अन्य भागों से अधिक गरम होता है। क्योंकि गरमी संकरे और नुकीले भाग में इकट्ठी होती है। इसलिए इस भाग में ऊंचे तापमान को सहने की उत्कृष्ट क्षमता वाली सामग्री लगाई जाती है।

इसलिए लोग ऐसी धातु की तलाश करते हैं जो अत्यधिक गरम स्थानों में भी अपनी मजबूती न खोए। लंबे समय तक उस स्थान पर बनी रहने वाली धातु निकल-आधारित सुपरअलॉय (Nickel-based superalloy) है। सुपरअलॉय एक ऐसा मशिर धातु है जिसे विशेष रूप से उच्च तापमान को अच्छी तरह सहन करने के लिए डिज़ाइन किया गया है। लेकिन इस धातु की भी एक तापमान सीमा होती है।

यह अध्याय उस सीमा को पार करने वाली नई धातु पर केंद्रित है। इसका मुख्य विषय उच्च-एन्ट्रॉपी मशिर धातु (High-Entropy Alloy, HEA) है। यह कई धातुओं को लगभग समान मात्रा में मिलाकर बनाया गया मशिर धातु है। इनमें से भी केवल उच्च गलनांक वाली धातुओं को चुनकर मिलाने पर यह रॉकेट सामग्री का नया उम्मीदवार बन जाता है। ऐसे मशिर धातु को दुरदम्य उच्च-एन्ट्रॉपी मशिर धातु (Refractory High-Entropy Alloy, RHEA) कहा जाता है।

यह अध्याय ऐसी धातु खोजने की नई विधि समझाता है। मनुष्य के एक-एक कर प्रयोग करने के बजाय कृत्रिम बुद्धिमत्ता (AI) उम्मीदवारों को तेजी से छांटती है। परमाणुओं की व्यवस्था, ऊष्मागतिकी के नियम और बड़े पैमाने की परमाणु गणना किस तरह कृत्रिम बुद्धिमत्ता से मिलती है, इसे क्रम से समझाया जाएगा। विषय धातुओं का है, लेकिन इसे ऋतु और स्कूल जैसी हमारे पास की मसालों में बदलकर समझाया जाएगा।

पहले यह चित्र बनाते हैं कि कृत्रिम बुद्धिमत्ता की जरूरत क्यों है। एक अच्छी मशिर धातु बनाने के लिए तत्वों के प्रकार और अनुपात तय करने पड़ते हैं। तत्व केवल पांच भी हों, तो अनुपातों के संयोजन गनिना कठिन हो जाता है। यदएक-एक बनाकर जांचें, तो पूरा जीवन लगाकर भी सब नहीं देख पाएंगे। कृत्रिम बुद्धिमत्ता इस विशाल उम्मीदवार क्षेत्र को पहले ही संकरा कर देती है।

कृत्रिम बुद्धिमत्ता की भूमिका मार्गदर्शक के निकट है। पहाड़ में रास्ता जानने वाला मार्गदर्शक छोटा रास्ता बताता है। लेकिन शखिर पर चढ़ना अंत में मनुष्य का काम है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता उम्मीदवारों को घटाती है, फरि मनुष्य प्रयोग से उनकी पुष्टि करता है। यह अध्याय उदाहरणों से दिखाता है कि यह सहयोग कैसे होता है।

4.1 चरम एयरोस्पेस वातावरण की आवश्यकताएं और उच्च-ताप मशीन धातुओं की संरचनात्मक सीमाएं

इस खंड में क्या चर्चा होगी

यह खंड पहले यह चर्चा बनाता है कि रॉकेट और पुनः प्रवेश करने वाले विमान जिन उष्मीय वातावरण से मिलते हैं, वह कतिना कठोर है। फिर यह देखता है कि लंबे समय से इस्तेमाल हो रही नकिल-आधारित सुपरअलॉय कहां अपनी सीमा से मिलती है। अंत में यह समझाता है कि अपवर्त्य उच्च-एन्ट्रॉपी मशीन धातु नई विकल्प के रूप में क्यों उभरी है।

सरल शब्दों में, यह खंड समस्या को परिभाषित करने की जगह है। समस्या को ठीक से जानने पर ही आगे आने वाले कृत्रिम बुद्धिमत्ता औजारों की उपयोगिता दखिती है। इसलिए यहां संख्याओं से पहले परिस्थितिको समझने पर जोर दिया गया है।

रॉकेट दहन कक्ष बहुत अधिक दबाव वाला पात्र है। ईंधन और ऑक्सीकारक उसमें साथ जलते हैं और बड़ा दबाव बनाते हैं। यह दबाव कई दसियों मेगापास्कल तक पहुंचता है। कार के टायर का दबाव लगभग 0.2 मेगापास्कल होता है। रॉकेट दहन कक्ष उससे सैकड़ों गुना दबाव सहता है।

दहन कक्ष में बनी गैस नोजल से बाहर निकलती है। इस गैस का तापमान सामग्री के अनुसार हजारों डिग्री तक पहुंचता है। हालांकि दीवार की धातु का तापमान गैस के तापमान जितना नहीं बढ़ता। शीतलन और सीमा परत गर्मी को रोककर धातु का तापमान कम रखते हैं। फिर भी दीवार को मिलने वाली गर्मी की मात्रा बहुत बड़ी होती है। यदि दीवार इस गर्मी को न सह सके, तो वह पघिलकर उसमें छेद बन जाता है और इंजन बेकार हो जाता है।

गर्मी केवल एक बार नहीं आती। इंजन बार-बार चालू और बंद होता है। चालू होने पर वह तेजी से गरम होता है और बंद होने पर तेजी से ठंडा होता है। तापमान के इस तरह ऊपर-नीचे होने को उष्मीय आघात (Thermal shock) कहा जाता है। यह उसी सिद्धांत जैसा है जिसमें कांच के गिलास में अचानक गरम पानी डालने पर दरार पड़ जाती है।

इसमें बल भी जुड़ता है। गरम अवस्था में लंबे समय तक बल लगने पर धातु धीरे-धीरे फैलती है। इस घटना को क्रीप (Creep) कहा जाता है। यह गुड़ की डंडी को लंबे समय तक पकड़ने पर उसके अपने आप झुक जाने जैसा है। ऊंचे तापमान पर यह क्रीप और दोहराया गया भार साथ काम करते हैं और सामग्री को धीरे-धीरे खराब करते हैं।

नकिल-आधारित सुपरअलॉय ऐसी धातु है जो इस वातावरण में लंबे समय तक टिकती रही है। इस धातु की ताकत उसकी सूक्ष्म संरचना से आती है। आधार बनने वाले गामा (γ) फेज के भीतर गामा प्राइम (γ') नामक छोटे कण घनी तरह जड़े होते हैं। ये कण धातु के विकृतिको रोकने वाली रुकावट का काम करते हैं। यह आटे में जड़े छोटे मेवों जैसा है, जो आटे को आसानी से फैलने नहीं देते।

हर सुपरअलॉय में इस रुकावट का प्रकार थोड़ा अलग होता है। अधिक नायोबियम (Nb) वाला इनकोनेल 718 (Inconel 718) इसका उदाहरण है। इस मशीन धातु में गामा प्राइम से अधिक गामा डबल प्राइम (γ'' , Ni_3Nb) नामक फेज मजबूती देता है। रुकावट का नाम अलग हो सकता है, लेकिन सिद्धांत समान है। छोटे कण विकृतिरोकते हैं और धातु को कठोर बनाते हैं।

रॉकेट में अलग-अलग जगहों पर अलग धातुएं इस्तेमाल होती हैं। ईंधन से दीवार को ठंडा करने वाले दहन कक्ष में तांबे की मशीन धातुएं अक्सर इस्तेमाल होती हैं। क्योंकि उनमें गर्मी को तेजी से बाहर निकालने का गुण उत्कृष्ट होता है। नकिल-आधारित सुपरअलॉय टरबाइन जैसे उन पुरजों में इस्तेमाल होती हैं जो लंबे समय तक ऊंचा तापमान झेलते हैं। उससे अधिक गरम नोजल गले या पुनः प्रवेश सतह के लिए अपवर्त्य धातुएं या सरिमिक उम्मीदवार बनते हैं। यह अध्याय इनमें भी सबसे अधिक तापमान वाली जगहों को लक्ष्य करने वाली नई धातुओं पर चर्चा करता है।

समस्या तब दखिती है जब तापमान और बढ़ता है। लगभग 1,150 डिग्री से ऊपर जाने पर ये छोटे कण बड़े हो जाते हैं या कुचल जाते हैं। इसे मोटा होना कहा जाता है। रुकावट गायब हो जाए तो धातु आसानी से फैलती है और मजबूती तेजी से घटती है। नकिल-आधारित सुपरअलॉय का गलनांक लगभग 1,350 डिग्री है, इसलिए उसकी प्रभावी संचालन सीमा गलनांक से काफी कम है।

इसके साथ हानिकारक फेज भी बन सकता है। ऊंचे तापमान पर लंबे समय तक रखने पर परमाणु किसी खास नियम से इकट्ठे होकर कठोर और आसानी से टूटने वाले ढेले बनाते हैं। ऐसे फेज को हानिकारक फेज कहा जाता है। हानिकारक फेज बनने पर धातु आसानी से टूटती है। अच्छी सुपरअलॉय को ऐसे फेज दबाने के लिए डिज़ाइन किया जाता है।

इन समस्याओं के कारण नकिल-आधारित सुपरअलॉय को शीतलन की जरूरत होती है। वास्तविक इंजन में पुरजे के भीतर छोटे रास्ते बनाए जाते हैं। उन रास्तों से ठंडा ईंधन बहाकर दीवार को ठंडा किया जाता है। इस शीतलन के कारण पुरजे को गलनांक से कम तापमान पर इस्तेमाल किया जाता है। लेकिन शीतलन रास्ते बनाने से पुरजे की संरचना जटिल होती है और वजन भी बढ़ता है।

अपवर्त्य उच्च-एन्ट्रॉपी मशिर धातु का लक्ष्य इस शीतलन को घटाना है। यदिसामग्री स्वयं अधिक गरम जगह सह सके, तो शीतलन की कम जरूरत होती है। शीतलन घटे तो संरचना हल्की और सरल हो जाती है। शोधकर्ता 1,400 डिग्री से ऊपर के स्थान पर बना शीतलन टकिने वाली सामग्री को नई मशिर धातु विकास का लक्ष्य मानते हैं।

इसलिए लोगो ने एक बलिकुल अलग रास्ता खोजा। यह विचार है कि स्वयं उच्च गलनांक वाली धातुओं से ही बुनियादी ढांचा तैयार किया जाए। नाइओबियम (Nb), मोलिब्डेनम (Mo), टैंगलम (Ta) और टंगस्टन (W) जैसी धातुएं इसमें शामिल हैं। इनका गलनांक 2,000 डिग्री से काफी अधिक होता है। ऐसी धातुओं को द्रुम्य धातु (Refractory metal) कहा जाता है।

अपवर्त्य उच्च-एन्ट्रॉपी मशिर धातु ऐसी मशिर धातु है जिसमें इन अपवर्त्य धातुओं को कई प्रकारों में लगभग समान मात्रा में मिलाया जाता है। हाल के शोध बताते हैं कि यह मशिर धातु 1,600 डिग्री के संपीड़न परीक्षण में भी नकिल-आधारित सुपरअलॉय से अधिक मजबूती दिखाती है। इसलिए इसे रॉकेट प्रणोदन, हाइपरसोनिक विमान के आगे के पंख और पुनः प्रवेश ऊष्मा ढाल की नई उम्मीदवार माना जाता है।

लेकिन इसमें केवल फायदे नहीं हैं। यह मशिर धातु कमरे के तापमान पर आसानी से टूटने की प्रवृत्ति रखती है। इसे कम तन्यता कहा जाता है। और ऊंचे तापमान पर ऑक्सीजन से मिलने पर सतह भुरभुरी होकर टूटने वाला ऑक्सीकरण होता है। वास्तविक पुरजे के रूप में इसे माल करने से पहले इन दोनों समस्याओं को अवश्य हल करना होगा। कृत्रिम बुद्धिमत्ता का उपयोग ठीक इसी काम को तेजी से हल करने में होता है।

ऑक्सीकरण की समस्या को थोड़ा और देखते हैं। जनि मशिर धातुओं में टंगस्टन या मोलिब्डेनम अधिक होता है, वे ऊंचे तापमान पर ऑक्सीजन से तीव्र प्रतिक्रिया करती हैं। सतह की ऑक्साइड परत मजबूती से चपक नहीं पाती और पाउडर की तरह झड़ जाती है। इस तरह भुरभुरा होकर ढहने वाले ऑक्सीकरण को पेस्ट ऑक्सीकरण (Pest oxidation) कहा जाता है। यह नाम इसलिए पड़ा कि यह अनाज कुतरने वाले कीट की तरह सतह को कुतरता है।

इस समस्या को रोकने का उपाय सुरक्षात्मक ऑक्साइड परत है। यदिएल्युमिनियम या क्रोमियम उचित मात्रा में मिलाया जाए, तो सतह पर घनी ऑक्साइड परत बनती है। यह परत ऑक्सीजन को भीतर घुसने से रोकती है। यह बर्तन के तले पर चपिकी परत के उलटे भीतर की धातु की रक्षा करने जैसा है। अच्छी परत बनाने के लिए कितना और कैसे मिलाना है, यही डिजाइन का मुख्य बंदु है।

कोटिंग के साथ मेल भी महत्वपूर्ण है। मशिर धातु के ऊपर सामान्यतः ऑक्सीकरण-रोधी कोटिंग चढ़ाई जाती है। समस्या यह है कि धातु और कोटिंग तापमान के अनुसार अलग-अलग फैलते हैं। फैलने की इस मात्रा को ऊष्मीय प्रसार गुणांक कहा जाता है। यदि दोनों सामग्रियों के ऊष्मीय प्रसार गुणांक बहुत अलग हों, तो तापमान बढ़ने पर सीमा फट जाती है। इसलिए मशिर धातु को केवल मजबूती ही नहीं, बल्कि कोटिंग के साथ मेल भी साथ में मिलाना पड़ता है।

इस तरह नोजल लाइनर की मशिर धातु को एक ही समय में कई शर्तें पूरी करनी पड़ती हैं। ऊंचा गलनांक, कम घनत्व, उच्च-ताप मजबूती, ऑक्सीकरण प्रतिरोध और कोटिंग के साथ मेल सभी चाहिए। शर्तें अक्सर एक-दूसरे से टकराती भी हैं। ऐसी उलझी समस्या को केवल मानवीय प्रयोग से हल करना कठिन है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता इस उलझी समस्या को तेजी से व्यवस्थित करने वाले औजार के रूप में आती है।

4.2 चार मुख्य प्रभावों का भौतिक मॉडलिंग और फेज संतुलन ऊष्मागतिकी

इस खंड में क्या चर्चा होगी

यह खंड बताता है कि उच्च-एन्ट्रॉपी मशिर धातु को विशेष क्यों माना गया, इसके आरंभिक व्याख्यात्मक ढांचे पर चर्चा करता है। जब यह क्षेत्र पहली बार खुला, तो शोधकर्ताओं ने चार प्रभाव सामने रखे। इन्हें चार मुख्य प्रभाव कहा जाता है। ये हैं वन्यास एन्ट्रॉपी, जाली विकृति, धीमा प्रसरण और कॉकटेल प्रभाव।

ये चारों पक्के भौतिक नियम नहीं, बल्कि आरंभिक परकल्पनाओं के अधिक नकिट हैं। आगे देखा जाएगा कि धीमा प्रसरण और उच्च एन्ट्रॉपी के कारण एकल-फेज स्थिराकरण सामान्य नियम के रूप में सिद्ध नहीं हुए हैं। फिर भी इस ढांचे को जानना जरूरी है ताकि समझा जा सके कि कृत्रिम बुद्धिमत्ता क्या गणना करना चाहती है। प्रत्येक को जीवन की मसालों में बदलकर एक-एक कर समझते हैं।

पहले देखते हैं कि उच्च-एन्ट्रॉपी मशिर धातु क्या है। सामान्य मशिर धातु में एक मुख्य धातु में थोड़ी मात्रा में दूसरी धातु मिलाई जाती है। इसपात में लोहा मुख्य होता है और उसमें थोड़ा कार्बन होता है। उच्च-एन्ट्रॉपी मशिर धातु इस तरीके से अलग है। इसमें पांच या उससे अधिक धातुएं लगभग समान मात्रा में मिलाई जाती हैं। मानो इसमें कई मुख्य पात्र हों।

यह अवधारणा 2004 में दो शोध दलों ने अलग-अलग प्रकाशित की। वे ताइवान के येह (Yeh) शोध दल और ब्रिटन के कैंटर (Cantor) शोध दल थे। उन्होंने दिखाया कि एक मुख्य तत्व पर निर्भर हुए बना भी स्थिर धातु बनाई जा सकती है। इस खोज ने नई मशिर धातु डिजाइन का द्वार खोला।

पहला सदिधांत वन्यास एन्ट्रॉपी (Configurational entropy) है। एन्ट्रॉपी मश्रिण की संभावति व्यवस्थाओं की संख्या से जुड़ा मान है। लॉकर में वस्तुएं रखने के तरीके जतिने अधिक होते हैं, अव्यवस्था उतनी बड़ी होती है। कई धातुओं को लगभग समान मात्रा में मलाने पर परमाणुओं को व्यवस्थित करने के तरीके बहुत अधिक हो जाते हैं। यह बड़ी अव्यवस्था धातु को एक ही मश्रिति अवस्था में बनाए रखने में मदद करती है।

इस मश्रिति अवस्था को ठोस वलियन (Solid solution) कहा जाता है। ठोस वलियन वह अवस्था है जिसमें कई तत्व एक ही क्रस्टल जाली के भीतर समान रूप से घुल जाते हैं। यह चीनी के पानी में घुलकर एक तरल बनने जैसा है। एन्ट्रॉपी बड़ी हो तो तत्वों को अलग-अलग इकट्ठा होकर कठोर यौगिक बनने से रोकती है। इसलिए उच्च-एन्ट्रॉपी मश्रि धातु यौगिक के बजाय ठोस वलियन बनाने में अधिक सक्षम होती है।

दूसरा सदिधांत जाली विकृति (Lattice distortion) है। धातु के परमाणुओं के आकार अलग-अलग होते हैं। जब बड़े और छोटे परमाणु एक ही जाली में मलिते हैं, तो जाली ऊबड़-खाबड़ होकर विकृत हो जाती है। यह चकिनी ईंटों के बजाय अलग-अलग आकार के पत्थरों से बनी दीवार जैसा है। यह विकृत जाली रूपांतरण को रोकने वाली दीवार बनती है।

विकृतिब होती है जब वसि्थापन (Dislocation) नामक छोटा दोष जाली के भीतर फसिलता है। यदजाली ऊबड़-खाबड़ हो, तो वसि्थापन का फसिलना कठिनी होता है। यह कंकरीली जमीन पर गाड़ी खींचने की कठिनी जैसा है। इसलिए बड़ी जाली विकृति वाली मश्रि धातु आसानी से नहीं फैलती और कठोर होती है।

तीसरा सदिधांत धीमा प्रसरण (Sluggish diffusion) है। प्रसरण परमाणुओं के अपनी जगह बदलने की गति है। उच्च-एन्ट्रॉपी मश्रि धातु में हर परमाणु का पड़ोसी वातावरण अलग होता है। कुछ जगहों से जाना आसान होता है और कुछ जगहों से कठिनी। माना जाता है कि यह असमानता औसतन परमाणुओं की गति को धीमा करती है।

यदपरमाणु धीरे-धीरे चलते हैं, तो ऊँचे तापमान पर भी सूक्ष्म संरचना आसानी से नहीं बदलती। इसलिए क्रस्टल कण धीरे-धीरे बढ़ सकते हैं और क्रीप के प्रतर् अधिक मजबूत हो सकते हैं। पर यह प्रभाव हर उच्च-एन्ट्रॉपी मश्रि धातु में हमेशा मजबूत रूप से नहीं दखिता। असली प्रसरण गति तत्वों के संयोजन, तापमान और क्रस्टल संरचना पर निर्भर करती है। इसलिए हाल के शोध इस प्रभाव को सामान्य नियम नहीं, बल्कि परिस्थिति के अनुसार जाँचने योग्य गुण मानते हैं।

चौथा सदिधांत कॉकटेल प्रभाव (Cocktail effect) है। कॉकटेल कई सामग्री मलाकर नया स्वाद बनाने वाला पेय है। हर सामग्री के स्वाद को अलग-अलग जोड़ने से जो स्वाद बनता है, वह मलाने के बाद बने स्वाद जैसा नहीं होता। धातुओं में भी ऐसा ही होता है। जब कई तत्व साथ होते हैं, तो ऐसे गुण दखिते हैं जिन्हें हर तत्व के गुणों को अलग-अलग जोड़कर समझाना कठिनी होता है।

यह अरैखिक गुण मजबूती, संक्षारण प्रतरीध और दृढ़ता में दखिई देता है। समस्या यह है कि मनुष्य ऐसे संयोजन प्रभाव को पहले से जानना कठिनी पाता है। क्योंकि तत्व संयोजनों की संख्या बहुत अधिक होती है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता ऐसे छपि संयोजन प्रभावों को डेटा में खोजने के उपकरण के रूप में इस्तेमाल होती है।

ये चार सदिधांत सीधे रॉकेट सामग्री से जुड़ते हैं। वन्यास एन्ट्रॉपी ऊँचे तापमान पर सूक्ष्म संरचना को अलग-अलग होने से रोकने में मदद करती है। जाली विकृति मजबूती बढ़ाती है। धीमा प्रसरण क्रीप के लिए लाभदायक हो सकता है। कॉकटेल प्रभाव ऑक्सीकरण प्रतरीध जैसे अनपेक्षित लाभ देता है। चरम वातावरण सहने के लिए चारों सदिधांतों को साथ काम करना चाहिए।

पर ये सदिधांत सर्वशक्तिमान चाबी नहीं हैं। कुछ संयोजनों में ये मजबूत दखिते हैं, कुछ संयोजनों में कमजोर। इसलिए सदिधांत जान लेने पर भी वास्तविक संरचना को एक-एक करके जाँचना पड़ता है। सदिधांत दशिा बताते हैं, और पुष्टि गणना तथा प्रयोग करते हैं। कृत्रिम बुद्धिमत्ता इस पुष्टि को बहुत तेज कर देती है।

ये चार सदिधांत अंत में एक ही प्रश्न में समिटते हैं। प्रश्न यह है कि कौन-सी संरचना एक फेज के रूप में स्थिर रहेगी। इस प्रश्न का उत्तर देने वाला वज्जिान फेज-संतुलन ऊष्मागतिकी है। अगले दो उपखंडों में इस नरिणय में मदद करने वाले दो संकेतकों को देखा जाता है।

4.2.1 एक फेज के रूप में बने रहने की संभावना मापने वाला ओमेगा पैरामीटर

ऊष्मागतिकी ऊर्जा और स्थरिता का अध्ययन करने वाला वज्जिान है। कौन-सी अवस्था स्थरि है, यह मुक्त ऊर्जा (Free energy) से तय कया जाता है। कम मुक्त ऊर्जा वाली अवस्था अधिक स्थरि होती है। जैसे पानी ऊँची जगह से नीची जगह की ओर बहता है, वैसे ही पदार्थ कम मुक्त ऊर्जा वाली अवस्था में जाना चाहता है।

मुक्त ऊर्जा दो मानों से मलिकर तय होती है। एक एन्थैल्पी (Enthalpy) है। एन्थैल्पी इस बात से जुड़ा मान है कि परमाणु एक-दूसरे को पसंद करते हैं या नहीं। जो परमाणु एक-दूसरे से अच्छी तरह मेल खाते हैं, वे मलिना चाहते हैं। जो परमाणु एक-दूसरे को पसंद नहीं करते, वे अलग होना चाहते हैं। दूसरा मान ऊपर देखा गया एन्ट्रॉपी है। एन्ट्रॉपी मश्रिण की अव्यवस्था को दखिताती है।

इन दोनों की खींचतान तापमान के अनुसार बदलती है। तापमान जतिना अधिक होता है, एनर्ट्रोपी की शक्ति उतनी मजबूत होती है। यह वैसा है जैसे गर्म कमरे में लोग अधिक स्वतंत्र रूप से फैल जाते हैं। इसलिए ऊँचे तापमान पर अव्यवस्थिति ठोस वलियन स्थिर होना आसान होता है। उच्च-एनर्ट्रोपी मशिर धातु के ऊँचे तापमान पर एक फेज के रूप में अच्छी तरह बने रहने का कारण यही है।

वनियास एनर्ट्रोपी तब बढ़ती है जब तत्वों को सममोल अनुपात में मिलाया जाता है। सममोल अनुपात का अर्थ है हर तत्व को समान मात्रा में डालना। पाँच तत्वों को समान मात्रा में मिलाने पर वनियास एनर्ट्रोपी अपने अधिकतम मान तक पहुँचती है। तत्वों की संख्या बढ़ने पर यह मान और बढ़ा होता है। वनियास एनर्ट्रोपी के इस बड़े गुण से उच्च-एनर्ट्रोपी नाम आया।

ओमेगा पैरामीटर एकल-फेज ठोस वलियन की संभावना को सरलता से देखने वाला मान है। यह मान तीन बातों को साथ देखता है। औसत गलनांक, वनियास एनर्ट्रोपी और मशिरण एन्थैल्पी का आकार। यदि एनर्ट्रोपी का अच्छा प्रभाव एन्थैल्पी के बुरे प्रभाव से बढ़ा हो, तो ओमेगा मान बढ़ता है। ओमेगा बढ़ा हो तो माना जाता है कि एक फेज के रूप में बने रहना आसान है।

इसके साथ परमाणु आकार का अंतर भी जाँचा जाता है। यदि परमाणु आकार बहुत अलग हों, तो जाली टकि नहीं पाती और अलग हो जाती है। इसलिए आकार का अंतर एक नश्चिति मान से छोटा होना चाहिए, तभी एकल-फेज ठोस वलियन अच्छी तरह बनता है। शोधकर्ता अनुभवजन्य नियम का उपयोग करते हैं कि ओमेगा बढ़ा हो और आकार का अंतर छोटा हो तो एकल-फेज ठोस वलियन बनता है।

यह नियम सुविधाजनक है, लेकिन अंतिम निर्णय का उपकरण नहीं है। वास्तविक मशिर धातु स्थानीय क्रम, शीतलन गति, अशुद्धियों और ऊष्मा उपचार से प्रभावित होती है। समान संरचना होने पर भी बनाने की वधि के अनुसार सूक्ष्म संरचना बदलती है। इसलिए ओमेगा नियम केवल पहली छँटाई के लिए इस्तेमाल होता है।

सटीक निर्णय अधिक गणना वाली वधियों द्वारा लिया जाता है। इसकी एक प्रमुख वधि CALPHAD है। CALPHAD वभिन्न प्रावस्थाओं की मुक्त ऊर्जा को डेटा के रूप में संचित करके प्रावस्था संतुलन की गणना करने की वधि है। इसमें घनत्व फलनक सिद्धांत (Density Functional Theory, DFT) गणनाएं और प्रयोग जोड़े जाते हैं। घनत्व फलनक सिद्धांत इलेक्ट्रॉनों के व्यवहार से ऊर्जा की गणना करने वाली एक क्वांटम गणना वधि है।

एन्थैल्पी और एनर्ट्रोपी की खींचतान को जीवन के उदाहरण से समझते हैं। मान लें कि किष्का में लड़के और लड़कियाँ मलिकर बैठे हैं। अपने मतिर समूहों में इकट्ठा होने की शक्ति एन्थैल्पी जैसी है। सीटों को स्वतंत्र रूप से मिलाने की शक्ति एनर्ट्रोपी जैसी है। शांत समय में समूह इकट्ठा होते हैं। सक्रिय समय में वे स्वतंत्र रूप से मिलते हैं। यह वैसा है जैसे तापमान बढ़ने पर मशिरति होने की शक्ति मजबूत होती है।

कृत्रिम बुद्धिमत्ता इस प्रक्रिया को तेज बनाती है। ओमेगा जैसे सरल संकेतक बहुत अधिक डेटा होने पर कृत्रिम बुद्धिमत्ता की इनपुट विशेषताओं के रूप में इस्तेमाल होते हैं। कृत्रिम बुद्धिमत्ता इन विशेषताओं को देखकर जल्दी छँटती है कि कौन-सी संरचना एक फेज के रूप में बचेगी। फरि केवल ऐसे संकुचति उम्मीदवारों की कैलफैड और प्रयोग से पुष्टि की जाती है। यही सहयोग वसित संरचना क्षेत्र को सँभालने की कुंजी है।

हाल के शोध ने इस पूर्वानुमान की सटीकता को काफी बढ़ाया है। कई भौतिक विशेषताओं को साथ डालने पर फेज पूर्वानुमान की सटीकता लगभग 70 प्रतिशत से बढ़कर 90 प्रतिशत से अधिक हो जाती है। इस सूत्र पर 10 लाख से अधिक संरचनाओं को तेजी से छँटा जा सकता है। इसका अर्थ है कि कृत्रिम बुद्धिमत्ता मनुष्य का काम बहुत कम कर देती है। इस तरह छँटे गए थोड़े से उम्मीदवारों पर समय और संसाधन लगाए जाते हैं।

4.2.2 संयोजक इलेक्ट्रॉन सांद्रता से क्रिस्टल संरचना का अनुमान लगाना

यह उपखंड इस सूचक पर चर्चा करता है कि मशिर धातु किस प्रकार की क्रिस्टल संरचना प्राप्त करेगी। वह सूचक संयोजकता इलेक्ट्रॉन सांद्रता (Valence Electron Concentration, VEC) है। इसका अर्थ बाहरी इलेक्ट्रॉनों की औसत संख्या है। सबसे पहले यह देखते हैं कि क्रिस्टल संरचना क्या है। धातु के परमाणु बेतरतीब ढंग से नहीं रखे जाते हैं। वे एक नियमिति जाली में व्यवस्थित होते हैं। यह नियमों के अनुसार ईटें जोड़ने जैसा है। व्यवस्थिति करने के तरीके के आधार पर उनके गुण बदल जाते हैं।

रॉकेट सामग्रियों में दो महत्वपूर्ण संरचनाएं हैं। एक काय-केंद्रित घनीय (Body-Centered Cubic, BCC) है। यह एक ऐसी व्यवस्था है जिसमें एक घन के आठ कोनों और ठीक केंद्र में एक परमाणु होता है। दूसरी फलक-केंद्रित घनीय (Face-Centered Cubic, FCC) है। यह आठ कोनों और छह फलकों के केंद्र में परमाणुओं की व्यवस्था है।

इन दोनों संरचनाओं के गुण अलग हैं। बॉडी-सेटर्ड क्यूबिक कई बार ऊँचे तापमान की मजबूती के लिए लाभदायक होती है। पर कमरे के तापमान पर इसमें भंगुरता दिखना आसान होता है, यानी यह आसानी से टूट सकती है। फेस-सेटर्ड क्यूबिक में अक्सर अच्छी तन्यता होती है, यानी यह अच्छी तरह खिंची सकती है। कौन-सी संरचना बनेगी, यह पहले से जानने पर डिजाइन आसान हो जाता है।

संयोजक इलेक्ट्रॉन सांद्रता इस संरचना का अनुमान लगाने वाला संकेतक है। संयोजक इलेक्ट्रॉन परमाणु का बाहरी इलेक्ट्रॉन है। यही इलेक्ट्रॉन बंधन में भाग लेता है। हर तत्व जतिने बाहरी इलेक्ट्रॉन देता है, उन्हें संरचना अनुपात से औसत करने पर जो मान मलित है, वही संयोजक इलेक्ट्रॉन सांद्रता है। यह मान क्रिस्टल संरचना की दशा बताता है।

अनुभवजन्य नियम इस प्रकार है। यदि यह मान लगभग 6.87 से छोटा हो, तो बॉडी-सेटर्ड क्यूबिक स्थिर होती है। यदि 8 से बड़ा हो, तो फेस-सेटर्ड क्यूबिक स्थिर होती है। इनके बीच दोनों संरचनाएँ मलित हैं। अपवर्त्य उच्च-एनर्जीपी मशिर धातु में यह मान छोटा होता है, इसलिए बॉडी-सेटर्ड क्यूबिक अधिक होती है। प्रसिद्ध कैटर मशिर धातु में यह मान बड़ा है, इसलिए वह फेस-सेटर्ड क्यूबिक है।

इस नियम की उपयोगिता हाल के कृत्रिम बुद्धिमत्ता शोध में भी दखिती है। 2026 की शुरुआत में प्रकाशित एक प्रीप्रिंट अध्ययन है। प्रीप्रिंट अध्ययन वह प्रारंभिक शोध है जो सहकर्मि समीक्षा से नहीं गुजरा होता। इस अध्ययन ने अपवर्त्य उच्च-एनर्जीपी मशिर धातुओं के गलनांक का पूर्वानुमान किया। इसमें क्रिस्टल संरचना को सीधे नहीं डाला गया, केवल तत्व संरचना से मली विशेषताएँ इस्तेमाल हुईं। संयोजक इलेक्ट्रॉन सांद्रता जैसी भौतिक अर्थ रखने वाली विशेषताओं ने पूर्वानुमान में बड़ा योगदान दिया। इसका अर्थ है कि मनुष्य द्वारा संचित भौतिक ज्ञान और कृत्रिम बुद्धिमत्ता द्वारा चुनी गई विशेषताएँ एक-दूसरे से जुड़ती हैं।

यह उदाहरण दो बातें दखिता है। पहली यह कि सरल संकेतक आज भी उपयोगी हैं। दूसरी यह कि कृत्रिम बुद्धिमत्ता भौतिकी से टकराए बनी सीख सकती है। ये दोनों बातें इस पूरे अध्याय को दशा देती हैं।

यहाँ थोड़ा और देखते हैं कि संरचना गुणों को क्यों नयितरति करती है। वरूपण तब होता है जब वसिथापन जाली के भीतर फसिलते हैं। फेस-सेटर्ड क्यूबिक में परमाणुओं से घनी भरी सतहें होती हैं, इसलिए वसिथापन आसानी से गुजरते हैं। इसलिए यह अच्छी तरह खचिती है और आसानी से नहीं टूटती। बॉडी-सेटर्ड क्यूबिक में ऐसी घनी सतह नहीं होती। कारण यह नहीं कि फसिलने के रास्तों की संख्या कम है, बल्कि यह है कि वसिथापन के गुजरने के लिए पार करनी पड़ने वाली ऊर्जा बाधा बड़ी होती है। यह बाधा तापमान के प्रतिसिंवेदनशील होती है। इसलिए बॉडी-सेटर्ड क्यूबिक कमरे के तापमान पर आसानी से टूटती है, और तापमान बढ़ने पर वसिथापन आसानी से चलते हैं तथा मजबूती बनी रहती है।

यह अंतर सीधे रॉकेट सामग्री के चयन से जुड़ता है। नोजल लाइनर के लिए सबसे महत्वपूर्ण चीज ऊँचे तापमान की मजबूती है। इसलिए बॉडी-सेटर्ड क्यूबिक श्रेणी की अपवर्त्य उच्च-एनर्जीपी मशिर धातुएँ उम्मीदवार बनती हैं। पर इनके साथ कमरे के तापमान की भंगुरता की कमजोरी भी आती है। इस कमजोरी को घटाने के लिए संरचना को सूक्ष्म रूप से नयितरति करना पड़ता है। संयोजक इलेक्ट्रॉन सांद्रता उस नयितरण का पहला दशा-सूचक बनती है।

पर संयोजक इलेक्ट्रॉन सांद्रता नियम की भी सीमा है। 6.87 और 8 की सीमाएँ संक्रमण धातु मशिर धातुओं के एक विशेष समूह से नकिले अनुभवजन्य मान हैं। वे दूसरे मशिर धातु समूहों पर वैसे ही लागू नहीं होते। यह मान औसत है, इसलिए स्थानीय वातावरण को भी नहीं दखा सकता। औसत मान समान होने पर भी तत्व संयोजन के अनुसार वास्तविक संरचना बदल सकती है। इसके अलावा यह नियम यह नहीं बताता कि ठोस और आसानी से टूटने वाले अंतरधात्विक यौगिक कब बनेंगे। लावेंस फेज और सगिमा फेज इसके उदाहरण हैं। ऐसे फेज मलि जाएँ तो मशिर धातु कमजोर हो जाती है। इसलिए यह संकेतक भी पहली छँटाई के लिए इस्तेमाल होता है और फरि सटीक गणना से पुष्टि की जाती है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता इस छँटाई को कहीं अधिक तेज और व्यापक बना देती है।

4.3 शोधपत्रों के पाठ से सामग्री की विशेषताएँ नकिलना

कृत्रिम बुद्धिमत्ता धातुओं को आँखों से नहीं देख सकती। वह संख्या में बदली गई विशेषताओं के माध्यम से ही सामग्री को जानती है। इन विशेषताओं को डस्क्रिप्टर (Descriptor) कहा जाता है। यह खंड शोधपत्रों के पाठ से इन विशेषताओं को नकिलने की वधिदेखता है। पहले यह समझना चाहिए कि संरचना क्षेत्र कतिना वसित है। पाँच या अधिक तत्वों को मलिाकर उनके अनुपात बदलने पर संभावनाओं की संख्या वसिफोट की तरह बढ़ती है। कॉफी में डालने की सामग्री दो हो तो संयोजन कुछ ही होते हैं। सामग्री दस हो तो संयोजनों की गनिती कठिनी हो जाती है। बहुघटक मशिर धातु ठीक ऐसी ही स्थिति में होती है।

इस वसित क्षेत्र को प्रयोग से पूरा देखना असंभव है। एक मशिर धातु बनाने और परखने में समय और पैसा लगता है। कैलफैड गणना में भी हर संरचना के लिए समय लगता है। इसलिए वसित क्षेत्र को जल्दी संकुचि करने वाले मार्गदर्शक की आवश्यकता होती है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता वही मार्गदर्शक है।

कृत्रिम बुद्धिमत्ता का उपयोग करने के लिए सामग्री को संख्याओं में बदलना पड़ता है। डस्क्रिप्टर वही संख्याएँ हैं। परमाणु त्रिज्या, वदियुतऋणात्मकता, गलनांक और बाहरी इलेक्ट्रॉनों की संख्या प्रमुख डस्क्रिप्टर हैं। वदियुतऋणात्मकता परमाणु द्वारा इलेक्ट्रॉन को खींचने की शक्ति है। ऐसे मानों को संरचना के अनुसार गणना कर कृत्रिम बुद्धिमत्ता में डाला जाता है।

समस्या यह है कि केवल ये संख्याएँ पर्याप्त नहीं हैं। समान संरचना होने पर भी बनाने की विधि के अनुसार गुण बहुत बदलते हैं। ऊष्मा उपचार तापमान, धारण समय और शीतलन विधि सूक्ष्म संरचना बदलते हैं। ऐसी प्रक्रिया संबंधी जानकारी को एक संख्या में रखना कठिन है। पर शोधपत्रों में यह जानकारी पाठ के रूप में लिखी होती है।

प्राकृतिक भाषा-व्युत्पन्न डिस्क्रिप्टर (Natural language-derived descriptor) इस अंतर को भरता है। यह वह तकनीक है जिसमें कृत्रिम बुद्धिमत्ता शोध पत्रों के वाक्यों को पढ़कर उन्हें फीचर मानों में बदल देती है। यह इंसानों द्वारा पढ़े जाने वाले पाठ को मशीनों द्वारा पढ़े जाने वाले अंकों में बदलने जैसा है। हाल के अध्ययनों ने इस पद्धति से प्रक्रिया विवरणों को भी विशेषताओं में शामिल किया है।

2026 में प्रकाशित एक प्रीप्रिंट अध्ययन इसका अच्छा उदाहरण है। यह अमेरिका के पेनसिल्वेनिया स्टेट विश्वविद्यालय के शोधकर्ताओं का परिणाम है। उन्होंने ऊष्मा उपचार प्रक्रिया समझाने वाले वाक्यों को बड़े भाषा मॉडल में डाला। उन वाक्यों की संख्यात्मक अभिव्यक्ति से मूल प्रक्रिया मानों को लगभग वैसा ही फरि से निकाला जा सका। और इस अभिव्यक्ति को विशेषता के रूप में इस्तेमाल कर मशीन धातु की कठोरता का पूर्वानुमान लगभग 20 प्रतिशत सुधारा गया। यह अध्ययन अभी सहकर्म समीक्षा से नहीं गुजरा प्रारंभिक शोध है।

साहित्य माइनरि ऐसी विशेषताओं को बड़े पैमाने पर जमा करने का कार्य है। यह धातुओं पर लिखे अनगिनत शोधपत्रों से फेज परिवर्तन तापमान, ठोस विलयता सीमा, मजबूती और तन्यता के मान अपने आप निकालता है। पहले मनुष्य हाथ से सारणी बनाते थे। अब बड़े भाषा मॉडल वाक्य पढ़ते हैं और सारणी भरते हैं। इस तरह जमा डेटा कृत्रिम बुद्धिमत्ता के प्रशिक्षण का आधार बनता है।

भाषा मॉडल को सीधे गुण पूर्वानुमान में इस्तेमाल करने वाला शोध भी है। यह 2025 में एक शैक्षणिक पत्रिका में प्रकाशित परिणाम है। इस शोध ने ट्रांसफॉर्मर नाम की भाषा मॉडल संरचना का उपयोग किया। ट्रांसफॉर्मर वाक्य में शब्दों के संबंध पढ़ने वाली कृत्रिम बुद्धिमत्ता है। उसने मशीन धातु की संरचना और शर्तों को पाठ की तरह लेकर गुणों का पूर्वानुमान किया। यह भाषा से जुड़ी तकनीक के सामग्री शोध में आने का उदाहरण है।

हाल में बड़े भाषा मॉडल से उच्च-एनर्जी मशीन धातु का डेटाबेस बनाने वाला शोध भी सामने आया है। यह 2026 में एक शैक्षणिक पत्रिका में प्रकाशित परिणाम है। यह डेटाबेस शोधपत्रों से संरचना और गुणों को अपने आप व्यवस्थित करता है। जिस काम में मनुष्य के हाथ से बहुत समय लगता था, उसे इसने बहुत तेज कर दिया। इस तरह जमा डेटा अगले खंड में देखे जाने वाले पूर्वानुमान मॉडल का आधार बनता है।

इस विधि की भी सीमाएँ हैं। हर शोधपत्र में माप की शर्तें और लिखने का तरीका अलग होता है। यदि मशीन वाक्य को गलत पढ़े, तो गलत मान सामग्री में मिला जाता है। इसलिए इकट्ठी की गई सामग्री की फरि से मनुष्य को जाँच करनी पड़ती है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता इकट्ठा करे और मनुष्य जाँच करे, यही सहयोग आज का मानक है।

सामग्री की गुणवत्ता ही पूर्वानुमान की गुणवत्ता तय करती है। गलत सामग्री से सीखने पर गलत उत्तर मिलता है। यदि निष्कर्ष गलत हो, तो कुशल बढ़ई भी मजबूत घर नहीं बना सकता। इसलिए सामग्री इकट्ठा करने का चरण पूर्वानुमान जितना ही महत्वपूर्ण है। अच्छी सामग्री ही अच्छी कृत्रिम बुद्धिमत्ता का आधार है।

हाल में कृत्रिम बुद्धिमत्ता नियमों को स्वयं फैलाने भी लगी है। 2026 में एक शैक्षणिक पत्रिका में छपे एक अध्ययन ने ज्ञान-सृष्टि कृत्रिम बुद्धिमत्ता ढाँचा पेश किया। इस अध्ययन ने इस बंधन से बाहर कदम रखा कि तत्वों को समान मात्रा में मिलाया जाए। इसने उद्देश्य के अनुसार तत्वों के अनुपात को स्वतंत्र रूप से बदलकर एकल-चरण उच्च-एनर्जी मशीन धातु डिजाइन की। यह मनुष्य द्वारा संचित धातुकर्म ज्ञान को कृत्रिम बुद्धिमत्ता में जोड़कर मिला परिणाम है।

यह प्रवाह कृत्रिम बुद्धिमत्ता और मानवीय ज्ञान का सहयोग दिखाता है। केवल कृत्रिम बुद्धिमत्ता का उपयोग करें, तो वह सामग्री के बाहर डगमगाती है। केवल मानवीय नियमों का उपयोग करें, तो बड़े क्षेत्र को छानना कठिन होता है। दोनों को मिलाने से वे एक-दूसरे की कमजोरी पूरी करते हैं। जब साहित्य माइनरि और ज्ञान-सृष्टिकरण साथ चलते हैं, तो डिजाइन मजबूत होता है।

CALPHAD के साथ संयोजन भी महत्वपूर्ण है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता CALPHAD गणनाओं का तेजी से अनुकरण कर सकती है या अगली गणना के उम्मीदवारों का चयन कर सकती है। साहित्य से एकत्रित डेटा, CALPHAD गणनाओं, घनत्व फलनक सिद्धांत और प्रयोगों को एक साथ जोड़ने से उम्मीदवार डिजाइन में तेजी आती है। यह एकीकृत पाइपलाइन वसित संरचनात्मक स्थान को संभालने का व्यावहारिक तरीका है।

4.4 अव्यवस्थित मशीन धातुओं को व्यक्त करने वाले ग्राफ न्यूरल नेटवर्क

अब देखते हैं कि कृत्रिम बुद्धिमत्ता उच्च-एनर्जी मशीन धातु की अव्यवस्था को कैसे व्यक्त करती है। मुख्य उपकरण ग्राफ न्यूरल नेटवर्क (Graph Neural Network, GNN) है। यह सामग्री को बटुओं और रेखाओं के चित्र में बदलकर सीखने की विधि है। पहले यह समझते हैं कि ग्राफ क्या है। ग्राफ ऐसा चित्र है जो बटुओं और रेखाओं से संबंध दिखाता है। मेट्रो मार्ग-मानचित्र ग्राफ है। स्टेशन बटु हैं और पटरियाँ रेखाएँ हैं। क्रिस्टल को भी ग्राफ के रूप में खींचा जा सकता है। परमाणु बटु हैं और परमाणुओं के बीच बंध रेखाएँ हैं।

ग्राफ न्यूरल नेटवर्क इस चित्र को पढ़कर सामग्री के गुणों का पूर्वानुमान करता है। हर बटु में परमाणु की जानकारी होती है। हर रेखा में परमाणुओं के बीच की दूरी और दिशा होती है। न्यूरल नेटवर्क पड़ोसी बटुओं के बीच जानकारी का आदान-प्रदान करते हुए सामग्री को समझता है। इस जानकारी के आदान-प्रदान को संदेश प्रेषण (Message passing) कहते हैं। यह वैसा है जैसे पास बैठे दोस्त से पर्ची लेकर पूरी कक्षा का माहौल समझना।

यह वर्धि आदर्श एकल क्रस्टिल पर अच्छी तरह लागू होती है। एकल क्रस्टिल वह क्रस्टिल है जिसमें हर स्थान पर केवल एक तत्व ठीक से भरा होता है। नमक के क्रस्टिल की तरह इसमें नियम साफ दखिते हैं। पुराने क्रस्टिल ग्राफ न्यूरल नेटवर्क इसी मान्यता पर बने थे। हर बटु में एक तत्व डाले, तो गणना साफ रहती है।

समस्या यह है कि उच्च-एनर्जी मशीन धातु ऐसी नहीं होती। इस मशीन धातु में एक स्थान पर कई तत्व संभावना के रूप में मलिते हैं। कोई स्थान नायोबियम हो सकता है, मॉलबिडेनम हो सकता है, या टैटलम हो सकता है। इसे आंशिक अधिभोग (Fractional occupancy) कहते हैं। यह वह अवस्था है जिसमें एक स्थान में कई संभावनाएँ एक साथ होती हैं।

इसके अलावा स्थानीय लघु-परास व्यवस्था (Short-Range Order, SRO) भी है। परमाणु पूरी तरह से बेतरतीब ढंग से नहीं मलिते हैं। कुछ तत्व एक-दूसरे के नजिक रहना पसंद करते हैं और कुछ तत्व एक-दूसरे से बचते हैं। नजिक दूरी की यह प्राथमिकता गुणों को बहुत प्रभावित करती है। मौजूदा मॉडल इस सूक्ष्म व्यवस्था को समाहित नहीं कर पाते हैं।

क्रस्टिल फ्रैक्शनल ग्राफ न्यूरल नेटवर्क इस समस्या को हल करने का प्रयास है। इस दिशा का विचार यह है। हर बटु में एक तत्व नहीं, बल्कि संघटन वेक्टर डाला जाता है। संघटन वेक्टर उन संख्याओं की सूची है जो बताती है कि प्रत्येक तत्व उस स्थान पर होने की कतिनी संभावना रखता है। उदाहरण के लिए किसी स्थान को नायोबियम 25 प्रतिशत, मॉलबिडेनम 25 प्रतिशत, और टैटलम 50 प्रतिशत के रूप में व्यक्त किया जाता है। ऐसा करने से आंशिक अधिभोग स्वाभाविक रूप से समा जाता है।

इस नाम से जुड़े पूर्व अध्ययन ने वास्तव में जो दिखाया, वह संकीर्ण और स्पष्ट है। इस अध्ययन ने लगभग 16 परमाणुओं के स्थानीय वातावरण और पूरे मशीन धातु के तत्वीय अंश को साथ डालकर क्रस्टिल की ऊर्जा का पूर्वानुमान किया। यह लगभग एक हजार संरचनाओं से सीखने का परिणाम था। यह ऐसा अध्ययन नहीं था जिसने अल्प-दूरी क्रम, गलनांक, मशीन एन्थैल्पी, और उच्च-ताप शक्ति को एक साथ मिला दिया हो। इन गुणों का साथ पूर्वानुमान करना आगे हल की जाने वाली दिशा है, पहले से हासिल उपलब्धि नहीं। रेखाओं में तत्व-युग्म जानकारी जोड़कर अल्प-दूरी क्रम को समेटने की विधि भी इसी प्रस्ताव चरण में है।

अब देखते हैं कि संदेश प्रेषण सीखने से कैसे जुड़ता है। शुरुआत में हर बटु केवल अपनी जानकारी जानता है। एक बार जानकारी का आदान-प्रदान हो जाए, तो वह पड़ोसियों तक जानता है। इसे कई बार दोहराएँ, तो वह और दूर तक जानता है। इस तरह फैली जानकारी से पूरी सामग्री के गुणों का पूर्वानुमान किया जाता है। यदि पूर्वानुमान वास्तविक मान से अलग हो, तो न्यूरल नेटवर्क के मान सुधारे जाते हैं। इस सुधार को अनगणित बार दोहराते हुए मॉडल अधिक समझदार बनता है।

एक ही मॉडल से कई गुणों का साथ पूर्वानुमान करना भी लाभ है। इसे बहुउद्देश्यीय पूर्वानुमान कहते हैं। गलनांक और शक्ति एक-दूसरे से संबंधित हैं। एक गुण सीखते समय मलित जानकारी दूसरे गुण के पूर्वानुमान में मदद करती है। यह वैसा है जैसे कई विषय साथ पढ़ने पर समझ एक-दूसरे को गहरा करती है।

फिर भी यह दिशा अभी शुरुआती चरण में है। क्रस्टिल फ्रैक्शनल ग्राफ न्यूरल नेटवर्क हाल ही में पूर्व अध्ययन के रूप में प्रस्तावित हुआ है। बड़ी कोशिका, जटिल अल्प-दूरी क्रम, और वास्तविक ऊष्मा-उपचार इतिहास अब भी कठिन समस्याएँ हैं। इसलिए इस मॉडल के पूर्वानुमान को प्रयोग और परमाणु समुलेशन से जाँचना चाहिए।

दूसरी ओर, अल्प-दूरी क्रम से जुड़े अन्य कृत्रिम बुद्धिमत्ता अध्ययन तेजी से बढ़ रहे हैं। 2025 में एक शैक्षिक पत्रिका में छपे एक अध्ययन ने मशीन लर्निंग पोटेथियल से अल्प-दूरी क्रम को फिर से बनाने की विधियों की तुलना की। मशीन लर्निंग पोटेथियल परमाणुओं के बीच बल की कृत्रिम बुद्धिमत्ता से गणना करने वाला उपकरण है। इस अध्ययन ने दिखाया कि ऊर्जा की सटीकता ऊँची होने पर भी गुण सही न बैठ सकते हैं। इसका अर्थ है कि सीखने की सामग्री कैसे चुनी जाती है, यही गुणों के पूर्वानुमान को तय करता है।

उसी वर्ष एक अन्य अध्ययन ने कृत्रिम बुद्धिमत्ता से मोटे कार्लो गणना को तेज किया। मोटे कार्लो यादृच्छिक प्रयासों से संतुलन अवस्था खोजने की गणना विधि है। इस अध्ययन ने कृत्रिम बुद्धिमत्ता प्रतिनिधि मॉडल का उपयोग करके अरबों परमाणुओं के पैमाने की नैनो संरचना प्रकट की। इसने उच्च-एनर्जी मशीन धातु के भीतर सूक्ष्म क्रम को बड़े पैमाने पर देखने का रास्ता खोला। क्रस्टिल फ्रैक्शनल ग्राफ न्यूरल नेटवर्क भी इसी प्रवाह पर विकसित हो रहा है।

अब देखते हैं कि ऐसी अव्यवस्था अभिव्यक्ति रॉकेट सामग्री के लिए क्यों महत्वपूर्ण है। नोजल लाइनर की शक्ति इस पर निर्भर करती है कि विस्थापन कतिनी अच्छी तरह रुकता है। अल्प-दूरी क्रम विस्थापन के गुजरने के रास्ते की कठिनाई बदलता है। यदि कुछ तत्व एक साथ गुच्छा बनाते हैं, तो वे विस्थापन को और मजबूती से रोकते हैं। इसलिए समान संघटन होने पर भी अल्प-दूरी क्रम के अनुसार शक्ति बदलती है।

यह सूक्ष्म क्रम बनाने की वधिके अनुसार बदलता है। तेजी से ठंडा करने पर अव्यवस्था जम जाती है। धीरे ठंडा करने पर परमाणु अपनी जगह पकड़ते हैं और क्रम बनता है। ऊष्मा-उपचार का तापमान और समय भी क्रम बदलते हैं। इसलिए गुणों को सही मलाने के लिए केवल संघटन नहीं, प्रक्रिया को भी साथ देखना पड़ता है।

कृत्रिम बुद्धिमत्ता इस उलझे संबंध को सीखने में उपयोग होती है। वह संघटन, प्रक्रिया, क्रम, और गुणों को एक साथ जोड़ती है। मनुष्य के लिए इतने अनेक चर एक साथ संभालना कठिन है। सामग्री पर्याप्त हो, तो कृत्रिम बुद्धिमत्ता वह संबंध खोज लेती है। क्रिस्टल फ्रैक्शनल ग्राफ न्यूरोल नेटवर्क इस संबंध को परमाणु वन्यास स्तर पर समेटने का प्रयास है।

यह दशा अभी शुरुआती चरण में है। अभी पूर्वानुमान की सटीकता और सामग्री की मात्रा दोनों कम हैं। प्रयोग सामग्री बढ़े और गणना तेज हो, तो पूर्वानुमान सुधरता है। तब तक कृत्रिम बुद्धिमत्ता के पूर्वानुमान को प्रयोग से जाँचने की प्रक्रिया अनिवार्य रूप से साथ चलती है।

4.5 एक-एक परमाणु तक देखने वाली बड़े पैमाने की आणविक गतिकी

कंप्यूटर द्वारा प्रत्येक परमाणु की गतिकी अनुकरण करने की वधिके आणविक गतिकी (Molecular Dynamics, MD) कहा जाता है। यह परमाणु स्तर पर धातु के टूटने की प्रक्रिया का अवलोकन करने का उपकरण है। इस गणना को बहुत बड़े पैमाने तक बढ़ाने की कुंजी न्यूरोइवोल्यूशन पोटेन्शियल (Neuroevolution Potential, NEP) नामक कृत्रिम बुद्धिमत्ता है। सबसे पहले यह देखते हैं कि बड़े पैमाने की आवश्यकता क्यों है। धातु में दरार केवल कुछ परमाणुओं से शुरू होती है। वह छोटा सा अंतर बढ़कर क्रिस्टल कण की सीमाओं तक फैलता है और अंततः संरचना को तोड़ देता है। इस प्रक्रिया को बहुत छोटी और काफी बड़ी चीजों को एक साथ देखकर ही समझा जा सकता है। ऐसी घटना को बहु-पैमाना (Multi-scale) घटना कहा जाता है।

परंपरागत घनत्व फलनक सदिश (DFT) के लिए यह काम करना कठिन है। यह गणना सटीक है, पर गणना की मात्रा अधिक है। कुछ सौ परमाणुओं से आगे जाना कठिन है। जसि वास्तविक संरचना में दरार फैलती है, उसमें अरबों से अधिक परमाणु होते हैं। इसलिए केवल सटीक क्वांटम गणना से पूरा चित्र नहीं देखा जा सकता।

अनुभवजन्य पोटेन्शियल की समस्या उलटी है। पोटेन्शियल वह नियम है जो परमाणुओं के बीच लगने वाले बल की गणना करता है। अनुभवजन्य पोटेन्शियल हल्का और तेज होता है। लेकिन पाँच से अधिक तत्वों वाले जटिल मशीन धातु में इसकी सटीकता घटती है। हर तत्व का पड़ोसी वातावरण अलग होता है, पर यह उस सूक्ष्मता को समेट नहीं पाता।

इसलिए ऐसा उपकरण चाहिए जो दोनों वधियों के लाभ साथ रखे। वह उपकरण क्वांटम गणना की सटीकता और अनुभवजन्य नियम की गति दोनों रखता है। इस स्थान को मशीन लर्निंग पोटेन्शियल भरता है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता क्वांटम गणना सामग्री से सीखकर बल का पूर्वानुमान करती है। न्यूरोइवोल्यूशन पोटेन्शियल इस श्रेणी में गतिकी मामले में मजबूत उपकरण है।

आणविक गतिकी क्या है, यह भी समझना चाहिए। यह गणना सभी परमाणुओं पर न्यूटन के गतिनियम लागू करती है। हर परमाणु पर लगने वाला बल निकाला जाता है और उसे बहुत थोड़े समय के लिए चलाया जाता है। इस प्रक्रिया को अनगिनत बार दोहराया जाता है। तब परमाणु समय के साथ कैसे चलते हैं, यह फ़िल्म की तरह देखा जा सकता है।

4.5.1 सटीकता और गति दोनों पकड़ने वाला न्यूरोइवोल्यूशन पोटेन्शियल

न्यूरोइवोल्यूशन पोटेन्शियल दो वचारों को मलाने वाला उपकरण है। एक है न्यूरोल नेटवर्क। न्यूरोल नेटवर्क वह कृत्रिम बुद्धिमत्ता है जो सामग्री से नियम सीखती है। दूसरा है विकास रणनीति। विकास रणनीति कई उम्मीदवार बनाकर बेहतर को चुनने और सँवारने की वधि है। यह प्रकृतिके चयन की नकल करने वाली सीखने की वधि है।

यह पोटेन्शियल पहले परमाणु के आसपास के वातावरण को संख्याओं में बदलता है। कोई परमाणु पड़ोसियों से कतिनी दूरी पर है और किस कोण पर है, इसे वर्णित बनाया जाता है। इन वर्णितताओं को न्यूरोल नेटवर्क में डालकर एक परमाणु की ऊर्जा का पूर्वानुमान किया जाता है। सभी परमाणुओं की ऊर्जा जोड़ने पर कुल ऊर्जा मिलती है। और ऊर्जा के बदलाव से परमाणु पर लगने वाला बल प्राप्त होता है।

अब देखते हैं कि दूरी और कोण को साथ क्यों देखा जाता है। केवल दूरी देखने पर यह पता चलता है कि परमाणु कतिने पास हैं। कोण तक देखने पर पता चलता है कि परमाणु किस आकार में रखे हैं। समान दूरी होने पर भी त्रिभुज व्यवस्था और सीधी रेखा व्यवस्था के गुण अलग होते हैं। इसलिए वातावरण को ठीक से समेटने के लिए दूरी और कोण दोनों डालने पड़ते हैं।

यह वधिरासायनिक बंध के मूल स्वभाव से जुड़ती है। परमाणु आसपास के वातावरण के अनुसार अलग तरह से बंध बनाते हैं। पड़ोसी घने हों, तो बंध मजबूत होता है; वे वरिल हों, तो कमजोर होता है। न्यूरोइवोल्यूशन पोटेन्शियल इस संबंध को सामग्री से सीखता है। सीखे हुए संबंध से वह नए वन्यास की ऊर्जा का तेज अनुमान लगाता है।

इस वधिकी लाभ सटीकता और गतिदोनों पकड़ने में है। न्यूरल नेटवर्क क्वांटम गणना के करीब की सटीकता सीखता है। गणना स्वयं अनुभवजन्य नियम जितनी हल्की होती है। इसलिए सटीक बल तेजी से मिलते हैं। यही बड़े पैमाने की गणना खोलने की कुंजी है।

गतिकी रहस्य ग्राफिक्स प्रोसेसिंग यूनिट (Graphics Processing Unit, GPU) में है। यह उपकरण मूल रूप से गेम स्क्रीन को चित्रित करने के लिए बनाया गया था। यह स्क्रीन के अनगणित बिंदुओं को एक साथ भरने में उत्कृष्ट है। यह समानांतर प्रसंस्करण क्षमता परमाणु गणनाओं के लिए भी बहुत उपयुक्त है। ऐसा इसलिए है क्योंकि यह एक साथ अनगणित परमाणुओं के बलों की गणना कर सकता है।

न्यूरोइवोल्यूशन पोटेन्शियल को इस उपकरण पर अच्छी तरह चलने के लिए बनाया गया है। इसे GPU-MD नामक ग्राफिक्स प्रोसेसिंग यूनिट कार्यक्रम के साथ उपयोग किया जाता है। यह संयोजन ऊष्मा चालकता, दोष, और उच्च-ताप वक्रित के अध्ययन में व्यापक रूप से उपयोग होता आया है। हाल में सीखने की वधिकी और तेज बनाने वाले बाद के अध्ययन भी आए हैं। ऐसे सुधार और बड़ी गणना को संभव बनाते हैं।

इस पोटेन्शियल को बनाने की प्रक्रिया भी समझ लेनी चाहिए। पहले घनत्व फलनक सदिधांत (DFT) से वभिन्न परमाणु वन्यासों की ऊर्जा और बल की गणना की जाती है। ये मान कृत्रिम बुद्धिमत्ता की पाठ्यपुस्तक बनते हैं। कृत्रिम बुद्धिमत्ता इस पाठ्यपुस्तक को देखकर अपना पूर्वानुमान सँवारी है। विकास रणनीति उन मानों को चुनती जाती है जिनसे पूर्वानुमान सामग्री से ठीक मेल खाता है। यह सीखना पूरा होने पर तेज और सटीक बल गणक तैयार हो जाता है।

सीखने में सक्रिय अधिगम भी साथ उपयोग होता है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता स्वयं उन वन्यासों को खोजती है जिन पर उसे भरोसा नहीं होता। केवल उन्हीं वन्यासों को चुनकर घनत्व फलनक सदिधांत (DFT) से नई गणना की जाती है। इस तरह माली सामग्री को फिर सीखने में डाला जाता है। यह कम गणना से बड़े दायरे को भरने की समझदार वधि है।

फिर भी तेज उत्तर हमेशा सही उत्तर नहीं होता। कृत्रिम बुद्धिमत्ता पोटेन्शियल सीखे हुए दायरे के भीतर सटीक होता है। सीखने की सामग्री में न होने वाले संघटन या तापमान पर यह गलत हो सकता है। उच्च-एनर्जी मशिर धातु में तत्वों का संयोजन थोड़ा बदलने पर भी वातावरण बहुत बदल जाता है। इसलिए सीखने की सामग्री का प्रतिनिधित्व सबसे अधिक महत्वपूर्ण है। पूर्वानुमान की अनिश्चितता को अलग से जाँचने की प्रक्रिया चाहिए।

4.5.2 बड़े पैमाने की गणना से देखी जाने वाली वक्रित और दरार

1 ट्रिलियन कल्पना करना कठिन संख्या है। 1 ट्रिलियन परमाणुओं को पंक्ति में रखें, तो आकार वास्तविक संरचना के करीब हो जाता है। इसका अर्थ है कि माइक्रोमीटर इकाई के नमूने को एक-एक परमाणु तक चित्रित किया जा सकता है। छोटी गणना में केवल एक दरार और कुछ सीमाएँ दिखती हैं। बड़ी गणना में अनेक सीमाएँ और दोष एक-दूसरे को कैसे प्रभावित करते हैं, यह दिखाई देता है।

2026 में सार्वजनिक हुए एक प्रारंभिक अध्ययन ने इस दहलीज को पार किया। इस अध्ययन ने न्यूरोइवोल्यूशन पोटेन्शियल से 1 खरब 600 अरब परमाणुओं की गणना की। चीन के नए अति-उच्च-प्रदर्शन कंप्यूटर में लगभग 45,000 गणना इकाइयों को साथ इस्तेमाल किया गया। इस अध्ययन ने गणना का पैमाना और गति दिखाए। इसमें बताया गया कि वही गणना पछिले सर्वोच्च रिकॉर्ड से कहीं तेज चलाई गई। यह ऐसा अध्ययन नहीं है जिसने इस पैमाने पर उच्च-एनर्जी मशिर धातु की वसिथिति और दरार का सचमुच विश्लेषण करके परिणाम दिए हों। पैमाना खोलने वाला प्रदर्शन और उस पैमाने से क्या उजागर किया जाता है, ये अलग प्रश्न हैं। यह अध्ययन अभी सहकर्म समीक्षा से नहीं गुजरा प्रारंभिक अध्ययन है।

इस संख्या का अर्थ क्या है, इसे थोड़ी देर तुलना करके देखते हैं। पहले 10 लाख परमाणुओं की गणना भी बड़ा काम थी। कुछ वर्ष पहले यह 10 करोड़ से ऊपर गई और शीघ्र ही 10 अरब तक पहुँची। अब यह 1 खरब से आगे निकल गई है। गणना की जा सकने वाली सीमा तेजी से बढ़ रही है। पर 1 खरब परमाणुओं की गणना अति-विशाल सुपरकंप्यूटर को पूरी सीमा तक इस्तेमाल करने वाला प्रतीकात्मक प्रदर्शन है। वास्तविक मशिर धातु डिज़ाइन में रोज इस्तेमाल होने वाली गणना हजारों से लाखों परमाणुओं के पैमाने की होती है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता पोटेन्शियल और तेज कंप्यूटर इस वृद्धि को चला रहे हैं।

बड़े पैमाने का लाभ सांख्यिकी में है। परमाणु जितने अधिक होंगे, दुर्लभ घटनाएँ भी उतनी पकड़ी जाएंगी। दरार का बीज बहुत दुर्लभ रूप से बनता है। छोटी गणना में वह बीज दिखाई नहीं दे सकता। बड़ी गणना में कई बीज साथ देखे जाते हैं। इससे पूर्वानुमान वास्तविकता के करीब जाता है।

पहले यह समझना चाहिए कि यह गणना रॉकेट सामग्री में क्यों उपयोगी है। वास्तविक नोज़ल लाइनर की सूक्ष्म संरचना में असंख्य परमाणु होते हैं। इस बड़ी संरचना में क्या होता है, यह जानना होगा तभी आयु पता चलेगी। बड़ी गणना इस वास्तविक संरचना के करीब की तस्वीर देती है। इसलिए इसका इस्तेमाल यह आंकने में हो सकता है कि कौन-सी संरचना अधिक देर टिकेगी।

इस तरह के बड़े पैमाने की आणविक गतिकी से सदिधांततः तीन घटनाएँ देखी जा सकती हैं। नीचे दी गई बातें इस वधिकी लक्ष्य हैं, न कि ऊपर के प्रदर्शन से पहले ही निकले परिणाम। पहली घटना वसिथिति नाभिकीयन है। वसिथिति विह छोटा दोष है जिससे वक्रित शुरू होती है।

शरीर-केंद्रित घन जालक में वसिथिति कैसे बनती है और कैसे फसिलती है, इसे वास्तविक समय में ट्रैक किया जाता है। उच्च-एनर्जी मशीन धातु में स्थानीय संरचना का उतार-चढ़ाव वसिथितिको पकड़ता है। यही पकड़ मजबूती बढ़ाने का सदिधांत है।

दूसरी घटना क्रिस्टल कण-सीमा का फसिलना है। क्रिस्टल कण-सीमा क्रिस्टल दानों के बीच की सीमा है। उच्च तापमान पर बल लगने पर यह सीमा फसिलती है। बड़ी गणना इस फसिलन और रक्ति स्थानों के जमाव को परमाणु स्तर पर मापती है। यही व्यवहार क्रीप आयु को तय करता है।

तीसरी घटना दरार का बढ़ना है। दरार का अग्रभाग अंतराल का सबसे आगे वाला भाग है। यहां परमाणुओं की व्यवस्था बदलती है और विकृति होती है। बड़ी गणना देखती है कि दरार कैसे बढ़ती है और कैसे रुकती है। इससे यह आंकने का संकेत मलित है कि कौन-सी संरचना दरार को अच्छी तरह सहती है।

ये तीनों घटनाएं आपस में जुड़ी हैं। वसिथितियां जमा होकर क्रिस्टल कण-सीमा की ओर बढ़ती हैं। क्रिस्टल कण-सीमा फसिलती है और रक्ति स्थान बनते हैं। वे रक्ति स्थान जुड़कर दरार बन जाते हैं। छोटी गणना में यह संबंध देखना कठिन है। बड़ी गणना में शुरुआत से अंत तक पूरा क्रम एक साथ देखा जा सकता है।

यह संबंध देखना क्यों उपयोगी है, इसे समझना चाहिए। सामग्री की आयु एक कमजोर कड़ी से तय होती है। शरूखला कमजोर कड़ी पर टूटती है। यदि पिता हो कि कौन-सा चरण पहले टूटता है, तो उसी जगह को मजबूत किया जा सकता है। बड़े पैमाने की गणना इस कमजोर कड़ी को पहले से खोजने में मदद करती है।

यह जानकारी रॉकेट नोजल लाइनर के अध्ययन में उपयोगी है। नोजल लाइनर उच्च तापमान गैस और तापीय आघात दोनों झेलता है। प्रयोग से पहले यह आंक लिया जाए कि कौन-सी संरचना अधिक देर टिकेगी, तो समय बचता है। बड़े पैमाने की गणना उम्मीदवारों को छांटने वाली तराजू का काम करती है।

पर इस गणना पर भी शर्तें लागू होती हैं। परिणाम की शुद्धता कृत्रिम बुद्धिमत्ता पोटेथियल की गुणवत्ता पर निर्भर करती है। जिस स्थिति को पोटेथियल ने नहीं सीखा, वहां गणना भी गलत होती है। इसलिए बड़ी गणना के परिणामों को छोटे पैमाने की सटीक गणना और प्रयोग से सत्यापित करना चाहिए। बड़ा पैमाना और सही होना अलग प्रश्न है।

4.6 भौतिक नियमों से न टकराने वाली धातु डज़ाइन कृत्रिम बुद्धिमत्ता

केवल शुद्ध डेटा शक्ति से जोखिम भरे पूर्वानुमान आ सकते हैं। उस जोखिम को भौतिकी के नियमों द्वारा रोकने की वधिको भौतिकी-सूचित न्यूरल नेटवर्क (Physics-Informed Neural Network, PINN) कहा जाता है। हम देखते हैं कि धातु विज्ञान, यानी धातुओं का अध्ययन करने वाले विज्ञान में इस पद्धतिको कैसे लागू किया जाता है। सबसे पहले शुद्ध डेटा शक्ति की कमजोरियों को समझते हैं। कृत्रिम बुद्धिमत्ता सीखे गए डेटा के दायरे में अच्छा उत्तर देती है। लेकिन जिस क्षेत्र में डेटा नहीं है, वहां यह बेतुका उत्तर दे देती है। ऐसे क्षेत्र को वतिरण से बाहर (Out-of-Distribution) कहा जाता है। यह परीक्षा पाठ्यक्रम से बाहर के प्रश्न का सामना करने वाले छात्र जैसा है।

धातु डज़ाइन में यह अजीब उत्तर भौतिक नियमों को तोड़ता है। उदाहरण के लिए तापमान बढ़ता है, पर स्थिरता का मान उल्टी दिशा में चलता है। कभी यह भी पूर्वानुमान करता है कि आयतन बढ़ने पर जालक ऊर्जा घटती है। ऐसे उत्तर प्रकृति में संभव नहीं हैं। ऐसे पूर्वानुमान पर सीधे भरोसा किया जाए, तो डज़ाइन बगिड़ जाता है।

भौतिकी-सूचित न्यूरल नेटवर्क इस समस्या को सीखने के चरण में रोकता है। तरीका यह है कि हानि फलन में भौतिक नियम डाले जाते हैं। हानि फलन वह पैमाना है जिससे मापा जाता है कि कृत्रिम बुद्धिमत्ता कतिनी गलत है। सामान्यतः यह केवल पूर्वानुमान और वास्तविक डेटा के अंतर को मापता है। इसमें भौतिक नियम तोड़ने की मात्रा जोड़ी जाती है।

ऐसा करने पर कृत्रिम बुद्धिमत्ता दो बातों को साथ नभाने की कोशिश करती है। एक है डेटा से मेल बैठाना। दूसरी है भौतिक नियमों का पालन करना। जहां डेटा नहीं है, वहां भी नियम उत्तर की दिशा तय करते हैं। यह परीक्षा की सीमा से बाहर के प्रश्न को मूल सदिधांतों से हल करने की कोशिश करने वाले छात्र जैसा है।

धातु डज़ाइन में कौन-से नियम डाले जाते हैं। मुक्त ऊर्जा तापमान के साथ कैसे बदलनी चाहिए, यह एक उदाहरण है। यह संबंध भी डाला जाता है कि मजबूती कई मजबूती-योगदानों के योग से तय होती है। फेज संतुलन को जनि शर्तों का पालन करना चाहिए, वे भी डाली जाती हैं। ये नियम कृत्रिम बुद्धिमत्ता की स्वतंत्रता घटाते हैं। घटी हुई स्वतंत्रता उलटे भरोसेमंद उत्तर बनाती है।

हानि फलन में नियम डालने की वधिको थोड़ा और खोलकर देखते हैं। भौतिक नियम प्रायः समीकरण के रूप में लिखे जाते हैं। पूर्वानुमानित मानों को उस समीकरण में डालने पर दोनों पक्षों को मेल खाना चाहिए। यदि वे मेल नहीं खाते, तो अंतर बचता है। इस अंतर को अवशेष कहते हैं। अवशेष बड़ा हो तो दंड दिया जाता है।

ऐसा करने पर कृत्रिम बुद्धिमत्ता दंड से बचने की कोशिश करती है। वह डेटा से मेल बैठाने में सक्षम होकर समीकरण का भी पालन करना चाहती है। यह उत्तर-पत्र देते समय गणना सूत्र और इकाई तक मलिन करने वाले छात्र जैसा है। वह केवल उत्तर देने वाले छात्र से अनुप्रयोग प्रश्नों में मजबूत होता है। भौतिकी-सूचि न्यूटन नेटवर्क डेटा से बाहर मजबूत क्यों होता है, इसका कारण यही है।

इस विधि का मूल्य तब बढ़ता है जब डेटा कम हो। रॉकेट के लिए चरम सामग्री का प्रयोगात्मक डेटा दुर्लभ होता है। एक परीक्षण में बड़ा खर्च और समय लगता है। डेटा कम हो तो शुद्ध अधिगम आसानी से डगमगाता है। भौतिक नियम कम डेटा की कमी भरते हैं।

इन दोनों विधियों को अलग समझना चाहिए। पछिले खंड में देखा गया गलनांक पूर्वानुमान अध्ययन भौतिकी-सूचि न्यूटन नेटवर्क नहीं है। वह अध्ययन भौतिक अर्थ रखने वाली विशेषताओं को चुनकर डालने वाला प्रतियोगिता मॉडल है। उसने हानि फिलन में भौतिक समीकरण सीधे नहीं डाले। अच्छी विशेषताएं इस्तेमाल करने वाला प्रतियोगिता और भौतिक नियमों को हानि फिलन में डालने वाला अधिगम अलग विधियां हैं। फरि भी दोनों एक ही लक्ष्य की ओर बढ़ते हैं। लक्ष्य यह है कि कृत्रिम बुद्धिमत्ता का पूर्वानुमान धातुकर्म से न टकराए। जब अच्छी विशेषताएं और भौतिक बाधाएं साथ चलती हैं, तब यह लक्ष्य और करीब आता है।

4.6.1 अति-उच्च तापमान नोजल लाइनर डिज़ाइन के लिए औजारों को जोड़ना

यह उपखंड देखता है कि ऊपर के औजार वास्तविक डिज़ाइन में साथ कैसे इस्तेमाल होते हैं। लक्ष्य अति-उच्च तापमान नोजल लाइनर के लिए आग-सह उच्च-एनर्जी मशीन धातु है। यहां किसी एक पूर्ण उपलब्ध से अधिक डिज़ाइन और सत्यापन की प्रक्रिया पर जोर है। हाल के अध्ययन कहां तक पहुंचे हैं और क्या बचा है, यह भी देखा जाता है। अच्छा नोजल लाइनर मशीन धातु कई गुणों को साथ पूरा करना चाहिए। गलनांक ऊंचा होना चाहिए। घनत्व बहुत बड़ा हो तो रॉकेट भारी हो जाता है। उच्च तापमान पर मजबूती बनी रहनी चाहिए। ऑक्सीजन से मिलने पर भी सतह अच्छी तरह टिकनी चाहिए। कोटिंग और तापीय प्रसार का मेल अच्छा होना चाहिए। केवल एक गुण अच्छा हो तो भाग के रूप में इस्तेमाल नहीं किया जा सकता।

इन कई लक्ष्यों को साथ पकड़ना मनुष्य के लिए कठिन है। टंगस्टन अधिक डालने से गलनांक बढ़ता है। लेकिन घनत्व बढ़ता है और टूटने की प्रवृत्ति हो सकती है। एल्यूमिनियम या क्रोमियम डालने से ऑक्सीकरण के विरुद्ध मजबूती बढ़ती है। लेकिन अन्य गुण डगमगा सकते हैं। इस तरह आपस में जुड़े लक्ष्यों को बहु-उद्देश्यीय अनुकूलन कहा जाता है।

रॉकेट में घनत्व बहुत संवेदनशील प्रश्न है। भाग भारी हो तो पूरा रॉकेट भारी हो जाता है। भारी रॉकेट समान ईंधन से कम दूर जाता है। इसलिए मजबूती अच्छी होने पर भी यदि वह बहुत भारी हो तो इस्तेमाल नहीं किया जा सकता। गलनांक, मजबूती और वजन को साथ तराजू पर रखना पड़ता है।

इस तरह के तौल में एक सही उत्तर नहीं होता। मजबूती थोड़ी छोड़ने पर वजन घटाया जा सकता है। वजन थोड़ा छोड़ने पर मजबूती बढ़ाई जा सकती है। इस तरह आपस में बदले जा सकने वाले उम्मीदवारों का समूह बनता है। इस समूह को सामने रखकर मनुष्य उद्देश्य के अनुरूप एक को चुनता है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता इस समूह को तेजी से चिह्नित कर देती है।

कृत्रिम बुद्धिमत्ता इन जुड़े लक्ष्यों को साथ संभालती है। ऊपर देखे गए डिस्क्रीप्टर से संरचना को संख्याओं में बदलती है। पूर्वानुमान मॉडल से गलनांक और मजबूती को तेजी से छांटती है। भौतिक बाधाओं से अव्यावहारिक उम्मीदवारों को हटाती है। बड़े पैमाने की परमाणु गणना से विकृत और दरार को देखती है। यह प्रवाह उम्मीदवारों को बहुत घटा देता है।

हाल के अध्ययन इस प्रवाह की उपयोगिता दिखाते हैं। 2024 में एक शोधपत्रिका में छपे अध्ययन ने मशीन लर्निंग से अति-उच्च तापमान के लिए आग-सह उच्च-एनर्जी मशीन धातु डिज़ाइन की। कृत्रिम बुद्धिमत्ता से व्यापक संरचना-क्षेत्र को छोटा किया गया और आशाजनक उम्मीदवार चुने गए। यह मजबूती और तन्यता को साथ बढ़ाने का प्रयास था। ऐसे अध्ययन दिखाते हैं कि कृत्रिम बुद्धिमत्ता डिज़ाइन प्रयोगशाला स्तर पर काम करता है।

ऑक्सीकरण की समस्या में भी कृत्रिम बुद्धिमत्ता प्रवेश कर रही है। 2025 के अंत में सार्वजनिक हुआ एक प्रारंभिक अध्ययन है। इस अध्ययन ने सक्रिय अधिगम से उच्च तापमान ऑक्सीकरण के विरुद्ध मजबूत आग-सह जटिल सघन मशीन धातुओं की खोज की। सक्रिय अधिगम वह विधि है जिसमें कृत्रिम बुद्धिमत्ता स्वयं अगली परीक्षण-योग्य संरचना चुनती है। यह कम प्रयोगों से अच्छे उम्मीदवार खोजने का मार्ग है। यह अध्ययन भी अभी सहकर्म समीक्षा से नहीं गुजरा प्रारंभिक अध्ययन है।

लेकिन इसे निश्चित उपलब्धि की तरह कहना अभी जल्दी है। कौन-सी संरचना किसी विशेष तापमान पर ठीक कतिनी मजबूती देती है, ऐसे आंकड़ों के लिए मूल लेख की जांच चाहिए। सत्यापन न किए गए प्रदर्शन मान इस पुस्तक में नहीं लिखे जाते। इसके बजाय यह खंड उस सत्यापन प्रक्रिया पर जोर देता है जिससे डिज़ाइन को गुजरना चाहिए।

सत्यापन तीन चरणों में होता है। पहले देखा जाता है कि उम्मीदवार संरचना गणना में स्थिर है या नहीं। CALPHAD और घनत्व फलनक सिद्धांत (DFT) से फेज संतुलन की पुष्टि की जाती है। फिर देखा जाता है कि मशीन धातु सचमुच बनाई जा सकती है या नहीं। गणना में अच्छी

हो, पर बनाई न जा सके, तो उसका कोई लाभ नहीं। अंत में उच्च तापमान पर मजबूती और ऑक्सीकरण प्रतरीध मापा जाता है। वास्तविक वातावरण के करीब का परीक्षण अंतिम द्वार है।

इन चरणों से गुजरते समय यह नहीं भूलना चाहिए कि त्रुटियां भी साथ बहती हैं। परमाणु गणना की छोटी त्रुटि सूक्ष्म संरचना पूर्वानुमान में फैलती है, और फरि भाग की मजबूती के पूर्वानुमान में बड़ी हो जाती है। ऑक्सीकरण से सतह कटकर सीमा खसिकती है तो पूर्वानुमान और डगमगाता है। बनाने की प्रत्येक प्रक्रिया में पैदा होने वाला अंतर भी इसमें जुड़ता है। इसलिए अच्छा डिज़ाइन एक मान नहीं, बल्कि आयु की सीमा भी साथ देता है। अंत में वास्तविक भाग जैसी शर्तों में प्रमाणीकरण परीक्षण से गुजरना चाहिए।

ये तीन चरण केवल क्रम से नहीं चलते। परीक्षण में कमजोरी देखे तो संरचना फरि सुधारी जाती है। सुधरी संरचना की फरि गणना होती है और फरि उसे बनाया जाता है। इस तरह घूमकर लौटने वाली प्रक्रिया दोहराई जाती है। इस चक्र को बंद-लूप डिज़ाइन कहा जाता है। स्व-चालित प्रयोगशाला इस चक्र को अपने आप चलाने का प्रयास है।

कृत्रिम बुद्धिमत्ता इस चक्र के हर चरण में शामिल होती है। वह अगली परीक्षण-योग्य संरचना चुनती है, परिणामों से सीखती है, और फरि चुनती है। मनुष्य रात भर पहरा न दे, तब भी चक्र चलता रहता है। इससे अच्छी संरचना तक पहुंचने का रास्ता छोटा होता है। यही प्रवाह उच्च तापमान मशिर धातु विकास का भविष्य बदल रहा है।

नकिल-आधारित सुपरअलॉय में भी कृत्रिम बुद्धिमत्ता डिज़ाइन सक्रिय है। 2025 के अध्ययनों ने एकल-क्रिस्टल सुपरअलॉय की क्रीप आयु का मशीन लर्नगि से पूर्वानुमान किया। संरचना और सूक्ष्म संरचना की जानकारी डालकर लंबे समय तक टकिने वाली संरचनाएं चुनी गईं। गामा प्राइम कणों का आयतन अनुपात और आकार महत्वपूर्ण विशेषताओं के रूप में इस्तेमाल हुए। ऐसे अध्ययन दिखाते हैं कि कृत्रिम बुद्धिमत्ता पुराने धातुओं को भी नया उपयोग देती है।

यहां फेज-फील्ड गणना और कृत्रिम बुद्धिमत्ता को जोड़ने वाले अध्ययन भी हैं। फेज-फील्ड वह गणना वर्धि है जो संरचना के बदलाव को चकिने क्षेत्र के रूप में चित्रित करती है। 2025 के एक अध्ययन ने इस गणना को मशीन लर्नगि से जोड़ा। उसने संरचना और सूक्ष्म संरचना के क्रीप विकृति पर प्रभाव का साथ पूर्वानुमान किया। गणना और कृत्रिम बुद्धिमत्ता को जोड़ने की ऐसी वर्धियां धीरे-धीरे बढ़ रही हैं।

