आयन किस रास्ते आसानी से गुजरेंगे? बैटरी सामग्री की खोज में ट्रांसफर लर्निंग

विज्ञान एवं प्रौद्योगिकी | शोध प्रकाशन: 2 फरवरी 2026 | मुख्य परीक्षा: सामान्य अध्ययन-तीन

खबरों में क्यों

भारतीय विज्ञान संस्थान से जुड़े शोधकर्ताओं ने ठोस पदार्थों में आयनों के एक स्थान से दूसरे स्थान तक जाने की ऊर्जा बाधा का अनुमान लगाने वाला मशीन लर्निंग मॉडल प्रस्तुत किया है। एनपीजे कम्प्यूटेशनल मटेरियल्स में प्रकाशित अध्ययन ग्राफ न्यूरल नेटवर्क और ट्रांसफर लर्निंग को जोड़ता है। पत्रिका और क्रॉसरेफ में इसकी ऑनलाइन प्रकाशन तारीख 2 फरवरी 2026 दर्ज है।

रेश्मा देवी, कीथ टी. बटलर और गोपालकृष्णन साई गौतम के अध्ययन का उद्देश्य संभावित बैटरी तथा अन्य विद्युत-रासायनिक सामग्रियों की शुरुआती छंटाई बेहतर करना है। यह नई बैटरी का सीधे निर्माण या किसी वाहन की चार्जिंग अवधि कम होने का प्रदर्शन नहीं है। मॉडल एक महत्वपूर्ण सामग्री गुण का अनुमान देता है, जिसे आगे गणना और प्रयोग से जांचना होगा।

बैटरी में आयनों की गति क्यों महत्वपूर्ण है?

रिचार्ज होने वाली बैटरी में आयन भीतर के रास्ते से चलते हैं, जबकि इलेक्ट्रॉन बाहरी परिपथ से होकर ऊर्जा के आदान-प्रदान में भाग लेते हैं। इलेक्ट्रोड और इलेक्ट्रोलाइट की संरचना आयनों की गति को प्रभावित करती है। यदि किसी जरूरी रास्ते पर आयन का गुजरना कठिन हो, तो सामग्री तेज चार्जिंग या डिस्चार्जिंग के लिए अनुपयुक्त हो सकती है।

फिर भी गति अकेला गुण नहीं है। उपयोगी बैटरी के लिए क्षमता, स्थिरता, सुरक्षा और चक्रों के बाद प्रदर्शन भी महत्वपूर्ण रहते हैं। ठोस इलेक्ट्रोलाइट में आयन आसानी से गुजरें, लेकिन इलेक्ट्रॉन का अनियंत्रित आंतरिक प्रवाह न हो, जैसी भूमिकाएं अलग हैं। इसलिए उच्च आयनिक गतिशीलता को सीधे पूरी बैटरी की अधिक ऊर्जा क्षमता या सुरक्षित होने के बराबर नहीं समझना चाहिए।

आयनिक प्रवासन बाधा क्या है?

क्रिस्टल के भीतर आयन एक स्थिर स्थान से दूसरे तक जाते समय ऊर्जा की एक बाधा पार करता है। इसी को आयनिक प्रवासन बाधा कहा जाता है। इसे रास्ते में आने वाली ऊर्जा-पहाड़ी की तरह समझ सकते हैं। एक ही पदार्थ में अलग दिशाओं या रास्तों की पहाड़ियों की ऊंचाई अलग हो सकती है, इसलिए केवल रासायनिक सूत्र जानना हमेशा पर्याप्त नहीं होता।

कई परिस्थितियों में यह बाधा आयन के प्रसरण पर घातांकीय प्रभाव डालती है। लेकिन मूल शोध स्पष्ट करता है कि ऐसा संबंध अनुभवजन्य है और किसी भी प्रणाली में विस्तृत तापमान सीमा पर अपने आप लागू होना निश्चित नहीं है। अन्य गुण, जैसे उपलब्ध रास्तों का जुड़ाव और आयनों की सांद्रता, भी भूमिका निभाते हैं। कम बाधा उपयोगी संकेत है, संपूर्ण प्रदर्शन का स्वतंत्र प्रमाण नहीं।

PCSMANTRA.COM

इस गुण की गणना कठिन क्यों है?