ये उदाहरण एक साझा सीख देते हैं। कृत्रिम बुद्धिमत्ता तब ताकत दिखाती है जब अच्छी विशेषताएं और पर्याप्त डेटा हों। विशेषताएं भौतिकी से जुड़ी हों तो पूर्वानुमान मजबूत होता है। डेटा यदि किसी विशेष क्षेत्र की ओर झुका हो, तो उसके बाहर पूर्वानुमान डगमगाता है। इसलिए पहले डेटा को व्यापक रूप से इकट्ठा करना और विशेषताओं को ठीक से चुनना जरूरी है।

इस प्रक्रिया में कृत्रिम बुद्धिमत्ता की जगह स्पष्ट है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता संरचना-क्षेत्र को घटाने वाला मार्गदर्शक है। यदि कृत्रिम बुद्धिमत्ता 100 उम्मीदवारों को 3 तक घटा दे, तो मनुष्य केवल उन 3 को गहराई से परखता है। इस तरह भूमिका बांटने पर विकास तेज होता है और वफिलता घटती है। यही भौतिक नियमों से न टकराने वाली धातु डिज़ाइन कृत्रिम बुद्धिमत्ता का वास्तविक रूप है।

सारांश

इस अध्याय ने उस धातु पर चर्चा की जो रॉकेट में तापमान सबसे अधिक बढ़ने वाली जगह की रक्षा करेगी। वह जगह दहन कक्ष नोज़ल और पुनःप्रवेश सतह है। यहां ताप, दबाव और बल साथ मिलकर सामग्री को परेशान करते हैं।

लंबे समय से इस्तेमाल हो रही नकिल-आधारित सुपरअलॉय लगभग 1,150 डिग्री पर अपनी सीमा पर पहुंचती है। उससे ऊपर के तापमान को लक्ष्य करने वाला नया उम्मीदवार अपवर्त्य उच्च-एनर्जी मशिर धातु है। यह मशिर धातु ऊंचे गलनांक वाली कई धातुओं को लगभग समान मात्रा में मिलाकर बनाई जाती है।

शुरुआती अध्ययनों ने इस मशिर धातु के गुणों को चार प्रभावों से समझाया। ये हैं वन्यास एनर्जी, जाली विकृति, धीमा वसिरण और कॉकटेल प्रभाव। इनमें से कुछ पर बाद में आपत्तियां आईं, इसलिए उन्हें सामान्य नियम मानना कठिन है। फरि भी यह ढांचा यह सोचने का आरंभिक आधार देता है कि कौन-सी संरचना एक ही अवस्था में स्थिर रह सकती है। ओमेगा पैरामीटर और संयोजकता इलेक्ट्रॉन सांद्रता ऐसे सरल संकेतक हैं जो इस नरिणय में मदद करते हैं।

वसित संरचना-क्षेत्र को संभालने के लिए कृत्रिम बुद्धिमत्ता की जरूरत होती है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता सामग्री को डिस्क्रिप्टर नामक संख्याओं के रूप में पढ़ती है। बड़े भाषा मॉडल शोधपत्रों के पाठ से ये विशेषताएं निकालते हैं। ग्राफ न्यूरल नेटवर्क सामग्री को बटुओं और रेखाओं के रूप में सीखते हैं। क्रिस्टल फ्रैक्शन ग्राफ न्यूरल नेटवर्क उच्च-एनर्जी मशिर धातु की अव्यवस्था को समेटने का एक नया प्रयास है।

परमाणु स्तर के व्यवहार को आणविक गतिकी से देखा जाता है। न्यूरल इवोल्यूशन पोटेथियल नामक कृत्रिम बुद्धिमत्ता इस गणना को तेज बनाती है। हालिया शोध 1 खरब से अधिक परमाणुओं के पैमाने तक पहुंचा है। इतनी बड़ी गणना अव्यवस्था, कणिका-सीमा फसिलन और दरारों को परमाणु स्तर पर देखती है।

इन सभी उपकरणों को एक साथ बांधने वाला विचार भौतिकी संगत है। केवल डेटा से सीखना भौतिकी का उल्लंघन करने वाले उत्तर दे सकता है। भौतिकी-सूचित न्यूरल नेटवर्क (PINN) हानि फलन में नियम जोड़कर इसे रोकता है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता उम्मीदवारों को सीमाति करने वाली मार्गदर्शक है, और अंतिम निर्णय प्रयोग करता है।

इस अध्याय के अधिकांश उदाहरण अभी शुरुआती शोध हैं। प्रारंभिक शोध के आंकड़े अंतिम मूल्य नहीं हैं। कंपनियों के उदाहरण केवल औद्योगिक उदाहरण हैं, अकादमिक प्रमाण नहीं। इसलिए अच्छा डिज़ाइन हमेशा गणना और प्रयोग, दोनों से पुष्टि पाता है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता रास्ता संकरा करती है और मनुष्य रास्ता तय करता है। यही इस क्षेत्र की मौजूदा सहयोग-प्रणाली है।

इस अध्याय को एक वाक्य में समेटें तो बात यह है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता उच्च-ताप धातु डिज़ाइन की गति बदलती है। पहले एक उम्मीदवार की जांच करने में लंबा समय लगता था। अब कृत्रिम बुद्धिमत्ता अनगिनत उम्मीदवारों को पहले ही छंट देती है। बचे हुए थोड़े से उम्मीदवारों की ही सूक्ष्म गणना और परीक्षण से पुष्टि की जाती है।

आगे के काम भी स्पष्ट हैं। प्रयोगात्मक डेटा को और व्यापक तथा संतुलित रूप से इकट्ठा करना होगा। कृत्रिम बुद्धिमत्ता की भविष्यवाणी की अनिश्चितता भी साथ बतानी होगी। भौतिकी नियमों को सीखने की प्रक्रिया में और सघन रूप से शामिल करना होगा। ये तीन बातें जितनी पूरी होंगी, रॉकेट सामग्री का डिज़ाइन उतना तेज होगा।

संबंधित आधार-सामग्री

- Yeh, J. W., Chen, S. K., Lin, S. J., Gan, J. Y., Chin, T. S., Shun, T. T., Tsau, C. H., & Chang, S. Y. (2004). Nanostructured high-entropy alloys with multiple principal elements: Novel alloy design concepts and outcomes. *Advanced Engineering Materials*, 6(5), 299-303. <https://doi.org/10.1002/adem.200300567>
- Cantor, B., Chang, I. T. H., Knight, P., & Vincent, A. J. B. (2004). Microstructural development in equiatomic multicomponent alloys. *Materials Science and Engineering A*, 375-377, 213-218. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2003.10.257>
- Senkov, O. N., Wilks, G. B., Miracle, D. B., Chuang, C. P., & Liaw, P. K. (2010). Refractory high-entropy alloys. *Intermetallics*, 18(9), 1758-1765. <https://doi.org/10.1016/j.intermet.2010.05.014>
- Senkov, O. N., Wilks, G. B., Scott, J. M., & Miracle, D. B. (2011). Mechanical properties of Nb₂₅Mo₂₅Ta₂₅W₂₅ and V₂₀Nb₂₀Mo₂₀Ta₂₀W₂₀ refractory high entropy alloys. *Intermetallics*, 19(5), 698-706. <https://doi.org/10.1016/j.intermet.2011.01.004>
- Zhang, Y., Zuo, T. T., Tang, Z., Gao, M. C., Dahmen, K. A., Liaw, P. K., & Lu, Z. P. (2014). Microstructures and properties of high-entropy alloys. *Progress in Materials Science*, 61, 1-93. <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2013.10.001>
- Miracle, D. B., & Senkov, O. N. (2017). A critical review of high entropy alloys and related concepts. *Acta Materialia*, 122, 448-511. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2016.08.081>
- George, E. P., Raabe, D., & Ritchie, R. O. (2019). High-entropy alloys. *Nature Reviews Materials*, 4(8), 515-534. <https://doi.org/10.1038/s41578-019-0121-4>
- Rao, Z., Tung, P. Y., Xie, R., Wei, Y., Zhang, H., Ferrari, A., Klaver, T. P. C., Kormann, F., Sukumar, P. T., da Silva, A. K., Chen, Y., Li, Z., Ponge, D., Neugebauer, J., Gutfleisch, O., Bauer, S., & Raabe, D. (2022). Machine learning-enabled high-entropy alloy discovery. *Science*, 378(6615), 78-85. <https://doi.org/10.1126/science.abo4940>
- Raissi, M., Perdikaris, P., & Karniadakis, G. E. (2019). Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, 378, 686-707. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045>
- Fan, Z., Zeng, Z., Zhang, C., Wang, Y., Dong, H., Chen, Y., & Ala-Nissila, T. (2021). Neuroevolution machine learning potentials: Combining high accuracy and low cost in atomistic simulations and application to heat transport. *Physical Review B*, 104, 104309. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.104.104309>
- Fan, Z., Wang, Y., Ying, P., Song, K., Wang, J., Wang, Y., Zeng, Z., Xu, K., Lindgren, E., Rahm, J. M., Gabourie, A., Liu, J., Dong, H., Wu, J., Chen, Y., Zhong, Z., Sun, J., Erhart, P., Su, Y., & Ala-Nissila, T. (2022). GPUMD: A package for constructing accurate machine-learned potentials and performing highly efficient atomistic simulations. *Journal of Chemical Physics*, 157, 114801. <https://doi.org/10.1063/5.0106617>
- He, Q., Wu, D., Wang, H., et al. (2024). Machine learning assisted design of refractory high-entropy alloy for ultrahigh temperature applications. *Materials & Design*, 246, 113326. <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2024.113326>
- Divilov, S., et al. (2024). A comparative study of predicting high entropy alloy phase fractions with traditional machine learning and deep neural networks. *npj Computational Materials*, 10, 68. <https://www.nature.com/articles/s41524-024-01335-1>

- Hasnain, M. (2026). Physically Consistent Machine Learning for Melting Temperature Prediction of Refractory High-Entropy Alloys. arXiv प्रीप्रिंट (अभी सहकर्मी-समीक्षा नहीं), arXiv:2601.03801. <https://arxiv.org/abs/2601.03801>
- Suo, P., Cao, W., Wu, X., Zhang, W., Fan, Z., Xian, S., et al. (2026). Trillion-atom molecular dynamics simulations with ab initio accuracy. arXiv प्रीप्रिंट (अभी सहकर्मी-समीक्षा नहीं), arXiv:2604.24816. <https://arxiv.org/abs/2604.24816>
- Hsiao, L. C., Liu, Z. K., & Reinhart, W. (2026). Modeling High Entropy Alloys' Mechanical Property through Natural Language-Derived Descriptors. arXiv प्रीप्रिंट (अभी सहकर्मी-समीक्षा नहीं), arXiv:2604.21807. <https://arxiv.org/abs/2604.21807>
- Kotama, T., & Huang, Y. (2026). Crystal Fractional Graph Neural Network for Energy Prediction of High-Entropy Alloys. arXiv प्रीप्रिंट (अभी सहकर्मी-समीक्षा नहीं), arXiv:2605.08103. <https://arxiv.org/abs/2605.08103>
- Bejjipurapu, A., Karumuri, S., Flanagan, J. C., Tucker, V., Bilonis, I., Strachan, A., Sandhage, K. H., & Titus, M. S. (2025). Active Learning Discovery of High Temperature Oxidation Resistant Refractory Complex Concentrated Alloys. arXiv प्रीप्रिंट (अभी सहकर्मी-समीक्षा नहीं), arXiv:2512.15958. <https://arxiv.org/abs/2512.15958>
- Cao, Y., Sheriff, K., & Freitas, R. (2025). Capturing short-range order in high-entropy alloys with machine learning potentials. npj Computational Materials, 11, 268. <https://doi.org/10.1038/s41524-025-01722-2>
- Liu, X., Yang, K., Liu, Y., Zhou, F., Fan, D., Pei, Z., Xu, P., & Tian, Y. (2025). Revealing nanostructures in high-entropy alloys via machine-learning accelerated scalable Monte Carlo simulation. npj Computational Materials, 11, 267. <https://doi.org/10.1038/s41524-025-01762-8>
- Huang, H., Yu, Y., Deng, W., Qian, Q., & Zheng, H. (2026). Breaking equiatomic constraints: knowledge-enhanced AI framework for function-oriented single-phase high-entropy alloy design. npj Computational Materials, 12, 209. <https://doi.org/10.1038/s41524-026-02071-4>
- Kamnis, S., & Delibasis, K. (2025). High entropy alloy property predictions using a transformer-based language model. Scientific Reports, 15, 11861. <https://doi.org/10.1038/s41598-025-95170-z>
- Chizhevskiy, V., Marković, G., Benrazzouq, S., Cvelbar, U., Nominé, A., & Zavašnik, J. (2026). High Entropy Alloys Database generated with Large Language Model. Scientific Data, 13, 612. <https://doi.org/10.1038/s41597-026-06930-z>
- Yao, J., Yu, W., Wang, J., Zhang, L., Liu, F., Li, W., Tan, L., Huang, L., & Liu, Y. (2025). Integrating Machine Learning and Thermodynamic Descriptors for Enhanced Ni-Based Single Crystal Superalloys Creep Life Prediction and Alloy Design. Metals and Materials International, 31, 2730-2748. <https://doi.org/10.1007/s12540-025-01906-x>
- Song, J., Shan, Y., Zhang, Z., Wang, S., Zhang, H., Muhammad, S., Huang, H., & Li, Y. (2025). Phase-field-informed machine learning on creep behavior of Ni-based single-crystal superalloys. Journal of Materials Informatics, 5, 2. <https://doi.org/10.20517/jmi.2025.02>

अध्याय 5. अंतरिक्ष-वमिनन के लिए मशिरति सामग्री (CMC) और अत-उच्च ताप सरिमकिस (UHTC) की सूक्ष्म संरचना नयितरण और ताप जीवन मूल्यांकन

आरंभ मे

चीनी मट्टी का बरतन गरम ओवन मे रखने पर भी नहीं पघिलता। लेकिन गरम बरतन को तुरंत ठंडे पानी मे डाल दे तो उसमे दरार पड़ जाती है। कारण यह है कि वह गरमी के प्रतमिजबूत होता है, पर अचानक तापमान बदलने और झटके के प्रतकिमजोर होता है। रॉकेट और अतधिवनकि उड़ान यान की बाहरी सतह की रक्षा करने वाली सामग्री भी इन दोनों गुणों के बीच उत्तर खोजती है। पर वहां का तापमान और बल रसोई से तुलना के बाहर है।

रॉकेट इंजन के दहन कक्ष का भीतरी भाग हजारों डिग्री गरम गैस से भर जाता है। अतधिवनकि उड़ान यान का आगे का भाग हवा से टकराते हुए स्वयं गरम हो जाता है। ऐसी जगहों की सतह को गरमी, ऑक्सीकरण, घिसाव और बड़े बल एक साथ झेलने पड़ते हैं। ऑक्सीकरण वह घटना है जिसमे ऑक्सीजन सामग्री से मलिकर उसे काटती-घसिती है।

धातु मजबूत होती है, पर बहुत ऊंचे तापमान पर नरम हो जाती है। यह वैसा ही है जैसे गुड़ की डंडी हाथ मे मुड़ जाती है। इसलिए शोधकर्ता सरिमकि की ओर देखते हैं। सरिमकि चीनी मट्टी की तरह गरमी के प्रतमिजबूत होता है और ऊंचे तापमान पर भी अच्छी तरह टकिता है।

इस अध्याय मे जनि दो सामग्रियों पर चर्चा होती है, वे सरिमकि मैट्रिक्स कम्पोजिट (CMC) और अत-उच्च ताप सरिमकिस (UHTC) हैं। सरिमकि मैट्रिक्स कम्पोजिट सरिमकि आधार के भीतर बारीक रेशे डालकर बनाए जाते हैं। अत-उच्च ताप सरिमकिस ऐसे सरिमकि हैं जनिका गलनांक बहुत ऊंचा होता है। दोनों का लक्ष्य गरम स्थानों मे अपना आकार बनाए रखना है।

समस्या यह है कि पहले से जानना कठनि है कि ये सामग्रियां कब खराब होंगी। वास्तवकि उड़ान वातावरण को प्रयोगशाला मे ज्यों का त्यों बनाना कठनि है। एक परीक्षण की लागत भी बड़ी होती है। इसलिए इस कठनिई को कम करने वाले औजार के रूप मे कृत्रमि बुद्धमिता (AI) सामने आती है।

कृत्रमि बुद्धमिता का उपयोग सामग्री के भीतर की छोटी संरचना को पढ़ने और जीवनकाल का अनुमान लगाने मे होता है। छोटी संरचना से मतलब सूक्ष्मदर्शी से दखिने वाले कणों, रेशों, छिद्रों और सीमाओं के आकार से है। यह अध्याय बताता है कि इस छोटी संरचना को संख्या मे कैसे बदला जाता है और भवष्य को कैसे देखा जाता है। सूत्रों का उपयोग नहीं कयिा जाता, बातों से समझाया जाता है।

इस अध्याय मे एक बड़ा प्रवाह है। वह है सामग्री की छोटी दुनिया को संख्या मे बदलना। सूक्ष्मदर्शी चित्र, क्रिस्टल दशिा और परमाणुओं का कंपन सभी इसके वषिय हैं। इस जानकारी को ऐसे रूप मे बदला जाता है जिसि कृत्रमि बुद्धमिता पढ़ सके। तब कृत्रमि बुद्धमिता भवष्य को देखती है और संरचना को गढ़ती है।

इस अध्याय का क्रम इस प्रकार है। पहले देखते हैं कि चरम वातावरण मे सामग्री कैसे खराब होती है। फिर देखते हैं कि क्रिस्टल कणों को ग्राफ मे बदलकर जीवनकाल का अनुमान कैसे लगाया जाता है। इसके बाद देखते हैं कि रेशों की बुनावट को उलटी दशिा से कैसे डिज़ाइन कयिा जाता है। अंत मे देखते हैं कि बहुत छोटी दुनिया के ऊष्मा प्रवाह को पूरे पुरजे के ऊष्मा प्रवाह से कैसे जोड़ा जाता है।

एक सदिधांत पहले स्पष्ट कर दिया जाता है। इस अध्याय की कृत्रमि बुद्धमिता परीक्षण की जगह नहीं लेती। कृत्रमि बुद्धमिता ने जो प्रदर्शन संख्या दी है, उसे वास्तवकि वस्तु से जांचना चाहिए। जनि संख्याओं की पुष्टि नहीं हुई है, वे केवल संदर्भ तक सीमति रहती हैं। यह पुस्तक केवल सत्यापति सामग्री को मुख्य पाठ मे रखती है। यही सदिधांत सामग्री वकिस मे सुरक्षा की नींव बनता है।

5.1 अतधिवनकि उड़ान और अगली पीढ़ी के रॉकेट प्रणोदन के चरम वातावरण तथा ताप-संरचनात्मक नकियों के क्षरण तंत्र

इस खंड मे क्या शामिल है

यह खंड पहले यह चित्र खीचता है कि सामग्री को कतिना कठोर वातावरण सहना पड़ता है। उदाहरण के रूप मे अतधिवनकि गति से उड़ने वाले यान और उच्च-दाब रॉकेट इंजन के भीतर का भाग लिया जाता है। यह बताता है कि साधारण धातु क्यों पर्याप्त नहीं है और सरिमकि की आवश्यकता क्यों है।

फरि देखते हैं कसरिमकि सामग्री वास्तव में कैसे खराब होती है। कार्बन रेशा कम्पोजिट के ऑक्सीकरण और अतः उच्च ताप सरिमकि के गलने-घसिने तथा अवस्था परिवर्तन को क्रम से देखते हैं। गलना-घसिना वह घटना है जिसमें गरम गैस से सतह पघिलती या कटकर नकिलती है। इस क्षति प्रक्रिया को जानना जरूरी है, तभी अगले खंड में कृत्रिम बुद्धिमत्ता का पूर्वानुमान क्या सीखता है, यह समझा जा सकता है।

5.1.1 असंतुलित वायुगतिकीय ताप और उच्च-एंथैल्पी दहन गैस वातावरण

वायुगतिकीय ताप वह घटना है जिसमें तेज उड़ान के कारण हवा सतह को गरम करती है। सतह से घर्षण भी गर्मी जोड़ता है। लेकिन अतध्वनिक गति पर हवा जोर से दबती है और इस दबाव से गरम होने का हिसा बड़ा होता है। गतिजितनी तेज होती है, यह गर्मी उतनी ही तेजी से बढ़ती है और सतह को तपाती है।

अतध्वनिक गति ध्वनिकी गति से पांच गुना से अधिक होती है। माख 7 का अर्थ है ध्वनि से सात गुना तेज गति। इस गति पर हवा सामान्य रूप से नहीं बहती। उड़ान यान के आगे आघात तरंग बनती है। आघात तरंग हवा के अचानक दबने से बनने वाली दबाव की पतली दीवार है।

आघात तरंग पार करने के बाद हवा पल भर में धीमी और गरम हो जाती है। तापमान बहुत बढ़ जाए तो हवा के अणु टूटते हैं। ऑक्सीजन अणु और नाइट्रोजन अणु अलग-अलग परमाणुओं में बंट जाते हैं। इस तरह अलग हुआ परमाण्विक ऑक्सीजन सामान्य ऑक्सीजन से अधिक प्रतिक्रियाशील होता है और सामग्री पर बेहतर हमला करता है।

उड़ान यान में गर्मी सबसे अधिक आगे की धार और नासिका भाग पर पड़ती है। आगे की धार वह कनारा है जहां पंख सबसे पहले हवा से मलित होते हैं। नासिका भाग उड़ान यान का नुकीला आगे का सरि है। इन जगहों की सतह हजारों डिग्री तक पहुंचती है। इसके साथ सतह को बगल की ओर धकेलने वाला कर्तन बल भी काम करता है।

रॉकेट इंजन का भीतरी भाग भी उतना ही कठोर होता है। मीथेन और तरल ऑक्सीजन को जलाने पर गरम गैस बनती है। इस गैस में पानी, कार्बन डाइऑक्साइड और कार्बन मोनोऑक्साइड मलित होते हैं। बची हुई ऑक्सीजन भी होती है। दहन कक्ष का दाब दर्जनों वायुमंडल तक पहुंचता है। यह उच्च-दाब गैस दहन कक्ष की दीवार को बना रुके मारती रहती है।

ऐसे वातावरण को उच्च-एंथैल्पी वातावरण कहा जाता है। एंथैल्पी गैस में नहिती ऊष्मा ऊर्जा की मात्रा है। उच्च-एंथैल्पी का अर्थ है कि गैस में बहुत अधिक गर्मी है। यह गैस दीवार पर गर्मी उड़ेलती है। लेकिन दीवार का तापमान गैस के तापमान से कम होता है। कारण यह है कि गर्मी सामग्री के भीतर फैलती है और शीतलन भी होता है।

यहां समय भी समस्या बनता है। रॉकेट प्रक्षेपण से कक्षा तक सैकड़ों सेकंड जलता है। अतध्वनिक उड़ान यान लंबे समय तक वायुमंडल में ग्लाइड करता है। इसका अर्थ है कि गर्मी थोड़े पल नहीं, बल्कि लंबे समय तक मलित होती है। इसलिए सामग्री का थोड़ी देर टकिना पर्याप्त नहीं है।

यह कतिना गरम है, इसका अंदाज़ लगाएं। अतध्वनिक आगे की धार का ठहराव बटु सामग्री की सीमा के पास होता है। ठहराव बटु वह स्थान है जहां प्रवाह रुकता है और गर्मी सबसे अधिक जमा होती है। इस स्थान का ऊष्मा भार रसोई की गैस आग से तुलना के बाहर है। सतह को बगल की ओर धकेलने वाला कर्तन बल भी इसी स्थान पर साथ लगता है।

इन सभी स्थितियों को एक सामग्री को सहना पड़ता है। गर्मी, ऑक्सीकरण, कर्तन बल और लंबा संपर्क समय एक साथ आते हैं। 2024 में अतध्वनिक उड़ान सामग्री पर लखी गई एक समीक्षा ने इस संयुक्त वातावरण को सामग्री चयन की मुख्य कठिनाई समझाया। यही कठिनाई समस्या सरिमकि सामग्री अनुसंधान का प्रारंभ बटु है।

यहां कृत्रिम बुद्धिमत्ता का काम स्पष्ट है। वास्तविक परीक्षण महंगे और दुर्लभ हैं। इसलिए कुछ परीक्षणों के डेटा से वसित स्थितियों का अनुमान लगाना पड़ता है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता कम डेटा से नयिम नकालने में सक्षम है। पर भौतिक नयिमों की सहायता के बिना वह गलत उत्तर दे सकती है। इसी कारण इस अध्याय की कई वधियां भौतिकी और कृत्रिम बुद्धिमत्ता को साथ उपयोग करती हैं।

5.1.2 कार्बन फाइबर कंपोजिट के ऑक्सीजन से क्षतगिरस्त होने की प्रक्रिया (C/SiC)

कार्बन रेशा प्रबलित सलिकॉन कार्बाइड (C/SiC) एक प्रतिनिधित्ताप-संरचनात्मक सामग्री है। कार्बन रेशा पतला और हल्का होता है और आसानी से टूटता नहीं। सलिकॉन कार्बाइड (SiC) उच्च ताप और ऑक्सीकरण को अपेक्षाकृत अच्छी तरह सहता है। इन दोनों को मलित पर हल्का और मजबूत कम्पोजिट बनता है। आगे इस सामग्री को C/SiC लिखा जाता है।

इस सामग्री को बनाने की दो मुख्य वधियां हैं। एक रासायनिक वाष्प अंतःप्रवेश वधि है। इसमें गैस को भीतर प्रवेश कराकर रेशों के बीच सरिमकि भरा जाता है। दूसरी तरल राल अंतःप्रवेश कार्बनीकरण वधि है। इसमें राल डालकर पकाया जाता है और उसे सरिमकि में बदला जाता है। दोनों वधियां रेशा गुच्छों के बीच की जगह को सरिमकि से भरती हैं।

समस्या निर्माण प्रक्रिया में ही शुरू हो जाती है। कार्बन रेशा और सलिकॉन कार्बाइड आधार गर्म होने पर अलग-अलग मात्रा में फैलते हैं। इसे तापीय प्रसार गुणांक का अंतर कहते हैं। गरम अवस्था से कमरे के तापमान तक ठंडा होने पर वे अलग-अलग मात्रा में सिकुड़ते हैं। इसके परिणामस्वरूप आधार के भीतर बारीक दरारों का जाल बनता है। ये सूक्ष्म दरारें निर्माण प्रक्रिया में अपरिहार्य रूप से बनती हैं।

दरारें ऑक्सीजन के भीतर जाने का रास्ता बनती हैं। बाहर से सामग्री ठीक दखि, तब भी ऑक्सीजन भीतर घुसती है। यह वैसा है जैसे दीवार के कागज की छोटी दरार से पानी रसिता है। भीतर गई ऑक्सीजन कार्बन रेशों और अंतरफलक परत पर हमला करती है। अंतरफलक परत रेशा और आधार के बीच की पतली सीमा है।

सलिकॉन कार्बाइड आधार ऑक्सीजन से मलिन पर दो तरह से प्रतिक्रिया करता है। तापमान बहुत अधिक न हो और ऑक्सीजन पर्याप्त हो तो सतह पर कांच जैसी परत बनती है। यह परत सलिकॉन डाइऑक्साइड की पतली सुरक्षा परत है। इसे नष्टिक्रिय ऑक्सीकरण कहते हैं। यह कांच परत ऑक्सीजन के प्रवेश को रोकती है और सामग्री के भीतर की रक्षा करती है।

इसके विपरीत, तापमान बहुत अधिक हो या ऑक्सीजन दाब कम हो तो स्थिति बदल जाती है। सुरक्षात्मक कांच परत नहीं बन पाती। इसके बजाय सलिकॉन कार्बाइड सीधे गैस बनकर उड़ जाता है। इसे सक्रिय ऑक्सीकरण कहते हैं। सक्रिय ऑक्सीकरण में सतह सुरक्षा परत के बिना लगातार कटती जाती है। उच्च ऊंचाई की अतध्वनिक उड़ान में यह जोखिम बढ़ता है।

अंतरफलक परत गायब हो जाए तो कम्पोजिट की ताकत टूट जाती है। सामान्यतः रेशे दरार बढ़ने पर पुल की तरह दरार को थामते हैं। इसे फाइबर ब्रिजिंग कहते हैं। ऑक्सीकरण से अंतरफलक खत्म हो जाए तो यह थामने वाला बल गायब हो जाता है। तब सामग्री अचानक आसानी से टूटने वाली अवस्था में आ जाती है। परतों का एक-दूसरे से अलग होना, जसि डेलिमिनेशन क्षति कहते हैं, भी साथ होता है।

यह क्षति बाहर से अच्छी तरह दिखाई नहीं देती। सतह ठीक रहे, तब भी भीतर अंतरफलक पहले खराब होता है। इसलिए केवल आंखों से देखने वाली जांच पर्याप्त नहीं है। सामग्री के भीतर ऑक्सीजन प्रवेश और अंतरफलक की अवस्था को जांचना चाहिए। कृत्रिम बुद्धिमत्ता जीवन मॉडल बाहर नहीं, भीतर छिपी इस क्षति को पढ़ता है।

2026 में प्रकाशित एक अध्ययन इस क्षति को संख्याओं में दिखाता है। वू (Wu) शोध दल ने 2.5-आयामी बुने हुए C/SiC की ऑक्सीकरण क्षतिकी भौतिक मॉडल से पूर्वानुमान किया। इस अध्ययन में कमरे के तापमान पर तन्य शक्ति लगभग 264 मेगापास्कल थी। 1100 डिग्री तक बढ़ने पर शक्ति लगभग 184 मेगापास्कल तक गिर गई। इसी अंतराल में प्रत्यासूयता गुणांक भी लगभग 23 प्रतिशत घटा। यह अध्ययन कृत्रिम बुद्धिमत्ता मॉडल नहीं, बल्कि भौतिकी-आधारित संरचनात्मक मॉडल का उपयोग करता है।

ऑक्सीजन रोकने का एक और रास्ता भी है। सतह पर सुरक्षात्मक कोटिंग चढ़ाने की विधि। इसे पर्यावरण अवरोध कोटिंग कहते हैं। यह कोटिंग ऑक्सीजन और जलवाष्प को भीतर जाने से रोकती है। अतध्वनिक अनुसंधान में लक्ष्य ऐसी कोटिंग है जो 2000 डिग्री सेल्सियस से ऊपर सह सके। कोटिंग की मोटाई और संरचना तय करने में कृत्रिम बुद्धिमत्ता का उपयोग होता है।

यह परिणाम क्या संकेत देता है। यदि केवल सामग्री के औसत गुण देखे तो अंतरफलक क्षति छूट जाती है। ऑक्सीजन कहां और कतिनी भीतर गई, इसका स्थान देखकर विश्लेषण करना चाहिए। ताप इतिहास और भार इतिहास को भी साथ देखना चाहिए। आगे आने वाला कृत्रिम बुद्धिमत्ता जीवन मॉडल यही काम करता है।

यहां सीमा भी स्पष्ट कर दी जाती है। वू शोध दल का मॉडल भौतिकी-आधारित गणना है। यह कृत्रिम बुद्धिमत्ता के बिना भी क्षतिकी अनुमान लगाता है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता ऐसे भौतिक मॉडल के डेटा को सीखकर गतिबिंदु की दृष्टि में उपयोग होती है। भौतिक मॉडल और कृत्रिम बुद्धिमत्ता प्रतिस्पर्धी नहीं, बल्कि एक-दूसरे की कमी पूरी करने वाले साथी हैं।

5.1.3 अति-उच्च तापमान सरिमिक के पघिलने और परत उतरने की प्रक्रिया (UHTC)

अति-उच्च ताप सरिमिक्स ऐसे सरिमिक हैं जिनका गलनांक बहुत ऊंचा होता है। प्रतिनिधि सामग्री ज़रिकोनियम डाइबोराइड और हैफनियम डाइबोराइड हैं। ज़रिकोनियम डाइबोराइड ज़रिकोनियम और बोरॉन का यौगिक है। इन सामग्रियों का गलनांक 3000 डिग्री सेल्सियस से अधिक होता है। इसलिए इन्हें अतध्वनिक आगे की धार और रॉकेट पुर्जों के उम्मीदवार के रूप में शोध किया जाता है।

गलनांक ऊंचा है, इसलिए नष्टि नहीं हुआ जा सकता। असली समस्या ऑक्सीकरण है। ज़रिकोनियम डाइबोराइड ऑक्सीजन से मलि तो दो ऑक्साइड बनते हैं। एक ज़रिकोनिया नामक कठोर ऑक्साइड है। दूसरा डाइबोरॉन ट्राइऑक्साइड नामक बोरॉन ऑक्साइड है।

डाइबोरॉन ट्राइऑक्साइड कम तापमान पर रोचक गुण दिखाता है। लगभग 450 डिग्री सेल्सियस पर यह पघिलकर तरल हो जाता है। यह तरल सतह की छोटी दरारें भरता है। यह घाव पर लगने वाली मरहम की तरह दरारें भरता है। इसे स्व-उपचारक फ़िल्म कहा जाता है। शुरुआती ऑक्सीकरण चरण में यह परत सामग्री की रक्षा करती है।

लेकिन तापमान और बढ़े तो यह बचाव टूट जाता है। लगभग 1100 डिग्री सेल्सियस से ऊपर डाइबोरॉन ट्राइऑक्साइड धीरे-धीरे वाष्पित होता है। 1500 डिग्री सेल्सियस के आसपास पहुंचने पर यह परत व्यवहार में गायब हो जाती है। सही सीमा तापमान ऑक्सीजन दाब, गैस गति और दाब के अनुसार बदलता है। इसलिए इसे एक स्थिर मान के रूप में कहना कठिन है।

सलिकॉन कार्बाइड मलिन पर स्थिति सुधरती है। ऑक्सीकृत सलिकॉन कार्बाइड का तरल कांच डाइबोरॉन ट्राइऑक्साइड से मिला जाता है। दोनों घटक मलिकर बोरोसलिकेट नामक कांचीय अवस्था बनाते हैं। यह कांच अधिक ऊंचे तापमान तक सतह को ढकता है।

तापमान और अधिक बढ़े तो यह कांच भी टकि नहीं पाता। लगभग 1700 डिग्री सेल्सियस से ऊपर कांच की श्यानता घटती है। कांच वाष्पित होता है और तेज गैस प्रवाह से उखड़ जाता है। इस तरह सुरक्षा परत गायब हो जाए तो सतह तेजी से कटती है। अंत में सतह पर छिद्रों वाला ज़रिकोनिया ढांचा ही बचता है। यह छदिरयुक्त ढांचा ऑक्सीजन को भीतर और आसानी से गुजरने देता है।

ज़रिकोनिया में एक और फंदा है। ज़रिकोनिया तापमान के अनुसार अपनी क्रिस्टल संरचना बदलता है। ठंडा होने की प्रक्रिया में वह टेट्रागोनल प्रणाली से मोनोक्लिनिक प्रणाली में जाता है। ये दोनों नाम परमाणुओं के जमा होने के तरीके के अंतर को बताते हैं। यह परिवर्तन होने पर आयतन लगभग 4.5 प्रतिशत बढ़ता है।

आयतन अचानक बढ़े तो ऑक्साइड परत के भीतर बड़ा बल पैदा होता है। यह वैसा है जैसे सर्दियों में पानी जमकर बोटल तोड़ देता है। यह बल ऑक्साइड परत में दरारें बनाता है। दरारें जुड़ जाएं तो ऑक्साइड परत टुकड़ों में गरिती है। इसे स्पॉलिंग कहते हैं। जहां परत गरिती है, वहां नई सतह खुलती है और फिर ऑक्सीकरण शुरू होता है।

उच्च-एनर्जी बोराइड इस समस्या के लिए एक नया दृष्टिकोण है। उच्च-एनर्जी सॉलिड एसिड एसिड है जिसमें कई धातु तत्व लगभग समान मात्रा में मिलाए जाते हैं। कभी-कभी पाँच प्रकार की धातुओं को एक ही क्रिस्टल में रखा जाता है। संरचना की सीमा व्यापक होती है, इसलिए यह कृत्रिम बुद्धिमत्ता खोज के लिए उपयुक्त है। कौन-सा संयोजन ऑक्सीकरण के विरुद्ध मजबूत है, इसे कंप्यूटर से पहले छाँटा जा सकता है।

2026 में अति-उच्च ताप सॉलिड पर लिखी गई एक समीक्षा इस प्रवाह को अच्छी तरह दिखाती है। यह समीक्षा प्रयोग, बहु-स्तरीय समीक्षण और डेटा-आधारित डिज़ाइन को साथ में देखती है। बहु-स्तरीय का अर्थ है परमाणु आकार से लेकर पुरजे के आकार तक कई स्तरों को जोड़ने की पद्धति। डेटा-आधारित डिज़ाइन वह पद्धति है जिसमें कृत्रिम बुद्धिमत्ता संरचना और सूक्ष्म संरचना चुनती है।

कृत्रिम बुद्धिमत्ता ऑक्साइड परत की मोटाई का अनुमान लगाने में भी उपयोग होती है। एक शोध दल ने मशीन लर्निंग से अति-उच्च ताप बोराइड की ऑक्सीकरण क्षमता का अनुमान लगाया। उन्होंने रैंडम फॉरेस्ट नाम की विधि से ऑक्साइड परत की मोटाई का अनुमान लगाया। रैंडम फॉरेस्ट कई नरिणय नमियों को जोड़कर उत्तर निकालने की विधि है। फिर भी ऑक्साइड परत का वास्तविक व्यवहार डिटेनल और आर्क-जेट परीक्षण से जाँचना पड़ता है। आर्क-जेट ऐसा उपकरण है जो अति-उच्च ताप गैस छोड़कर उड़ान वातावरण की नकल करता है।

गलनांक का अनुमान लगाने में भी मशीन लर्निंग अंतर-परमाणु पोटेनशियल (MLIP) का उपयोग होता है। यह वह विधि है जिसमें कृत्रिम बुद्धिमत्ता परमाणुओं के बीच के बलों की तेज़ गणना करती है। 2025 में एक शोध दल ने MLIP से उच्च-एनर्जी सॉलिड एसिड के गलनांक का अनुमान लगाया। उन्होंने ऊँचे गलनांक वाले संयोजनों को कंप्यूटर से पहले छाँटा। यह विधि प्रयोग से पहले उम्मीदवारों की संख्या घटाती है। इससे महँगे संश्लेषण और परीक्षण की संख्या कम होती है। इस तरह गणना पहले छाँटाई कर दे तो पूरी सामग्री खोज तेज़ हो जाती है।

फिर भी एक प्रश्न बचता है। क्या कंप्यूटर से चुना गया संयोजन सचमुच ऑक्सीकरण के विरुद्ध मजबूत है। गणना आदर्श स्थितियों को मानकर चलती है। वास्तविक सतह पर अशुद्धियाँ और दोष होते हैं। गैस का प्रवाह और दबाव भी गणना से अलग होते हैं। इसलिए अंतिम नरिणय वास्तविक वस्तु का परीक्षण करता है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता केवल परीक्षण के उम्मीदवारों को समझदारी से चुनने में मदद करती है।

5.2 क्रिस्टल कणों को ग्राफ में बदलकर जीवनकाल का अनुमान लगाने की विधि

इस खंड में क्या देखा जाएगा

यह खंड सामग्री के भीतर के हिस्से को ऐसे रूप में बदलने की विधि देखता है जिससे कृत्रिम बुद्धिमत्ता पढ़ सके। उसका उपकरण स्पेस-टाइम ग्राफ न्यूरोल नेटवर्क है। ग्राफ बिंदुओं और रेखाओं से संबंध दिखाने वाला चित्र है। मेट्रो मार्ग मानचित्र इसका अच्छा उदाहरण है। स्टेशन बिंदु हैं और खंड रेखाएँ हैं।

सामग्री के भीतर क्रिस्टल कणों को बिंदुओं में, और कण सीमाओं को रेखाओं में बदला जाता है। इसमें समय का प्रवाह जोड़ा जाता है। कारण यह है कि गर्मी और बल बार-बार मिलने पर क्षति जमा होती है। यह खंड बताता है कि उस ग्राफ को कैसे बनाया जाता है, क्षति कैसे बढ़ती है, और भौतिक नमियों को सीखने में कैसे रखा जाता है। समय और स्थान को साथ देखने के अर्थ में इसे स्पेस-टाइम मॉडल कहा जाता है।

5.2.1 सूक्ष्म संरचना को ग्राफ में बदलना

क्रिस्टल दाना सामग्री के भीतर छोटा क्रिस्टल कण है। धातु या सरिमिक एक बड़ा क्रिस्टल नहीं होते। वे असंख्य छोटे कणों से मलिकर बनते हैं। हर कण में परमाणुओं की दशा थोड़ी-थोड़ी अलग होती है। इस दशा को क्रिस्टल अभविन्यास कहा जाता है।

क्रिस्टल अभविन्यास पढ़ने का प्रतिनिधि उपकरण इलेक्ट्रॉन बैकस्कैटर डिफ्रैक्शन (EBSD) है। इलेक्ट्रॉन सूक्ष्मदर्शी में इलेक्ट्रॉन भेजकर हर कण की दशा पढ़ी जाती है। यह उपकरण सतह को स्कैन करते हुए प्रत्येक कण की दशा दर्ज करता है। उसका परिणाम रंग-बरंगे अभविन्यास मानचित्र के रूप में निकलता है।

क्रिस्टल दाना सीमा वह सीमा है जहाँ दो कण मिलते हैं। यह सीमा सामग्री की कमजोर कड़ी बनना आसान है। ऑक्सीजन इसी रास्ते से भीतर घुसती है। दरारे भी इसी सीमा के साथ बढ़ती हैं। इसलिए सीमा के गुण जानना जीवनकाल अनुमान का मुख्य भाग है।

ग्राफ में बदलने की विधि एक सरल विचार से निकलती है। एक कण को बढ़ि, अर्थात नोड, माना जाता है। यदि दो कण जुड़े हों तो उनके बीच रेखा, अर्थात एज, खींची जाती है। ऐसा करने से जटिल सूक्ष्मदर्शी चित्र एक साफ संबंध मानचित्र बन जाता है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता फोटो की तुलना में इस संबंध मानचित्र को बेहतर पढ़ती है।

नोड में कण की जानकारी रखी जाती है। कण का आकार, आकृति और दशा डाली जाती है। उस स्थान का तापमान और तनाव भी डाला जाता है। तनाव किसी वस्तु को दबाने या खींचने वाले बल की तीव्रता है। इस तरह एक बढ़ि उस कण की अवस्था का सार देता है।

एज में सीमा की जानकारी रखी जाती है। दो कणों की दशा का अंतर डाला जाता है। सीमा का क्षेत्रफल और दशा भी डाली जाती है। ऑक्सीकरण से कितनी क्षति हुई है, यह भी डाला जाता है। दशा का अंतर जितना बड़ा होता है, सीमा में ऑक्सीजन के अधिक आसानी से घुसने की प्रवृत्ति होती है।

यह तरीका पहले ही दूसरी सामग्रियों में परखा गया है। 2023 में एक शोध दल ने इस ग्राफ पद्धति को इस्पात पर लागू किया। उन्होंने इस्पात के हर कण में अधिक थकान क्षति वाले स्थानों को वर्गीकृत किया। थकान वह क्षति है जो बार-बार बल मिलने से बनती है। EBSD मानचित्र को ग्राफ में बदलकर मॉडल को सखिया गया। इस अध्ययन में ग्राफ पद्धति कण-वार क्षति स्थानों को पहचानने में उपयोगी साबित हुई। फरि भी इस अध्ययन ने इस्पात की थकान वर्गीकरण को देखा था। यह सरिमिक के जीवनकाल, क्रीप टूटन या समय के साथ परिवर्तन का अनुमान लगाने वाला अध्ययन नहीं था।

सरिमिक के जीवनकाल अनुमान में इस ग्राफ पद्धति को ले जाना इस पुस्तक द्वारा प्रस्तावित दशा है। सरिमिक पर इसका प्रायोगिक प्रमाण अभी नहीं मिला है। नीचे दिया गया वर्णन सिद्धि तथ्य नहीं, बल्कि शोध के आगे बढ़ने की दशा का चित्र है।

सीमा जानकारी सँभालने की नई विधि भी सामने आ रही है। 2026 में एक शोध दल ने EBSD मानचित्र के खाली स्थानों को ग्राफ लर्निंग से भरा। यह मापन में छूटे क्षेत्रों को क्रिस्टल-विज्ञान नियमों के अनुसार भरने की तकनीक है। यह विधि क्रिस्टल नियमों को कृत्रिम बुद्धिमत्ता में रखती है ताकि वह गलत दशा न भर दे। सामग्री डेटा हमेशा पूरा नहीं होता, इसलिए ऐसी पूरक तकनीक उपयोगी होती है।

ग्राफ पद्धति में फोटो की तुलना में एक लाभ है। फोटो एक-एक पिकसेल को सँभालती है। इसलिए वह अपने आप नहीं जानती कि कण कहाँ शुरू होता है और कहाँ समाप्त होता है। ग्राफ कण को एक इकाई के रूप में बाँधता है। यह उस तरीके के निकट है जिससे मनुष्य सामग्री को देखता है। इसलिए कणों के बीच संबंध सीखना आसान होता है।

आकार अलग होने पर भी ग्राफ को सँभालना आसान है। फोटो का आकार तय होना चाहिए। ग्राफ में कणों की संख्या बढ़े या घटे, उसे समान तरीके से सँभाला जाता है। हर सामग्री में कणों की संख्या अलग होती है, इसलिए यह गुण उपयोगी है। छोटे नमूने से सीखे नियम को बड़े पुरजे पर आजमाया जा सकता है। फरि भी आकार बढ़ा होने पर दोष वितरण और ताप ढाल भी बदल जाते हैं। इसलिए बड़े पुरजे में फरि से सत्यापन का चरण चाहिए।

इस तरह बनाया गया ग्राफ सरिमिक पर भी लागू किया जा सकता है। कारण यह है कि सरिमिक भी क्रिस्टल दानों और सीमाओं से बने होते हैं। अति-उच्च ताप सरिमिक का ऑक्सीकरण और क्रीप भी सीमा से शुरू होता है। क्रीप वह घटना है जिसमें लंबे समय तक बल मिलने पर सामग्री धीरे-धीरे खिंची है। इसलिए यह ग्राफ पद्धति सरिमिक जीवनकाल अनुमान का आधार बनती है।

5.2.2 पड़ोस और समय को साथ देखने वाली ग्राफ लर्निंग

अब ग्राफ में समय का प्रवाह जोड़ा जाता है। क्षति एक पल में समाप्त नहीं होती। गर्मी और बल बार-बार लगते हैं और क्षति थोड़ा-थोड़ा जमा होती है। इसलिए वही सामग्री भी समय के साथ अलग ग्राफ बनती है। इस परिवर्तन का पीछा करना स्पेस-टाइम मॉडल का काम है।

पहले स्थान पक्ष को देखते हैं। एक कण की अवस्था पड़ोसियों से प्रभावित होती है। बगल का कण अधिक बल झेले तो मेरे कण तक भी बल पहुँचता है। इस पड़ोसी जानकारी को जुटाने वाली गणना ग्राफ कॉन्वोल्यूशन है। हर नोड पड़ोसी नोडों की जानकारी लेकर अपनी अवस्था को नया करता है।

सभी पड़ोसियों को एक जैसा नहीं माना जाता। कोई सीमा क्षति में बड़ा योगदान देती है और कोई कम। इसलिए मॉडल हर पड़ोसी को अलग भार देता है। इस भार को तय करने की विधि अटेंशन है। यह महत्वपूर्ण पड़ोसी पर अधिक ध्यान देने की पद्धति है।

मुख्य बात यह है कि अटेंशन में भौतिक ज्ञान डाला जाता है। सीमा का दशांतर बड़ा हो तो सीमा ऊर्जा ऊँची होती है। सीमा ऊर्जा ऊँची हो तो ऑक्सीजन अधिक आसानी से प्रवेश करती है। ऐसे भौतिक नियमों को भार गणना में शामिल किया जाता है। तब डेटा कम होने पर भी मॉडल गलत निर्णय से बचता है।

समय पक्ष को भी मलित-जुलते ढंग से सँभाला जाता है। पछिली अवस्था अगली अवस्था बनाती है। कल तक जमा क्षति पर आज की क्षति जुड़ती है। मॉडल समय की इस श्रृंखला को सीखता है। इसके लिए समय क्रम को सँभालने वाली न्यूरल नेटवर्क संरचना का उपयोग किया जाता है।

इस खंड में देखी जाने वाली महत्वपूर्ण क्षतिकी दशा होती है। सरिमिक कंपोजिट में पहले मैट्रिक्स में बारीक दरार बनती है। इस दरार के साथ फाइबर और मैट्रिक्स का इंटरफेस अलग होता है। उसी जगह से ऑक्सीजन प्रवेश करती है और ऑक्सीकरण परत बढ़ती है। क्षति सामान्यतः बल और गैस की दशा के साथ फैलती है।

यह दशात्मक क्षतिसामग्री के जीवनकाल पर बड़ा प्रभाव डालती है। दरार और इंटरफेस अलगाव एक दशा में जुड़ जाएँ तो वह दशा कमजोर हो जाती है। छद्म आपस में जुड़ जाएँ तो ऑक्सीजन का रास्ता चौड़ा हो जाता है। सीमा में फँसा कार्बीय चरण हलिते हुए क्षतिको आगे ले जा सकता है। ऐसे परिवर्तन क्रीप की गति बदलते हैं और टूटन को जल्दी लाते हैं। टूटन उस क्षण को कहते हैं जब सामग्री सह नहीं पाती और टूट जाती है।

क्रिस्टल दाना सीमा फसिलन भी इस खंड की महत्वपूर्ण क्षति है। ऊँचे ताप पर कण सीमाओं के साथ एक-दूसरे पर फसिलते हैं। यह गीली ईंटों के एक-दूसरे से खसिकने जैसा है। यह फसिलन क्रीप वक्रितिको बढ़ाती है। सीमा की दशा और गुण फसिलन का आकार तय करते हैं। इसलिए सीमा जानकारी रखने वाली एज महत्वपूर्ण है।

गर्म गैस सामान्यतः एक दशा में बहती है और सतह को धकेलती है। इसलिए सरिमिक की क्षति भी दशा लेकर बढ़ती है। स्पेस-टाइम ग्राफ मॉडल इस दशात्मकता को भी सीखने में शामिल करना चाहता है। तब यह अनुमान लगाया जा सकता है कि क्षतिकिसि दशा में बढ़ेगी। ऐसी दशात्मक भविष्यवाणी के लिए अभी सत्यापन डेटा कम है।

समय को सँभालने के दो तरीके हैं। एक तरीका समय क्रम को क्रम से पढ़ना है। यह वाक्य को आगे से पढ़ने जैसा है। दूसरा तरीका परिवर्तन की गतिको सीधे सँभालना है। यह सीखता है कि क्षतिकितनी तेज़ी से बढ़ती है। दोनों तरीके क्षतिजमा होने की प्रक्रिया को शामिल करते हैं।

अटेंशन पद्धति आज की कृत्रिम बुद्धिमत्ता का केंद्रीय उपकरण है। लेख का अनुवाद करने वाली कृत्रिम बुद्धिमत्ता भी इसी पद्धतिको उपयोग करती है। इसका सिद्धांत वाक्य में महत्वपूर्ण शब्दों पर अधिक ध्यान देना है। सामग्री ग्राफ में यह क्षतिके लिए महत्वपूर्ण पड़ोसियों पर ध्यान देता है। वही अटेंशन सिद्धांत भाषा अनुवाद और सामग्री विश्लेषण दोनों में उपयोग होता है।

ऐसी स्पेस-टाइम ग्राफ पद्धति अभी विकसित हो रही तकनीक है। सरिमिक कंपोजिट पर बड़े पैमाने के प्रायोगिक प्रमाण अधिक नहीं हैं। अच्छा अनुमान लगाने के लिए बहुत सारा अच्छा डेटा चाहिए। अति-उच्च ताप परीक्षण डेटा इकट्ठा करना ही कठिन है। इसलिए अगले उपशीर्षक में देखे जाने वाले भौतिक नियमों की मदद चाहिए।

5.2.3 दशा को ध्यान में रखने वाली क्रीप टूटन और भौतिक नियमों को शामिल करने वाला अधिगम

क्रीप वह घटना है जिसमें लंबे समय तक बल मलिन पर सामग्री धीरे-धीरे खचिती है। यह लंबे समय तक टँगी कपड़े की रस्सी के थोड़ा-थोड़ा झुकने जैसा है। ऊँचे ताप पर यह घटना तेज़ हो जाती है। रॉकेट पुरजे गर्म अवस्था में लंबे समय तक बल झेलते हैं। इसलिए क्रीप रॉकेट पुरजों के जीवनकाल को तय करने वाला बड़ा कारक बन जाता है।

क्रीप क्षतिदशा के अनुसार अलग-अलग जमा होती है। इसे अनसिस्ट्रॉपी कहा जाता है। अनसिस्ट्रॉपी वह गुण है जिसमें हर दशा में गुण अलग होते हैं। यह लकड़ी के रेशे की दशा में आसानी से फटने जैसा है। सामग्री कई दशाओं से एक साथ बल झेलती है। इसे बहु-अक्षीय भार कहा जाता है।

शोधकर्ता इस क्षतिको एक चर में संक्षेप करते हैं। इसे क्षतिचर कहा जाता है। क्षतिचर 0 हो तो सामग्री साबुत है। 1 हो तो उस स्थान के टूट जाने का अर्थ है। क्षतिबढ़ने पर बचा हुआ भाग अधिक बल झेलता है। तब क्षति और तेज़ी से बढ़ती है। इस प्रतियुक्ति के कारण क्षति नियंत्रण से बाहर बढ़ती है और टूटन को जल्दी लाती है।

तापमान बढ़े तो क्रीप तेज़ हो जाता है। कारण यह है कि परिमाण अधिक सक्रिय होकर चलते हैं। इस ताप निर्भरता को घातीय फलन में रखा जाता है। तापमान थोड़ा ही बढ़े तो भी क्षत की गति बहुत बढ़ जाती है। इसलिए सतह के अधिकतम तापमान को घटाना महत्वपूर्ण है। पछिले खंड की कोटिंग और इस खंड का ताप प्रवाह यहीं मिलते हैं।

ऑक्सीकरण इस क्षत को तेज़ बनाता है। ऑक्साइड परत जितनी मोटी होती है, सीमा उतनी कमजोर होती है। इसलिए क्षत नियम में ऑक्सीकरण मोटाई को साथ रखा जाता है। इसका अर्थ है कि क्रीप और ऑक्सीकरण को अलग-अलग नहीं, साथ में देखा जाता है। रॉकेट वातावरण में ये दोनों हमेशा साथ होते हैं।

यहाँ एक महत्वपूर्ण भौतिक नियम है। क्षत केवल एक दिशा में बढ़ती है। एक बार बनी दरार अपने आप नहीं भरती। समय बीतने पर भी क्षत चर घटता नहीं। इस नियम को क्षत की अपरिवर्तनीयता कहा जाता है। यह ऊष्मागतिकी के दूसरे नियम के समान संदर्भ में है।

यदि कृत्रिम बुद्धिमत्ता इस नियम को तोड़े तो अनुमान गलत हो जाता है। यदि वह क्षत घटने वाला उत्तर दे तो वह वास्तविकता से मेल नहीं खाता। इसलिए सीखने में दंड दिया जाता है। नियम तोड़ने वाला उत्तर आए तो हानि को बढ़ा माना जाता है। इस दंड को हानि फलन में रखने की पद्धति भौतिकी-सूचि अधिगम है।

भौतिकी-सूचि अधिगम में दूसरे नियम भी साथ रखे जाते हैं। बल का संतुलन उनमें से एक है। एक स्थान पर धकेलने और खींचने वाले बलों का योग मेल खाना चाहिए। द्रव्यमान न गायब होता है और न पैदा होता है, यह नियम भी रखा जाता है। इन नियमों को हानि फलन में जोड़ा जाता है। तब मॉडल भौतिकी के वरिद्ध उत्तर से बचता है।

टूटन मानदंड भी दिशा को साथ देखता है। सामग्री खींचने वाले बल के सामने कमजोर होती है। इसलिए जिस दिशा में तन्य बल सबसे अधिक हो, उसे अलग से देखा जाता है। भीतर से फुलाने वाले दबाव को भी साथ देखा जाता है। कई दिशाओं के बलों को एक जोखिम मान में बाँधा जाता है। यही जोखिम मान तय करता है कि क्षत कितनी तेज़ी से बढ़ेगी।

इस तरीके की जड़ भौतिकी-सूचि न्यूरल नेटवर्क (PINN) में है। 2019 में राइसी (Raissi) शोध दल ने इस अवधारणा को व्यवस्थित किया। उन्होंने भौतिक समीकरणों को सीधे न्यूरल नेटवर्क के प्रशिक्षण में डाला। विचार यह है कि डेटा कम हो, तब भी भौतिक नियम खाली जगह भर देते हैं। यही विचार सरिमिकी की आयु के अनुमान तक वैसा ही जारी रहता है।

भौतिक नियमों का असली मूल्य अनुमान को फैलाने में दखिता है। परीक्षण डेटा अधिकतर कम तापमान पर केंद्रित होता है। असल में जानना होता है कि लगभग 2000 डिग्री सेल्सियस पर पदार्थ कैसा व्यवहार करेगा। इस ऊँचे तापमान का डेटा लगभग नहीं होता। भौतिक नियम हों, तो बना डेटा वाले क्षेत्र को भी उचित ढंग से देखा जा सकता है।

फिर भी इस तरीके की सीमा है। भौतिक नियम गलत डाल दिए जाएं, तो अनुमान उलटे खराब हो जाता है। नियमों के बीच भार तय करना भी कठिन है। वास्तविक टूटन के डेटा से जांचने का चरण छोड़ा नहीं जा सकता। इसलिए कृत्रिम बुद्धिमत्ता के अनुमान को परीक्षण का विकल्प नहीं, बल्कि परीक्षण घटाने के औजार के रूप में इस्तेमाल किया जाता है।

5.3 रेशों की बुनावट और कोटिंग को डिजाइन करने वाला जनरेटिव मॉडल

पछिले खंड ने पहले से बने पदार्थ की आयु का अनुमान लगाया। यह खंड दिशा बदलता है। पहले इच्छित प्रदर्शन तय किया जाता है, फिर उस प्रदर्शन को देने वाली संरचना को उलटी दिशा से खोजा जाता है। इसे प्रतिलोम डिजाइन कहा जाता है। खाना पकाने से तुलना करें, तो यह मनचाहा स्वाद तय करके उसके लिए सामग्री का मश्रुण खोजने जैसा है।

इस खंड का विषय 3-आयामी बुनी हुई रेशा संरचना और इंटरफेस कोटिंग है। प्रश्न यह है कि रेशों को किस कोण पर बुना जाए और कोटिंग कितनी चढ़ाई जाए। इसके लिए डिफ्यूजन मॉडल नामक जनरेटिव कृत्रिम बुद्धिमत्ता का उपयोग किया जाता है। डिफ्यूजन मॉडल धुंधले शोर से स्पष्ट संरचना गढ़ने की विधि है। इसमें यह गुण जोड़ा जाता है कि दिशा बदलने पर भी परिणाम न डगमगाए।

5.3.1 त्रि-आयामी बुनी हुई रेशा संरचना और दिशा से न डगमगाने वाला अधिगम

3-आयामी ब्रेडेड कंपोजिट वह पदार्थ है जिसमें रेशा-गुच्छों को त्रि-आयामी रूप से बुना जाता है। यह तीन दिशाओं में कसकर बुनी टोकरी जैसा दखिता है। साधारण कंपोजिट पतली परतें चढ़ाकर बनाया जाता है। तब परतों के बीच का भाग कमजोर हो जाता है और आसानी से अलग हो जाता है। इसे परतों के बीच अलगाव कहा जाता है।

3-आयामी ब्रेडिंग इस कमजोरी को हटाती है। रेशे कई दिशाओं में उलझे होते हैं, इसलिए परत की सीमा नहीं रहती। इसलिए परत खुलने वाली क्षतिक्रम होती है। यह हाइपरसोनिक अग्र-कनारों जैसे बड़े तापीय आघात वाले स्थानों के लिए लाभदायक है। तापीय आघात वह क्षति है जो अचानक गर्म या ठंडा होने पर होती है।

ब्रेडिंग के कई प्रकार हैं। रेशों को चार दशाओं में भी बुना जाता है और उससे अधिक दशाओं में भी। दशाएं जितनी अधिक हों, पदार्थ उतने ही विविध भागों को समान रूप से झेलता है। इसके बदले बुनाई कठिन हो जाती है। इसलिए घटक के उपयोग के अनुसार बुनावट चुननी पड़ती है। बुनावट का यह चुनाव भी प्रतिलोम डिजाइन का विषय बनता है।

समस्या यह है कि बुनावट हमेशा पूर्ण नहीं होती। वास्तविक निर्माण में रेशे मुर जाते हैं। दबाव से उनका अनुप्रस्थ काट विकृत भी हो जाता है। बुनाई का कोण भी थोड़ा-थोड़ा डगमगाता है। कोटिंग की मोटाई भी हर स्थान पर समान नहीं होती। ऐसे उतार-चढ़ाव किसी खास स्थान पर बल को इकट्ठा कर देते हैं।

इस उतार-चढ़ाव को प्रायिकता से संभाला जाता है। कारण यह है कि हर उत्पाद बिल्कुल समान नहीं होता और थोड़ा-थोड़ा अलग होता है। इसलिए एक सही संरचना नहीं, बल्कि संरचनाओं के वितरण को देखा जाता है। डिफ्यूजन मॉडल इस वितरण को संभालने के लिए उपयुक्त है। डिफ्यूजन मॉडल कई संभावित और यथार्थ लगने वाली संरचनाएं बना सकता है।

यहां समवैरिएंस नामक गुण महत्वपूर्ण है। समवैरिएंस वह गुण है जिसमें वस्तु को घुमाने पर परिणाम भी उसी तरह घूमता है। यदि घटक को बाईं ओर घुमाया जाए, तो अनुमानित बल भी साथ में बाईं ओर घूमना चाहिए। यह गुण न हो, तो वही संरचना रखी हुई दशा के अनुसार अलग आंकी जाती है, जो भौतिकी के विरुद्ध है।

3-आयामी स्थान में वस्तु घूम भी सकती है और खसिक भी सकती है। इन दोनों गतियों को साथ संभालने वाला गणति है। इसे विशेष यूक्लिडियन समूह कहा जाता है। नाम कठिन है, पर अर्थ सरल है। यह घूर्णन और स्थानांतरण को साथ संभालने वाले नियमों का समूह है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता को इस तरह डिजाइन किया जाता है कि वह घूर्णन और स्थानांतरण के इन नियमों का हमेशा पालन करे।

ऐसे समवैरिएंट डिफ्यूजन मॉडल पहले अणु डिजाइन में विकसित हुए। 2025 में चैन (Chen) शोध दल ने कई पैमानों के ग्राफों को जोड़ने वाला समवैरिएंट डिफ्यूजन मॉडल प्रस्तुत किया। उन्होंने इस मॉडल से 3-आयामी अणु डिजाइन किए। अणु भी 3-आयामी स्थान में घूमते और खसिकते हैं। इसलिए वही गणति रेशा संरचना में भी लाया जा सकता है। हालांकि इस अध्ययन का विषय अणु थे, सरिमिक रेशा बुनावट नहीं। रेशा-गुच्छ, बुनावट की बाधाएं, छद्म और निर्माण-योग्यता इस मॉडल से अभी सत्यापित नहीं हुए हैं। इसे सरिमिक ब्रेडिंग में लाना इस पुस्तक द्वारा दिखाई गई दशा है।

समवैरिएंस क्यों महत्वपूर्ण है, इसे उदाहरण से देखें। एक ही स्क्रू को मेज पर अलग-अलग दशाओं में रखकर देखें। स्क्रू की मजबूती उसके रखे जाने की दशा पर निर्भर नहीं करती। कृत्रिम बुद्धिमत्ता को भी इस तथ्य का पालन करना चाहिए। समवैरिएंस न हो, तो वही स्क्रू हर दशा में अलग आंका जाता है। तब हर दशा के लिए अलग डेटा जुटाना पड़ता है, जिससे प्रशिक्षण में बहुत बर्बादी होती है।

समवैरिएंस का पालन करने से डेटा बचाया जा सकता है। एक दशा के डेटा से सभी दशाओं को संभाला जाता है। सामग्री डेटा दुर्लभ हो, तो यह बचत बड़ी होती है। इसलिए यह अल्ट्रा-हाई-टेम्परेचर सरिमिक जैसे कम डेटा वाले क्षेत्रों के लिए उपयुक्त है। इसे भौतिकी नियमों को संरचना में अंकित करने की विधि कहा जा सकता है।

सारांश में, तीन तत्व मिलते हैं। 3-आयामी संरचना, प्रायिक उतार-चढ़ाव, और दशा से न डगमगाने वाला गुण। इन तीनों को एक मॉडल में रखा जाता है। तभी वास्तविक निर्माण की विविधता को जैसे है वैसे प्रतिलिपि किया जा सकता है। अगला उपशीर्षक देखता है कि यह मॉडल संरचना कैसे गढ़ता है।

5.3.2 शोर से संरचना को फरि जीवित करने वाला डिफ्यूजन मॉडल

डिफ्यूजन मॉडल का मूल विचार दो चरणों में बंटता है। पहला चरण संरचना को शोर से धुंधला करने की प्रक्रिया है। दूसरा चरण शोर से संरचना को फरि जीवित करने की प्रक्रिया है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता जीवित करने की प्रक्रिया सीखती है। यह पानी में फैली स्याही की एक बूंद को उलटा चलाने जैसा है।

पहले चरण से देखते हैं। स्पष्ट रेशा संरचना में थोड़ा-थोड़ा शोर डाला जाता है। समय बीतने पर संरचना धुंधली होती जाती है। अंत में केवल पूरा शोर बचता है। यह प्रक्रिया नियमों के अनुसार धीरे-धीरे चलती है। उस नियम को नॉइज शेड्यूल कहा जाता है।

दूसरा चरण इस प्रक्रिया को उलटे क्रम में चलता है। यह शोर से शुरू करता है और थोड़ा-थोड़ा संरचना को फरि जीवित करता है। हर कदम पर थोड़ा शोर हटाया जाता है। इस समय एक मान होता है जो बताता है कि शोर कसि दशा में हटाना है। इसे स्कोर कहा जाता है। स्कोर उस दशा की ओर संकेत करता है जिसमें संरचना अधिक यथार्थ लगती है।

कृत्रिम बुद्धिमत्ता इसी स्कोर को सीखती है। वह धुंधली संरचना को देखकर स्पष्ट दशा का अनुमान लगाती है। प्रशिक्षण पूरा हो जाए, तो शुद्ध शोर से भी संरचना गढ़ी जा सकती है। इस तरीके को स्कोर-आधारित डिफ्यूजन कहा जाता है। आजकल छवि बनाने वाली कृत्रिम बुद्धिमत्ता भी इसी सिद्धांत से चित्र बनाती है।

यह तरीका सामग्री डिजाइन के लिए उपयुक्त होने का कारण है। सामग्री संरचना का केवल एक सही उत्तर नहीं होता। एक ही प्रदर्शन देने वाली कई संरचनाएं हो सकती हैं। डिफ़्यूजन मॉडल ऐसे कई उम्मीदवार बनाता है। तब मनुष्य उनमें से वह चुनता है जसिं बनाना आसान हो। इसका उपयोगी पक्ष यह है कि यह एक उत्तर नहीं, बल्कि कई विकल्प देता है।

इसमें शर्त जोड़ना प्रतिलोम डिजाइन का मुख्य भाग है। बस कोई भी संरचना बना दी जाए, तो वह उपयोगी नहीं होती। इच्छति प्रदर्शन वाली संरचना बनानी होती है। इसलिए लक्ष्य प्रदर्शन को शर्त के रूप में डाला जाता है। लक्ष्य में तापीय चालकता, तन्य शक्ति, फ्रैक्चर टफनेस और एब्लेशन दर आदि रखे जाते हैं।

फ्रैक्चर टफनेस वह बल है जिससे पदार्थ दरार बढ़ने पर प्रतिरोध करता है। एब्लेशन दर वह गति है जिससे सतह कटकर हटती है। इन मानों को इच्छति स्तर पर तय किया जाता है। तब मॉडल उन शर्तों के अनुरूप संरचना चुनकर गढ़ता है। यह भी नयितरति किया जा सकता है कि लक्ष्य को मजबूत रूप से प्रतबिबिति किया जाए या कमजोर रूप से।

शर्त प्रतबिबिति करने की यह तकनीक पहले से कई सामग्रियों में इस्तेमाल होती है। 2025 में एक शोध दल ने भौतिक बाधाएं डालने वाला 3-आयामी डिफ़्यूजन मॉडल प्रस्तुत किया। उन्होंने रेशा-सुदृढ़ पॉलिमर कंपोजिट को लक्ष्य प्रदर्शन के अनुसार डिजाइन किया। इच्छति तनाव-विकृतिवक्र तय किया गया और उसकी संरचना को उलटी दिशा से खोजा गया। इस तरीके ने निर्माण प्रक्रिया के दौरान भौतिक नियमों का सीधे पालन कराया।

शर्त को बहुत मजबूत डालने पर दूसरी समस्या पैदा होती है। यदि केवल लक्ष्य प्रदर्शन का पीछा किया जाए, तो ऐसी संरचना निकलती है जसिं बनाया नहीं जा सकता। कागज पर वह अच्छी लगती है, पर वास्तव में बुनी नहीं जा सकती। इसलिए उत्तर उस सीमा के भीतर खोजा जाता है जसिमें निर्माण संभव हो। यह निर्माण नियमों को भी शर्त में साथ डालने का तरीका है। प्रदर्शन और निर्माण-योग्यता के बीच यह संतुलन पकड़ना प्रतिलोम डिजाइन का कठिन भाग है।

सरिमिक कंपोजिट में इस तरीके का उपयोग करने के लिए कुछ बाधाएं पार करनी होंगी। सरिमिक की 3-आयामी संरचना का बहुत डेटा जुटाना होगा। यह डेटा एक्स-रे टोमोग्राफी से मिलता है। एक्स-रे टोमोग्राफी अस्पताल की CT स्कैनिंग जैसे सदिधांत पर चलती है। घटक को काटे बिना भीतर का भाग त्रि-आयामी रूप में देखा जाता है। इस तरह मली संरचना मॉडल की आधार सामग्री बनती है।

डेटा जुटाने में समय लगता है। एक नमूने की स्कैनिंग में लंबा समय लगता है। स्कैन किए गए डेटा को कणों और रेशों में बांटना भी मेहनत मांगता है। इसलिए डेटा हमेशा कम पड़ता है। ऊपर देखा गया समवैरिएंस इस कमी को घटाता है। कारण यह है कि वह कम डेटा से अधिक स्थितियों सीखने देता है।

5.3.3 रेशा कोण और कोटिंग मोटाई को साथ तय करना

प्रतिलोम डिजाइन मॉडल दो तरह के निर्णय बनाता है। एक है रेशों को बुनने का कोण। दूसरा है इंटरफेस कोटिंग की मोटाई। ये दोनों सामग्री की मजबूती और ऊष्मा सहन करने की क्षमता को बहुत प्रभावित करते हैं।

पहले रेशा कोण देखें। बल आम तौर पर किसी एक दिशा में अधिक लगता है। रॉकेट नोजल अंदर से धकेलने वाला बल झेलता है। हाइपरसोनिक अग्र-किनारा प्रवाह की दिशा में कतरनी बल झेलता है। यदि रेशा बल की दिशा के अनुरूप रखा जाए, तो पदार्थ बल को अच्छी तरह सहता है। इसलिए मॉडल बल को ध्यान में रखकर कोण तय करता है।

कोटिंग की मोटाई भी उतनी ही महत्वपूर्ण है। यहां दो प्रकार की परतों को अलग करना होगा। एक है रेशा और मैट्रिक्स के बीच डाली जाने वाली पतली इंटरफेस परत। यह इंटरफेस परत बोरोन नाइट्राइड या पायरोलिटिक कार्बन से बनाई जाती है। यह परत दरार को रेशे को सीधे काटने से रोकती है। दरार परत के साथ फसिलती है और बल को बखिर देती है। इंटरफेस परत बहुत पतली हो, तो यह प्रभाव कमजोर होता है, और बहुत मोटी हो, तो दूसरी समस्या पैदा होती है।

दूसरी है पदार्थ के बाहर चढ़ाई जाने वाली पर्यावरण अवरोधक कोटिंग। यह कोटिंग ऑक्सीजन और जलवाष्प को भीतर घुसने से रोकती है। रेयर-अर्थ डिसिलिकेट इस बाहरी कोटिंग का उम्मीदवार है। यह पदार्थ ऊंचे तापमान पर ऑक्सीजन को अच्छी तरह रोकता है। इंटरफेस परत और बाहरी कोटिंग का स्थान और भूमिका अलग-अलग हैं। कभी-कभी दोनों परतों को कई तहों में चढ़ाकर हर तह को अलग भूमिका दी जाती है।

प्रतिलोम डिजाइन मॉडल इन दोनों निर्णयों को साथ संभालता है। वह मजबूती बढ़ाते हुए तापीय तनाव घटाने की कोशिश करता है। ये दो लक्ष्य अक्सर एक-दूसरे से टकराते हैं। एक पक्ष पाने पर दूसरे पक्ष को थोड़ा खोना पड़ता है। ऐसी समस्या को बहुउद्देश्यीय अनुकूलन कहा जाता है। मॉडल मजबूती और तापीय तनाव के बीच अच्छा संतुलन बटु खोजता है।

बल का एक स्थान पर जमा होना तनाव सांद्रण कहलाता है। यह वैसा ही है जैसे कपड़ा पहले एक धागे से उधड़ता है। जहां तनाव सांद्रण बढ़ा होता है, वही दरार पहले बनती है। इसलिए डिजाइन बल को समान रूप से बांटने की कोशिश करता है। रेशा कोण और कोटिंग मोटाई को परष्कृत करने का कारण यही है।

संतुलन खोजते समय चकिनाई भी देखी जाती है। रेशा अचानक मुड़ जाए, तो उस स्थान पर बल जमा होता है। कोटिंग की मोटाई तेजी से बदल जाए, तो भी यही होता है। इसलिए मॉडल कोण और मोटाई को सहज रूप से जुड़ा रहने की दशा देता है। जसि डिजाइन में कोण या मोटाई अचानक बदलती है, उसे दंड देने का तरीका अपनाया जाता है।

ऐसा प्रतिलोम डिजाइन अभी अवधारणा सदिध करने के चरण के पास है। किसी खास प्रदर्शन मान को कतिना सुधारा जा सकता है, इस दावे को सावधानी से लेना चाहिए। मॉडल द्वारा दी गई संरचना सचमुच वह प्रदर्शन देती है या नहीं, इसकी पुष्टि करनी होगी। पुष्टि फिर निर्माण और परीक्षण से होती है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता उम्मीदवारों को कम करने की भूमिका नभाती है।

2026 में पाठ से शर्त देने वाला जनरेटिव अध्ययन भी आया। एक शोध दल ने लक्ष्य गुणों को समाहित करने वाले वाक्य से सूक्ष्मसंरचना बनाई। यह अभी सहकर्म समीक्षा से न गुजरा प्रारंभिक अध्ययन है। फिर भी दशा स्पष्ट है। मनुष्य इच्छति प्रदर्शन बताता है और कृत्रिम बुद्धिमत्ता संरचना गढ़ती है। यह प्रवाह सरिमिक कंपोजिट डिजाइन तक जारी रह सकता है।

5.4 बहुत छोटी दुनिया और पूरे घटक में ऊष्मा प्रवाह को जोड़ना

यह खंड पदार्थ के भीतर ऊष्मा प्रवाह को देखता है। ऊष्मा पदार्थ की आयु तय करने की कुंजी है। ऊष्मा कहां और कतिनी तेजी से बहती है, यह जाने बिना तापमान का अनुमान नहीं लगाया जा सकता। तापमान जानने पर ही अगली अवस्था में ऑक्सीकरण और क्रीप की गति का अनुमान लगाया जा सकता है।

समस्या यह है कि ऊष्मा प्रवाह बहुत छोटी दुनिया में तय होता है। परमाणुओं का कंपन ऊष्मा ले जाता है। लेकिन हमें पूरे घटक का तापमान जानना होता है। बहुत छोटी दुनिया और बहुत बड़ी दुनिया को जोड़ना पड़ता है। इस जोड़ को बहु-पैमाना मलिन कहा जाता है। यह खंड बताता है कि यह जोड़ डीप ऑपरेटर न्यूरल नेटवर्क से कैसे किया जाता है।

5.4.1 परमाणु कंपन से तापीय चालकता की गणना करना (ग्रीन-कुबो आणविक गतिकी)

सरिमिक में ऊष्मा परमाणुओं के कंपन से संचारित होती है। इस कंपन के कण को फोनॉन कहा जाता है। फोनॉन को ध्वनिका कण मानना आसान है। जालक के साथ कंपन फैलता है और ऊष्मा ले जाता है। यह कंपन कतिनी अच्छी तरह फैलता है, वही तापीय चालकता तय करता है।

ऊंचे तापमान पर ये कंपन आपस में टकराते हैं। फोनॉन एक-दूसरे से टकराएं, तो ऊष्मा का प्रवाह अस्त-व्यस्त हो जाता है। क्रिस्टल कण-सीमाएं, दोष और मल्लि हुए परमाणु भी कंपन को बखिरते हैं। ऐसा बखिराव जतिना अधिक हो, ऊष्मा उतनी धीमी बहती है। अल्ट्रा-हाई-टेम्परेचर सरिमिक की तापीय चालकता समझने के लिए इस बखिराव को जानना होगा।

उच्च-एनर्जी सरिमिक इस दृष्टिसे वशिष्ट है। कई तत्व मल्लि होते हैं, इसलिए जालक समान नहीं रहता। यह अनयिमतिता कंपन को जोर से बखिरती है। परिणामस्वरूप ऊष्मा अच्छी तरह नहीं फैलती। यदल्लिष्य ऊष्मा अवरोध है, तो यह गुण मददगार है। क्योंकि बाहरी सतह की ऊष्मा भीतर कम प्रवेश करती है।

इस छोटे संसार की गणना करने की वधि आणविक गतिकी है। कंप्यूटर के भीतर प्रत्येक परमाणु को चलाकर देखा जाता है। यह देखा जाता है कि परमाणु कैसे कांपते और टकराते हैं। यह गणना नैनोसेकंड के छोटे समय को संभालती है। नैनोसेकंड 1 सेकंड का 1 अरबवां भाग है। यह इतना ही छोटा और तेज संसार है।

ऊष्मा चालकता निकालने का सूत्र ग्रीन-कुबो सूत्र है। यह सूत्र ऊष्मा प्रवाह के उतार-चढ़ाव को लंबे समय तक देखने की वधि है। यह शांत पानी की लहरों को देखकर पानी का गुण जानने जैसा है। परमाणु अपने आप जो ऊष्मा प्रवाह का उतार-चढ़ाव बनाते हैं, उसे इकट्ठा किया जाता है। उसी उतार-चढ़ाव से ऊष्मा चालकता की गणना की जाती है। यह सूत्र 1950 के दशक में ग्रीन और कुबो ने स्थापित किया था।

गणना की शुद्धता इस पर निर्भर करती है कि हम परमाणुओं के बीच के बल को कतिनी अच्छी तरह जानते हैं। इस बल को संभालने वाले नियम को अंतर-परमाणु पोटेंशियल कहा जाता है। पहले लोग हाथ से बनाए सरल नियमों का उपयोग करते थे। ये नियम तेज थे, पर उनकी शुद्धता कम थी। इसके विपरीत, क्वांटम गणना शुद्ध थी, पर बहुत धीमी थी।

यही मशीन लर्निंग अंतर-परमाणु पोटेंशियल (MLIP) पुल बनाता है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता क्वांटम गणना के परिणामों से सीखकर बल का अनुमान लगाती है। यह क्वांटम गणना के नकिट शुद्धता को तेज गति से देती है। इस वधि को इस पुस्तक के पछिले अध्यायों में वसितार से देखा गया है। अत-उच्च ताप ऊष्मा चालकता की गणना में भी MLIP का उपयोग होता है।

हाल के अध्ययन इस संयोजन की शक्ति दिखाते हैं। 2021 में एक शोध दल ने MLIP से जरिकोनिया का अध्ययन किया। उन्होंने तापमान के अनुसार अवस्था परिवर्तन और ऊष्मा चालकता की साथ-साथ गणना की। उन्होंने ग्रीन-कुबो वधिसे ऊष्मा का प्रवाह निकाला। यह वधि परमाणु कंपन के जटिल प्रभावों को बिना छोड़े समेटती है।

इस गणना की एक सीमा ध्यान में रखनी चाहिए। ग्रीन-कुबो वधि पदार्थ के संतुलन में होने पर ऊष्मा चालकता नकालती है। यह मान पदार्थ के भीतर के मूल गुण को बताता है। पर जहाँ अपक्षरण होता है, वह बाहरी सतह संतुलन अवस्था में नहीं होती। वहाँ विकिरण और सतही रासायनिक अभिक्रिया ऊष्मा को बहुत प्रभावित करते हैं। इसलिए केवल ग्रीन-कुबो मान से सतह की ऊष्मा को पूरा नहीं समझाया जा सकता। इस मान को घटक के भीतर की ऊष्मा चालकता के इनपुट के रूप में उपयोग करना उचित है।

आखिर इस छोटे संसार तक नीचे क्यों जाना चाहिए। क्या ऊष्मा चालकता को सीधे माप लेना पर्याप्त नहीं होगा। अति-उच्च ताप पर मापन कठिन होता है। 2000 डिग्री सेल्सियस के सरिमिक के भीतर मापना आसान नहीं है। ऑक्सीकरण आगे बढ़ता है और पदार्थ खुद बदल जाता है। इसलिए गणना से मान पाने का रास्ता आवश्यक है।

गणना का एक और लाभ है। जनि संघटनों को अभी बनाया नहीं गया है, उन्हें भी पहले से देखा जा सकता है। उच्च-एनर्जी सरिमिक में असंख्य संयोजन होते हैं। इन सभी को बनाकर मापना असंभव है। गणना उम्मीदवारों की ऊष्मा चालकता पहले ही बता देती है। तब केवल आशाजनक संयोजनों को चुनकर वास्तविक रूप में बनाया जाता है।

यह प्रवाह आज भी जारी है। 2026 के एक अध्ययन ने ग्रीन-कुबो और MLIP से बहुत कम ऊष्मा चालकता का अनुमान लगाया। अनेक पदार्थों में यह संयोजन अपनी जगह बना रहा है। फरि भी गणना के लिए अब भी बड़े कंप्यूटर की जरूरत होती है। समय काटने या सांख्यिकीय उतार-चढ़ाव जैसी त्रुटियों को भी संभालना पड़ता है। इसलिए कई बार गणना कर औसत निकाला जाता है।

यहाँ भी सत्यापन का सिद्धांत वही है। गणना के मान को प्रयोग के मान से मिलाकर देखना चाहिए। कुछ ज्ञात पदार्थों पर गणना की परीक्षा की जाती है। यदि गणना प्रयोग से अच्छी तरह मिलती है, तो नए पदार्थों पर भी भरोसा देती है। इस मिलान प्रक्रिया से न गुजरा मान केवल संदर्भ भर रहता है। गणना और प्रयोग एक-दूसरे की पुष्टिकरने वाली दो आँखें हैं।

5.4.2 पूरे घटक में ऊष्मा प्रवाह का समीकरण

पछिले उपशीर्षक ने बहुत छोटे संसार को संभाला। अब दृष्टि को पूरे घटक तक फैलाते हैं। घटक का तापमान स्थान के अनुसार अलग होता है और समय के अनुसार बदलता है। इस परिवर्तन को संभालने वाला नियम ऊष्मा चालकता समीकरण है। समीकरण गणितीय रूप में लिखा जाता है, पर उसका अर्थ शब्दों में समझाया जा सकता है।

ऊष्मा चालकता समीकरण का अर्थ सरल है। किसी स्थान के तापमान में परिवर्तन आने वाली ऊष्मा और जाने वाली ऊष्मा के अंतर से तय होता है। ऊष्मा गर्म भाग से ठंडे भाग की ओर बहती है। इस प्रवाह की गति ही ऊष्मा चालकता है। पहले गणना किया गया वही मान यहाँ आता है।

इस समीकरण के कठिन होने के कई कारण हैं। पहले, ऊष्मा चालकता तापमान के अनुसार बदलती है। तापमान बढ़ने पर ऊष्मा चालकता बदल जाती है। इसे अरेखीय कहा जाता है। अरेखीय का अर्थ है कि कारण और परिणाम का संबंध सीधा अनुपात नहीं होता। इसके साथ पदार्थ के गुण हर दिशा में अलग होते हैं। रेशों की दिशा में ऊष्मा अधिक अच्छी तरह बहती है।

इसमें पदार्थ के खुद बदलने की समस्या जुड़ जाती है। ऑक्सीकरण आगे बढ़ने पर ऊष्मा चालकता बदलती है। सतह कटने पर मोटाई घटती है। इसलिए समीकरण के मान समय के अनुसार बदलते हैं। पछिले खंड का ऑक्सीकरण और क्रीप इस खंड के ऊष्मा प्रवाह से जुड़ते हैं। इसलिए इन कई घटनाओं को अलग करके नहीं, साथ में हल करना चाहिए।

सीमा पर होने वाली बातें भी जटिल हैं। अति-ध्वनिक सतह पर कई प्रकार की ऊष्मा एक साथ आती हैं। हवा से गरम करने वाली ऊष्मा भीतर आती है। सतह प्रकाश के रूप में ऊष्मा बाहर भेजती है, जैसी विकिरण कहते हैं। यह वही घटना है जिसमें गर्म वस्तु लाल चमकती है और ऊष्मा खोती है। इसमें रासायनिक ऊष्मा-उत्पादन भी जुड़ता है।

रासायनिक ऊष्मा-उत्पादन तब नकिलता है जब सतह पर परमाणु फरि से जुड़ते हैं। अति-ध्वनिक गति में हवा के अणु परमाणुओं में टूट जाते हैं। ये परमाणु सतह पर फरि से जोड़ी बनाते हैं, तो ऊष्मा छोड़ते हैं। इसे उत्प्रेरक पुनर्संयोजन कहा जाता है। सतह के पदार्थ के अनुसार इस ऊष्मा का आकार बदलता है। इसलिए कौन-सा पदार्थ चुना जाता है, यह सतह के तापमान को बहुत प्रभावित करता है।

इन सभी ऊष्माओं को एक समीकरण की सीमा शर्त में रखा जाता है। आने वाली ऊष्मा, जाने वाला विकिरण और रासायनिक ऊष्मा-उत्पादन साथ रखे जाते हैं। समय भी साथ बहता है। उड़ान पथ के साथ ऊष्मा लगातार बदलती रहती है। इसे अस्थिर अवस्था कहा जाता है। इसका अर्थ है कि यह किसी रुके हुए क्षण को नहीं, बल्कि बहती हुई प्रक्रिया को संभालता है।

इस समीकरण को हल करने की पारंपरिक विधि सीमित तत्व विधि है। घटक को छोटे-छोटे टुकड़ों में बांटा जाता है। हर टुकड़े में समीकरण हल किया जाता है और फिर उन्हें जोड़ा जाता है। यह विधि शुद्ध है, पर गणना में लंबा समय लगता है। हर समय चरण पर दोहराई हुई गणना चाहिए। माख 7 के पूरे पथ को वास्तविक समय में हल करना कठिन है।

रॉकेट और अति-ध्वनिक विकास में तेज उत्तर चाहिए। हर बार डिजाइन बदलने पर तापमान फिर से गणना करना पड़ता है। परीक्षण के दौरान वास्तविक समय के निकट अनुमान चाहिए। धीमी गणना इन जरूरतों को पूरा नहीं कर सकती। इसलिए अगले उपशीर्षक का कृत्रिम बुद्धिमत्ता ऑपरेटर सामने आता है।

5.4.3 फलन को फलन में बदलने वाला न्यूरल नेटवर्क (डीपओनेट)

डीप ऑपरेटर न्यूरल नेटवर्क वह कृत्रिम बुद्धिमत्ता है जो फलन को फलन में बदलने वाले संबंध को सीखती है। इसे डीपओनेट (DeepONet) कहा जाता है। सामान्य न्यूरल नेटवर्क में संख्या डालने पर संख्या निकलती है। DeepONet में फलन डालने पर फलन निकलता है। यहाँ फलन से आशय समय के अनुसार बदलने वाले ऊष्मा इनपुट जैसी चीज से है।

इस विचार को 2021 में लू शोध दल ने व्यवस्थित किया। उन्होंने ऑपरेटर सीखने वाले न्यूरल नेटवर्क का सिद्धांत और संरचना बनाई। यह अध्ययन एक गणितीय प्रमेय पर आधारित है। वह प्रमेय कहता है कि ऑपरेटर को न्यूरल नेटवर्क से निकटित किया जा सकता है। यही निकटन प्रमेय DeepONet को सहारा देने वाले सिद्धांत का आधार बनता है।

DeepONet दो जालों से बना होता है। एक जाल इनपुट फलन को पढ़ता है। दूसरा जाल उस स्थान और समय को पढ़ता है जहाँ उत्तर देखना है। दोनों जालों के परिणामों को गुणा करके उत्तर निकाला जाता है। पहले जाल को शाखा और दूसरे जाल को तना कहा जाता है। शाखा और तना मलिकर तापमान निकालते हैं।

फलन को फलन में बदलना क्यों महत्वपूर्ण है। ऊष्मा समस्या का इनपुट एक संख्या नहीं है। समय के अनुसार बदलने वाला वायुगतिकीय ताप ही इनपुट है। आउटपुट भी स्थान और समय के अनुसार बदलने वाला तापमान क्षेत्र है। ऐसी समस्या फलन को फलन से जोड़ने वाला संबंध है। DeepONet इस संबंध को पूरा सीखता है।

DeepONet की शक्ति गति है। एक बार सीखने के बाद यह नए इनपुट पर तुरंत उत्तर देता है। यह सीमिति तत्व विधिकी तरह हर बार शुरुआत से हल नहीं करता। कई उड़ान स्थितियों को जल्दी देखा जा सकता है। डिजाइन बदलते हुए तापमान देखने के लिए यह उपयुक्त है।

समस्या प्रशिक्षण डेटा की है। अच्छा उत्तर सीखने के लिए बहुत अधिक शुद्ध डेटा चाहिए। पर शुद्ध डेटा बनाना महंगा है। क्योंकि सीमिति तत्व गणना और आणविक गतिकी गणना में लंबा समय लगता है। डेटा कम हो तो कृत्रिम बुद्धिमत्ता अच्छी तरह नहीं सीख पाती। इस समस्या को बहु-नष्टि विधि हल करती है।

नष्टि का अर्थ है कि गणना कतिनी सूक्ष्म है। उच्च-नष्टि गणना शुद्ध, पर महंगी होती है। नमिन्-नष्टि गणना मोटी, पर सस्ती होती है। बहु-नष्टि इन दोनों का साथ उपयोग करती है। सस्ता डेटा बहुत इकट्ठा किया जाता है और महंगा डेटा थोड़ा ही इकट्ठा किया जाता है।

इस विधिकी विचार रूपरेखा और ऊपर से रंग भरने जैसा है। सस्ती गणना से पहले बड़ी तस्वीर बनाई जाती है। महंगी गणना से उसके ऊपर सूक्ष्म रंग भरा जाता है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता नमिन्-नष्टि उत्तर और उच्च-नष्टि उत्तर के अंतर को सीखती है। इस अंतर को अवशेष कहा जाता है। अवशेष सीखने पर थोड़े महंगे डेटा से भी शुद्धता बढ़ाई जा सकती है।

2022 में लू शोध दल ने इस बहु-नष्टि DeepONet को नैनो ऊष्मा स्थानांतरण पर लागू किया। उन्होंने बहुत छोटे संसार की ऊष्मा प्रवाह समस्या को संभाला। बहु-नष्टि विधि ने महंगे डेटा की समान मात्रा से त्रुटि को बहुत घटाया। महंगे डेटा की जरूरत भी बहुत कम की। पर इस अध्ययन ने नैनो ऊष्मा स्थानांतरण को संभाला। यह अति-उच्च ताप सरिमिक के ऑक्सीकरण या अपक्षरण और माख 7 ऊष्मा भार को जोड़ने वाला प्रमाण नहीं है।

समांगीकरण शब्द को भी खोलकर समझते हैं। सरिमिक सममिश्र में रेशे और छदिर मलि होते हैं। इस जटिल संरचना को एक-एक करके संभालना गणना को भारी बना देता है। इसलिए छोटे क्षेत्र को औसत गुणों में बदला जाता है। इसे समांगीकरण कहा जाता है। नमिन्-नष्टि गणना इन्हीं औसत गुणों से बड़ी तस्वीर बनाती है।

दो संसारों को जोड़ना कठिन क्यों है, यह भी देखना चाहिए। परमाणु संसार नैनोसेकंड के स्तर पर चलता है। घटक संसार सैकड़ों सेकंड को संभालता है। समय का पैमाना दस से अधिक क्रमों तक अलग है। आकार का पैमाना भी उतना ही अलग है। इस अंतराल को एक साथ गणना करना असंभव है।

सरिमिक ऊष्मीय संरचना में इस विधि से दो संसारों को जोड़ना इस पुस्तक का प्रस्तावित मार्ग है। नमिन्-नष्टि सरल समांगीकरण मॉडल बनती है। उच्च-नष्टि आणविक गतिकी और सीमिति तत्व को जोड़ने वाला सूक्ष्म विश्लेषण बनती है। चित्र यह है कि कृत्रिम बुद्धिमत्ता इन दोनों को जोड़ती है। तब बहुत छोटे संसार की ऊष्मा चालकता घटक के तापमान तक जुड़ सकती है। इस जोड़ का सरिमिक ऊष्मीय संरचना में अभी व्यापक सत्यापन नहीं हुआ है।

5.4.4 भौतिक नयिम डालकर सीखना और गति बिढ़ाना

कृत्रिम बुद्धिमत्ता तेज है, इसलिए वह कोई भी उत्तर नहीं दे सकती। उत्तर को भौतिक नयिमों का पालन करना चाहिए। इसलिए सीखने की प्रक्रिया में भौतिक नयिम डाले जाते हैं। इस वधि की जड़ पछिले खंड के जीवनकाल अनुमान से समान है।

पहले डेटा से मिलाने वाली शक्ति की जाती है। नमिन-नष्टि डेटा और उच्च-नष्टि डेटा दोनों से मिलाया जाता है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता के उत्तर को डेटा के नकिट ले जाया जाता है। उत्तर और डेटा के अंतर पर दंड दिया जाता है। इस दंड को हानि कहा जाता है।

इसमें समीकरण का पालन करने वाली शक्ति जोड़ी जाती है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता के उत्तर को ऊष्मा चालकता समीकरण में डालकर देखा जाता है। यदि उत्तर समीकरण को अच्छी तरह संतुष्ट करता है, तो दंड छोटा होता है। यदि वह चूकता है, तो दंड बड़ा होता है। इससे डेटा न होने वाले स्थानों पर भी भौतिकी के अनुसार उत्तर मिलता है।

भौतिक नयिम डालने पर डेटा कम हो तो भी काम चल जाता है। केवल डेटा से सीखना हो तो बहुत डेटा चाहिए। डेटा कम हो तो वह बीच की जगहों को गलत ढंग से भर देता है। भौतिक नयिम इन खाली जगहों को समीकरण से भरते हैं। यह अति-उच्च ताप डेटा दुर्लभ होने वाली सरिमिक समस्या के लिए उपयुक्त है। डेटा कम हो तो भी टकि पाना भौतिकी-सूचि शक्ति का बड़ा लाभ है।

सीमा शर्तें भी इसी तरह डाली जाती हैं। सतह के ऊष्मा संतुलन का पालन कराया जाता है। आने वाली ऊष्मा और जाने वाला विकिरण मेल खाने चाहिए। इस नयिम को तोड़ने पर दंड दिया जाता है। सतह का तापमान पदार्थ के जीवनकाल को बहुत प्रभावित करता है, इसलिए यह शर्त सबसे महत्वपूर्ण है।

इन कई दंडों को एक साथ जोड़ा जाता है। डेटा दंड, समीकरण दंड और सीमा दंड को जोड़ा जाता है। हर दंड को भार दिया जाता है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता इस पूरे दंड को जितना हो सके छोटा करने के लिए सीखती है। तब वह तेज और भौतिकी के अनुरूप अनुमान देती है।

भौतिक नयिम डालने के लिए अवकलन गणना चाहिए। मापना पड़ता है कि तापमान स्थान और समय के अनुसार कितना बदलता है। इस अवकलन को अपने आप गणना करने की तकनीक है। इसे स्वचालित अवकलन कहा जाता है। पर यह गणना भारी होती है और गति घटाती है।

इसलिए गणना को हल्का बनाने की कई वधियाँ उपयोग की जाती हैं। गणना को बाँटकर दोहराए जाने वाले हिस्से घटाए जाते हैं। चकिने फलनों से निर्देशांक बदले जाते हैं, ताकि अवकलन आसान हो। इन अनुकूलनों से पारंपरिक गणना की तुलना में कहीं तेज अनुमान मिलता है। पर वशिष्ट त्वरण गुणक या त्रुटिमान हर समस्या में अलग होते हैं। उन मानों को केवल सत्यापन मामलों से ही उद्धृत करना चाहिए।

इस वधि का मूल्य डिजाइन चरण में दिखता है। नोजल का आकार बदलने पर तापमान वितरण बदलता है। पारंपरिक गणना में हर बदलाव पर लंबे समय तक प्रतीक्षा करनी पड़ती है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता ऑपरेटर तुरंत नया तापमान दिखाता है। तब एक दिन में दर्जनों आकारों की तुलना की जा सकती है। डिजाइनर अधिक तेजी से बेहतर उत्तर तक पहुँचता है।

परीक्षण स्थल पर भी इसका उपयोग है। इंजन परीक्षण के दौरान वास्तविक समय के नकिट अनुमान चाहिए। पहले से जानना चाहिए कि कौन-सा स्थान खतरनाक तापमान तक पहुँचेगा। कृत्रिम बुद्धिमत्ता ऑपरेटर यह अनुमान तेजी से देता है। पर परीक्षण डेटा से इसे लगातार सुधारना होगा, तभी इस पर भरोसा किया जा सकता है। अनुमान और वास्तविक मापन के अंतर को घटाने का काम चलता रहता है।

इस वधि की सीमा भी स्पष्ट है। भौतिक नयिम गलत ढंग से डाले जाएँ, तो उत्तर खराब हो जाता है। नयिमों के बीच भार तय करना भी बहुत मेहनत मांगता है। अति-उच्च ताप का वास्तविक डेटा कम है, इसलिए सत्यापन भी कठिन है। इसलिए यह तकनीक अभी शोध और परीक्षण को साथ लेकर चलने वाले चरण में है। इसे परीक्षण का विकल्प नहीं, बल्कि परीक्षणों की संख्या घटाने वाले उपकरण के रूप में उपयोग किया जाता है।

सारांश

इस अध्याय में रॉकेट और अति-ध्वनिक उड़ान वाहनों की गर्म बाहरी सतहों पर चर्चा की गई। इस स्थान की सामग्री को गर्मी, ऑक्सीकरण, बल और लंबे समय को एक साथ सहना पड़ता है। धातु पर्याप्त नहीं होती, इसलिए सरिमिक सामग्री की जरूरत पड़ती है। कार्बन फाइबर कंपोजिट और अति-उच्च तापमान सरिमिक इसके उम्मीदवार हैं। इन सामग्रियों का जीवन पहले से जानना विकास की कुंजी है।

पहले देखा गया कि सामग्री कैसे खराब होती है। कार्बन फाइबर कंपोजिट में दरारों के रास्ते ऑक्सीजन अंदर जाती है और उसे खराब करती है। सलिकॉन कार्बाइड तापमान और ऑक्सीजन दबाव के अनुसार सुरक्षा परत पाता या खो देता है। अति-उच्च तापमान सरिमिक में ऑक्साइड परत के वाष्पीकरण और अवस्था परिवर्तन से सतह छिल जाती है। यही क्षति प्रक्रिया जीवन अनुमान का विषय है। क्षति प्रायः सामग्री के भीतर चुपचाप शुरू होती है, इसलिए बाहर नहीं, भीतर को पढ़ना पड़ता है।

इसके बाद देखा गया कि कृत्रिम बुद्धिमत्ता इस क्षति से कैसे निपटती है। क्रिस्टल कणों को बटुओं में और सीमाओं को रेखाओं में बदलकर ग्राफ बनाया जाता है। इसमें समय जोड़ा जाता है और क्षति जमा होने की प्रक्रिया का पीछा किया जाता है। भौतिक नयिमों को अधिमिम में

डालकर कम आंकड़ों वाले अति-उच्च तापमान क्षेत्र का भी अनुमान लगाया जाता है। क्षति वापस नहीं लौटती, यह नियम इसका प्रतिनिधि उदाहरण है।

इसके बाद प्रतिलोम डज़ाइन देखा गया। पहले इच्छित प्रदर्शन तय किया जाता है और फिर उस संरचना को उलटी दशा में खोजा जाता है। प्रसार मॉडल धुंधले शोर से संरचना गढ़ता है। दशा से न डगमगाने वाला गुण डालकर उसे भौतिकी के अनुकूल बनाया जाता है। फाइबर कोण और इंटरफेस कोटिंग की मोटाई साथ में तय की जाती है। प्रसार मॉडल एक उत्तर नहीं, बल्कि कई उम्मीदवार देता है। तब मनुष्य उन उम्मीदवारों में से बनाने में आसान संरचना चुनता है।

अंत में ऊष्मा प्रवाह के बहु-स्तरीय मलिन को देखा गया। परमाणु कंपन की दुनिया और पूरे पुरजे की दुनिया को जोड़ना पड़ता है। ग्रीन-कुबो आणविक गतिकी छोटे संसार की ऊष्मा चालकता की गणना करती है। डीप ऑपरेटर न्यूरोल नेटवर्क उस मान को पुरजे के तापमान में बदलता है। बहु-नष्टा विधि सस्ते आंकड़ों और महंगे आंकड़ों को जोड़ती है। इस मलिन से पुरजे के तापमान का तेज अनुमान लगाया जा सकता है। यह तेज अनुमान डज़ाइन चरण और परीक्षण स्थल, दोनों में उपयोगी है।

इन सभी औजारों में एक समान बात है। वह यह है कि कृत्रिम बुद्धिमत्ता परीक्षण की जगह नहीं लेती। कृत्रिम बुद्धिमत्ता उम्मीदवारों को कम करती है और अनुमान को आगे खसिकाती है। अंतिम पुष्टिपत्र सुरंग, आर्क-जेट और दहन परीक्षण करते हैं। कृत्रिम बुद्धिमत्ता और वास्तविक परीक्षण साथ चले, तभी विकास सच में तेज होता है।

एक और समान बात भौतिकी से जुड़ाव है। इस अध्याय की कृत्रिम बुद्धिमत्ता केवल आंकड़ों से नहीं सीखती। ऊष्मागतिकी के नियम और बलों का संतुलन अधिगम में डाला जाता है। इसलिए वह कम आंकड़ों वाले अति-उच्च तापमान क्षेत्र को भी संभालती है। यह ऐसी दीवार है जिसे शुद्ध डेटा अधिगम से पार करना कठिन है। भौतिकी और कृत्रिम बुद्धिमत्ता का मलिन इस अध्याय की मुख्य कुंजी है।

इस अध्याय की विधियाँ आपस में जुड़ी हुई हैं। ऊष्मा प्रवाह का अनुमान सतह का तापमान देता है। सतह का तापमान ऑक्सीकरण और क्रीप की गतिकी करता है। ऑक्सीकरण और क्रीप जीवन अनुमान तक ले जाते हैं। जीवन अनुमान प्रतिलोम डज़ाइन का लक्ष्य बनता है। इन्हें एक ही श्रृंखला में बंधा माना जा सकता है।

बाकी काम भी बहुत है। अति-उच्च तापमान के वास्तविक आंकड़े अब भी कम हैं। प्रतिलोम डज़ाइन मॉडल के प्रदर्शन के दावे को वास्तविक वस्तु से जांचना जरूरी है। भौतिकी नियम डालने के तरीके को भी और नखारना होगा। जैसे-जैसे ये काम हल होंगे, अगली पीढ़ी की ऊष्मा-सुरक्षा प्रणाली का डज़ाइन आगे बढ़ेगा। ऊष्मा-सुरक्षा प्रणाली का अर्थ वह पूरी संरचना है जो गर्म बाहरी सतह से उड़ान वाहन की रक्षा करती है।

कोरिया भी इस क्षेत्र में कदम रख रहा है। नूरीहो (Nuri) और अगली पीढ़ी का परीक्षण यान गर्म पुरजों से नपिते हैं। पुनः प्रयोज्य रॉकेट में पुरजों को कई बार इस्तेमाल करना पड़ता है। इसलिए जीवन अनुमान उतना ही अधिक महत्वपूर्ण हो जाता है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता और भौतिकी को साथ इस्तेमाल करने वाली ये विधियाँ उसका आधार बनती हैं। सामग्री की छोटी दुनिया को पढ़ने वाली नजर बड़े उड़ान की सुरक्षा बचाती है।

संबंधित आधार-सामग्री

- Binner, J., Porter, M., Baker, B., Zou, J., Venkatachalam, V., Rubio Diaz, V., D'Angio, A., Ramanujam, P., Zhang, T., & Murthy, T. S. R. C. (2020). Selection, processing, properties and applications of ultra-high temperature ceramic matrix composites. *International Materials Reviews*, 65(7), 389-444. <https://doi.org/10.1080/09506608.2019.1652006>
- Fahrenholtz, W. G., & Hilmas, G. E. (2017). Ultra-high temperature ceramics: Materials for extreme environments. *Scripta Materialia*, 129, 94-99. <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2016.10.018>
- DiCarlo, J. A., Yun, H. M., Morscher, G. N., & Bhatt, R. T. (2004). SiC/SiC composites for 1200°C and above. *NASA Technical Reports Server*, 20040191405. <https://ntrs.nasa.gov/citations/20040191405>
- NASA. (2008). Ceramic Matrix Composite (CMC) thermal protection systems and hot structures for hypersonic vehicles. *NASA Technical Reports Server*, 20080017096. <https://ntrs.nasa.gov/citations/20080017096>
- Wu, T., Wang, Y., Qi, W., Luo, X., Luo, P., Gao, X., & Song, Y. (2026). Predictive constitutive modelling of oxidation-induced degradation in 2.5D woven C/SiC composites. *Materials*, 19(2), 307. <https://doi.org/10.3390/ma19020307>
- Qu, N., Zhou, W., Zhang, W., Liu, Y., Zheng, L., Cao, D., Tan, M., Zhu, J., & Zhang, X. (2026). Research progress and prospects of ultra-high-temperature ceramics: Experimentation, multiscale simulation and data-driven design. *Nanomaterials*, 16(11), 693. <https://doi.org/10.3390/nano16110693>
- Baier, L., Frieß, M., Hensch, N., & Leisner, V. (2024). Development of ultra-high temperature ceramic matrix composites for hypersonic applications via reactive melt infiltration and mechanical testing under high temperature. *CEAS Space Journal*, 17(4), 635-644. <https://doi.org/10.1007/s12567-024-00562-y>

- Peters, A. B., Zhang, D., Chen, S., Ott, C., Oses, C., Curtarolo, S., McCue, I., Pollock, T. M., & Eswarappa Prameela, S. (2024). Materials design for hypersonics. *Nature Communications*, 15, 3328. <https://doi.org/10.1038/s41467-024-46753-3>
- Bianco, G., Nisar, A., Zhang, C., Boesl, B., & Agarwal, A. (2022). Predicting oxidation damage in ultra high-temperature borides: A machine learning approach. *Ceramics International*, 48(20), 29763-29769. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2022.06.236>
- Meng, H., Liu, Y., Yu, H., Zhuang, L., & Chu, Y. (2025). Machine-learning-potential-driven prediction of high-entropy ceramics with ultra-high melting points. *Cell Reports Physical Science*, 6, 102449. <https://doi.org/10.1016/j.xcrp.2025.102449>
- Liu, Y., Meng, H., Zhu, Z., Yu, H., Zhuang, L., & Chu, Y. (2024). Exploring mechanical and thermal properties of high-entropy ceramics via general machine learning potentials. *arXiv*, 2406.08243. प्रीप्रिंट, अभी सहकर्मी-समीक्षित नहीं. <https://arxiv.org/abs/2406.08243>
- Thomas, A., Durmaz, A. R., Alam, M., Gumbsch, P., Sack, H., & Eberl, C. (2023). Materials fatigue prediction using graph neural networks on microstructure representations. *Scientific Reports*, 13, 12562. <https://doi.org/10.1038/s41598-023-39400-2>
- Zheng, B., Wen, J., Choy, Y.-S., & Fei, C. (2026). Physics-constrained EBSD image inpainting via adversarial graph learning: Bridging crystallographic rules and multimodal deep learning. *Expert Systems with Applications*, 298, 129667. <https://doi.org/10.1016/j.eswa.2025.129667>
- Raissi, M., Perdikaris, P., & Karniadakis, G. E. (2019). Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, 378, 686-707. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045>
- Chen, L., Li, Y., Ma, Y., Gao, L., & Yu, L. (2025). Multiscale graph equivariant diffusion model for 3D molecule design. *Science Advances*, 11(16), eadv0778. <https://doi.org/10.1126/sciadv.adv0778>
- Xu, P., Wu, Y., Zarei, A., Ahmed, S., Pilla, S., Li, G., & Luo, F. (2025). Physically constrained 3D diffusion for inverse design of fiber-reinforced polymer composite materials. *Composites Part B: Engineering*, 303, 112515. <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2025.112515>
- Dai, B., Wang, H., & Gui, J. (2026). Property-informed diffusion-based text-to-microstructure generation. *arXiv*, 2606.08150. प्रीप्रिंट, अभी सहकर्मी-समीक्षित नहीं. <https://arxiv.org/abs/2606.08150>
- Lu, L., Jin, P., Pang, G., Zhang, Z., & Karniadakis, G. E. (2021). Learning nonlinear operators via DeepONet based on the universal approximation theorem of operators. *Nature Machine Intelligence*, 3, 218-229. <https://doi.org/10.1038/s42256-021-00302-5>
- Lu, L., Pestourie, R., Johnson, S. G., & Romano, G. (2022). Multifidelity deep neural operators for efficient learning of partial differential equations with application to fast inverse design of nanoscale heat transport. *Physical Review Research*, 4, 023210. <https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.4.023210>
- Green, M. S. (1954). Markoff random processes and the statistical mechanics of time-dependent phenomena. *Journal of Chemical Physics*, 22, 398-413. <https://doi.org/10.1063/1.1740082>
- Kubo, R. (1957). Statistical-mechanical theory of irreversible processes. *Journal of the Physical Society of Japan*, 12, 570-586. <https://doi.org/10.1143/JPSJ.12.570>
- Verdi, C., Karsai, F., Liu, P., Jinnouchi, R., & Kresse, G. (2021). Thermal transport and phase transitions of zirconia by on-the-fly machine-learned interatomic potentials. *npj Computational Materials*, 7, 156. <https://doi.org/10.1038/s41524-021-00630-5>
- Zhang, X., Liu, N., Guo, Q., Shi, G., & Wang, Y. (2026). Beyond Boltzmann transport: Green-Kubo prediction of lattice thermal conductivity with machine-learned potentials. *Journal of Chemical Physics*, 164(7), 074101. <https://doi.org/10.1063/5.0297462>
- Mandal, S., Srivastava, A., Das, T., Singh, A. K., & Maiti, P. K. (2025). Probing lattice anharmonicity and thermal transport in ultralow- κ materials using machine learning interatomic potentials. *Small*, 22(8), 2513476. <https://doi.org/10.1002/sml.202513476>
- Arabha, S., Shokri Aghbolagh, Z., Ghorbani, K., Hatam-Lee, S. M., & Rajabpour, A. (2021). Recent advances in lattice thermal conductivity calculation using machine-learning interatomic potentials. *Journal of Applied Physics*, 130(21), 210903. <https://doi.org/10.1063/5.0069443>

अध्याय 6. धातु योज्य वनिर्माण (LPBF/DED) प्रक्रिया में तापीय तनाव मॉडलिंग और इन-सिटू (In-situ) दोष पहचान

भूमिका

सोचिए किरिस्टोई में केक बेक किया जा रहा है। आटे का घोल सांचे में डालकर ओवन में रखा जाए तो एक पूरा टुकड़ा निकलता है। सामग्री को सांचे में डालकर एक बार में बनाने की यह विधि पुरानी निर्माण पद्धति है। रॉकेट पुरजे भी लंबे समय तक इसी तरह बनाए गए। धातु के बड़े टुकड़े को काटकर आकार दिया गया, या कई टुकड़े अलग-अलग बनाकर जोड़े गए।

लेकिन रॉकेट इंजन के दहन कक्ष और नोजल के भीतर सैकड़ों बहुत पतले शीतलन मार्ग गुजरते हैं। तेज आग से दीवार को बचाने के लिए उन मार्गों से ठंडा ईंधन बहाना पड़ता है। भीतर की ऐसी जटिल संरचना को काटकर बनाना कठिन है। टुकड़े जोड़ने पर जोड़ कमजोर स्थान बन जाता है।

धातु योज्य वनिर्माण दूसरा रास्ता खोलता है। यह विधि धातु को परत दर परत जमा करके पुरजा बनाती है। जैसे 3D प्रिंटर प्लास्टिक को एक-एक रेखा में निकालकर जमाता है, वैसे ही धातु पाउडर या धातु तार को पघिलाकर जमाया जाता है। भीतर खाली जटिल मार्ग भी एक ही प्रक्रिया में बनाए जा सकते हैं। जोड़ नहीं होता, इसलिए कमजोर स्थान भी घटते हैं।

यह विधि स्वतंत्रता देती है, लेकिन नई चिंता भी देती है। धातु को परतों में पघिलाकर जमाते समय बहुत छोटे छिद्र बन सकते हैं। हर परत के गर्म होकर ठंडा होने से पुरजा टेढ़ा भी हो सकता है। क्रिस्टल का आकार दशा के अनुसार बदल सकता है, जिससे मजबूती एक दशा में झुक सकती है। ऐसे दोष आंखों से आसानी से नहीं देखिते। लेकिन रॉकेट पुरजे में एक छोटा दोष भी बड़े हादसे में बदल सकता है।

इस अध्याय में देखा गया है कि कृत्रिम बुद्धिमत्ता इस समस्या में कैसे मदद करती है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता तीन काम करती है। निर्माण के दौरान दोष को जल्दी ढूंढती है। धीमी गणना की जगह तापीय तनाव और विकृति का तेज अनुमान लगाती है। प्रक्रिया की स्थितियों को उसी समय बदलने में मदद करती है। इन तीन बातों को क्रम से देखने पर लगभग दोषरहित रॉकेट पुरजे स्वयं बनाने वाले कारखाने की रूपरेखा दिखाई देती है।

इस अध्याय की तकनीक के आधार में एक विचार है। केवल कृत्रिम बुद्धिमत्ता पर्याप्त नहीं है, और केवल भौतिकी भी पर्याप्त नहीं है। सरिफ डेटा से सीखी कृत्रिम बुद्धिमत्ता शोर से डगमगा जाती है। सरिफ भौतिकी गणना का उपयोग बहुत धीमा होता है। दोनों को मलाने पर वे एक-दूसरे की कमजोरियां भरते हैं। यही मेल भौतिकी-सूचि मशीन लर्निंग का मूल है, और इस अध्याय की कई तकनीकें इसके उदाहरण हैं।

6.1 रॉकेट पुरजे जमा करके बनाने की दो विधियां

इस खंड में क्या देखा जाएगा

रॉकेट इंजन पुरजों को धातु से जमा करके बनाने की दो प्रमुख विधियां हैं। एक विधि में पतली बछी धातु पाउडर पर लेजर डाली जाती है। दूसरी विधि में धातु पाउडर या तार को लेजर फोकस में डालते हुए पघिलाकर जमाया जाता है। दोनों विधियों में बनाए जाने वाले पुरजों का आकार और सूक्ष्मता अलग होती है।

यह खंड रॉकेट में इस्तेमाल होने वाली तीन धातुओं का परिचय भी देता है। तीनों धातुओं के गुण अलग हैं। बनाते समय सावधानी की बातें भी अलग हैं। धातु के पघिलकर जमने के दौरान भीतर क्या होता है, यह जानना जरूरी है। तभी आगे आने वाली कृत्रिम बुद्धिमत्ता तकनीकों की जरूरत समझी जा सकती है। यह खंड तीन धातुओं के गुण बताकर वही आधार रखता है।

6.1.1 अगली पीढ़ी की रॉकेट प्रणोदन प्रणाली और धातु योज्य वनिर्माण (Additive Manufacturing)

रॉकेट इंजन चरम स्थितियों में काम करता है। दहन कक्ष के भीतर दबाव कार के टायर के दबाव से सैकड़ों गुना तक पहुंचता है। जहां ईंधन जलता है, वहां तापमान 3 हजार डिग्री से ऊपर जाता है। इसके उलट शीतलन मार्गों में शून्य से 200 डिग्री नीचे के करीब तरल ईंधन बहता है। एक ही पुरजे को इस गर्मी और ठंडक को साथ-साथ सहना पड़ता है।

ऐसे पुरजे को पुरानी विधि से बनाने में बहुत काम लगता है। शीतलन मार्गों को एक-एक करके काटा जाता है, और कई टुकड़ों को ब्रेजिंग नाम की विधि से जोड़ा जाता है। ब्रेजिंग धातुओं के बीच दूसरी धातु पघिलाकर डालने और जोड़ने की विधि है। टुकड़े जितने अधिक होते हैं, जोड़ उतने बढ़ते हैं, और निर्माण में कई महीने लगते हैं। जोड़ बाद में रिसाव या दरार की जगह बनने में आसान होते हैं।

धातु योज्य वनिर्माण इस प्रक्रिया को काफी घटा देता है। लेजर पाउडर बेड फ्यूजन (Laser Powder Bed Fusion; LPBF) में धातु पाउडर को पतला बछिया जाता है। उस पर लेजर डाली जाती है। केवल जरूरी स्थानों को पघिलाकर जोड़ा जाता है, फिर पाउडर दोबारा पतला

बछाकर फरि पधिलाया जाता है। इस प्रक्रिया को हजारों बार दोहराने पर पुरजा पूरा हो जाता है। यह घने मार्गो वाले दहन कक्ष लाइनर जैसे छोटे और सूक्ष्म पुरजों के लिए उपयुक्त है।

डायरेक्टेड एनर्जी डिपोजिशन (Directed Energy Deposition; DED) का तरीका थोड़ा अलग है। धातु के पाउडर या धातु के तार को लेजर फोकस में डालते हुए पधिलाकर परत-दर-परत जमाया जाता है। यह ब्रश से पेट की परतें चढ़ाने की तरह धातु को एक के ऊपर एक जोड़ने जैसा दखिता है। इसके नरिमाण की गति तेज होती है और यह बड़े पुरजों के लिए उपयुक्त है। 1 मीटर से अधिक व्यास वाले नोजल स्कर्ट बनाते समय इस वधिका उपयोग किया जाता है।

दोनों वधियों के अपने गुण और सीमाएं हैं। लेजर पाउडर बेड फ्यूजन बहुत सूक्ष्म है, लेकिन धीमा है। कारण यह है कि पतली परत हजारों बार बछिनी पड़ती है। बनाए जा सकने वाले पुरजे का आकार भी कक्ष के आकार तक सीमति रहता है। इसके उलट दशितमक ऊर्जा नकिषेपण तेज है और बड़े आकार बना सकता है, लेकिन सतह खुरदरी होती है। बनाने के बाद काटकर समतल करने का काम और चाहिए।

पाउडर की गुणवत्ता भी परणाम तय करती है। पाउडर के कण समान रूप से गोल होने चाहिए, तभी वे पतले और ठीक से बछिते हैं। कणों का आकार असमान हो तो खाली जगह बनती है। पाउडर में नमी आ जाए तो नरिमाण के दौरान बुलबुले बनते हैं। इसलिए पाउडर को सूखी अवस्था में रखा और संभाला जाता है। अच्छा पुरजा अच्छे पाउडर से शुरू होता है।

दोनों वधियों में पुरजे को एक ही टुकड़े के रूप में बनाने की शक्ति है। दहन कक्ष लाइनर, इंजेक्टर हेड, टर्बोपंप इम्पेलर और बड़े नोजल को बना जोड़ के आकार दिया जा सकता है। अमेरिकी राष्ट्रीय वैमानिकी और अंतरिक्ष प्रशासन (NASA) के रॉकेट प्रणोदन प्रौद्योगिकी कार्यक्रम (RAMPT) ने इस वधि से बड़े नोजल बनाए हैं। प्रकाशति सामग्री के अनुसार, लगभग 1.5 मीटर व्यास और लगभग 1.8 मीटर लंबाई वाले शीतलन मार्ग नोजल को 90 दिनों में जमा करके बनाया गया। यह नोजल अंतरिक्ष प्रक्षेपण यान के बड़े इंजन नोजल के आकार का 65 प्रतशित है।

उसी कार्यक्रम ने परीक्षण परणाम भी बताए। कई इंजेक्टरों, दहन कक्षों और नोजलों को मलाकर किए गए विकास परीक्षण में वे लंबे समय तक दहन सह सके। कुल दहन समय 10 हजार सेकंड से काफी अधिक रहा, और प्रज्वलन भी सैकड़ों बार दोहराया गया। इसका अर्थ है कि परत दर परत सामग्री जमा करके बने पुरजे वास्तविक रॉकेट दहन सह सकते हैं। यह उपलब्धि दखिताती है कि योज्य वनिर्माण प्रयोगशाला से आगे बढ़कर उड़ान योग्य पुरजों तक जा रहा है।

इस वधिका लाभ समय और पुरजों की संख्या में है। पुरानी वधि में सैकड़ों टुकड़े अलग-अलग बनाकर जोड़े जाते थे। योज्य वनिर्माण उन सैकड़ों को घटाकर कुछ टुकड़ों तक ला देता है। टुकड़े कम होते हैं तो जोड़ कम होते हैं और नरिमाण समय भी घटता है। डिजाइन बदलना हो तो उसे जल्दी दोबारा बनाकर देखा जा सकता है। यही गतिनिए इंजन के विकास की रफ्तार बढ़ाती है।

6.1.2 मशिर् धातु के अनुसार धातुकर्मीय गुण और अवस्था-परविर्तन व्यवहार

रॉकेट पुरजों में इस्तेमाल होने वाली हर धातु का अपना काम होता है। यह खंड तीन प्रतनिधि धातुओं को देखता है। इनकोनेल 718, GRCo-42 और C-103। धातुकर्म वह अध्ययन है जो धातु की आंतरिक संरचना और उसके बदलावों को देखता है। वही धातु भी कैसे ठंडी होती है, इसके अनुसार उसकी आंतरिक संरचना बदल जाती है।

तीनों धातुएं अपनी-अपनी जगह संभालती हैं। इनकोनेल 718 बल सहने वाले मजबूत पुरजों का काम करता है। GRCo-42 दहन कक्ष की उस दीवार का काम करता है जो गर्मी जल्दी निकालती है। C-103 आग से सीधे छूने वाले नोजल सरि का काम करता है। एक इंजन के भीतर तीनों धातुएं काम बांटती हैं। इसलिए हर धातु को ठीक से बनाने वाला धातुकर्म साथ-साथ चाहिए।

इनकोनेल 718 नकिल आधारति सुपरअलॉय है। सुपरअलॉय ऐसी मशिर् धातु है जो ऊंचे तापमान पर भी मजबूती बनाए रखने के लिए बनाई जाती है। यह धातु टर्बोपंप, वाल्व और उच्च-दाब पाइपों में व्यापक रूप से इस्तेमाल होती है। यह मजबूत है, अच्छी तरह जुड़ती है, और गर्म होने पर भी अच्छी तरह टकितती है। इसलिए यह इंजन में बल सहने वाले पुरजों के लिए उपयुक्त है।

समस्या तेज शीतलन में पैदा होती है। लेजर से पधिली धातु पलक झपकते ही जम जाती है। उस समय नयिबयिम और मॉलबिडेनम जैसे तत्व क्रस्टिलों की सीमाओं पर इकट्ठे हो जाते हैं। इस इकट्ठेपन को सूक्ष्म पृथक्करण कहा जाता है। पृथक्करण अधिक हो तो उस स्थान पर लावेस अवस्था (Laves phase) नाम का कमजोर यौगिक बनता है। यह यौगिक धातु को मजबूत बनाने वाले तत्वों को खींच लेता है और मजबूती घटा देता है।

इसलिए इनकोनेल 718 को बनाने के बाद ऊष्मा उपचार चाहिए। पुरजे को फरि ऊंचे तापमान पर गर्म किया जाता है ताकि कमजोर यौगिक घुलकर हट जाएं। इसके बाद तापमान घटाकर बहुत छोटे और समान मजबूत कण बनने के लिए प्रेरति किया जाता है। इस प्रक्रिया से गुजरने पर ही पुरजा थकान के वरिद्ध मजबूत बनता है। थकान वह घटना है जिसमें बार-बार बल लगने पर धीरे-धीरे दरार पड़ती है।

इन मजबूत कणों का नाम है। यह नकिल और नथिबयिम से बनी बहुत छोटी अवस्था है, जसै गामा डबल-प्राइम कहा जाता है। रासायनिक सूत्र में तीन नकिल परमाणुओं से एक नथिबयिम परमाणु जुड़ता है। इनकोनेल 718 की मजबूती अधिकतर यही अवस्था बनाती है। यह अन्य नकिल सुपरअलॉय में आम गामा-प्राइम से अलग अवस्था है। इसलिए नथिबयिम को ठीक से नियंत्रित करना इस धातु की कुंजी है।

GRCop-42 NASA द्वारा रॉकेट दहन कक्षों के लिए विकसित तांबा मशिर धातु है। तांबा ऊष्मा को बहुत अच्छी तरह आगे भेजता है। दहन कक्ष की दीवार से गर्मी तेजी से निकालने के लिए यह गुण जरूरी है। लेकिन शुद्ध तांबा गर्म होने पर नरम हो जाता है। इसलिए तांबे में थोड़ा क्रोमियम और नथिबयिम मिलाया जाता है। ये दोनों तत्व बहुत छोटे कण बनाकर तांबे को थामे रखते हैं।

GRCop-42 को लेजर से बनाते समय कठिनाई होती है। तांबा प्रकाश को अच्छी तरह परावर्तित करता है। वह दर्पण की तरह लेजर प्रकाश का बड़ा हिस्सा लौटा देता है। इसलिए उसे पर्याप्त पघिलाने के लिए शक्तिशाली लेजर या हरी रोशनी वाला लेजर चाहिए। बनाने के बाद ऊंचे दबाव और तापमान से दबाकर भीतर के छद्म हटाने की प्रक्रिया से गुजरना पड़ता है। इस प्रक्रिया के बाद यह 800 डिग्री से अधिक गर्म वातावरण में भी ऊष्मा अच्छी तरह भेजता है और मजबूती बनाए रखता है।

दहन कक्ष की दीवार को इतनी अच्छी तरह गर्मी क्यों निकालनी पड़ती है, इसे देखें। दीवार के एक तरफ 3 हजार डिग्री से अधिक की आग छूती है। दूसरी तरफ ठंडा ईंधन बहता है। यह पतली दीवार दोनों तापमानों को अलग रखती है। यदि गर्मी जल्दी न निकले तो दीवार पघिल या फट जाती है। इसलिए ऊष्मा अच्छी तरह भेजने वाली तांबा मशिर धातु दीवार की सामग्री के रूप में इस्तेमाल होती है।

यह मशिर धातु शीतलन मार्गों के साथ मलिकर काम करती है। दीवार के भीतर पतले मार्गों को घना बनाकर गुजारा जाता है। उन मार्गों से ईंधन बहाकर दीवार की गर्मी ले जाई जाती है। मार्ग जितने जटिल होते हैं, गर्मी उतनी समान रूप से निकलती है। ऐसे जटिल मार्गों को एक बार में बनाने की शक्तियोज्य वनिर्माण में है। सामग्री और बनाने की विधि एक-दूसरे को सफल बनाते हैं।

C-103 नथिबयिम आधारित उच्च-तापमान मशिर धातु है। नथिबयिम का गलनांक 2 हजार डिग्री से काफी ऊपर है। इसलिए इसका उपयोग आग से सीधे छूने वाले नोजल सरि या अभिविन्यास नियंत्रण थ्रस्टर में किया जाता है। इसमें थोड़ा हैफनियम, टाइटेनियम और जरिकोनियम मिलाकर गुण सुधारे जाते हैं। बड़े पतली-शीट नोजल बनाते समय DED विधि का उपयोग किया जाता है।

C-103 बनाते समय हवा से सावधान रहना पड़ता है। पघिला नथिबयिम हवा में मौजूद ऑक्सीजन और नाइट्रोजन को तेजी से खींच लेता है। ऑक्सीजन एक नश्चित मात्रा से अधिक हो जाए तो धातु आसानी से टूटने लगती है। वह कांच की तरह झटके से टूटने वाले गुण में बदल जाती है। इसलिए निर्माण कक्ष को आर्गन जैसी सुरक्षा गैस से भरकर ऑक्सीजन को बहुत कम रखा जाता है।

उपयोग के दौरान भी ऑक्सीकरण बड़ी समस्या है। गर्म निकास गैस में मौजूद ऑक्सीजन नथिबयिम पर लगातार हमला करती है। इसलिए बाहर सलिकॉन युक्त सलिसाइड सुरक्षा परत चढ़ाई जाती है। यह परत ऑक्सीजन को धातु तक पहुंचने से रोकती है। निर्माण के समय वातावरण नियंत्रण और उपयोग के समय सुरक्षा परत, दोनों चाहिए। यही दो नियंत्रण C-103 पुरजे की सफलता तय करते हैं।

हाल के शोध इस धातु को बनाने की प्रक्रिया को गहराई से देखते हैं। 2025 के एक अध्ययन ने लेजर तार नक्षेपण से C-103 की पतली शीट बनाई और उसके गुणों को देखा। दूसरे अध्ययन ने कई भौतिक प्रक्रियाओं को साथ हल करने वाले मेल्ट पूल मॉडल से दोष मानचित्र बनाया। इसका अर्थ है कि निम्न स्थितियों में दोष बनेंगे, इसे पहले से चित्रित कर लिया जाता है। ऐसा मानचित्र हो तो अच्छी स्थितियां चुनकर इस्तेमाल की जा सकती है। बनाने से पहले दोषों से बचने का रास्ता खोजा जाता है।

6.2 इन-सिटू (In-situ) दोष पहचान तंत्र और भौतिकी-सूचक इमेजिंग मॉडल

इस खंड में क्या देखा जाएगा

इन-सिटू का अर्थ है बनते हुए उसी स्थान पर देखना। पुरजा पूरा बनने के बाद दोष मलि तो देर हो चुकी होती है। निर्माण के दौरान दोष मलि जाए तो उसी स्थान पर उसे ठीक किया जा सकता है या प्रक्रिया रोकी जा सकती है। यह खंड निर्माण के दौरान दोष देखने की विधियों को देखता है।

पहले देखा जाएगा कि दोष क्यों और कैसे बनते हैं। फिर लेजर से बने छोटे तालाब को देखने वाले उपकरणों का परिचय दिया जाएगा। अंत में देखा जाएगा कि कृत्रिम बुद्धिमत्ता देखी गई छवियों को कैसे पढ़ती है। यहां भौतिक नियमों और कृत्रिम बुद्धिमत्ता को साथ इस्तेमाल करने की विधि आती है। यह विधि इस पुस्तक में लगातार आने वाली भौतिकी-सूचक मशीन लर्निंग का एक उदाहरण है।

6.2.1 मेल्ट पूल दोष बनने का ऊष्मा-द्रवगतिकीय तंत्र

लेजर जब धातु पाउडर को पघिलाती है, तो एक छोटा तालाब बनता है। इस तालाब को मेल्ट पूल (Melt pool) कहा जाता है। इसका व्यास कुछ बालों जितना छोटा होता है। लेजर आगे बढ़ती है तो यह तालाब भी साथ चलता है। पुरजे की गुणवत्ता इस छोटे तालाब की अवस्था पर बहुत निर्भर करती है।

इस तालाब के भीतर धातु लगातार चलती रहती है। गर्म स्थान और कम गर्म स्थान की सतही तनाव अलग होती है। यह अंतर पघिली धातु को इधर-उधर धकेलता है। इस प्रवाह को मारांगोनी संवहन कहा जाता है। यह शोरबे वाले बर्तन की सतह पर घूमते भंवर जैसा है। यही भंवर कभी दोष बनाता है और कभी दोष हटाता है।

एक दोष कीहोल पोरोसिटी (Keyhole porosity) है। यह तब बनती है जब लेजर बहुत तेज़ हो या बहुत धीमे आगे बढ़े। तेज़ प्रकाश धातु में गहराई तक घुसता है और चाबी के छेद जैसी संकरी और गहरी खाई बनाता है। यह खाई अस्थिर होती है और अचानक ढह जाती है। ढहते समय उसके भीतर की गैस धातु में फँस जाती है और गोल बुलबुला बन जाती है। इस तरह फँसा बुलबुला ही कीहोल पोरोसिटी है।

कीहोल केवल बुरा नहीं होता। सही गहराई का कीहोल धातु को गहराई तक पघिलाकर अच्छी तरह जोड़ता है। समस्या तब होती है जब कीहोल बहुत गहरा और अस्थिर हो जाता है। इसलिए प्रक्रिया कीहोल की गहराई को उचित सीमा में रखने की कोशिश करती है। लेजर शक्ति को न बहुत ऊँचा और न बहुत कम रखकर सही खड़िकी खोजी जाती है। सही खड़िकी खोजना ही प्रक्रिया नियंत्रण का मुख्य भाग है।

दूसरा दोष फ्यूज़न की कमी (Lack-of-Fusion; LoF) है। यह कीहोल के उलट तब बनता है जब लेजर कमजोर हो या रास्तों के बीच दूरी बहुत अधिक हो। पास-पास की लेजर रेखाएँ या नीचे की परतें ठीक से पघिलकर आपस में नहीं जुड़तीं। उनके बीच खाली जगह रह जाती है। यह खाली जगह नुकीले आकार की होती है और उसके भीतर बर्ना पघिला पाउडर होता है।

दोनों दोषों के खतरे का स्वभाव अलग है। कीहोल छद्म गोल होता है, इसलिए अपेक्षाकृत कम खतरनाक है। फ्यूज़न की कमी नुकीली होती है, इसलिए बल उसके सरि पर इकट्ठा होता है। यह उसी सदिधांत जैसा है जिसमें नुकीले काँच के टुकड़े का सरि आसानी से चटकता है। इसलिए फ्यूज़न की कमी थकान दरार की शुरुआत बनना आसान है। रॉकेट पुरजों पर अनगणित बार कंपन आता है, इसलिए यह दोष बड़ा खतरा बन जाता है।

हाल के शोध दोषों को और छोटे वर्गों में बाँटकर देखते हैं। 2026 के एक शोध ने छद्मों को तीन भागों में बाँटा। छद्म नहीं, 15 माइक्रोमीटर से छोटे छद्म, और उससे बड़े छद्म। यह 15 माइक्रोमीटर उस शोध में तय की गई वर्गीकरण सीमा है। उस शोध में बड़े कीहोल छद्म अधिक हानिकारक थे। छोटी गैस छद्मियाँ उन स्थितियों में कम हानिकारक थीं। इस शोध ने फोटोडायोड संकेत और सूक्ष्म एक्स-रे चित्रों को साथ इस्तेमाल करके यह विभाजन सखाया।

लेकिन इस सीमा को सीधे स्वीकृत भिन्न नहीं बनाना चाहिए। छद्म का खतरा केवल आकार से तय नहीं होता। छद्म की जगह, आकार, उस पर लगने वाला बल, सामग्री और अपेक्षित आयु मलिकर इसे तय करते हैं। समान आकार का छद्म भी सतह के पास हो तो अधिक खतरनाक होता है। इसलिए वर्गीकरण सीमा और संरचनात्मक सुरक्षा मानक को अलग-अलग देखना चाहिए।

दोषों को इस तरह छोटे वर्गों में बाँटने का कारण है। यदि सभी छद्मों को एक जैसा माना जाए, तो ठीक पुरजे भी खराब मानकर फेंक दिए जाएँगे। उलट, यदि सबको अनदेखा किया जाए, तो खतरनाक छद्म छूट जाएँगे। दोष के प्रकार और आकार को पहचानना होगा, तभी उचित प्रतिक्रिया दी जा सकती है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता यह सूक्ष्म विभाजन करती है।

दोष दिखाई देने से पहले संकेत छोड़ता है। कीहोल बनने के ठीक पहले मेल्ट पूल का आकार डगमगाता है। पोखर के गहरा और संकरा होने का पैटर्न दिखाता है। मनुष्य की आँख इस तेज़ बदलाव का पीछा नहीं कर सकती। प्रतिसिंकंड दसियों हजार चित्र लेने वाला कैमरा और कृत्रिम बुद्धिमत्ता इन शुरुआती संकेतों को पढ़ते हैं। लक्ष्य है कि दोष बनने से पहले ही उसे पहचान लिया जाए।

पाउडर का बखिराव भी दोषों से जुड़ा है। बखिराव वह घटना है जिसमें लेजर के तेज़ प्रहार से पघिली धातु छटिकती है। छटिकी हुई बूँदें अभी न पघिले पाउडर पर गरिती हैं। जब उस स्थान पर अगला लेजर आता है, तो वह ठीक से नहीं पघिलता। इसलिए बखिराव अधिक हो तो फ्यूज़न की कमी बढ़ती है। बखिराव की मात्रा भी दोष का पूर्व संकेत बनती है।

6.2.2 मेल्ट पूल तापमान मापने वाली आँख और भौतिक आधार रेखा

मेल्ट पूल को देखने के लिए विशेष आँख चाहिए। पोखर बहुत चमकीला होता है और बहुत तेज़ी से बदलता है। पाइरोमेट्री (Pyrometry) गर्म वस्तु से निकलने वाले प्रकाश से तापमान मापने की विधि है। यह इस सदिधांत का इस्तेमाल करती है कि वस्तु जितनी गर्म होती है, उतना अलग प्रकाश निकालती है। यह विधि वस्तु को छुए बिना तापमान मापती है।

समाक्षीय (Coaxial) पाइरोमेट्री लेजर के गुजरने वाले रास्ते की दशा से ही प्रकाश को देखती है। इसे ऐसे समझ सकते हैं कि लेजर और कैमरा एक ही लेंस साझा करते हैं। इसलिए लेजर जहाँ भी गुजरे, पोखर को हमेशा सामने से देखा जा सकता है। प्रतिसिंकंड दसियों हजार चित्र लेने वाला तेज़ कैमरा पोखर की चमक और आकार में बदलाव दर्ज करता है। दो तरंगदैर्घ्यों के प्रकाश की तुलना करने से सतह की अवस्था से कम प्रभावित तापमान मलित है।

यह दो-तरंगदैर्ध्य वधि भी पूरी नहीं है। उत्सर्जकता का अर्थ है कि कोई वस्तु कतिनी मात्रा में प्रकाश निकालती है। यह वधिमानती है कि दो तरंगदैर्ध्यों पर उत्सर्जकता का अनुपात स्थिर है। यद्यपि मान्यता गलत हो जाए, तो मापे गए तापमान में त्रुटि आती है। छटिकी हुई धातु-वाष्प या गंदा लेंस भी मान को हला देता है। इसलिए मापे गए मानों को नियमिति रूप से ठीक किया जाता है।

केवल कैमरा पर्याप्त नहीं है। यह तुलना करने का आधार चाहिए कि क्या सामान्य है और क्या असामान्य। ऐसे एक आधार के रूप में रोसेन्थल (Rosenthal) ऊष्मा चालन मॉडल को रखा जा सकता है। यह मॉडल 1946 में आया पुराना भौतिक सिद्धांत है। यह चलती ऊष्मा-स्रोत से धातु के गर्म होने पर तापमान वितरण को हाथ से हल करने वाला सूत्र है।

रोसेन्थल मॉडल केवल मोटा खाका है। यह धातु को लगभग अर्ध-अनंत ठोस मानता है और ऊष्मा-स्रोत को एक बट्टी मानता है। यह मानता है कि धातु के गुण तापमान से स्वतंत्र और स्थिर हैं। पघिलने और उबलने के समय आने-जाने वाली गुप्त ऊष्मा को भी अनदेखा करता है। पघिली धातु के बहाव और वाष्पीकरण को भी इसमें शामिल नहीं किया जा सकता।

इसलिए यह सूत्र केवल अनुमानित आधार तापमान देता है। कीहोल के ढहने की तेज़ गति को यह सूत्र समझा नहीं सकता। अधिक सटीक आधार चाहिए तो सीमिति तत्व विश्लेषण या द्रव गणना का उपयोग किया जाता है। रोसेन्थल मान को वास्तविक समय नगिरानी की आधार रेखा के रूप में सीधे इस्तेमाल करने के उदाहरण अभी दुर्लभ हैं। यहाँ इसे केवल इस विचार के उदाहरण के रूप में दिया गया है कि एक भौतिक आधार रखा जाए।

कृत्रिम बुद्धिमत्ता ऐसे वचिलन को इनपुट के रूप में ले सकती है। वह वास्तविक तापमान क्षेत्र और भौतिक आधार के अंतर को सीखकर दोष का अनुमान लगाती है। भौतिक आधार हो तो कृत्रिम बुद्धिमत्ता को सीखने का बोझ हल्का हो जाता है। ऐसा इसलिए है क्योंकि डेटा कम हो तब भी भौतिकी मार्गदर्शक बनती है। भौतिक आधार कृत्रिम बुद्धिमत्ता के सीखने का बोझ घटा देता है।

वास्तविक समय इतना महत्वपूर्ण क्यों है। लेज़र प्रतिसेकंड कई मीटर आगे बढ़ता है। एक परत बनाने में लगने वाला समय छोटा होता है। जहाँ दोष बनता है, वह स्थान जल्द ही अगली परत से ढक जाता है। ढकने से पहले पहचानना होगा, तभी उस स्थान को ठीक किया जा सकता है। इसलिए नरिणय मल्लिसेकंड स्तर पर तेज़ होना चाहिए।

नरीक्षण उपकरण भी लगातार वकिसति हो रहे हैं। हाल के शोध ने एक कैमरे से दो तरंगदैर्ध्यों को साथ पकड़ने की वधिपेश की। यह वधिप्रतिसेकंड अधिकतम 100,000 चित्रों तक मेल्ट पूल के तापमान परिवर्तन को दर्ज करती है। इस तरह मल्लि सूक्ष्म तापमान चित्र छद्मों को कई तरीकों से पहचानने का आधार बनते हैं। ऐसी सूक्ष्म आँख होनी चाहिए, तभी छद्मों को ठीक से पहचाना जा सकता है।

6.2.3 भौतिकी-सूचि छवि मॉडल के डिजाइन सिद्धांत

अब नरीक्षित छवियों को पढ़ने की बारी है। यह खंड भौतिकी को शामिल करने वाले छवि मॉडल के डिजाइन सिद्धांत का प्रस्ताव रखता है। पहले व्यापक रूप से इस्तेमाल होने वाले छविन्यूरल नेटवर्क को देखते हैं। वज़िन ट्रांसफॉर्मर (Vision Transformer) ऐसा न्यूरल नेटवर्क है जो छवियों को छोटे खानों में बाँटकर उनके संबंधों को देखता है। यह तस्वीर को पैबंददार कपड़े की तरह काटता है और देखता है कि हर टुकड़ा दूसरे से कैसे जुड़ा है। मेल्ट पूल छवि में केंद्र का चमकीला भाग, पीछे खिचिती पूँछ और छटिके पाउडर की रोशनी सब अलग होते हैं। यह इन संबंधों को पढ़कर दोष पहचानता है।

इस न्यूरल नेटवर्क की शक्तिदूर स्थिति भागों को जोड़ने में है। मेल्ट पूल के आगे का तापमान और पीछे की पूँछ आपस में जुड़े होते हैं। ऊष्मा कैसे बहती है, यह केवल एक टुकड़ा देखकर नहीं जाना जा सकता। वज़िन ट्रांसफॉर्मर सभी टुकड़ों की एक साथ तुलना करता है। इसलिए वह पूरे पोखर में ऊष्मा प्रवाह को पढ़ता है। यह व्यापक दृष्टि दोष के पूर्व संकेत पकड़ने में मदद करती है।

यह पुस्तक प्रस्ताव रखती है कि इसमें ऊष्मा चालन का नियम भी साथ जोड़ा जाए। कृत्रिम बुद्धिमत्ता जब उत्तर दे, तो वह स्वयं जाँचे कि उत्तर भौतिकी से मेल खाता है या नहीं। हान फिलन (Loss function) वह स्कोर है जो मापता है कि कृत्रिम बुद्धिमत्ता कतिनी गलत है। इस स्कोर में दोष वर्गीकरण त्रुटि, तापमान क्षेत्र त्रुटि और भौतिक अवशेष को साथ शामिल करने का विचार है। अवशेष वह मान है जो बताता है कि सीमीकरण कतिना वचिलति हुआ है।

इस तरह भौतिकी जोड़ने से लाभ है। कैमरा छवि में हमेशा शोर मिला रहता है। छटिका पाउडर प्रकाश को ढक भी सकता है। केवल डेटा से सीखा मॉडल ऐसे शोर से आसानी से डगमगा जाता है। भौतिकी के साथ सीखा मॉडल ऊष्मा चालन नियम का सहारा रखता है। छवि थोड़ी धुंधली हो तब भी वह भौतिकी से मेल खाता नरिणय बनाए रखता है।

वास्तविक शोध भी भौतिक विशेषताओं की शक्ति का समर्थन करता है। एक शोध ने अवरक्त कैमरा संकेतों से भौतिकी पर आधारित विशेषताएँ निकालीं। इन विशेषताओं से इनकोनेल 718 पुरजों के छद्म खोजे गए। क्योंकि तापमान में बदलाव का आकार ही दोष के संकेत रखता है। भौतिकी से निकाली गई विशेषताएँ शोर के प्रतभिजबूत होती हैं और उनका अर्थ स्पष्ट होता है। इसलिए नरिणय का आधार समझाना भी आसान होता है।

तेज़ी भी महत्वपूर्ण है। निर्माण के दौरान नरिणय करना हो तो पलक झपकते उत्तर आना चाहिए। 2026 के एक शोध ने पहले से सीखे न्यूरल नेटवर्क और पारंपरिक वर्गीकारक को मिलाया। इस वधिने नर्किल मशिर धातु के मेल्ट पूल चत्तिरो को लगभग 0.95 की सटीकता से पहचाना। एक चत्तिर पर नरिणय लेने में 1.15 मल्लिसेकंड लगे। यह शोध अभी सहकर्मी समीक्षा से नहीं गुजरा शुरुआती शोध है। फरि भी यह दखिता है ककारखाने में इस्तेमाल करने योग्य तेज़ नरिणय संभव है।

भौतिकी जोड़ने के तरीके में भार संतुलन करना पड़ता है। भौतिक अवशेष को बहुत अधिक दबाव दे तो मॉडल डेटा को कम सीखता है। केवल डेटा का पीछा करे तो भौतिकी से भटक जाता है। इन दो बलों का संतुलन ठीक पकड़ना होगा, तभी अच्छा मॉडल बनता है। यह संतुलन बढि खोजना ही भौतिकी-सूचति अधगिम का परषिकार है। पुरजे और उपकरण के अनुसार उचति भार अलग होता है।

यहाँ प्रमाणति बात और प्रस्तावति बात को अलग रखना चाहिए। अवरकृत वशिषताओं से छद्िर खोजना और तेज़ मशिरति मॉडल वास्तवकि शोधों में दखिरे परिणाम है। वजिन ट्रांसफॉर्मर में ऊष्मा चालन अवशेष को साथ रखने वाली संरचना इस पुस्तक की सुझाई दशिा है। यह अभी वास्तवकि पुरजो पर प्रमाणति वधिनिही है। कृत्रमि बुद्धमित्ता के नरिणय को काटकर देखे गए अनुप्रस्थ खंड और कंप्यूटर टोमोग्राफी से फरि जाँचना चाहिए।

6.3 बड़े नोज़ल की वकित किम करना

नोज़ल स्कर्ट इंजन के पीछे जुड़ा तुरही आकार का बड़ा पुरजा है। इसे पतली चादर को शंकु की तरह गोल-गोल परतों में जमाकर बनाया जाता है। इतने बड़े और पतले पुरजे निर्माण के दौरान आसानी से वकित हो जाते हैं। यह खंड उस वकित के कारण और उसे रोकने के तरीके बताता है।

पहले देखते हैं कि पुरजे के भीतर बल क्यों जमा होता है। फरि धीमी गणना की जगह लेने वाला तेज़ कृत्रमि बुद्धमित्ता मॉडल पेश कथिा जाता है। अंत में देखते हैं कि उस मॉडल से लेज़र की गतिनयित्तिरति करके वकित कैसे घटाई जाती है। पुरजा जतिना बड़ा होता है, यह वकितनयित्तिरण उतना कठनि और उतना ही महत्वपूर्ण होता है।

6.3.1 बड़े पतले-पट्ट पुरजों की परत-दर-परत बनावट में तापीय तनाव संचय और बकलिंग वकित

अवशष्टि तनाव (Residual stress) पुरजे के भीतर बची हुई खचाव और दबाव की शक्ति है। यह आँखों से नहीं दखिती, लेकिन भीतर हमेशा काम करती है। आइए देखे कथिह बल कैसे बनता है। जब लेज़र धातु की एक रेखा को गर्म करता है, तो वह भाग फैलता है। ऐसा इसलिए है क्योंकि गर्म धातु फूलती है।

लेज़र के गुजरने के बाद वह रेखा फरि ठंडी होती है। ठंडी होने पर वह अपने मूल आकार में सकिड़ना चाहती है। लेकिन नीचे की परत पहले ही जम चुकी होती है और इस गति को रोकती है। सकिड़ने की शक्ति और रोकने की शक्ति आमने-सामने आती हैं, और भीतर तनाव रह जाता है। ऊपर की ओर खींचने की शक्ति और नीचे की ओर दबाने की शक्ति जमा होती है।

पतले और बड़े नोज़ल स्कर्ट में यह बल बड़ी समस्या पैदा करता है। यह कुछ वैसा है जैसे कागज़ को एक ओर से खींचने पर वह सलिवटों के साथ मुड़ जाता है। पुरजा त्रिज्या दशिा में वकित हो सकता है या पतली चादर अचानक मुड़ सकती है। इस अचानक मुड़ने को बकलिंग (Buckling) कहा जाता है। गंभीर स्थिति में पुरजा आधार से अलग भी हो सकता है।

पुरजा जतिना बड़ा होता है, नयित्तिरण उतना कठनि होता है। ऐसा इसलिए है क्योंकि सैकड़ों परतों तक पहुँचने पर ऊष्मा लगातार जमा होती रहती है। शुरुआती कुछ परतों को बनाते समय और बाद की कुछ परतों को बनाते समय तापमान अवस्था अलग होती है। लेज़र की समान स्थिति देने पर भी परिणाम बदल जाता है। इसलिए बड़े पुरजों में ताप अवस्था देखते हुए स्थितियों बदलनी पड़ती है।

C-103 जैसी नयिोबयिम मशिर धातु में यह समस्या और कठनि है। उसका गलनांक ऊँचा होता है, इसलिए उसे पघिलाने के लिए बड़ी ऊष्मा देनी पड़ती है। बड़ी ऊष्मा बड़े तनाव में बदलती है। इस धातु से बड़ा नोज़ल बनाते समय वकितनयित्तिरण सफलता और वफिलता तय करता है। ऊष्मा वशि्लेषण और पथ डिजाइन को शुरुआत से साथ तैयार करना चाहिए।

बनने के बाद वकित को ठीक करना कठनि है। पहले से जमे पुरजे को जबरन सीधा करे तो नई दरार पड़ती है। इसलिए निर्माण के दौरान तनाव को जमा होने से रोकना बेहतर है। यह बीमारी होने के बाद इलाज करने के बजाय पहले से रोकने जैसा है। यह रोकथाम कृत्रमि बुद्धमित्ता आधारति पूर्वानुमान और सक्रयि नयित्तिरण का काम है। आगे आने वाला सरोगेट मॉडल इस रोकथाम में मदद करता है।

6.3.2 ऊष्मागतिकी-आधारति सरोगेट मॉडल (Surrogate Model)

पुरजे के भीतर तनाव को पहले से जानने के लिए गणना चाहिए। सीमति तत्व वशि्लेषण (Finite Element Analysis) पुरजे को छोटे भागों में बाँटकर तापमान और बल की गणना करने की वधि है। यह बहुत सटीक है, लेकिन बड़े पुरजों में बहुत समय लेती है। ऐसा इसलिए है क्योंकि लाखों छोटे टुकड़ों को एक-एक करके हल करना पड़ता है। बड़े नोज़ल के एक वशि्लेषण में कई दिनि भी लग सकते हैं।

इस धीमी गणना का स्थान लेने वाला मॉडल सरोगेट मॉडल (Surrogate model) है। सरोगेट मॉडल एक तेज़ मॉडल है जो धीमी गणना के परिणामों को पहले से सीख कर रखता है। मल्टीलेयर परसेप्ट्रॉन (Multilayer Perceptron; MLP) का अक्सर उपयोग किया जाता है। यह एक बुनियादी न्यूरल नेटवर्क है जो कई परतों से गुजरते हुए इनपुट को आउटपुट में बदलता है। सटीक विश्लेषण के कई परिणामों को सीखने के बाद, यह नई स्थितियों के परिणामों का अनुमान लगाता है।

यह मॉडल क्या लेता है और क्या देता है। इनपुट लेजर शक्ति, चलने की गति, लेजर के गुजरे हुए पथ, और परतों के बीच प्रतीक्षा समय है। आउटपुट पूरे भाग में अवशिष्ट तनाव का वितरण और अंतमि वक्रित आकार है। जिस सूक्ष्म विश्लेषण में कई दिनि लगते हैं, यह मॉडल उसका कम समय में अनुमान लगाता है। इससे कई स्थितियों की जल्दी तुलना की जा सकती है।

गतनिया रास्ता खोलती है। यदि हर बार एक शर्त बदलने पर कई दिनि इंतजार करना पड़े, तो अच्छा डिजाइन खोजना कठिन होता है। अनुमान भी तेज हो, तो हजारों स्थितियों को पहले से छांटा जा सकता है। फरि केवल अच्छे उम्मीदवारों को चुनकर सूक्ष्म विश्लेषण से दोबारा जांचा जाता है। प्रतिनिधि मॉडल वसित्त उम्मीदवारों को संकरा करने वाली छलनी का काम करता है।

प्रतिनिधि मॉडल को अच्छी तरह सीखने के लिए अच्छी सामग्री अधिक चाहिए। कई स्थितियों में सूक्ष्म विश्लेषण पहले से चलाकर सामग्री इकट्ठी की जाती है। वास्तविक भाग बनाकर मापे गए मान भी साथ में डाले जाते हैं। सामग्री जतिनी वसित्त और समान रूप से फैली होती है, अनुमान उतना सटीक होता है। जनि अनजानी स्थितियों को मॉडल ने नहीं सीखा, उनमें अनुमान डगमगाता है। इसलिए प्रतिनिधि मॉडल को सीखी हुई सीमा के भीतर ही भरोंसे से इस्तेमाल किया जाता है।

हाल के शोध ने इस दिशा में उपलब्धि पाई है। 2025 के एक शोध ने मशीन लर्निंग से अवशिष्ट तनाव का तेजी से अनुमान लगाया और वक्रित घटाई। इस शोध में बताया गया कि पुल के आकार के परीक्षण नमूने का मुड़ना काफी कम हुआ। अनुमानित तनाव और सूक्ष्म विश्लेषण के बीच अंतर भी छोटा था। इसका अर्थ है कि तेज मॉडल सूक्ष्म विश्लेषण के करीब पहुंचा।

भौतिक जानकारी जोड़ने से यह और बेहतर होता है। 2025 के एक अन्य शोध ने भौतिक नियमों को न्यूरल नेटवर्क में डालकर बड़े भागों की वक्रित को लगभग वास्तविक समय में अनुमानित किया। इसने Neural Operator नाम की संरचना का उपयोग किया, ताकि कई स्थितियों में व्यापक रूप से फिट हो सके। यह शोध अभी सहकर्म समीक्षा से नहीं गुजरा प्रारंभिक शोध है। फरि भी यह तेज पूर्वानुमान और भौतिक संगतता साथ पाने का रास्ता दिखाता है।

6.3.3 स्कैन पथ और परतों के बीच शीतलन समय का सक्रिय अनुकूलन

अब पूर्वानुमान के आधार पर वास्तविक प्रक्रिया बदलने की बारी है। स्कैन पथ (Scan path) लेजर के चलने की दिशा और क्रम है। यदि लेजर को लगातार केवल एक दिशा में गुजारा जाए, तो ऊष्मा एक ओर इकट्ठी हो जाती है। इकट्ठी हुई ऊष्मा बड़ा तनाव छोड़ती है। इसलिए दिशा बदलते हुए ऊष्मा को समान रूप से फैलाया जाता है।

कई समझदार पथ सामने आए हैं। चौड़ी सतह को छोटे क्षेत्रों में बांटकर बारी-बारी भरने की विधि है। हर क्षेत्र में लेजर की दिशा को थोड़ा-थोड़ा घुमाने की विधि भी है। स्थान को घना भरते हुए गुजरने वाले वक्र पथ भी इस्तेमाल किए जाते हैं। लक्ष्य एक है। ऊष्मा के प्रवाह को चारों ओर समान रूप से बिखेरकर एक ओर झुकाव रोकना।

परतों के बीच प्रतीक्षा समय भी महत्वपूर्ण है। यदि पछिली परत अभी गर्म हो और अगली परत चढ़ा दी जाए, तो ऊष्मा परत दर परत जमा होती है। जमा हुई ऊष्मा बड़ी वक्रित लाती है। इसलिए पछिली परत के कुछ हद तक ठंडा होने की प्रतीक्षा की जाती है। इस प्रतीक्षा को परतों के बीच शीतलन समय कहा जाता है।

सक्रिय अनुकूलन (Active optimization) इन स्थितियों को प्रक्रिया के दौरान बदलने की विधि है। पाइरोमेट्री बताती है कि अभी भाग कतिना गर्म है। प्रतिनिधि मॉडल अगले पथ के तनाव जोखिम का तेजी से अनुमान लगाता है। इन दोनों को देखकर लेजर शक्ति, गति और प्रतीक्षा समय को हर क्षण समायोजित किया जाता है। यह मनुष्य के लंबे अनुभव को संख्याओं और नियमों में बदलने की प्रक्रिया है।

नियंत्रण के तरीके भी अधिक समझदार हो जाते हैं। बायेसियन अनुकूलन (बेयियन Optimization) कम प्रयासों में अच्छी स्थिति खोजने की एक विधि है। यह पहले से किए गए परिणामों के आधार पर अगली बार आजमाई जाने वाली स्थितियों को बुद्धिमानी से चुनता है। जेनेटिक एल्गोरिदम (Genetic Algorithm) अच्छी स्थितियों को आपस में मिलाकर और बेहतर स्थिति खोजने की विधि है। इस तरह के तरीकों से प्रतीक्षा समय को पछिली परत की थर्मल स्थितियों के अनुसार बदला जाता है।

यह समायोजन हर परत में अलग ढंग से होता है। नचिली परत आधार से ऊष्मा खोकर जल्दी ठंडी होती है। ऊपर की परतों की ओर जाते हुए ऊष्मा कभी-कभी आसानी से नहीं निकलती। ऐसे में ऊपर की परतों में प्रतीक्षा समय बढ़ाया जाता है। हालांकि यह केवल एक उदाहरण है। ऊष्मा कतिनी जमा होती है, यह भाग के आकार, आधार, परत की चौड़ाई और निर्माण क्रम पर निर्भर करता है। इसलिए सेंसर से हर परत की ऊष्मीय अवस्था देखकर प्रतीक्षा समय तय किया जाता है।

यदि यह तरीका अच्छी तरह काम करे, तो वक्रतासाफ दिखाई देने लायक घटती है। तनाव समान रूप से फैलता है और अधिकतम तनाव घटता है। भाग अनुमत सहनशीलता के भीतर आ जाता है। हालांकि यह समायोजन हमेशा सुरक्षित प्रक्रिया सीमा के भीतर करना चाहिए। सेंसर की देरी, मॉडल की त्रुटि और उपकरण की प्रतिक्रिया सीमा को साथ संभालना चाहिए। परीक्षण नमूने से पहले पुष्टि करने के बाद ही इसे वास्तविक भाग पर लागू किया जा सकता है।

डिजिटल ट्वनि का वचिार भी यहीं से बढ़ता है। डिजिटल ट्वनि वास्तविक भाग का जुड़वां रूप कंप्यूटर के भीतर रखना है। वास्तविक प्रक्रिया के सेंसर मान लगातार उस जुड़वां में डाले जाते हैं। जुड़वां दिखाता है कि अभी भाग के भीतर क्या हो रहा है। वह यह भी पहले से दिखाता है कि अगली परत में क्या जोखिम हो सकता है। प्रतिनिधि मॉडल इस जुड़वां को तेजी से सोचने में मदद करने वाला मसुदा है।

6.4 क्रस्टिल के आकार को नियंत्रित करना

जब धातु जमती है, तो उसके भीतर क्रस्टिल बढ़ते हैं। इन क्रस्टिलों का आकार भाग की मजबूती तय करता है। यदि क्रस्टिल केवल एक दिशा में लंबे बढ़ें, तो मजबूती हर दिशा में अलग हो जाती है। यह खंड क्रस्टिल के आकार को इच्छानुसार नियंत्रित करने की वधि पर चर्चा करता है।

पहले क्रस्टिल के दो आकार और उनका अंतर देखा जाता है। फिर प्रक्रिया स्थितियों से क्रस्टिल आकार चित्रित करने वाला जनरेटिव मॉडल प्रस्तुत किया जाता है। अंत में निर्माण के दौरान क्रस्टिल आकार को स्वयं नियंत्रित करने वाला सुदृढीकरण अधिगम नियंत्रण देखा जाता है। आंखों से न देखने वाली क्रस्टिलों की दुनिया भाग का भाग्य तय करती है।

6.4.1 स्तंभाकार क्रस्टिल और समअक्षीय क्रस्टिल का संक्रमण (CET) और यांत्रिक दिशानिर्भरता

जब धातु जमती है, तो क्रस्टिल दो आकारों में बढ़ते हैं। स्तंभाकार क्रस्टिल (Columnar grain) खंभे की तरह एक दिशा में लंबे बढ़े हुए क्रस्टिल हैं। यह कई पेड़ों के तनों को खड़ा रखने जैसा दिखता है। सम-अक्षीय क्रस्टिल (Equiaxed grain) चारों तरफ समान आकार में विकसित हुए क्रस्टिल हैं। यह बजरी को समान रूप से बछिाने जैसा दिखता है।

यही अंतर भाग के गुणों को बांटता है। स्तंभाकार क्रस्टिल अधिक हो, तो भाग स्तंभ की दिशा में मजबूत और बगल की दिशा में कमजोर होता है। दिशा के अनुसार मजबूती और थकान आयु बदलती है। इस गुण को दिशानिर्भरता (Anisotropy) कहा जाता है। यह उसी सिद्धांत जैसा है कलकड़ी रेशों की दिशा में आसानी से फटती है और आड़ी दिशा में आसानी से नहीं फटती।

रॉकेट भागों में दिशानिर्भरता चर्चा का विषय भी बनती है। इसका कारण है कि भाग कई दिशाओं से बल लेते हैं। यदि केवल एक दिशा मजबूत हो, तो कमजोर दिशा पहले दरकती है। समअक्षीय क्रस्टिल इस समस्या को घटाते हैं। वे चारों ओर समान रूप से मजबूत होते हैं और जमते समय दरार के प्रति भी मजबूत होते हैं। इसलिए कई दिशाओं से बल लेने वाले भागों में समअक्षीय क्रस्टिल लाभकारी होते हैं।

हालांकि समअक्षीय क्रस्टिल हमेशा अच्छे नहीं होते। जिन भागों में क्रीप या तापीय थकान समस्या हो, वहां कभी-कभी स्तंभाकार क्रस्टिल बेहतर होते हैं। क्रीप लंबे समय तक बल मिलने पर धीरे-धीरे खचने की घटना है। जिन भागों में ऊष्मा केवल एक दिशा में बहती है, उनमें दिशात्मक क्रस्टिल लाभकारी भी हो सकते हैं। भाग पर लगने वाले बल के अनुसार वांछित क्रस्टिल आकार बदलता है।

एडिटिव मैनुफैक्चरिंग में स्तंभाकार क्रस्टिल आसानी से बनते हैं। इसका कारण है कि ऊष्मा लेजर द्वारा चढ़ाई जाने वाली दिशा में नकिलती है। ऊष्मा के नकिलने की दिशा के साथ क्रस्टिल खंभों की तरह बढ़ते हैं। परिणामस्वरूप निर्माण दिशा में क्रस्टिल कतारबद्ध फैलते हैं। इस तरह एक दिशा में झुके क्रस्टिल समूह को बनावट या टेक्सचर कहा जाता है। इस झुकाव को जरूरत के अनुसार बदलना इस खंड का लक्ष्य है।

क्रस्टिल का आकार दो मानों पर काफी हद तक निर्भर करता है। तापमान प्रवणता (Temperature gradient; G) तापमान के उतार-चढ़ाव की तीव्रता को दर्शाती है। यह इंगित करता है कि स्थान के अनुसार तापमान कतिनी तेजी से बदलता है। जमने की दर (Solidification rate; R) तरल और ठोस की सीमा के आगे बढ़ने की गति है। ये दोनों मान अलग-अलग भूमिकाएँ निभाते हैं।

दोनों का अनुपात, यानी G को R से भाग देने पर मिलने वाला मान, क्रस्टिल का आकार तय करता है। यह अनुपात बड़ा हो, तो आकार स्तंभाकार की ओर झुकता है, और छोटा हो, तो समअक्षीय की ओर झुकता है। दोनों का गुणफल, यानी G गुणा R, ठंडा होने की गतिबिना है। यह मान जतिना बड़ा होता है, क्रस्टिल उतने छोटे टुकड़ों में बंटते हैं। इसलिए आकार और माप को अलग-अलग नियंत्रित किया जा सकता है। लेजर शक्ति और गतिबदलने पर ये दोनों मान साथ बदलते हैं।

आकार तय करने वाले केवल ये दो मान नहीं हैं। बीज बनने वाले छोटे कण, पघिली धातु का प्रवाह, और दोबारा पघिलने की मात्रा भी असर डालते हैं। नीचे पहले से बड़े क्रस्टिलों की दिशा भी वरिसत में मिलती है। इसलिए तापमान प्रवणता कम और जमना तेज हो, तो समअक्षीय क्रस्टिल आसानी से बनते हैं, पर ऐसा हमेशा नहीं होता। कई मानों को साथ देखकर ही क्रस्टिल आकार ठीक से नियंत्रित किया जा सकता है।

एक ऐसा बटु होता है जहाँ स्तंभाकार क्रस्टिल सम-अक्षीय क्रस्टिल में बदल जाते हैं। इस परिवर्तन को स्तंभाकार-से-सम-अक्षीय संक्रमण (Columnar-to-Equiaxed Transition; CET) कहा जाता है। जब तापमान प्रवणता और जमने की दर किसी निश्चित शर्त

को पार कर जाती है, तो यह परिवर्तन होता है। इस शर्त को जानकर वांछित क्रिस्टल आकार के करीब पहुँचा जा सकता है। एक पुराने सदिधांत ने इस सीमा को गणितीय सूत्र के रूप में दर्शाया है।

हाल के शोध इस सीमा को और सूक्ष्म बना रहे हैं। 2025 के एक शोध ने मशीन धातु की संरचना से CET का अनुमान लगाने का मानदंड बनाया। मशीन लर्नगि से बताया गया कि कौन सा तत्व क्रिस्टल आकार पर बड़ा असर डालता है। इसका अर्थ है कि संरचना को थोड़ा बदलने भर से भी क्रिस्टल आकार बदला जा सकता है। प्रक्रिया और संरचना को साथ संभालने से क्रिस्टल नियंत्रण की सीमा वसित होती है।

संरचना की जांच करने वाली मशीन लर्नगि भी आगे बढ़ रही है। डेटा से छांटा जाता है कि कौन सा तत्व क्रिस्टल आकार पर बड़ा असर डालता है। ऐसे परिणाम हैं कि सिलिकॉन या कार्बन जैसे तत्वों की मात्रा क्रिस्टल आकार बदलती है। ऐसे शोध क्रिस्टल नियंत्रण का नक्शा धीरे-धीरे भरते हैं।

6.4.2 प्रक्रिया स्थितियों से क्रिस्टल आकार चित्रित करने वाला जनरेटिव मॉडल

प्रक्रिया स्थितियों से क्रिस्टल आकार पहले से देखना है। इसके लिए ऐसा औजार चाहिए जो स्थितियां डालने पर सूक्ष्मसंरचना का चित्र बना दे। ऐसे औजार के रूप में Conditional GAN को लिया जा सकता है। यह न्यूरल नेटवर्क स्थितियां डालकर इच्छित चित्र बनाने वाला जनरेटिव मॉडल है। यहां स्थितियां लेजर शक्ति, गति, तापमान प्रवणता और जमने की गति जैसे मान हैं। सूक्ष्मसंरचना नियंत्रण में इस मॉडल का उपयोग करने का विचार अभी प्रस्ताव चरण में है।

इस मॉडल में दो भाग आपस में प्रतिस्पर्धा करते हुए सीखते हैं। जनरेटर (Generator) सूक्ष्म संरचना के चित्र बनाता है। डिस्क्रिमिनेटर (Discriminator) यह पहचान करता है कि वह चित्र असली है या नकली। जनरेटर डिस्क्रिमिनेटर को धोखा देने की कोशिश करता है, और डिस्क्रिमिनेटर धोखा न खाने का प्रयास करता है। इस प्रतिस्पर्धा को दोहराने से जनरेटर धीरे-धीरे और अधिक वास्तविक दिखने वाले चित्र बनाने लगता है। यह एक जालसाज और एक पारखी द्वारा आपस में एक-दूसरे के कौशल को निखारने जैसी स्थिति है।

यहां असली चित्र इलेक्ट्रॉन बैकस्कैटर विवर्तन (EBSD) छवि हैं। यह विधि इलेक्ट्रॉन माइक्रोस्कोप से क्रिस्टल की दशा पढ़ती है। हर क्रिस्टल की दशा को रंगों से रंगकर नक्शे की तरह दिखाती है। Generator इसी नक्शे की नकल करना सीखता है। स्थितियां डालने पर वह उन स्थितियों में बनने वाला क्रिस्टल नक्शा बनाता है।

यदि यह मॉडल अच्छी तरह सीखे, तो उपयोगी होता है। डिजाइनर पहले से देखता है कि प्रक्रिया स्थितियां बदलने पर क्रिस्टल कैसे बदलेंगे। वास्तविक भाग बनाकर काटकर देखे बिना भी अनुमान लगाया जा सकता है। इससे समय और सामग्री काफी बचती है। कई स्थितियों की स्क्रीन पर तुलना कर अच्छी दशा चुनी जाती है।

वास्तव में क्रिस्टल नक्शा पाने में बहुत श्रम लगता है। भाग को काटकर सतह को बारीक घसिना पड़ता है। इलेक्ट्रॉन माइक्रोस्कोप से हर स्थान पर क्रिस्टल दशा पढ़नी पड़ती है। चौड़ी सतह पूरी पढ़ने में लंबा समय लगता है। जनरेटिव मॉडल इस धीमी प्रक्रिया को छोटा करने वाला सीधा रास्ता बनता है। बेशक, ऐसे सीधे रास्ते को कभी-कभी वास्तविक माप से लौटकर जांचना चाहिए।

सावधानी की बात भी है। जनरेटिव मॉडल देखने में विश्वसनीय चित्र अच्छी तरह बनाते हैं। लेकिन विश्वसनीय दिखना ही भौतिक सत्य नहीं है। चित्र सुंदर हो, फिर भी वास्तविकता से अलग हो सकता है। इसलिए क्रिस्टल दाने का आकार, दशा वितरण और चरणों का अनुपात जैसे भौतिक संकेतकों को साथ जांचा जाता है। ये संकेतक वास्तविकता से मेल खाएं, तभी चित्र पर भरोसा किया जा सकता है।

भौतिकी को हानिफिलन में डालने से भरोसा बढ़ता है। यदि बिनाए गए चित्र का क्रिस्टल आकार वास्तविक वितरण से हटे, तो दंड दिया जाता है। ऐसा करने से Generator को भौतिकी से मेल खाने वाला चित्र बनाने की ओर ले जाया जाता है। यह सुंदर चित्र और सही चित्र के बीच की दूरी घटाता है। जनरेटिव मॉडल को भी रॉकेट भागों में इस्तेमाल करने के लिए भौतिकी की कसौटी पर कसना पड़ता है।

6.4.3 निर्माण के दौरान क्रिस्टल आकार नियंत्रित करने वाला सुदृढीकरण अधिगम

अब निर्माण के दौरान क्रिस्टल आकार को स्वयं नियंत्रित करने की बारी है। सुदृढीकरण अधिगम (Reinforcement Learning) प्रयास और पुरस्कार से अच्छा व्यवहार सीखने की विधि है। यह बच्चे के गरिते-पड़ते चलना सीखने की प्रक्रिया जैसा है। अच्छा करने पर पुरस्कार दिया जाता है, और अच्छा न करने पर दंड दिया जाता है। अधिक पुरस्कार दिलाने वाले व्यवहार को धीरे-धीरे बढ़ाया जाता है।

एडिटिव मैन्युफैक्चरिंग में व्यवहार लेजर का समायोजन है। लेजर शक्ति कितनी बढ़ानी या घटानी है, और गति कितनी बदलनी है, यही व्यवहार है। हालांकि क्रिस्टल आकार निर्माण के दौरान सीधे नहीं देखा जा सकता। इसलिए उसके बदले मेल्ट पूल का तापमान और आकार देखा जाता है। इन मानों से क्रिस्टल आकार का अनुमान लगाया जाता है। पाइरोमेट्री यह अवस्था वास्तविक समय में बताती है।

पुरस्कार इस आधार पर तय किया जाता है कि लक्ष्य से दूरी कितनी है। वांछित क्रस्टिल आकार के जितना करीब हो, उतना बड़ा पुरस्कार दिया जाता है। समअक्षीय क्रस्टिल का अनुपात लक्ष्य तक पहुंचे, तो पुरस्कार बड़ा होता है। इसके विपरीत, कीहोल या संलयन की कमी बने, तो दंड दिया जाता है। इस पुरस्कार का पीछा करते हुए कृत्रिम बुद्धिमत्ता लेजर समायोजन सीखती है।

प्रतफल को कैसे बढ़ाया जाता है, इसी से सफलता और विफलता तय होती है। यदि प्रतफल बहुत ढीला बनाया जाए तो वह गलत राह पर चला जाता है। वह केवल क्रस्टिल के आकार का पीछा करते हुए ऊर्जा भी बर्बाद कर सकता है। इसलिए प्रतफल में क्रस्टिल का आकार, दोष और ऊर्जा तीनों को साथ रखा जाता है। यह कई लक्ष्यों को तराजू पर रखकर संतुलन बनाने जैसा है। इस तराजू को ठीक से बनाना सुदृढीकरण अधिगम के डिज़ाइन का मूल है।

ऐसे वास्तविक समय नियंत्रण की जरूरत क्यों है। क्योंकि प्रोजे का आकार हर जगह अलग होता है। कोने, पतली दीवारें और बाहर निकले भागों में ऊष्मा नकिलने की गति अलग होती है। लेजर की वही शर्तें देने पर भी जगह के अनुसार क्रस्टिल का आकार बदल जाता है। वास्तविक समय नियंत्रण हर जगह शर्तें बदलकर क्रस्टिल के आकार को समान रखने की कोशिश करता है।

यह दशा अभी उद्योग मानक नहीं है। समिलेशन और परीक्षण नमूने के स्तर पर प्रस्ताव अधिक है। वास्तविक समय में बंद लूप से क्रस्टिल के आकार को नियंत्रित करने के उदाहरण कम हैं। कारण यह है कि प्रक्रिया के दौरान क्रस्टिल का आकार तुरंत मापना कठिन है। सेंसर की देरी, मॉडल की त्रुटि और उपकरण की प्रतिक्रिया सीमा को भी साथ पार करना पड़ता है।

सुदृढीकरण अधिगम खतरनाक प्रयासों को पहले से अनुभव करने में मजबूत है। असली उपकरण पर खराब शर्तें आजमाने से प्रोजे फेंकना पड़ता है। कंप्यूटर के भीतर नकली प्रयोग में जितना चाहे उतना असफल हो सकते हैं। अनेक असफलताओं से अच्छा नियंत्रण पहले ही सीखा जाता है। सीखने के बाद उसे सुरक्षित सीमा के भीतर वास्तविक उपकरण पर सावधानी से ले जाया जाता है। मानो असफलता की कीमत कंप्यूटर ही चुका देता है।

इसलिए क्रम महत्वपूर्ण है। पहले समिलेशन में नियंत्रण सीखा जाता है। उसके बाद सीमा परीक्षण नमूनों में उसकी जांच की जाती है। सत्यापित प्रक्रिया सीमा के भीतर उसे सहायक उपकरण के रूप में इस्तेमाल किया जाता है। इन चरणों से गुजरने पर ही सुदृढीकरण अधिगम नियंत्रण को असली प्रोजे में सावधानी से लाया जा सकता है। क्रस्टिल का आकार बनाने के बाद EBSD से फेरि जांचा जाता है कि नियंत्रण सही था या नहीं।

6.5 ध्वनि से भीतर सुनने वाली दोष निगरानी

अब तक दोषों को प्रकाश से खोजा गया। लेकिन प्रकाश केवल सतह को देखता है। प्रोजे के भीतर गहराई में बनने वाली दरारों को कैमरे से पकड़ना कठिन है। यह खंड ध्वनि से भीतर सुनने की विधि को देखता है।

पहले देखते हैं कि दोष कैसी ध्वनि निकालते हैं। फिर देखते हैं कि उस ध्वनि को चित्र में कैसे बदला जाता है। अंत में देखते हैं कि ध्वनि और प्रकाश को साथ इस्तेमाल करके बेहतर निर्णय कैसे लिया जाता है। अलग-अलग इंद्रियों को जोड़ने से एक इंद्री से छूटी बात पूरी होती है।

6.5.1 ब्रॉडबैंड ध्वनिक उत्सर्जन (AE) संकेतों की भौतिक क्रियाविधि

ध्वनिक उत्सर्जन (Acoustic Emission; AE) वह ध्वनि है जो सामग्री के भीतर अचानक बदलाव होने पर निकलती है। ठीक कहे तो यह बहुत छोटी लोचदार तरंग है। यह उसी सिद्धांत जैसा है जिसमें कांच के प्याले में दरार पड़ते समय टकि जैसी आवाज आती है। यह लकड़ी के मुड़ते-मुड़ते टूटने पर चरमराने की आवाज जैसा भी है। सामग्री के भीतर की घटना ध्वनि बनकर बाहर रसिती है।

एडिटिव मैनुफैक्चरिंग में कई घटनाएं अपनी-अपनी अलग ध्वनि निकालती हैं। उच्च तापमान दरार एक क्षण में बड़ी ऊर्जा छोड़ती है। इसलिए वह ऊंची आवृत्ति की तीखी ध्वनि देती है। वह छोटी, अचानक फूटने वाली आवाज के करीब होती है। ऐसी ध्वनि का आयाम बड़ा होता है और वह अचानक उछलती है।

कीहोल के ढहने पर भी ध्वनि निकलती है। पघिले कुंड के भीतर खाली जगह अचानक धंसती है और आघात देती है। यह ध्वनि दरार की तुलना में कुछ कम आवृत्ति पर लगातार कांपती है। यह पानी के भीतर बुलबुला बैठने पर होने वाले डगमगाने जैसी है। ध्वनि की बनावट दरार से अलग होती है।

पाउडर उछलने या उपकरण के रगड़ खाने पर भी ध्वनि निकलती है। यह ध्वनि और कम आवृत्ति पर होती है। दोष न होने पर भी सामान्य शोर ध्वनि में मिला जाता है। इसलिए ध्वनि को सावधानी से छांटकर सुनना पड़ता है। दोष की ध्वनि और साधारण शोर को अलग करना मूल बात है।

हर ध्वनि की अलग बनावट होने का कारण है। बड़ी ऊर्जा अचानक मुक्त हो तो ऊंची आवृत्ति जुड़ती है। धीरे मुक्त हो तो कम आवृत्ति जुड़ती है। दरार पलक झपकते खुलती है, इसलिए ऊंची ध्वनि देती है। पाउडर का उछलना अपेक्षाकृत धीमा होता है, इसलिए कम ध्वनि देता है। लेकिन

वास्तव में पकड़ी जाने वाली आवृत्त सेसर, संचरण मार्ग और फिल्टर करने की पद्धति पर निर्भर करती है। इसलिए इस क्रम को किसी विशेष परीक्षण में देखी गई प्रवृत्त माना जाना चाहिए।

ध्वन से सुनने की वधि की बड़ी ताकत है। प्रकाश केवल सतह देखता है, लेकिन ध्वन भीतर से होकर आती है। एडिटिव रूप से बने शरीर की गहराई की दूर भी ध्वन से पकड़ी जा सकती है। दूर बनने के पहले ही क्षण को पहचान लिया जाए तो जल्दी प्रतिक्रिया दी जा सकती है। उसी जगह प्रक्रिया रोकी जाती है और उस भाग को चिह्नित कर फरि जांचा जाता है। लेजर दोबारा चलाकर पघिलाने वाली मरम्मत के बारे में भी सोचा जा सकता है। लेकिन दोबारा पघिलाना दूर को हमेशा खत्म नहीं करता। वह नई तापीय प्रतबिल और नई दूर भी बुला सकता है। सत्पापति मरम्मत प्रक्रिया और बस दोबारा पघिलाना अलग बातों के रूप में देखना चाहिए।

ध्वन सुनने की दो वधियाँ हैं। एक वधि पुरजे को छूने वाले पजोइलेक्ट्रिक सेसर से सुनना है। पजोइलेक्ट्रिक सेसर वह घटक है जो बल मिलने पर बजिली पैदा करता है। इसे पुरजे को सहारा देने वाली प्लेट पर लगाकर भीतर से आई लोचदार तरंग सुनी जाती है। दूसरी वधि हवा में फैलने वाली ध्वन को माइक्रोफोन से सुनना है। दोनों वधियों में ध्वन का रास्ता और आवृत्त अलग होती है।

6.5.2 समय-आवृत्त वेवलेट रूपांतरण

ध्वन संकेत को ज्यों का त्यों देखने पर नरिणय कठिन होता है। समय के साथ कंपन मात्र से यह जानना कठिन है कि कौन-सा दोष है। क्योंकि एक ही क्षण में कई ऊँचाइयों की ध्वनियाँ एक साथ चढ़ी होती हैं। कब कसि ऊँचाई की ध्वन हुई, यह साथ देखना पड़ता है। तभी दोष की उंगलियों की छाप पढ़ी जा सकती है।

वेवलेट ट्रांसफॉर्म (Wavelet Transform) यह काम करता है। यह वधि समय और आवृत्त को एक साथ चित्रित करने का तरीका है। यह ध्वन संकेत को एक ऐसे चित्र में बदल देती है जहाँ कृषैतजि अक्ष समय और लंबवत अक्ष पघि होती है। इस चित्र को स्केलोग्राम (Scalogram) कहा जाता है। यह एक संगीत स्कोर की तरह है जो समय और सुर को एक साथ दिखाता है।

यह चित्र हर दोष के लिए अलग पैटर्न बनाता है। दूर की तीखी ध्वन ऊँचे स्थान पर चमकीले बंदु के रूप में दिखती है। कीहोल का डगमगाना बीच के स्थान पर जुड़ी हुई आकृति के रूप में आता है। शोर नीचे धुंधला बछि रहता है। जब ध्वन चित्र बन जाती है तो आँखों से तुलना करना आसान होता है।

पैटर्न पढ़ते समय मदर वेवलेट को ठीक से चुनना पड़ता है। मदर वेवलेट एक छोटी तरंगरूप है जो ध्वन की तुलना का पैमाना बनती है। ध्वन की बनावट जैसी पैमाना तरंग इस्तेमाल करने पर पैटर्न साफ होता है। अलग बनावट का पैमाना इस्तेमाल करने पर पैटर्न धुंधला हो जाता है। उचित पैमाना चुनना भी पूर्व-प्रसंस्करण का हिस्सा है। उचित पैमाना चुनने पर ही साफ पैटर्न वाला चित्र मिलता है।

कृत्रिम बुद्धिमत्ता इस चित्र से पैटर्न सीखती है। फोटो पढ़ने वाला नयूरल नेटवर्क स्केलोग्राम पढ़ता है। अनेक उदाहरणों से सीखता है कि कौन-सा पैटर्न कसि दोष का है। सीखने के बाद वह नया चित्र देखकर दोष पहचानता है। ध्वन को चित्र में बदलने से दृश्य कृत्रिम बुद्धिमत्ता की शक्त ली जा सकती है।

हाल के शोध ने इस वधि से अच्छे परिणाम निकाले हैं। एक शोध ने केवल हवा में ध्वन और लेजर गति से कीहोल छदिर का अनुमान लगाया। माइक्रोफोन से पकड़ी ध्वन को स्केलोग्राम में बदलकर प्रक्षिण दिया गया। परिणाम की विश्वसनीयता बताने वाला मान 0.8 से ऊपर था। यह शोध एक अकादमिक पत्रिका में प्रकाशित परिणाम है। इसने दिखाया कि केवल ध्वन से भी आंतरिक दोषों का मल्लिसेकंड स्तर पर अनुमान लगाया जा सकता है।

ध्वन सुनने का एक लाभ कम लागत भी है। तेज कैमरे और सटीक एक्स-रे उपकरण महंगे और कठिन होते हैं। पजोइलेक्ट्रिक सेसर अपेक्षाकृत सस्ता और लगाना आसान होता है। कई सेसर लगाएँ तो यह भी अनुमान लगाया जा सकता है कि ध्वन कहां से आई। इसलिए ध्वन आधारित निगरानी को मैदान में व्यावहारिक मार्ग के रूप में ध्यान मलि रहा है।

कई सेसर से स्थान खोजने का सदिधांत सरल है। वही ध्वन हर सेसर तक अलग समय पर पहुंचती है। वह पास के सेसर तक पहले और दूर के सेसर तक बाद में पहुंचती है। इस आगमन समय के अंतर की तुलना करने पर ध्वन के स्थान का अनुमान लगाया जाता है। यह कई माइक्रोफोन तक पहुंचने के समय अंतर से दिशा पकड़ने जैसा है। इस तरह मलि स्थान बताता है कि दोष कहां है।

6.5.3 प्रकाश और ध्वन को साथ इस्तेमाल करने वाली दोष पहचान

मल्टीमॉडल (Multimodal) का अर्थ है कई प्रकार के डेटा को साथ इस्तेमाल करना। यह मनुष्य के आँख और कान साथ इस्तेमाल करने जैसा है। केवल ध्वन सुनने पर कुछ छूटता है, और केवल प्रकाश देखने पर भी कुछ छूटता है। दोनों को जोड़ने पर वे एक-दूसरे की कमी भरते हैं। यह खंड ध्वन और प्रकाश को जोड़ने की वधि देखता है।

प्रकाश और ध्वनि अलग चीजें देखते हैं। पाइरोमेट्री सतह का तापमान अच्छी तरह दिखाती है। ध्वनिक उत्सर्जन भीतर होने वाले अचानक बदलाव को पकड़ता है। सतह के तापमान की गड़बड़ी कैमरा पहले जानता है। भीतर की दरार ध्वनि पहले जानती है। दोनों संकेतों को जोड़ने पर सतह और भीतर को साथ देखा जाता है।

जोड़ने की वधि यह है। ध्वनि संकेत को ध्वनि-विशेष न्यूरल नेटवर्क पढ़ता है। प्रकाश छविको छवि-विशेष न्यूरल नेटवर्क पढ़ता है। दोनों न्यूरल नेटवर्क से निकली विशेषताओं को एक जगह इकट्ठा कर अंतिम निर्णय लिया जाता है। यानी प्रत्येक को उसका अच्छा काम सौंपा जाता है और नष्टिकर्ष में उनकी शक्ति जोड़ी जाती है।

वास्तविक शोध ने इस संयोजन की शक्ति दिखाई। एक शोध ने पाइरोमेट्री और ध्वनिको साथ इकट्ठा किया। दोनों संकेतों को जोड़कर कीहोल छद्मों को बेहतर पकड़ा गया। केवल एक संकेत इस्तेमाल करने की तुलना में छूटने वाले छद्म घटे। दरारों को भी इसी तरह साथ पकड़ना आगे का कार्य है।

जोड़ते समय सबसे महत्वपूर्ण बात समय मिलान है। ध्वनिक निकलने के क्षण और प्रकाश बदलने के क्षण को ठीक-ठीक मिलाना पड़ता है। समय बगड़ जाए तो अलग घटनाओं को एक ही घटना मान सकते हैं। इसलिए दोनों सेंसरों को बहुत सटीक रूप से समकालित किया जाता है। हर सेंसर का शोर अलग होता है, इसलिए पहले से साफ-सफाई का प्रसंस्करण भी चाहिए।

दो संकेतों को जोड़ने के भी कई तरीके हैं। एक तरीका है कि संकेतों को शुरू से मिलाकर साथ सीखाया जाए। दूसरा तरीका है कि वे अलग-अलग सीखें और केवल नष्टिकर्ष में जुड़ें। हाल के शोध अलग-अलग सीखी विशेषताओं को हल्के वर्गीकारक से जोड़ने की वधि अधिक इस्तेमाल करते हैं। इस वधि में गणना हल्की होती है और नए दोषों पर भी अच्छी तरह बैठती है। कौन-सी वधि अच्छी है, यह पुरजे और उपकरण पर निर्भर करता है।

कई इंद्रियों को जोड़ने की धारा आगे और फैलेगी। प्रकाश और ध्वनिको साथ लेजर का परावर्तन संकेत भी इस्तेमाल होगा। बनी हुई परत की तस्वीर और तापमान मानचित्र भी साथ इकट्ठे होंगे। कई आंखें और कान एक पुरजे को परत-दर-परत जांचेंगे। इंद्रियां जितनी अधिक होंगी, छूटने वाले दोष उतने कम होंगे। इन कई संकेतों को एक में परीना कृत्रिम बुद्धिमत्ता का काम है।

इस वधि की भी स्पष्ट सीमाएं हैं। कृत्रिम बुद्धिमत्ता के निर्णय को उत्पादन के दौरान चेतावनी और उम्मीदवार छांटने में इस्तेमाल करना सुरक्षित है। असली पास निर्णय गैर-वनिशकारी परीक्षण, कर्ष-सेक्शन अवलोकन और कंप्यूटर टोमोग्राफी से लिया जाता है। सेंसरों के बीच समय का फर्क और शोर भी गलत निर्णय बुला सकते हैं। कृत्रिम बुद्धिमत्ता मनुष्य को देखने की जगह सीमाति कर देने वाली मार्गदर्शक है।

सारांश

इस अध्याय ने रॉकेट पुरजों को धातु से परत-दर-परत बनाने की तकनीक देखी। लेजर से पाउडर पघिलाकर जमा करने की वधि और तार पघिलाकर जमा करने की वधि देखी गई। Inconel 718, GRCop-42 और C-103 तीन धातुओं के गुण और सावधानियां देखी गईं। हर धातु का मशिन अलग है, और बनाते समय नयित्ति करने वाली समस्याएं भी अलग हैं।

एडिटिव मैन्युफैक्चरिंग जितनी स्वतंत्रता देती है, उतना ही दोष का जोखिम भी देती है। कीहोल छद्मता और फ्यूजन की कमी थकान दरार की शुरुआत बनते हैं। अवशिष्ट प्रतबिल बड़े पुरजों को मोड़ देता है। क्रस्टिल दशा का झुकाव मजबूती को एक ओर झुका देता है। ये दोष सीधे इंजन की सुरक्षा से जुड़े हैं।

ये दोष आपस में उलझे हैं। लेजर की एक गलत शर्त कई दोषों को साथ बुलाती है। कीहोल से बचते हुए फ्यूजन की कमी भी आ सकती है। प्रतबिल घटाने की कोशिश में क्रस्टिल का आकार खराब भी हो सकता है। इसलिए केवल एक दोष देखकर शर्तें नहीं बदलनी चाहिए। कई दोषों को साथ तराजू पर रखकर संतुलन खोजना चाहिए।

कृत्रिम बुद्धिमत्ता इस समस्या में तीन दशाओं से मदद करती है। एक काम है बनाने के दौरान दोषों को जल्दी खोजना। भौतिक नियमों को पाइरोमेट्री छवि में डालने वाला मॉडल छद्मों को पहचानता है। ध्वनिको चित्र में बदलकर पढ़ने वाला मॉडल भीतरी दरार पकड़ता है। प्रकाश और ध्वनिको जोड़ने पर सतह और भीतर को साथ देखा जाता है।

अगला काम धीमी गणना की जगह तापीय प्रतबिल और वक्तिका तेज पूर्वानुमान करना है। सरोगेट मॉडल कई दनि लगने वाले विश्लेषण को छोटा कर देता है। इस तेज पूर्वानुमान से असंख्य प्रक्रिया शर्तों को पहले से छांटा जाता है। भौतिकी को जोड़ने पर पूर्वानुमान भौतिकी से बाहर नहीं जाता।

अंतिम काम प्रक्रिया शर्तों को समय-समय पर बदलने में मदद करना है। स्कैन पथ और शीतलन समय को नयित्ति कर वक्तिका घटाई जाती है। लेजर को नयित्ति कर क्रस्टिल का आकार समान रखा जाता है। जेनरेटिव मॉडल शर्तों से क्रस्टिल का आकार पहले से खींचकर दिखाता है। सुदृढीकरण अधिगम बनाने के दौरान स्वयं शर्तों को नयित्ति करता है।

एक बात स्पष्ट कर देनी चाहिए। कृत्रिम बुद्धिमत्ता सभी नरीक्षणों की जगह नहीं ले सकती। इस अध्याय में देखे गए कई मॉडल तेज और चतुर हैं, लेकिन पूर्ण नहीं हैं। प्रारंभिक शोध अधिक है, और उद्योग मानक के रूप में जमे उदाहरण कम हैं। कृत्रिम बुद्धिमत्ता के नरीण्य को चेतावनी और उम्मीदवार छांटने में इस्तेमाल करना सुरक्षित है। अंतिम गुणवत्ता आश्वासन परीक्षण नमूनों, गैर-वनिशकारी परीक्षण और दहन परीक्षण के साथ मलिकर बनता है।

भाषा मॉडल इस्तेमाल करने की नई धारा भी है। एडिटिवि मैन्युफैक्चरिंग में शोधपत्र और रपिपोर्टों का पहाड़ जमा है। बड़ा भाषा मॉडल (Large Language Model; LLM) इन लेखों को पढ़कर ज्ञान व्यवस्थित करता है। पूछा जा सकता है कि किस शर्त में कौन-सा दोष अधिक बनता है। 2025 के एक शोध ने भाषा मॉडल से दोष शर्तों का अनुमान लगाने का प्रयास किया। ऐसे उपकरण मनुष्य के अनुभव और साहित्य के बीच पुल बनते हैं।

बड़ी तस्वीर यह है। सेंसर आंख और कान बनते हैं, सरोगेट मॉडल दमिग बनता है, और नरियंत्रक हाथ बनता है। ये तीनों एक में जुड़ जाएं तो कारखाना पुरजे को स्वयं देखते हुए बनाता है। NASA ने बड़े नोजल को बनाकर लंबे दहन परीक्षण झेले, यह उसका प्रारंभ बट्टि है। अगले अध्याय में ऐसे बने पुरजों को परष्कृत करने और यह परखने की वधिदिखी जाएगी कि वे लंबे समय तक टकिंगे या नहीं।

संबंधति आधार-सामग्री

- DebRoy, T., Wei, H. L., Zuback, J. S., Mukherjee, T., Elmer, J. W., Milewski, J. O., Beese, A. M., Wilson-Heid, A., De, A., & Zhang, W. (2018). Additive manufacturing of metallic components: Process, structure and properties. *Progress in Materials Science*, 92, 112-224. <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2017.10.001>
- King, W. E., Barth, H. D., Castillo, V. M., Gallegos, G. F., Gibbs, J. W., Hahn, D. E., Kamath, C., & Rubenchik, A. M. (2014). Observation of keyhole-mode laser melting in laser powder-bed fusion additive manufacturing. *Journal of Materials Processing Technology*, 214, 2915-2925. <https://doi.org/10.1016/j.jmatprotec.2014.06.005>
- Rosenthal, D. (1946). The theory of moving sources of heat and its application to metal treatments. *Transactions of the ASME*, 68, 849-866.
- Hunt, J. D. (1984). Steady state columnar and equiaxed growth of dendrites and eutectic. *Materials Science and Engineering*, 65, 75-83. [https://doi.org/10.1016/0025-5416\(84\)90201-5](https://doi.org/10.1016/0025-5416(84)90201-5)
- Mukherjee, T., Manvatkar, V., De, A., & DebRoy, T. (2017). Mitigation of thermal distortion during additive manufacturing. *Scripta Materialia*, 127, 79-83. <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2016.09.001>
- Gradl, P. R., Protz, C. S., Cooper, K., Ellis, D., Evans, L. J., & Garcia, C. (2019). GRCop-42 Development and Hot-fire Testing Using Additive Manufacturing Powder Bed Fusion for Channel-cooled Combustion Chambers. *AIAA Propulsion and Energy 2019 Forum*. <https://doi.org/10.2514/6.2019-4228>
- Gradl, P., Mireles, O. R., Katsarelis, C., Smith, T. M., Sowards, J., Park, A., et al. (2023). Advancement of extreme environment additively manufactured alloys for next generation space propulsion applications. *Acta Astronautica*, 211, 483-497. <https://doi.org/10.1016/j.actaastro.2023.06.035>
- NASA. (2023). Rapid Analysis and Manufacturing Propulsion Technology (RAMPT). <https://www.nasa.gov/rapid-analysis-and-manufacturing-propulsion-technology/>
- NASA. (2023). GRCop-42 additive manufacturing for high heat flux thrust chamber liners (Document ID 20230007103). NASA Technical Reports Server. <https://ntrs.nasa.gov/citations/20230007103>
- NIST. (2024). Additive Manufacturing Benchmark Test Series (AM Bench). National Institute of Standards and Technology. <https://www.nist.gov/ambench>
- NIST. (2022). AM Bench 2022 measurement results data: in-situ thermography and scan strategy laser scans. National Institute of Standards and Technology. <https://www.nist.gov/data-publications/am-bench-2022-measurement-result-s-data-situ-thermography-and-scan-strategy-laser>
- Levine, L. E., Lane, B. M., Heigel, J. C., et al. (2024). Outcomes and conclusions from the 2022 AM Bench measurements, challenge problems, and conference. *Integrating Materials and Manufacturing Innovation*, 13, 154-193. <https://doi.org/10.1007/s40192-024-00372-4>
- Aydogan, B., & Chou, K. (2024). Review of in situ detection and ex situ characterization of porosity in laser powder bed fusion metal additive manufacturing. *Metals*, 14(6), 669. <https://doi.org/10.3390/met14060669>
- Chen, L., Bi, G., Yao, X., Su, J., Tan, C., Feng, W., Benakis, M., Chew, Y., & Moon, S. K. (2024). In-situ process monitoring and adaptive quality enhancement in laser additive manufacturing: a critical review. *arXiv:2404.13673*. <https://arxiv.org/abs/2404.13673>
- Emmanuel, I., Yang, Z., Yeung, H., & Zhang, X. (2026). Machine learning modeling for real-time melt pool monitoring in laser powder bed fusion additive manufacturing: a hybrid approach. *arXiv:2606.23851*. <https://arxiv.org/abs/2606.23851>

- Liu, H., Guirguis, D., Zeng, X., Maurer, L., Rajan, V., Sanaei, N., Yang, C.-T., Beuth, J. L., Rollett, A. D., & Kara, L. B. (2026). Airborne acoustic emission enables sub-scanline keyhole porosity quantification and effective process characterization for metallic laser powder bed fusion. *Additive Manufacturing*, 116, 105062. <https://doi.org/10.1016/j.addma.2025.105062>
- Tian, M., Mu, H., Ding, D., Li, M., Ding, Y., & Zhao, J. (2025). Real-time distortion prediction in metallic additive manufacturing via a physics-informed neural operator approach. *arXiv:2511.13178*. <https://arxiv.org/abs/2511.13178>
- Zhang, R., Strickland, J., Hou, X., Yang, F., Li, X., de Oliveira, J. A., Li, J., & Zhang, S. (2025). Rapid residual stress simulation and distortion mitigation in laser additive manufacturing through machine learning. *Additive Manufacturing*, 102, 104721. <https://doi.org/10.1016/j.addma.2025.104721>
- Bostan, B., Hinnebusch, S., Anderson, D., & To, A. C. (2025). Accurate detection of local porosity in laser powder bed fusion through deep learning of physics-based in-situ infrared camera signatures. *Additive Manufacturing*, 101, 104701. <https://doi.org/10.1016/j.addma.2025.104701>
- Giri, S., Liu, S., Gorgannejad, S., Thampy, V., Quan, P., Nicolino, J. W., Strantza, M., Forien, J.-B., Martin, A. A., Calta, N. P., & Tassone, C. J. (2026). In-situ sensor monitoring of multi-class gas porosity formation in laser powder bed fusion using convolutional neural network. *Journal of Intelligent Manufacturing*. <https://doi.org/10.1007/s10845-026-02861-z>
- Zhang, H., Caputo, A. N., Neu, R. W., Vallabh, C. K. P., To, A. C., Alam, M. J., & Zhao, X. (2026). Process-agnostic multi-metric nondestructive characterization of porosity in additive manufacturing via specialized single-camera two-wavelength pyrometry. *Additive Manufacturing*, 127, 105282. <https://doi.org/10.1016/j.addma.2026.105282>
- Tempelman, J. R., Wachtor, A. J., Flynn, E. B., Depond, P. J., Forien, J.-B., Guss, G. M., Calta, N. P., & Matthews, M. J. (2022). Sensor fusion of pyrometry and acoustic measurements for localized keyhole pore identification in laser powder bed fusion. *Journal of Materials Processing Technology*, 308, 117656. <https://doi.org/10.1016/j.jmatprotec.2022.117656>
- Li, Z., Zheng, H., Zhang, Z., Wang, J., Wen, G., Grasso, M., & Colosimo, B. M. (2026). On the use of acoustic emission methods for in-situ monitoring in metal additive manufacturing: a review study. *Additive Manufacturing Frontiers*, 5(2), 200347. <https://doi.org/10.1016/j.amf.2026.200347>
- Brooke, R., Zhang, D., Qiu, D., Gibson, M. A., & Easton, M. (2025). Compositional criteria to predict columnar to equiaxed transitions in metal additive manufacturing. *Nature Communications*, 16, 5710. <https://doi.org/10.1038/s41467-025-60162-0>
- Prabhune, B., Panicker, N., Jordan, B., Lim, B., Snyder, K., Delchini, M., See, N. D., Nag, S., Plotnikov, Y., & Lee, Y. (2025). Multi-physics melt pool modeling and process optimization for laser direct energy deposition of Nb-based refractory C103. *Journal of Manufacturing Processes*, 154, 444-461. <https://doi.org/10.1016/j.jmapro.2025.09.082>
- Jeong, W., Cho, S., & Ryu, H. J. (2025). Optimization and characterization of C103 Nb alloy fabricated by laser wire directed energy deposition. *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials*, 133, 107318. <https://doi.org/10.1016/j.ijrmhm.2025.107318>
- Xu, Z. Y., Mao, J. Y., Ren, R. X., Wu, Z. Q., Lei, Y. J., Han, L. L., Chen, C., Fan, W., & Wang, Y. (2026). Research progress and challenges of intelligent in situ monitoring for laser additive manufacturing processes based on machine learning. *Advances in Mechanical Engineering*. <https://doi.org/10.1177/16878132261442327>
- Pak, P., & Barati Farimani, A. (2025). AdditiveLLM: Large Language Models Predict Defects in Metals Additive Manufacturing. *arXiv:2501.17784*. <https://arxiv.org/abs/2501.17784>

अध्याय 7. 3D प्रटिड एयरोस्पेस मशीन धातुओं की पोस्ट-प्रोसेसिंग और उच्च-चक्र थकान आयु की गारंटी

प्रस्तावना

घर में इस्तेमाल होने वाले 3D प्रिटर की कल्पना करें। वह प्लास्टिक धागे को पघिलाकर परत दर परत चढ़ाता है और वस्तु बनाता है। रॉकेट इंजन के पुरजे भी मलिते-जुलते तरीके से बनते हैं। फर्क यह है कि सामग्री प्लास्टिक नहीं, बल्कि धातु पाउडर होती है। लेजर धातु पाउडर को पल भर में पघिलाता है और परत दर परत जमाता है। इस तरह जटिल आकार को एक ही बार में पूरा निकाला जा सकता है।

इस तरीके ने रॉकेट पुरजों के निर्माण को बहुत बदल दिया है। पहले कई टुकड़े अलग-अलग बनाए जाते थे और उन्हें वेल्डिंग से जोड़ा जाता था। अब भीतर शीतलन मार्ग वाले पुरजे भी एक बार में बनाए जाते हैं। पुरजों की संख्या घटती है और वजन हल्का होता है। कई टुकड़ों को जोड़ने की प्रक्रिया खत्म होती है, इसलिए बनाने का समय भी घटता है।

लेकिन एक समस्या है। प्रिटर से अभी निकली धातु को ज्यों का त्यों रॉकेट में नहीं लगाया जा सकता। उसकी बाहरी सतह खुरदरी होती है, और भीतर छोटे छेद रह जाते हैं। आंख से न देखिने वाला तनाव भी अंदर बंद रहता है। इस हालत में उसे तेज गति से चलाया जाए तो पुरजा टूटने का खतरा रहता है।

इसलिए छपाई के बाद की सफाई और सुधार जरूरी है। इस सुधार को पोस्ट-प्रोसेसिंग कहते हैं। सतह को काटकर चिकना बनाया जाता है। गर्मी और दबाव से भीतर के छेद मटिआ जाते हैं। ऊष्मा उपचार से सूक्ष्म संरचना को समान बनाया जाता है। यह अध्याय सतह को समतल करने से लेकर भीतर की खराबियां हटाने तक पोस्ट-प्रोसेसिंग प्रक्रिया को क्रम से समझाता है।

रसोई में सख्त मांस काटने का दृश्य सोचें। मुलायम टोफू में चाकू आसानी से गुजर जाता है। सख्त मांस में चाकू आसानी से नहीं घुसता। रॉकेट के लिए इस्तेमाल होने वाली सुपरमशीन धातु सख्त मांस जैसी होती है। उसे काटना बहुत कठिन होता है। काटने में कठिन इस गुण को कठिन-मशीनीयता कहते हैं।

एक और बड़ी चिंता है। वह है थकान। थकान वह घटना है जिसमें छोटा बल बार-बार लगने से सामग्री टूट जाती है। कागज की क्लिप को कई बार मोड़ें और सीधा करें तो वह टूट जाती है। एक बार में बड़ा बल नहीं लगाया गया, फिर भी वह टूटती है। रॉकेट टर्बोपंप के घूमने वाले ब्लेड इसी खतरे में रहते हैं।

इस अध्याय में हम देखते हैं कि कृत्रिम बुद्धिमत्ता दो कामों में कैसे मदद करती है। पहला काम कठिन कटाई वाली धातु को ठीक से काटने की शर्तें खोजना है। दूसरा काम पहले से जानना है कि पुरजा कतिनी बार दोहराए गए भार को सह सकेगा। दोनों काम केवल मनुष्य के अनुभव से करने में बहुत समय लगता है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता डेटा से सीखकर उत्तर की सीमा जल्दी संकरी करती है।

हालांकि कृत्रिम बुद्धिमत्ता सब कुछ तय नहीं करती। रॉकेट पुरजों से मनुष्य का जीवन और बहुत बड़ी लागत जुड़ी होती है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता की भविष्यवाणी को प्रयोग और नरीक्षण से फरि जांचना पड़ता है। यह अध्याय बताता है कि कृत्रिम बुद्धिमत्ता और प्रयोग एक-दूसरे की जांच करते हुए साथ कैसे काम करते हैं।

इस अध्याय को पढ़ने के बाद दो बातें देखेंगी। एक यह कि 3D प्रिंटिंग धातु को सुधार की जरूरत क्यों होती है। दूसरी यह कि कृत्रिम बुद्धिमत्ता उस सुधार और जांच में कैसे मदद करती है। कठिन सूत्रों का इस्तेमाल नहीं किया जाएगा। रोजमर्रा के उदाहरणों से एक-एक बात समझाई जाएगी। धीरे-धीरे साथ चले तो इस अध्याय की पूरी तस्वीर आसानी से समझ में आ जाएगी।

7.1 3D प्रिंटिंग की ओर बढ़ते रॉकेट पुरजे और नई चुनौतियां

पहले यह समझते हैं कि इस खंड में क्या चर्चा होगी। रॉकेट इंजन का मुख्य भाग बहुत कठोर जगह होता है। एक ओर शून्य से 200 डिग्री से भी कम तापमान वाला अति-शीत ईंधन बहता है। दूसरी ओर सैकड़ों डिग्री से अधिक गर्म गैस गुजरती है। दबाव भी उंचा होता है और कंपन भी बड़ा होता है। ऐसे स्थानों में इस्तेमाल होने वाली धातु को 3D प्रिंटिंग से क्यों बनाया जाता है, और उस समय कौन सी कमजोरियां पैदा होती हैं, यह खंड इन्हीं बातों को देखता है।

रॉकेट इंजन के पुरजे हल्के और मजबूत होने चाहिए। यदि वजन अधिक होगा तो ले जाया जा सकने वाला भार कम हो जाएगा। यदि ताकत कम होगी तो वे उच्च दबाव को सहन नहीं कर पाएंगे। ये दोनों आवश्यकताएं आपस में टकराती हैं। ऐसा इसलिए है क्योंकि हल्का बनाने पर उनके कमजोर होने की संभावना बढ़ जाती है। एडिटिव मैन्युफैक्चरिंग (Additive Manufacturing, AM) ने इस समस्या को हल करने का मार्ग खोल दिया है।

पुनर्योजी शीतलन दहन कक्ष इसका अच्छा उदाहरण है। दहन कक्ष की दीवार गर्म लौ से सटी रहती है। उसे वैसे ही छोड़ दिया जाए तो दीवार पघिल जाती है। इसलिए दीवार के भीतर पतले शीतलन मार्ग बनाए जाते हैं। ठंडा ईंधन उन मार्गों से गुजरते हुए दीवार को ठंडा करता है। दीवार के भीतर छपि ऐसे मार्गों वाली संरचना पुराने तरीके से बनाना कठिन है। ऐडिटिवि मैनुफैक्चरिंग ऐसी जटिल आंतरिक संरचना को एक बार में बनाती है।

पुरजों को बनाने की प्रमुख तकनीक लेजर पाउडर बेड फ्यूजन (Laser Powder Bed Fusion, LPBF) है। पतली परत में बछियाए गए धातु के पाउडर के ऊपर से लेजर गुजरती है। जसि स्थान पर लेजर पड़ती है, वह तुरंत पघिलकर शीघ्र ही जम जाता है। उसके ऊपर फिर से पाउडर बछियाया जाता है और लेजर दागी जाती है। इस प्रक्रिया को हजारों बार दोहराकर पुरजे को परत-दर-परत तैयार किया जाता है।

रॉकेट के पुरजों में व्यापक रूप से इस्तेमाल की जाने वाली धातु नर्किल-आधारित सुपरअलॉय (superalloy) है। सुपरअलॉय एक विशेष धातु है जो उच्च तापमान पर भी अपनी ताकत नहीं खोती है। इसका प्रतिनिधि पदार्थ इनकोनेल 718 (Inconel 718) है। इसके अलावा हेन्स (Haynes) श्रृंखला के मशिर धातुओं का भी उपयोग किया जाता है। ये धातुएं गर्म गैसों के बीच भी लंबे समय तक टिकी रहती हैं।

समस्या लेजर से पघिली धातु की अंदरूनी हालत में है। जसि जगह से लेजर गुजरता है, वह बहुत तेजी से ठंडी होती है। यह इतनी तेजी से ठंडी होती है कि 1 सेकंड में तापमान लाखों डिग्री तक घट सकता है। इतनी जल्दी ठंडा होने पर सूक्ष्म संरचना समान रूप से नहीं जमती। जमाने की दशा में क्रिस्टल लंबे आकार में बढ़ते हैं। इन लंबे क्रिस्टलों को स्तंभीय दाने (columnar grain) कहते हैं।

दशा के अनुसार गुण बदलने की घटना भी पैदा होती है। इसे अनिसोट्रॉपी (anisotropy) कहते हैं। इसे लकड़ी से समझना आसान है। लकड़ी को रेशे की दशा में चीरे तो वह आसानी से फटती है। रेशे के आर-पार काटे तो अधिक बल लगता है। ऐडिटिवि धातु में भी हर दशा में मजबूती अलग होती है। यह गुण पुरजे की डिजाइन और मशीनगि को कठिन बनाता है।

तेज शीतलन दूसरे नशान भी छोड़ता है। सर्दियों में जमे कांच के कप में गर्म पानी डाले तो दरार पड़ जाती है। कारण यह है कि भीतर और बाहर अलग-अलग गति से फैलते हैं। ऐडिटिवि धातु के भीतर भी ऐसा ही होता है। हर जगह जमने की गति अलग होती है। इसलिए पुरजे के भीतर बल बंद हो जाता है। इस बंद बल को अवशेषित तनाव (residual stress) कहते हैं।

इसके साथ ही घटकों का पृथक्करण भी जुड़ जाता है। जब पघिली हुई धातु जमती है, तो कुछ वशिष्ट तत्व एक तरफ जमा हो जाते हैं। इनकोनेल 718 में नायोबियम (Nb) तत्व जमा हो जाता है। इस स्थान पर कठोर कण बनते हैं। इन कणों को लेवेस चरण (Laves phase) कहा जाता है। लेवेस चरण आधार धातु की तुलना में बहुत अधिक कठोर और आसानी से टूटने वाला होता है।

इन अंदरूनी कारणों से दो चुनौतियां पैदा होती हैं। पहली यह कि उसे काटना कठिन होता है। कठोर कण कटाई औजार को नुकसान पहुंचाते हैं। दूसरी यह कि भीतर के छेद थकान दरार के बीज बनते हैं। तेज गति से घूमने वाले पुरजों में ये बीज खतरनाक होते हैं। इसलिए आगे के खंडों में इन दोनों चुनौतियों को क्रम से समझाया जाएगा।

ऐडिटिवि मैनुफैक्चरिंग के रॉकेट उद्योग में तेजी से जगह बनाने का कारण है। इससे एक पुरजा बनाने का समय बहुत घटता है। पहले कास्टिंग मोल्ड बनाने में ही कई महीने लग जाते थे। ऐडिटिवि मैनुफैक्चरिंग बिना मोल्ड के सीधे पुरजा परतों में बनाती है। डिजाइन बदलने पर अगले दिन नया पुरजा निकाला जा सकता है। इस तरह डिजाइन और निर्माण को छोटे चक्रों में दोहराया जा सकता है, इसलिए विकास की गति तेज होती है।

वजन घटाने की इसकी क्षमता भी बड़ी है। कई टुकड़ों को एक में मिला दे तो जोड़ खत्म हो जाते हैं। जोड़ भारी होते हैं और कमजोर स्थान बनना आसान होता है। जोड़ हटाने पर पुरजा हल्का और मजबूत होता है। इसलिए रॉकेट कंपनियों इस तकनीक में बड़ा निवेश करती हैं। अमेरिकी अंतरिक्ष एजेंसी भी ऐडिटिवि दहन कक्षों का लंबे समय से परीक्षण करती आई है।

पोस्ट-प्रोसेसिंग में ऊष्मा उपचार जरूर शामिल होता है। ऊष्मा उपचार धातु को गर्म करके और ठंडा करके उसकी सूक्ष्म संरचना बदलने का काम है। पहले ऊंचे तापमान पर गर्म करके कठोर कणों को आधार में घोला जाता है। इस चरण को सॉल्यूशन ट्रीटमेंट कहते हैं। इसके बाद उचित तापमान पर लंबे समय तक रखकर मजबूत करने वाले कणों को समान रूप से बढ़ाया जाता है। इस चरण को एजिंग कहते हैं। इन दोनों चरणों के बाद ही सुपरमशिर धातु अपनी पूरी ताकत देती है।

संक्षेप में, ऐडिटिवि मैनुफैक्चरिंग बड़े लाभ और नई चुनौतियों साथ लेकर आई है। लाभ हैं जटिल आकार और तेज निर्माण। चुनौतियां हैं खुरदरी सतह और भीतर की खराबियां। इन चुनौतियों को हल करने की कुंजी पोस्ट-प्रोसेसिंग और निरीक्षण है। और कृत्रिम बुद्धिमत्ता पूरी पोस्ट-प्रोसेसिंग और निरीक्षण प्रक्रिया में साथ रहकर मदद करती है।

7.2 ऐडिटिवि तरीके से बनी सुपरमश्रि धातु को काटना कठनि क्यों है

पहले यह समझते हैं कि इस खंड में क्या चर्चा होगी। कठनि-मशीनीयता काटने में कठनि गुण को कहते हैं। ऐडिटिवि तरीके से बनी सुपरमश्रि धातु पहले से ही कठनि कटाई वाली धातु को और कठनि बना देती है। ऐसा क्यों होता है, इसे तीन कारणों में बांटकर देखा जाएगा। ये हैं क्रस्टिल संरचना की दशात्मकता, बंद तनाव और वर्क हार्डनिंग, और औजार के घसिने की प्रक्रिया।

7.2.1 दशा के अनुसार बदलने वाली क्रस्टिल संरचना

इस उपशीर्षक में क्रस्टिल संरचना की दशात्मकता का कटाई पर असर समझाया गया है। पहले कहा गया था कि स्तंभीय दाने जमाने की दशा में लंबे बढ़ते हैं। अब वसितार से देखते हैं कि यह संरचना कटाई को कठनि क्यों बनाती है। और कठोर Laves फेज औजार पर क्या आघात डालता है, यह भी देखा जाएगा।

धातु छोटे क्रस्टिलों से मलिकर बनती है। हर क्रस्टिल में परमाणु नियम के अनुसार पंक्तबिद्ध होते हैं। क्रस्टिल कसि दशा में खड़ा है, यही गुणों को तय करता है। ऐडिटिवि धातु में क्रस्टिल एक दशा में झुके होते हैं। जमाने की दशा के साथ क्रस्टिल लंबे बढ़ते हैं, इसलिए हर दशा में गुण बदल जाते हैं।

जब कटाई औजार इस संरचना से गुजरता है, तो प्रतरीध बदलता है। क्रस्टिल की दशा और धार की दशा के मलिने का कोण हर जगह अलग होता है। कोई जगह मुलायम ढंग से कटती है। कोई जगह जोर से रोकती है। इसलिए कटाई बल नियमिति रूप से ऊपर-नीचे होता है। बल समान न हो तो मशीनगि अस्थिर होती है और सतह भी असमान बनती है।

यह उतार-चढ़ाव औजार पर दोहराया आघात डालता है। आघात जमा हो तो धार धीरे-धीरे खराब होती है। कंपन भी बढ़ता है। इस कंपन को चैटर (chatter) कहते हैं। चैटर अधिक हो तो सतह पर लहरदार नशान रह जाते हैं। सटीक पुरजों में ऐसे नशान बड़ी खराबी बन जाते हैं।

इसके साथ कठोर कण समस्या को बढ़ाते हैं। इंकोनेल 718 के जमते समय नायोबियम क्रस्टिल सीमाओं पर जमा होता है। उस जगह प्लेट जैसे या ढेले जैसे Laves फेज बनते हैं। ये कण आधार धातु से कहीं अधिक कठोर होते हैं, फरि भी आसानी से टूटने का गुण रखते हैं।

जब कटाई औजार इन कठोर कणों से टकराता है तो क्या होता है। यह मुलायम मट्टी में मलि कंकड़ों पर चाकू चलाने जैसा है। धार में छोटे-छोटे दांत टूट जाते हैं। ऐसी सूक्ष्म टूट-फूट लगातार जमा हो तो अंत में औजार की धार कुंद होकर घसि जाती है।

इस समस्या को हल करने के लिए पहले संरचना को समान बनाना होगा। आगे समझाया जाने वाला ऊष्मा उपचार यही भूमिका नभिता है। ऊष्मा उपचार कठोर कणों को घोलकर आधार के भीतर वापस भेजता है। लंबे स्तंभीय दानों को भी कुछ अधिक गोल बनाता है। तब दशा के अनुसार गुण बदलने की मात्रा घटती है।

संरचना का यह अंतर सीधे पुरजे के प्रदर्शन से जुड़ता है। दशा के अनुसार मजबूती अलग हो तो डिजाइन कठनि हो जाती है। पुरजे को ऐसी दशा में रखना पड़ता है कि कमजोर दशा से बचा जा सके। संरचना समान बनाने पर यह चिता घटती है। इसलिए पोस्ट-प्रोसेसगि केवल मशीनगि ही नहीं, प्रदर्शन को भी बेहतर बनाती है।

कृत्रमि बुद्धमिता इस संरचना की जानकारी को भवषियवाणी में शामिल करती है। क्रस्टिल कसि दशा में हैं और कठोर कण कतिने हैं, ये इनपुट बनते हैं। इन मूल्यों के आधार पर वह सीखती है कि कटाई प्रतरीध कैसे बदलेगा। मनुष्य के लिए हर संरचना-चित्र को आंख से देखना कठनि है। कृत्रमि बुद्धमिता बहुत से चित्र जल्दी पढ़कर नियम खोजती है।

क्रस्टिल की दशा वशिष उपकरण से मापी जाती है। नमूने की सतह पर इलेक्ट्रॉन बीम डाली जाए तो हर क्रस्टिल से अलग पैटर्न निकलता है। इस पैटर्न से पता चलता है कि हर क्रस्टिल कसि ओर है। यह दशा-सूचना कृत्रमि बुद्धमिता के लिए अच्छा इनपुट बनती है। मनुष्य के लिए दशाओं को आंख से गनिना कठनि है। मशीन असंख्य क्रस्टिलों की दशाएं एक बार में पढ़ती है।

जमाने का कोण भी गुणों को बदलता है। पुरजे को खड़ा करके जमाया गया या लटिकर, इसके अनुसार संरचना बदलती है। वही ड्राइंग हो, फरि भी रखने की दशा अलग हो तो मजबूती अलग होती है। इसलिए डिजाइन चरण से ही जमाने की दशा तय की जाती है। यह कोण भी मशीनगि-योग्यता और थकान को प्रभावति करता है। कृत्रमि बुद्धमिता कोण को चर के रूप में शामिल कर उसका प्रभाव सीखती है।

हालांकि संरचना हर पुरजे में थोड़ी अलग होती है। समान सेटगि से बनाने पर भी जगह-जगह अंतर रहता है। लेजर की छोटी डगमगाहट और पाउडर के आकार का अंतर यह वचिलन बनाते हैं। इसलिए मॉडल की भवषियवाणी में भी डगमगाहट रहती है। इस डगमगाहट को कैसे संभाला जाता है, इसे आगे के खंड में वसितार से देखा जाएगा।

7.2.2 बंद तनाव और काटने पर और कठोर होने वाला गुण

इस उपशीर्षक में बंद तनाव और वर्क हार्डनिंग को समझाया गया है। पहले कहा गया था कि ऐडिटिव धातु के भीतर बल बंद रहता है। यह बंद बल काटते समय कौन सी समस्या पैदा करता है, इसे देखा जाएगा। और सुपरमशिर धातु का काटते समय और कठोर होने वाला गुण भी देखा जाएगा।

पहले अवशेषित तनाव को फरि समझते हैं। पुरजे के भीतर कई दशियों में बल बंद रहता है। इस बल के समूह को टेसर नाम के गणतीय डबिबे से दिखाया जाता है। टेसर को कई दशियों के मूल्यों को साथ रखने वाली तालिका समझ सकते हैं। यह आंख से नहीं देखता, लेकिन पुरजे के भीतर एक-दूसरे को धकेलता और खींचता है।

यह बंद बल काटने के क्षण समस्या दिखाता है। सतह काटकर हटाने पर उस जगह का बल मुक्त होता है। तब बचा हुआ भाग संतुलन खो देता है। पतला ब्लेड या छल्ले के आकार का पुरजा मुड़ जाता है। सटीक माप मिलाने की कोशिश में उलटे आकार बगिड़ जाता है। इसलिए किस सतह को पहले काटना है, इसका क्रम भी पहले से तय करना पड़ता है।

अगला है वर्क हार्डनिंग (work hardening)। वर्क हार्डनिंग वह गुण है जिसमें धातु जतिनी विकृत होती है, उतनी और कठोर हो जाती है। तार को कई बार मोड़ें तो वह जगह कड़ी हो जाती है। सुपरमशिर धातु में यह गुण मजबूत होता है। धार के आगे की पतली परत पल भर में और कठोर हो जाती है।

तब औजार को उस परत को फरि से काटना पड़ता है जो अभी-अभी कठोर हुई है। इसमें अधिक बल लगता है। गर्मी भी अधिक पैदा होती है। इनकोनेल 718 ऐसा धातु है जो ऊष्मा को अच्छी तरह बाहर नहीं निकाल पाता। इसकी ऊष्मा चालकता सामान्य इस्पात के लगभग एक तह्माई स्तर तक ही रहती है। इसलिए बाहर न निकल सकी ऊष्मा धार और पुरजे के बीच जमा होती है और तापमान को और बढ़ाती है।

सुदृढ़ीकरण फेज भी औजार के लिए कठिनाई पैदा करता है। इनकोनेल 718 के भीतर बहुत छोटे सुदृढ़ीकरण कण फैले होते हैं। इस मशिर धातु के मुख्य सुदृढ़ीकरण कण नियोबियम वाले गामा डबल-प्राइम (γ'' , Ni₃Nb) हैं। ये कण धातु को मजबूती से थामे रखते हैं। ऊँचे तापमान पर भी ये कण आसानी से नहीं टूटते। इसलिए गर्म कटाई क्षेत्र में भी धातु नरम नहीं होती और औजार पर लगातार बड़ा बल पड़ता है।

ये सभी कारण मलिकर सतह को नुकसान पहुँचाते हैं। कटी हुई सतह के नीचे की पतली परत में बदलाव आता है। सूक्ष्म संरचना बारीक टूट जाती है और रंग सफेद हो जाता है। इस परत को सफेद परत (white layer) कहा जाता है। सफेद परत में तन्य अवशेषित तनाव और सूक्ष्म दरारें साथ-साथ रह जाने की संभावना रहती है। यह परत दरार की शुरुआत बनती है और पुरजे की थकान आयु को बहुत कम कर देती है।

सफेद परत खतरनाक क्यों है। इस परत में आँख से न देखने वाला तन्य अवशेषित तनाव होता है। तन्य तनाव दरार को खोलने वाला बल है। इसमें सूक्ष्म दरारें जुड़ जाएँ तो वे बीज बन जाती हैं। दोहराए गए भार में इसी बीज से दरार बढ़ती है। इसलिए अंतिम फिनिशिंग में सफेद परत नहीं छोड़नी चाहिए।

इस समस्या को घटाने के तरीके भी हैं। कटाई के बाद सतह को छोटे कणों से पीटने वाला पश्च-उपचार जोड़ा जाता है। यह उपचार सतह पर संपीडन तनाव छोड़ता है। संपीडन तनाव दरार को दबाकर बंद करने वाला बल है। यह तन्य तनाव की विपरीत दिशा में काम करता है। इस तरह सतह में संपीडन तनाव बैठा देने से पुरजे की थकान आयु बढ़ती है।

कृत्रिम बुद्धिमत्ता इन अलग-अलग पश्च-उपचारों के असर को भी साथ में सीखती है। कटाई की शर्तें, पीटने की प्रक्रिया और ऊष्मा उपचार, सबको इनपुट के रूप में डाला जाता है। तब वह अनुमान लगाती है कि कौन-सा संयोजन अच्छा परिणाम देगा। इससे मनुष्य द्वारा एक-एक करके किए जाने वाले परीक्षण बहुत कम हो जाते हैं। फरि भी अंतिम पुष्टिवास्तविक परीक्षण से की जाती है।

कृत्रिम बुद्धिमत्ता का उपयोग इस जोखिम को पहले से पहचानने में किया जाता है। कटाई की शर्तें और अवशेषित तनाव के मान डालने पर वह सतह की अवस्था का अनुमान लगाती है। वह सीखती है कि किनी शर्तों में सफेद परत बनती है। तब खतरनाक शर्तों से बचा जा सकता है। टाइटेनियम की परत-दर-परत बने पुरजों में प्रक्रिया की शर्तों से सतह खुरदरापन और कठोरता का अनुमान लगाने वाला डीप लर्निंग मॉडल सामने आया है। यह पुस्तक वही दृष्टि सुपरएलॉय की कटी हुई सतहों पर लागू करने की दिशा सुझाती है।

लेकिन अनुमान पर भरोसा केवल सीखी गई सीमा के भीतर ही किया जा सकता है। पहली बार देखने वाली शर्तों में त्रुटि बिड़ जाती है। इसलिए वास्तविक पुरजे की पुष्टि सतह नरीक्षण से अवश्य की जाती है। क्योंकि सफेद परत पतली होती है और आँख से छूट सकती है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता खतरनाक शर्तों को पहले छाँटकर उम्मीदवारों की संख्या घटाती है।

7.2.3 औजार के घसिने के तरीके और सतह क्षति

इस उपशीर्षक में औजार के घसिने के कई तरीकों पर चर्चा की जाती है। औजार घसिाव (tool wear) सीधे उत्पादन गुणवत्ता से जुड़ा है। औजार घसिने पर सतह खुरदरी हो जाती है। खुरदरी सतह थकान दरार की शुरुआत बनती है। इसलिए औजार कतिना घसिा है, यह पहले से जानना गुणवत्ता नियंत्रण में महत्वपूर्ण है।

औजार घिसाव के कई प्रकार हैं। पहला है नॉच घिसाव। कटाई गहराई की सीमा रेखा पर औजार में गहरी खाँच बनती है। यह वह जगह है जहाँ हवा में मौजूद ऑक्सीजन और कठोर हुई धातु परत साथ-साथ रगड़ खाते हैं। ऑक्सीजन और कठोर धातु परत की संयुक्त रगड़ से इस जगह की खाँच धीरे-धीरे गहरी होती जाती है।

दूसरा है चपिकाव के कारण परत उखड़ना। नकिल औजार सामग्री से आसानी से चपिकता है। कटी हुई धातु की बुरादे धार पर चपिककर जम जाती है। इस जमाव को बलिट-अप एज कहा जाता है। जब यह जमाव अलग होता है तो औजार की सतह की कोटिंग भी साथ में उखाड़ लेता है। इस समय कोटिंग उखड़ने से औजार की सतह तेजी से खराब होती है।

तीसरा है प्रसरण घिसाव। कटाई क्षेत्र का तापमान बहुत ऊँचा होता है। ऊँचे तापमान पर परमाणु एक-दूसरे में समा जाते हैं। औजार के भीतर के परमाणु धातु बुरादे की ओर चले जाते हैं। तब औजार की सतह पर धँसा हुआ नशान बचता है, और इस नशान को क्रेटर कहा जाता है।

चौथा है सतह की सफेद परत और सूक्ष्म दरारें। पहले चर्चा की गई सफेद परत यहाँ भी आती है। तेज विकृति और तीव्र शीतलन मलिकर पतली सफेद परत बनाते हैं। इस परत में दरारें छिपी रहने की संभावना होती है। बाहर से सतह चिकनी दखि, तब भी भीतर दरार जैसे दोष छिपे हो सकते हैं।

ये सभी घिसाव आपस में जुड़े होते हैं। एक बढ़े तो दूसरे भी उसके साथ बढ़ते हैं। इसलिए केवल एक कारण को नहीं देखना चाहिए। कई संकेतों को साथ देखकर जाँचना चाहिए। कटाई बल, कंपन, ध्वनि और तापमान, ये सभी घिसाव के संकेत हैं।

कृत्रिम बुद्धिमत्ता इन संकेतों को साथ पढ़ती है। सेंसर कटाई के दौरान संकेतों को वास्तविक समय में इकट्ठा करते हैं। मॉडल इन संकेतों से अनुमान लगाता है कि इस समय औजार कतिना घिस चुका है। हाल के शोध ने घिसे हुए औजार की तस्वीर को डीप लर्निंग से पढ़कर घिसाव की मात्रा का तुरंत अनुमान लगाया। जिस काम के लिए मनुष्य औजार रोककर आवर्धक काँच से देखता था, वह काम मशीन करती है।

दूसरी धातुओं में भी यही तरीका काम करता है। एक अध्ययन ने हास्टेलॉय C276 नामक नकिल मशीन धातु को काटते समय औजार घिसाव का अनुमान डेटा-आधारित मॉडल से लगाया। क्योंकि कई सुपरएलॉय में घिसाव के तरीके मलित-जुलते होते हैं। ऐसे परिणाम रॉकेट के लिए उपयोग होने वाले सुपरएलॉय में भी संदर्भ बनते हैं।

औजार घिसाव का अनुमान लग सके तो मानवरहित मशीन भी संभव हो जाती है। मशीन स्वयं औजार की अवस्था देखती है। जोखिम हो तो गति घटाती है या औजार बदलती है। मनुष्य को लगातार नगिरानी नहीं करनी पड़ती। इस तरह रात भर बिना मनुष्य के पुरजे काटने वाले कारखाने में अनुमान मॉडल उसकी सुरक्षा को सहारा देता है।

इन चारों घिसावों पर तापमान का बड़ा असर पड़ता है। कटाई क्षेत्र जतिना गरम होता है, घिसाव उतना तेज होता है। इसलिए शीतलन महत्वपूर्ण है। कटाई द्रव छड़िककर गर्मी कम की जाती है। कभी-कभी ऊँचे दबाव से कटाई द्रव को सीधे धार पर भी छोड़ा जाता है। यह शीतलन तरीका भी कृत्रिम बुद्धिमत्ता का इनपुट चर बनता है।

सार रूप में, औजार घिसाव का अनुमान गुणवत्ता नियंत्रण की आँख बनता है। घिसाव अधिक होने से पहले औजार बदला जा सकता है। खराब पूरजा बनने से पहले शर्तों को सुधारा जा सकता है। लेकिन सेंसर संकेतों में शोर मलित होता है। कंपन में मशीन की अपनी थरथराहट भी मलित होती है। इसलिए मॉडल को शोर सहने लायक अच्छी तरह प्रशिक्षित करना चाहिए। कई सेंसर साथ इस्तेमाल करने से शोर का असर घटता है।

7.3 अच्छी कटाई के लिए बल गणना और पश्च-उपचार अनुकूलन

पछिले खंड में हमने देखा कि कितना कठिन क्यों है। इस खंड में देखते हैं कि इस कठिनाई को कैसे पार किया जाता है। तीन बातों को क्रम से लिया जाता है। पहले देखते हैं कि कटाई में लगने वाले बल की गणना कैसे की जाती है। फिर देखते हैं कि पश्च-उपचार के अनुसार मशीनगि योग्यता कैसे बदलती है। अंत में देखते हैं कि कृत्रिम बुद्धिमत्ता सर्वश्रेष्ठ शर्तें कैसे खोजती है।

7.3.1 कटाई में लगने वाला बल और उस बल को संभालने वाले मॉडल

इस उपशीर्षक में कटाई में लगने वाला बल और उसे संभालने वाले मॉडल देखे जाते हैं। कटाई बल (cutting force) वह बल है जिससे औजार धातु को धकेलता है। इस बल को पहले से जान लिया जाए तो औजार और शर्तें अच्छी तरह चुनी जा सकती हैं। बल की गणना का मूल विचार और कंपन की समस्या को साथ देखा जाता है।

कटाई बल केवल एक दिशा में काम नहीं करता। आगे धकेलने वाला बल, बगल में धकेलने वाला बल और नीचे दबाने वाला बल साथ मौजूद होते हैं। इसलिए कटाई बल को तीन दिशात्मक घटकों वाले वेक्टर के रूप में दिखाया जाता है। वेक्टर वह मात्रा है जिसमें परिमाण और दिशा दोनों होते हैं। दूसरी ओर, सामग्री के भीतर लगने वाला तनाव टेन्सर से दिखाया जाता है। टेन्सर वह मात्रा है जिसमें कई दिशाओं के मान साथ समाए होते हैं। कटाई बल वेक्टर और तनाव टेन्सर अलग-अलग मात्राएँ हैं। इस बल का परिमाण काटी जाने वाली मोटाई और सामग्री की मजबूती पर निर्भर करता है।

कटाई के दौरान तीन काम साथ-साथ होते हैं। धातु विकृत होती है, गर्मी पैदा होती है और घर्षण होता है। अच्छा मॉडल इन तीनों को साथ संभालना चाहिए। जब सामग्री तेजी से दबती है, तब उसकी मजबूती तापमान के अनुसार बदलती है। गरम होने पर धातु कुछ नरम होती है। इस संबंध को सूत्र के बजाय तालिका में रखकर मॉडल में डाला जाता है।

यह मॉडल प्रत्येक सामग्री के लिए अलग स्थिरांक इस्तेमाल करता है। स्थिरांक प्रयोग से तय किए जाते हैं। एक ही इनकोनेल 718 में भी परत-दर-परत बने पदार्थ और फोर्ज्ड पदार्थ के स्थिरांक अलग होते हैं। क्योंकि परत-दर-परत बने पदार्थ की सूक्ष्म संरचना अलग होती है। इसलिए परत-दर-परत बने पदार्थ के लिए अलग प्रयोग चाहिए। ऐसे विशेष प्रयोगात्मक डेटा पर्याप्त जमा हों, तभी मॉडल सटीक होता है।

स्थिरांक तय करने वाले प्रयोग में भी कृत्रिम बुद्धिमत्ता मदद करती है। कटाई संकेतों से स्थिरांक को उलटे ढंग से खोजने की वधि है। बल और तापमान मापे जाते हैं और उन मानों से मेल खाते स्थिरांक चुने जाते हैं। जो काम मनुष्य हाथ से मिलाकर करता था, उसे मशीन तेजी से करती है। तब नए पदार्थ पर भी मॉडल को जल्दी अनुकूल किया जा सकता है।

कंपन की समस्या भी महत्वपूर्ण है। पहले चटर की बात हुई थी। चटर वह कंपन है जिसमें औजार और पुरजा एक-दूसरे को हिलाते हैं। एक बार कंपन शुरू हो जाए तो अगली घुमाव में औजार उसी नशान को फेरि काटता है। तब कंपन और बढ़ता है। छोटी थरथराहट स्वयं धीरे-धीरे बड़ी होकर मशीनगि में बाधा डालती है।

इस कंपन को रोकने के लिए सुरक्षा कटाई गहराई जाननी चाहिए। बहुत गहरा काटने पर कंपन बढ़ता है। उथला काटने पर कंपन शांत होता है। घूर्णन गतिके अनुसार इसकी सीमा बदलती है। इस सीमा को देखाने वाले चित्र को स्थिरता लोब आरेख कहा जाता है। इस चित्र को देखकर कंपन-रहति शर्तें चुनी जाती हैं।

कृत्रिम बुद्धिमत्ता इस गणना में तेजी से मदद करती है। केवल भौतिक मॉडल से गणना में बहुत समय लगता है। शर्त थोड़ी बदलने पर हर बार शुरुआत से फेरि हल करना पड़ता है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता भौतिक मॉडल के परिणाम पहले से सीखती है। उसके बाद वह नई शर्त का उत्तर तुरंत देती है। ऐसी भारी गणना की जगह लेने वाले मॉडल को सरोगेट कहा जाता है। सरोगेट का अर्थ प्रतिनिधि है। सटीक गणना पहले केवल कुछ बार कर ली जाती है। उसके परिणाम सीख चुका प्रतिनिधि मॉडल बाद का काम संभालता है।

यह तरीका कार्यस्थल पर समय बहुत घटाता है। पहले शर्तें बदलते हुए कई बार परीक्षण कटाई की जाती थी। अब मॉडल पहले खतरनाक शर्तों को छाँट देता है। बचे हुए कुछ मामलों को ही वास्तव में परखा जाता है। लेकिन यदि भौतिक मॉडल गलत हो, तो कृत्रिम बुद्धिमत्ता भी गलत होगी। इसलिए भौतिकी और डेटा को साथ इस्तेमाल करना अधिक सुरक्षित है।

भौतिकी और डेटा को साथ इस्तेमाल करने की वधिको भौतिकी-सूचि मशीन लर्निंग (PIML) कहा जाता है। यह वधि भौतिक नियमों को कृत्रिम बुद्धिमत्ता में साथ शामिल करती है। डेटा कम हो, तब भी भौतिक नियम उत्तर को थामे रखते हैं। वे अटपटे अनुमान को रोकने वाला सुरक्षा उपाय बनते हैं। यह वधि इस पुस्तक के अगले अध्यायों में भी बार-बार आएगा। रॉकेट इंजीनियरिंग जैसे डेटा-दुर्लभ क्षेत्रों में इसका उपयोग बढ़ा है।

7.3.2 फोर्ज्ड पदार्थ, परत-दर-परत निर्माण के तुरंत बाद की अवस्था और HIP-उपचारित पदार्थ की मशीनगि योग्यता की तुलना

इस उपशीर्षक में धातु की तीन अवस्थाओं की तुलना की जाती है। एक ही इनकोनेल 718 में भी निर्माण वधि और पश्च-उपचार के अनुसार गुण बदलते हैं। फोर्ज्ड पदार्थ, परत-दर-परत निर्माण के तुरंत बाद की अवस्था, और गरम समदशि दाब से गुजरी अवस्था को साथ-साथ देखा जाता है।

पहले फोर्ज्ड पदार्थ (wrought) को देखें। फोर्ज्ड पदार्थ वह सामग्री है जिसे धातु को दबाकर और गढ़कर बनाया जाता है। इसकी जड़ वही है जैसे लोहारखाने में लोहे को पीटकर बनाया जाता है। इसकी सूक्ष्म संरचना महीन और समान होती है। क्रस्टल छोटे और गोल होते हैं। इसलिए कटाई बल का उतार-चढ़ाव तीनों सामग्रियों में अपेक्षाकृत छोटा रहता है। औजार घिसाव भी उतना ही कम होता है, इसलिए उसका अनुमान लगाना अधिक आसान है।

अगली अवस्था परत-दर-परत निर्माण के तुरंत बाद की है। इस अवस्था को ऐज-बिल्ट (as-built) भी कहा जाता है। यह बनि पश्च-उपचार के प्रटिर से निकली हुई अवस्था है। अवशिष्ट तनाव बड़ा होता है और कठोर Laves फेज जमा रहता है। स्तंभीय क्रस्टल भी मोटे और लंबे होते हैं। इसलिए कटाई प्रतिरोध फोर्ज्ड पदार्थ की तुलना में बहुत बढ़ जाता है। औजार टूटने का जोखिम भी तीनों सामग्रियों में अपेक्षाकृत बढ़ा होता है।

तीसरी स्थिति हॉट आइसोस्टैटिक प्रेसिंग (Hot Isostatic Pressing, HIP) से गुजरने के बाद की है। HIP एक पोस्ट-प्रोसेसिंग है जिसमें एक साथ उच्च तापमान और उच्च दबाव दिया जाता है। यह आमतौर पर 1000 डिग्री सेल्सियस से अधिक तापमान पर किया जाता है। दबाव भी 100 मेगापास्कल से अधिक होता है। इन परिस्थितियों में धातु के अंदर के छदिर दबकर बंद हो जाते हैं।

रोटी या ब्रेड के आटे की लोई को सोचें तो समझना आसान है। लोई के भीतर छोटे हवा के बुलबुले होते हैं। लंबे समय तक दबाकर गूँथने पर ये बुलबुले नकिल जाते हैं और लोई घनी हो जाती है। HIP भी मलिता-जुलता है। ऊँचा दबाव धातु के भीतर के छद्मों को दबाकर जोड़ देता है। ऊँचा दबाव और ऊष्मा परमाणुओं को हलिते हैं और छद्मों की दीवारों को एक-दूसरे से चपिका देते हैं।

HIP सूक्ष्म संरचना भी बदलता है। लेकिन यह बदलाव तापमान और रोके रखने के समय पर निर्भर करता है। तापमान पर्याप्त ऊँचा हो तो कठोर Laves फेज मैट्रिक्स में घुल जाता है। तापमान कम हो या समय छोटा हो तो Laves फेज का कुछ भाग बचा रहता है। लंबे स्तंभीय क्रिस्टल भी शर्तों के अनुसार वैसे ही रह सकते हैं। यदिसूक्ष्म संरचना समान रूप से बदल जाए, तो दशिया के अनुसार अंतर और कटाई बल का उतार-चढ़ाव घटता है। इसलिए HIP को सॉल्यूशन उपचार, एजिंग और समांगीकरण ऊष्मा उपचार के साथ शर्तें मिलाकर इस्तेमाल किया जाता है।

लेकिन HIP की भी सीमा है। यह सभी छद्मों को समाप्त नहीं करता। सतह से जुड़े छद्म और भीतर बंद छद्म अलग-अलग ढंग से व्यवहार करते हैं। परत-दर-परत निर्माण के दौरान फँसे आर्गन बुलबुले HIP से बंद होने पर भी फरि समस्या पैदा करते हैं। क्योंकि आर्गन ऐसी गैस है जो धातु में नहीं घुलती। बाद में फरि ऊँचा तापमान मलितो तो बंद हुए बुलबुले फूलकर खुल जाते हैं। इस घटना को ऊष्मा-प्रेरित रंधरता कहा जाता है। इसलिए शुरुआत से ही गैस बुलबुले घटाना महत्त्वपूर्ण है।

HIP के बाद नई समस्या भी पैदा होती है। सूक्ष्म संरचना नरम होने पर धातु की बुरादे आसानी से नहीं टूटती। बुरादे लंबे होकर औजार में लपिट जाते हैं। यदयिह लपिटना अधिक हो तो सतह को खरोचता है। इसलिए औजार का आकार ऐसा चुनना चाहिए कि बुरादे अच्छी तरह टूटें।

कृत्रिम बुद्धिमत्ता इस तुलना को डेटा के रूप में व्यवस्थित करती है। वह हर अवस्था के कटाई डेटा को इकट्ठा करके अंतर सीखती है। तब वह नरिणय करती है किनया पुरजा किस अवस्था के करीब है। वह यह भी सुझाती है कि कौन-सा बाद का उपचार करना चाहिए। हाल के अध्ययन HIP और ऊष्मा उपचार को साथ-साथ अनुकूलित करने के तरीकों की व्यापक समीक्षा कर रहे हैं।

HIP खर्च और समय लेने वाला बाद का उपचार है। बड़े उपकरण के अंदर लंबे समय तक गर्म करके दबाना पड़ता है। इसलिए इसे हर पुरजे पर लगाना कठिन है। यह तय करना पड़ता है कि किस पुरजे के लिए HIP सचमुच जरूरी है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता इस नरिणय में भी मदद करती है। वह दोषों की जानकारी देखकर HIP के असर का पहले से अनुमान लगाती है।

प्रकाशित शोध भी अच्छा मार्गदर्शक बनता है। अमेरिकी अंतरिक्ष एजेंसी नासा (NASA) ने समिलेशन से देखा कि HIP परत-दर-परत बने Inconel 718 के दोषों को कैसे घटाता है। एक अध्ययन ने शुरू में अधिक छद्मों वाले पुरजे को HIP से उपचारित करने के बाद उसकी थकान शक्ति मापी। अधिकांश छद्म बंद हो गए, लेकिन आर्गन की बूंदें बचीं। ऐसे परिणाम जमा होकर बाद के उपचार की डिजाइन का आधार बनते हैं।

फोर्ज्ड सामग्री को मानक बनाने का कारण है। फोर्ज्ड सामग्री लंबे समय से परखी हुई सामग्री है। उसके गुण अच्छी तरह ज्ञात हैं और डेटा भी बहुत है। लक्ष्य परत-दर-परत बनी सामग्री को फोर्ज्ड सामग्री के स्तर तक उठाना है। बाद का उपचार उस लक्ष्य तक पहुंचने का रास्ता है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता उस रास्ते को अधिक तेजी से खोजने में मदद करती है।

7.3.3 कम प्रयोगों से अच्छी कटाई शर्तें खोजना

इस उपशीर्षक में कम प्रयोगों से अच्छी शर्तें खोजने की विधि बताई गई है। कटाई की शर्तें कई होती हैं। गति, फीड मात्रा, गहराई और शीतलन विधि सभी चर हैं। इन चरों के सभी संयोजन बनाए जाएं तो प्रयोगों की संख्या बहुत बढ़ जाती है। टैगुची प्रयोग योजना विधि और कृत्रिम न्यूरल नेटवर्क को जोड़कर इस समस्या को हल किया जाता है।

टैगुची विधि (Taguchi method) कम प्रयोगों से कई शर्तों की तुलना करने की विधि है। इसमें सभी संयोजन आजमाए नहीं जाते। केवल प्रतिनिधि संयोजन चुने जाते हैं और उन पर प्रयोग होता है। अच्छी तरह चुने गए कुछ संयोजनों से पूरी प्रवृत्ति पढ़ी जाती है। प्रयोगों की संख्या घटती है, इसलिए समय और खर्च भी उतना ही बचता है।

इस विधि से प्रयोगों की संख्या बहुत घटाई जाती है। उदाहरण के लिए, सैकड़ों संयोजनों को घटाकर अठारह प्रयोगों तक लाया जा सकता है। हर प्रयोग में सतह की खुरदरापन और औजार घिसाव मापा जाता है। कटाई में लगी ऊर्जा भी मापी जाती है। इस तरह कई संयोजनों से जुटाए गए मान कृत्रिम बुद्धिमत्ता की प्रशिक्षण सामग्री बनते हैं।

कृत्रिम न्यूरल नेटवर्क (Artificial Neural Network, ANN) इस डेटा से नियमों को सीखता है। कृत्रिम न्यूरल नेटवर्क मानव मस्तिष्क के तंत्रिका कनेक्शन की नकल करने वाली एक कम्प्यूटेशनल संरचना है। इनपुट में कटिंग की स्थितियाँ और ताप उपचार की स्थिति शामिल होती है। आउटपुट में सतह का खुरदरापन और उपकरण का घिसाव प्राप्त होता है। मॉडल इनपुट और आउटपुट के बीच के संबंध को स्वयं खोजकर नियम के रूप में सीखता है।

प्रशिक्षण पूरा होने पर वह उन शर्तों का भी अनुमान लगाता है जनि पर प्रयोग नहीं हुआ। नई गति और नई फीड मात्रा डालने पर वह परिणाम पहले से बता देता है। इसके बाद सर्वोत्तम शर्तें खोजने वाली खोज जोड़ी जाती है। ऐसी शर्तें चुनी जाती हैं जनिसे सतह चकिनी हो और औजार घिसाव कम हो। जब दोनों लक्ष्य एक-दूसरे से टकराते हैं, तब संतुलन बढ़ि खोजा जाता है।

वास्तविक उदाहरण भी बढ़ रहे हैं। एक अध्ययन ने परत-दर-परत बने Inconel 718 की सूक्ष्म टर्नगि को देखा। उसने जांचा कि ऊष्मा उपचार के बाद सामग्री की मशीनगि क्षमता कैसे बदलती है। प्रति मिनट 30 मीटर से 60 मीटर के बीच कटाई गति की तुलना की गई। ऐसा डेटा जमा होकर मॉडल की प्रशिक्षण सामग्री बनता है।

यह संयोजन कार्यस्थल पर बहुत उपयोगी है। पहले एक छोटी प्रयोग तालिका बनाई जाती है। फिर सेंसर और मापन से डेटा जुटाया जाता है। अंत में कृत्रिम बुद्धिमत्ता शर्तों और गुणवत्ता के संबंध को सीखती है। ऐसा करने से नए पुरजे की शर्तें जल्दी तय की जा सकती हैं।

जब लक्ष्य कई हो, तब संतुलन बढ़ि खोजना पड़ता है। सतह को चकिना, औजार घिसाव को कम और समय को छोटा रखना चाहते हैं। ये लक्ष्य एक-दूसरे से टकराते हैं। तेज कटाई करने पर सतह आसानी से खुरदरी हो सकती है। इसलिए किसी एक को अच्छा बनाने की कोशिश में दूसरा खराब हो जाता है।

इस समय कई लक्ष्यों को साथ संभालने वाली वधिकि उपयोग किया जाता है। किसी एक लक्ष्य में थोड़ा समझौता करके दूसरा लक्ष्य पाया जाता है। इस तरह मल्लि अच्छे संयोजन इकट्ठे किए जाते हैं। उनमें से पुरजे के अनुकूल संयोजन चुना जाता है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता इन संयोजनों को तेजी से खोज देती है।

वास्तविक लक्ष्य सतह की खुरदरापन को कम करना है। रॉकेट पुरजों की सतह चकिनी होनी चाहिए ताकि वे थकान के प्रति मजबूत रहें। ठीक से चुनी गई कटाई शर्तों और अच्छे औजार को साथ इस्तेमाल करने से इस लक्ष्य के करीब पहुंचा जा सकता है। चकिनी सतह दरार शुरू होने के बढ़ि घटाती है। इसलिए सतह की फनिशिगि थकान आश्वासन की पहली कड़ी बनती है।

सीमाएं भी स्पष्ट हैं। मॉडल पर केवल सीखी गई सीमा के भीतर भरोसा किया जा सकता है। प्रशिक्षण में न रही गति या फीड मात्रा पर अनुमान डगमगा जाता है। डेटा कम हो तो त्रुटि बढ़ती है। इसलिए महत्वपूर्ण पुरजों के लिए वास्तविक कटाई परीक्षण से शर्तें जांची जाती हैं। अनुमान सही था या नहीं, इसे सतह की खुरदरापन और औजार घिसाव से सत्यापित किया जाता है।

औजार का चयन भी महत्वपूर्ण चर है। सुपरएलॉय के लिए विशेष कोटिंग वाले औजार इस्तेमाल होते हैं। कोटिंग ऊष्मा और घिसाव सहने में मदद करती है। कभी-कभी सरिमकि सामग्री से बने औजार भी इस्तेमाल होते हैं। कौन-सा औजार किस शर्त के लिए उपयुक्त है, यह भी कृत्रिम बुद्धिमत्ता सीखती है। तब औजार की लागत और मशीनगि गुणवत्ता को साथ मिलाया जा सकता है।

आगे का काम डेटा को व्यापक बनाना है। कई संस्थानों के प्रयोग डेटा को इकट्ठा किया जाए तो मॉडल अधिक मजबूत होता है। लेकिन हर संस्थान की मापन वधि थोड़ी-थोड़ी अलग होती है। कटाई शर्तें लिखने का तरीका भी अलग-अलग होता है। इसलिए डेटा को एक रूप में मलाने के नयिम चाहिए। ऐसे मानक तैयार हो तो अनुमान की विश्वसनीयता बढ़ती है।

7.4 टर्बोपंप ब्लेड की अति-उच्च-चक्र थकान वफिलता

अब तक यह देखा गया कि अच्छी कटाई कैसे की जाए। इस खंड से यह देखा जाता है कि पुरजा कतिने लंबे समय तक टकिता है। हम देखते हैं कि रॉकेट टर्बोपंप का घूमता ब्लेड विशेष रूप से खतरनाक क्यों है और टूटते समय वह कौन-से नशान छोड़ता है।

7.4.1 क्रायोजेनकि ताप और उच्च ताप साथ आने वाला कठोर वातावरण

यह उप-शीर्षक उस कठोर वातावरण की चर्चा करता है जिसमें टर्बोपंप के ब्लेड स्थिति होते हैं। टर्बोपंप (turbopump) एक ऐसा पंप है जो ईंधन और ऑक्सीडाइज़र को उच्च दबाव पर अंदर धकेलता है। इसके भीतर तेजी से घूमने वाले ब्लेड को इम्पेलर (impeller) कहा जाता है। आइए देखें कि इस पुरजे पर पड़ने वाला भार इतना विशिष्ट क्यों है।

इम्पेलर बहुत तेजी से घूमता है। वह 1 मिनट में 30 हजार से 80 हजार बार तक घूमता है। यह कार इंजन से दस गुना से भी अधिक तेज गति है। घूमते समय अपकेद्री बल ब्लेड को बाहर की ओर खींचता है। यदि घूर्णन स्थिर हो, तो यह अपकेद्री बल लगभग न बदलने वाला स्थिर भार है।

तापमान का वातावरण भी कठोर है। इम्पेलर स्वयं क्रायोजेनकि प्रणोदक से छूता है। तरल हाइड्रोजन शून्य से 250 डिग्री सेल्सियस से भी अधिक ठंडा होता है। तरल ऑक्सीजन भी शून्य से 180 डिग्री सेल्सियस के आसपास होता है। गर्म कार्य गैस इम्पेलर में नहीं, बल्कि उसी शाफ्ट पर लगे टर्बाइन की ओर होती है। यह ऊष्मा शाफ्ट, बेयरिंग और सील से होकर पंप की ओर थोड़ी-थोड़ी आती है। इसलिए एक ही शाफ्ट के दोनों छोर बहुत ठंडी और गर्म जगहों का सामना साथ करते हैं।

बड़ा ताप अंतर संकुचन और प्रसार बनाता है। ठंडी ओर सकिड़ती है और गर्म ओर फैलती है। यह अंतर पुरजे के भीतर बल बनाता है। इसके नीचे स्थिर अपकेद्री बल आधार की तरह मौजूद रहता है। उसके ऊपर बार-बार आने वाला कंपन भार जुड़कर पुरजे को हलाता है।

दोहराया जाने वाला भार कई जगहों से आता है। ब्लेड जब भी स्थिर पुरजे के पास से गुजरता है, बल लगता है। घूर्णन शाफ्ट का सूक्ष्म असंतुलन और दबाव की धड़कन भी बल जोड़ते हैं। शुरू और बंद करना भी एक-एक बड़ा भार देता है। ब्लेड-पासगि बल 1 सेकंड में हजारों बार दोहराया जाता है। इसलिए दोहराव की संख्या बहुत तेजी से जमा होती है।

इतनी बड़ी दोहराव संख्या वाली थकान को अति-उच्च-चक्र थकान (Very High Cycle Fatigue, VHCF) कहा जाता है। सामान्य डिजाइन एक करोड़ चक्र को मानक बनाती है। वास्तविक पुरजा कतिनी बार दोहराया भार झेलता है, यह प्राकृतिक आवृत्ति और कुल संचालन समय को गुणा करने पर मलित है। परीक्षण नमूना अध्ययनों में 10 करोड़ और 1 अरब चक्र तक का क्षेत्र देखा जाता है। इस क्षेत्र में थकान के नियम बदलते हैं, इसलिए इसे अलग से देखना पड़ता है।

सामान्य थकान परीक्षण इस क्षेत्र को संभालना कठिन पाता है। 1 अरब चक्र को सामान्य गति से परखा जाए तो बहुत अधिक समय लगता है। इसलिए विशेष उच्च-आवृत्ति परीक्षण मशीन का उपयोग किया जाता है। यह मशीन नमूने को 1 सेकंड में लगभग 20 हजार बार कंपन कराती है। इतनी तेज कंपन के बाद भी एक परीक्षण पूरा करने में कई दिन लगते हैं।

परीक्षण में लंबा समय लगता है, इसलिए डेटा मूल्यवान होता है। डेटा कम हो तो अनुमान डगमगा जाता है। इसलिए कृत्रिम बुद्धिमत्ता को डेटा बचाकर इस्तेमाल करने की वधि चाहिए। कम डेटा से भी भरोसेमंद अनुमान देना पड़ता है। डेटा बचाकर इस्तेमाल करने की यह समस्या आगे के खंड में फरि वसितार से देखी जाएगी।

सामग्री का चयन भी इस वातावरण से जुड़ा है। कुछ धातुएं बहुत ठंडी जगहों पर नरम पड़ जाती हैं या आसानी से टूटती हैं। Inconel 718 क्रायोजेनिक ताप पर भी अपने गुणों में अपेक्षाकृत स्थिर है। इसलिए क्रायोजेनिक पुरजों में उसका व्यापक उपयोग होता है। Haynes श्रेणी ऊंचे तापमान पर अधिक अच्छा बल देती है। पुरजे की जगह के अनुसार सामग्री चुननी चाहिए।

एक ही पुरजे के भीतर भी जगह-जगह शर्तें अलग होती हैं। ब्लेड की जड़ अधिक बल झेलती है। ब्लेड का सरि अधिक कंपन झेलता है। इसलिए पहले उस कमजोर जगह को खोजना चाहिए जहां बल सहना कठिन है। इस जगह को जोखिम काट-खंड कहा जाता है। थकान आश्वासन इसी जोखिम काट-खंड को आधार बनाता है।

जोखिम काट-खंड खोजने में भी गणना चाहिए। पुरजे पर लगने वाले बल को कंप्यूटर से हल किया जाता है। इस गणना को सीमिति तत्व विश्लेषण कहा जाता है। पुरजे को छोटे-छोटे टुकड़ों में बांटकर हर एक पर बल नकाला जाता है। जहां बल बहुत इकट्ठा होता है, वही जोखिम काट-खंड है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता कभी-कभी इस गणना को तेजी से बदलकर करती है।

इम्पेलर के कंपन में विशेष नियम होता है। ब्लेड स्थिर पुरजे के पास से कतिनी बार गुजरता है, यह तय होता है। यह संख्या और घूर्णन गति मलिकर कंपन की अवधि बनाते हैं। किसी घूर्णन गति पर यह कंपन पुरजे के प्राकृतिक कंपन से मलि जाता है। तब कंपन बहुत बड़ा हो जाता है। इस मलिन को अनुनाद कहा जाता है। अनुनाद पुरजे को जल्दी खराब कर देता है। इसलिए डिजाइन में खतरनाक घूर्णन गति से बचा जाता है।

इम्पेलर का थकान आश्वासन रॉकेट सुरक्षा का मूल है। एक ब्लेड टूटे तो पूरा पंप टूट जाता है। तब इंजन रुक सकता है या वस्फोट हो सकता है। इसलिए इस पुरजे की जांच किसी भी दूसरे पुरजे से अधिक कठोर होती है। सतह की गुणवत्ता और अंदरूनी दोष दोनों को नयितरति करना पड़ता है।

7.4.2 भीतर से शुरू होने वाली वफिलता और मछली-आंख जैसा पैटर्न

इस उपशीर्षक में देखा गया है कि अति-उच्च-चक्र थकान पुरजे को कैसे तोड़ती है। पहले कहा गया कि इस क्षेत्र के नियम अलग हैं। अब हम ठोस रूप से देखते हैं कि वे कैसे अलग हैं। और टूटे हुए तल पर बचने वाले विशेष पैटर्न को भी देखते हैं।

सामान्य थकान सतह से शुरू होती है। सतह पर खरोच लगना आसान होता है। दोहराया भार मलिन पर सतह पर फसिलन के नशान बनते हैं। उन्हीं नशानों से दरार शुरू होती है। इसलिए सतह को चकिना घसिने से आयु बढ़ती है।

अति-उच्च-चक्र थकान अलग होती है। दरार सतह से नहीं, भीतर से शुरू होती है। दोहराव की संख्या बहुत बड़ी हो तो बल कमजोर होने पर भी भीतर का दोष टकि नहीं पाता। भीतर का छोटा छेद या कठोर कण बीज बनता है। HIP से भी न हट सकी छोटी आर्गन बूंद इसका खतरनाक उदाहरण है।

दरार के बीज के चारों ओर एक विशेष क्षेत्र बनता है। बीज के आसपास करोड़ों बार के सूक्ष्म वरूपण जमा होते हैं। भीतर से शुरू हुई दरार उस जगह बढ़ती है जहां हवा नहीं पहुंचती। संकरी दरार के दो तल आपस में रगड़कर संरचना को बहुत बारीक तोड़ते हैं। इस तरह बारीक टूटे हुए स्थान को सूक्ष्म दानेदार क्षेत्र (Fine Granular Area, FGA) कहा जाता है। यह क्षेत्र माइक्रोस्कोप से देखने पर आसपास से अधिक गहरा दखिता है। मछली-आंख जैसे पैटर्न के बीचोबीच यह गहरा क्षेत्र रहता है।

यह गहरा क्षेत्र बनने में लंबा समय लगता है। कुल थकान आयु का अधिकतर भाग इसी चरण में खर्च होता है। दरार आंखों से दखिने लायक बढ़ने से पहले का समय लंबा होता है। बाहर से पुरजा सही दखि, फरि भी भीतर नुकसान पहले से बढ़ रहा होता है।

यह बात जांच का समय तय करने में अर्थ रखती है। नुकसान बाहर से देर से दखिता है। इसलिए केवल बाहर देखकर नश्वरि नही होना चाहिए। तय अंतराल पर भीतर देखना चाहिए। पुनः उपयोग वाले रॉकेट में यह अंतराल प्रबंधन अधिक महत्वपूर्ण है। एक बार इस्तेमाल हुए पुरजे को फरि इस्तेमाल करने से पहले भीतर की जांच करनी चाहिए।

बीज से दरार बढे तो गोल पैटर्न बचता है। यह पैटर्न मछली की आंख जैसा दखिता है। इसलिए इसे मछली-आंख (fish-eye) कहा जाता है। मछली-आंख इस बात का प्रमाण है कि दरार भीतर से शुरू हुई। टूटे तल को देखकर इसी पैटर्न से कारण समझा जाता है।

अंत में दरार सतह तक पहुंचती है। उसी क्षण पुरजा अचानक टूट जाता है। धीरे-धीरे बढ़ रही दरार एक बार में फट जाती है। इस तरह पहले से पहचानना कठिन अचानक वफिलता सबसे अधिक खतरनाक है।

वफिलता का यह तरीका नरीक्षण के लिए महत्वपूर्ण अर्थ रखता है। केवल सतह को देखकर खतरे को नजरअंदाज किया जा सकता है। इसके अंदर देखना आवश्यक है। इसलिए एक्स-रे सीटी (X-ray CT) और अल्ट्रासोनिक परीक्षण का एक साथ उपयोग किया जाता है। यह परीक्षण पुरजे को तोड़े बिना उसके अंदर देखता है। इस प्रकार के परीक्षण को गैर-वनिशकारी परीक्षण (non-destructive testing) कहा जाता है।

कृत्रिम बुद्धिमत्ता इस जांच के साथ काम करती है। CT से मल्लि भीतर के दोषों के आकार और स्थान को इनपुट बनाया जाता है। इन मानों से थकान आयु का अनुमान लगाया जाता है। कौन-सा दोष खतरनाक है, इसकी क्रमसूची बनाई जाती है। हाल के शोध ने परत-दर-परत बने पुरजों के जोखिम दोषों को अवनिशी तरीके से खोजने की वधि सुझाई है। जनि भीतर के दोषों को मनुष्य आसानी से छोड़ सकता है, मशीन उन्हें पहले पकड़ती है।

भीतर के दोषों को पूरी तरह हटाना कठिन है। इसलिए ऐसा डजिइन किया जाता है कि दोष होने पर भी सुरक्षा बनी रहे। इस सोच को दोष-सहषिणु डजिइन कहा जाता है। पहले से तय किया जाता है कि कतिना बड़ा दोष सहा जा सकता है। उससे बड़े दोष वाले पुरजे फेंक दिए जाते हैं। कृत्रिम बुद्धिमत्ता यह मानक तय करने वाला डेटा बनाती है।

यह तरीका नरीक्षण मानदंडों से भी जुड़ता है। नरीक्षण उपकरण बहुत छोटे दोषों तक नहीं खोज पाते। जनि दोषों को खोजा जा सकता है, उनके आकार की एक सीमा तय होती है। डजिइन इस सीमा से बड़े दोषों को भी सुरक्षित बनाता है। तब नरीक्षण में छूट गए दोष भी खतरनाक नहीं रहते। इस तरह नरीक्षण और डजिइन एक-दूसरे की कमी भरते हुए सुरक्षा बनाए रखते हैं।

7.5 डगमगाहट को साथ में अनुमानति करने वाला थकान वश्वसनीयता आश्वसन

थकान जीवन एक ही संख्या में साफ-साफ तय नहीं होता। समान दशा के पुरजों का जीवन भी अलग-अलग होता है। इसलिए अनुमान में डगमगाहट की सीमा भी साथ रखनी चाहिए। यह खंड उस डगमगाहट को संभालने वाली कृत्रिम बुद्धिमत्ता को समझाता है। इसमें दोषों को संख्या में बदलने का तरीका, डगमगाहट को समेटने वाला मॉडल, और उसे सुरक्षा मानदंड से जोड़ने का तरीका देखा जाता है।

7.5.1 सामग्री की अवस्था को संख्या में बदलना

इस उपशीर्षक में सामग्री की अवस्था को संख्या में बदलने का तरीका बताया गया है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता संख्याओं को लेकर सीखती है। इसलिए दोष और सतह को संख्या में बदलना पड़ता है। इन संख्याओं को डिस्क्रिप्टर (descriptor) कहा जाता है। यहां एक-एक करके देखा जाता है कि कौन-सी संख्याएं थकान जीवन के लिए जरूरी हैं।

पहले दोष के आकार को संख्या में रखा जाता है। CT से पुरजे के अंदर की तस्वीर लेने पर छेद का 3D आकार मलित है। इस आकार को टेंसर में व्यवस्थित किया जाता है। जैसा पहले बताया गया, टेंसर कई दशाओं के मान रखने वाला डबिबा है। उसमें यह जानकारी होती है कि छेद कसि दशा में लंबा है और कतिना चपटा है।

एक्स-रे CT का सदिधांत अस्पताल के CT जैसा ही है। कई दशाओं से एक्स-रे भेजकर भीतर देखा जाता है। उस जानकारी को जोड़कर 3D चित्र बनाया जाता है। पुरजे को काटे बिना भीतर के छेद देखे जाते हैं। छेदों का आकार और रूप एक-एक करके मापा जाता है। इस तरह जुटाई गई आकार और रूप की जानकारी थकान अनुमान का आधार डेटा बनती है।

दोष का आकार भी जरूरी है। आकार मापने का अच्छा तरीका मुराकामी स्क्वेयर रूट ऑफ एरिया (Murakami square root of area) वधि है। यह वधि दोष को छोटी दरार की तरह देखती है। दोष को भार की दशा के लंबवत तल पर प्रक्षेपित कर उसका क्षेत्रफल मापा जाता है। उस क्षेत्रफल के वर्गमूल को दोष का आकार माना जाता है। ऐसा इसलिए है क्योंकि यह वर्गमूल दरार को खोलने वाले बल की तीव्रता से अच्छी तरह जुड़ता है। इसलिए जटिल 3D छेद को इसी एक मान में बदलकर संभाला जाता है। यह मान जतिना बड़ा होता है, थकान पर उसका असर उतना ही खराब होता है।

दोष की स्थिति भी साथ देखी जाती है। समान आकार होने पर भी सतह के पास का दोष अधिक खतरनाक होता है। सतह दोष के आसपास उसे थामने वाली सामग्री कम होती है, इसलिए बल अधिक केंद्रित होता है। हवा से संपर्क का पर्यावरणीय असर भी दरार को थोड़ा तेजी से बढ़ाता है। भीतर गहराई में मौजूद दोष चारों ओर से सामग्री से घिरा होता है, इसलिए कम खतरनाक होता है। इसलिए स्थिति के अनुसार सुधार मान अलग दिया जाता है।

सतह के खुरदरेपन को भी संख्या में बदला जाता है। तराशी गई सतह पर सूक्ष्म घाटियाँ और शिखर होते हैं। घाटी जितनी गहरी और नुकीली होगी, बल उतना ही अधिक केंद्रित होगा। इस संकेंद्रण की मात्रा को प्रतबिल संकेंद्रण गुणांक (stress concentration factor) कहा जाता है। यह कागज को काटते समय हल्का सा कट लगाने पर उसके आसानी से फट जाने जैसा है। ऐसा इसलिए है क्योंकि एक छोटा सा कट बखिरे हुए बल को एक बिंदु पर केंद्रित करके उस जगह को कमजोर बना देता है।

ये संख्याएँ मलिकर थकान जीवन से जुड़ी हैं। बल के आकार और दोहराव की संख्या का संबंध दिखाने वाला एक चित्र होता है। इस चित्र को S-N वक्र कहा जाता है। दोष और खुरदराहट की जानकारी इस वक्र को ऊपर-नीचे ले जाती है। दोष बढ़ा हो और सतह खुरदरी हो, तो वक्र नीचे चला जाता है। वक्र नीचे जाने का मतलब है कि समान बल पर भी पुरजा जल्दी टूटेगा।

हाल के अध्ययनों ने इन डिसक्रिप्टो को कृत्रिम बुद्धिमत्ता में डालकर अच्छे नतीजे पाए हैं। एक अध्ययन ने CT से मापी गई दोष जानकारी से एडिटिव धातु का थकान जीवन अनुमानित किया। कई एडिटिव निर्माण मामलों में मुराकामी वधि लागू करने वाले अध्ययन भी बढ़ रहे हैं। बार-बार यह पुष्टि हो रही है कि दोष का आकार, स्थिति और रूप जीवन पर बड़ा असर डालते हैं।

डिसक्रिप्टर में सामग्री की कठोरता भी डाली जाती है। कठोरता बताती है कि सामग्री कतिनी सख्त है। मुराकामी समीकरण में कठोरता बढ़ने पर सामग्री दोष को अधिक सहने वाली दशा में जाती है। लेकिन केवल कठोरता से दोष सहनशीलता पूरी तरह नहीं समझाई जा सकती। बहुत सख्त सामग्री कभी-कभी दोषों के प्रति और संवेदनशील हो जाती है। इसलिए कठोरता, दोष आकार, स्थिति और भार अनुपात को साथ देखना चाहिए।

भार की दशा को भी संख्या के रूप में डाला जाता है। बल कतिना बढ़ा है और किस दशा में है, यह जरूरी है। बल केवल एक दशा से आता है या कई दशाओं में मिला हुआ है, इसमें भी अंतर है। तापमान भी साथ डाला जाता है। क्योंकि गर्म और ठंडी जगहों पर सामग्री के गुण अलग होते हैं।

हाल के शोध ने ऐसे डिसक्रिप्टो से अच्छे नतीजे पाए हैं। एक अध्ययन ने एडिटिव Inconel 718 के उच्च-चक्र थकान जीवन का अनुमान लगाया। दोष आकार और भार आकार को इनपुट बनाया गया। डेटा की कमी की समस्या को कृत्रिम बुद्धिमत्ता से डेटा बढ़ाकर हल किया गया। नतीजे में अनुमान का निर्धारण गुणांक 0.975 तक बढ़ गया। औसत त्रुटि 1.13 प्रतिशत तक सीमित रही। निर्धारण गुणांक वह मान है जो दिखाता है कि अनुमान वास्तविकता से कतिना मेल खाता है। यह मान 1 के जितना करीब होता है, अनुमान वास्तविकता से उतना ही मेल खाता है। लेकिन यह संख्या एक सामग्री के सीमिति डेटा से निकली है। यह बढ़ाए गए डेटा से मिला नतीजा है, इसलिए इसे दूसरी प्रक्रियाओं और सामग्रियों पर जस का तस लागू करना कठिन है।

लेकिन डिसक्रिप्टर तय करना आसान नहीं है। कौन-सी संख्या डाली जाए और कौन-सी हटाई जाए, इसके लिए निर्णय चाहिए। जरूरी संख्या छूट जाए तो अनुमान बगिड़ जाता है। बेकार संख्या डालने पर सीखना धुंधला हो जाता है। इसलिए सामग्री को अच्छी तरह जानने वाले व्यक्ति और कृत्रिम बुद्धिमत्ता को मलिकर चयन करना चाहिए।

7.5.2 उत्तर की सीमा देने वाला बेयज़ियन न्यूरल नेटवर्क (BNN)

इस उपशीर्षक में डगमगाहट को समेटने वाली कृत्रिम बुद्धिमत्ता बताई गई है। सामान्य न्यूरल नेटवर्क केवल एक उत्तर देता है। थकान अनुमान में यह काफी नहीं है। क्योंकि समान दशा में भी जीवन व्यापक रूप से फैला होता है। इसलिए ऐसा मॉडल चाहिए जो उत्तर की सीमा भी साथ दे।

ऐसे मॉडल को बायेसियन न्यूरल नेटवर्क (बेयज़ियन Neural Network, BNN) कहा जाता है। सामान्य न्यूरल नेटवर्क में आंतरिक मान केवल एक ही तय होता है। बायेसियन न्यूरल नेटवर्क आंतरिक मानों को एक वितरण के रूप में मानता है। इसका एक निश्चित मान होने के बजाय मानों का एक वस्तितार होता है। इसलिए पूर्वानुमानित आउटपुट भी केवल एक मान के रूप में नहीं, बल्कि एक सीमा के रूप में आता है।

यहां गॉसियन शब्द अक्सर आता है। गॉसियन का अर्थ घंटी-आकार वितरण है। इसका आकार बीच में ऊंचा और दोनों ओर नीचे जाता है। परीक्षा अंकों के वितरण को याद करें तो समझना आसान है। औसत के पास लोग अधिक होते हैं और सरिों की ओर कम होते जाते हैं। लेकिन थकान जीवन स्वयं अक्सर घंटी-आकार का नहीं होता। वह लॉगनॉर्मल या वेइबुल जैसे दूसरे आकारों में फैलता है। इसलिए जीवन का लॉग लेकर उस मान पर घंटी-आकार मान्यता रखी जाती है। यह घंटी-आकार मान्यता गणना को आसान बनाने की सुविधा भी है।

इस वितरण में दो मान जरूरी हैं। एक औसत है। औसत प्रतिनिधिमान है। दूसरा फैलाव की चौड़ाई है। चौड़ाई बड़ी हो तो डगमगाहट बड़ी है। बेयज़ियन न्यूट्रल नेटवर्क ये दोनों मान साथ देता है।

अनुमान में चौड़ाई क्यों होती है, इसे मौसम पूर्वानुमान से समझें। पूर्वानुमान कल बारिश की संभावना 70 प्रतिशत बताता है। वह साफ-साफ 100 प्रतिशत नहीं कहता। क्योंकि भविष्य में डगमगाहट होती है। बेयज़ियन न्यूट्रल नेटवर्क भी एक उत्तर के बजाय संभावना की चौड़ाई साथ बताता है।

इस मॉडल को प्रशिक्षित करने का तरीका भी अलग है। आंतरिक मान वितरण होते हैं, इसलिए गणना जटिल होती है। सटीक गणना लगभग असंभव है। इसलिए उसके बदले निकट वितरण का उपयोग किया जाता है। इस तरह निकट वितरण में बदलकर गणना घटाने की प्रक्रिया ही प्रशिक्षण का केंद्र है।

प्रशिक्षण पूरा होने पर अनुमान कई बार निकाला जाता है। आंतरिक मान वितरण हैं, इसलिए हर बार थोड़ा अलग उत्तर आता है। इन उत्तरों को जोड़कर औसत और चौड़ाई निकाली जाती है। उत्तर आपस में मिलते-जुलते हों तो चौड़ाई संकरी होती है। उत्तर बखिरे हों तो चौड़ाई बड़ी होती है। इस चौड़ाई का आकार दिखाता है कि अनुमान पर कतिना भरोसा किया जा सकता है।

यह तरीका मनुष्य के निर्णय जैसा है। अनुभवी तकनीशियन भी भरोसे और अनुमान में फर्क करता है। जसि पुरजे को वह अच्छी तरह जानता है, उसके बारे में आत्मविश्वास से कहता है। पहली बार देखे पुरजे के बारे में सावधानी से कहता है। बेयज़ियन न्यूट्रल नेटवर्क भी इसी तरह अपना भरोसा साथ बताता है। इसलिए मनुष्य उस भरोसे की मात्रा देखकर परिणाम पर विश्वास कर उसका उपयोग आसानी से कर सकता है।

इस दृष्टिकोण का एक और अच्छा पक्ष है। मॉडल जब पहली बार कोई दशा देखता है, तो चौड़ाई बड़ी देता है। वह खुद संकेत देता है कि वह अच्छी तरह नहीं जानता। मनुष्य इस संकेत को देखकर सावधान होता है। बड़ी चौड़ाई वाले अनुमान को अधिक जांचकर उपयोग किया जाता है। मॉडल का अपनी सीमा बताना सुरक्षा में बड़ी मदद करता है।

यह दृष्टिकोण थकान अनुमान के लिए ठीक बैठता है। थकान बहुत डगमगाहट वाला परिघटना है। एक संख्या की तुलना में चौड़ाई अधिक ईमानदार है। हाल के कई अध्ययन इसी दशा में चल रहे हैं। विमानन धातुओं के थकान जीवन को डगमगाहट के साथ अनुमानित करने वाले अध्ययन आए हैं। भौतिक नियमों को साथ डालकर भरोसा बढ़ाने वाले अध्ययन भी हैं।

भौतिक नियम डालने से लाभ क्यों होता है। थकान के लिए लंबे समय से बने सिद्धांत हैं। ये बल और जीवन के संबंध को रखने वाले समीकरण हैं। इन समीकरणों को कृत्रिम बुद्धिमत्ता में साथ डाला जाता है। तब डेटा कम होने पर भी उत्तर बहुत दूर नहीं भटकता। कई दशाओं के भार को साथ संभालने वाले अध्ययन भी आए हैं। यह प्रवृत्तियों के पुरजों के जीवन आश्वासन को अधिक मजबूत बनाती है।

इस विधि की लागत भी है। उत्तर कई बार निकालना पड़ता है, इसलिए गणना बढ़ती है। सामान्य न्यूट्रल नेटवर्क की तुलना में प्रशिक्षण भी कठिन है। फरि भी रॉकेट पुरजों के लिए यह लागत बेकार नहीं है। क्योंकि डगमगाहट जानना सुरक्षा बचाता है। केवल एक संख्या पर भरोसा करके दुर्घटना हो जाए, तो नुकसान कहीं बड़ा होता है।

7.5.3 डगमगाहट को बांटेकर सुरक्षा मानदंड से जोड़ना

इस उपशीर्षक में डगमगाहट को बांटेकर देखने का तरीका बताया गया है। पहले कहा गया कि अनुमान की चौड़ाई होती है। यह चौड़ाई एक ही प्रकार की नहीं होती। इसमें दो प्रकार की डगमगाहट मिली होती है। दोनों को अलग करने पर दिखता है कि क्या करना है।

पहला है ज्ञान संबंधी अनिश्चितता (epistemic uncertainty)। यह मॉडल की कम जानकारी के कारण होने वाला वचिलन है। यह डेटा की कमी वाली परिस्थितियों में बड़े पैमाने पर दिखाई देता है। यदि कोई ऐसी स्थिति आती है जसि मॉडल ने कभी नहीं सीखा है, तो वह अनिश्चित हो जाता है। यह वचिलन अपर्याप्त डेटा को और जोड़ने पर धीरे-धीरे कम हो जाता है।

दूसरा है यादृच्छिक अनिश्चितता (aleatoric uncertainty)। यह सामग्री और भार में होने वाले स्वाभाविक बदलावों के कारण उत्पन्न होती है। समान परिस्थितियों में बने पुरजों के आंतरिक दोष भी अलग-अलग होते हैं। मापन में भी शोर शामिल होता है। यह वचिलन घटना में ही अंतर्निहित होता है, इसलिए डेटा बढ़ाने पर भी आसानी से कम नहीं होता है।

इन दोनों को अलग करना क्यों जरूरी है। क्योंकि उपाय अलग हैं। ज्ञानगत डगमगाहट बड़ी हो तो और प्रयोग करने चाहिए। आकस्मिक डगमगाहट बड़ी हो तो सुरक्षा मार्जिन अधिक रखना चाहिए। दोनों को एक साथ मिला देने पर गलत उपाय चुनना आसान है। दोनों डगमगाहटों को अलग करके देखने पर स्पष्ट होता है कि आगे क्या करना है।

अब अनुमान को सुरक्षा मानदंड से जोड़ा जाता है। रॉकेट पुरजों को तय सुरक्षा मानदंड पार करना होता है। इस मानदंड में दो बातें साथ आती हैं। एक यह कि कितने प्रतिशत पुरजे बचेंगे। दूसरी यह कि उस मान पर कतिना विश्वास किया जा सकता है। उदाहरण के लिए, ऐसा नचिला मान लिया जाता है जसिमें 90 प्रतिशत पुरजे बचें और उस पर 95 प्रतिशत भरोसा हो। जीवित रहने की दर और विश्वास स्तर को साथ तय करके निकाले गए मान को सामग्री अनुमत मान कहा जाता है। विमानन सामग्री में उपयोग होने वाले A आधार मान और B आधार मान ऐसे ही

उदाहरण है। औसत से केवल डगमगाहट घटाने भर से इस मान का आश्वासन नहीं दिया जा सकता। परीक्षण डेटा की संख्या और फैलाव को साथ डालकर इसे सांख्यिकी से निकाला जाता है।

इस नचिली सीमा को डिज़ाइन अनुमत मान कहा जाता है। पुरजे को इस अनुमत मान से अधिक समय तक टकिना चाहिए। इसके ऊपर कभी-कभी सुरक्षा गुणांक भी एक बार और गुणा किया जाता है। सुरक्षा गुणांक अप्रत्याशति जोखिम के लिए रखा गया मार्जिन है। इस तरह कई परतों का मार्जिन रखकर दुर्घटना रोकी जाती है। मार्जिन बहुत अधिक हो तो पुरजा भारी हो जाता है, इसलिए संतुलन खोजना पड़ता है।

ऐसा करने पर नरिणय सुरक्षा की ओर झुकता है। जनि दशाओं में मॉडल को भरोसा कम होता है, वहां जीवन कम माना जाता है। जनि दशाओं में भरोसा अधिक होता है, वहां थोड़ा अधिक अवकाश दिया जाता है। यह रवैया रॉकेट पुरजों के लिए उपयुक्त है। थोड़ा रूढ़िवादी अनुमान लगाना भी दुर्घटना रोकने के लिए बेहतर है।

केवल कृत्रिम बुद्धिमत्ता से प्रमाणन पूरा नहीं होता। थकान आश्वासन में कई उपकरण साथ लगते हैं। कृत्रिम बुद्धिमत्ता का अनुमान, मानक थकान परीक्षण, अवनिशी नरीक्षण और सुरक्षा गुणांक, सभी जरूरी हैं। मानक परीक्षण वधियां भी तय हैं। बल लगाने के तरीके और डेटा का विश्लेषण करने के तरीके के अंतरराष्ट्रीय मानक हैं।

कृत्रिम बुद्धिमत्ता की भूमिका स्पष्ट है। वह खतरनाक उम्मीदवारों को जल्दी खोजती है। वह बताती है कि कहां और परीक्षण चाहिए। वह कम प्रयोगों से अधिक जानकारी पाने में मदद करती है। मनुष्य उस जानकारी से परीक्षण योजना अच्छी तरह बनाकर समय और लागत बहुत घटाता है।

अंतमि नरिणय मनुष्य और प्रयोग करते हैं। कृत्रिम बुद्धिमत्ता का अनुमान शुरुआत है, अंत नहीं। वास्तविक परीक्षण डेटा को अनुमान का समर्थन करना चाहिए। गुणवत्ता दस्तावेजों को उस प्रक्रिया का रिकॉर्ड रखना चाहिए। यह सब पूरा होने पर ही पुरजा रॉकेट पर चढ़ता है।

आगे बचे हुए कार्य भी हैं। थकान डेटा अब भी कम है। अतः-उच्च-चक्र क्षेत्र का डेटा और कम है। क्योंकि परीक्षण में लंबा समय लगता है। इसलिए कम डेटा से सीखने के तरीके पर लगातार शोध होता है। दूसरी सामग्रियों का डेटा लाकर उपयोग करने का तरीका भी है। ऐसे तरीके विकसित होने पर अनुमान और मजबूत होगा।

डेटा की गुणवत्ता भी जरूरी है। दोषों को कैसे मापा गया, यह डेटा के अनुसार अलग होता है। परीक्षण कैसे किया गया, यह भी अलग-अलग होता है। रिकॉर्ड कमजोर हो तो मॉडल गलत सीखता है। इसलिए डेटा को सावधानी से दर्ज करने की संस्कृति चाहिए। अच्छा मॉडल बनाने के लिए अच्छे और ठीक से दर्ज किए गए डेटा की जरूरत होती है।

मानक और प्रमाणन भी साथ-साथ विकसित होने चाहिए। आज के प्रमाणन नियम पुराने पदार्थों को आधार बनाकर बनाए गए थे। परत-दर-परत बने पदार्थों के गुण अलग होते हैं। इसलिए नए नियम चाहिए। इस बात पर भी चर्चा चल रही है कि कृत्रिम बुद्धिमत्ता के पूर्वानुमान को प्रमाणन में कैसे शामिल किया जाए। जब यह चर्चा व्यवस्थित हो जाएगी, तब परत-दर-परत बने पुरजे अधिक व्यापक रूप से इस्तेमाल होंगे।

सारांश

इस अध्याय में दो बड़े प्रश्नों पर चर्चा की गई। एक है ऐसे धातु को ठीक से काटना जैसा काटना कठिन है। दूसरा है यह जानना कि पुरजा कितने समय तक टकेंगा। दोनों प्रश्न 3D प्रटिंग से बने रॉकेट पुरजों में पैदा होते हैं। और दोनों प्रश्नों में कृत्रिम बुद्धिमत्ता बड़ी सहायता देती है।

ये दोनों प्रश्न वास्तव में एक ही धारा में जुड़े हैं। ठीक से काटने पर सतह चिकनी होती है। चिकनी सतह थकान के वरिद्ध मजबूत होती है। भीतर के छदिर हटाने पर दरारों के बीज घटते हैं। अंत में अच्छा प्रसंस्करण लंबी आयु तक ले जाता है। इसलिए प्रसंस्करण और थकान को हमेशा साथ देखना चाहिए। इस अध्याय ने प्रसंस्करण और थकान नामक दो प्रश्नों को एक जगह रखकर साथ-साथ समझा।

पहले भाग में देखा गया कि परत-दर-परत बने सुपरएलॉय को काटना कठिन क्यों है। तेजी से ठंडी हुई सूक्ष्म संरचना की दशा के अनुसार उसके गुण बदलते हैं। भीतर बल फंसा रहता है और कठोर कण इकट्ठे रहते हैं। ये गुण औजार को जल्दी घिसाते हैं और सतह पर सफेद परत तथा सूक्ष्म दरारें भी छोड़ते हैं।

इस कठिनाई को पार करने के उपाय भी देखे गए। काटने के बल और कंपन की पहले गणना करके सुरक्षित स्थितियां चुनी जाती हैं। गर्म समदशित दाब से भीतर के छदिर घटाए जाते हैं और संरचना को समान बनाया जाता है। टैगुची वधि और कृत्रिम न्यूरल नेटवर्क से कम प्रयोगों में अच्छी स्थितियां खोजी जाती हैं। कृत्रिम बुद्धिमत्ता इस प्रक्रिया में उम्मीदवारों को तेजी से सीमिति करती है।

बाद के भाग में थकान की समस्या पर चर्चा की गई। रॉकेट टर्बोपंप के ब्लेड अतः-उच्च-चक्र थकान में रहते हैं। इस क्षेत्र में दरार सतह से नहीं, भीतर से शुरू होती है। टूटे हुए तल पर फिश-आई जैसा गोल पैटर्न बचता है। इसलिए पुरजे को तोड़े बिना भीतर देखने वाली अवनिशी जांच जरूरी होती है।

थकान के पूर्वानुमान में अनश्चितता को साथ शामिल करना चाहिए। ऐसा इसलिए है क्योंकि समान स्थितियों वाले पुरजों की आयु भी अलग-अलग होती है। बेयज़ियन न्यूरोल नेटवर्क एक उत्तर के बजाय उत्तर की चौड़ाई देता है। इस चौड़ाई को दो प्रकारों में बांटने पर अगला काम दिखाई देता है। इससे तय किया जा सकता है कि डेटा बढ़ाना है या सुरक्षा मार्जिन बढ़ाना है।

मुख्य बात कृत्रिम बुद्धिमत्ता और मनुष्य का सहयोग है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता डेटा को तेजी से पढ़कर जोखिम बताती है। वह प्रयोग योजना को बुद्धिमानी से छोटा करती है। लेकिन अंतिम प्रमाणन प्रयोग और जांच करते हैं। रॉकेट पुरजों की रक्षा ये दोनों शक्तियाँ साथ मलिकर करती हैं। कृत्रिम बुद्धिमत्ता और प्रयोग का यह सहयोग सुरक्षित उड़ान को सहारा देने वाली बुनियाद बनाता है।

इस अध्याय की बात को एक पंक्ति में समेटकर देखें। ठीक से काटना, ठीक से घिसकर संवारना और ठीक से जांचना चाहिए। और उसके परिणाम को अनश्चितता के साथ अनुमानित करना चाहिए। कृत्रिम बुद्धिमत्ता इन सभी चरणों में तेजी से सहायता करती है। मनुष्य उस सहायता से अधिक सुरक्षित पुरजे बनाता है। 3D प्रिंटिंग से बने रॉकेट पुरजों का भविष्य अंततः इसी सहयोग पर निर्भर है।

संबंधित आधार-सामग्री

- Ojo, O. O., & Taban, E. (2023). Post-processing treatments-microstructure-performance interrelationship of metal additive manufactured aerospace alloys: A review. *Materials Science and Technology*, 39(1), 1-41. <https://doi.org/10.1080/02670836.2022.2130530>
- Song, Z., Peng, J., Zhu, L., Deng, C., Zhao, Y., Guo, Q., & Zhu, A. (2025). High-Cycle Fatigue Life Prediction of Additive Manufacturing Inconel 718 Alloy via Machine Learning. *Materials*, 18(11), 2604. <https://doi.org/10.3390/ma18112604>
- Yu, C., Huang, Z., Zhang, Z., Shen, J., Wang, J., & Xu, Z. (2021). Influence of post-processing on very high cycle fatigue resistance of Inconel 718 obtained with laser powder bed fusion. *International Journal of Fatigue*, 153, 106510. <https://doi.org/10.1016/j.ijfatigue.2021.106510>
- ASTM International. (2021). ASTM E466-21: Standard Practice for Conducting Force Controlled Constant Amplitude Axial Fatigue Tests of Metallic Materials. ASTM International, West Conshohocken, PA. <https://www.astm.org/e0466-21.html>
- ASTM International. (2015). ASTM E739-10(2015): Standard Practice for Statistical Analysis of Linear or Linearized Stress-Life and Strain-Life Fatigue Data. ASTM International, West Conshohocken, PA. <https://www.astm.org/e0739-10r15.html>
- Yi, M., Tang, W., Zhu, Y., Liang, C., Tang, Z., & Yin, Y. (2023). A holistic review on fatigue properties of additively manufactured metals. *arXiv preprint*. (प्रीप्रिंट, अभी सहकर्मी-समीक्षित नहीं) <https://arxiv.org/abs/2311.07046>
- Altıparmak, S. C., Lombardi, M., Bondioli, F., Fino, P., Biamino, S., & Ugues, D. (2025). Hot isostatic pressing for powder-based additive manufacturing of metals: State-of-the-art review and future perspectives. *Journal of Materials Research and Technology*, 39, 4794-4822. <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2025.10.135>
- Murakami, Y. (2002). *Metal Fatigue: Effects of Small Defects and Nonmetallic Inclusions*. Elsevier Science, Oxford, UK.
- Basquin, O. H. (1910). The exponential law of endurance tests. *Proceedings of the American Society for Testing and Materials*, 10(2), 625-630.
- Coffin, L. F. (1954). A study of the effects of cyclic thermal stresses on a ductile metal. *Transactions of the American Society of Mechanical Engineers*, 76(6), 931-950.
- Manson, S. S. (1953). Behavior of materials under conditions of thermal stress. National Advisory Committee for Aeronautics (NACA) Technical Note, NACA-TN-2933.
- Arola, D., & Ramulu, M. (1999). An examination of the effects of surface texture on the strength, fatigue life, and stress concentration of machined components. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 121(3), 376-381.
- Blavette, D., Cadel, E., Fraczkiewicz, A., & Menand, A. (1999). Three-dimensional atomic-scale imaging of segregation and precipitation in superalloys. *Science*, 286(5448), 2317-2319. <https://doi.org/10.1126/science.286.5448.2317>
- Wang, Q., Yao, G., & Hou, M. (2026). Fatigue life prediction and uncertainty quantification of aerospace metals: A Bayesian physics-informed neural network model. *Reliability Engineering & System Safety*, 266, 111724. <https://doi.org/10.1016/j.ress.2025.111724>
- Zhang, D., Dai, W., & Ding, Y. (2025). Bayesian optimization-based physics-informed neural network for adaptive prediction of multiaxial fatigue life in metallic materials. *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, 49(1), 28-51. <https://doi.org/10.1111/ffe.70101>
- Chang, J., Basvoju, D., Vakanski, A., Charit, I., & Xian, M. (2025). Predictive modeling and uncertainty quantification of fatigue life in metal alloys using machine learning. *arXiv preprint*. (प्रीप्रिंट, अभी सहकर्मी-समीक्षित नहीं) <https://arxiv.org/abs/2501.15057>

- Li, L., Chang, J., Vakanski, A., Wang, Y., Yao, T., & Xian, M. (2024). Uncertainty quantification in multivariable regression for material property prediction with Bayesian neural networks. *Scientific Reports*, 14, 10543. <https://doi.org/10.1038/s41598-024-61189-x>
- Vishnu, S., Kuriachen, B., & Mathew, J. (2026). Microturning response of LPBF Inconel 718: Effect of homogenization annealing. *Materials and Manufacturing Processes*, 41(7), 964-973. <https://doi.org/10.1080/10426914.2026.2660062>
- Truong, T. T., Airao, J., Fattahi, S., Azarhoushang, B., Karras, P., & Aghababaei, R. (2025). Image-based machine learning model for tool wear estimation in milling Inconel 718. *Wear*, 571, 205865. <https://doi.org/10.1016/j.wear.2025.205865>
- Abdullah, M., Rao, A. C. U., Ramachandran, T., Biswal, S., Chaudhary, S. P., Singh, R., Mishra, A., & Mann, V. S. (2026). A data-driven approach for high-accuracy tool wear prediction in machining Hastelloy C276. *Scientific Reports*, 16, 19442. <https://doi.org/10.1038/s41598-026-50824-4>
- Medibew, T. M., Zieliński, D., Agebo, S. W., & Deja, M. (2025). Recent research progress in the abrasive machining and finishing of additively manufactured metal parts. *Materials*, 18(6), 1249. <https://doi.org/10.3390/ma18061249>
- Liu, Y., Zhao, L., Huang, S., Meng, X., Zhang, Z., Lu, H., Zhou, S., & Dai, G. (2026). Recent progress in surface post-treatment techniques for additive manufactured alloy metal parts: A comprehensive review. *Additive Manufacturing Frontiers*, 200339. <https://doi.org/10.1016/j.amf.2026.200339>
- Hassan, M., Hussain, M. A., & Jahan, M. P. (2026). Post-processing of additively manufactured metallic parts - A review. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*. <https://doi.org/10.1007/s00170-026-18615-3>
- Sommer, D., Truetsch, B., Esen, C., & Hellmann, R. (2025). Effect of hot isostatic pressing and sequenced heat treatment on the mechanical properties of hybrid additive manufactured Inconel 718 components. *Journal of Manufacturing and Materials Processing*, 9(11), 378. <https://doi.org/10.3390/jmmp9110378>
- Kaletsch, A., Qin, S., Herzog, S., & Broeckmann, C. (2021). Influence of high initial porosity introduced by laser powder bed fusion on the fatigue strength of Inconel 718 after post-processing with hot isostatic pressing. *Additive Manufacturing*, 47, 102331. <https://doi.org/10.1016/j.addma.2021.102331>
- Fody, J. M., & Lang, C. G. (2021). Hot isostatic pressing for reduction of defects in additively manufactured Inconel-718: Preliminary simulation approach and results. NASA Technical Reports Server, Document ID 20210015451. <https://ntrs.nasa.gov/citations/20210015451>
- Baig, S., Jam, A., Beretta, S., Shao, S., & Shamsaei, N. (2025). Non-destructive detection of critical defects in additive manufacturing. *Scientific Reports*, 15, 6740. <https://doi.org/10.1038/s41598-025-91608-6>
- Novelino, A. L. B., de Oliveira, D., Araújo, J. A., & Ziberov, M. (2026). Defects characterization of wall components fabricated via WAAM and fatigue strength estimation: A theoretical prediction approach based on Murakami's square root of area method. *Progress in Engineering Science*, 3(1), 100238. <https://doi.org/10.1016/j.pes.2026.100238>
- He, P., Huang, Y., Wang, W., Guo, Y., Yu, Z., Chen, W., Li, B., & Wang, X. (2025). Deep learning driven prediction method for roughness and hardness of laser in-situ forging additive manufacturing Ti-6Al-4V. *Virtual and Physical Prototyping*, 20(1), e2569541. <https://doi.org/10.1080/17452759.2025.2569541>

अध्याय 8. भौतिकी-सूचि मशीन लर्नगि (PIML/PINNs) और ऑपरेटर लर्नगि (FNO) के माध्यम से गैस प्रतिक्रिया प्रवाह और दहन रसायन मॉडलिंग

प्रस्तावना

रसोई के गैस स्टोव में आग जलाने पर नीली लौ खिलती है। ईंधन गैस और हवा में मौजूद ऑक्सीजन मलिकर ऊष्मा पैदा करते हैं। इस प्रक्रिया को दहन कहा जाता है। दहन हमारे जीवन में हर जगह है। कार का इंजन भी और बॉयलर भी दहन से चलते हैं।

रॉकेट इंजन भी इसी सिद्धांत से बल पैदा करता है। पर उसका पैमाना और स्थितियां बहुत अलग होती हैं। रॉकेट के दहन कक्ष के भीतर तापमान कहीं अधिक होता है और दबाव ऊंचा होता है। ईंधन और ऑक्सीजन बहुत तेजी से मिलते और प्रतिक्रिया करते हैं। उसके भीतर गैस बहती है, भंवर बनाती है और ध्वनि पैदा करती है।

इन सभी बातों की एक साथ गणना करना कठिन है। रासायनिक प्रतिक्रिया पलक झपकते ही हो जाती है। दूसरी ओर पूरे दहन कक्ष में घूमने वाला प्रवाह उससे धीमा होता है। तेज बदलाव और धीमे बदलाव एक ही स्थान में मल रहे हैं। कंप्यूटर को दोनों का एक साथ पीछा करना हो तो गणना की मात्रा बहुत बढ़ जाती है।

अब तक समीकरणों को बहुत छोटे भागों में बांटकर हल किया गया। इस विधिको संगणकीय द्रव गतिकी (CFD) कहा जाता है। यह सटीक है, लेकिन इसकी गणना लागत बड़ी है। बड़े रॉकेट दहन कक्ष को वसितार से हल करने के लिए सुपरकंप्यूटर को कई दिने चलना पड़ता है। डिजाइनर लंबे समय से अधिक तेज उपकरण चाहते रहे हैं।

कृत्रिम बुद्धिमत्ता इस बटु पर मदद करती है। अच्छी तरह सीखा हुआ न्यूरल नेटवर्क गणना को तेजी से घटा देता है। सेंसर कम हो तो वह खाली जानकारी भी भर देता है। लेकिन दहन समस्या में कृत्रिम बुद्धिमत्ता मनमाना उत्तर दे तो खतरा होता है। क्योंकि रॉकेट में छोटी सी त्रुटि भी बड़ी दुर्घटना बन सकती है।

इसलिए भौतिक नियमों को सीखने की प्रक्रिया में सीधे डालने की विधिसामने आई। इस विधिको भौतिकी-सूचि मशीन लर्नगि (PIML) कहा जाता है। न्यूरल नेटवर्क केवल डेटा की नकल नहीं करता। उसे द्रव्यमान संरक्षण और ऊर्जा संरक्षण जैसे नियम भी साथ में मानने के लिए बनाया जाता है। इसकी प्रतिनिधि विधि भौतिकी-सूचि न्यूरल नेटवर्क (PINN) है।

यह अध्याय उसी भौतिकी-सूचि अधिगम की कई विधियों पर चर्चा करता है। पहले दहन को नियंत्रित करने वाले समीकरणों को शब्दों में समझते हैं। फिर तेज रासायनिक प्रतिक्रिया से पैदा होने वाली गणना कठिनाई देखते हैं। इसके बाद कोलमोगोरोव-अर्नोल्ड नेटवर्क (KAN) नाम की नई संरचना देखते हैं। फिर फलन को फलन में बदलने वाले फूरियर न्यूरल ऑपरेटर (FNO) का परिचय देते हैं। अंत में घूर्णन डेटोनेशन इंजन के भीतर की स्थिति पुनर्निर्मित करने के उदाहरण से समाप्त करते हैं।

यहां एक उपमा लें। नक्शा बनाने की दो विधियां सोचें। एक विधि पूरी जमीन को कदम-कदम चलकर नापने की है। यह सटीक है, लेकिन समय अधिक लेती है। दूसरी विधि कुछ जगहों को नापकर बाकी भरने की है। यह तेज है, लेकिन नियम के बिना भरे तो गलत नक्शा बनता है। भौतिकी-सूचि अधिगम इस भराई में प्रकृतिक नियम डालने का काम है।

इस अध्याय को पढ़ने के बाद बड़ी तस्वीर समझ में आती है। दिखता है कि कृत्रिम बुद्धिमत्ता दहन गणना को कैसे बदलती है। यह भी अलग किया जा सकता है कि क्या पहले से संभव है और क्या अभी कठिन है। नया उपकरण शक्तिशाली है, लेकिन सर्वशक्तिमान नहीं है। भौतिकी और सत्यापन साथ ही तभी उस पर भरोसा किया जा सकता है। यही संतुलन इस अध्याय की मुख्य सोच है।

यह पुस्तक कठिन नामों और संख्याओं को सावधानी से संभालती है। हाल के शोधों में कुछ ऐसे भी हैं जिनके नाम ही प्रभावशाली लगते हैं। ऐसे प्रदर्शन आंकड़े भी मल्लि हैं जिनका आधार पुष्ट नहीं है। इसलिए यह अध्याय केवल सत्यापित शोध चुनकर समझाता है। जनि संख्याओं की पुष्टि नहीं हो सकी, उन्हें मुख्य पाठ में नहीं लिखा जाता। आरंभिक चरण के शोध को साफ तौर पर आरंभिक शोध बताया जाता है।

8.1 संगणकीय दहन अभियांत्रिकी का प्रतिमान परिवर्तन और कृत्रिम बुद्धिमत्ता

इस खंड में क्या शामिल है

यह खंड पहले यह बताता है कि दहन गणना कठिन क्यों है। रॉकेट दहन कक्ष के भीतर होने वाली प्रक्रिया कतिनी जटिल है, यह देखता है। फिर पारंपरिक गणना विधियों की सीमा जांचता है। उस सीमा को पार करने के लिए कृत्रिम बुद्धिमत्ता क्यों आई, यह समझाता है।

यहां कठनि सूत्रों का उपयोग नहीं किया जाता। इसके बजाय रोजमर्रा के दृश्यों से अवधारणा समझते हैं। इस खंड को समझ लेने पर बाद के सभी खंड आसान हो जाते हैं। क्योंकि पूरा अध्याय अंत में इसी समस्या को हल करने की कई वधियां हैं।

रॉकेट दहन कक्ष के भीतर चरम वातावरण होता है। तापमान कई हजार डिग्री तक बढ़ जाता है। दबाव वायुमंडलीय दबाव के सैकड़ों गुना तक पहुंचता है। ईंधन और ऑक्सीकारक थोड़े समय में तीव्र प्रतिक्रिया करते हैं। मीथेन और तरल ऑक्सीजन का उपयोग करने वाला इंजन इसका प्रतिनिधि उदाहरण है।

ऐसी प्रतिक्रिया देखने में जितनी लगती है, उससे कहीं अधिक जटिल होती है। मीथेन के ऑक्सीजन से मलिकर पानी और कार्बन डाइऑक्साइड बनने का रास्ता एक ही नहीं है। बीच में दर्जनों प्रकार के मध्यवर्ती पदार्थ प्रकट होते हैं। इन पदार्थों को रेडकिल कहा जाता है और ये बहुत प्रतिक्रियाशील होते हैं। इसलिए सैकड़ों छोटी प्रतिक्रियाएं आपस में उलझकर साथ-साथ चलती हैं।

रेडकिल को रल्लि दौड़ से समझें। बैटन एक हाथ से दूसरे हाथ में तेजी से जाता है। कोई धावक बैटन को लंबे समय तक नहीं पकड़े रहता। रेडकिल भी पल भर में बनता है और अगले पदार्थ में बदल जाता है। यही तेज लेन-देन दहन को चलाता है। उसकी गति छूट जाए तो लौ का रूप सही नहीं बनाया जा सकता।

इसके ऊपर अशांत भी जुड़ती है। अशांतविह प्रवाह है जिसमें गैस भंवर बनाते हुए बेतरतीब ढंग से मिलती है। यह नदी के पत्थर से टकराकर सफेद झाग में टूटने जैसा है। रॉकेट दहन कक्ष के भीतर गैस भी इसी तरह मिलती है। अशांत ईंधन और ऑक्सीजन को तेजी से मिलाती है। लेकिन उसकी अनियमिति गतिके कारण गणना और कठनि हो जाती है।

इस प्रतिक्रिया को सूक्ष्मता से हल करने के लिए समय और स्थान को बहुत छोटे भागों में बांटना पड़ता है। जहां लौ पतली परत में खड़ी होती है, वहां मोटाई बाल से भी कम होती है। उसके भीतर तापमान और सांद्रता तेजी से बदलते हैं। यह पतली परत छूट जाए तो गणना बगिड़ जाती है। इसलिए इस परत को पकड़ने के लिए जालकियां बहुत घनी रखनी पड़ती हैं।

इस बहु-पैमाना समस्या को संख्याओं से महसूस करें। लौ की पतली परत दर्जनों माइक्रोमीटर की होती है। दूसरी ओर पूरे दहन कक्ष की लंबाई दर्जनों सेंटीमीटर होती है। आकार का अंतर हजारों गुना तक पहुंचता है। समय में भी यही अंतर दखिता है। इस बड़े दायरे को एक साथ पकड़ने के लिए जालकियां वसिफोटक ढंग से बढ़ती हैं।

पारंपरिक गणना वधियों में प्रत्यक्ष संख्यात्मक अनुकरण (DNS) और बड़ी भंवर अनुकरण (LES) हैं। प्रत्यक्ष संख्यात्मक अनुकरण बहुत छोटे भंवर तक कुछ भी छोड़े बिना सब हल करता है। बड़ी भंवर अनुकरण केवल बड़े भंवर हल करता है और छोटे भंवरों का सन्निकटन करता है। दोनों सटीक हैं, लेकिन गणना मात्रा बड़ी है। बड़े दहन कक्ष को वसितार से हल करने में लंबा समय लगता है।

गणना लागत बड़ी है, इसे रोजमर्रा की भाषा में समझें। यह उच्च गुणवत्ता वाली फिलिम बनाने जैसा है। हर दृश्य को बारीकी से बनाएं तो महीनों लग जाते हैं। दहन गणना भी ऐसी ही है। हर बार शर्त बदलने पर शुरू से फरि बनाना पड़ता है। डिजाइनर दर्जनों स्थितियों आजमाना चाहता है। लेकिन हर स्थिति बदलने पर कई दिनि प्रतीक्षा करना व्यवहार में कठनि है।

यहां कृत्रिम बुद्धिमत्ता नया रास्ता खोलती है। न्यूरल नेटवर्क एक बार अच्छी तरह सीख जाए तो मिली-जुलती समस्याओं का उत्तर तेज देता है। वह भारी गणना की जगह लेने वाला हल्का प्रतिनिधि मॉडल (surrogate model) बनता है। प्रतिनिधि मॉडल मूल गणना की नकल करने वाला तेज सन्निकटन मॉडल है। डिजाइनर कम समय में कई स्थितियों देख सकता है।

प्रतिनिधि मॉडल को नक्शा ऐप से समझें। रास्ता सचमुच चले बिना भी वह लगने वाला समय बता देता है। वह असंख्य मार्गों की तुरंत तुलना कर देता है। प्रतिनिधि मॉडल भी ऐसा ही है। वास्तविक गणना पूरी चलाए बिना परिणाम का अनुमान करता है। इससे कई डिजाइन विकल्पों को कम समय में देखा जा सकता है।

लेकिन नक्शा ऐप भी अनजान रास्ते पर गलत हो सकता है। प्रतिनिधि मॉडल भी सीखी हुई सीमा से बाहर जाने पर चूकता है। इसलिए अनुमानित उत्तर पर सीधे भरोसा नहीं किया जाता। महत्वपूर्ण निर्णय से पहले सूक्ष्म गणना से फरि जांच की जाती है। प्रतिनिधि मॉडल दशा बताने वाला कंपास है, अंतिम फैसला नहीं। यही दृष्टि पूरे अध्याय में समान रूप से चलती है।

अति-क्रांतिक अवस्था को थोड़ा और खोलकर समझें। पानी का उदाहरण ले तो समझना आसान है। आम तौर पर पानी उबलकर भाप में बदलता है। द्रव और गैस की सीमा साफ होती है। लेकिन दबाव और तापमान बहुत बढ़ा दें तो वह सीमा धुंधली हो जाती है। रॉकेट के उच्च-दबाव दहन कक्ष के भीतर ईंधन ऐसी ही अवस्था में होता है। द्रव और गैस की इस धुंधली सीमा की सही गणना करना कठनि है।

वास्तविक उदाहरण भी सामने आते हैं। डीपफ्लेम (DeepFlame) ऐसा सॉफ्टवेयर है जो न्यूरल नेटवर्क डालकर अति-क्रांतिक दहन की तेज गणना करता है। अति-क्रांतिक उस उच्च-दबाव अवस्था को कहते हैं जिसमें द्रव और गैस की सीमा धुंधली हो जाती है। शोधकर्ताओं ने इस कोड को अनुकूलित कर मीथेन और ऑक्सीजन के अशांत दहन को बड़े पैमाने पर हल किया। सार्वजनिक सामग्री के अनुसार गणना का आकार

दसियों अरब सेल स्तर तक बढ़ाया गया। यह पहले से बहुत वसितृत दायरा है। यह परणाम 2025 में उच्च-प्रदर्शन कंप्यूटिंग सम्मेलन में प्रस्तुत आरंभिक शोध है।

इस उदाहरण में कृत्रिम बुद्धिमत्ता का काम स्पष्ट है। रासायनिक प्रतिक्रिया की गणना समय लेने वाला भाग है। न्यूरल नेटवर्क इस गणना को तेजी से बदल देता है। साथ ही वास्तविक द्रव के गुणों को जिस का तस रखता है। यह गति और सटीकता साथ पाने की कोशिश है। यह दशिया बड़े रॉकेट दहन की गणना को आगे बढ़ाती है।

बड़े पैमाने की गणना क्यों महत्वपूर्ण है, यह देखें। वास्तविक रॉकेट इंजन में सैकड़ों इंजेक्टर होते हैं। इंजेक्टर वह पुरजा है जो ईंधन और ऑक्सीजन को फुहार के रूप में छोड़कर मिलाता है। इतने सारे इंजेक्टरों की लपटें एक-दूसरे को प्रभावित करती हैं। छोटे पैमाने की गणना से इस परस्पर प्रभाव को पकड़ना कठिन है। बड़े पैमाने की गणना खुले तभी वास्तविक इंजन के करीब पहुंचा जा सकता है।

कृत्रिम बुद्धिमत्ता दहन में मुख्य रूप से तीन तरीकों से आती है। एक है समय लेने वाली गणना की जगह लेने वाला तेज प्रतिनिधि मॉडल। दूसरा है कम मापों से पूरे क्षेत्र को फिर बनाना। तीसरा है वास्तविक समय में अवस्था का निदान और नियंत्रण करना। यह अध्याय पहले दो तरीकों पर केंद्रित है, और तीसरा नियंत्रण बाद के अध्याय में देखा जाएगा।

कृत्रिम बुद्धिमत्ता भौतिकी तोड़ें तो क्यों खतरनाक है, उदाहरण से देखें। मान लें कोई मॉडल तापमान को वास्तविक से कम बताता है। डिजाइनर मान लेता है कि दीवार सह लेगी। लेकिन वास्तविक तापमान अधिक हो तो दीवार पघिल जाती है। छोटी त्रुटि बड़ी दुर्घटना बनती है। इसलिए रॉकेट में भौतिकी का पालन सुरक्षा से सीधे जुड़ा है।

बेशक सीमाएं भी स्पष्ट हैं। कृत्रिम बुद्धिमत्ता सीखी हुई सीमा के बाहर अक्सर गलत होती है। रॉकेट में नई स्थितियां हमेशा आती रहती हैं। भौतिक नियम न माने जाएं तो भविष्यवाणी खतरनाक हो जाती है। इसलिए पूरा अध्याय भौतिकी और अधिगम को जोड़ने की विधियों पर चर्चा करता है। 2026 में एयरोस्पेस प्रणोदन के लिए भौतिकी-सूचि अधिगम की समीक्षा भी सामने आई। यह प्रवाह दिखाता है कि यह क्षेत्र तेजी से बढ़ रहा है।

8.2 बहु-घटक संपीड़्य प्रतिक्रियाशील प्रवाह के नियंत्रण समीकरण और भौतिकी-सूचि अधिगम

इस खंड में क्या शामिल है

यह खंड दहन को नियंत्रित करने वाले मूल समीकरणों को शब्दों में समझाता है। समीकरण सुनने में कठिन लगता है। लेकिन उसका अर्थ सरल है। नियम यह है कि कुछ भी यूं ही गायब या पैदा नहीं होता।

इसके बाद इस नियम को न्यूरल नेटवर्क में डालने की विधि देखते हैं। देखते हैं कि भौतिकी-सूचि न्यूरल नेटवर्क कानूनों का पालन कैसे करता है। ये दो अवधारणाएं इस अध्याय का ढांचा हैं। आगे आने वाली सभी विधियां इन्हीं दो अवधारणाओं से अलग-अलग निकलती हैं।

8.2.1 प्रतिक्रियाशील नेवियर-स्टोक्स नियंत्रण समीकरण

नेवियर-स्टोक्स समीकरण द्रव की गति समझाने वाला नियम है। पानी का बहना और हवा का चलना इसी नियम से हल किया जाता है। रॉकेट दहन में इसमें रासायनिक प्रतिक्रिया और ऊष्मा भी जुड़ती है। इसलिए साथ हल किए जाने वाले समीकरण कई हो जाते हैं।

बना प्रतिक्रिया वाले सामान्य द्रव के लिए द्रव्यमान, संवेग और ऊर्जा के तीन संतुलन पर्याप्त हैं। लेकिन दहन जैसे प्रतिक्रिया करने वाले द्रव में रासायनिक प्रजाति संरक्षण भी जुड़ता है। इसलिए ये समीकरण चार संरक्षण नियमों को समेटते हैं। पहला है द्रव्यमान संरक्षण। भीतर आई गैस की मात्रा और बाहर गई मात्रा मेल खानी चाहिए। गैस अपने-आप पैदा या गायब नहीं होती। द्रव्यमान का यह संतुलन हर गणना का आधार बनता है।

अगला है संवेग संरक्षण। संवेग वह मात्रा है जो द्रव्यमान और वेग को गुणा करने से मिलती है। बल लगे तो संवेग बदलता है। दबाव का अंतर और श्यानता यह बल बनाते हैं। इसी कारण रॉकेट में गैस तेजी से बाहर धकेली जाती है।

संवेग संरक्षण को साइकिल से समझें। पैडल दबाने पर साइकिल आगे बढ़ती है। दबाने का बल वेग में बदलाव पैदा करता है। रॉकेट के भीतर दबाव का अंतर वही बल बनाता है। श्यानता वह घर्षण है जो प्रवाह को एक-दूसरे से पकड़कर धीमा करता है। दबाव का अंतर और श्यानता नाम के ये दो बल गैस का वेग बदलते हैं।

एक और है रासायनिक प्रजाति संरक्षण। रासायनिक प्रजाति वे पदार्थ हैं जो प्रतिक्रिया में भाग लेते हैं, जैसे ऑक्सीजन, मीथेन और पानी। प्रतिक्रिया होने पर कुछ पदार्थ घटते हैं और कुछ बढ़ते हैं। कतिनी मात्रा घटेगी या बढ़ेगी, यह प्रतिक्रिया दर तय करती है। प्रतिक्रिया करने वाले द्रव में हर पदार्थ के लिए ऐसा संरक्षण समीकरण अलग बनाया जाता है। इसलिए रासायनिक प्रजातियों की संख्या जतिने समीकरण और जुड़ते हैं। अंतिम है ऊर्जा संरक्षण। प्रतिक्रिया से निकली ऊष्मा गैस को गर्म करती है और प्रवाह को धकेलती है।

ऊर्जा संरक्षण को गुलक से समझा जा सकता है। डाला गया पैसा और खर्च किया गया पैसा मिलाएँ तो बचा पैसा निकलता है। दहन में रासायनिक प्रतिक्रिया नई ऊर्जा नहीं बनाती। ईंधन में बंद रासायनिक ऊर्जा केवल ऊष्मा में बदलती है। वह ऊष्मा गैस को गर्म करती है और काम करके बाहर जाती है। विकिरण से बाहर जाने वाली ऊष्मा भी होती है। इन सभी आवागमन को मलाने वाला नियम ऊर्जा संरक्षण है।

संपीड्य शब्द भी महत्वपूर्ण है। संपीड्य का अर्थ है कठिनाय के अनुसार गैस का घनत्व बहुत बदलता है। रॉकेट दहन कक्ष में दबाव उंचा होता है और बदलाव तीव्र होता है। इसलिए घनत्व को स्थिर नहीं रखा जा सकता। घनत्व का लगातार बदलना गणना को और कठिन बनाता है।

आइए देखें कि ये चार संतुलन इतने महत्वपूर्ण क्यों हैं। जिस गणना में संतुलन टूट जाता है, वह तुरंत झूठ बन जाती है। यदि द्रव्यमान अपने आप बढ़ जाए, तो मानो ऐसी प्रेरक शक्ति पैदा हो गई जो थी ही नहीं। यदि ऊर्जा रसि जाए, तो तापमान का अनुमान गलत हो जाता है। रॉकेट डिजाइन में ऐसी त्रुटि सीधे दुर्घटना तक ले जाती है। इसलिए कृत्रिम बुद्धिमत्ता को भी यह संतुलन अवश्य बनाए रखना चाहिए।

रासायनिक प्रतिक्रिया की गति अर्रेनियस नियम से तय की जाती है। अर्रेनियस नियम यह नियम है कि तापमान बढ़ने पर प्रतिक्रिया बहुत तेजी से तेज हो जाती है। यह उस तरह है जैसे माचिस की आग एक बार लग जाए तो पल भर में फैल जाती है। यही तीखा गुण आगे देखने वाली गणना समस्या की जड़ बनता है। रॉकेट डिजाइनर को सुरक्षा बनाए रखने के लिए इस प्रतिक्रिया का सटीक अनुमान लगाना पड़ता है।

वसिरण और ऊष्मा संचरण को भी साथ में हल करना पड़ता है। वसिरण वह घटना है जिसमें पदार्थ अधिक सांद्रता वाली जगह से कम सांद्रता वाली जगह की ओर फैलता है। यह रसोई की गंध के कमरे में फैलने जैसा है। ऊष्मा संचरण वह घटना है जिसमें गर्म जगह से ठंडी जगह की ओर ऊष्मा जाती है। दहन कक्ष में ये दोनों रासायनिक प्रतिक्रिया के साथ-साथ होते हैं। इसलिए समीकरण आपस में उलझकर एक ही ढांचे में हल होते हैं।

8.2.2 भौतिकी-सूचि आधारित संयुक्त हानि फिलन

भौतिकी-सूचि न्यूरल नेटवर्क (PINN) का मूल हानि फिलन में है। हानि फिलन वह माप है जिससे देखा जाता है कि न्यूरल नेटवर्क कतिना गलत है। सामान्य न्यूरल नेटवर्क केवल डेटा से अंतर मापता है। भौतिकी-सूचि न्यूरल नेटवर्क इसमें भौतिकी त्रुटि जोड़ता है।

काम करने का तरीका यह है। न्यूरल नेटवर्क स्थिति और समय को इनपुट के रूप में लेता है। फिर वह उस बटु का दाब, तापमान, वेग और सांद्रता देता है। ये मान संरक्षण समीकरणों को संतुष्ट करते हैं। यदि ये मान समीकरणों को संतुष्ट नहीं करते, तो उसी अनुपात में उन्हें दंड मिलाता है।

इस भौतिकी त्रुटि को मापने के लिए अवकलन की जरूरत होती है। यहां स्वचालित अवकलन (automatic differentiation) का उपयोग होता है। स्वचालित अवकलन वह तकनीक है जो न्यूरल नेटवर्क की गणना प्रक्रिया का अनुसरण करते हुए अवकलन निकालती है। यह जालिका के अंतर से अनुमान लगाने वाली सीमांत अंतर वृद्धि से अलग है। इसलिए सीमांत अंतर में होने वाली छेदन त्रुटि इसमें नहीं होती। पर न्यूरल नेटवर्क की अपनी सन्निकटन त्रुटि नमूना बटु चुनने से आने वाली त्रुटि बची रहती है। स्वचालित अवकलन जिस त्रुटि को हटाता है, वह अवकलन का अनुमान लगाते समय बनने वाली त्रुटि है।

आइए देखें कि अवकलन की जरूरत क्यों है। संरक्षण समीकरण परिवर्तन की दरों से निपटते हैं। वे देखते हैं कि दाब कतिनी तेजी से बदलता है और वेग कैसे बदलता है। परिवर्तन की यही दर अवकलन है। न्यूरल नेटवर्क ने जो मान दिए हैं, उनके परिवर्तन को अवकलन से निकाला जाता है। फिर जांचा जाता है कि इस तरह निकाली गई परिवर्तन दर समीकरण को संतुष्ट करती है या नहीं।

परंपरागत गणना में जालिका पर अवकलन का सन्निकटन किया जाता था। पड़ोसी जालिका बटुओं के अंतर से परिवर्तन का अनुमान लगाया जाता था। इस तरीके में जालिका मोटी हो तो त्रुटि बड़ी हो जाती है। स्वचालित अवकलन इस सन्निकटन का उपयोग नहीं करता। यह न्यूरल नेटवर्क के सूत्र को उसी रूप में अवकलित करता है। इसलिए अवकलन के लिए अलग से बहुत घनी जालिका बछिने की जरूरत नहीं होती। पर जनि बटुओं पर भौतिकी त्रुटि मापनी है, उन्हें चुनना पड़ता है। इन बटुओं को कोलोकेशन बटु कहा जाता है। यदि कोलोकेशन बटु बहुत वरिल रखे जाएं, तो हल डगमगाता है। जालिका से स्वतंत्र होने का अर्थ यह नहीं है कि वह कहीं भी सटीक है।

हानि फिलन में कई पद साथ-साथ शामिल होते हैं। डेटा से अंतर एक पद है। द्रव्यमान, संवेग, ऊर्जा और रासायनिक प्रजाति समीकरण की त्रुटियाँ अलग-अलग पद हैं। सीमा शर्तें और प्रारंभिक अवस्था भी पद के रूप में डाली जाती हैं। प्रशिक्षण इन कई पदों को तौलते हुए साथ-साथ कम करता है।

ऐसा करने से बड़ा लाभ मिलता है। डेटा कम हो तब भी भौतिकी नियम खाली जगह भर देते हैं। प्रयोगशाला में प्रायः दीवार दाब सेंसर या प्रकाशीय प्रोब जैसी चीजें ही इस्तेमाल होती हैं। इन वरिल मापों से पूरा प्रवाह नहीं जाना जा सकता। यदि भौतिकी नियमों को नियम के रूप में लगा दिया जाए, तो बीच की जगह भरी जा सकती है।

यह गुण उलटी दशा में हल की जाने वाली समस्याओं में चमकता है। सामान्य गणना में कारण डालकर परिणाम निकाला जाता है। उलटी समस्या में परिणाम देखकर कारण खोजा जाता है। केवल दीवार का तापमान देखकर भीतर का ऊष्मा स्रोत पता लगाना इसका उदाहरण है।

भौतिकी-सूचि न्यूरल नेटवर्क (PINN) ऐसी प्रतिलोम समस्याओं में मजबूत होता है। कारण यह है कि वह माप और भौतिकी को एक ही हानि फलन में साथ संभालता है।

रॉकेट परीक्षण में यह क्षमता मूल्यवान है। दहन कक्ष के भीतर बहुत से सेंसर लगाना कठिन है। वह गर्म और संकरा होता है, इसलिए सेंसर टकि नहीं पाते। इसलिए बाहर से कुछ ही बटु मापे जाते हैं। इन कुछ बटुओं से भीतर की अवस्था को फरि से बनाना मुख्य काम है। भौतिकी-सूचि न्यूरल नेटवर्क (PINN) माप और भीतर की अवस्था के बीच पुल बनाता है।

इस हानि फलन में तौलने की कठिनाई छपि है। समस्या यह है कि प्रत्येक पद का महत्व कैसे तय किया जाए। यदि किसी पद को बहुत बड़ा भार दिया जाए, तो दूसरे पद अनदेखे रह जाते हैं। केवल भौतिकी त्रुटि का पीछा करने पर डेटा छूट जाता है। केवल डेटा का पीछा करने पर भौतिकी टूट जाती है। इस संतुलन को पकड़ने की वधि शोध का बड़ा वषिय है।

इस तौलने की प्रक्रिया की तुलना पकवान में स्वाद मलाने से की जा सकती है। नमक अधिक हो तो स्वाद खारा होता है, चीनी अधिक हो तो मीठा। कोई एक चीज अधिक हो जाए तो स्वाद बगिड़ जाता है। हानि फलन के कई पदों के साथ भी यही होता है। एक पद अत्यधिक मजबूत हो जाए तो प्रशिक्षण एक ओर झुक जाता है। इसलिए भार को अपने आप समायोजित करने की वधियों पर भी शोध होता है।

इस अवधारणा को पहली बार व्यापक रूप से सामने लाने वाला अध्ययन रैसी (Raissi) आदिका 2019 का शोधपत्र है। उसके बाद यह दहन क्षेत्र में व्यापक रूप से फैला। 2025 में दहन के लिए भौतिकी-सूचि अधिगम को व्यवस्थित करने वाली एक व्यापक समीक्षा भी आई। यह समीक्षा रासायनिक प्रतिक्रिया, प्रतिक्रियाशील प्रवाह और अन्य दहन समस्याओं को प्रकारों में बांटी है। यह दिखाती है कि भौतिकी-सूचि अधिगम एक बड़ी धारा बन चुका है।

सीमाओं को भी साफ-साफ देखना चाहिए। भौतिकी-सूचि न्यूरल नेटवर्क (PINN) एक शर्त के लिए अनुकूल हल अच्छी तरह खोजता है। लेकिन शर्त बदल जाए तो कई बार फरि से प्रशिक्षण करना पड़ता है। व्यापक शर्तों को एक बार में समेटना अभी कठिन है। तीव्र आघात तरंग या तेज लौ सतह पर प्रशिक्षण डगमगा भी सकता है। इन कमजोरियों को भरने का शोध आज भी जारी है।

8.3 कठोर प्रतिक्रिया गतिकी और संरक्षण-बद्ध भौतिक अधिगम

8.3.1 रासायनिक प्रतिक्रिया की संख्यात्मक कठोरता और मानक अधिगम का ध्वंस

कठोरता तब पैदा होती है जब कुछ परिवर्तन बहुत तेज और कुछ परिवर्तन धीमे होते हैं। दहन रासायन में ऐसी स्थिति आम है। रेडकिल जैसे मध्यवर्ती पदार्थ पल भर में बनते और खत्म हो जाते हैं। इसके उलट तापमान या मुख्य घटक अपेक्षाकृत धीरे बदलते हैं।

आइए देखें कि समय का यह अंतर कितना बड़ा है। तेज प्रतिक्रियाएं एक अरबवें सेकंड के स्तर पर चलती हैं। धीमा प्रवाह एक हजारवें सेकंड के स्तर पर चलता है। दोनों पैमानों का अंतर दस लाख गुना से भी अधिक है। यही बड़ा फासला गणना को हलाने वाली कठोरता की जड़ बनता है।

तेज और धीमे परिवर्तनों को एक ही अंतराल से हल करने पर समस्या पैदा होती है। अंतराल को तेज प्रतिक्रिया के अनुरूप रखें तो गणना अंतहीन लंबी हो जाती है। धीमे प्रवाह के अनुरूप रखें तो तेज प्रतिक्रिया छूट जाती है और गणना अपसारी हो जाती है। परंपरागत संख्यात्मक वश्लेषण भी इस जगह लंबे समय तक जूझता रहा है। इसलिए परंपरागत संख्यात्मक वश्लेषण ने वशिष समय समाकलन वधियों से इसका सामना किया है।

समय का यह अंतर फोटो खींचने जैसा है। मान लें कि हम हमगिबर्ड के पंखों की फड़फड़ाहट और कछुए की चाल को एक ही तस्वीर में लेना चाहते हैं। हमगिबर्ड के अनुसार चले तो शटर अनगिनत बार दबाना पड़ेगा। कछुए के अनुसार चले तो हमगिबर्ड धुंधला हो जाएगा। एक ही फ्रेम में दोनों को रखना कठिन है। दहन की तेज प्रतिक्रिया और धीमा प्रवाह भी ऐसे ही हैं।

मानक भौतिकी-सूचि न्यूरल नेटवर्क (PINN) यहां अक्सर टूट जाता है। यह न्यूरल नेटवर्क सभी त्रुटियों को एक साथ घटाने की कोशिश करता है। तेज प्रतिक्रिया से बनने वाली बड़ी त्रुटि प्रशिक्षण पर हावी हो जाती है। तब वह धीमे चरों का संतुलन ठीक से नहीं सीख पाता। प्रशिक्षण के इस तरह एक ओर झुक जाने की घटना को ग्रेडिएंट पैथोलॉजी कहा जाता है।

इस पैथोलॉजी को चित्र की तरह सोचें। मान लें कि एक तेज आवाज वाला व्यक्ति पूरी बैठक पर कब्जा कर लेता है। शांत लोगों की बात दब जाती है। बैठक एक ही दशा में झुक जाती है। तेज प्रतिक्रिया की बड़ी त्रुटि वही तेज आवाज है। इसलिए धीमे चरों का संतुलन प्रशिक्षण में पीछे धकेल दिया जाता है।

यहां दो और कारण छपि हैं। एक कारण यह है कि न्यूरल नेटवर्क तेज बदलावों को देर से सीखता है। न्यूरल नेटवर्क पहले मृदु प्रवाह सीखता है और तीखे बदलावों को बाद के लिए टालता है। इस गुण को स्पेक्ट्रल बायस कहा जाता है। प्रज्वलन के क्षण का तीखा परिवर्तन यही तीखा हसिसा है। दूसरा कारण समय की कारणिकता को न नभि पाने की समस्या है। दहन में पहले का क्षण बाद के क्षण का कारण बनता है। लेकिन मानक प्रशिक्षण सभी समयों को एक साथ मलाने की कोशिश करता है। तब कारण और परिणाम का क्रम बगिड़ जाता है। अधिक

बगिड़ने पर हल ऐसी सपाट अवस्था में बैठ जाता है जिसमें कोई प्रतिक्रिया ही नहीं होती। इसलिए समय को बांटकर क्रम से सीखाने या प्रत्येक रासायनिक प्रजातों के लिए अलग भार देने की वधियाँ आईं।

एक और समस्या संरक्षण नियम का टूटना है। कई पदों को साथ-साथ तौलते समय संतुलन टूट जाता है। रासायनिक प्रजातियों की सांद्रता का योग हमेशा स्थिर होना चाहिए। परमाणुओं की संख्या भी प्रतिक्रिया से पहले और बाद में समान रहनी चाहिए। यह नियम टूटे तो ऋणात्मक सांद्रता जैसे नरिथक मान निकलते हैं।

आइए देखें कि ऋणात्मक सांद्रता इतनी बड़ी समस्या क्यों है। किसी पदार्थ की मात्रा ऋणात्मक होना वास्तविकता में नहीं होता। पानी माइनस एक कप नहीं हो सकता। यदि गणना ऐसा मान दे, तो अगला चरण टूट जाता है। प्रतिक्रिया गतिकी गणना अनयितरि हो जाती है या रुक जाती है। इसलिए सांद्रता को ऋणात्मक होने से अवश्य रोकना पड़ता है।

इस समस्या से निपटने वाले कई शुरुआती अध्ययन हैं। जी (Ji) आदिका 2021 का Stiff-PINN इसका प्रतिनिधि उदाहरण है। इस अध्ययन ने कठोर रासायन को संभालने के लिए विशेष प्रक्रिया जोड़ी। बहु-पैमाना भौतिकी-सूचित न्यूरल नेटवर्क भी लगभग उसी समय आया। इन अध्ययनों ने दिखाया कि कठोरता अधिगम के लिए कतिनी बड़ी दीवार है।

रॉकेट में यह दीवार और ऊंची हो जाती है। मीथेन और ऑक्सीजन के दहन में प्रतिक्रिया पथ अनेक होते हैं। संभालने वाले पदार्थों की संख्या दर्जनों तक पहुँचती है। पदार्थ बढ़ते हैं तो कठोरता भी साथ बढ़ती है। इसलिए रॉकेट दहन कठोरता समस्या के कठिन छोर पर स्थिति है। इसलिए भौतिकी को मजबूत रूप से बांधने की वधि उतनी ही जरूरी है।

8.3.2 संरक्षण बाधाओं और समय समाकलन का संयोजन

कठोरता समस्या को हल करने की कुंजी भौतिकी को और दृढ़ता से बांधने में है। भौतिकी लगाने की वधियाँ मोटे तौर पर दो हैं। एक सॉफ्ट बाधा है, जिसमें नियम तोड़ने पर दंड दिया जाता है। हानि फिलन में भौतिकी त्रुटि पद जोड़ने की वधि इसी में आती है। दूसरी हार्ड बाधा है, जिसमें नियम को तोड़ना असंभव बनाने के लिए उसे संरचना में ही बैठा दिया जाता है। कठोरता जतिनी गंभीर होती है, ये दोनों वधियाँ उतनी ही साथ इस्तेमाल होती हैं।

पहला औजार प्रमाणित समय समाकलक को न्यूरल नेटवर्क से जोड़ना है। रुनगे-कुट्टा वधि समय को छोटे-छोटे भागों में बांटकर अवकल समीकरण हल करने की मानक तकनीक है। पर इसका प्रकार चुनना पड़ता है। आगे से सीधे मान बढ़ाने वाली स्पष्ट वधिकठोरता समस्या में कमजोर होती है। स्थिर रूप से हल करने के लिए समय अंतराल को जरूरत से अधिक छोटा करना पड़ता है। इसलिए कठोरता समस्या में अंतर्निहित श्रेणी की स्थिर समाकलन वधियाँ इस्तेमाल होती हैं। न्यूरल नेटवर्क के भीतर इसी तरह स्थिरता-सदिश समाकलन संरचना डाली जाती है। तब डीप लर्निंग लंबे समय से बने संख्यात्मक विश्लेषण की स्थिरता प्राप्त करती है।

दूसरा औजार संरक्षण को बाध्य करने वाला प्रक्षेपण है। न्यूरल नेटवर्क ने जो सांद्रता दी है, उसे ज्यों का त्यों इस्तेमाल नहीं किया जाता। पहले मान को हमेशा धनात्मक बनाया जाता है। फिर योग स्थिर रहे, इसके लिए उसे फिर से मिलाया जाता है। अंत में परमाणु संख्या संरक्षित रहे, इसके लिए मान समायोजित किए जाते हैं। इस प्रक्रिया से गुजरने के बाद भौतिकी तोड़ने वाला मान पैदा ही नहीं होता।

प्रक्षेपण की तुलना द्वारपाल से की जा सकती है। न्यूरल नेटवर्क कोई भी मान दे, दरवाजे पर उसकी जांच होती है। नियम से मेल न खाए तो उसे पास के सही मान में सुधार दिया जाता है। ऋणात्मक मान को धनात्मक किया जाता है। योग बगिड़ जाए तो फिर से मिलाया जाता है। इसलिए बाहर जाने वाला मान हमेशा नियम का पालन करता है।

इस वधि और सॉफ्ट वधि में अंतर है। सॉफ्ट वधि नियम टूटने पर केवल दंड देती है। दंड प्रशिक्षण को दशा देता है, पर उल्लंघन को रोकता नहीं। हार्ड वधि उल्लंघन को संरचना से ही रोक देती है। प्रशिक्षण कमजोर हो तब भी भौतिकी बनी रहती है। इसलिए यह उस रॉकेट के लिए उपयुक्त वधि है जिसमें सुरक्षा सबसे ऊपर है।

वास्तविक उदाहरण के रूप में CRK-PINN है। यह अध्ययन दहन प्रतिक्रिया गतिकी समीकरण को भौतिकी-सूचित न्यूरल नेटवर्क (PINN) से हल करने का उदाहरण है। इसके लेखक झांग शहोंग, झांग ची और वांग बोसेन हैं। यह शोधपत्र सहकर्मि समीक्षा से गुजरकर Combustion and Flame पत्रिका में प्रकाशित हुआ। यह वधि भौतिकी नियमों को हानि फिलन के पद के रूप में डालने वाली सॉफ्ट बाधा का उपयोग करती है। इसमें द्रव्यमान क्रिया नियम और अर्रेनियस नियम को हानि में रखा गया। एन्थैल्पी संरक्षण, तत्व संरक्षण और सांद्रता-योग संरक्षण भी इसी तरह लगाए गए। ऊपर की हार्ड प्रक्षेपण वधि के विपरीत, यह दंड से भौतिकी को दशा देने वाली वधि है।

प्रदर्शन भी सार्वजनिक है। हाइड्रोजन और वायु की प्रतिक्रिया प्रणाली में गणना तेज हुई। इसने दस प्रकार के पदार्थ और इक्कीस प्रतिक्रियाएँ संभालीं। मानक गणना की तुलना में यह लगभग छह गुना से चौदह गुना तेज थी। वास्तविक प्रतिक्रियाशील प्रवाह गणना से जोड़ने पर भी यह लगभग दो गुना से पांच गुना तेज थी। यह ऐसा उदाहरण है जिसमें भौतिकी नियमों को नभिते हुए गणना गति भी मिली।

कई गुना तेज होने का अर्थ समझना जरूरी है। रासायनिक प्रतिक्रिया की गणना दहन विश्लेषण में समय लेने वाला बड़ा हिस्सा है। कुल गणना समय का बड़ा भाग इसी में जाता है। यदि इस भाग को दस गुना तेज किया जाए, तो कुल समय बहुत घटता है। कई दिनों लगने वाली गणना एक दिन में घट जाती है। उतना ही डिजाइन सुधारने और फिर से परीक्षण करने का चक्र तेज हो जाता है।

यहां यह स्पष्ट कर देना चाहिए कि सॉफ्ट बाधा और हार्ड बाधा को मिलाकर न कहा जाए। CRK-PINN भौतिकी को हानि से दृष्टि देने वाली सॉफ्ट बाधा है। मान को बलपूर्वक सुधारने वाले हार्ड प्रक्षेपण से इसका स्वभाव अलग है। दोनों बाधाओं साथ भी इस्तेमाल हो सकती हैं और अलग भी। सॉफ्ट बाधा लचीली है, पर भौतिकी उल्लंघन को पूरी तरह नहीं रोकती। हार्ड बाधा उल्लंघन रोकती है, पर संरचना जटिल हो जाती है। कसि कतिना इस्तेमाल करना है, यह डिजाइन का निर्णय है।

इस तरीके से मिलने वाला सबक सरल और स्पष्ट है। बात यह है कि यह प्रमाणित संख्यात्मक विश्लेषण के ज्ञान को नहीं छोड़ता। रूंगे-कुट्टा जैसे तरीके दशकों तक सुधारे गए हैं। कृत्रिम बुद्धिमत्ता इसी ज्ञान के ऊपर रखी जाती है और अपनी शक्ति बढ़ाती है। यह ऐसा तरीका है जिसमें पुराना भौतिकी ज्ञान और नया अधिगम आमने-सामने नहीं आते, बल्कि एक-दूसरे की मदद करते हैं।

लेकिन इसकी सीमाएँ भी स्पष्ट हैं। ऐसे तरीकों की जाँच उसी प्रतिक्रिया तंत्र के भीतर हुई है जैसी उन्होंने संभाला। रॉकेट में मीथेन और ऑक्सीजन का दहन इससे अधिक जटिल है। पदार्थों और प्रतिक्रियाओं की संख्या कहीं अधिक होती है। नए प्रतिक्रिया तंत्र में ले जाने के लिए फिर से सिखाना और जाँचना पड़ता है। भौतिकी को जितना मजबूत बाँधा जाता है, गणना उतनी भारी हो जाती है। यह भी एक लेन-देन है।

8.4 कोलमोगोरोव-आर्नोल्ड नेटवर्क आधारित प्रतिक्रियाशील प्रवाह मॉडलिंग

8.4.1 संयोजक रेखाओं पर फलन रखने का आधार और अनुकूली सक्रियण फलन

पहले सामान्य न्यूरल नेटवर्क की रचना को याद करें। न्यूरल नेटवर्क नोडों और उन्हें जोड़ने वाली रेखाओं से बनता है। नोडों में तय सक्रियण फलन रखे जाते हैं। संयोजक रेखाओं पर केवल वेट नाम की संख्याएँ जुड़ी होती हैं। अधिगम इन वेट संख्याओं को समायोजित करने का काम है।

पहले सक्रियण फलन का अर्थ खोलकर देखें। न्यूरल नेटवर्क इनपुट लेता है और उसे किसी वक्र से गुजारकर बाहर भेजता है। यही वक्र सक्रियण फलन है। सामान्य न्यूरल नेटवर्क इस वक्र का आकार स्थिर रखता है। तय वक्रों को कई परतों में मिलाकर जटिल संबंध बनाता है। अधिगम में वक्र का आकार वैसा ही रहता है, केवल उनके मिलने की ताकत बदली जाती है।

कोलमोगोरोव-आर्नोल्ड नेटवर्क इस व्यवस्था को उलट देता है। यह नोड पर नहीं, बल्कि संयोजक रेखा पर फलन रखता है। वह फलन स्वयं अधिगम से बदलता है। यह तय आकार नहीं अपनाता, बल्कि वक्र को लचीले ढंग से गढ़ता है। यह विचार बहुत पहले सिद्ध किए गए एक गणितीय प्रमेय से आया है।

वह प्रमेय कोलमोगोरोव-आर्नोल्ड निरूपण प्रमेय है। यह प्रमेय कहता है कि जटिल फलन को सरल एक-आयामी फलनों के योग के रूप में दिखाया जा सकता है। यह रचना हर संयोजक रेखा के फलन को लचीले वक्र के रूप में व्यक्त करती है। यह वक्र स्थानीय रूप से अपना आकार बदल सकता है। इसलिए लौ जैसी तीव्र बदलाव वाली जगहों को चुनकर ही अधिक बारीकी से संवारा जा सकता है।

इस प्रमेय को ब्लॉक जोड़ने के उदाहरण में बदलकर देखें। कोई भी जटिल आकार कुछ मूल ब्लॉकों के मेल से बनता है। बड़ी रचना को छोटे टुकड़ों में बाँटकर फिर जोड़ा जाता है। जटिल फलन भी सरल एक-आयामी टुकड़ों के योग में बाँटा जा सकता है। कोलमोगोरोव-आर्नोल्ड नेटवर्क इसी बाँट को अपनी रचना बनाता है। इस अर्थ में पुराना गणित नए न्यूरल नेटवर्क का आधार बन गया।

इस वक्र को बनाने की सामग्री B-स्प्लेइन है। B-स्प्लेइन कई टुकड़ा-वक्रों को चिकने ढंग से जोड़ने का तरीका है। यह उस औजार की ही श्रेणी का है जिसका उपयोग वाहन डिजाइनर मुलायम वक्र खींचने में करते हैं। हर टुकड़ा केवल अपने ही अंतराल में प्रभाव डालता है। इसलिए एक जगह सुधार करने पर दूसरी जगह नहीं हलती।

इस स्थानीयता से अधिगम को लाभ मिलता है। जहाँ लौ खड़ी होती है, केवल उस सँकरे अंतराल को बारीक बाँटा जा सकता है। बाकी चौड़े अंतराल को वरिल छोड़ा जा सकता है। यह संसाधनों को जरूरत वाली जगह पर केंद्रित करने का तरीका है। इसे ग्रिड परिष्करण कहा जाता है। इसलिए गणना बचाते हुए भी जरूरी सटीकता मिलती है।

यह गुण क्यों अच्छा है, इसका अंदाजा हो जाता है। कौन-सा इनपुट किस आउटपुट को प्रभावित करता है, यह अधिक साफ दिखता है। केवल जरूरी अंतरालों को सटीक रूप से व्यक्त किया जा सकता है। फलन को आँख से देखकर जाँचना भी आसान होता है। यह दहन जैसी स्थानीय बदलाव अधिक वाली समस्या के अनुकूल है।

नोड और एज के अंतर को जीवन के उदाहरण से देखें। सामान्य न्यूरल नेटवर्क तय आकार के कई लेंसों को एक-दूसरे पर रखने जैसा है। लेंस का आकार स्थिर रहता है और केवल उसके असर की ताकत बदली जाती है। कोलमोगोरोव-आर्नोल्ड नेटवर्क लेंस के आकार को ही तराशता है। इसलिए इच्छित अपवर्तन अधिक स्वतंत्र रूप से बनाया जा सकता है। पर लेंस तराशने का काम अधिक मेहनत माँगता है।

बेशक यह रचना सर्वशक्तिमान नहीं है। अधगिम अधिक कठिन हो सकता है। वक्र को जतिना बारीक बाँटा जाता है, समायोजित करने वाले मान उतने बढ़ते हैं। समस्या के अनुसार कभी सामान्य न्यूरल नेटवर्क बेहतर हो सकता है। नई रचना को विकल्पों में से एक मानना उचित है।

8.4.2 लौ-पृष्ठ अभिव्यक्तिक्षमता और पैरामीटर हल्कापन

लौ-पृष्ठ वह पतला क्षेत्र है जहाँ प्रतिक्रिया केंद्रित होती है। यहाँ तापमान बहुत कम दूरी में तेज़ी से ऊपर उठता है। कमरे के तापमान की गैस पलक झपकते हजारों डिग्री तक पहुँचती है। सांद्रता भी अचानक बदल जाती है। इस सँकरे अंतराल के तीखे बदलाव को गणना से व्यक्त करना कठिन है।

सामान्य न्यूरल नेटवर्क ऐसे तीव्र बदलावों में कमजोर होता है। तय सक्रियण फलनों से धारदार परत को चकिने ढंग से खींचना कठिन है। जबरन मलाने पर आसपास लहर जैसी तरुटियाँ बनती हैं। उच्च आवृत्ति सूचना को देर से सीखने का गुण भी होता है। इन गुणों के कारण लौ-पृष्ठ गणना का परिणाम धुँधला हो जाता है।

इन लहरों को झंडे की तस्वीर से समझें। मान लें कि सीधी खड़ी डंडी को केवल मुलायम ब्रश से खींचा जाता है। डंडी के तीखे किनारे के पास लहरदार आकृति बनती है। गणना में भी तीखे लौ-पृष्ठ के पास झूठी आकृतियाँ दिखाई देती हैं। ये आकृतियाँ वास्तविकता में नहीं होतीं। ऐसी झूठी आकृतियाँ वास्तविकता में न होने वाले संकेत बनकर पूर्वानुमान को धुँधला करती हैं।

कोलमोगोरोव-आर्नोल्ड नेटवर्क इस बटु पर अपनी ताकत दिखा सकता है। यह लचीले वक्र से तीखी परत को बेहतर खींचता है। जहाँ लौ खड़ी होती है, केवल उस सँकरे अंतराल को चुनकर बारीक बाँटा जा सकता है। जहाँ जरूरत नहीं है, वहाँ वरिल छोड़कर अपव्यय घटाया जाता है। संसाधनों को इस तरह स्थानांतरित करके उपयोग करने की अनुकूल क्षमता दहन गणना से अच्छी तरह मेल खाती है।

एक वास्तविक उदाहरण ChemKANs है। इसके लेखक कोएनिग (König), किम (Kim) और डेंग (Deng) हैं। यह अध्ययन 2025 में अकादमिक पत्रिका फजिकल केमिस्ट्री केमिकल फजिक्स (Physical Chemistry Chemical Physics) में प्रकाशित हुआ था। इसमें कोलमोगोरोव-आर्नोल्ड नेटवर्क (Kolmogorov-Arnold Networks) में प्रतिक्रिया दर और ऊष्मागतिकी के नियमों के प्रवाह को शामिल किया गया है। इसका उद्देश्य दहन रसायन विज्ञान मॉडल को सीखना और गणना को तेज़ करना है। हालाँकि, इस अध्ययन ने जसि चीज़ का सत्यापन किया वह स्थान में फ्लेम फ्रंट (flame front) नहीं है। इसने समय के साथ पदार्थों की प्रतिक्रिया करने वाली रासायनिक रिएक्टर समस्या को सीखा है। रॉकेट दहन कक्ष के स्थानिक फ्लेम फ्रंट या शॉक वेव का पुनर्निर्माण भविष्य के कार्य के रूप में बाकी है।

प्रकाशित परिणाम व्यावहारिक हैं। यह मॉडल बहुत कम समायोज्य मानों से काम करता था। शोर मल्लि डेटा में भी इसने ओवरफिटिंग के बनिा अच्छी तरह सीखा। इसने अधिकतम पंद्रह प्रतिशत शोर भी सहा। मानक गणना की तुलना में लगभग दो गुना तेज परिणाम भी दिखा। उसी शोध दल ने दबाव के अनुसार प्रतिक्रिया दर सीखने वाला बाद का प्रारंभिक अध्ययन भी प्रस्तुत किया।

शोर के प्रतिमिजबूत होने का अर्थ खोलकर देखें। वास्तविक मापन में हमेशा शोर मल्लि होता है। इसका कारण है किसेसर पूर्ण नहीं होते। शोर के प्रतिमिजबूत मॉडल इस शोर को भी याद कर लेता है। इसे ओवरफिटिंग कहा जाता है। शोर के प्रतिमिजबूत मॉडल केवल सच्चे नियम चुनकर सीखता है।

ओवरफिटिंग को परीक्षा की तैयारी से समझें। जो छात्र केवल उत्तर याद करता है, प्रश्न बदलते ही गलती करता है। जो छात्र सिद्धांत समझता है, वह नया प्रश्न भी हल करता है। शोर के प्रतिमिजबूत मॉडल सिद्धांत समझने वाले छात्र जैसा है। रॉकेट मापन सामग्री में शोर बहुत होता है। इसलिए शोर के प्रति यह मिजबूती रॉकेट मापन में मूल्यवान है।

इस मॉडल की ताकत को प्रमाणित दायरे के भीतर ही कहना चाहिए। तीन बातें प्रमाणित हुई हैं। समायोज्य मान कम हैं, शोर के प्रतिमिजबूती है, और मानक गणना की तुलना में गति लगभग दो गुना है। इससे बड़े प्रदर्शन का दावा करने वाली संख्याओं को अभी जाँच की जरूरत है। इसलिए यह पुस्तक केवल इसी प्रमाणित दायरे की बात करती है।

कोलमोगोरोव-आर्नोल्ड नेटवर्क रॉकेट के लिए क्या अर्थ रखता है। रॉकेट दहन कक्ष के भीतर भी लौ-पृष्ठ पतली परत की तरह खड़ा होता है। इस पतली परत को ठीक से खींचना जरूरी है ताकि ऊष्मा और दबाव का सही पूर्वानुमान हो। पैरामीटर कम हों तो गणना हल्की हो जाती है। हल्का मॉडल वास्तविक समय की गणना में उपयोगी होता है। इसलिए यह रचना वास्तविक समय नदिन की उम्मीदवार के रूप में ध्यान पा रही है।

पैरामीटर कम होने के अर्थ का वजन समझें। पैरामीटर उन संख्याओं की संख्या है जिन्हें मॉडल समायोजित करता है। ये संख्याएँ अधिक हो तो सीखने के लिए अधिक डेटा चाहिए। गणना भी भारी होती है और मेमोरी भी अधिक लगती है। कम पैरामीटर से वही काम हो जाए तो कई तरह से लाभ है। इसे रॉकेट पर रखे छोटे कंप्यूटर में भी चलाया जा सकता है।

सीमाओं को भी साथ देखना चाहिए। ये उदाहरण अपेक्षाकृत सरल प्रतिक्रिया तंत्रों में जाँचे गए हैं। रासायनिक प्रजातियाँ दर्जनों तक बढ़ें तो संयोजक रेखाएँ वसिफोटक रूप से बढ़ जाती हैं। तब मेमोरी और प्रशिक्षण समय बहुत बढ़ सकते हैं। इसी कारण रचना को और हल्का बनाने के अध्ययन जारी हैं। रॉकेट का उच्च-दाब अशांत दहन कहीं अधिक जटिल है। इस रचना को वास्तविक इंजन डिजाइन में उपयोग करने के लिए अभी दूरी बाकी है। खुले कोड, तुलनात्मक प्रयोग और स्वतंत्र सत्यापन की अधिक जरूरत है। अभी इसे आशाजनक उम्मीदवार रचना के रूप में लेना उचित है।

8.5 फलन को फलन में बदलने वाला फूरियर न्यूरल ऑपरेटर

8.5.1 ऑपरेटर अधिगम का सिद्धांत और ग्राडि-स्वतंत्रता

ऑपरेटर वह नियम है जो एक फलन से दूसरे फलन तक जाता है। बात कठिन लगती है, इसलिए उदाहरण देखें। मान लें कि दिन कक्षा के प्रवेश द्वार की प्रवाह दर वितरण को इनपुट दिया जाता है। तब पूरे दहन कक्षा का तापमान वितरण निकलता है। प्रवेश द्वार की इस तस्वीर को तापमान की तस्वीर में बदलने वाला नियम ऑपरेटर है।

फलन से फलन की मैपिंग को खाना पकाने से समझें। मान लें कि पूरी सामग्री सूची डालने पर तैयार पकवान की तस्वीर निकलती है। सामग्री थोड़ी बदलती है तो पकवान भी साथ बदलता है। ऑपरेटर अधिगम इसी पूरे रूपांतरण को सीखता है। यह सामग्री के एक-एक मान को नहीं, बल्कि पूरे संबंध को सीखता है। इसलिए शर्तें बदलने पर भी जल्दी उत्तर देता है।

सामान्य न्यूरल नेटवर्क कुछ संख्याओं को कुछ संख्याओं में बदलता है। ऑपरेटर अधिगम एक तस्वीर को दूसरी तस्वीर में बदलता है। इसलिए यह पूरे प्रवाह क्षेत्र को एक साथ संभालता है। इस विचार को पहले व्यापक बनाने वाले अध्ययनों में DeepONet है। फूरियर न्यूरल ऑपरेटर भी इसी ऑपरेटर अधिगम में आने वाला तरीका है।

यह अंतर क्यों बड़ा है, इसे समझें। हर शर्त के लिए गणना फिर से की जाए तो गतिधीमी होती है। एक बार ऑपरेटर सीख लेने पर कई शर्तों के उत्तर जल्दी मिलते हैं। प्रवेश शर्त बदलने पर भी फिर से सीखने की जरूरत नहीं रहती। डिजाइन में शर्तों को अनगिनत बार बदलकर देखा जाता है। इसलिए ऑपरेटर अधिगम डिजाइन उपकरण के रूप में ध्यान पाता है।

फूरियर न्यूरल ऑपरेटर का मूल फूरियर रूपांतरण में है। फूरियर रूपांतरण जटिल आकार को कई तरंगों के योग में बदलने की तकनीक है। कम आवृत्ति वाली तरंगें प्रवाह की बड़ी रचना रखती हैं। अधिक आवृत्ति वाली तरंगें महीन आकृतियों जैसे विवरण रखती हैं। यह न्यूरल नेटवर्क मुख्य रूप से कम आवृत्ति घटकों को सीखकर बड़े प्रवाह को जल्दी खींचता है।

इस तरीके के अपने लाभ हैं। न्यूरल नेटवर्क प्रवाह को तरंगों के योग के रूप में संभालता है। बड़ा प्रवाह कम आवृत्ति की कुछ तरंगों से संक्षेप में और जल्दी पकड़ा जाता है। यह बड़े क्षेत्र के संबंधों को एक नजर में समेटने में लाभकारी है। लेकिन यह तरीका समीकरणों के अवकलज को सीधे हल करने वाली संख्यात्मक विधि नहीं है। केवल कम आवृत्तियों को छोड़कर अधिक आवृत्तियों को काट देने से गणना हल्की होती है। लेकिन यही कटाव शॉक वेव या लौ-पृष्ठ जैसे तीखे भागों को और धुंधला कर सकता है। इसलिए जहाँ विवरण जरूरी हो, वहाँ सावधानी चाहिए।

इस धुंधलेपन को तस्वीर से समझें। फोकस बिगड़ी हुई तस्वीर में सीमाएँ धुंधली होती हैं। तीखी रेखाएँ फैली हुई दिखती हैं। अधिक आवृत्तियाँ जितनी अधिक काटी जाती हैं, ऐसा फैलाव उतना बनता है। लौ की तीखी सीमा मटि सकती है। इसलिए ऐसे स्थानों पर अधिक आवृत्तियों को बचाने वाली अलग प्रक्रिया चाहिए।

इस तरीके में ध्यान खींचने वाला गुण ग्राडि-स्वतंत्रता है। यह मॉडल गणना ग्राडि की बारीकी से स्वतंत्र रूप से परिभाषित होता है। कम रजॉल्यूशन डेटा से सीखने के बाद इसे अधिक बारीक ग्राडि पर लागू किया जा सकता है। इसे ज़ीरो-शॉट सुपर-रजॉल्यूशन कहा जाता है। यह कम रजॉल्यूशन तस्वीर को उच्च रजॉल्यूशन में बहाल करने जैसा है। लेकिन यह सैद्धांतिक गुण और कुछ प्रयोगों में दिखा परिणाम है। नए रजॉल्यूशन पर शुद्धता अपने-आप सुनिश्चित नहीं होती।

सामान्य न्यूरल नेटवर्क ऐसा काम नहीं कर सकता। इनपुट और आउटपुट का आकार शुरू से तय होता है। ग्राडि बदलने पर मॉडल फिर से बनाना पड़ता है। फूरियर न्यूरल ऑपरेटर अलग है। यह प्रवाह को ग्राडि नहीं, बल्कि फलन के रूप में संभालता है। इसलिए रजॉल्यूशन बदलने पर भी वही मॉडल इस्तेमाल होता है।

फूरियर रूपांतरण को रेडियो से समझें। रेडियो कई प्रसारणों को आवृत्तिके आधार पर अलग करके प्राप्त करता है। कम आवृत्ति और अधिक आवृत्ति अलग-अलग जानकारी रखती हैं। फूरियर न्यूरल ऑपरेटर भी प्रवाह को आवृत्तिके आधार पर बाँटता है। बड़ा प्रवाह कम आवृत्ति में और महीन आकृतियाँ अधिक आवृत्ति में रहती हैं। यह न्यूरल नेटवर्क कम आवृत्ति वाले भाग को चुनकर बड़े प्रवाह को जल्दी पकड़ता है।

ग्रिड-स्वतंत्रता रॉकेट गणना को बड़ा लाभ देती है। विकास की शुरुआत में मोटे ग्रिड से कई विकल्प जल्दी देखे जाते हैं। अच्छा विकल्प चुनने के बाद बारीक ग्रिड से सटीक जाँच की जाती है। उस समय मॉडल को फरि से सीखने की जरूरत नहीं होती। वही मॉडल दोनों रजिऑल्यूशन में जस का तस इस्तेमाल होता है, इसलिए समय और लागत दोनों घटते हैं।

लेकिन यह हर समस्या में अपने-आप नहीं होता। शॉक वेव जैसी जगहें कठिन होती हैं जहाँ मान अचानक कट जाता है। पतले लौ-पृष्ठ और दीवार के पास की अशांत पर भी सावधानी चाहिए। ऐसी जगहों में उच्च आवृत्त सूचना महत्वपूर्ण होती है। अलग प्रक्रिया और सत्यापन साथ ही तभी भरोसा किया जा सकता है।

8.5.2 दहन प्रवाह के लिए न्यूरल ऑपरेटर

दहन ऊष्मा, प्रवाह और रसायन के उलझाव वाली कठिन समस्या है। इस समस्या के अनुरूप न्यूरल ऑपरेटर बनाने पर शोध जारी है। कई दल अलग-अलग तरीके आजमा रहे हैं। यहाँ प्रमाणित नवीन मामलों को अवधारणा के केंद्र में रखकर देखा जाता है।

एक दशिया ऑपरेटर के माध्यम से स्टिफ़ केमिस्ट्री (stiff chemistry) को सीखने का मार्ग है। वसितारति फूरियर न्यूरल ऑपरेटर (EFNO) इसका एक उदाहरण है। इसके लेखक वोंग (Wong), ली (Li), झांग (Zhang), चैन (Chen) और झोउ (Zhou) हैं। इस अध्ययन ने न सीखी गई परिस्थितियों में भी स्टिफ़ केमिस्ट्री को हल करने का प्रयास किया। इसका परीक्षण शून्य-आयामी हाइड्रोजन स्वतः-प्रज्वलन और त्रि-आयामी हाइड्रोजन-अमोनिया जेट फ्लेम में किया गया था। इसने बिना सीखी गई स्थितियों में भी अच्छी तरह से सामान्यीकृत होने का गुण दिखाया। यह वसितारति ऑपरेटर अध्ययन अकादमिक पत्रिका कम्बशन एंड फ्लेम (Combustion and Flame) में प्रकाशित हुआ था।

आइए “स्वतः प्रज्वलन” शब्द को खोलकर समझें। ईंधन और ऑक्सीजन को गरम रखा जाए तो आग अपने आप लग जाती है। यह बनिा माचिस के स्वयं जल उठने की घटना है। इस क्षण की रसायन प्रक्रिया बहुत तेज होती है और उसकी कठोरता बड़ी होती है। वसितारति ऑपरेटर ने इसी कठिन क्षण को सीखने की कोशिश की। यह कठोर रसायन के परीक्षण के लिए अक्सर इस्तेमाल की जाने वाली समस्या है।

आइए देखें कि वसितारति ऑपरेटर क्यों महत्वपूर्ण है। सामान्य न्यूरल नेटवर्क सीखी हुई स्थितियों में ही ठीक बैठता है। तापमान या दबाव थोड़ा भी हट जाए तो वह चूक जाता है। वसितारति ऑपरेटर ने इस दीवार को नीचा करने की कोशिश की। उसने परीक्षण में न सीखी गई स्थितियों तक भी कुछ हद तक सामान्यीकरण किया। इसका अर्थ है कि उसने नई रॉकेट स्थितियों में भी इस्तेमाल की संभावना दिखाई।

एक और दशिया त्रि-आयामी अभिक्रियाशील अशांत प्रवाह को पूरा सीखने की है। एक अध्ययन ने इसे यूनेट संरचना जोड़े गए फूरिए न्यूरल ऑपरेटर से संभाला। यूनेट बड़े चित्र और बारीकियों को साथ संभालने वाली न्यूरल नेटवर्क संरचना है। इसने संपीड्य अभिक्रियाशील अशांत प्रवाह की गति, तापमान और घनत्व की आवृत्त विशेषताओं को अच्छी तरह दोहराया। इसने मौजूदा गणना की तुलना में बहुत तेजी से प्रवाह का अनुमान लगाया। ऐसे परिणाम प्रतनिधि मॉडल की संभावना दिखाते हैं। इस श्रेणी के कई अध्ययन अभी सहकर्म समीक्षा से पहले के शुरुआती चरण में हैं।

आवृत्त विशेषताओं को अच्छी तरह मलाने का अर्थ भी समझें। प्रवाह में बड़े भंवर और छोटे भंवर मलि होते हैं। हर आकार के भंवर में अपनी ऊर्जा होती है। इस ऊर्जा वतिरण को ठीक खींच पाना एक महत्वपूर्ण कसौटी है। यदि बड़ा प्रवाह तो मलि जाए पर छोटे भंवर छूट जाएँ, तो वह आधा काम है। अच्छा ऑपरेटर बड़े प्रवाह और छोटे भंवरों के इस वतिरण को व्यापक रूप से दोहराता है।

तीसरी दशिया विकिरण ऊष्मा हस्तांतरण को ऑपरेटर से संभालने की है। गरम ज्वाला प्रकाश के रूप में भी ऊष्मा खोती है। इसे विकिरण ऊष्मा हस्तांतरण कहते हैं। झाओ (Zhao) आदि ने आग में विकिरण ऊष्मा हस्तांतरण हल करने वाला न्यूरल ऑपरेटर प्रस्तुत किया। यह अध्ययन रॉकेट पर नहीं, आग पर आधारित शुरुआती अध्ययन है। इसलिए इसे रॉकेट प्रमाण के रूप में नहीं फैलाया गया, बल्कि नेकिट उदाहरण के रूप में ही लिया गया है।

विकिरण ऊष्मा हस्तांतरण को अलाव से महसूस करें। अलाव के सामने खड़े हों तो चेहरा गरम लगता है। हवा गरम होने से पहले प्रकाश ऊष्मा को ले जाता है। रॉकेट दहन कक्ष के भीतर की ज्वाला भी इसी तरह प्रकाश से ऊष्मा निकालती है। यह विकिरण दीवार को गरम करता है और ज्वाला को ठंडा करता है। इसलिए सटीक अनुमान में इस विकिरण ऊष्मा को भी साथ रखना पड़ता है।

विकिरण को गणना में रखना कठिन है। प्रकाश चारों ओर फैलता है और आपस में मलिता है। हर दशिया में उसकी तीव्रता अलग होती है। इस जटिल प्रवाह को ऑपरेटर से सीखने की कोशिश आग संबंधी शोध में सामने आई। इसे रॉकेट पर लाना हो तो स्थितियों को फरि से मलाना और सत्यापति करना होगा। फरि भी यह आगे की दशिया दिखाने वाला अर्थपूर्ण शुरुआती उदाहरण है।

ये उदाहरण एक साझा लाभ दिखाते हैं। उच्च-सटीकता वाली गणना के परिणाम सीख लिए जाएँ तो तेज प्रतनिधि मॉडल बनता है। कम रेजोल्यूशन वाली गणना को उच्च रेजोल्यूशन रूप में बहाल किया जा सकता है। कम संसर वाली स्थिति में यह पूरे क्षेत्र का अनुमान लगाने वाला सहायक औजार बनता है। इसे कम समय में डिज़ाइन क्षेत्र को खंगालने में इस्तेमाल किया जा सकता है।

ऑपरेटर अधगम और भौतिकी-सूचि अधगम के मलिन की जगह भी है। न्यूरल ऑपरेटर तेज होता है, पर वह हमेशा भौतिकी का पालन नहीं करता। इसमें संरक्षण संबंधी बाधा को हानिफिलन के रूप में लगाया जा सकता है। यह ऑपरेटर की गति और भौतिकी के भरोसे को साथ पाने की कोशिश है। यह संयोजन आगे घूर्णन डेटोनेशन के उदाहरण में फरि आता है। इसलिए ये दोनों औजार एक-दूसरे से प्रतिसिपर्धा नहीं करते, बल्कि जोड़ी बनाते हैं।

यहाँ यह स्पष्ट कर दें कि इन उदाहरणों को कैसे पढ़ना है। यह पुस्तक किसी विशेष मॉडल की प्रदर्शन तुलना तालिका नहीं रखती। शुरुआती शोध के आँकड़े स्थितियों के अनुसार बहुत बदलते हैं। इसके बजाय सत्यापित उदाहरणों से यह समझाती है कि न्यूरल ऑपरेटर कौन-सी भूमिका निभाता है। यहाँ आँकड़ों से अधिक वधिके उपयोग पर जोर है।

बड़े पैमाने की गणना का उदाहरण भी सामने आता है। डीपफ्लेम (DeepFlame) शोध दल ने न्यूरल नेटवर्क जोड़कर अतकिरांतिक दहन को बड़े पैमाने पर हल किया। लेखक गुओ, माओ, लउ, तान, झा और चेन हैं। सार्वजनिक सामग्री के अनुसार उन्होंने मीथेन और ऑक्सीजन के अशांत दहन की गणना सैकड़ों अरब सेल के पैमाने पर की। यह पहले की क्षमता से बहुत आगे का दायरा है। यह सौ से अधिक इंजेक्टरो वाले रॉकेट दहन की ओर बढ़ता शुरुआती अध्ययन है।

वास्तविक डिजाइन में इस्तेमाल करना हो तो जाँच की कई मंदा है। देखना होगा कि दिव्यमान और ऊर्जा संरक्षण बना रहता है या नहीं। यह पुष्टि करनी होगी कि शॉक वेव की स्थिति सही है या नहीं। यह भी देखना होगा कि रासायनिक प्रजातियों की सांद्रता ऋणात्मक न हो जाए। ऐसी जाँचों से गुजरने पर ही यह औजार बनता है। प्रतनिधि मॉडल सटीक गणना का सहायक साथी है, उसका विकल्प नहीं।

8.6 घूर्णन डेटोनेशन इंजन में शॉक वेव-दहन सीमा सतह की बहाली

8.6.1 घूर्णन डेटोनेशन इंजन के विश्लेषण की समस्या

घूर्णन डेटोनेशन इंजन (RDRE) वलयाकार दहन कक्ष का इस्तेमाल करता है। उसके भीतर डेटोनेशन तरंग वृत्त बनाते हुए तेजी से घूमती है। डेटोनेशन वह वसिफोटक दहन है जिसमें शॉक वेव और दहन जुड़े हुए साथ चलते हैं। यह तरंग ध्वनि से कई गुना तेज, प्रतसिकंड हजारों मीटर की गति से दौड़ती है।

इस वधिके लाभ यह है कि दहन स्वयं दबाव बढ़ाता है। सामान्य इंजन संपीडक या पंप से दबाव बढ़ाकर फरि ईंधन जलाते हैं। डेटोनेशन में शॉक वेव गैस को क्षण भर में संपीडित करके जलाती है। इसलिए जलने के दौरान दबाव अपने आप बढ़ता है। इसे दबाव-वृद्धि दहन कहते हैं। फरि भी ईंधन और ऑक्सीजन को धकेलने के लिए इंजेक्शन दबाव अभी भी चाहिए। दहन कक्ष में दबाव बढ़े, तब भी इंजेक्शन, मशिर्ण और निकास में हानि होती है। इसलिए पूरे इंजन के स्तर पर लाभ स्थितियों के अनुसार बदलता है। ठीक से इस्तेमाल हो तो दक्षता बढ़ने की संभावना है, इसलिए दुनिया की कई संस्थाएँ इसके विकास में लगी हैं।

आइए डेटोनेशन और सामान्य दहन का अंतर देखें। सामान्य दहन आग के धीरे-धीरे फैलने की तरह फैलता है। डेटोनेशन शॉक वेव को आगे रखकर वसिफोट की तरह फैलता है। शॉक वेव हवा को पल भर में संपीडित कर गरम करती है। उसके पीछे ईंधन तुरंत जलता है। शॉक वेव और ज्वाला की यह जुड़ी हुई संरचना बड़ा दबाव बनाती है।

समस्या यह है कि भीतर की स्थिति अत्यंत जटिल है। अग्रणी शॉक वेव और ऊष्मा छोड़ने वाला अभकि्रिया क्षेत्र आपस में जुड़ा होता है। तरिछी शॉक वेव, संपर्क सतह और अजला मशिर्ण परत आपस में उलझती हैं। ये संरचनाएँ सेकंड के दस लाखवें हसिसे के पैमाने पर परस्पर क्रिया करती हैं। इसलिए यह द्रव गतिकी की सबसे कठिन समस्याओं में गनी जाती है।

इस परस्पर क्रिया को सड़क पर दुर्घटना से तुलना करके देखें। कई वाहन एक संकरे चौराहे में एक साथ उलझ जाते हैं। एक जगह का बदलाव पल भर में पूरे क्षेत्र में फैल जाता है। डेटोनेशन के भीतर भी शॉक वेव और ज्वाला इसी तरह उलझते हैं। छोटी-सी हलचल पूरी तरंग को बदल देती है। इसलिए इस इंजन के भीतर का अनुमान और नियंत्रण कठिन है।

मापन और भी असुवधिजनक है। भूमि परीक्षण में जो देखा जा सकता है वह सीमति है। दहन कक्ष की बाहरी दीवार पर दबाव संकेत लगभग सब कुछ है। कभी-कभी अततिव् कैमरे से ज्वाला का प्रकाश भी लिया जाता है। इस प्रकाश को स्व-दीप्ति कहते हैं। यह किसी विशेष अणु की अभकि्रिया से स्वयं निकलने वाला प्रकाश है। पर ऐसे मापों से भीतर की त्रि-आयामी अवस्था सीधे नहीं जानी जा सकती।

यह भी जान लें कि घूर्णन डेटोनेशन इंजन क्यों विकसित किया जाता है। सामान्य रॉकेट इंजन स्थिर दबाव पर ईंधन जलाते हैं। डेटोनेशन दहन दबाव को स्वयं बढ़ाते हुए जलता है। उसी ईंधन से अधिक बल पाने की संभावना होती है। इंजन को छोटा और हल्का बनाने की गुंजाइश भी बनती है। इसलिए इस वधिके अगली पीढ़ी की प्रणोदन तकनीक का उम्मीदवार माना जाता है।

इस इंजन की कठिनाई को कैमरे से तुलना करके देखें। मान लें कि तेजी से घूमते लट्ठू की तस्वीर लेनी है। यदि शटर धीमा हो तो लट्ठू धुंधला होकर मलिन जाता है। डेटोनेशन तरंग लट्ठू से कहीं अधिक तेज होती है। कतिना भी तेज कैमरा हो, वह केवल बाहरी रूप पकड़ता है। भीतर देखने के लिए खाली हसिंसों को गणना से भरना पड़ता है।

डेटोनेशन तरंग की गति को संख्याओं से महसूस करें। यह तरंग प्रतिसेकंड हजारों मीटर की गति से दौड़ती है। यह गोली से भी तेज गति है। वलयाकार दहन कक्ष का एक चक्कर लगाने में मल्लिसेकंड भी नहीं लगता। इतने छोटे समय में दबाव और तापमान बहुत ऊपर-नीचे होते हैं। यह बदलाव इतना तेज है कि मानव आँख उसका पीछा नहीं कर सकती।

इसलिए बहाली मॉडल की सख्त जरूरत है। वरिल मापों से पूरे प्रवाह क्षेत्र को फिर से बनाने वाला औजार चाहिए। दबाव, तापमान, गति और रासायनिक प्रजातियों के वितरण का कम समय में अनुमान लगाना होगा। यही वह जगह है जहाँ भौतिकी-सूचि अधगम और ऑपरेटर अधगम मिलते हैं। इस अध्याय में सीखी गई वधियाँ यहाँ मलिकर काम करती हैं।

8.6.2 डेटा और भौतिकी को मलिकर बहाली और डजिटल ट्वनि

बहाली का पहला औजार सुपर-रेजोल्यूशन तकनीक है। यह वरिल या मोटे मापों को सूक्ष्म क्षेत्र के रूप में फिर से बनाती है। याओ और झांग के 2026 के अध्ययन ने चक्रीय-संगत प्रतदिवंदी न्यूरल नेटवर्क से यह प्रयास किया। प्रतदिवंदी न्यूरल नेटवर्क ऐसी संरचना है जिसमें बनाने वाला पक्ष और पहचानने वाला पक्ष प्रतसिप्रा करते हुए सीखते हैं। यह जालसाज और परीक्षण के एक-दूसरे को प्रशिक्षित करने जैसा है। इस वधि में हाइड्रोजन और हवा वाले इंजन की गणना सामग्री से सीखा। इसने मोटे प्रवाह क्षेत्र को आठ गुना सूक्ष्म बनाकर दिखाया। यह परणाम अकादमिक पत्रिका में प्रकाशित अध्ययन है।

सुपर-रेजोल्यूशन क्यों चाहिए, इसे चित्र से देखें। पुरानी तस्वीर को बड़ा करें तो वह सीढ़ियों जैसी खुरदरी हो जाती है। सुपर-रेजोल्यूशन तकनीक इस खुरदरी तस्वीर को चिकना बनाकर फिर से बनाती है। दहन गणना में भी मोटे ग्रिड का परणाम नकिलता है। इस मोटे क्षेत्र को सूक्ष्म क्षेत्र में बहाल किया जाए तो सूचना बढ़ती है। यह मोटी गणना से गणना-लागत बचाते हुए बारीकियाँ वापस पाने का रास्ता है।

अगला औजार बहु-नष्टा संलयन है। यह सस्ती नमिन-सटीकता गणना और महँगी उच्च-सटीकता गणना को जोड़ता है। वचार यह है कि थोड़े उच्च-सटीकता डेटा से भी सटीक अनुमान पाया जाए। चीप2रिच (Cheap2Rich) नामक अध्ययन ने इसे घूर्णन डेटोनेशन इंजन पर लागू किया। लेखक बाओ, जायाक, पावर्स, रामन और कर्टज हैं। यह बहु-नष्टा अध्ययन अभी सहकर्मि समीक्षा से पहले का शुरुआती अध्ययन है।

बहु-नष्टा के लाभ को घरेलू खर्च से तुलना करके देखें। केवल महँगी सामग्री इस्तेमाल करें तो घर का खर्च तंग हो जाता है। सस्ती सामग्री से आधार बनाया जाता है और जरूरी जगह पर ही अच्छी सामग्री लगाई जाती है। गणना भी ऐसी ही है। नमिन-सटीकता गणना से बड़ा ढाँचा पकड़ा जाता है। केवल महत्वपूर्ण स्थानों को उच्च-सटीकता गणना से सँवारा जाता है। इस तरह कम लागत से उच्च सटीकता के करीब पहुँचा जाता है।

इस संलयन में डेटा आत्मसात करने की अवधारणा भी आती है। डेटा आत्मसात करना वह वधि है जिसमें गणना और वास्तविक माप को लगातार मलिया जाता है। यह वैसा ही है जैसे मौसम पूर्वानुमान प्रेक्षण लेकर अपना अनुमान सुधारता है। घूर्णन डेटोनेशन इंजन में भी सेंसर संकेत आते हैं। इन संकेतों से गणना को लगातार ठीक किया जाता है। तब मॉडल का अनुमान वास्तविक इंजन अवस्था के अधिक निकट हो जाता है।

एक और औजार ऐसा जनरेटिव मॉडल है जो अवलोकन को प्रतबिबिति करता है। जनरेटिव मॉडल ऐसा न्यूरल नेटवर्क है जो अपने आप संभाव्य दृश्य बनाता है। वरिल अवलोकन को शर्त के रूप में दें तो वह पूरा क्षेत्र खींच देता है। अवलोकन स्थान बदल जाएँ, तब भी फिर से सीखे बिना इस्तेमाल की संभावना रहती है। वांग आदि ने घूर्णन डेटोनेशन दहन कक्ष की बहाली में ऐसा प्रयास प्रस्तुत किया। इसलिए कम सेंसरों के कारण अवलोकन की कमी वाली स्थिति में यह उपयोगी है।

अंतिम औजार न्यूरल ऑपरेटर और भौतिकी न्यूरल नेटवर्क का संयोजन है। न्यूरल ऑपरेटर पूरे क्षेत्र का तेजी से अनुमान लगाता है। भौतिकी न्यूरल नेटवर्क उसे संरक्षण नियमों का पालन करने के लिए थामता है। दोनों वधियों को मलाने पर तेज और भौतिकी के अनुकूल अनुमान बनता है। सेंसर संकेत आते ही वह कम समय में भीतर की अवस्था बहाल करता है।

यह बहाली परणाम डजिटल ट्वनि तक जाता है। डजिटल ट्वनि वह तकनीक है जिसमें कंप्यूटर मॉडल वास्तविक उपकरण की अवस्था का पीछा करता है। बहाल किए गए प्रवाह क्षेत्र से दीवार की ऊष्मा-भार और दहन दक्षता की गणना की जा सकती है। इंजेक्टर के ऊष्मा से कटने के जोखिम को पहले से पहचाना जा सकता है। यह दहन अस्थिरता को कम समय में संभालने वाले नयितरण से भी जुड़ता है।

दहन अस्थिरता को झूले से तुलना करके देखें। झूले को लय में धक्का दें तो वह धीरे-धीरे अधिक झूलता है। दहन कक्ष के भीतर दबाव दोलन भी ज्वाला से लय मलि जाए तो बढ़ता है। यह दोलन बढ़े तो इंजन टूट सकता है। इसलिए दोलन को जल्दी पहचानकर लय तोड़नी होगी। वास्तविक समय बहाली और नियंत्रण इसी दोलन को पहचानने और संभालने का काम करते हैं।

फरि भी यहाँ सावधान रहने की कई बातें हैं। ये बहाली अध्ययन अधिकांशतः शुरुआती चरण में हैं। बड़ी गति-वृद्धियाँ ऊँची सटीकता बताने वाले आँकड़े स्थितियों पर निर्भर करते हैं। इसलिए यह पुस्तक ऐसे आँकड़ों को मुख्य पाठ में नहीं लिखती। यह हिसा केवल डिज़ाइन अवधारणा और सत्यापन उदाहरणों से समझाया गया है।

देखें कि डिजिटल ट्विनि क्यों उपयोगी है। वास्तविक इंजन के भीतर परीक्षण के दौरान सीधे नहीं देखा जा सकता। डिजिटल ट्विनि सेसर संकेतों से भीतर की अवस्था का अनुमान लगाता है। वह खतरनाक संकेतों को मनुष्य से पहले पहचानता है। समस्या बड़ी होने से पहले संकेत भेज सकता है। पुनः प्रयोज्य रॉकेट में यह शुरुआती चेतावनी मूल्यवान है।

स्वयं-अद्यतन में छपा जोखिम भी है। यदमॉडल अपनी ही भविष्यवाणी से स्वयं को सुधारता है तो त्रुटि जमा हो सकती है। वह खुद को गलत दिशा में धकेल सकता है। 2026 के एक अध्ययन ने इस समस्या को इंगित किया। उसने भौतिकी से स्थिर किए गए स्वयं-अद्यतन डिजिटल ट्विनि का प्रस्ताव किया। इस अध्ययन ने रॉकेट नहीं, बल्कि सामान्य ऊष्मा समस्या से अवधारणा दिखाई। यह ऐसी वधि है जिसमें भौतिकी के नियम अद्यतन की लगाम पकड़ते हैं।

आइए देखें कि सीमक क्यों चाहिए। कृत्रिम बुद्धिमत्ता कभी-कभी अजीब मान देती है। यदविह मान सीधे नियंत्रण में चला जाए तो जोखिम होता है। सीमक मान को सुरक्षा सीमा से बाहर जाने से रोकता है। यह मनुष्य द्वारा तय भौतिक सीमाओं को बनाए रखने वाली बाड़ है। स्वायत्त नियंत्रण में ऐसी बाड़ अनिवार्य है।

वास्तविक इंजन नियंत्रण में इस्तेमाल करने के लिए और तैयारी चाहिए। तेज परीक्षण डेटा पर्याप्त मात्रा में जमा होना चाहिए। स्वतंत्र सत्यापन होना चाहिए। सुरक्षा बनाए रखने वाला सीमक भी होना चाहिए। यह प्रवाह दिखाता है कि यह तकनीक अभी परीक्षित हो रही है। फरि भी दिशा साफ है। डेटा और भौतिकी को साथ इस्तेमाल करने वाली बहाली अपनी जगह बना रही है।

सारांश

इस अध्याय में दहन गणना में कृत्रिम बुद्धिमत्ता को शामिल करने के कई रास्तों पर चर्चा की गई। आरंभ एक ही समस्या से हुआ। रॉकेट दहन में तेज रसायन और धीमा प्रवाह आपस में उलझे रहते हैं, इसलिए गणना बहुत अधिक होती है। पारंपरिक गणना सटीक होती है, पर धीमी होती है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता तेज होती है, पर यदविह भौतिकी का उल्लंघन करे तो जोखिम पैदा होता है।

इसका उत्तर भौतिकी-सूचि मशीन लर्निंग है। न्यूरल नेटवर्क केवल डेटा की नकल नहीं करता। वह द्रव्यमान और ऊर्जा संरक्षण जैसे नियमों का भी पालन करता है। भौतिकी-सूचि न्यूरल नेटवर्क इसका प्रमुख तरीका है। डेटा कम हो तो भी भौतिकी खाली जगह भर देती है। उलटी दिशा में हल किए जाने वाले प्रश्नों में यह शक्ति साफ दिखाई देती है।

इस बटु पर कृत्रिम बुद्धिमत्ता और भौतिकी के संबंध को व्यवस्थित कर लें। कृत्रिम बुद्धिमत्ता डेटा से नियम खोजने में मजबूत है। भौतिकी में लंबे समय से परखे गए नियम होते हैं। इनमें से केवल एक से काम पूरा नहीं होता। केवल डेटा का उपयोग करने पर भौतिकी टूटती है। केवल भौतिकी का उपयोग करने पर गणना बहुत बढ़ जाती है। इसलिए इन दोनों को साथ उपयोग करना ही इस पूरे अध्याय का मुख्य बटु है।

कठोरता वाली समस्याओं में भौतिकी को अधिक मजबूत रूप से लगाना पड़ता है। कई बार केवल दंड पर्याप्त नहीं होता। स्थिरता पाने के लिए समय समाकलक को न्यूरल नेटवर्क में डाला जाता है। संरक्षण को बाध्य करने वाले प्रक्षेपण से असंगत मानों को रोका जाता है। CRK-PINN भौतिकी को हानि के रूप में लगाने वाले नरम प्रतिबंध का उदाहरण है।

बहुघटक अभिक्रियाशील प्रवाह के समीकरणों को भी फरि से देख लें। द्रव्यमान, संवेग, रासायनिक प्रजाति और ऊर्जा के चार संतुलन इसकी हड्डी हैं। यह संतुलन इस नियम को बताता है कि कोई चीज अपने आप पैदा या गायब नहीं होती। भौतिकी-सूचि अधिगम इस नियम को हानि फलन में डालता है। स्वचालित अवकलन से समीकरण अवशेष को सटीक रूप से मापा जाता है। इसी कारण वरिल डेटा से भी पूरे रूप को फरि से बनाया जा सकता है।

कोल्मोगोरोव-अर्नोल्ड नेटवर्क (Kolmogorov-Arnold Networks) एक नई संरचना प्रस्तुत करता है। यह कनेक्शन लाइनों पर लचीले फलनों को रखता है। यह तीव्र फ्लेम फ्रंट (flame front) को बेहतर ढंग से चित्रित कर सकता है। ChemKANs ने दहन रसायन विज्ञान में इस संभावना को दिखाया है। इसने कम मानों के साथ भी नॉइज़ के प्रतिमजबूत परिणाम दिए।

फूरिए न्यूरल ऑपरेटर फलन को फलन में बदलता है। इसे कम विभिन्न पर सीखकर अधिक विभिन्न में उपयोग किया जा सकता है। यह तेज प्रतिरूप मॉडल और पुनर्निर्माण उपकरण बनता है। वसितारित ऑपरेटर और यूनेट के संयोजन पर हुए अध्ययन ने अभिक्रियाशील प्रवाह में

परिणाम दिखाए। विकिरण ऊष्मा स्थानांतरण को संभालने वाले ऑपरेटर अध्ययन भी पास के क्षेत्रों से आए। फिर भी आघात तरंगों और पतले ज्वाला तल के लिए अब भी सावधानी चाहिए।

घूर्णन डेटोनेशन इंजन वह मंच है जहां ये तरीके एक साथ आते हैं। वरिल मापों से अंदरूनी भाग को फिर से बनाना लक्ष्य है। इसमें अति-विभिन्न, बहु-नष्टि, ऑपरेटर और भौतिकी न्यूरल नेटवर्क का संयोजन उपयोग होता है। इसका परिणाम डिजिटल ट्वनि और वास्तविक समय नयित्रण तक जाता है। यह अभी शुरुआती चरण में है और अधिक सत्यापन की आवश्यकता है।

इस अध्याय के तरीकों को एक वाक्य में बांधकर देखें। ये सभी भौतिकी और डेटा को साथ उपयोग करने के रास्ते हैं। भौतिकी भरोसा देती है और डेटा गति देता है। केवल किसी एक से रॉकेट दहन को संभालना कठिन है। इन दोनों शक्तियों के मिलने की जगह पर उत्तर है। इस पुस्तक ने उस जगह को सत्यापित उदाहरणों से समझाया।

इस अध्याय में उपयोग किए गए उदाहरणों का स्वभाव भी व्यवस्थित कर लें। राइसी (Raissi) का भौतिकी-सूचित न्यूरल नेटवर्क और ली (Li) का फूरिए न्यूरल ऑपरेटर व्यापक रूप से उद्धृत आधारभूत अध्ययन हैं। CRK-PINN और ChemKANs सहकर्म समीक्षा से गुजरे शोध पत्र हैं। डीपफ्लेम, वसितारित ऑपरेटर और बहु-नष्टि पुनर्निर्माण नवीनतम अध्ययन हैं। इनमें से कई अभी शुरुआती चरण के प्रीप्रिंट हैं। शुरुआती अध्ययन का अर्थ है कि आगे उनमें बदलाव की गुंजाइश है।

इस अध्याय में दिखाई देने वाला दृष्टिकोण भी याद रखने योग्य है। इस पुस्तक ने प्रमाण को आगे रखकर उदाहरण चुने। केवल नाम से आकर्षक लगने वाले मॉडल को अवधारणा के स्तर पर रखा गया। अपुष्ट प्रदर्शन संख्याओं को मुख्य पाठ में नहीं डाला गया। शुरुआती अध्ययन को साफ तौर पर शुरुआती अध्ययन कहा गया। इसका उद्देश्य पाठक को तथ्य और अपेक्षा में अंतर करने में सहायता देना है।

आगे के कार्य भी स्पष्ट हैं। व्यापक स्थितियों में एक बार में ठीक बैठने वाला मॉडल चाहिए। आघात तरंगों और पतले ज्वाला तल को स्थिर रूप से संभालना होगा। वास्तविक इंजन डेटा से सत्यापित उदाहरण और जमा होने चाहिए। सुरक्षा बनाए रखने वाले नयित्त्रक भी साथ विकसित होने चाहिए। ये कार्य जतिने हल होंगे, उपकरण उतना ही कार्यस्थल के करीब आएगा।

इस अध्याय की सीख स्पष्ट है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता दहन गणना की गति को बहुत बदल देती है। पर वह अभी भरोसेमंद होती है जब भौतिकी और सत्यापन उसके साथ हों। चमकदार मॉडल नाम से अधिक पुष्ट किए गए प्रमाण महत्वपूर्ण हैं। इसी संतुलन पर अगली पीढ़ी की प्रणोदन तकनीक कदम-दर-कदम बढ़ती है। जब कृत्रिम बुद्धिमत्ता और भौतिकी हाथ मिलाते हैं, तब वह कदम मजबूत होता है।

संबंधित आधार-सामग्री

- Raissi, M., Perdikaris, P., & Karniadakis, G. E. (2019). Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, 378, 686-707. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045>
- Karniadakis, G. E., Kevrekidis, I. G., Lu, L., Perdikaris, P., Wang, S., & Yang, L. (2021). Physics-informed machine learning. *Nature Reviews Physics*, 3, 422-440. <https://doi.org/10.1038/s42254-021-00314-5>
- Li, Z., Kovachki, N., Azizzadenesheli, K., Liu, B., Bhattacharya, K., Stuart, A., & Anandkumar, A. (2021). Fourier Neural Operator for Parametric Partial Differential Equations. *International Conference on Learning Representations*. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2010.08895>
- Kovachki, N., Li, Z., Liu, B., Azizzadenesheli, K., Bhattacharya, K., Stuart, A., & Anandkumar, A. (2023). Neural Operator: Learning Maps Between Function Spaces With Applications to PDEs. *Journal of Machine Learning Research*, 24, 1-97. <https://www.jmlr.org/papers/v24/21-1524.html>
- Lu, L., Jin, P., Pang, G., Zhang, Z., & Karniadakis, G. E. (2021). Learning nonlinear operators via DeepONet based on the universal approximation theorem of operators. *Nature Machine Intelligence*, 3, 218-229. <https://doi.org/10.1038/s42256-021-00302-5>
- Lu, L., Meng, X., Mao, Z., & Karniadakis, G. E. (2021). DeepXDE: A deep learning library for solving differential equations. *SIAM Review*, 63(1), 208-228. <https://doi.org/10.1137/19M1274067>
- Liu, Z., Wang, Y., Vaidya, S., Ruehle, F., Halverson, J., Soljagic, M., Hou, T. Y., & Tegmark, M. (2025). KAN: Kolmogorov-Arnold Networks. *International Conference on Learning Representations*. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2404.19756>
- Ji, W., Qiu, W., Shi, Z., Pan, S., & Deng, S. (2021). Stiff-PINN: Physics-Informed Neural Network for Stiff Chemical Kinetics. *The Journal of Physical Chemistry A*, 125(36), 8098-8106. <https://doi.org/10.1021/acs.jpca.1c05102>
- Zhang, S., Zhang, C., & Wang, B. (2024). CRK-PINN: A physics-informed neural network for solving combustion reaction kinetics ordinary differential equations. *Combustion and Flame*, 269, 113647. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2024.113647>

- Koenig, B. C., Kim, S., & Deng, S. (2025). ChemKANs for combustion chemistry modeling and acceleration. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 27(33), 17313-17330. <https://doi.org/10.1039/D5CP02009C>
- Koenig, B. C., & Deng, S. (2025). Kolmogorov-Arnold Chemical Reaction Neural Networks for learning pressure-dependent kinetic rate laws. *arXiv preprint (प्रीप्रिंट, अभी सहकर्मी-समीक्षित नहीं)*. arXiv:2511.07686. <https://arxiv.org/abs/2511.07686>
- Weng, Y., Li, H., Zhang, H., Chen, Z. X., & Zhou, D. (2025). Extended Fourier Neural Operators to learn stiff chemical kinetics under unseen conditions. *Combustion and Flame*, 272, 113847. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2024.113847>
- Wu, J., Wang, X., Zhang, G., Liu, J., Li, X., Zhang, Y., Zhang, H., Lyu, J., Wang, B., & Wu, Y. (2025). Physics-informed machine learning for combustion: A review. *arXiv preprint (प्रीप्रिंट, अभी सहकर्मी-समीक्षित नहीं)*. arXiv:2509.03347. <https://arxiv.org/abs/2509.03347>
- Zhang, Z., Li, Z., Wang, Y., Yang, H., Peng, W., Teng, J., & Wang, J. (2026). Prediction of three-dimensional chemically reacting compressible turbulence based on implicit U-Net enhanced Fourier neural operator. *Acta Mechanica Sinica*, 42(7), 725274. <https://doi.org/10.1007/s10409-025-25274-x>
- Guo, Z., Mao, R., Liu, L., Tan, G., Jia, W., & Chen, Z. X. (2025). Deep Learning-Enabled Supercritical Flame Simulation at Detailed Chemistry and Real-Fluid Accuracy Towards Trillion-Cell Scale. *Proceedings of the International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC25)*. arXiv:2508.18969. <https://doi.org/10.1145/3712285.3759850>
- DeepModeling. (2026). DeepFlame development repository. <https://github.com/deepmodeling/deepflame-dev>
- Jiao, A., Jiang, W., Lu, X., Wang, Y., & Lu, L. (2026). Nested Fourier-enhanced neural operator for efficient modeling of radiation transfer in fires. *arXiv preprint (प्रीप्रिंट, अभी सहकर्मी-समीक्षित नहीं)*. arXiv:2604.13919. <https://arxiv.org/abs/2604.13919>
- Bao, Y., Zajac, J., Powers, M., Raman, V., & Kutz, J. N. (2026). Cheap2Rich: A Multi-Fidelity Framework for Data Assimilation and System Identification of Multiscale Physics -- Rotating Detonation Engines. *arXiv preprint (प्रीप्रिंट, अभी सहकर्मी-समीक्षित नहीं)*. arXiv:2601.20295. <https://arxiv.org/abs/2601.20295>
- Yao, S., & Zhang, W. (2026). Super-resolution reconstruction of high-fidelity rotating detonation flow fields based on cycle-consistent generative adversarial networks. *Physics of Fluids*, 38(4), 041704. <https://doi.org/10.1063/5.0333031>
- Wang, X., Li, Z., Zhang, Y., Wen, H., & Wang, B. (2025). Observation-guided generative flow field reconstruction of rotating detonation combustor. *Physics of Fluids*, 37(11), 116110. <https://doi.org/10.1063/5.0300394>
- Karkadakattil, A. (2026). A Physics-Stabilized Self-Updating Digital Twin Framework Using Physics-Informed Neural Networks for Thermal Field Prediction. *Applied Computer Systems*, 31(1), 30-40. <https://doi.org/10.2478/acss-2026-0003>
- Shateri, A., Yang, Z., Yan, Y., Paul, M. C., & Xie, J. (2026). AI-Powered Surrogate Modelling for Multiscale Combustion: A Critical Review and Opportunities. *arXiv preprint (प्रीप्रिंट, अभी सहकर्मी-समीक्षित नहीं)*. arXiv:2604.25617. <https://arxiv.org/abs/2604.25617>
- Mousavi, M., Caldwell, C., Baltes, J., Aljaseem, M., & Lee, B. J. (2025). Physics-Informed Neural Networks in Clean Combustion: A Pathway to Sustainable Aerospace Propulsion. *arXiv preprint (प्रीप्रिंट, अभी सहकर्मी-समीक्षित नहीं)*. arXiv:2509.08094. <https://arxiv.org/abs/2509.08094>
- Poinsot, T., & Veynante, D. (2012). *Theoretical and Numerical Combustion* (3rd ed.). R.T. Edwards, Inc., Philadelphia, PA.

अध्याय 9. पुनर्योजी शीतलन चैनलों, फ़िल्म शीतलन छद्मों और इंड्यूसर का टोपोलॉजी-आधारित प्रतिलोम डिजाइन अनुकूलन

प्रस्तावना

गर्मी में गरम बर्तन को हाथ से पकड़ने पर हाथ जल जाता है। इसलिए हम बर्तन के हैंडल को लकड़ी या प्लास्टिक से बनाते हैं। इसका उद्देश्य गर्मी को हाथ तक पहुंचने से रोकना है। रॉकेट इंजन के सामने भी यही समस्या होती है। इंजन के भीतर ईंधन जलता है और बहुत गरम गैस बनती है। यह गैस इतनी गरम होती है कि धातु को भी पिघला सकती है। लेकिन इस गरम गैस को थामने वाली दीवार धातु की होती है। इस दीवार की रक्षा कैसे की जाए, यह रॉकेट इंजन डिजाइन की बड़ी समस्या है।

रॉकेट इस समस्या को समझदारी से हल करता है। इंजन में जाने वाले ईंधन को तुरंत नहीं जलाया जाता। पहले उसे गरम दीवार के भीतर बने पतले रास्तों से बहाया जाता है। ईंधन दीवार से गुजरते हुए दीवार की गर्मी खींच लेता है। दीवार ठंडी होती है और ईंधन गरम होता है। गरम हुआ ईंधन फिर दहन कक्ष में जाकर जलता है। यह दीवार को भी बचाता है और ईंधन को पहले से गरम भी करता है। इसे पुनर्योजी शीतलन (regenerative cooling) कहा जाता है। गरम किए गए ईंधन को फेंका नहीं जाता, बल्कि फिर इस्तेमाल किया जाता है, इसलिए इसमें पुनर्योजी शब्द जुड़ा है।

पुनर्योजी शीतलन पुरानी वधि है। शुरुआती रॉकेटों से ही यह वधि इस्तेमाल हुई। लेकिन शीतलन मार्गों को स्वतंत्र रूप से डिजाइन करना कठिन था। धातु को काटकर बनाने की वधि मार्गों के आकार को सीमित कर देती थी। हाल में दो बातों ने यह बंधन खोला है। एक है धातु 3D प्रटिंग। दूसरी है अच्छा डिजाइन जल्दी खोजने वाली कृत्रिम बुद्धिमत्ता। इन दोनों के मिलने से शीतलन डिजाइन एक नए चरण में पहुंचा है।

यह अध्याय रॉकेट इंजन की ऊष्मा प्रबंधन संरचना पर चर्चा करता है। इसमें दीवार के भीतर शीतलन मार्ग और दीवार पर पतली शीतलन परत चढ़ाने वाले फ़िल्म शीतलन छद्म देखे जाते हैं। ईंधन को ऊपर धकेलने वाले पंप के आगे लगे पंखे, यानी इंड्यूसर (inducer), पर भी चर्चा की जाती है। ये तीनों संरचनाएं ऊष्मा और प्रवाह के संतुलन की समस्या हैं। दीवार को अधिक मजबूती से ठंडा करना चाहें, तो प्रवाह को रोकने वाला प्रतिरोध बढ़ता है। प्रतिरोध घटाना चाहें, तो शीतलन कमजोर होता है। यह संतुलन केवल मानव हाथों से खोजना कठिन है।

यही कृत्रिम बुद्धिमत्ता प्रवेश करती है। इस अध्याय में चर्चा की गई कृत्रिम बुद्धिमत्ता चित्र बनाने या लेख लिखने वाली कृत्रिम बुद्धिमत्ता नहीं है। यह जटिल डिजाइन क्षेत्र में अच्छे उत्तर जल्दी खोजने वाला औजार है। कुछ कृत्रिम बुद्धिमत्ता धीमी प्रवाह गणना की जगह काम करती है। कुछ कृत्रिम बुद्धिमत्ता अगला कौन सा प्रयोग करना है, यह स्वयं चुनती है। कुछ कृत्रिम बुद्धिमत्ता जटिल शीतलन मार्गों के आकार को संख्याओं के छोटे समूह में बदल देती है। यह अध्याय इन औजारों को एक-एक करके सरल ढंग से समझाता है।

इस अध्याय की बात क्यों महत्वपूर्ण है, इसे पहले समझ ले। रॉकेट इंजन में जनि जगहों पर समस्या अधिक आती है, वे ऊष्मा प्रबंधन और पंप हैं। दीवार पिघल जाए या पंप कांपने लगे, तो इंजन रुक जाता है। इसलिए नया इंजन बनाते समय इस हिससे में बहुत समय और धन लगता है। डिजाइन को थोड़ा भी तेज और थोड़ा भी सुरक्षित बनाया जा सके, तो बड़ा लाभ होता है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता ठीक इसी जगह मदद करती है। वह व्यापक डिजाइन क्षेत्र को मनुष्य से तेज खंगालती है और अच्छे उम्मीदवार चुन देती है।

एक बात पहले ही स्पष्ट करनी है। रॉकेट इंजन शीतलन डिजाइन ऐसा क्षेत्र है जहां सुरक्षा मार्जिन बड़ा रखा जाता है। दीवार एक बार पिघल जाए, तो पूरा इंजन टूट जाता है। इसलिए कृत्रिम बुद्धिमत्ता द्वारा दिए गए उत्तर पर सीधे भरोसा करके उसे इस्तेमाल नहीं किया जाता। कृत्रिम बुद्धिमत्ता का उपयोग अच्छे उम्मीदवार जल्दी खोजने के लिए किया जाता है। अंतिम निर्णय हमेशा उच्च-सटीकता गणना और वास्तविक दहन परीक्षण से जांचा जाता है। इस अध्याय के उदाहरणों को भी इसी सिद्धांत पर पढ़ना चाहिए।

9.1 रॉकेट गरम दहन कक्ष की दीवार की रक्षा कैसे करता है

इस खंड में यह देखा जाता है कि रॉकेट इंजन गरम दीवार की रक्षा कैसे करता है। पहले देखते हैं कि रॉकेट का दहन कक्ष इतना गरम क्यों होता है। फिर समझाते हैं कि पुनर्योजी शीतलन क्या है और इसे बनाना कठिन क्यों था। अंत में देखते हैं कि धातु 3D प्रटिंग इस डिजाइन को कैसे बदल रही है। यह खंड आगे आने वाली सारी चर्चा का आधार है।

रॉकेट इंजन के मुख्य दहन कक्ष में ईंधन और ऑक्सीजन मलिकर जलते हैं। इस समय बनने वाली गैस का तापमान 3 हजार डिग्री से काफी ऊपर चला जाता है। स्टील का गलनांक लगभग 1 हजार 5 सौ डिग्री है। दहन गैस स्टील के गलनांक से बहुत अधिक गरम होती है। इसके अलावा दहन कक्ष के भीतर दबाव भी ऊंचा होता है। उच्च-प्रदर्शन इंजन में अंदरूनी दबाव वायुमंडलीय दबाव से सौ गुना से अधिक होता है। गरम और उच्च-दबाव गैस पतली धातु दीवार को भीतर से धकेलती और गरम करती है।

दबाव का अधिक होना भी बड़ा बोझ है। दहन कक्ष के भीतर का ऊंचा दबाव पतली दीवार को बाहर की ओर धकेलता है। यह वैसा ही है जैसे गुब्बारे में जोर से हवा भरने पर उसकी परत तन जाती है। इसके साथ भीतर गरम और बाहर ठंडा होने से बड़ा तापमान अंतर जुड़ जाता है। गरम भाग फैलना चाहता है और ठंडा भाग वैसा ही रहना चाहता है। यह खींचतान दीवार में बड़ा तनाव छोड़ती है। दबाव और गर्मी मलिकर दीवार को परेशान करते हैं। इसलिए दीवार पतली होते हुए भी अच्छी तरह ठंडी और मजबूत होनी चाहिए।

दीवार पर सबसे अधिक गर्मी जसि जगह गरिती है, वह नोजल का गला है। नोजल तुरही जैसे आकार का भाग है, जो गैस को पीछे फेंककर thrust बनाता है। उस तुरही में जहां चौड़ाई घटकर संकरी होती है, उसे नोजल गला (throat) कहा जाता है। यहां गैस ध्वनि की गति तक तेज हो जाती है। नोजल से गुजरते समय गैस का अपना तापमान उलटे थोड़ा घटता है। फरि भी नोजल गले पर दीवार में आने वाली गर्मी सबसे अधिक होती है। इसका कारण है कतिज गैस संकरी दीवार को जोर से छूकर गुजरती है। प्रतिकाई क्षेत्रफल दीवार में प्रवेश करने वाली ऊष्मा की मात्रा को ऊष्मा फ्लक्स (heat flux) कहा जाता है। नोजल गले का ऊष्मा फ्लक्स बहुत बड़ा होता है। यह ऐसा है मानो हथेली जतिने छोटे क्षेत्र में दर्जनो बड़े हीटरो की गर्मी इकट्ठी हो जाए।

ऊष्मा फ्लक्स कतिना बड़ा होता है, इसका अनुमान लगाएं। घरेलू गैस चूल्हे का एक बर्नर हथेली जतिने क्षेत्र में गर्मी फैलाता है। नोजल गले पर इतने ही क्षेत्र में दर्जनो बर्नरो की गर्मी जमा होती है। वह गर्मी धातु की एक पतली दीवार पर गरिती है। दीवार की भीतरी सतह और बाहरी सतह के तापमान में सैकड़ों डिग्री का अंतर होता है। यह बड़ा अंतर धातु को मोड़ता है और दरारे पैदा करता है। दीवार को ठंडा न किया जाए, तो कुछ ही सेकंड में दीवार ढह जाती है।

यदि दीवार इस गर्मी को सीधे सह ले, तो दीवार पघिलती या कमजोर होती है। इसलिए पुनर्योजी शीतलन का उपयोग किया जाता है। दीवार के भीतर कई पतले मार्ग बनाए जाते हैं। ईंधन को पहले इन्हीं मार्गों से बहाया जाता है। ईंधन मार्ग से गुजरते हुए दीवार की गर्मी खींच लेता है। दीवार ठंडी होती है और ईंधन गरम होता है। गरम हुआ ईंधन दहन कक्ष में जाकर जलता है। दीवार की रक्षा करते हुए ईंधन भी पहले से गरम होता है, इसलिए गर्मी व्यर्थ नहीं जाती। इसके साथ फिलिम शीतलन भी जोड़ा जाता है। फिलिम शीतलन दीवार के साथ एक पतली शीतलन द्रव परत चढ़ाने की वधि है। दोनों वधियों को साथ इस्तेमाल करने से दीवार को अधिक सुरक्षित रखा जा सकता है।

समस्या इन शीतलन मार्गों को बनाने की है। पहले धातु के ठोस टुकड़े को काटकर मार्ग बनाए जाते थे। काटकर बनाने की वधि में मार्गों का आकार सरल रखना पड़ता था। प्रायः सीधे आयताकार खांचे समानांतर काटे जाते थे। ऐसे मार्गों में स्थान के अनुसार चौड़ाई या दिशा को बहुत बदलना कठिन होता है। जसि नोजल गले पर गर्मी अधिक जमा होती है, केवल उसे अलग से अधिक ठंडा करना कठिन होता है। मार्ग को जबरन संकरा करे, तो ईंधन का गुजरना कठिन हो जाता है और दबाव हानि बढ़ती है। दबाव हानि बढ़ी हो, तो ईंधन धकेलने वाले पंप को अधिक बल लगाना पड़ता है।

धातु 3D प्रटिगि इस सीमा को खोल रही है। धातु 3D प्रटिगि में धातु पाउडर को पतली परत में फैलाकर लेजर से पघिलाया और जोड़ा जाता है। परतों को एक-एक करके जमाकर भाग बनाया जाता है। यह वधि ऐसे जटिल अंदरूनी मार्ग बना सकती है, जिन्हें काटकर बनाना संभव नहीं है। मार्गों को पेड़ की शाखाओं की तरह बांटकर फरि मलाने वाला डिजाइन भी संभव है। दीवार की घुमावदार सतह के साथ मुड़ने वाले मार्ग भी बनाए जा सकते हैं। जहां गर्मी जमा होती है, वहां मार्गों को घना रखा जा सकता है और जहां नहीं होती, वहां वरिल रखा जा सकता है। डिजाइन की स्वतंत्रता बहुत बढ़ गई है।

3D प्रटिगि शीतलन मार्गों को कतिना बदलती है, इसका उदाहरण देखें। पुराने तरीके में भीतरी दीवार पर खांचा काटकर बाहर ढक्कन लगाकर मार्ग बनाया जाता था। कई भाग बनाकर उन्हें जोड़ना पड़ता था। जोड़ अधिक हो, तो वे जगहें कमजोर हो सकती हैं। 3D प्रटिगि मार्गों वाली दीवार को एक ही टुकड़े में छाप देती है। जोड़ कम होने से दीवार मजबूत होती है। नरिमाण चरण भी घटते हैं, जसिसे समय और सामग्री बचती है। इसलिए डिजाइन को कई बार बदलकर परीक्षण करना आसान हो गया है।

शीतलन मार्गों की सामग्री भी साथ-साथ विकसित हुई। अमेरिकी अंतरिक्ष एजेंसी (NASA) ने GRCop-42 नाम की तांबा मशिर् धातु विकसित की। तांबा गर्मी को अच्छी तरह पहुंचाने वाली धातु है। GRCop-42 तांबे में थोड़ा क्रोमियम और नियोबियम मलिकर बनाई गई मशिर् धातु है। यह गर्मी को अच्छी तरह ले जाते हुए भी ऊंचे तापमान पर अच्छी तरह टिकती है। इस मशिर् धातु से 3D प्रटिगि द्वारा मार्गों वाला पूरा दहन कक्ष छपा जा सकता है। अमेरिकी अंतरिक्ष एजेंसी ने इस मशिर् धातु से बने दहन कक्ष का वास्तविक दहन परीक्षण भी किया। इस विकास और परीक्षण के परिणाम सार्वजनिक रिपोर्टों में संकलित हैं। अमेरिकी अंतरिक्ष एजेंसी ने इस सामग्री और नरिमाण तकनीक को अगली पीढ़ी की प्रणोदन तकनीक योजना के भीतर विकसित किया। यह सामग्री, नरिमाण और डिजाइन के एक साथ आगे बढ़ने का उदाहरण है।

फिलिम शीतलन साथ इस्तेमाल करने पर दीवार को अधिक सुरक्षित रखा जा सकता है। दीवार में कई छोटे छेद किए जाते हैं। उन छेदों से ठंडा द्रव थोड़ा-थोड़ा बहाया जाता है। बाहर निकला द्रव दीवार के साथ पतली परत बनाता है। यह परत गरम गैस और दीवार के बीच आ जाती है। यदि पुनर्योजी शीतलन दीवार को भीतर से ठंडा करता है, तो फिलिम शीतलन दीवार की सतह पर सुरक्षा परत ढकता है। दोनों वधियां एक-दूसरे की मदद करती हैं। जसि नोजल गले के पास गर्मी अधिक जमा होती है, वहां दोनों वधियों को साथ भी इस्तेमाल किया जाता है।

शीतलन मार्गों का आकार ऊष्मा प्रबंधन क्षमता को बहुत प्रभावित करता है। मार्ग संकरे और घने हों, तो दीवार से संपर्क का क्षेत्र बढ़ता है। संपर्क क्षेत्र बड़ा हो, तो वे अधिक गर्मी खींचते हैं। लेकिन मार्ग बहुत संकरे हों, तो ईंधन का गुजरना कठिन होता है। ईंधन धकेलने में अधिक बल लगता है। इस बल की हानि को दबाव हानि कहा जाता है। दबाव हानि बढ़ी हो, तो पंप को अधिक तेज चलना पड़ता है। अच्छा शीतलन मार्ग वह है जो दीवार को अच्छी तरह ठंडा करे और दबाव हानि को कम रखे। ये दोनों एक-दूसरे को खींचने वाले संबंध में हैं।

नई वधि आसान ही हो, ऐसा नहीं है। 2025 में आए एक अध्ययन ने 3D प्रटिगि GRCop-42 दहन कक्ष की वफिलता का विश्लेषण किया। फरवरी 2021 के एक दहन परीक्षण में दहन कक्ष 9 सेकंड में टूट गया। कारण देखने पर पता चला कि प्रटिगि के दौरान काम एक बार जहां रुका था, वही जगह समस्या थी। उस जगह सूक्ष्म छदिर सामान्य से बहुत अधिक बन गए थे। छदिर अधिक हो, तो वह भाग कमजोर होता है। यह उदाहरण दिखाता है कि नई नरिमाण वधि गुणवत्ता नियंत्रण के प्रतिक्रिया संवेदनशील है। स्वतंत्र डिजाइन मलिन के बदले नरिमाण प्रक्रिया को अधिक सावधानी से देखना पड़ता है।

बढ़ी हुई डिजाइन स्वतंत्रता नई चिंता भी देती है। जब मार्गों का आकार लगभग अनंत रूप से बदला जा सकता है, तो कौन सा आकार अच्छा है, यह चुनना उल्टे कठिन हो गया। मनुष्य द्वारा हाथ से कुछ आकार बनाकर उनकी गणना करने की वधि व्यापक डिजाइन क्षेत्र को पूरा नहीं खंगाल सकती। एक ही मार्ग के प्रवाह और ऊष्मा की सटीक गणना करने में भी कंप्यूटर को लंबा समय लगता है। इस व्यापक क्षेत्र को तेज और समझदारी से खोजने के काम में कृत्रिम बुद्धिमत्ता आती है। अगले खंड से उन वधियों को एक-एक करके देखेंगे।

9.2 शीतलन मार्गों में ईंधन के तीव्र परिवर्तन का अनुमान लगाने वाला सरीगेट मॉडल

इस खंड में यह देखा जाता है कि शीतलन मार्गों में ईंधन का अनुमान लगाना कठिन क्यों है। शीतलक के रूप में इस्तेमाल होने वाला मीथेन या केरोसीन ऊंचे दबाव और तापमान पर अपने गुण अचानक बदलता है। इस परिवर्तनशील प्रवाह की गणना करने वाला सटीक विश्लेषण धीमा होता है। इसलिए गणना की जगह काम करने वाला कृत्रिम बुद्धिमत्ता सरीगेट मॉडल इस्तेमाल किया जाता है। यहां उस सरीगेट मॉडल के सदिधांत और सीमाएं समझाई जाती हैं।

रॉकेट के शीतलक के रूप में मीथेन (methane) या RP-1 इस्तेमाल होता है। RP-1 रॉकेट के लिए परिष्कृत केरोसीन है। यह हमारे इस्तेमाल वाले केरोसीन का निकट संबंधी माना जा सकता है। ये ईंधन शीतलन मार्ग के भीतर बहुत ऊंचे दबाव में होते हैं। दबाव किसी मान से ऊपर जाए, तो द्रव और गैस की सीमा धुंधली हो जाती है। पानी का उदाहरण लें, तो यह ऐसी अवस्था है जिसमें बर्तन में पानी उबलकर बुलबुले बनने का अलगव मटि जाता है। इस अवस्था को सुपरक्रिटिकल (supercritical) अवस्था कहा जाता है। सुपरक्रिटिकल अवस्था का ईंधन न पूरी तरह द्रव होता है, न गैस, बल्कि बीच के गुण रखता है।

सुपरक्रिटिकल शब्द कठिन लग सकता है। इसे सरल करके देखें। बर्तन में पानी उबालें, तो पानी बुलबुलों में बदलते हुए उबलता है। द्रव और गैस साफ अलग दखिते हैं। लेकिन दबाव बहुत बढ़ा दें, तो यह उबलना गायब हो जाता है। द्रव धीरे-धीरे गैस जैसे गुणों में बदलता है। बुलबुले बनने की स्पष्ट सीमा मटि जाती है। जसि अवस्था में यह सीमा गायब हो जाती है, वही सुपरक्रिटिकल अवस्था है। शीतलन मार्गों में ईंधन ऊंचे दबाव में होता है, इसलिए इसी अवस्था में बहता है।

सुपरक्रिटिकल अवस्था के गुण तापमान के अनुसार तेजी से बदलते हैं। किसी तापमान क्षेत्र से गुजरते समय घनत्व अचानक गरिता है। उसी क्षेत्र में विशिष्ट ऊष्मा अचानक बढ़ जाती है। विशिष्ट ऊष्मा किसी पदार्थ का तापमान 1 डिग्री बढ़ाने में लगने वाली ऊष्मा की मात्रा है। जसि बटु पर घनत्व और विशिष्ट ऊष्मा इस तरह डगमगाते हैं, उसे छद्म-क्रांतिक रेखा (pseudo-critical line) कहा जाता है। इसके पास ईंधन के गुण मानो उबलने जैसे तेजी से बदलते हैं। वास्तव में वह उबलता नहीं, लेकिन उबलने जैसा होता है, इसलिए इसे छद्म-क्वथन (pseudo-boiling) कहा जाता है।

विशिष्ट ऊष्मा का बढ़ना शीतलन के लिए अच्छा पक्ष भी रखता है। विशिष्ट ऊष्मा बढ़ी हो, तो ईंधन अधिक गर्मी अपने भीतर रख सकता है। समान मात्रा का ईंधन अधिक गर्मी लेकर जाता है। लेकिन घनत्व अचानक घटे, तो ईंधन फैलता और तेज हो जाता है। तेज हुआ प्रवाह यदि दीवार के पास डगमगाए, तो ऊष्मा ढोने का तरीका बगिड़ता है। अच्छा पक्ष और बुरा पक्ष एक ही जगह साथ दिखाई देते हैं। इसलिए इस क्षेत्र के शीतलन का अनुमान लगाना कठिन है।

छद्म-उबाल शीतलन में समस्या पैदा करता है। ईंधन दीवार से ऊष्मा अच्छी तरह खींचे, तभी दीवार ठंडी होती है। लेकिन छद्म-क्रांतिक रेखा के पास ऊष्मा खींचने की क्षमता अचानक घट भी सकती है। दीवार के पास गरम हुई ईंधन की परत पतले कंबल की तरह ऊष्मा को रोक देती है। इस घटना को ऊष्मा अंतरण ह्रास (heat transfer deterioration) कहा जाता है। ऊष्मा अंतरण ह्रास होने पर उस स्थान की दीवार का तापमान अचानक चढ़ जाता है। 2020 के एक अध्ययन ने बताया कि रॉकेट ईंधन को गरम करते समय छद्म-उबाल और ऊष्मा अंतरण ह्रास साथ-साथ दिखाई देते हैं। 2024 के अध्ययन ने सूक्ष्म दो-अवस्था प्रवाह मॉडल से यह समझा कि यह ह्रास क्यों होता है। यह ऊष्मा अंतरण ह्रास आगे आने वाली कोकगि समस्या से भी जुड़ता है। कारण यह है कि दीवार अचानक गरम हो जाए तो उस स्थान पर ईंधन अधिक तेजी से टूटता है।

ऐसे प्रवाह की गणना करने की एक सटीक वधि है। वह है संगणकीय द्रव गतिकी (computational fluid dynamics, CFD)। इसमें प्रवाह को छोटे-छोटे ग्रिडों में बांटा जाता है। फिर हर खाने की गति, दबाव और तापमान को भौतिकी नियमों के अनुसार हल किया जाता है। इसके आधार में संरक्षण के तीन नियम हैं। पहला द्रव्यमान संरक्षण है। भीतर आए द्रव और बाहर गए द्रव की मात्रा मेल खानी चाहिए। अगला संवेग संरक्षण है। द्रव को धकेलने या खींचने वाला बल गति में बदलाव से मेल खाना चाहिए। अंतिम ऊर्जा संरक्षण है। भीतर आई ऊष्मा और बाहर गई ऊष्मा तापमान में बदलाव से मेल खानी चाहिए। इन तीनों नियमों को हर खाने में साथ-साथ हल करना ही CFD है। CFD सटीक है, लेकिन धीमा है। शीतलन मार्ग के एक छोटे हिस्से को सटीक रूप से हल करने में भी कंप्यूटर को लगभग एक घंटा लग सकता है। शीतलन मार्ग के डिजाइन में मार्ग के आकार और प्रवाह दर को हजारों तरीकों से बदलकर जांचना पड़ता है। हर बार एक घंटा गणना की जाए तो डिजाइन पूरा नहीं हो पाता।

इसलिए सारोगेट मॉडल (surrogate model) का उपयोग किया जाता है। सारोगेट मॉडल धीमी गणना की जगह लेने वाला तेज अनुमान मॉडल है। पहले CFD से कई स्थितियों की पहले से गणना कर डेटा इकट्ठा किया जाता है। उस डेटा से कृत्रिम न्यूरल नेटवर्क को प्रशिक्षित किया जाता है। न्यूरल नेटवर्क मार्ग का आकार, प्रवाह दर, दबाव और प्रवेश तापमान को इनपुट के रूप में लेता है। फिर वह दीवार का तापमान, ऊष्मा फ्लक्स और दबाव हानि तुरंत दे देता है। जर्मन एयरोस्पेस सेंटर (DLR) के शोधकर्ताओं ने ऐसा न्यूरल नेटवर्क सारोगेट मॉडल बनाया। उन्होंने वास्तव में कुछ छपिं परतों वाला साधारण न्यूरल नेटवर्क इस्तेमाल किया। CFD से जसि गणना में एक घंटा लगता था, इस मॉडल ने उसे 1 सेकंड से भी कम समय में पूरा किया। शुरुआत में उसने केवल सीधे मार्गों को संभाला। बाद में उसे मुड़े हुए मार्गों को भी संभालने तक बढ़ाया गया।

सारोगेट मॉडल बनाने का क्रम इस प्रकार है। पहले डिजाइन चरों की सीमा तय की जाती है। ये मार्ग की चौड़ाई, मार्ग की ऊंचाई, प्रवाह दर और प्रवेश तापमान की सीमाएं हैं। उस सीमा के भीतर कई स्थितियां चुनी जाती हैं और CFD से गणना की जाती है। गणना के परिणामों को इनपुट और आउटपुट के जोड़ों के रूप में इकट्ठा किया जाता है। ये जोड़े न्यूरल नेटवर्क की पाठ्यपुस्तक बनते हैं। न्यूरल नेटवर्क इन जोड़ों को देखकर इनपुट से आउटपुट तक जाने का नियम सीखता है। प्रशिक्षण पूरा होने पर वह नए इनपुट का भी तेजी से उत्तर देता है। यह वैसा ही है जैसे कोई व्यक्ति कई उदाहरण हल करके प्रश्नों के प्रकार सीखता है।

सारोगेट मॉडल की सटीकता बढ़ाने के और भी तरीके हैं। ये तरीके DLR के ऊपर बताए अध्ययन ने जस के तस इस्तेमाल नहीं किए। ये सारोगेट मॉडल को मजबूत बनाने के लिए व्यापक रूप से इस्तेमाल की जाने वाली तकनीकें हैं। एक तरीका भौतिकी ज्ञान को साथ में डालना है। यदि न्यूरल नेटवर्क केवल डेटा देखकर सीखे, तो वह भौतिकी नियमों को तोड़ने वाला उत्तर दे सकता है। इसलिए द्रव्यमान, संवेग और ऊर्जा के संरक्षण के नियमों को प्रशिक्षण नियम में शामिल किया जाता है। यदि न्यूरल नेटवर्क उस नियम को तोड़ता है, तो उसे दंड दिया जाता है। इस तरह बने न्यूरल नेटवर्क को भौतिकी-सूचित न्यूरल नेटवर्क (physics-informed neural network, PINN) कहा जाता है। इसमें अवशेषित कनेक्शन (residual connection) नाम की संरचना भी जोड़ी जा सकती है। अवशेषित कनेक्शन पछिली परत की सूचना को बीच की परतों को छोड़कर सीधे आगे की परत तक भेजने का मार्ग है। यह संरचना गहरे न्यूरल नेटवर्क को स्थिर रूप से प्रशिक्षित करने में मदद करती है। ऐसी तकनीकों को शीतलन मार्ग के सारोगेट मॉडल में जोड़ना इस पुस्तक की प्रस्तावति दिशा है।

सुपरक्रिटिकल द्रव के गुण मान भी सही-सही डालने चाहिए। अमेरिका का राष्ट्रीय मानक और प्रौद्योगिकी संस्थान (NIST) कई द्रवों के घनत्व और विशिष्ट ऊष्मा जैसे मानों को तापमान और दबाव के अनुसार व्यवस्थित करके प्रकाशित करता है। मीथेन जैसे एक ही घटक वाले शुद्ध द्रवों में इन मानक मानों को सीधे जोड़कर इस्तेमाल किया जा सकता है। ऐसा करने से छद्म-क्रांतिक रेखा के पास होने वाला अचानक बदलाव छूटता नहीं है। लेकिन केरोसीन RP-1 की स्थिति अलग है। RP-1 कई हाइड्रोकार्बनों का मिश्रण है, इसलिए हर परिशोधन में उसकी संरचना थोड़ी बदलती है। इसलिए शुद्ध द्रव की सारणी सीधे इस्तेमाल नहीं की जा सकती। गुणों से मेल खाने वाला अलग प्रतस्थापन मिश्रण मॉडल बनाना पड़ता है। यदि गुण मान गलत हों, तो सारोगेट मॉडल भी दीवार का गलत तापमान देगा। सुपरक्रिटिकल द्रवों के गुण संवेदनशील होते हैं, इसलिए यह आधारभूत डेटा महत्वपूर्ण है।

शीतलन को ठीक से चुनने पर भी शोध हो रहा है। 2026 के एक अध्ययन ने रॉकेट केरोसीन की नकल करने वाला प्रतस्थापन ईंधन डिजाइन किया। उसने आनुवंशिक एल्गोरिदम से वह संयोजन खोजा जो सुपरक्रिटिकल अवस्था के गुणों से अच्छी तरह मेल खाता है। आनुवंशिक एल्गोरिदम अच्छे संयोजनों को चुनकर और मिलाकर उत्तर को सुधारने की वधि है। शीतलन गणना में इस्तेमाल ईंधन मॉडल जतिना सटीक होगा, भविष्यवाणी भी उतनी सटीक होगी। कृत्रिम बुद्धिमत्ता ईंधन संयोजन चुनने के काम में भी मदद करती है।

सारोगेट मॉडल संभालते समय सावधानी चाहिए। ट्रेडमार्क की तरह लगे मॉडल नामों या बनि सत्यापन वाले प्रदर्शन आंकड़ों पर भरोसा नहीं करना चाहिए। इसलिए यह पुस्तक किसी विशेष मॉडल नाम के बजाय CFD सारोगेट मॉडल की सामान्य अवधारणा से समझाती है। यदि सिद्धांत समान है, तो नाम चाहे जो हो, सीखने की बात समान रहती है।

यह सारोगेट मॉडल वास्तविक इंजन में भी इस्तेमाल हुआ। जर्मन एयरोस्पेस सेंटर ने अपने विकसित इंजन के शीतलन मार्ग के प्रदर्शन को इस वधि से जांचा। उसने दीवार तापमान की भविष्यवाणी सुधारी और उसे डिजाइन में शामिल किया। गणना तेज होने से कई मार्ग डिजाइनों की कम समय में तुलना की जा सकी। इस तरह डिजाइन को धीमी सटीक गणना तक सीमा रखे बनि व्यापक रूप से खोजा गया।

सरोगेट मॉडल की स्पष्ट सीमा है। सरोगेट मॉडल केवल उसी दायरे में भरोसेमंद होता है जसि उसने सीखा है। प्रशिक्षण के समय न देखे गए अपरचिती मार्ग आकारों या अपरचिती संचालन स्थितियों में वह काफी गलत हो सकता है। सुपरक्रिटिकल द्रवों के गुण संवेदनशील होते हैं, इसलिए यह जोखिम और बड़ा है। इसलिए अंतमि डिजाइन केवल सरोगेट मॉडल से तय नहीं करना चाहिए। सरोगेट मॉडल से अच्छे उम्मीदवारों को तेजी से छांटा जाता है। फरि केवल उन उम्मीदवारों को चुनकर सटीक CFD और वास्तविक दहन परीक्षण से फरि जांचा जाता है। सरोगेट मॉडल उत्तर देने वाला उपकरण नहीं है। वह उम्मीदवारों को तेजी से छांटने वाला उपकरण है।

9.3 कम गणना से फलिम शीतलन छदिर खोजने वाला सक्रयि अधगिम

पहले यह देखे कि फलिम शीतलन क्यों जरूरी है। पुनर्योजी शीतलन दीवार को भीतर से ठंडा करता है। लेकिन जहां ऊष्मा बहुत अधिक केंद्रति होती है, वहां केवल दीवार के भीतर का शीतलन कम पड़ सकता है। कारण यह है कि दीवार की सतह खुद गरम गैस से सीधे छूकर गरम होती है। इसलिए सतह पर एक पतली सुरक्षात्मक परत और चढ़ाई जाती है। यही फलिम शीतलन है। पुनर्योजी शीतलन और फलिम शीतलन भीतर और बाहर से दीवार की साथ-साथ रक्षा करते हैं।

फलिम शीतलन (film cooling) गरम दीवार के ठीक सामने ठंडे द्रव की पतली परत बनाने की वधि है। दीवार में कई छोटे छदिर कएि जाते हैं। उन छदिरों से ठंडे द्रव को तरिछा फुहारा कयिा जाता है। नकिला हुआ द्रव दीवार के साथ पतला फैलता है और कंबल की तरह दीवार को ढकता है। यह परत गरम गैस और दीवार के बीच अलगाव बनाती है। दीवार गरम गैस से सीधे नहीं छूती, इसलिए कम गरम होती है। यह कार के आगे के शीशे पर धुंध रोकने वाली हवा को नीचे से ऊपर बहाने जैसा है।

फलिम शीतलन का प्रदर्शन कुछ मान तय करते हैं। एक है फूँके गए द्रव की ताकत। इसे ब्लोइंग अनुपात (blowing ratio) कहा जाता है। यह ठंडे द्रव के प्रवाह की ताकत को गरम गैस के प्रवाह की ताकत से भाग देकर नकिला मान है। छदिर का झुकाव कोण, छदिरों के बीच की दूरी और छदिर का आकार भी प्रदर्शन तय करते हैं। ये मान थोड़ा भी बदले तो फलिम का प्रदर्शन काफी बदल सकता है। फलिम दीवार से अच्छी तरह चपिकती है या ऊपर उठकर छूट जाती है, यह इन मानों पर निर्भर करता है।

ब्लोइंग अनुपात बहुत बड़ा हो तो भी समस्या होती है। द्रव को अधिक जोर से फुहारने पर फलिम दीवार से उठ जाती है। नकिली हुई धारा दीवार को ढक नहीं पाती और ऊपर उठती है। तब दीवार फरि गरम गैस से छूती है। ब्लोइंग अनुपात बहुत छोटा हो तो फलिम पतली होती है और जल्दी हट जाती है। इसलिए ताकत का भी उचित मान होता है। कोण, दूरी और ताकत को साथ-साथ मलाना पड़ता है, तभी अच्छी फलिम बनती है।

फलिम के छूटने का एक कारण भंवर है। जब द्रव छदिर से बाहर नकिलता है, तो बाएं और दाएं घूमते भंवरों की एक जोड़ी बनती है। ये भंवर गरम गैस को दीवार की ओर खींचते हैं। तब मेहनत से बनाई गई शीतलन फलिम उठकर छूट जाती है। दीवार फरि गरम गैस के संपर्क में आ जाती है। छदिर को ठीक से डिजाइन कयिा जाए तो इन भंवरों को कमजोर कयिा जा सकता है। इसलिए आजकल छदिर के सरि को पंखे की तरह फैलाया गया फैन-आकार छदिर इस्तेमाल कयिा जाता है। नकिला हुआ द्रव बगल की ओर चौड़ा फैलता है और दीवार को समान रूप से ढकता है।

पंखे के आकार का छदिर गोल छदिर की तुलना में शीतलन फलिम को अधिक चौड़ा फैलाता है। गोल छदिर द्रव को एक धारा के रूप में फुहारता है। यह धारा दीवार से आसानी से उठ सकती है। पंखे के आकार का छदिर अपने सरि को बगल की ओर फैलाकर द्रव को चौड़ा फुहारता है। चौड़ा फैला द्रव दीवार से बेहतर चपिकता है। चपिकने का क्षेत्र बढ़े तो दीवार समान रूप से ढकती है। इसलिए गैस टरबाइन और वमिन इंजन पंखे के आकार के छदिरों का खूब उपयोग करते हैं। छदिर को कतिना फैलाना है और किस कोण पर बनाना है, यही प्रदर्शन तय करता है।

अच्छे छदिर आकार को खोजने के लिए प्रवाह की गणना करनी पड़ती है। भंवरों को भी बारीकी से देखना हो तो सटीक विश्लेषण चाहिए। इस विश्लेषण को लार्ज एडी समिलेशन (large eddy simulation, LES) कहा जाता है। LES प्रवाह के भीतर बड़े भंवरों की सीधे गणना करने की वधि है। यह सटीक है, लेकिन गणना बहुत महंगी है। एक स्थितिहल करने में भी लंबा समय लगता है। छदिर कोण, दूरी और ताकत बदलते हुए सैकड़ों स्थितियों की गणना करना कठिन है। गणना बजट तय होता है, इसलिए किसी भी स्थिति की अंधाधुंध गणना नहीं की जा सकती।

यहां गॉसयिन प्रोसेस (Gaussian process) मदद करता है। गॉसयिन प्रोसेस कम डेटा से भविष्यवाणी करने की वधि है। इसकी विशेषता यह है कि यह केवल अनुमानति मान नहीं देता। यह यह भी बताता है कि भविष्यवाणी कतिनी अनश्चिति है। जहां डेटा अधिक हो, वहां यह आत्मवश्वास से भविष्यवाणी करता है। जहां डेटा नहीं हो, वहां यह अनश्चितिता दिखाता है। यह वैसा ही है जैसे नक्शा बनाते समय देखे हुए रास्तों को वसितार से और न देखे हुए रास्तों को धुंधला बनाया जाए। यह वधिमानों को जोड़ने के लिए मैटर्न (Matern) नाम का चकिना नियम इस्तेमाल करती है।

आइए देखे कि गॉसयिन प्रोसेस मानों को कैसे जोड़ता है। जो स्थितियां पास-पास हैं, उनका प्रदर्शन भी मलिता-जुलता होगा। यदि छदिर कोण को बहुत थोड़ा बदला जाए, तो शीतलन प्रदर्शन भी थोड़ा ही बदलेगा। इस वचिार को गणति में रखने वाली चीज करनेल है। करनेल दो स्थितियों की नकितता मापने का पैमाना है। यदि वे पास हों, तो माना जाता है कि मान मलिते-जुलते होंगे। यदि वे दूर हों, तो माना जाता है कि मान अलग हो सकते हैं। इसी पैमाने से गणना की गई स्थितियों के बीच चकिना संबंध बनाया जाता है। जनि स्थितियों की गणना नहीं की गई, उनके मान भी अनुमानति कएि जाते हैं।

सक्रिय अधिगम (active learning) इसमें एक समझदारी भरा चुनाव जोड़ता है। यह अपने आप चुनता है कि अगली बार LES के साथ कनि स्थितियों की गणना करनी है। चुनते समय यह दो बातों को एक साथ देखता है। एक वह क्षेत्र है जहाँ प्रदर्शन अच्छा दिखाई देता है। दूसरा वह क्षेत्र है जहाँ अनिश्चितता है। अच्छे प्रदर्शन वाले क्षेत्र की खोज करने पर बेहतर समाधान के करीब पहुँचा जाता है। अनिश्चित क्षेत्र की खोज करने पर मानचित्र का धुंधला हिस्सा स्पष्ट हो जाता है। इन दोनों के बीच संतुलन बनाने वाले नियम को अधिग्रहण फलन (acquisition function) कहा जाता है। अक्सर इस्तेमाल होने वाला नियम यह मापने का तरीका है कि वर्तमान की तुलना में कतिना सुधार होने की उम्मीद है।

इस विधि का लाभ गणना क्रम को समझदारी से तय करने में है। यह किसी भी स्थिति की अंधाधुंध गणना नहीं करती। पहले उन स्थितियों को चुनती है जिनसे अधिक सीखने को मिलेगा। इसलिए कम LES गणनाओं से भी अच्छे छद्म आकार के पास पहुँचा जा सकता है। महंगी गणना बचाते हुए डिजाइन को तेजी से संकीर्ण किया जाता है। यह तरीका पहले गैस टरबाइन ब्लेडों के शीतलन छद्म डिजाइन में स्थापित हुआ। अब तक सत्यापित शोध मुख्यतः गैस टरबाइन पर केंद्रित है। कई लक्ष्यों को साथ देखने वाले बेजियन अनुकूलन से शीतलन प्रदर्शन और समानता दोनों बढ़ाए गए। एक अध्ययन ने रिपोर्ट किया कि समान दबाव हानि की स्थिति में शीतलन प्रदर्शन पुराने डिजाइन से अधिक हुआ।

कृत्रिम बुद्धिमत्ता को प्रवाह गणना में भी इस्तेमाल किया जाता है। 2024 के आसपास के अध्ययनों ने फ्लिम शीतलन दक्षता का अनुमान लगाने वाले न्यूरल नेटवर्क बनाए। एक अध्ययन ने दीवार की वक्रता और छद्म कोण बदलने पर भी शीतलन दक्षता का अनुमान लगाया। ऐसे अनुमान मॉडल सटीक गणना जैसे मान बहुत तेजी से देते हैं। वे डिजाइन के शुरुआती चरण में कई छद्म आकारों की तेजी से तुलना करने में मदद करते हैं। गॉसियन प्रोसेस अगली गणना चुनता है, और न्यूरल नेटवर्क उस गणना का तेज अनुमान करता है। इस तरह दोनों को जोड़ा भी जाता है।

रॉकेट दहन कक्ष का फ्लिम शीतलन भी यही विधि उधार लेता है। लेकिन रॉकेट की स्थितियाँ कहीं अधिक कठोर होती हैं। गैस अधिक गरम और अधिक तेज होती है। इसलिए विमान इंजन से मिले श्रेष्ठ छद्म मानों को रॉकेट में जस का तस नहीं ले जाना चाहिए। छद्म आकार, द्रव गति, दीवार वक्रता और ईंधन प्रकार बदले तो परिणाम बदलता है। अच्छी डिजाइन विधि स्थानांतरित की जा सकती है, लेकिन ठोस श्रेष्ठ मान हर बार फिर खोजने पड़ते हैं। कृत्रिम बुद्धिमत्ता उस दोबारा खोजने के काम को तेज करने वाला उपकरण है। अंतिम आकार को रॉकेट स्थितियों में फिर सत्यापित करना चाहिए।

9.4 कृत्रिम बुद्धिमत्ता से शीतलन मार्ग का आकार डिजाइन करना

शीतलन मार्ग का डिजाइन ठोस और द्रव के उलझे हुए संबंध की समस्या है। गर्म गैस की ऊष्मा पहले धातु की दीवार में प्रवेश करती है। वह ऊष्मा धातु के भीतर से होकर शीतलन मार्ग की ओर जाती है। मार्ग में बहता ईंधन उस ऊष्मा को छीन लेता है। धातु के भीतर बहने वाला ऊष्मा-चालन और द्रव द्वारा छीनी जाने वाली संवहन ऊष्मा एक ही जगह मिलते हैं। इन दोनों को साथ हल करने वाली गणना को संयुग्मी ऊष्मा अंतरण (conjugate heat transfer, CHT) कहते हैं। रॉकेट शीतलन मार्ग में ठोस और द्रव गहराई से जुड़े होते हैं, इसलिए यह गणना महत्वपूर्ण है।

सर्दियों की खड़की को याद करें तो समझना आसान है। कमरे के अंदर गर्मी होती है और बाहर ठंड होती है। कांच की अंदरूनी सतह और बाहरी सतह का तापमान अलग होता है। कांच के भीतर ऊष्मा बहती है, और कांच के बाहर ठंडी हवा ऊष्मा ले जाती है। कांच के भीतर ऊष्मा-चालन और बाहर की हवा का संवहन खड़की की सतह पर मिलते हैं। रॉकेट की दीवार भी ऐसी ही होती है। गर्म गैस की ओर से ऊष्मा अंदर आती है, और शीतलन मार्ग की ओर से ईंधन ऊष्मा ले जाता है। दोनों प्रवाह दीवार पर मिलकर संतुलन बनाते हैं।

संयुग्मी ऊष्मा अंतरण का मूल बटु सीमा पर नियम है। उस सतह को सोचें जहाँ धातु और ईंधन एक-दूसरे से लगते हैं। धातु से उस सतह पर आने वाली ऊष्मा और उस सतह पर ईंधन को मिलने वाली ऊष्मा बराबर होनी चाहिए। क्योंकि ऊष्मा न गायब होती है और न पैदा होती है। इसी नियम को नभिते हुए दीवार का तापमान निकालना पड़ता है। यह गणना बताती है कि दीवार पर तापमान सबसे अधिक कहां बढ़ता है और उस जगह को कैसे ठंडा करना है।

संयुग्मी ऊष्मा अंतरण की गणना में बहुत गणना लगती है। कारण यह है कि ठोस के भीतर ऊष्मा-चालन और द्रव के भीतर संवहन को एक साथ हल करना पड़ता है। इसके अलावा द्रव अशांत प्रवाह होता है। अशांत प्रवाह वह प्रवाह है जिसमें छोटे-बड़े भंवर मलि जाते हैं। इस प्रवाह को जतिनी बारीकी से हल किया जाता है, गणना में उतना अधिक समय लगता है। केवल एक शीतलन मार्ग को सही ढंग से हल करने में भी कंप्यूटर को लंबा समय लगता है। यदि डिजाइन उम्मीदवार हजारों हों, तो यह गणना हजारों बार करनी पड़ती है। इसलिए गणना घटाने की युक्ति चाहिए।

अब मार्ग का आकार डिजाइन करने की बारी है। यहां टोपोलॉजी अनुकूलन (topology optimization) का उपयोग किया जाता है। टोपोलॉजी अनुकूलन वह तरीका है जो तय जगह को पदार्थ से भरना है या खाली छोड़ना है, यह खोजता है। शीतलन मार्ग में यह समस्या बनती है कि कहां धातु रखनी है और कहां ईंधन बहने वाला खाली मार्ग रखना है। मनुष्य पहले से मार्ग का आकार तय नहीं करता। केवल लक्ष्य तय कर दिया जाए, तो अनुकूलन स्वयं मार्ग का आकार बना देता है। लक्ष्य दीवार के अधिकतम तापमान को कम करना है। साथ ही दबाव हानि को

भी बहुत अधिक नहीं होने देना है। शीतलन मार्ग को टोपोलॉजी अनुकूलन से डिजाइन करने वाले शोध पहले से मौजूद हैं। प्रवाह और ऊष्मा को साथ देखते हुए पदार्थ के वन्यास को थोड़ा-थोड़ा बदलने वाली घनत्व-आधारित विधि इसका प्रमुख उदाहरण है।

इस समस्या में बहुत अधिक चर होते हैं। स्थान को बारीक रूप से विभाजित करने वाले लाखों खाने होते हैं। प्रत्येक खाने के लिए यह तय करना होता है कि वह धातु है या खाली स्थान। संभावनाओं की संख्या अनगिनत है। यदि इस विशाल स्थान को सीधे खोजा जाए, तो अंतहीन समय लगेगा। इसलिए समस्या को छोटा करने की कला की आवश्यकता होती है। यही पर कॉन्वोल्यूशनल ऑटोएनकोडर (convolutional autoencoder, CAE) काम में आता है।

ऑटोएनकोडर एक ऐसा न्यूरल नेटवर्क है जो जटिल डेटा को छोटा करता है और फिर उसे पुनः नरूपित करता है। इसका अगला भाग चैनल के आकार को संख्याओं के एक छोटे समूह में संपीड़ित करता है। संख्याओं के इस समूह को लेटेन्ट वेक्टर (latent vector) कहा जाता है। इसका पछिला भाग उस लेटेन्ट वेक्टर से चैनल के आकार को फिर से पुनः नरूपित करता है। यदि इसे अच्छी तरह प्रशिक्षित किया जाए, तो केवल कुछ ही संख्याओं से चैनल के मुख्य आकार को समाहित किया जा सकता है। यह किसी तस्वीर को छोटी फाइल में संपीड़ित करने और फिर से खोलने के समान है। कॉन्वोल्यूशनल एक ऐसी गणना पद्धति है जो छवियों के आस-पास के हिस्सों को एक साथ देखती है। यह चैनल के आकार की तरह स्थानिक रूप से फैले डेटा को संभालने के लिए उपयुक्त है।

ऑटोएनकोडर से डिजाइन क्षेत्र को छोटा करने की इस विधि को रॉकेट शीतलन मार्ग पर सीधे लागू करने के सत्यापित उदाहरण अभी कम हैं। यह पुस्तक उसी दिशा का प्रस्ताव करती है। टोपोलॉजी अनुकूलन स्वयं सत्यापित विधि है, और उस पर ऑटोएनकोडर जोड़कर खोज को तेज करने की बात है।

यह संपीड़न डिजाइन को आसान बनाता है। ऑप्टिमाइज़र सीधे लाखों खानों को नहीं संभालता है। इसके बजाय, वह केवल छोटे लेटेन्ट वेक्टर में बदलाव करता है। लेटेन्ट वेक्टर को थोड़ा बदलने पर पछिला भाग एक उचित चैनल का आकार तैयार करता है। यह वसितुत डिजाइन स्थान को छोटे स्थान में घटाकर खोजने जैसा है। ऑप्टिमाइज़र इस छोटे स्थान में एक अच्छा लेटेन्ट वेक्टर खोजता है। उस वेक्टर द्वारा बनाया गया चैनल एक अच्छा शीतलन चैनल बन जाता है।

latent vector का एक और लाभ है। बनने वाला मार्ग आकार सामान्यतः विश्वसनीय लगता है। कारण यह है कि ऑटोएनकोडर ने वास्तविक मार्ग डेटा देखकर सीखा होता है। वह सीखे हुए आकारों की रूपरेखा के भीतर नया आकार बनाता है। इसलिए भौतिक रूप से असंगत विचित्र आकार कम निकलते हैं। बड़े क्षेत्र को बना करम खोजने से होने वाली व्यर्थ मेहनत घटती है। केवल संकरे और सार्थक क्षेत्र में उत्तर खोजा जाता है, इसलिए खोज तेज होती है। फिर भी केवल प्रशिक्षण डेटा से मालिती-जुलती आकृतियों से अच्छा मार्ग सुनिश्चित नहीं होता। यह अलग से जांचना पड़ता है कि मार्ग शुरू से अंत तक ठीक से जुड़ा है या नहीं, दीवार बहुत पतली तो नहीं है, और प्रवाह प्रतरोध तथा संरचनात्मक मजबूती ठीक है या नहीं। ऐसी शर्तों को अनुकूलन के भीतर अलग नियमों के रूप में रखना पड़ता है।

साथ ही यह शर्त भी रखनी होगी कि आकार बनाया जा सके। 3D प्रटिगि ऊपर की ओर परत चढ़ाकर बनाती है। नीचे सहारा न हो और कोई हिस्सा बहुत अधिक तरिखा फैल जाए, तो बनते समय वह झुक जाता है। इसलिए प्रतिबंध लगाया जाता है कि मार्ग की दीवार एक तय कोण से अधिक न झुके। यह प्रतिबंध पूरा हो तो मार्ग बना सहारे स्वयं खड़ा रह सकता है। ऐसी शर्तों को भी अनुकूलन में डालने पर निकले हुए डिजाइन को सीधे प्रटि किया जा सकता है। इससे गणना में अच्छा दिखने वाला डिजाइन वास्तव में न बन पाने वाला डिजाइन बनने से बचता है।

संयुग्मी ऊष्मा अंतरण गणना की जगह कृत्रिम बुद्धिमत्ता का उपयोग करने वाले शोध भी हैं। 2024 के एक शोध ने encoder और decoder को परतों में रखकर न्यूरल नेटवर्क बनाया। यह न्यूरल नेटवर्क पुरजे का आकार इनपुट लेकर तापमान वितरण सीधे बनाता था। हर बार सूक्ष्म संयुग्मी ऊष्मा अंतरण गणना चलाने के बजाय उसे तेज पूर्वानुमान से बदला गया। 2025 के एक अन्य शोध ने ठोस और द्रव को अलग-अलग न्यूरल नेटवर्क में बांटकर संभाला। दोनों न्यूरल नेटवर्क को सीमा पर एक-दूसरे के मानों से मेल खाने के लिए प्रशिक्षित किया गया। इससे दीवार और ईंधन के संपर्क वाली सतह पर तापमान के तीखे बदलाव बेहतर पकड़े जाते हैं। इन शोधों ने सामान्य संयुग्मी ऊष्मा अंतरण समस्याओं को संभाला। यदि रॉकेट शीतलन मार्ग के टोपोलॉजी अनुकूलन में ऐसे तेज पूर्वानुमान मॉडल इस्तेमाल किए जाएं, तो डिजाइन खोज तेज होती है। यह संयोजन आगे सुधारने की दिशा है।

टोपोलॉजी अनुकूलन जो मार्ग बनाता है, वह ऐसा आकार होता है जैसा मनुष्य हाथ से बनाना कठिन पाता है। शाखाएं अलग होती हैं और फिर मालिती हैं, तथा दीवार की घुमावदार सतह के साथ मुड़ती हैं। कभी-कभी मछली की हड्डी जैसी तरिछी पतली पंखनुमा संरचनाएं सघन रूप से कतार में दिखती हैं। ऐसे आकार ऊष्मा को समान रूप से बांटते हैं और प्रवाह को सहज दिशा देते हैं। मनुष्य की आंखों को वे अच्छे न लगे, फिर भी गणना के अनुसार अच्छे आकार हो सकते हैं। कृत्रिम बुद्धिमत्ता ऐसे अप्रत्याशित आकार खोज देती है।

इस विधि का एक औद्योगिक उदाहरण है। एक कंपनी ने ऐसी टोपोलॉजी अनुकूलन तकनीक को रॉकेट शीतलन मार्ग पर लागू किया। उसने घोषणा की कि इससे दीवार का अधिकतम तापमान काफी घटा। हाल में नियमित वक्र सतहों को शीतलन मार्ग में इस्तेमाल करने वाला शोध भी आया है। इस वक्र सतह को triply periodic minimal surface (TPMS) कहते हैं। TPMS ऐसी संरचना है जिसमें साबुन के बुलबुले की झलिली जैसी मुलायम मुड़ी हुई वक्र सतहें स्थान में नियमित रूप से दोहराई जाती हैं। यह संरचना संकरी जगह में बड़ा सतह-क्षेत्र मोड़कर

रखती है। सतह बड़ी हो तो ऊष्मा का आदान-प्रदान अधिक होता है। 2025 के एक शोध ने दीवार की वक्र सतह के साथ लपिटने वाला TPMS मार्ग बनाया। उसने बताया कि इससे शीतलन क्षमता और दीवार की परधिपर तापमान की समानता दोनों बढ़ी। 2026 में जालक के भीतर भरे शीतलन मार्ग से ऊष्मा अंतरण बढ़ाने वाला शोध भी आया। ऐसे वक्र मार्ग और जालक मार्ग 3D प्रटिंग के बिना नहीं बनाए जा सकते। फरि भी कंपनी का उदाहरण शैक्षणिक शोधपत्रों और सत्यापन पद्धतसे अलग है। इस पुस्तक में उसे केवल उद्योग की दशा दखाने वाले संदर्भ उदाहरण के रूप में लिया गया है। अंतमि प्रदर्शन को डिजाइन आधार तभी बनाना चाहिए जब स्वतंत्र परीक्षण डेटा उपलब्ध हो।

9.5 कालखि जमने वाले कोकगि को कम करने हेतु बहु-उद्देश्यीय अनुकूलन

केरोसीन श्रेणी का ईंधन RP-1 जब शीतलन के रूप में इस्तेमाल होता है, तो उसकी एक कमजोरी होती है। गर्म दीवार के पास से गुजरते समय ईंधन ऊष्मा से टूटता है। इसे ऊष्मीय अपघटन कहते हैं। टूटे हुए टुकड़ों में से कार्बन दीवार पर चपिककर जमता है। यह वैसा है जैसे तवे में तेल लंबे समय तक रहने पर काला जम जाता है। दीवार पर चपिकने वाली इस कार्बन परत को coking कहते हैं। coking शीतलन मार्ग के भीतर धीरे-धीरे जमा होती है।

ईंधन के ऊष्मा से टूटने को ऊष्मीय अपघटन कहते हैं। यह वह प्रक्रिया है जिसमें बड़े अणु ऊष्मा पाकर छोटे टुकड़ों में बंट जाते हैं। तापमान जतिना अधिक होता है, टूटना उतना तेज होता है। टूटे हुए टुकड़ों में जनिमें कार्बन अधिक होता है, वे आपस में जुड़ते हैं। जुड़ा हुआ कार्बन दीवार पर चपिककर परत बनाता है। इसलए दीवार जतिनी गर्म होती है, coking उतनी आसानी से बनती है। coking दीवार के तापमान, ईंधन के प्रकार और बीतते समय पर साथ नरिभर करती है।

coking नोजल गले में आसानी से बनती है। नोजल गला वह जगह है जहां ऊष्मा फ्लक्स सबसे अधिक होता है। दीवार उतनी ही गर्म होती है, इसलए ईंधन का अपघटन भी सक्रिय होता है। coking दो समस्याएं पैदा करती है। पहली यह कि कार्बन परत ऊष्मा अच्छी तरह नहीं पहुंचाती। परत दीवार और ईंधन के बीच अवरोध बनती है और दीवार अधिक गर्म हो जाती है। दूसरी यह कि परत मार्ग को संकरा करती है। मार्ग संकरा होने पर ईंधन का गुजरना कठिन होता है और दबाव हानि बढ़ती है। दोनों समस्याएं मल्लिं तो दीवार खतरनाक स्थितिमें पहुंचती है। पुनः इस्तेमाल होने वाले इंजन में coking परीक्षण दोहराने के साथ जमा होती जाती है, इसलए समस्या और बढ़ती है।

तापमान और कोकगि के संबंध में एक नियम होता है। तापमान में थोड़ी सी भी वृद्धि होने पर रासायनिक प्रतिक्रिया काफी तेज हो जाती है। दीवार का तापमान बढ़ने पर ईंधन का अपघटन स्पष्ट रूप से तेज हो जाता है। उसी अनुपात में कोकगि भी तेजी से जमती है। इसलए दीवार का तापमान थोड़ा सा कम करने मात्र से भी कोकगि को काफी हद तक कम किया जा सकता है। अच्छी तरह शीतलन करने पर दीवार ठंडी होती है, और दीवार के ठंडे होने पर कोकगि घटती है। शीतलन और कोकगि का दमन इस प्रकार आपस में जुड़े हुए हैं।

पछिले खंड का ऊष्मा अंतरण क्षरण इसी coking से जुड़ता है। जब अतःक्रांतिक ईंधन छद्म-क्रांतिक रेखा से गुजरता है, तो दीवार के पास ऊष्मा अंतरण अचानक बगिड़ता है। तब उसी जगह दीवार का तापमान तेजी से बढ़ता है। दीवार गर्म हो तो ईंधन तेजी से टूटता है और coking तेजी से जमा होती है। जमा coking ऊष्मा को और रोकती है और दीवार को अधिक गर्म करती है। यह प्रतपिष्ट जारी रहे तो दीवार अचानक वफिल हो सकती है। ऊष्मा अंतरण क्षरण और coking एक-दूसरे को बढ़ाते हैं।

coking घटाने के लिए दीवार का तापमान घटाना पड़ता है। दीवार कम गर्म हो तो ईंधन कम टूटता है। इसके साथ दीवार के पास के प्रवाह को भी देखना चाहिए। यदि ईंधन दीवार को तेजी से छूता हुआ गुजरता है, तो परत चपिकने का अवसर घटता है। दीवार के पास द्रव द्वारा दीवार को छूते हुए लगाने वाले बल को दीवार कतरनी तनाव कहते हैं। यह बल कुछ हद तक मजबूत होना चाहिए ताकि परत कम जमे। coking रोकथाम डिजाइन दीवार तापमान और दीवार कतरनी को साथ नयित्तरति करने की समस्या है।

समस्या यह है कि लक्ष्य कई हैं और वे एक-दूसरे से टकराते हैं। दीवार का तापमान घटाने का लक्ष्य है। दबाव हानि घटाने का लक्ष्य है। coking रोकने का लक्ष्य है। ये लक्ष्य साथ-साथ बेहतर नहीं होते। मार्ग को संकरा करके प्रवाह तेज किया जाए तो दीवार ठंडी होती है, पर दबाव हानि बढ़ती है। मार्ग को चौड़ा करके प्रवाह धीमा किया जाए तो दबाव हानि घटती है, पर शीतलन कमजोर होता है। एक पक्ष पाने पर दूसरा पक्ष खोना पड़ता है। ऐसी समस्या जिसमें कई लक्ष्य टकराते हैं, बहुउद्देश्यीय अनुकूलन कहलाती है।

ऐसा अदला-बदली वाला संबंध जीवन में भी परिचित है। बैग चुनने का समय सोचें। हल्का, मजबूत और सस्ता बैग एक साथ पाना कठिन है। हल्का हो तो कमजोर होने की संभावना रहती है, और मजबूत हो तो भारी या महंगा होता है। इसलए हम उपयोग के अनुसार संतुलन बिंदु चुनते हैं। शीतलन मार्ग डिजाइन भी ऐसा ही है। शीतलन, दबाव हानि और coking रोकथाम को सभी को सर्वोत्तम नहीं बनाया जा सकता। एक पक्ष पाने पर दूसरा पक्ष थोड़ा छोड़ना पड़ता है।

बहुउद्देश्यीय अनुकूलन का उत्तर एक नहीं होता। इसके बजाय एक-दूसरे से अदला-बदली करने वाले कई अच्छे उत्तरों का समूह मलित है। इस समूह को Pareto front कहते हैं। Pareto front पर मौजूद उत्तरों के संतुलन बिंदु अलग-अलग होते हैं। कोई उत्तर शीतलन को आगे रखता है, और कोई उत्तर दबाव हानि को आगे रखता है। डिजाइनर इस समूह को देखकर इंजन के लिए उपयुक्त संतुलन बिंदु चुनता है। मनुष्य पहले से एक उत्तर तय करने के बजाय अच्छे उम्मीदवारों को सामने रखकर चुनता है।

यहाँ बायेसयिन अनुकूलन (बेजियन optimization) का उपयोग किया जाता है। यह पछिले खंड के गॉसियन प्रोसेस और सक्रिय अधिगम को कई लक्ष्यों तक विस्तारित करने वाली विधि है। पहले, कम गणनाओं के साथ लक्ष्यों का एक मोटा नक्शा तैयार किया जाता है। उस नक्शे को देखकर यह चुना जाता है कि अगली बार कनि स्थितियों की गणना करनी है। पेरैटो सीमा (Pareto boundary) को विस्तारित करने में काफी मददगार होने वाली स्थितियों की गणना पहले की जाती है। महंगे दहन विश्लेषण को कम करते हुए भी अच्छे संतुलन बिंदु खोजे जाते हैं। कोकगि को भी लक्ष्य में शामिल करने पर दीवार के तापमान, शयिर और दबाव के नुकसान को एक साथ तौलने वाला डिज़ाइन सामने आता है। हालाँकि, रॉकेट शीतलन चैनल में कोकगि को लक्ष्य बनाकर अनुकूलित किए गए सत्यापित उदाहरण अभी खोजना कठिन है। तापीय अपघटन और नक्षेपण की भौतिकी अच्छी तरह ज्ञात है, इसलिए यह पुस्तक उस भौतिकी को लक्ष्य में शामिल करके डिज़ाइन करने की दिशा का प्रस्ताव करती है।

कोकगि पुनः उपयोग होने वाले इंजन में और बड़ी समस्या बनती है। इसका अर्थ यह नहीं है कि एक बार इस्तेमाल होकर फेंक दिए जाने वाले इंजन को कोकगि से छूट मलि जाती है। एक ही दहन के दौरान भी यदि जमी हुई परत रास्ते को संकरा कर दे या ऊष्मा हस्तांतरण को खराब कर दे, तो दीवार टूट सकती है। इंजन दोबारा इस्तेमाल हो या न हो, मशिन के समय के भीतर परत कतिनी तेजी से जमती है, यह महत्वपूर्ण है। कई बार फिर से इस्तेमाल होने वाले इंजन में इसके ऊपर संचय की समस्या जुड़ जाती है। दहन परीक्षण जतिनी बार दोहराया जाता है, परत थोड़ी-थोड़ी जमती जाती है। जमी हुई परत शीतलन को धीरे-धीरे खराब बनाती है। इसलिए पुनः उपयोग होने वाले इंजन को शुरू से ही कोकगि दबाने के लिए डिज़ाइन करना चाहिए। कृत्रिम बुद्धिमत्ता आधारित अनुकूलन इस लंबे समय के बदलाव तक आगे देखकर डिज़ाइन बनाने में मदद करता है।

इस विधि को रॉकेट परीक्षण डेटा के साथ भी जोड़ा जाता है। जर्मन एयरोस्पेस सेंटर का लैम्पोल्ड्सहाउज़ेन (Lampoldshausen) परीक्षण स्थल वह स्थान है जहाँ रॉकेट इंजनों को वास्तव में चलाकर डेटा प्राप्त किया जाता है। ऐसे परीक्षण डेटा होने पर अनुकूलन का आधार मॉडल अधिक सटीक हो जाता है। केवल गणनाओं से छूट जाने वाले वास्तविक कोकगि व्यवहार को यह डेटा पूरा कर देता है। यह परीक्षण और गणना के बीच सामंजस्य बनाते हुए डिज़ाइन को परिष्कृत करने का प्रवाह है।

ऊँचे आस्पेक्ट रेशियो वाले रास्ते भी कोकगि रोकने में इस्तेमाल होते हैं। आस्पेक्ट रेशियो रास्ते की ऊँचाई को उसकी चौड़ाई से भाग देने पर मिलने वाला मान है। संकरा और गहरा रास्ता ऊँचे आस्पेक्ट रेशियो वाला होता है। ऐसे रास्ते में दीवार से छूने वाला क्षेत्र बड़ा होता है, इसलिए वह ऊष्मा को अच्छी तरह खींच लेता है। दीवार अधिक ठंडी रहती है, इसलिए ईंधन का विघटन घटता है। कभी-कभी सर्पिली की तरह घूमते हुए रास्ते भी इस्तेमाल किए जाते हैं। प्रवाह को घुमाने से वह दीवार के पास अधिक जोर से रगड़ खाता है। पर ऐसे रास्तों में दबाव हानि बढ़ सकती है, इसलिए इसे साथ में तौलना चाहिए।

इस खंड में भी सावधानी की बात है। कोकगि में कमी के आंकड़े तभी भरोसेमंद हैं जब वास्तविक परीक्षण उनका समर्थन करे। इसलिए यह पुस्तक ठोस आंकड़ों के बजाय विधिके सिद्धांत पर ध्यान देती है। वास्तविक इंजन में ईंधन की संरचना, सतह की खुरदरापन, दीवार की उत्प्रेरक क्रिया और संचालन समय, सभी कोकगि को प्रभावित करते हैं। चर बहुत अधिक है, इसलिए पूर्वानुमान कठिन है। परीक्षण से समर्थन न होने वाले कोकगि पूर्वानुमान को सावधानी से देखना चाहिए। कृत्रिम बुद्धिमत्ता का उपयोग अच्छे उम्मीदवारों को छानने में किया जाता है, और अंत में पुष्टि वास्तविक दहन परीक्षण से की जाती है।

9.6 पंप के आगे के ब्लेड इंड्यूसर को डिज़ाइन करने वाली भौतिकी-सुदृढ़ मशीन लर्नगि

रॉकेट इंजन को ईंधन और ऑक्सीजन को दहन कक्ष में जोर से धकेलना पड़ता है। यह काम टर्बोपंप (turbo pump) करता है। टर्बोपंप बहुत तेजी से घूमने वाला पंप है। लेकिन पंप का मुख्य ब्लेड प्रवेश दबाव कम होने पर ठीक से काम नहीं कर पाता। इसलिए मुख्य ब्लेड के आगे एक सहायक ब्लेड लगाया जाता है। यही सहायक ब्लेड इंड्यूसर है। इंड्यूसर पहले द्रव को सहज रूप से भीतर खींचता है और दबाव को थोड़ा बढ़ाता है। इससे पीछे का मुख्य ब्लेड स्थिर रूप से घूमता है। यह पंप के द्वारपाल जैसा घटक है।

पहले देखें कि टर्बोपंप क्यों जरूरी है। दहन कक्ष के भीतर दबाव बहुत अधिक होता है। ईंधन को उसके भीतर धकेलने के लिए उससे अधिक दबाव चाहिए। कम दबाव वाला ईंधन अधिक दबाव वाले दहन कक्ष में प्रवेश नहीं कर सकता। यह वैसा ही है जैसे पानी अपने आप नीची जगह से ऊंची जगह नहीं बहता। इसलिए पंप से ईंधन का दबाव बहुत बढ़ाया जाता है। रॉकेट का टर्बोपंप यह काम बहुत तेज घूर्णन से करता है। बड़े इंजन का टर्बोपंप 1 मिनट में दसियों हजार बार घूमता है।

तरल हाइड्रोजन को संभालते समय इंड्यूसर अधिक कठिन हो जाता है। तरल हाइड्रोजन (liquid hydrogen) लगभग माइनस 253 डिग्री का अत्यंत ठंडा द्रव है। उसका घनत्व कम होता है, इसलिए वह हल्का होता है। इंड्यूसर तेजी से घूमे तो ब्लेड के आगे वाले हिस्से में ऐसी जगह बनती है जहां दबाव अचानक गिर जाता है। द्रव का दबाव पर्याप्त कम हो जाए तो वह उबलता है। गर्म न हो, तब भी केवल दबाव कम होने से बुलबुले बनते हैं। यह वही सिद्धांत है जैसे पहाड़ पर पानी कम तापमान पर भी आसानी से उबलता है। बहते द्रव के भीतर इस तरह बुलबुले बनने की घटना को कैविटेशन (cavitation) कहा जाता है।

कैवटिशन इंड्यूसर को परेशान करता है। बने हुए बुलबुले फरि अधिक दबाव वाली जगह में बहकर पहुंचते हैं, तो पल भर में दब जाते हैं। बुलबुला मटिते समय बहुत तीव्र दबाव तरंग बनती है। यह तरंग ब्लेड की सतह को थोड़ा-थोड़ा काटती है। लंबे समय तक ऐसा हो तो ब्लेड में गड़दे पड़ जाते हैं। कैवटिशन पंप के प्रदर्शन को भी घटाता है। बुलबुले अधिक हो जाएं तो पंप द्वारा उठाया गया दबाव अचानक ढह जाता है। इस ढहने के बटु से आगे बढ़ने पर पूरा इंजन खतरे में पड़ जाता है। इसलिए इंड्यूसर को इस तरह डजिइन करना चाहिए कि कैवटिशन देर से हो।

एक गुण इसमें मदद करता है। अतशीत द्रवों में ऊष्मागतिकीय दमन प्रभाव होता है। बुलबुला बनने के लिए आसपास के द्रव से वाष्पीकरण की गुप्त ऊष्मा लेनी पड़ती है। तब बुलबुले के आसपास का तापमान थोड़ा घटता है। तापमान घटे तो उस स्थान का उबलने का दबाव भी घटता है। इसलिए बुलबुले का और बढ़ना कठिन हो जाता है। मानो बुलबुला स्वयं अपने विकास को दबाता है। तरल हाइड्रोजन में यह दमन प्रभाव बड़ा होता है, इसलिए कैवटिशन थोड़ा देर से होता है। इंड्यूसर डजिइन में इस प्रभाव को भी गणना में शामिल करना चाहिए। भौतिकी-सुदृढ़ अधगिम के भौतिक नयिमों में भी यह प्रभाव शामिल करना चाहिए। ऐसा न किया जाए तो कैवटिशन प्रदर्शन को वास्तविकता से अधिक खराब समझ लिया जाता है।

इंड्यूसर डजिइन का अर्थ ब्लेड का आकार तय करना है। ब्लेड का कोण, वक्रता और आगे की ओर स्वीप की मात्रा प्रदर्शन तय करती है। लक्ष्य तीन है। दबाव अच्छी तरह बढ़ना चाहिए। दक्षता अच्छी होनी चाहिए। कैवटिशन देर से होना चाहिए। ये लक्ष्य भी आपस में टकराते हैं। दबाव जोर से बढ़ाने के लिए ब्लेड को अधिक खड़ा किया जाए तो कैवटिशन आसानी से होता है। कैवटिशन से बचने के लिए ब्लेड को अधिक लटिया जाए तो दबाव कम बढ़ता है। यह पछिले खंडों जैसी ही संतुलन की समस्या है।

दबाव बढ़ाने की इंड्यूसर की क्षमता की एक सीमा रेखा होती है। मान लें कि प्रवेश दबाव को थोड़ा-थोड़ा घटाते हुए पंप चलाया जाता है। एक बटु तक पंप इसे अच्छी तरह सह लेता है। लेकिन प्रवेश दबाव किसी मान से नीचे गरिते ही कैवटिशन गंभीर हो जाता है। उसी क्षण पंप द्वारा बढ़ाया गया दबाव अचानक ढह जाता है। इस ढहने के बटु को हेड ब्रेकडाउन बटु कहा जाता है। हेड वह माप है जो बताता है कि पंप द्रव को ऊपर धकेलने में कतिना बल देता है। वास्तविक पंप में बुलबुले पहली बार बनने के बटु और हेड के पूरी तरह ढहने के बटु को अलग किया जाता है। उनके बीच, जहां हेड 3 प्रतिशत गरिता है, उसे भी आधार मानते हैं। इस मान को NPSH3 कहा जाता है। प्रारंभिक कैवटिशन, NPSH3 और पूर्ण हेड पतन अलग-अलग बटु हैं। अच्छा इंड्यूसर इस ब्रेकडाउन बटु को और कम प्रवेश दबाव तक टाल देता है। उतने कम दबाव पर भी वह स्थिर रूप से घूमता है। यह गुण रॉकेट के वजन से भी जुड़ा है। यदि इंड्यूसर कम दबाव को अच्छी तरह सह ले, तो ईंधन टैंक का दबाव कम रखा जा सकता है। टैंक दबाव कम हो तो टैंक की दीवार पतली बनाई जा सकती है। टैंक हल्का हो जाए तो पूरा रॉकेट हल्का हो जाता है। इस तरह छोटे से ब्लेड का डजिइन रॉकेट के वजन तक बदल देता है।

यहां भौतिकी-सुदृढ़ मशीन लर्नगि (physics-enhanced machine learning) का उपयोग किया जाता है। केवल डेटा सीखने वाली मशीन लर्नगि भौतिक नयिम तोड़ सकती है। इसलिए द्रव के संरक्षण नयिम और कैवटिशन भौतिकी को अधगिम में साथ रखा जाता है। प्रवाह क्षेत्र का तेज अनुमान फूरिये न्यूरल ऑपरेटर (Fourier neural operator, FNO) से लगाया जाता है। यह ऑपरेटर प्रवाह की पूरी तस्वीर को एक साथ तेजी से अनुमानित करने वाला न्यूरल नेटवर्क है। सामान्य न्यूरल नेटवर्क किसी एक बटु का मान अनुमानित करता है, जबकि यह ऑपरेटर पूरे प्रवाह क्षेत्र का एक साथ अनुमान लगाता है। क्योंकि यह प्रवाह को कई आकार की तरंगों में बांटेकर संभालता है, इसलिए बड़े प्रवाह और छोटी लहरों, दोनों को पकड़ता है। इसलिए यह प्रवाह क्षेत्र जैसे स्थान में फैले मानों का तेज अनुमान लगाने के लिए उपयुक्त है। ब्लेड का आकार बदलते हुए प्रवाह और कैवटिशन जोखिम को जल्दी जांचा जा सकता है। हर बार सूक्ष्म गणना चलाने की तुलना में यह बहुत तेज है। फूरिये न्यूरल ऑपरेटर स्वयं कई प्रवाह समस्याओं में परखी हुई वर्धित है। इसे तरल हाइड्रोजन इंड्यूसर के रविर्स डजिइन में इस्तेमाल करना इस पुस्तक का प्रस्तावित मार्ग है।

इंड्यूसर डजिइन में कृत्रिम बुद्धिमत्ता कई प्रकार की जानकारी देखती है। वह ब्लेड के आगे वाले हिस्से में दबाव वितरण देखती है। वह देखती है कि कहां दबाव बहुत कम होता है और वहां कैवटिशन कतिना बढ़ेगा। वह यह भी देखती है कि ब्लेड के पीछे दबाव कतिना वापस संभलता है। इन जानकारीयों को मिलाकर अच्छा ब्लेड आकार खोजा जाता है। आगे की ओर स्वीप वाला ब्लेड आकार कैवटिशन को देर से लाने में मदद करता है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता ऐसे कई आकार बनाती है और तेजी से उनकी तुलना करती है।

कृत्रिम बुद्धिमत्ता कैवटिशन का नदिान करने में भी इस्तेमाल होती है। 2025 के एक अध्ययन ने हाई-स्पीड कैमरे से इंड्यूसर कैवटिशन को रकिॉर्ड किया और उस वीडियो का न्यूरल नेटवर्क से विश्लेषण किया। स्थानिक पैटर्न देखने वाले न्यूरल नेटवर्क और समय के बदलाव देखने वाले न्यूरल नेटवर्क को साथ इस्तेमाल किया गया। इससे कैवटिशन के अस्थिर होने का क्षण पहचाना जा सकता है। आंख से देखना कठिन तेज बदलावों को कृत्रिम बुद्धिमत्ता पकड़ लेती है। यह अध्ययन कैवटिशन पहचानने वाले नदिान से जुड़ा है। प्रवाह की जगह गणना करने वाले सरोगेट मॉडल या ब्लेड आकार खोजने वाले रविर्स डजिइन से इसका उपयोग अलग है। इन तीनों को मिलाकर नहीं, अलग-अलग समझना चाहिए।

इंड्यूसर डजिइन केवल प्रवाह गणना से पूरा नहीं होता। ब्लेड बहुत तेजी से घूमता है, इसलिए उस पर बड़ा बल लगता है। कैवटिशन बुलबुले दबकर मटिते समय बनने वाली तरंग भी ब्लेड पर चोट करती है। इसलिए साथ में यह भी देखना चाहिए कि ब्लेड इन बलों को सहता है या नहीं।

यदि शीतलन रास्ते का डिजाइन ऊष्मा और प्रवाह का संतुलन है, तो इंड्यूस्टर डिजाइन प्रवाह, बल और कैवटेशन का संतुलन है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता इन कई लक्ष्यों को साथ तौलने में इस्तेमाल होती है।

यहां भी सीमाएं स्पष्ट हैं। अतः शीत हाइड्रोजन परीक्षण कठिन और महंगा है। माइनस 250 डिग्री से भी अधिक ठंडे द्रव को संभालने वाली परीक्षण सुविधाएं स्वयं बहुत कम हैं। इसलिए इंड्यूस्टर डिजाइन के सत्यापन डेटा पर्याप्त नहीं हैं। कैवटेशन में कमी के आंकड़े तभी भरोसेमंद हैं जब वास्तविक पंप परीक्षण उनका समर्थन करे। इसलिए यह पुस्तक अपुष्ट आंकड़े नहीं लिखती। इसके बजाय यह इस बात पर ध्यान देती है कि भौतिकी-सुदृढ़ मॉडल कौन-सी जानकारी देखकर डिजाइन में मदद करता है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता अच्छे ब्लेड उम्मीदवारों को छोट दे, तब भी अंतिम नरिणय वास्तविक पंप परीक्षण से ही करना चाहिए।

सारांश

इस अध्याय ने रॉकेट इंजन की ऊष्मा प्रबंधन संरचना को कृत्रिम बुद्धिमत्ता से डिजाइन करने की वधि देखी। जनि संरचनाओं पर चर्चा हुई, वे तीन हैं। दीवार के भीतर शीतलन रास्ता, दीवार पर शीतलन फ़िल्म चढ़ाने वाले फ़िल्म-कूलिंग छदिर, और ईंधन को ऊपर धकेलने वाले पंप के आगे के ब्लेड इंड्यूस्टर। तीनों संरचनाओं में एक ही तरह की समस्या है। यह ऊष्मा और प्रवाह के संतुलन की समस्या है। एक ओर को जोर से पाने पर दूसरी ओर खो जाती है। इस संतुलन बटु को जल्दी खोजने में कृत्रिम बुद्धिमत्ता आई है।

आधार में दो बड़े बदलाव थे। एक है धातु 3D प्रटिंग। काटकर न बनाए जा सकने वाले जटिल अंदरूनी रास्ते बनाना संभव हुआ। डिजाइन की स्वतंत्रता बहुत बढ़ गई। दूसरा है ऊष्मा को अच्छी तरह ले जाने वाली तांबे की मशिर् धातु GRCop-42 जैसी नई सामग्री। स्वतंत्र डिजाइन और अच्छी सामग्री के मिलने से नई शीतलन संरचना संभव हुई। पर नई नरिमाण वधि गुणवत्ता नरिंत्रण के प्रतिसंवेदनशील है, इसलिए नरिमाण प्रक्रिया को बारीकी से देखना चाहिए।

कृत्रिम बुद्धिमत्ता कई तरीकों से इस्तेमाल हुई। सरोगेट मॉडल ने धीमी द्रव गणना की जगह सुपरक्रिटिकल ईंधन के व्यवहार का तेज अनुमान लगाया। गॉसियन प्रोसेस सक्रिय अधगिम ने महंगी गणना बचाते हुए अच्छे फ़िल्म-कूलिंग छदिर खोजे। कॉन्वोल्यूशनल ऑटोएन्कोडर ने जटिल रास्ते के आकार को छोटी संख्या-स्थान में घटाकर टोपोलॉजी डिजाइन को आसान बनाया। बहु-उद्देश्यीय बेजियन अनुकूलन ने आपस में टकराने वाले लक्ष्यों के संतुलन बटु खोजकर कोकगि दबाई। भौतिकी-सुदृढ़ मशीन लर्नगि और फूरिय न्यूरोल ऑपरेटर ने इंड्यूस्टर के कैवटेशन को नरिंत्रति करने वाला डिजाइन बनाने में मदद की।

इस अध्याय की वधियां एक-दूसरे से जुड़ी हैं। सरोगेट मॉडल प्रवाह का तेज अनुमान लगाता है। सक्रिय अधगिम उस अनुमान के आधार पर अगली गणना चुनता है। ऑटोएन्कोडर डिजाइन स्थान को घटाकर खोज को आसान बनाता है। बेजियन अनुकूलन कई लक्ष्यों का संतुलन बटु खोजता है। भौतिकी-सुदृढ़ अधगिम भौतिक नयिमों का पालन कराता है। केवल एक औजार इस्तेमाल नहीं होता, कई औजारों को जोड़कर इस्तेमाल किया जाता है। समस्या के अनुसार चुनकर मलाना डिजाइनर का काम है।

एक साझा सिद्धांत है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता उत्तर की जगह नरिणय लेने वाला औजार नहीं है। यह वसितुत डिजाइन स्थान में अच्छे उम्मीदवारों को जल्दी छोटने वाला औजार है। सरोगेट मॉडल केवल सीखी हुई सीमा के भीतर भरोसेमंद है। कंपनी मामलों के प्रदर्शन आंकड़े शैक्षणिक सत्यापन से अलग हैं। जसिका स्रोत पुष्ट न हो, ऐसे आंकड़े नहीं लिखे जाते। रॉकेट इंजन शीतलन ऐसा क्षेत्र है जहां दीवार एक बार पघिल जाए तो इंजन टूट जाता है। इसलिए अंतिम नरिणय हमेशा उच्च-सटीकता गणना और वास्तविक दहन परीक्षण से किया जाता है।

इस अध्याय की वधियों में एक समानता है। वे सभी महंगी गणना बचाने की तकनीक हैं। सूक्ष्म गणना सटीक होती है, लेकिन धीमी होती है। यदि उस धीमी गणना को हर बार चलाया जाए, तो डिजाइन पूरा नहीं होता। इसलिए कृत्रिम बुद्धिमत्ता तेज अनुमान का काम संभालती है। सरोगेट मॉडल गणना की जगह लेता है, सक्रिय अधगिम गणना का क्रम चुनता है, और ऑटोएन्कोडर समस्या को घटाता है। बचाए गए समय से अधिक उम्मीदवारों को देखा जाता है। जतिने अधिक उम्मीदवार देखे जाते हैं, अच्छे उत्तर तक पहुंचने की संभावना उतनी बढ़ती है।

आगे की दशा भी इसी सिद्धांत पर खड़ी है। भौतिक ज्ञान को और गहराई से शामिल करने वाली मशीन लर्नगि बढ़ रही है। डिजाइन और नदिन को जोड़ने वाला प्रवाह भी फैल रहा है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता डिजाइन के उम्मीदवार देती है, परीक्षण उन उम्मीदवारों की पुष्टि करता है, और उस परीक्षण का डेटा फिर कृत्रिम बुद्धिमत्ता को और बेहतर बनाता है। यह चक्र रॉकेट इंजन के ताप प्रबंधन डिजाइन को धीरे-धीरे आगे बढ़ा रहा है। इस अध्याय को एक वाक्य में घटाएँ तो बात यह है। ताप और प्रवाह के कठिन संतुलन की समस्या को, बढ़ी हुई डिजाइन स्वतंत्रता के भीतर, कृत्रिम बुद्धिमत्ता तेजी से हल करने में मदद करती है। और उस उत्तर की पुष्टि हमेशा परीक्षण से की जाती है। औजार तेज हो गए हैं, लेकिन सत्यापन का सिद्धांत वही है। अगला अध्याय यह बताता है कि इस तरह बनाए गए इंजन को वास्तव में चलाते समय कृत्रिम बुद्धिमत्ता इंजन का नदिन और नरिंत्रण कैसे करती है।

संबंधित आधार-सामग्री

- Pizzarelli, M. (2017). Regenerative cooling of liquid rocket engine thrust chambers: Modeling and simulation. *Journal of Propulsion and Power*, 33(4), 802-821. <https://doi.org/10.2514/1.B36261>
- Waxenegger-Wilfing, G., Dresia, K., Deeken, J., & Oswald, M. (2020). Heat transfer prediction for methane in regenerative cooling channels with neural networks. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 34(2), 347-357. <https://doi.org/10.2514/1.T5865>
- Dresia, K., Waxenegger-Wilfing, G., Riccius, J., Deeken, J., & Oswald, M. (2023). Improved wall temperature prediction for the LUMEN rocket combustion chamber with neural networks. *Aerospace*, 10(5), 450. <https://doi.org/10.3390/aerospace10050450>
- Waxenegger-Wilfing, G., Dresia, K., Deeken, J., & Oswald, M. (2021). Machine learning methods for the design and operation of liquid rocket engines: Research activities at the DLR Institute of Space Propulsion. *arXiv*. <https://arxiv.org/abs/2102.07109>
- Gradl, P. R., Protz, C. S., Cooper, K., Ellis, D., & Evans, L. J. (2019). GRCop-42 development and hot-fire testing using additive manufacturing powder bed fusion for channel-cooled combustion chambers. *AIAA Propulsion and Energy 2019 Forum*. <https://doi.org/10.2514/6.2019-4228>
- NASA NTRS. (2019). GRCop-42 development and hot-fire testing using additive manufacturing powder bed fusion for channel-cooled combustion chambers. Document ID 20190030433. <https://ntrs.nasa.gov/citations/20190030433>
- Gradl, P., Mireles, O. R., Katsarelis, C., Smith, T. M., Sowards, J., Park, A., et al. (2023). Advancement of extreme environment additively manufactured alloys for next generation space propulsion applications. *Acta Astronautica*, 211, 483-497. <https://doi.org/10.1016/j.actaastro.2023.06.035>
- NASA. (2023). GRCop-42 additive manufacturing for high heat flux thrust chamber liners. NASA Technical Reports Server. <https://ntrs.nasa.gov/citations/20230007103>
- NASA. (2023). Rapid Analysis and Manufacturing Propulsion Technology (RAMPT) project. NASA. <https://www.nasa.gov/rapid-analysis-and-manufacturing-propulsion-technology/>
- Demeneghi, G., Williams, B. B., Katsarelis, C., Tilson, W., & Gradl, P. (2025). Additively manufactured GRCop-42 copper-alloy combustion chamber failure analysis: The role of build interruptions. *Engineering Failure Analysis*, 174, 109509. <https://doi.org/10.1016/j.engfailanal.2025.109509>
- Ferster, K. K., et al. (2025). An open tool for the design of cooling channels within regeneratively cooled liquid rocket engines. *AIAA SciTech 2025 Forum*. <https://doi.org/10.2514/6.2025-2127>
- NIST. (2026). Thermophysical properties of fluid systems. NIST Chemistry WebBook. <https://webbook.nist.gov/chemistry/fluid/>
- Banuti, D. T. (2020). Pseudo-boiling and heat transfer deterioration while heating supercritical liquid rocket engine propellants. *Journal of Supercritical Fluids*, 165, 104895. <https://doi.org/10.1016/j.supflu.2020.104895>
- Zhu, B., Zhang, Q., Ma, L., & Shi, H. (2025). Analysis of heat transfer deterioration mechanism of supercritical fluid based on VOF two-phase method and pseudo-boiling theory. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 240, 126643. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2024.126643>
- Xiao, R., Zhang, P., Chen, L., & Hou, Y. (2023). Machine learning based prediction of heat transfer deterioration of supercritical fluid in upward vertical tubes. *Applied Thermal Engineering*, 228, 120477. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2023.120477>
- Gong, K., Zhang, Y., Cao, Y., Feng, Y., & Qin, J. (2024). Deep learning approach for predicting the flow field and heat transfer of supercritical hydrocarbon fuels. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 219, 124869. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2023.124869>
- Ko, S., Gil, Y., & Park, S. (2026). Development of RP-3 surrogate fuels via multi-objective genetic algorithm for regenerative cooling CFD with supercritical property fidelity. *Aerospace*, 13(4), 307. <https://doi.org/10.3390/aerospace13040307>
- Zhang, H., Gou, J., Yin, P., Su, X., & Yuan, X. (2023). Film-cooling hole optimization and experimental validation considering the lateral pressure gradient. *Frontiers in Mechanical Engineering*, 8, 973293. <https://doi.org/10.3389/fmech.2022.973293>
- Wang, Y., Wang, Z., Qian, S., Qiu, X., Shen, W., Zhang, X., Lyu, B., & Cui, J. (2024). Data-driven framework for prediction and optimization of gas turbine blade film cooling. *Physics of Fluids*, 36(3), 035160. <https://doi.org/10.1063/5.0186087>
- Yao, G., Li, D., Zhu, J., Tao, Z., & Qiu, L. (2024). Hybrid AI framework for the predictions of film cooling effectiveness distribution with various surface curvatures and compound angles. *Applied Thermal Engineering*, 257, 124147. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2024.124147>

- Navah, F., Lamarche-Gagnon, M.-E., & Ilinca, F. (2023). Thermofluid topology optimization for cooling channel design. arXiv:2302.04745. <https://arxiv.org/abs/2302.04745>
- Gao, C., Xu, W., Zhu, X., Cui, J., Luo, T., Wang, D., Sun, L., Ling, W., Li, X., & Zhou, W. (2025). Enhanced regenerative cooling performance with conformal TPMS channels. *Energy*, 322, 135530. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2025.135530>
- Fu, R., Miao, X., Gao, L., Duan, L., Xu, Y., Guo, M., Luo, P., & Hu, J. (2026). Numerical study of flow and heat-transfer enhancement in lattice-core regenerative cooling channels for liquid rocket engines. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 175, 111069. <https://doi.org/10.1016/j.icheatmasstransfer.2026.111069>
- Ebbs-Picken, T., Romero, D. A., Da Silva, C. M., & Amon, C. H. (2024). Deep encoder-decoder hierarchical convolutional neural networks for conjugate heat transfer surrogate modeling. *Applied Energy*, 372, 123723. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2024.123723>
- Lee, J., Shin, S., Choi, H., Lee, A., Park, B., & Lee, S. (2025). Extended multiphysics-informed neural network for conjugate heat transfer problems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 246, 127098. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2025.127098>
- Lee, S., Yoon, Y., & Song, S. J. (2025). Deep learning-based identification of turbopump inducer cavitation instability using high-speed camera images. *AIAA SciTech 2025 Forum*. <https://doi.org/10.2514/6.2025-0760>
- Li, Z., Kovachki, N., Azizzadenesheli, K., Liu, B., Bhattacharya, K., Stuart, A., & Anandkumar, A. (2021). Fourier neural operator for parametric partial differential equations. *International Conference on Learning Representations*. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2010.08895>
- Raissi, M., Perdikaris, P., & Karniadakis, G. E. (2019). Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, 378, 686-707. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045>
- DLR Institute of Space Propulsion. (2026). Test facilities at Lampoldshausen and rocket propulsion research. DLR. <https://www.dlr.de/en/ra>

अध्याय 10. तरल रॉकेट इंजन (LRE) का रयिल-टाइम दोष नदिन, डिजिटल ट्वनि और सुदृढीकरण अधगिम आधारति प्रणोदन का रयिल-टाइम अनुकूल नयित्रण

प्रस्तावना

कार को लंबे समय तक चलाने पर चालक आवाज़ से उसकी हालत समझता है। इंजन से अनजानी आवाज़ आए तो वह मरम्मत केंद्र जाता है। डैशबोर्ड पर चेतावनी बत्ती जले तो वह गति कम करता है। मनुष्य इस तरह कई संकेतों को साथ देखकर नरिणय लेता है। रॉकेट इंजन भी ऐसा ही है। बस रॉकेट इंजन कार से कहीं अधिक तेज, गर्म और खतरनाक होता है।

तरल रॉकेट इंजन तरल ईंधन और तरल ऑक्सीकारक को जलाकर बड़ी शक्ति बिनाता है। यह इंजन कम समय में बहुत अधिक ताप और दबाव संभालता है। एक पुरजा थोड़ा भी चूक जाए तो पूरा तंत्र टूट सकता है। इसलिए इंजन चालू रहने के दौरान उसकी हालत को लगातार देखना ज़रूरी है। इंजन चलते समय इस तरह हालत देखने को रयिल-टाइम अवस्था नगिरानी कहते हैं।

यह अध्याय इस बात पर चर्चा करता है कि कृत्रिम बुद्धिमत्ता रॉकेट इंजन की नगिरानी और उसे नयित्त्रति कैसे करती है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता को अंग्रेज़ी में Artificial Intelligence, संक्षेप में AI लिखा जाता है। इसमें मुख्य रूप से चार बातें बताई गई हैं। पहला सेसर संकेतों से वसिगतियों को तेज़ी से खोजने वाला नदिन है। अगला डिजिटल ट्वनि (Digital Twin) है, जो इंजन के अदृश्य भीतरी हसिसे को कंप्यूटर से चित्रित करता है। एक और वषिय इंजन के पुराने होने या नरिमाण त्रुटियों के बावजूद उस अनश्चितता को मापने की वधि है। अंतमि वषिय कई वाल्वों को एक साथ नयित्त्रति करने वाला स्मार्ट नयित्त्रण है।

जब ये तकनीकें एक साथ जुड़ती हैं, तो इंजन अपनी सेहत खुद संभालता है। यह दशिा पुनः इस्तेमाल होने वाले रॉकेटों के युग में ज़रूरी है। एक इंजन को कई बार इस्तेमाल करने पर हर बार उसकी हालत थोड़ी बदलती है। मनुष्य के लिए हर बार हाथ से समायोजन करना कठिन है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता उस बदलाव को तेज़ी से पढ़कर जवाब देने वाला औज़ार है। अब इन तकनीकों के काम करने के सिद्धांत को एक-एक करके समझते हैं।

इस अध्याय को पढ़ने से पहले एक बात मन में रखनी चाहिए। कृत्रिम बुद्धिमत्ता जादू नहीं है। यह डेटा देखकर नियम खोजने वाला औज़ार है। डेटा खराब हो तो उत्तर भी खराब होता है। इसलिए यह अध्याय हर तकनीक के उपयोग के साथ उसकी सीमा भी बताता है। अपुष्ट प्रदर्शन ऑकड़ों का इस्तेमाल नहीं किया गया है। इसके बदले सिद्धांत को आसान ढंग से समझाने पर ध्यान दिया गया है। लक्ष्य यह है कि पाठक तकनीक की मूल संरचना समझे।

10.1 LRE रयिल-टाइम स्थिति नगिरानी की चुनौतियाँ

इस खंड में क्या है

यह खंड बताता है कि रॉकेट इंजन को रयिल-टाइम में देखना इतना कठिन क्यों है। पहले यह दिखाया गया है कि तरल रॉकेट इंजन का वातावरण कतिना कठोर है। फिर अब तक इस्तेमाल होती नगिरानी वधियों की सीमाएँ बताई गई हैं। अंत में बताया गया है कि कृत्रिम बुद्धिमत्ता आधारति नगिरानी क्यों ज़रूरी है।

यहाँ प्रयुक्त एक पद को पहले स्पष्ट कर लेते हैं। इस अध्याय में बार-बार आने वाला LRE तरल रॉकेट इंजन (Liquid Rocket Engine) का संक्षेपित रूप है। आगे इसे तरल रॉकेट इंजन या इंजन लिखा जाएगा। इस इंजन का व्यापक उपयोग अंतरिक्ष में भारी वस्तुओं को भेजने के लिए किया जाता है।

तरल रॉकेट इंजन कई पुरजों के साथ चलने वाली जटिल मशीन है। दहन कक्ष वह कमरा है जहाँ ईंधन और ऑक्सीकारक जलते हैं। इंजेक्टर वह पुरजा है जो ईंधन और ऑक्सीकारक को बारीक फुहार के रूप में छड़िककर मिलाता है। टर्बोपंप प्रणोदक को ऊँचे दबाव से धकेलने वाला पंप है। वाल्व प्रणोदक के प्रवाह को खोलते और बंद करते हैं। शीतलन मार्ग दीवार को पघिलने से बचाने के लिए ताप बाहर निकालते हैं। इन पुरजों को एक शरीर की तरह चलना होता है। तभी इंजन ठीक से चलता है।

समस्या यह है कि यह वातावरण बहुत कठोर है। दहन कक्ष के भीतर दबाव कई दर्जन वायुमंडल तक पहुँचता है। लौ का तापमान 3 हजार डिग्री से ऊपर जाता है। टर्बोपंप 1 मिनट में दसियों हजार बार घूमता है। ये मान रसोई के प्रेशर कुकर या कार इंजन से बिल्कुल अलग स्तर के हैं। छोटी कंपन भी बड़ी शक्ति में बदल जाती है। इसलिए इंजन हमेशा टूटने के जोखिम के साथ चलता है।

यह कठोर वातावरण सेंसरों के लिए भी कठिन है। सेंसर हालत पढ़ने वाली आँख है। लेकिन सेंसर गर्म स्थान के पास हो तो वह खुद खराब हो जाता है। कंपन तेज हो तो तार टूट भी सकता है। मानो धुंधली आँखों से इंजन देखना पड़ता है। इसलिए केवल एक सेंसर मान पर भरोसा करना कठिन है। कई सेंसरों को साथ देखकर छाँटना पड़ता है। एक सेंसर में गड़बड़ी हो तो दूसरे सेंसर से पुष्टि की जाती है।

संकेतों की मात्रा भी कम नहीं होती। घने अंतराल पर पढ़ने वाला एक सेंसर 1 सेकंड में दसियों हजार मान देता है। इंजन में ऐसे दसियों से सैकड़ों सेंसर लगे होते हैं। तब 1 सेकंड में लाखों मान निकलते हैं। मनुष्य इन सभी मानों को आँख से नहीं देख सकता। ऊपर से नरिणय मल्लिसेकंड के भीतर पूरा होना चाहिए। मल्लिसेकंड 1000वें हिस्से का 1 सेकंड है। आँख झपकने भर के समय में सैकड़ों बार नरिणय करना पड़ता है। इस गति और मात्रा को मशीन की मदद के बिना संभाला नहीं जा सकता।

एक उदाहरण से देखें कि इंजन की असामान्यता कतिनी जल्दी दुर्घटना में बदलती है। दहन कक्ष के भीतर दबाव नियमित रूप से बहुत हलना शुरू करता है। यह कंपन कुछ मल्लिसेकंड में कई गुना बढ़ी हो सकती है। बढ़ी हुई कंपन इंजेक्टर और दीवार पर चोट करती है। बार-बार चोट लगे तो धातु फटती है। फटी दरार से गर्म गैस रसिती है। यह प्रक्रिया आँख झपकते ही हो जाती है। इसलिए असामान्यता का पहला संकेत जतिना जल्दी हो सके पकड़ना चाहिए।

भूमिपरीक्षण और उड़ान की शर्तें अलग होती हैं। यह भी एक कठिनाई है। भूमिपरीक्षण में इंजन को मजबूती से बाँधा जाता है। अधिक सेंसर लगाए जा सकते हैं। समस्या आए तो उसे तुरंत बंद किया जा सकता है। उड़ान के दौरान स्थिति अलग होती है। भार के कारण बहुत सेंसर नहीं लगाए जा सकते। मनुष्य पास खड़े होकर देख भी नहीं सकता। इसलिए उड़ान इंजन को कम सेंसरों के आधार पर खुद नरिणय करना पड़ता है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता इस नरिणय में मदद करती है।

रॉकेट इंजन नदिन का लक्ष्य अन्य मशीन नदिन जैसा है। लेकिन उसकी स्थितियाँ कहीं अधिक कठोर हैं। समय कम है, डेटा कम है और जोखिम बड़ा है। इसलिए दूसरे कक्षों की वधियों को ज्यों का त्यों लाना कठिन है। वधिको रॉकेट के अनुरूप फरि से तराशना पड़ता है। इस अध्याय में बताई गई तकनीकें उसी सुधार का परिणाम हैं। यह काम आज भी जारी है।

भूमिपरीक्षण भी उतना ही जोखिम भरा है। इंजन को जमीन पर बाँधकर आग लगाने वाले परीक्षण को हॉट-फायर (hot-fire) परीक्षण कहते हैं। इस परीक्षण में इंजन वास्तविक जैसी शक्ति पैदा करता है। अंतरिक्ष में स्थिति और कठिन होती है। रॉकेट को फरि से उतरना हो तो इंजन को हवा में बंद करके फरि चालू करना पड़ता है। इस समय प्रणोदक टैंक के भीतर डोलता है। इस डोलने को स्लॉशिंग (sloshing) कहते हैं। वाल्व खुलने का समय भी थोड़ा-थोड़ा बदलता है। ऐसी तीखी कंपन पल भर में आती और चली जाती है। इसलिए उसे चूकना आसान है।

रॉकेट के फरि से उतरने का दृश्य सोचें तो बात आसानी से समझ आती है। प्रक्षेपण के समय इंजन सबसे अधिक शक्ति देता है। उतरते समय शक्ति बहुत कम करनी होती है ताकि वह धीरे से नीचे आए। इस प्रक्रिया में इंजन की शक्ति बड़े दायरे में ऊपर-नीचे होती है। प्रणोदक टैंक के भीतर का द्रव भी साथ डोलता है। वाल्व तेज़ी से खुलते और बंद होते हैं। तापमान और दबाव तेज़ी से बदलते हैं। इस छोटे और कठोर क्षण में असामान्यता पैदा होना आसान है। इसलिए इस क्षण को चूके बिना देखना होता है।

हवा में इंजन को फरि से चालू करना भी कठिन है। कक्षा में भी पृथ्वी का गुरुत्वाकर्षण अब भी बड़ा रहता है। लेकिन रॉकेट और प्रणोदक साथ-साथ मुक्त पतन करते हैं। इसलिए भार लगभग महसूस नहीं होता। इस अवस्था को सूक्ष्मगुरुत्व कहते हैं। सूक्ष्मगुरुत्व में द्रव टैंक के भीतर अपनी जगह पर नहीं रहता। इसलिए छोटे त्वरण या पृष्ठ तनाव से प्रणोदक को एक ओर इकट्ठा करना पड़ता है। इस प्रक्रिया के बिना इंजन चालू करें तो प्रवाह समान नहीं होता। दबाव और प्रवाह दर पल भर में उछलते हैं। ऐसी संक्रमण अवस्था में नदिन डगमगा सकता है। सामान्य अवस्था को गलती से असामान्य माना जा सकता है। इसलिए नदिन को इस संक्रमण अवस्था को सहना सीखना चाहिए।

अब तक इंजन नगिरानी में सीमा-मान वधि बहुत इस्तेमाल हुई है। किसी मान के पहले से तय रेखा से ऊपर जाते ही इंजन को तुरंत बंद कर दिया जाता है। इस रेखा को रेडलाइन (redline) कहा जाता है। उदाहरण के लिए दबाव तय मान से ऊपर जाए तो इंजन बंद किया जाता है। यह वधि समझने में आसान और तेज है। इसलिए लंबे समय से भरोसेमंद वधिके रूप में इस्तेमाल होती आई है।

रेडलाइन वधिघर के बजिली कटआउट जैसी है। बजिली बहुत अधिक इस्तेमाल की जाए तो कटआउट गरि जाता है। सीमा पार होने पर बिना शर्त काट देने की वधि है। यह वधि बड़े हादसे रोकने में अच्छी है। नरिणय सरल होता है, इसलिए तेज और स्पष्ट होता है। रॉकेट इंजन में भी ऐसा सुरक्षा बंद मूल व्यवस्था के रूप में रखा जाता है। मान खतरे की रेखा पार करे तो इंजन तुरंत बंद कर दिया जाता है।

लेकिन रेडलाइन वधिकमजोर असामान्य संकेतों को चूक सकती है। सेंसर संकेतों में हमेशा शोर मल्लि होता है। शोर बड़ा हो तो सब ठीक होने पर भी चेतावनी बजती है। इसे झूठी चेतावनी कहते हैं। झूठी चेतावनी बार-बार हो तो लोग चेतावनी पर भरोसा नहीं करते। उलटे इंजेक्टर की हल्की कंपन या सील की छोटी घिसावट सीमा-मान के भीतर छपि जाती है। ऐसे कमजोर संकेत बड़े होने तक अच्छी तरह नहीं दखिते। और बड़े होने के बाद कुछ करने के लिए देर हो चुकी होती है।

कृत्रिम बुद्धिमत्ता नदिन इसी खाली जगह को भरना चाहता है। मनुष्य केवल एक-दो मीटर देख सकता है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता सैकड़ों सेंसर संकेतों को एक साथ देखती है। यह कई संकेतों के आकार और संबंध को साथ देखती है। इसलिए मान सीमा रेखा पार करने से पहले असामान्यता

के संकेत पढ़े जा सकते हैं। 2026 में एक एयरोस्पेस पत्रिका में प्रकाशित एक समीक्षा लेख इस दशा को व्यवस्थित करता है। यह लेख बताता है कि रॉकेट इंजन नदिन में डेटा आधारित विधियाँ बहुत बढ़ी हैं। साथ ही यह भी बताता है कि वास्तविक खराबी का डेटा कम होना एक कठिनाई है।

सार यह है कि रॉकेट इंजन नगिरानी के सामने तीन दीवारें हैं। संकेत तेज और शोर भरे हैं। कमजोर असामान्यता देर से दखिती है। झूठी चेतावनी और चूक के बीच संतुलन भी बनाना पड़ता है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता इन तीनों दीवारों को साथ पार करने का प्रयास है। अगले खंड से उन विधियों को एक-एक करके ठोस रूप में देखते हैं।

कृत्रिम बुद्धिमत्ता नगिरानी रेडलाइन विधि को हटाती नहीं है। दोनों विधियाँ साथ इस्तेमाल होती हैं। रेडलाइन बड़े हादसे को रोकने वाली अंतिम रक्षा रेखा है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता उसके आगे कमजोर संकेत पहले से पढ़ती है। यह परत-दर-परत बनी सुरक्षा जाली की तरह है। बाहर की जाली जो छोड़ती है, भीतर की जाली उसे पकड़ती है। रॉकेट सुरक्षा कई विधियों को मिलाकर रखी जाती है। वह केवल एक विधि पर निर्भर नहीं करती।

10.2 कई सेंसरों को साथ देखकर असामान्यता जल्दी खोजना

इस खंड में क्या है

यह खंड इंजन सेंसर संकेतों में असामान्यता जल्दी खोजने वाली कृत्रिम बुद्धिमत्ता संरचना पर चर्चा करता है। पहले टेलीमेट्री शब्द और अति-उच्च आवृत्ति संकेत समझाए जाते हैं। फिर समय प्रवाह और चैनल संबंध को साथ देखने वाला न्यूरल नेटवर्क बताया जाता है। ऐसे न्यूरल नेटवर्क को टेम्पोरल कन्वोल्यूशन अटेंशन नेटवर्क (TCAN) कहा जाता है। यह संरचना रॉकेट के लिए विशेष रूप से सत्यापित मॉडल नहीं है, बल्कि कई क्षेत्रों में इस्तेमाल होने वाली विधि है। अंत में ऐसे नदिन की अब तक न पार हुई सीमाएँ भी देखी जाती हैं।

पहले शब्द समझते हैं। टेलीमेट्री (telemetry) दूर स्थिति उपकरण की अवस्था को संकेतों के रूप में भेजने और प्राप्त करने का काम है। इंजन में दबाव, कंपन, तापमान और प्रवाह दर मापने वाले सेंसर लगे होते हैं। इन सेंसरों के मान रियल-टाइम में कंप्यूटर में आते हैं। अति-उच्च आवृत्ति का अर्थ है कि इन संकेतों को बहुत छोटे अंतरालों पर पढ़ा जाता है। कुछ सेंसर 1 सेकंड में दसियों हजार से सैकड़ों हजार बार पढ़ते हैं। तेज कंपन पकड़ने के लिए इतना घना पठन जरूरी है।

दबाव मापने वाले सेंसर में पीजोइलेक्ट्रिक तत्व इस्तेमाल होता है। पीजोइलेक्ट्रिक तत्व दबने पर छोटी बजिली पैदा करने वाला पदार्थ है। दबाव तेज़ी से बदले तो विद्युत संकेत भी तेज़ी से बदलता है। इसलिए यह सेंसर तेज दबाव कंपन को अच्छी तरह पकड़ता है। एक्सेलेरोमीटर मापता है कि पुरजा कतिना काँपता है। इन दोनों सेंसरों को साथ इस्तेमाल करने पर दबाव और कंपन साथ देखे जाते हैं। यह इंजन की अवस्था को कई कोणों से पढ़ने जैसा है।

धीमी नगिरानी से तेज असामान्यता छूट जाती है। मान लें कि पुराने कैमरे से हम गिबर्ड के पंखों की गति खिंची जाती है। शटर धीमा हो तो पंख धुंधले होकर मलि जाते हैं। तेज शटर ही पंख के क्षण को पकड़ता है। सेंसर भी ऐसे ही हैं। पढ़ने का अंतराल बड़ा हो तो तेज कंपन गायब हो जाती है। इसलिए खतरनाक उच्च आवृत्ति कंपन देखने के लिए घना पठन चाहिए।

देखें कि इतनी तेज नगिरानी क्यों जरूरी है। रॉकेट इंजन की असामान्यता आँख झपकते ही बड़ी हो जाती है। इंजेक्टर के पास दबाव के नियमिति रूप से काँपने की घटना होती है। इसे चगिंग (chugging) कहा जाता है। यह कम आवृत्ति पर इंजन के डोलने की घटना है। गंभीर होने पर वाल्व और पाइप हलिकर टूट जाते हैं। ऐसी कंपन पल भर में बढ़ती है। मनुष्य के लिए आँख से देखकर जवाब देना बहुत धीमा है। इसलिए मशीन को मल्लिसेकंड स्तर पर नरिणय लेना पड़ता है।

एक पुरजे की असामान्यता दूसरे पुरजे के संकेत में पहले दिखाई दे सकती है। उदाहरण के लिए टर्बोपंप का शाफ्ट पहले काँपता है। वह कंपन थोड़ी देर बाद दहन कक्ष के दबाव में बदलाव बनती है। मनुष्य के लिए इस समय वलिंब और संबंध को एक नजर में देखना कठिनी है। न्यूरल नेटवर्क कई सेंसरों को एक साथ जोड़कर देखता है। इसलिए वह ऐसे समय वलिंब और चैनलों के बीच संबंध सीख सकता है।

यहाँ बताई गई संरचना दो विधियों को जोड़ती है। पहली है टेम्पोरल कन्वोल्यूशन। टेम्पोरल कन्वोल्यूशन संकेत के समय प्रवाह से आकृति निकालने की विधि है। यह छोटी खड़िकी से लंबी खड़िकी तक चौड़ाई बढ़ाते हुए लंबा प्रवाह देखती है। दूसरी है अटेंशन (attention)। अटेंशन वह विधि है जो तय करती है कि कई संकेतों में कहाँ अधिक ध्यान देना है। यह उस समय महत्वपूर्ण चैनल को अधिक भार देती है। इन दोनों विधियों को जोड़ने पर छोटी कंपन और चैनल संबंध साथ देखे जाते हैं। इस संयुक्त संरचना को टेम्पोरल कन्वोल्यूशन अटेंशन नेटवर्क (TCAN) कहा जाता है।

टेम्पोरल कन्वोल्यूशन द्वारा लंबे प्रवाह को देखने के तरीके को थोड़ा और वसितार से समझते हैं। कन्वोल्यूशन एक छोटी विडि के माध्यम से सगिंल को स्कैन करने की विधि है। यदि विडि संकीर्ण है, तो केवल एक संक्षिप्त क्षण ही दिखाई देता है। रॉकेट की वसिंगतियाँ कभी-कभी लंबी समयावधि में भी प्रकट होती हैं। इसलिए एक व्यापक समय सीमा को देखना आवश्यक होता है। इस समय उपयोग की जाने वाली विधि

वडि के अंतराल को बढ़ाना है। इसे वसितारति कन्वोल्यूशन (Dilated Convolution) कहा जाता है। यह एक-एक मान छोड़कर देखते हुए व्यापक समय को स्कैन करता है। यह वैसा ही सदिधांत है जैसे दो-दो सीढ़ियाँ एक साथ चढ़ने पर उतने ही कदमों में अधिक ऊँचाई तक पहुँच जाते हैं। ऐसा करने से कम गणना के साथ लंबे प्रवाह को देखा जा सकता है।

अटेंशन (Attention) द्वारा ध्यान केंद्रित करने के तरीके को भी एक उदाहरण से समझते हैं। एक शोरगुल वाली कक्षा में किसी मतिर की आवाज़ को चुनकर सुनने के दृश्य की कल्पना करें। कान कई ध्वनियों में से महत्वपूर्ण ध्वनि पर ध्यान केंद्रित करते हैं। अटेंशन भी यही काम करता है। यह उस चैनल को अधिक भार देता है जो इस समय वसिंगत को स्पष्ट रूप से दर्शा रहा हो। स्थितिबदलने पर भार भी बदल जाता है। इसलिए यह कई सेंसरों में से महत्वपूर्ण संकेतों को समय-समय पर चुनकर देखता है। टेम्पोरल कन्वोल्यूशन समय के प्रवाह को देखता है और अटेंशन चैनलों का चयन करता है।

यह संयोजन वर्धित हाल के शोध में व्यापक रूप से उपयोग की जाती है। 2025 के एक अध्ययन में अटेंशन युक्त टेम्पोरल कन्वोल्यूशनल न्यूरल नेटवर्क का प्रस्ताव दिया गया है। यह अध्ययन बताता है कि यह छोटी और लंबी दोनों निर्भरताओं को एक साथ पकड़ता है। उसी वर्ष का एक अन्य अध्ययन टेम्पोरल कन्वोल्यूशन और ग्राफ अटेंशन को जोड़ता है। यह कई सेंसरों को एक ग्राफ के रूप में देखता है और उनके संबंधों को एक साथ सीखता है। ये अध्ययन विशेष रूप से रॉकेट के लिए नहीं हैं। लेकिन वे कई सेंसरों में एक साथ वसिंगतियों का पता लगाने की समस्या के लिए बहुत उपयुक्त हैं। रॉकेट इंजन का नदिन भी उसी प्रकार की समस्या है जिसमें कई सेंसरों की वसिंगतियों को एक साथ खोजना होता है। जो बात सदिध हुई है वह यह है कि इस संरचना ने सामान्य समय-श्रृंखला डेटा में वसिंगतियों को अच्छी तरह से खोजा है। रॉकेट सेंसरों और खराबी के प्रकारों पर यह सीधे लागू होता है, इसका अभी कोई व्यावहारिक प्रमाण नहीं है। यह पुस्तक इस संरचना को रॉकेट नदिन में लागू करने की दशा का प्रस्ताव करती है।

रॉकेट क्षेत्र के अन्य अध्ययन भी इसी तरह की दशा दिखाते हैं। कई सेंसर सग्नलों को एक साथ पढ़ने वाले डीप लर्निंग नदिन में वृद्धि हो रही है। 2022 का एक अध्ययन व्याख्या योग्य लॉन्ग शॉर्ट-टर्म मेमोरी (LSTM) नेटवर्क का उपयोग करता है। यह न्यूरल नेटवर्क कई सेंसर डेटा का उपयोग करके इंजन की वसिंगतियों को वर्गीकृत करता है। 2024 का एक अध्ययन फीचर लर्निंग आधारित दोष पहचान से संबंधित है। ये सभी रुझान कई सग्नलों को मिलाकर वसिंगतियों का तुरंत पता लगाने के प्रयास हैं।

यह गणना कहाँ की जाती है, यह भी ऐसे नदिन में महत्वपूर्ण है। सग्नल को किसी दूर स्थिति कंप्यूटर पर भेजकर नर्णय लेने में समय लगता है। मल्लिसेकंड के भीतर उत्तर देने के लिए इंजन के पास ही गणना करनी होगी। उपकरण के ठीक पास इस प्रकार सीधे गणना करने की वर्धिति को एज कंप्यूटिंग (edge computing) कहा जाता है। न्यूरल नेटवर्क को एक छोटे समर्पित चिप में डालकर चलाया जाता है। सग्नल प्राप्त होते ही यह मौके पर ही नर्णय ले लेता है। तभी मल्लिसेकंड के भीतर खतरे को पहचाना जा सकता है। इसलिए, नैदानिक न्यूरल नेटवर्क छोटा और तेज़ होना चाहिए। बड़ा न्यूरल नेटवर्क सटीक होने पर भी यदधीमा हो, तो उसकी उपयोगिता कम हो जाती है।

नैदानिक मॉडल आमतौर पर तीन चरणों से गुजरता है। सबसे पहले, यह सेंसर सग्नलों को समान रूप से परिष्कृत करता है। इसे मानकीकरण कहा जाता है। ऐसा इसलिए है क्योंकि प्रत्येक सेंसर का परिमाण और इकाई अलग-अलग होती है। इसके बाद, यह एक छोटी समय-खड़की को काटकर मॉडल में इनपुट करता है। अंत में, यह स्थितियों को कई प्रकारों में वर्गीकृत करता है। यह तय करता है कि स्थिति सामान्य है, सेंसर की खराबी है, पंप की खराबी है, या दहन कंपन है। नैदानिक मॉडल इन तीन चरणों को बना रुके बहुत तेज़ गति से दोहराता है।

इस नदिन द्वारा पकड़ी जाने वाली वसिंगतियों के कई प्रकार हैं। इंजेक्टर के पास कम आवृत्त के कंपन के साथ गड़गड़ाने वाला चकगि (chugging) होता है। अधिक तेज़ कंपन के साथ गूँजने वाला उच्च-आवृत्त कंपन होता है। टर्बोपंप की सील घिस जाने से रसाव की समस्या होती है। बेयरिंग के घिसने से कंपन बढ़ने की समस्या भी होती है। प्रत्येक वसिंगति एक अलग सग्नल पैटर्न छोड़ती है। नैदानिक मॉडल इन पैटर्न के अंतर को सीखता है। यह देखता है कि कौन सा पैटर्न दिखाई दे रहा है और वसिंगति के प्रकार की पहचान करता है।

यहाँ एक बात पर ध्यान देना आवश्यक है। इस संरचना पर चर्चा करने वाले कुछ लेख सटीकता या वलिंबता जैसे आंकड़े प्रस्तुत करते हैं। लेकिन उन आंकड़ों की पुष्टि प्रकाशित शोध पत्रों से नहीं होती है। अपुष्ट आंकड़ों को तथ्य की तरह प्रस्तुत करने से पाठक गुमराह हो सकते हैं। इसलिए यह पुस्तक ऐसे आंकड़ों का उपयोग नहीं करती है। इसके बजाय, यह इस संरचना को केवल प्रारंभिक दोष नदिन के सदिधांत के रूप में समझाती है। मुख्य बात यह है कि कई सेंसरों को एक साथ देखकर वसिंगतियों को जल्दी पकड़ लिया जाता है।

वास्तविक इंजन में, नैदानिक परिणामों को संभालते समय खराबी के जोखिम स्तर को वर्गीकृत किया जाता है। दबाव के खतरे की सीमा को काफी पार कर जाने वाले घातक सग्नल के मामले में केवल एक सग्नल मल्लिने पर भी इंजन को तुरंत बंद कर दिया जाता है। ऐसे सग्नलों पर कई बार पुष्टि अनिवार्य करने से शटडाउन में देरी होगी और दुर्घटना बड़ी हो जाएगी। इसके विपरीत, हल्के संकेतों के मामले में तभी कार्रवाई की जाती है जब कई सग्नल एक ही वसिंगति की ओर इशारा करते हैं। यह किसी एक मॉडल के गलत नर्णय से पूरी तरह से ठीक चल रहे परीक्षण को खराब होने से बचाने के लिए है। इसलिए, नैदानिक आउटपुट का उपयोग सुरक्षा लॉजिक के साथ किया जाता है। मानव पर्यवेक्षण और नियम-आधारित सुरक्षा तंत्र एक साथ मौजूद होने चाहिए।

नैदानिक मॉडल पर भरोसा करने के लिए यह जानना आवश्यक है कि उसने ऐसा नरिणय क्यों लिया। न्यूरल नेटवर्क एक ऐसे डबिबे के समान है जिसके अंदर देखना मुश्किल होता है। यह उत्तर तो देता है लेकिन कारण नहीं बताता। रॉकेट जैसे खतरनाक वातावरण में कारण महत्वपूर्ण होता है। इसलिए, ऐसे अध्ययनों में वृद्धि हो रही है जो यह दिखाते हैं कि किस सेंसर ने नरिणय को प्रेरित किया। इसे व्याख्या योग्य नदिन कहा जाता है। मनुष्य उस कारण को देखकर तय करता है कि नदिन पर भरोसा किया जाए या नहीं। कारण ज्ञात होने पर ही कृत्रिम बुद्धिमत्ता का उपयोग सुरक्षा नरिणयों में किया जा सकता है।

एक और कठिनाई यह है कि डेटा बहुत कम है। रॉकेट इंजन का वास्तविक विफलता डेटा अत्यंत दुर्लभ है। ऐसा इसलिए है क्योंकि विफलता का सीधा अर्थ एक महंगी दुर्घटना है। इसलिए, सामान्य डेटा प्रचुर मात्रा में है और विफलता डेटा लगभग न के बराबर है। डेटा कम होने पर कृत्रिम बुद्धिमत्ता के लिए अच्छी तरह सीखना कठिन होता है। इसे हल करने के लिए शोधकर्ता कई तरीके अपनाते हैं। पहला तरीका भौतिक मॉडल के साथ विफलता की स्थितियों का अनुकरण करके कृत्रिम डेटा बनाना है। दूसरा तरीका परीक्षण मॉडल में पहले से निर्धारित खराबी को जानबूझकर डालना है। खराबी को इस तरह जानबूझकर डालने की प्रक्रिया को दोष अंतःक्षेपण (fault injection) कहा जाता है। कृत्रिम डेटा निर्माण और दोष अंतःक्षेपण के अर्थ अलग-अलग हैं। डेटा की कमी इस क्षेत्र में एक बड़ी चुनौती बनी हुई है।

एक इंजन से सीखी गई बातों को दूसरे इंजन में स्थानांतरित करने का भी एक तरीका है। इसे स्थानांतरण अधिगम कहा जाता है। यह वैसा ही है जैसे साइकिल चलाना जानने वाला व्यक्ति मोटरसाइकिल चलाना अधिक तेजी से सीखता है। यह पहले से सीखे गए ज्ञान को नई स्थिति में स्थानांतरित करके उपयोग करता है। इस प्रकार, नए इंजन का डेटा कम होने पर भी यह तेजी से सीख लेता है। 2026 के एक एयरोस्पेस जर्नल का समीक्षा पत्र भी इस कठिनाई की ओर इशारा करता है। वह यह है कि वास्तविक खराबी का डेटा कम है और खराबी के प्रकार बहुत अधिक हैं। यह शोधपत्र इन तीन व्यावहारिक समस्याओं पर ध्यान केंद्रित करते हुए नैदानिक शोध का सारांश प्रस्तुत करता है।

नदिन का उद्देश्य केवल दुर्घटनाओं को रोकना ही नहीं है। इसका उपयोग रखरखाव को उचित तरीके से करने के लिए भी किया जाता है। यदि कोई खराबी नहीं है, तो पुर्जों को बेवजह नहीं बदला जाता। यदि किसी वसिगतिके लक्षण दिखाई देते हैं, तो पहले से ही मरम्मत कर ली जाती है। स्थिति देखकर इस प्रकार रखरखाव करने की विधि को स्थिति-आधारित रखरखाव कहा जाता है। पुनः प्रयोज्य इंजन इस पद्धति से लागत बचाते हैं। नदिन सुरक्षा और लागत दोनों की एक साथ रक्षा करने वाला उपकरण है।

10.3 अदृश्य दहन कक्ष के अंदर का चित्रण करने वाला डिजिटल ट्वनि

यह खंड दहन कक्ष के अंदर होने वाले खतरनाक कंपनों पर चर्चा करता है। इस कंपन को दहन अस्थिरता कहा जाता है। सबसे पहले, यह समझाया गया है कि ध्वनि और ज्वाला एक-दूसरे की शक्त को कैसे बढ़ाते हैं। इसके बाद, कंप्यूटर द्वारा अदृश्य दबाव प्रवाह को पुनर्निर्मित करने की विधि पर विचार किया जाता है। यह विधि भौतिकी के समीकरणों का पालन करने वाले न्यूरल नेटवर्क का उपयोग करती है। अंत में, इस पद्धति की उपयोगिता और सीमाओं की समीक्षा की जाती है।

पहले शब्दावली को स्पष्ट करते हैं। दहन अस्थिरता वह घटना है जिसमें दहन कक्ष के अंदर दबाव में भारी कंपन होता है। जब ज्वाला और ध्वनि आपस में तालमेल बंठा लेते हैं, तो यह कंपन बढ़ जाता है। दबाव का एक छोटा सा कंपन ज्वाला से ऊष्मा उत्सर्जन को विचलित करता है। विचलित ज्वाला फिर से दबाव के कंपन को बढ़ा देती है। जब यह फीडबैक दोहराया जाता है, तो कंपन बर्फ के गोले की तरह बढ़ता जाता है। गंभीर मामलों में, दहन कक्ष की दीवारें और इंजेक्टर नष्ट हो जाते हैं। रॉकेट के इतिहास में यह घटना एक पुरानी और बड़ी समस्या रही है।

रॉकेट विकास के शुरुआती दिनों से ही यह कंपन एक बड़ी समस्या थी। चंद्रमा पर इंसानों को भेजने वाले विशाल इंजनों को भी इस समस्या से काफी जूझना पड़ा था। दहन कक्ष के भीतर दबाव तीव्रता से गूंजता था और इंजन को नष्ट कर देता था। शोधकर्ताओं ने इंजेक्टर के आकार को कई बार बदलकर इसे नियंत्रित किया। दहन कंपन से निपटना इतना जटिल है। आज भी, जब भी कोई नया इंजन बनाया जाता है, इस समस्या की पुष्टि की जाती है।

कंपन के कई रूप होते हैं। मान लें कि दहन कक्ष एक बेलन है। ध्वनि बेलन की लंबाई की दशा में गूंज सकती है। यह पराधिके चारों ओर घूमते हुए भी गूंज सकती है। यह व्यास के आर-पार भी गूंज सकती है। प्रत्येक रूप की आवृत्ति अलग होती है। यदि यह पता हो कि कौन सा रूप विकसित हो रहा है, तो प्रतिक्रिया देना आसान हो जाता है। इसलिए कंपन के रूप और उसकी तीव्रता को जानना महत्वपूर्ण है।

इस फीडबैक को समझने वाला एक पुराना सिद्धांत है। जिस क्षण दबाव बढ़ता है, यदि उस समय अधिक ऊष्मा निकलती है, तो कंपन बढ़ जाता है। इस सिद्धांत को रेले (Rayleigh) मानदंड कहा जाता है। झूले को धक्का देने के दृश्य की कल्पना करना आसान है। जब झूला आगे जा रहा हो और उसे धक्का दिया जाए, तो वह और ऊंचा जाता है। विपरीत क्षण में धक्का देने पर झूला रुक जाता है। ज्वाला और ध्वनि भी इसी सिद्धांत से एक-दूसरे को बढ़ाते हैं या शांत करते हैं। वे किस समय बल का आदान-प्रदान करते हैं, यही स्थिरता और अस्थिरता को निर्धारित करता है।

यह फीडबैक एक ट्यूनिंग फोर्क और माइक्रोफोन के संबंध जैसा भी है। सभागार में जब माइक्रोफोन को स्पीकर के पास ले जाया जाता है, तो एक तीखी आवाज़ आती है। ऐसा इसलिए होता है क्योंकि स्पीकर की आवाज़ माइक्रोफोन में जाती है और फिर से बढ़ जाती है। यह फीडबैक

ध्वनिको बहुत तेजी से बढ़ा कर देता है। दहन कक्ष में ज्वाला स्पीकर है और ध्वनि माइक्रोफोन के समान है। यदि दोनों का चरण मेल खा जाए, तो ध्वनि बिकाबू होकर बढ़ जाती है। इसलिए, इस फीडबैक को तोड़ने वाले डिज़ाइन की आवश्यकता होती है।

समस्या यह है कि दहन कक्ष के अंदर सीधे देखना मुश्किल है। अंदर अत्यधिक गर्मी और उच्च दबाव होता है। सेंसरों को कहीं भी नहीं लगाया जा सकता। केवल दीवार पर कुछ ही स्थानों पर दबाव सेंसर लगाए जाते हैं। लेकिन खतरनाक कंपन पूरे दहन कक्ष में होता है। दीवार के केवल कुछ बिंदुओं से पूरी स्थिति को समझना कठिन है। इसलिए कम अवलोकनों से पूरे परदृश्य का चित्रण करने की विधि की आवश्यकता है।

यहीं पर डिजिटल ट्वनि सामने आता है। डिजिटल ट्वनि एक कंप्यूटर मॉडल है जो वास्तविक उपकरण का हूबहू अनुसरण करता है। जब वास्तविक इंजन चलता है, तो मॉडल भी उसके साथ चलता है। यह सेंसर मान प्राप्त करता है और मॉडल को लगातार वास्तविकता के साथ संरेखित करता रहता है। ऐसा करने से उन स्थानों की स्थिति का भी अनुमान लगाया जा सकता है जहाँ सेंसर नहीं है। इसका नाम इसलिए पड़ा क्योंकि यह जुड़वाँ की तरह वास्तविकता के समानांतर चलने वाला मॉडल है।

डिजिटल ट्वनि में कार नेविगेशन के समान कुछ समानताएं हैं। नेविगेशन वास्तविक सड़क स्थितियों को प्राप्त करता है और मार्ग को फिर से तैयार करता है। डिजिटल ट्वनि भी वास्तविक इंजन से सिग्नल प्राप्त करता है और स्थिति को फिर से चित्रित करता है। अंतर गति और सटीकता में है। रॉकेट ट्वनि को हर मल्लिसेकंड में स्थिति का मलिन करना होता है। तभी यह तेज़ कंपन के साथ तालमेल बनाए रख सकता है। यह गति प्राप्त करने के लिए मॉडल को हल्का बनाना होगा।

दीवार पर लगे कुछ सेंसरों से अंदर की स्थिति का पता लगाना उल्टी दशा में हल करने वाली समस्या है। आमतौर पर, कारण को जानकर परिणाम ज्ञात किया जाता है। यहाँ, केवल परिणाम यानी दीवार के दबाव की जानकारी होती है। उस परिणाम से कारण यानी आंतरिक दबाव क्षेत्र का पता लगाया जाता है। इस प्रकार परिणाम से कारण खोजने की समस्या को व्युत्क्रम समस्या कहा जाता है। व्युत्क्रम समस्या इसलिए जटिल होती है क्योंकि इसके कई उत्तर हो सकते हैं। भौतिकी समीकरण इन कई उत्तरों में से केवल उन्हीं उत्तरों को बनाए रखते हैं जो भौतिकी के अनुकूल होते हैं।

इस डिजिटल ट्वनि के आंतरिक तंत्र को पूरा करने की विधि भौतिकी-आधारित न्यूरल नेटवर्क है। इस न्यूरल नेटवर्क को भौतिकी-सूचित न्यूरल नेटवर्क (Physics-Informed Neural Network, PINN) कहा जाता है। आगे इसे भौतिकी न्यूरल नेटवर्क लिखा जाएगा। सामान्य न्यूरल नेटवर्क केवल डेटा देखकर सीखते हैं। भौतिकी न्यूरल नेटवर्क डेटा के साथ-साथ भौतिकी के समीकरणों का पालन करना भी सीखता है। प्रशिक्षण के दौरान समीकरणों का उल्लंघन करने पर पेनल्टी दी जाती है। इसलिए डेटा कम होने पर भी यह भौतिकी के अनुरूप उत्तर देता है।

आइए भौतिकी न्यूरल नेटवर्क के सीखने के तरीके को थोड़ा और करीब से देखें। साधारण न्यूरल नेटवर्क केवल सही उत्तर के साथ अंतर को कम करता है। भौतिकी न्यूरल नेटवर्क दो चीज़ों को एक साथ कम करता है। पहला सेंसर मान के साथ अंतर है। दूसरा भौतिकी समीकरणों के उल्लंघन की मात्रा है। यह दोनों डंडों को एक साथ कम करना सीखता है। इस प्रकार, जिन स्थानों पर सेंसर नहीं है, वहाँ भी उत्तर भौतिकी के नियमों का पालन करता है। यह ऐसा है मानो भौतिकी के नियम डेटा के खाली स्थानों को भर रहे हों। यह कलरिग बुक में रेखाचित्र द्वारा रंगों का मार्गदर्शन करने जैसा है।

यह विधि एक कफायती निगरानी उपकरण बन सकती है। दहन कक्ष के अंदर की सटीक गणना करने के लिए बड़े कंप्यूटर को लंबे समय तक चलना पड़ता है। परीक्षण के दौरान इतना समय नहीं होता है। भौतिकी न्यूरल नेटवर्क एक बार सीख लेने के बाद तेज़ी से उत्तर देता है। इसलिए, परीक्षण जारी रहने के दौरान भी आंतरिक स्थिति का चित्रण किया जा सकता है। इस त्वरित चित्रण से खतरनाक कंपन के संकेतों पर नज़र रखी जाती है। यह परीक्षण को रोके बिना अंदर झाँकने जैसा है।

दहन कक्ष में ध्वनिकी प्रतारूप का वर्णन करने वाला समीकरण हेल्महोल्टज़ (Helmholtz) समीकरण है। यह समीकरण बताता है कि किसी बंद स्थान के अंदर ध्वनि किस रूप में गूँजती है। यह सुषरि वाद्ययंत्र के अंदर किसी विशेष स्वर के अच्छी तरह गूँजने के सिद्धांत के समान है। भौतिकी न्यूरल नेटवर्क इस समीकरण और सीमा शर्तों का पालन करते हुए सीखता है। यह दीवार पर लगे कुछ सेंसर मानों को इनपुट के रूप में लेता है। फिर यह पूरे दहन कक्ष के दबाव प्रवाह को पुनर्निर्मित करता है। यह एक चित्र की तरह दिखाता है कि कंपन किस स्थान पर तीव्रता से उत्पन्न हो रहा है।

दहन कक्ष में ध्वनि इस बात पर निर्भर करती है कि वह सीमाओं पर कैसी प्रतिक्रिया करती है। इंजेक्टर का चेहरा और नोजल का गला ध्वनिकी को कुछ हद तक परावर्तित करते हैं और कुछ हद तक अवशोषित करते हैं। परावर्तन और अवशोषण की इस सीमा को ध्वनिकी सीमा स्थितियाँ कहा जाता है। भौतिकी न्यूरल नेटवर्क इन सीमा स्थितियों का भी पालन करते हुए सीखता है। केवल तभी यह खाली कमरे की ध्वनिकी के बजाय वास्तविक दहन कक्ष की ध्वनिकी चित्रण करता है। पहले देखा गया रेल मानदंड और ये सीमा स्थितियाँ रॉकेट दहन अस्थिरता को निर्धारित करती हैं।

यह दशिया हाल के शोध में सक्रिय है। भौतिकी न्यूरल नेटवर्क कम अवलोकनों से ध्वनिके दबाव क्षेत्र को पुनर्निर्मित करने में मजबूत है। इसका कारण यह है कि दबाव केवल कुछ स्थानों पर मापा जाता है, और वेग लगभग मापा नहीं जा पाता। 2024 के एक अध्ययन ने भौतिकी न्यूरल नेटवर्क से दहनकक्ष की ऊष्मा-ध्वनिकी अंतःक्रिया को सीखा। ऊष्मा-ध्वनिकी उस घटना को कहते हैं जिसमें ऊष्मा और ध्वनि आपस में जुड़ती है। इस अध्ययन ने दबाव क्षेत्रों और ऊष्मा-उत्सर्जन युग्मन जैसे मानों को डेटा से खोजा। 2026 के एक अध्ययन ने क्षेत्र को भागों में बाँटकर हल करने वाले भौतिकी न्यूरल नेटवर्क से दहनकक्ष की दीवार के ध्वनिकी अवशोषण गुणों का अनुमान लगाया। ये अध्ययन सामान्य दहनकक्षों की ऊष्मा-ध्वनिकी सीख और सीमा गुणों के अनुमान से जुड़े हैं। वास्तविक तरल रॉकेट दहनकक्ष में कम सेसरो से पूरे दबाव क्षेत्र को वास्तविक समय में पुनर्निर्मित करने का प्रमाण अभी नहीं है। यह पुस्तक ऐसे वास्तविक समय पुनर्निर्माण को आगे बढ़ने की दशिया के रूप में प्रस्तावित करती है।

भौतिकी न्यूरल नेटवर्क का उपयोग एयरोस्पेस प्रणोदन में स्वच्छ दहन अनुसंधान में भी होता है। 2026 का एक शोधपत्र इस प्रवाह को टिकाऊ प्रणोदन का मार्ग मानता है। यह भौतिकी समीकरणों और डेटा को जोड़कर दहन को अधिक सटीक रूप से चित्रित करता है। ऐसा शोध केवल रॉकेट तक सीमित नहीं है, बल्कि विमान इंजनों तक भी फैलता है। भौतिकी का पालन करने वाले न्यूरल नेटवर्क का विचार कई क्षेत्रों में फैल रहा है।

डजिटल ट्वनि का उपयोग विमान इंजन रखरखाव में पहले से किया जा रहा है। एक बड़े विमान इंजन ने डजिटल ट्वनि से कई असामान्यताओं को पहले ही पकड़ा। बताया गया कि उसने टरबाइन ब्लेड के घिसाव और दहन समस्याओं की भविष्यवाणी की। यह उदाहरण दिखाता है कि नगिरानी मॉडल सचमुच उपयोगी हो सकता है। रॉकेट इंजन विमान इंजन से अधिक कठोर वातावरण में काम करता है और उसमें डेटा कम होता है। इसलिए इस दशिया को रॉकेट पर लागू करने के लिए अधिक सत्यापन की आवश्यकता है।

भौतिकी न्यूरल नेटवर्क की कमजोरियाँ भी हैं। समीकरणों को सीखने में शामिल करने से प्रशिक्षण कठिन हो जाता है। भौतिकी दंड और डेटा दंड के भार को ठीक से मिलाता पड़ता है। भार बगिड़ जाए तो उत्तर एक ओर झुक जाता है। दहन जतिना जटिल होता है, यह समायोजन उतना कठिन होता है। इसलिए भौतिकी न्यूरल नेटवर्क सर्वशक्तिमान नहीं है। समस्या के अनुसार समीकरण और संरचना चुननी पड़ती है। इस चयन में मानवीय ज्ञान अब भी आवश्यक है।

व्यापक रूप से देखें तो भौतिकी-आधारित मशीन लर्निंग दहन अनुसंधान के पूरे क्षेत्र में तेजी से बढ़ रही है। 2025 में प्रकाशित एक समीक्षा शोधपत्र ने इस प्रवाह को व्यवस्थित किया। यह शोधपत्र दहन रसायन, अभिक्रियाशील प्रवाह और अन्य कई समस्याओं में बाँटकर समझाता है। उसका मानना है कि यदि भौतिकी ज्ञान को सीखने में शामिल किया जाए तो कम डेटा होने पर भी उत्तर भौतिकी के अनुरूप रहता है। 2026 का एक अन्य समीक्षा शोधपत्र एयरोस्पेस प्रणोदन में अशांत दहन पर केंद्रित है। वह इसे भौतिकी की कठोरता और डेटा की शक्त को जोड़ना बताता है।

इस विधिकी लाभ यह है कि यह डेटा और भौतिकी को साथ में उपयोग करती है। सेसर कम हों तो केवल डेटा से खाली जगह भरना कठिन होता है। भौतिकी समीकरण उस खाली जगह को कम कर देते हैं। इसलिए कुछ सस्ते सेसरो से भी पूरी अवस्था का चित्र बनाया जा सकता है। नगिरानी के लिए इसे तेजी से चलाया जा सकता है, यह बात भी बहुत उपयोगी है।

सीमाएँ भी स्पष्ट हैं। लौ की अभिक्रिया और अशांत बिहुत जटिल होती है। हेलमहोल्ट्ज़ समीकरण ध्वनिकी सरल रूप में देखने वाला संक्षिप्त मॉडल है। यह वास्तविक दहन के सभी विवरण नहीं समेटता। इसलिए यह डजिटल ट्वनि तेज नगिरानी के लिए उपयोग किया जाता है। सटीक निर्णय को उच्च-निष्ठा विश्लेषण और वास्तविक परीक्षण से पूरक करना चाहिए। किसी विशेष आवृत्ति या दबाव आयाम जैसे सूक्ष्म संख्यात्मक मान प्रकाशित शोधपत्रों से पुष्टि नहीं किए गए हैं। इसलिए यह पुस्तक ऐसे संख्यात्मक मानों का उपयोग नहीं करती। इसके बजाय यह केवल यह सिद्धांत समझाती है कि यह विधि कैसे काम करती है और कहाँ उपयोगी है।

डजिटल ट्वनि को ठीक से चलाने के लिए उसे वास्तविकता से लगातार मिलाता पड़ता है। यदि मॉडल वास्तविकता से थोड़ा-थोड़ा अलग होने लगे तो चित्र बगिड़ जाता है। इसलिए सेसर मानों से मॉडल को लगातार सुधारा जाता है। यह सुधार देर से हो तो ट्वनि वास्तविकता को खो देता है। सुधार बहुत बार हो तो वह शोर तक का पीछा करने लगता है और डगमगाता है। इनके बीच संतुलन बनाना तकनीक का मुख्य बंदु है। अच्छा ट्वनि वास्तविकता को नहीं खोता, लेकिन शोर से भी प्रभावित नहीं होता।

दहन कंपन को पकड़ने का तरीका केवल नगिरानी नहीं है। कभी-कभी दीवार में ध्वनि सोखने वाली संरचना डाली जाती है। इस संरचना को ध्वनिकी अवशोषक उपकरण कहते हैं। इंजेक्टर व्यवस्था बदलकर प्रतपिष्ट को तोड़ा भी जाता है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता आधारित नगिरानी ऐसी डजिइन में सहायता करने वाला उपकरण है। यह पहले ही बताती है कि किन स्थितियों में कंपन बढ़ता है। डजिइन और नगिरानी साथ चले तभी कंपन को नियंत्रित किया जा सकता है।

10.4 इंजन के पुरानेपन और इकाईगत अंतर को मापने की वधि

यह खंड इंजन के पुराने होने या हर इकाई में भिन्न होने की समस्या से जुड़ा है। पहले यह समझाता है कि पुनः प्रयोज्य इंजन थोड़ा-थोड़ा क्यों बदलता है। फिर उस परिवर्तन की अनश्चितता मापने की वधि देखता है। यह वधि ऐसा न्यूरल नेटवर्क है जो उत्तर के साथ उत्तर की चौड़ाई भी देता है। अंत में यह बताता है कि यह अनश्चितता सुरक्षा के लिए क्यों महत्वपूर्ण है। पहले एक बात स्पष्ट करनी है। यहाँ दिए गए अध्ययन सामान्य मशीनों की आयु-पूर्वानुमान से जुड़े हैं। वे रॉकेट इंजन डेटा से सत्यापित नहीं हैं, और रॉकेट में उनका उपयोग भविष्य की संभावना है।

पुनः प्रयोज्य इंजन में एक ही इंजन को कई बार उपयोग किया जाता है। यह ऐसा है जैसे एक बार उपयोग करके फेंक दिए जाने वाले कागज के कप से कई बार उपयोग होने वाले चीनी मट्टी के कप की ओर जाना। यह तरीका अंतरिक्ष परिवहन की लागत को बहुत घटाता है। लेकिन हर उपयोग के साथ पुरजे थोड़ा-थोड़ा घसिते हैं। इंजेक्टर की सतह घसिती है। टरबाइन ब्लेड क्षरति होते हैं। शीतलन मार्ग ऊष्मीय थकान से बदलते हैं। समय के साथ प्रदर्शन बदलने की इस घटना को कालगत वृद्धावस्था कहा जाता है।

एक और चर निर्माण वचिलन है। एक ही ड्राइंग से बनाने पर भी वास्तविक माप थोड़ा-थोड़ा अलग होता है। हर पुरजे में सूक्ष्म त्रुटि होती है। इसी त्रुटि के कारण हर इंजन की प्रतिक्रिया अलग होती है। वृद्धावस्था और निर्माण वचिलन मलि जाएँ तो इंजन का अपना स्वभाव बन जाता है। एक ही वाल्व आदेश देने पर भी हर इंजन का परिणाम थोड़ा अलग होता है, इसलिए नियंत्रक को इस अंतर को जानना चाहिए।

यह परिवर्तन इंजन प्रदर्शन को सीधे प्रभावित करता है। घिसाव और क्षरण थ्रस्ट को धीरे-धीरे घटाते हैं। थ्रस्ट घटे तो रॉकेट का पथ बदल जाता है। दहन कतिना प्रभावी है, यह भी बदलता है। इस प्रभावशीलता को बताने वाला एक मान वशिषता निकास वेग है। यह मान घटे तो वही प्रणोदक कम बल देता है। इसलिए वृद्धावस्था और वचिलन को पहले से मापना महत्वपूर्ण है।

वशिषता निकास वेग शब्द को थोड़ा खोलकर समझते हैं। यह मान बताता है कि दहनकक्ष में दहन कतिना प्रभावी है। यह दहनकक्ष दबाव, नोज़ल गले के क्षेत्रफल और प्रणोदक के प्रवाह की मात्रा से तय होता है। यह नोज़ल से सचमुच निकलने वाले निकास वेग या नोज़ल दक्षता से अलग मान है। यह केवल यह मापने की कसौटी है कि दहन कतिना अच्छा हो रहा है। यह मान ऊँचा हो तो दहन प्रभावी है। कम हो तो प्रणोदक कम प्रभावी ढंग से जलता है। इंजेक्टर घसिते तो मशिर्ण बगिड़ता है और यह मान घटता है। इसलिए इस मान के परिवर्तन से इंजन के स्वास्थ्य का अनुमान लगाया जा सकता है।

इस परिवर्तन की तुलना लंबे समय तक पहने गए खेल-जूतों से की जा सकती है। नए खेल-जूतों का तला मजबूत होता है। लंबे समय तक पहनने पर तला घसित है और फसिलने लगता है। वही बल लगाकर दौड़ने पर भी गतिकिम होती है। इंजन भी उपयोग के साथ प्रदर्शन में थोड़ा-थोड़ा पीछे जाता है। समस्या यह है कि यह गरिवट हर इंजन में अलग होती है। कोई इंजन जल्दी घसित है और कोई धीरे-धीरे घसित है। इसलिए हर इंजन की स्थिति अलग से देखनी पड़ती है।

वृद्धावस्था को जानना सुरक्षित पुनः उपयोग की कुंजी है। स्थितिनि पता हो तो दो गलतियाँ होती हैं। अभी उपयोग योग्य इंजन को बहुत जल्दी फेंका जा सकता है। यह बर्बादी है। इसके उलट पहले से थके इंजन को ज़बरदस्ती उपयोग किया जा सकता है। यह दुर्घटना तक ले जाता है। स्थिति ठीक से पता हो तो इंजन को जतिना उपयोग करना है उतना किया जा सकता है और जोखिमि रेखा पार नहीं होती, इसलिए दोनों गलतियाँ साथ में टलती हैं।

यहाँ वैरिएशनल बायेसियन न्यूरल नेटवर्क का उपयोग किया जाता है। अंग्रेज़ी में इसे Variational बेज़ियन Neural Network कहा जाता है। आगे इसे बायेसियन न्यूरल नेटवर्क लिखा जाएगा। सामान्य न्यूरल नेटवर्क केवल एक ही उत्तर देता है। उदाहरण के लिए, यह केवल एक उत्तर देता है कि थ्रस्ट में कमी 3 प्रतिशत है। बायेसियन न्यूरल नेटवर्क उत्तर के साथ उसकी सीमा भी प्रदान करता है। यह थ्रस्ट में कमी 2 से 4 प्रतिशत के बीच होने की संभावना के रूप में उत्तर और वशिवास के स्तर को एक साथ बताता है।

बेज़ियन न्यूरल नेटवर्क चौड़ाई कैसे देता है, इसे सरल ढंग से देखें। मान लें कि केवल एक व्यक्ति से पूछने के बजाय कई लोगों से पूछा जाता है। कई उत्तर मलिते-जुलते हों तो वशिवास अधिक होता है। उत्तर अलग-अलग हों तो वशिवास कम होता है। बेज़ियन न्यूरल नेटवर्क ऐसे कई मतों को एक मॉडल के भीतर रखता है। इसलिए वह उत्तर का मध्य मान और फैली हुई चौड़ाई साथ में देता है। चौड़ाई कम हो तो इसका अर्थ है कि मॉडल आश्वस्त है, और चौड़ाई अधिक हो तो अर्थ है कि वह अभी ठीक से नहीं जानता।

अनश्चितता दो प्रकार की होती है। एक डेटा के अपने डगमगाने से आती है। यह सेंसर शोर जैसी ऐसी डगमगाहट है जिससे मटिया नहीं जा सकता। दूसरी मॉडल के कम सीखे होने से आती है। यह उन स्थितियों में बढ़ती है जनिहे मॉडल ने अनुभव नहीं किया। जब किसी नए प्रकार की वृद्धावस्था से पहली बार सामना होता है तो यह अनश्चितता बढ़ती है। दोनों प्रकार अलग कर देखें तो प्रतिक्रिया आसान होती है। तब यह तय किया जा सकता है कि डेटा और जुटाना है या परीक्षण और करना है।

बेज़ियन न्यूरल नेटवर्क सामान्य न्यूरल नेटवर्क से सीखने में कठिन होता है। इसका कारण यह है कि उसे एक उत्तर नहीं, बल्कि उत्तर का वतिरण सीखना पड़ता है। इस वतिरण को सही-सही निकालने के लिए बहुत गणना चाहिए। इसलिए शोधकर्ता अनुमान वधिका उपयोग करते

है। वे वतिरण को संभालने में आसान रूप में बदलकर सीखते हैं। इस वधिको वैरैशिनल इन्फरेंस कहा जाता है। नाम में वैरैशिनल इसी अनुमान से आया है। चूँकि अनुमान का उपयोग होता है, इसलिए परणाम को वास्तविक डेटा से अवश्य जाँचना चाहिए।

वृद्धावस्था का पूर्वानुमान केवल रॉकेट की समस्या नहीं है। वमिन इंजन, पवन टरबाइन और कारखाने की मशीनें भी यही चिंता रखती हैं। इसका कारण यह है कि ये सभी लंबे समय तक उपयोग होने वाली मशीनें हैं। इसलिए इस क्षेत्र के शोध एक-दूसरे से जुड़ते हैं। अन्य मशीनों में सफल वधिको रॉकेट में लाया जाता है। रॉकेट की कठिनी स्थितियों नई वधि भी पैदा करती है। इस तरह क्षेत्र एक-दूसरे से वधियाँ लेते-देते हैं तो तकनीक तेजी से बढ़ती है।

वशिवास के इस सूत्र को अनश्चितता कहा जाता है। अनश्चितता को जानना सुरक्षा के लिए महत्वपूर्ण है। जब मॉडल वशिवास के साथ उत्तर देता है और जब वह ठीक से नहीं जानता, दोनों स्थितियों को अलग तरह से संभालना चाहिए। मॉडल कहे कि वह नहीं जानता, तो मनुष्य अधिक सावधानी बरतता है। सुरक्षा मार्जिन अधिक रखा जाता है। अतिरिक्त परीक्षण से पुष्टि की जाती है। यह मौसम पूर्वानुमान में बारिश की संभावना बताने जैसा है। संभावना आधी-आधी हो तो छाता लिया जाता है और स्थिति देखी जाती है।

यह दशा कई क्षेत्रों में तेजी से बढ़ रही है। पुरजों के बचे हुए जीवन का पूर्वानुमान लगाने वाला शोध इसका प्रमुख उदाहरण है। बचे हुए जीवन को शेष उपयोगी जीवन कहा जाता है। 2024 के एक अध्ययन ने बेजियन न्यूरोल नेटवर्क से इस जीवन का पूर्वानुमान लगाया। उसने उत्तर को एक मान नहीं, बल्कि संभाव्यता वतिरण के रूप में दिया। 2025 के एक अध्ययन ने बेजियन आवर्ती न्यूरोल नेटवर्क से कई अनश्चितताओं को साथ में संभाला। ये अध्ययन रॉकेट-वशिष नहीं हैं। लेकिन पुरानी होती मशीन की स्थिति से जुड़ी समस्या समान है। रॉकेट इंजन की वृद्धावस्था का पूर्वानुमान लगाने में भी यही वचार उपयोग किया जा सकता है।

इस वधिको व्यापक रूप से जसि लक्ष्य पर परखा गया है, वह वमिन इंजन डेटा है। शोधकर्ता सार्वजनिक इंजन वृद्धावस्था डेटा से वधियों की तुलना करते हैं। वे एक ही डेटा पर कई वधियों की भवषियवाणी की तुलना करते हैं। इससे तय किया जा सकता है कि कौन-सी वधि बेहतर है। रॉकेट डेटा कम है, लेकिन ऐसे सार्वजनिक डेटा से आधार मजबूत किया जाता है। फरि मजबूत की गई वधिको रॉकेट डेटा पर ले जाकर जाँचा जाता है।

नयित्तरक यह अनश्चितता जानकारी लेकर नरिणय करता है। अनश्चितता अधिक हो तो वह रूढ़िवादी ढंग से संचालन करता है। थ्रस्ट थोड़ा कम रखा जाता है या अधिक मार्जिन छोड़ा जाता है। अनश्चितता कम हो तो प्रदर्शन अधिक निकाला जाता है। ऐसा करने से इंजन की स्थिति के अनुसार संचालन किया जा सकता है। यह सभी इंजनों को एक स्थिर नियम से संभालने की वधि से अधिक सुरक्षित है।

अनश्चितता जानकारी रखरखाव नरिणयों में भी उपयोग होती है। मॉडल वृद्धावस्था का वशिवास के साथ पूर्वानुमान लगाए तो योजना बनाना आसान होता है। मॉडल कहे कि वह ठीक से नहीं जानता, तो पुरजे खोलकर सीधे देखे जाते हैं। ऐसा करने से अंधा रखरखाव घटता है। स्थिति जानकर रखरखाव किया जाता है, इसलिए पुरजे बचते हैं। साथ ही जोखिमपूर्ण पुरजे छूटते नहीं हैं। अनश्चितता को जानना बचत और सुरक्षा दोनों की रक्षा करता है।

सीमाएँ भी हैं। कृत्रिम बुद्धिमत्ता कोई संभावना दे दे, इसका अर्थ यह नहीं कि वह संभावना अपने आप सही है। मॉडल गलत सीखे तो गलत वशिवास देता है। इसलिए उसे वास्तविक परीक्षण डेटा से सुधारना और सत्यापित करना चाहिए। यह जाँचने का काम है कि मॉडल की दी हुई अनश्चितता वास्तविक त्रुटि से मेल खाती है या नहीं। इस जाँच से न गुजरी संभावना पर वशिवास करना कठिन है। रॉकेट जैसी जोखिमपूर्ण जगहों में यह सत्यापन अधिक कठोर होना चाहिए। वसित वशिवास अंतराल जैसे संख्यात्मक मान प्रकाशित शोधपत्रों से पुष्टि नहीं किए गए हैं। इसलिए यह पुस्तक ऐसे संख्यात्मक मानों का उपयोग नहीं करती। इसके बजाय यह केवल अनश्चितता मापने के वचार का आधार समझाती है।

10.5 कई वाल्वों को एक साथ नयित्तरि करने वाला सुदृढीकरण अधगिम नयित्तरण (LUMEN, DLR P8.3)

यह खंड इंजन के कई वाल्वों को साथ में समायोजित करने वाले बुद्धिमिन नयित्तरण से जुड़ा है। पहले यह समझाता है कि सुदृढीकरण अधगिम क्या है। फरि देखता है कि रॉकेट इंजन नयित्तरण कठिनी क्यों है। इसके बाद जर्मनी के वास्तविक प्रयोग का उदाहरण प्रस्तुत करता है। अंत में यह बताता है कि इस तकनीक को उड़ान में उपयोग करने तक कौन-से कार्य शेष हैं।

सुदृढीकरण अधगिम प्रयास और त्रुटि से सीखने की एक वधि है। यह कसी बच्चे के चलना सीखने जैसा है। गरिने पर दंड और ठीक से चलने पर पुरस्कार मिलने जैसा समझा जा सकता है। अच्छे कार्यों के लिए पुरस्कार दिया जाता है और बुरे कार्यों के लिए दंड दिया जाता है। बार-बार प्रयास करके अधिकतम पुरस्कार प्राप्त करने का तरीका खोजा जाता है। इसमें न्यूरोल नेटवर्क को जोड़ने वाली वधिको गहन सुदृढीकरण अधगिम (Deep Reinforcement Learning, DRL) कहा जाता है। आगे इसे गहन सुदृढीकरण अधगिम लिखा जाएगा।

सुदृढीकरण अधगम में दो प्रवृत्तियाँ टकराती हैं। एक प्रवृत्ति पहले से ज्ञात अच्छे तरीके को अपनाने की होती है। दूसरी प्रवृत्ति नया तरीका आजमाने की होती है। यदि हमेशा केवल ज्ञात तरीका ही अपनाया जाए, तो बेहतर रास्ता नहीं मलि पाता। यदि हमेशा केवल नया ही किया जाए, तो जोखिम होता है और भटकाव होता है। इसलिए दोनों के बीच संतुलन चाहिए। इस संतुलन को नया खोजने की प्रवृत्ति और ज्ञात को अपनाने की प्रवृत्ति के बीच रस्साकशी के रूप में देखा जा सकता है। सीखने की शुरुआत में बहुत आजमाया जाता है और बाद में ज्ञात तरीके का अधिक प्रयोग होता है।

रॉकेट में यह परीक्षण और भूल असली इंजन से नहीं किया जा सकता। कारण यह है कि इंजन तोड़कर सीखा नहीं जा सकता। इसलिए पहले कंप्यूटर के भीतर बने मॉडल से सीखा जाता है। इस मॉडल को सम्युलेटर कहा जाता है। सम्युलेटर में हजारों बार गरिना भी ठीक है। खुलकर आजमाते हुए अच्छा नयित्रण खोजा जाता है। यह कई बार खेल खेलकर तरकीब सीखने जैसा है।

देखें कि रॉकेट इंजन नयित्रण कठिन क्यों है। इंजन के भीतर के मान एक-दूसरे से जुड़े रहते हैं। ऑक्सीकारक वाल्व खोलने पर दबाव बढ़ता है। दबाव बढ़ने पर टर्बोपंप का घूर्णन बदलता है। ईंधन और ऑक्सीकारक का अनुपात भी साथ बदलता है। इस अनुपात को मशिरण अनुपात कहा जाता है। एक मान को छूने पर दूसरे मान क्रम से साथ हलिते हैं। इसलिए केवल एक वाल्व को अलग से नयित्त्रति नहीं किया जा सकता। कई मानों को एक साथ संभालने वाला नयित्त्रण चाहिए।

उतरने वाले रॉकेट में यह नयित्त्रण और कठिन हो जाता है। रॉकेट को फरि नीचे आना हो, तो थ्रस्ट को बहुत कम करना पड़ता है। कभी-कभी इसे अधिकतम थ्रस्ट के एक तह्माई से भी नीचे लाया जाता है। थ्रस्ट को इतने बड़े दायरे में नयित्त्रति करने को डीप थ्रॉटलिंग (deep throttling) कहा जाता है। इसका अर्थ है गहराई तक कसना। इस समय भी मशिरण अनुपात को ठीक रखना पड़ता है। मशिरण अनुपात बगिड़ जाए, तो दहन खराब होता है और पुर्जे क्षतगिरस्त होते हैं। कई मानों को एक साथ, तेजी से और सुरक्षित ढंग से मलिना पड़ता है।

जर्मन एयरोस्पेस सेंटर वास्तविक इंजन के साथ इस समस्या पर शोध कर रहा है। जर्मन एयरोस्पेस सेंटर को संक्षेप में DLR कहा जाता है। DLR ने LUMEN नाम का एक प्रायोगिक इंजन बनाया। LUMEN तरल ऑक्सीजन और मीथेन का उपयोग करने वाला पंप-संचालित इंजन है। इसका थ्रस्ट 25 कलोन्यूटन श्रेणी का है। यह एक छोटे रॉकेट इंजन के बराबर आकार का है। यह इंजन पहली बार मार्च 2024 में P8.3 टेस्ट स्टैंड पर संचालित हुआ था। P8.3 DLR लैम्पोल्डशॉजेन (Lampoldshausen) में स्थित एक परीक्षण सुविधा है। LUMEN पुनः प्रयोज्य इंजन प्रौद्योगिकी के परीक्षण का एक मंच है। यह स्थिति निगरानी और स्मार्ट नयित्त्रण का एक साथ अध्ययन करता है।

LUMEN एक वशिष चक्र वधिका उपयोग करता है। इस वधिका को एक्सपैंडर ब्लीड कहा जाता है। इसमें शीतलन मार्ग में गरम हुए ईंधन के एक भाग से टर्बाइन घुमाई जाती है। इसकी संरचना तुलनात्मक रूप से सरल और सुरक्षित है। इसलिए यह कई तकनीकों को परखने के लिए उपयुक्त है। LUMEN उद्योग और शोध संस्थानों के लिए साझा खुला परीक्षण मंच है। नई नयित्त्रण वधिका असली इंजन पर लगाया जा सकता है।

P8.3 परीक्षण स्टैंड ने 2021 से संचालन शुरू किया। यह परीक्षण स्टैंड पहले की सुविधा को बढ़ाकर बनाया गया। पहले केवल दहन कक्ष का परीक्षण किया जा सकता था। P8.3 पूरे इंजन और टर्बोपंप तक का परीक्षण करता है। इसलिए नयित्त्रण वधिका वास्तविक स्थितियों में जांचा जा सकता है। LUMEN और P8.3 कृत्रिम बुद्धिमत्ता नयित्त्रण शोध का आधार बनते हैं।

DLR इस इंजन में कृत्रिम बुद्धिमत्ता नयित्त्रण जोड़ता है। DLR की आधिकारिक सामग्री बताती है कि शीतलन मार्ग में ऊष्मा हस्तांतरण को न्यूरल नेटवर्क से मॉडल किया जाता है। वह बताती है कि कृत्रिम बुद्धिमत्ता नयित्त्रण से थ्रस्ट मलिाया जाता है और दहन अस्थिरता की जांच की जाती है। 2025 में आई काइ ड्रेसिया (Kai Dresia) की डॉक्टरेट शोध-प्रबंध इस शोध को वसितार सेती है। यह शोध-प्रबंध गहन सुदृढीकरण अधगम से रॉकेट इंजन को नयित्त्रति करता है। इसके परिणामों की तुलना मौजूदा मॉडल पूर्वानुमान नयित्त्रण से की गई है। यह रिपोर्ट करता है कि कई मानों को एक साथ नयित्त्रति करते हुए लगभग 1.3 प्रतशित औसत त्रुटि मलिी। यह मान ड्रेसिया शोध-प्रबंध में प्रस्तुत परिणाम है। यह समिलेशन और परीक्षण स्टैंड शोध से निकला मान है, और पूरण इंजन के पूरे संचालन क्षेत्त्र को उड़ान में सिद्ध करने वाला मान नहीं है।

DLR ने पहले के शोध में न्यूरल नेटवर्क नयित्त्रण को वास्तविक परीक्षण पर लगाया। 2023 में LUMEN के टर्बोपंप परीक्षण में न्यूरल नेटवर्क नयित्त्रण की पुष्टि की गई। शीतलन मार्ग के ऊष्मा हस्तांतरण को न्यूरल नेटवर्क से मॉडल करने वाला शोध भी किया गया। 2024 में LUMEN के पुर्जा परीक्षण परिणाम और प्रगतप्रकाशति की गई। ऐसे शोध जुड़ते हुए वास्तविक इंजन नयित्त्रण तक पहुंचते हैं। यह एक बार की सफलता नहीं, बल्कि कई वर्षों का संचय है।

नयित्त्रक अवस्था और क्रिया को कसि ढांचे में संभालता है, इसे थोड़ा और देखें। नयित्त्रक हर क्षण अवस्था पढ़ता है और क्रिया निकालता है। वह क्रिया अगली अवस्था बनाती है। अगली अवस्था में फरि क्रिया निकाली जाती है। यह प्रक्रिया लगातार चलती रहती है। ऐसी समस्या, जिसमें अवस्था और क्रिया एक-दूसरे का पीछा करती है, क्रमिक नरिणय समस्या कहलाती है। सुदृढीकरण अधगम इस क्रमिक नरिणय को संभालने के लिए उपयुक्त है। यह एक बार के नरिणय को नहीं, बल्कि जुड़े हुए नरिणयों के प्रवाह को सीखता है।

देखे कि सुदृढीकरण अधगमि नयित्त्रक कैसे नरिणय करता है। नयित्त्रक पहले इंजन की अवस्था पढ़ता है। ये दहन कक्ष दबाव, वाल्व स्थिति, पंप घूर्णन और तापमान जैसे मान होते हैं। इन मानों को अवस्था कहा जाता है। नयित्त्रक अवस्था देखकर तय करता है कि वाल्व को कतिना हलाना है। इस गति को क्रिया कहा जाता है। क्रिया का परिणाम अच्छा हो, तो पुरस्कार मलित है, और खराब हो, तो दंड मलित है। लक्ष्य थ्रस्ट के नकिट होने पर पुरस्कार दिया जाता है। मशिर्ण अनुपात बगिड़ने या कंपन बढ़ने पर दंड दिया जाता है। इन पुरस्कार और दंड वाले नयिम को प्रतफिल फलन कहा जाता है। नयित्त्रक अधिक पुरस्कार पाने की दशिा में वाल्व संचालन को सुधारता है।

प्रतफिल फलन को ठीक बनाना नयित्त्रण की सफलता और वफिलता तय करता है। पुरस्कार और दंड के नयिमों में लक्ष्य ठीक वैसा ही आना चाहिए। यदि केवल थ्रस्ट पर पुरस्कार दिया जाए, तो नयित्त्रक कंपन को अनदेखा कर सकता है। इसलिए थ्रस्ट, मशिर्ण अनुपात और कंपन को साथ पुरस्कार-दंड में रखा जाता है। वाल्व को बहुत तेजी से हलाने पर भी दंड दिया जाता है। तेज संचालन पुर्जों पर दबाव डालता है। कई लक्ष्यों के भार को ठीक संतुलित करना पड़ता है। यह भार-संतुलन नयित्त्रण डिजाइन का मुख्य काम है।

उद्योग में भी पुनः प्रयोज्य इंजन के स्वचालित संचालन पर चर्चा है। एक अमेरिकी कंपनी का नया इंजन बार-बार पुनः उपयोग को लक्ष्य बनाता है। माना जाता है कि इस इंजन में पुर्जे घटाए गए हैं और इसे बनाना आसान किया गया है। कहा जाता है कि हीट शील्ड हटाकर भार और जटिलता घटाई गई है। ऐसे बदलाव इंजन को बार-बार उपयोग करने और जल्दी रखरखाव करने की दशिा दखिते हैं। पर यह किसी कंपनी के विकास का उदाहरण है। यह अकादमिकी रूप से सत्यापित प्रदर्शन मान नहीं है। यह पुस्तक ऐसे उदाहरण को केवल प्रवृत्ति के संदर्भ के रूप में रखती है।

इस वधि की ताकत इसमें है कि यह जुड़ी हुई समस्या को पूरे रूप में संभालती है। मनुष्य के लिए हर वाल्व के नयिम हाथ से बनाना कठिन है। मान एक-दूसरे से जुड़े होते हैं, इसलिए नयिम जटिल हो जाते हैं। सुदृढीकरण अधगमि जुड़े हुए संबंधों को डेटा से स्वयं सीखता है। यह कई मानों को साथ देखकर संतुलन बिंदु खोजता है। लेकिन एक बार सीखा नयित्त्रक अपने आप उस बूढ़ेपन के अनुसार नहीं ढलता, जिसका उसने अनुभव नहीं किया। इंजन के बदलाव का सामना करने के कई रास्ते हैं। पहले अवस्था पढ़कर उसे नयित्त्रण में शामिल करने का तरीका है। बदलाव होने पर भी न डगमगाने वाला मजबूत नयित्त्रण है। नए डेटा से नयित्त्रक को फिर सीखाने का तरीका भी है। संचालन के दौरान सीखने वाला ऑनलाइन अनुकूलन, अप्रमाणित नयित्त्रण बदलाव का नया जोखिम पैदा करता है। इसलिए कौन सा रास्ता अपनाना है, यह सुरक्षा देखकर तय किया जाता है।

सुदृढीकरण अधगमि नयित्त्रण की तुलना मौजूदा तरीकों से की जा सकती है। लंबे समय से इस्तेमाल होने वाली वधि मॉडल पूर्वानुमान नयित्त्रण है। यह वधि इंजन के समीकरण मॉडल से आगे का अनुमान लगाती है और वाल्व तय करती है। सटीक मॉडल हो, तो यह अच्छी तरह काम करती है। लेकिन इंजन पुराना हो जाए या मॉडल चूक जाए, तो प्रदर्शन घटता है। सुदृढीकरण अधगमि डेटा से सीधे सीखता है, इसलिए ऐसे बदलावों के प्रतलिचीला है। दोनों वधियों के अपने लाभ और सीमाएँ हैं। इसलिए शोधकर्ता दोनों की तुलना करते हैं और उन्हें मिलाकर उपयोग करते हैं।

देखे कि मशिर्ण अनुपात को ठीक रखना क्यों जरूरी है। ईंधन और ऑक्सीकारक का अनुपात ही मशिर्ण अनुपात है। लौ का तापमान आम तौर पर ईंधन और ऑक्सीकारक के ठीक अनुपात के पास सबसे अधिक होता है। इस अनुपात से हटने पर, चाहे ईंधन बचे या ऑक्सीकारक, तापमान घटता है। रॉकेट अक्सर जानबूझकर थोड़ा अधिक ईंधन डालकर चलाए जाते हैं। ऐसा दीवार से लगने वाली लौ का तापमान घटाकर दीवार बचाने के लिए किया जाता है। लेकिन ईंधन बहुत अधिक डालने पर बल घटता है। केरोसीन वर्ग के ईंधन में इस समय कालखि जमती है। हाइड्रोजन का उपयोग करने वाले इंजन में कालखि लगभग नहीं होती। इस तरह उपयुक्त मशिर्ण अनुपात हर प्रणोदक संयोजन के लिए अलग होता है। इसलिए थ्रस्ट बदलते समय भी मशिर्ण अनुपात बनाए रखना पड़ता है। यही कारण है कि कई मानों को साथ मलाने वाला नयित्त्रण चाहिए।

यहाँ संख्याओं को सावधानी से संभाला जाता है। तेज डीप थ्रॉटलिंग (deep throttling) समय, मशिर्ण अनुपात त्रुटि सीमा और कंपन कमी दर जैसे वसितृत प्रदर्शन मान प्रकाशित शोध-पत्रों से पुष्ट नहीं हुए हैं। अपुष्ट प्रदर्शन मान लिखने से तथ्य बढ़ा-चढ़ाकर दखिते हैं। इसलिए यह पुस्तक ऐसे आंकड़े उपयोग नहीं करती। पुष्ट मान कई चर नयित्त्रण की लगभग 1.3 प्रतशित औसत त्रुटि हैं। केवल इसी मान को आधार बनाया जाता है।

इस 1.3 प्रतशित औसत त्रुटि का अर्थ स्पष्ट कर ले। यह मान कई चर को एक साथ मलाने का परिणाम है। इसका अर्थ है कि एक नहीं, कई लक्ष्यों को साथ संभाला गया। हाथ से बनाए नयिमों से यह संतुलन पकड़ना कठिन है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता ने जुड़े हुए संबंध सीखे और संतुलन खोजा। पर यह मान एक विशेष शोध की सीमति स्थितियों से निकला परिणाम है। इसे हर इंजन पर जस का तस लागू नहीं किया जा सकता। स्थितियाँ बदले, तो फिर जांच करनी पड़ती है।

इस तकनीक को सीधे उड़ान इंजन में लगाने के लिए अभी रास्ता बाकी है। सुदृढीकरण अधगमि नयित्त्रक पहले समिलेशन में सीखता है। कंप्यूटर के भीतर गलती करने पर जोखिम नहीं होता। फिर हार्डवेयर जोड़कर परीक्षण किया जाता है। इस परीक्षण को हार्डवेयर-इन-द-लूप (hardware-in-the-loop) परीक्षण कहा जाता है। वास्तविक पुर्जों और न्यूरल नेटवर्क को साथ चलाकर देखा जाता है। इसके बाद जमीन पर दहन परीक्षण से सुरक्षा की पुष्टि की जाती है। इन सभी चरणों को पार करने के बाद ही उड़ान पर चर्चा होती है। कारण यह है कि रॉकेट प्रमाणीकरण बहुत कठोर होता है।

यहाँ एक बड़ी कठिनाई समियुलेटर और वास्तविकता का अंतर है। कंप्यूटर मॉडल वास्तविक इंजन जैसा बिल्कुल नहीं होता। मॉडल में अच्छी तरह सीखा नियंत्रण वास्तविकता में चूक सकता है। इस अंतर को समियुलेटर और वास्तविकता की खाई कहा जाता है। इस खाई को घटाने के लिए मॉडल को अधिक सटीक बनाना पड़ता है। वास्तविक परीक्षण डेटा से मॉडल को लगातार सुधारना पड़ता है। LUMEN जैसे परीक्षण मंच इस सुधार में उपयोग होते हैं। वास्तविक डेटा होने पर ही कृत्रिम बुद्धिमत्ता पर भरोसा किया जा सकता है।

एक और सदिधांत सुरक्षा उपायों को परतों में रखना है। सुदृढीकरण अधिगम नियंत्रक अजीब आदेश दे सकता है। ऐसे समय के लिए नियम-आधारित सुरक्षा उपाय साथ रखे जाते हैं। नियंत्रक का आदेश जोखिम सीमा पार करे, तो सुरक्षा उपाय उसे रोकता है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता प्रदर्शन बढ़ाती है और नियम न्यूनतम सुरक्षा बचाते हैं। ये दो परतें हों, तभी वास्तविक इंजन में कृत्रिम बुद्धिमत्ता लगाई जा सकती है।

वाल्वों की भी भौतिक सीमाएँ होती हैं। वाल्व निर्धारित गति से अधिक तेज नहीं खुल या बंद हो सकते। इस अधिकतम गति को वाल्व चलन गति सीमा कहा जाता है। यदि कृत्रिम बुद्धिमत्ता इस सीमा से अधिक तेज आदेश दे, तो पाइपिंग पर झटका आता है। तरल के अचानक रुककर पाइप पर चोट करने की घटना, जिसे जलाघात कहा जाता है, इसका उदाहरण है। इसलिए नियंत्रक के आदेश को वाल्व की संभव गतिके भीतर सीमित किया जाता है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता डगमगाए, तो तुरंत पारंपरिक नियंत्रक को सौंपने वाला सुरक्षा स्वचि भी रखा जाता है। पारंपरिक नियंत्रक लंबे समय से परखे गए नियमों से इंजन को सुरक्षित रखता है।

सुदृढीकरण अधिगम नियंत्रण का मूल्य पुनः उपयोग में साफ दखिता है। एक इंजन को कई बार उपयोग करने पर उसकी अवस्था हर बार बदलती है। स्थिर नियंत्रण नियम इस बदलाव के साथ नहीं चल पाते। सुदृढीकरण अधिगम नियंत्रक अवस्था पढ़ता है और उसके अनुसार वाल्व समायोजित करता है। पुराना इंजन पुरानेपन के अनुसार, और नया इंजन नएपन के अनुसार संभाला जाता है। यह लचीलापन पुनः प्रयोज्य रॉकेट की लागत घटाता है। इसलिए दुनिया की कई संस्थाएँ इस शोध पर ध्यान दे रही हैं।

लेकिन कृत्रिम बुद्धिमत्ता नियंत्रण अभी जमीन पर परीक्षण के चरण में है। यह वास्तविक उड़ान इंजनों में व्यापक रूप से इस्तेमाल नहीं होता। उड़ान प्रमाणीकरण लंबे परीक्षण और रिकॉर्ड मांगता है। यह सदिध करना पड़ता है कि नया नियंत्रण हर स्थिति में सुरक्षित है। इस सदिधि के लिए बहुत डेटा और समय चाहिए। इसलिए कृत्रिम बुद्धिमत्ता नियंत्रण अभी प्रयोगशाला और परीक्षण स्टैंड पर बढ़ रहा है। इसके परिणाम जमा होंगे, तो कभी उड़ान तक पहुंचेंगे।

10.6 नषिकर्ष और भावी दृष्टि

यह खंड देखता है कि ऊपर की चार तकनीकों कैसे एक में जुड़ती हैं। फिर यह संक्षेप में बताता है कि पुनः प्रयोज्य रॉकेट युग में यह जोड़ क्यों जरूरी है। अंत में कृत्रिम बुद्धिमत्ता इंजन प्रबंधन के लिए आवश्यक सुरक्षा सदिधांतों को देखता है।

तरल रॉकेट इंजन का बुद्धिमत्त संचालन चार तकनीकों को जोड़ता है। सेंसर नदिन कई संकेतों को साथ देखकर कमजोर लक्षणों को जल्दी पढ़ता है और शुरुआती असामान्यता खोजता है। डिजिटल ट्वनि भौतिक समीकरणों का पालन करने वाले न्यूरल नेटवर्क से भीतर के अदृश्य दबाव प्रवाह को पुनर्निर्मित करता है। बेज़ मॉडल बूढ़ेपन और वचिलन की अनश्चितता मापता है और उत्तर के साथ उत्तर की सीमा भी देता है। सुदृढीकरण अधिगम नियंत्रक कई वाल्वों को साथ नियंत्रित करते हुए जुड़े हुए मानों का संतुलन बढ़ि खोजता है।

ये चार तकनीकों एक-दूसरे को डेटा देती और लेती हैं। नदिन असामान्यता खोजे, तो नियंत्रक प्रतिक्रिया देता है। डिजिटल ट्वनि भीतर की अवस्था बताए, तो नदिन अधिक सटीक होता है। बेज़ मॉडल अनश्चितता बताए, तो नियंत्रक अधिक सावधानी बरतता है। इस तरह चारों तकनीकों एक चक्र में चलती हैं। यह ऐसी संरचना है, जिसमें इंजन स्वयं अपनी अवस्था देखता है और स्वयं समायोजित होता है। इस संरचना को स्वायत्त स्वास्थ्य प्रबंधन कहा जाता है।

ये चार तकनीकों एक-दूसरे की कमजोरियों को पूरा करती हैं। केवल नदिन से गड़बड़ी का सही कारण जानना कठिन होता है। जब डिजिटल ट्वनि भीतर की स्थिति दिखाता है, तो कारण साफ हो जाता है। केवल नियंत्रक से इंजन की पुरानी होती अवस्था का पता नहीं चलता। जब बेयज़ मॉडल अनश्चितता बताता है, तो नियंत्रण सुरक्षित हो जाता है। एक तकनीक की कमी दूसरी तकनीक पूरी करती है। इसलिए इन्हें अलग-अलग नहीं, बल्कि एक साथ जोड़ा जाता है। जब ये जुड़ती हैं, तभी स्वायत्त प्रबंधन पूरा होता है।

यह प्रवाह अभी तैयार उत्पाद नहीं है। इसका अधिकांश भाग शोध और परीक्षण के चरण में है। कई परिणाम ऐसे प्रारंभिक शोध भी हैं, जिनकी सहकर्मी समीक्षा नहीं हुई है। इसलिए उपलब्धियों को नरिणायक रूप से कहना अभी जल्दबाजी है। यह पुस्तक इस बात को साफ बताती है। अभी तकनीक की बुनियाद और दिशा समझने का चरण है। वास्तविक उड़ान इंजन में इसके व्यापक उपयोग तक अभी और समय चाहिए।

यह प्रवाह पुनः उपयोग योग्य रॉकेट के युग में आवश्यक है। एक इंजन को कई बार इस्तेमाल करने पर उसकी अवस्था हर बार बदलती है। केवल तय नियमों से सभी बदलावों को संभालना कठिन है। मनुष्य के लिए हर बार हाथ से मलिन करना कठिन है, क्योंकि मान बहुत तेजी से

बदलते हैं और आपस में जुड़े होते हैं। कृत्रिम बुद्धिमत्ता इन बदलावों को तेजी से पढ़ने और जवाब देने का उपकरण है। अंतरिक्ष परविहन की लागत घटानी है, तो यह स्वायत्त प्रबंधन होना चाहिए।

लेकिन कृत्रिम बुद्धिमत्ता नियंत्रण में सीमा लगाने वाले उपकरण अवश्य होने चाहिए। पहला है व्याख्येयता। मनुष्य को यह जान सकना चाहिए कि मॉडल ने वैसा नरिणय क्यों लिया। दूसरा है स्वतंत्र सत्यापन। मॉडल के नरिणय को दूसरे तरीके से फिर जांचना चाहिए। तीसरा है वफिलता होने पर सुरक्षति अवस्था में जाना। मॉडल डगमगाए, तब भी इंजन सुरक्षति रूप से रुक सकना चाहिए। इन तीन उपकरणों के बनिा इंजन को कृत्रिम बुद्धिमत्ता के भरोसे छोड़ना कठनि है।

कृत्रिम बुद्धिमत्ता इंजन पर मनुष्य की जगह भरोसा करने का उपकरण नहीं है। कृत्रिम बुद्धिमत्ता इंजन को और बारीकी से देखने का उपकरण है। मनुष्य कृत्रिम बुद्धिमत्ता की आंखों से इंजन को अधिक गहराई से समझता है। अंतमि नरिणय और जमिमेदारी अब भी मनुष्य के पास रहती है। इसी सदिधांत पर कृत्रिम बुद्धिमत्ता रॉकेट को अधिक सुरक्षति और सस्ता बनाती है।

सारांश

इस अध्याय के मूल बढि को फिर देखना चाहिए। तरल रॉकेट इंजन बहुत तेज, बहुत गर्म और खतरनाक मशीन है। इस इंजन को सुरक्षति रूप से इस्तेमाल करने के लिए वास्तवकि समय की नगिरानी और नियंत्रण चाहिए। पुराने सीमा-मान तरीके से कमजोर गड़बड़ियां छूट सकती हैं। कृत्रिम बुद्धिमत्ता कई सेंसरो को साथ देखकर यह कमी पूरी करती है। इसका उद्देश्य यह है किमान खतरे की रेखा पार करने से पहले कमजोर संकेत पढ़े जाएं।

प्रारंभकि नदिन समय के प्रवाह और चैनलों के संबंध को साथ देखता है। समय-संबंधी कॉन्वोल्यूशन और अटेंशन को मिलाने वाली संरचना इसका प्रतनिधि उदाहरण है। यह संरचना कई सेंसरो से गड़बड़ी जल्दी खोजती है। नरिणय इंजन के पास लगे छोटे चपि में मल्लिसेकंड के भीतर पूरा होना चाहिए। हालांकि रॉकेट-वशिष प्रदर्शन संख्याओं की पुष्टि अभी कठनि है। इसलिए यह पुस्तक इसे केवल सदिधांत के रूप में समझाती है। नदिन को मनुष्य की नगिरानी और नियम-आधारति सुरक्षा उपकरणों के साथ इस्तेमाल कयिा जाता है।

डजिटल ट्वनि अदृश्य दहन कक्ष के भीतर की तस्वीर बनाता है। यह भौतिकी समीकरणों का पालन करने वाले भौतिकी न्यूरल नेटवर्क का उपयोग करता है। दीवार पर लगे कुछ सेंसरो से पूरे दबाव प्रवाह को पुनर्नरिमिति करता है। दहन अस्थरिता की नगिरानी में इसका बड़ा उपयोग है। हालांकि यह जटलि लौ को पूरी तरह नहीं समेट सकता। इसे तेज नगिरानी के लिए इस्तेमाल कयिा जाता है और सटीक वशि्लेषण से पूरा कयिा जाता है। डजिटल ट्वनि को अपना काम करने के लिए वास्तवकि संकेतों से लगातार ठीक करना पड़ता है।

बेयज़ न्यूरल नेटवर्क पुरानी होती अवस्था और अंतर की अनश्चितता को मापता है। यह उत्तर के साथ उत्तर की चौड़ाई भी देता है। चौड़ाई संकरी हो तो इसका अर्थ है कि भरोसा अधिक है। चौड़ाई बड़ी हो तो इसका अर्थ है कि जानकारी कम है। यह जानकारी नियंत्रक को यह तय करने में मदद देती है कि उसे सावधानी बरतनी चाहिए या नहीं। इसका उपयोग यह तय करने में भी होता है कि रखरखाव कब करना है। हालांकि मॉडल की संभावना को वास्तवकि आंकड़ों से जांचना चाहिए।

सुदृढीकरण अधगिम नियंत्रक कई वाल्वों को साथ समायोजति करता है। जर्मनी का DLR, LUMEN इंजन और P8.3 परीक्षण मंच पर इसका अध्ययन करता है। सार्वजनकि सामग्री कई चर नियंत्रण में लगभग 1.3 प्रतशित औसत त्रुटि की रपिरेट करते हैं। कुछ वसितृत प्रदर्शन संख्याओं की पुष्टि किम है, इसलिए उनका उपयोग नहीं कयिा गया है। इस तकनीक को उड़ान में इस्तेमाल करने के लिए कई चरणों का सत्यापन अभी बाकी है।

इस अध्याय से गुजरने वाले एक सदिधांत को फिर देखना चाहिए। कृत्रिम बुद्धिमत्ता प्रदर्शन बढ़ाने का उपकरण है। लेकिन सुरक्षा नियम और मनुष्य संभालते हैं। वास्तवकि इंजन में कृत्रिम बुद्धिमत्ता लगाने के लिए ये दोनों परते साथ होनी चाहिए। अप्रमाणति संख्याओं पर भरोसा नहीं कयिा जाता। प्रारंभकि शोध और सत्यापति उपलब्धियों को अलग करके पढ़ना चाहिए। रॉकेट जैसी खतरनाक तकनीक से नपिटने का सही तरीका यही है।

जब ये चार तकनीके एक साथ जुड़ती हैं, तो इंजन अपने स्वास्थ्य का स्वयं ध्यान रखता है। चारों तकनीके एक-दूसरे को डेटा देती और लेती हैं तथा एक चक्र बनाती हैं। यह स्वायत्त प्रबंधन पुनः उपयोग योग्य रॉकेट युग की बुनियद है। क्योंकि एक इंजन को कई बार इस्तेमाल करने पर उसकी अवस्था हर बार बदलती है। लेकिन सुरक्षा के लिए व्याख्येयता, स्वतंत्र सत्यापन और सुरक्षति बदलाव उपकरण साथ होने चाहिए।

इस अध्याय में देखी गई तकनीके अलग-अलग प्रश्नों का उत्तर देती हैं। नदिन पूछता है कि अभी क्या गलत है। डजिटल ट्वनि पूछता है कि दिखाई न देने वाला भीतर कैसा है। बेयज़ मॉडल पूछता है कि इस नरिणय पर कतिना भरोसा कयिा जाए। नियंत्रक पूछता है कि इसलिए क्या करना चाहिए। जब ये चार प्रश्न मलिते हैं, तो इंजन की अवस्था और प्रतिक्रिया एक रूप में जुड़ती हैं। अच्छा कृत्रिम बुद्धिमत्ता इंजन प्रबंधन इन चार प्रश्नों को साथ संभालता है।

अंत में, इस अध्याय की सामग्री को देखने का दृष्टिकोण स्पष्ट किया जाता है। इस अध्याय में शामिल नवीनतम शोध का बड़ा भाग प्रारंभिक चरण में है। कई शोधपत्र सहकर्मी समीक्षा से पहले के प्रारंभिक अध्ययन हैं। कंपनियों के इंजन उदाहरण केवल औद्योगिक प्रवाह दिखाते हैं। उनका वजन शैक्षणिक रूप से सत्यापित उपलब्धियों से अलग है। इसलिए इस अध्याय ने सत्यापित मानों और सदिशान्तों को अधिक महत्व दिया। जनि संख्याओं की पुष्टि नहीं हो सकी, उन्हें हटाया गया। आशा है कि पाठक तकनीक की दृष्टि को सही ढंग से समझेंगे। कृत्रिम बुद्धिमत्ता रॉकेट को अधिक सुरक्षित और सस्ता बनाने वाली लंबी यात्रा का उपकरण है।

संबंधित आधार-सामग्री

- Yang, S., Wu, J., Xie, C., Zhong, Z., Cheng, Y., Wang, B., Liu, Y., & Lu, J. (2026). Data-Driven Intelligent Fault Diagnosis: A Review from the Perspectives of Three Practical Issues in Liquid Rocket Engines. *International Journal of Aeronautical and Space Sciences*, 27(4), 3438-3463. <https://doi.org/10.1007/s42405-026-01131-9>
- Wang, T., Ding, L., & Yu, H. (2022). Research and Development of Fault Diagnosis Methods for Liquid Rocket Engines. *Aerospace*, 9(9), 481. <https://doi.org/10.3390/aerospace9090481>
- Deng, L., Cheng, Y., & Shi, Y. (2022). Fault Detection and Diagnosis for Liquid Rocket Engines Based on Long Short-Term Memory and Generative Adversarial Networks. *Aerospace*, 9(8), 399. <https://doi.org/10.3390/aerospace9080399>
- Urgolo, A., Pill, I., Waxenegger-Wilfing, G., & Freiburger, M. (2024). Property Learning-Based Fault Detection for Liquid Propellant Rocket Engine Control Systems. *OASICS*, 125, 15:1-15:20. <https://doi.org/10.4230/OASICS.DX.2024.15>
- Waxenegger-Wilfing, G., Dresia, K., Deeken, J., & Oswald, M. (2021). Machine Learning Methods for the Design and Operation of Liquid Rocket Engines: Research Activities at the DLR Institute of Space Propulsion. *arXiv*. <https://arxiv.org/abs/2102.07109>
- NASA. (2009). Distributed Health Monitoring System for Reusable Liquid Rocket Engines. NASA Technical Reports Server. <https://ntrs.nasa.gov/api/citations/20090040299/downloads/20090040299.pdf>
- Wang, C., Liu, Q., Qu, L., Chang, W., Wang, T., Duan, P., & Cao, Y. (2025). Self-attention-enhanced Temporal Convolutional Networks for Anomaly Detection in Time Series. *Proceedings of the 2025 4th International Conference on Cryptography, Network Security and Communication Technology*. <https://doi.org/10.1145/3723890.3723911>
- Wang, D., Zhang, H., & Yu, Z. (2026). MST-MFGAT: An adaptive temporal convolution with feature graph attention network for time series anomaly detection. *Neurocomputing*, 664, 132134. <https://doi.org/10.1016/j.neucom.2025.132134>
- Harrje, D. T., & Reardon, F. H. (1972). Liquid Propellant Rocket Combustion Instability. NASA SP-194. <https://ntrs.nasa.gov/citations/19720026079>
- Culick, F. E. C. (2006). Unsteady Combustion in Liquid Rocket Engines: Dynamics, Instabilities, and Control. NATO RTO-EN-AVT-143.
- Raissi, M., Perdikaris, P., & Karniadakis, G. E. (2019). Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, 378, 686-707. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045>
- Mariappan, S., Nath, K., & Karniadakis, G. E. (2024). Learning thermoacoustic interactions in combustors using a physics-informed neural network. *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, 138, 109388. <https://doi.org/10.1016/j.engappai.2024.109388>
- Li, A., Du, J., & Liu, Y. (2026). Domain-decomposition physics-informed neural network approach for the acoustic boundary impedance estimation of a combustion chamber model. *Journal of Vibration and Control*. <https://doi.org/10.1177/10775463261433496>
- Wu, J., Wang, X., Zhang, G., Liu, J., Li, X., Zhang, Y., Zhang, H., Lyu, J., Wang, B., & Wu, Y. (2025). Physics-informed machine learning for combustion: A review. *arXiv*. <https://arxiv.org/abs/2509.03347>
- Mousavi, M., Caldwell, C., Baltes, J., Aljaseem, M., & Lee, B. J. (2025). Physics-Informed Neural Networks in Clean Combustion: A Pathway to Sustainable Aerospace Propulsion. *arXiv:2509.08094*. <https://arxiv.org/abs/2509.08094>
- Selvam D., C., Devarajan, Y., Raja, T., Tiwari, A., Sunil Kumar, M., Sharma, K., Agrawal, A. P., Khandual, A., & Mehar, K. (2026). Physics-Informed machine learning for turbulent combustion in aerospace propulsion: bridging physical rigour and data intelligence. *Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics*, 20, 2678066. <https://doi.org/10.1080/19942060.2026.2678066>
- Ochella, S., Dinmohammadi, F., & Shafiee, M. (2024). Bayesian neural networks for uncertainty quantification in remaining useful life prediction of systems with sensor monitoring. *Journal of Mechanical Engineering Science*. <https://doi.org/10.1177/16878132241239802>

- Chen, C., Wang, C., Guo, J., Cui, P., Zheng, J., & Liu, Z. (2025). Remaining useful life prediction considering multiple uncertainty information via Bayesian BiGRU-based method. *Reliability Engineering & System Safety*, 264, 111431. <https://doi.org/10.1016/j.ress.2025.111431>
- Dresia, K. (2025). Rocket Engine Control with Deep Reinforcement Learning. DLR-Forschungsbericht DLR-FB-2025-16. <https://doi.org/10.57676/bwbm-p528>
- Dresia, K., Adler, A., Saraf, A., Hahn, R., Kurudzija, E., Traudt, T., Deeken, J., & Waxenegger-Wilfing, G. (2023). Rocket Engine Control with Neural Networks: Experimental Results of the LUMEN Turbopump Test Campaign. *AIAA SciTech 2023 Forum*, AIAA 2023-0137. <https://doi.org/10.2514/6.2023-0137>
- Börner, M., Traudt, T., Dresia, K., Armbruster, W., Suslov, D., Groll, C., Hahn, R. D., Saraf, A. M., Deeken, J., Hardi, J., Oswald, M., & Schlechtriem, S. (2024). Component Test Results and Project Progress of the DLR Liquid Upper Stage Demonstrator Engine (LUMEN). *AIAA SciTech 2024 Forum*, AIAA 2024-1398. <https://doi.org/10.2514/6.2024-1398>
- DLR. (2026). LUMEN: AI-assisted reusable rocket engines. German Aerospace Center. <https://www.dlr.de/en/research-and-transfer/featured-topics/reusable-space-transportation/lumen>
- DLR. (2026). LUMEN, Liquid Upper Stage Demonstrator Engine. German Aerospace Center. <https://www.dlr.de/en/research-and-transfer/research-infrastructure/large-scale-research-facilities/lumen-en>
- DLR Institute of Space Propulsion. (2026). Test cell P8.3. German Aerospace Center. <https://www.dlr.de/en/ra/research-transfer/research-and-test-infrastructure/test-benches-for-space-propulsion/research-and-technology-test-bench-p8-1/test-cell-p8.3>

इस AI पुस्तकालय पुस्तक का समर्थन करें

यदि यह पुस्तक उपयोगी रही, तो आप PayPal के माध्यम से आगे के अनुवाद, सार्वजनिक संस्करण और खुली कृत्रिम बुद्धिमत्ता ज्ञान परियोजनाओं का समर्थन कर सकते हैं।

PayPal

<https://paypal.me/kimkjkj>



QR कोड स्कैन करें या ऊपर दिया गया लिंक खोलें।

अधिवक्ता कमि क्यूंगा-जनि