आयनिक प्रवासन को प्रयोग से समझने के लिए विशेष मापन, उपयुक्त नमूने और नियंत्रित परिस्थितियां चाहिए। दूसरी ओर प्रथम-सिद्धांत आधारित गणनाओं में आयन के शुरुआती और अंतिम स्थान के बीच न्यूनतम ऊर्जा वाले रास्ते की तलाश की जाती है। अध्ययन जिस संदर्भ डेटा का उपयोग करता है, वह घनत्व फलन सिद्धांत और नज्ड इलास्टिक बैंड गणनाओं से जुड़ा है।

ऐसी गणनाएं उपयोगी होते हुए भी समय और संगणकीय संसाधन मांग सकती हैं। बड़ी संख्या में संभावित संरचनाओं को जांचते समय यही कठिनाई सामग्री खोज की गति सीमित करती है। मशीन लर्निंग का प्रस्ताव महंगी गणना को हमेशा के लिए हटाना नहीं, बल्कि उन उम्मीदवारों को प्राथमिकता देना है जिन पर विस्तृत गणना या प्रयोग अधिक उपयोगी होगा। इस तरह मॉडल खोज की शुरुआती छलनी बन सकता है।

ट्रांसफर लर्निंग ने क्या बदला?

कम डेटा वाली समस्या में बिल्कुल शुरुआत से बड़ा मॉडल सिखाना कठिन होता है। ट्रांसफर लर्निंग में पहले किसी बड़े या संबंधित डेटा से सीखे मॉडल को नए लक्ष्य के लिए अनुकूलित किया जाता है। यहां आधार मॉडल सात अलग थोक सामग्री गुणों पर एक साथ पहले से प्रशिक्षित था। फिर उसे आयनिक प्रवासन बाधाओं के छोटे डेटा पर विशेष रूप से प्रशिक्षित किया गया।

ग्राफ न्यूरल नेटवर्क क्रिस्टल में परमाणुओं और उनके संबंधों को संरचनात्मक जाल की तरह प्रस्तुत करता है। शोध ने इस ढांचे को बदलकर आयन की गति की दिशा और संभावित रास्ते की जानकारी शामिल की। इससे मॉडल केवल सामान्य संरचना पहचानने के बजाय एक ही क्रिस्टल के अलग प्रवासन रास्तों को अलग समझने का प्रयास कर सकता है। पहले का ज्ञान मदद करता है, लेकिन नए लक्ष्य के लिए उचित इनपुट फिर भी जरूरी हैं।

डेटा और सबसे अच्छा मॉडल

मूल शोध में साहित्य से संकलित 619 अलग प्रवासन रास्तों की गणितीय बाधाओं का डेटा है। ये नए अध्ययन में सीधे मापे गए 619 प्रयोगात्मक परिणाम नहीं हैं। डेटा में विविध संरचनाएं और आयन शामिल हैं। मॉडल की संरचना के चार संशोधित रूपों की तुलना की गई। सबसे अच्छे परीक्षण परिणाम वाला तीसरा मॉडल शुरुआती और अंतिम विन्यास के बीच मध्यवर्ती संरचनाओं की श्रृंखला को इनपुट बनाता है।

यह श्रृंखला रास्ते की दिशा के साथ उसकी ज्यामिति की कुछ जानकारी भी देती है। शोध के अनुसार इसी विन्यास ने बिना पूर्व-प्रशिक्षण वाले ग्राफ मॉडल और अध्ययन में चुने पारंपरिक मशीन लर्निंग विकल्पों से बेहतर परिणाम दिए। इसे हर उपलब्ध कृत्रिम बुद्धिमत्ता मॉडल पर सार्वभौमिक जीत नहीं कहना चाहिए। तुलना संबंधित डेटा, चुने विकल्पों और परीक्षण व्यवस्था के भीतर है।

सटीकता के आंकड़े कैसे पढ़ें?

तीसरे मॉडल के परीक्षण परिणाम में निर्धारण गुणांक लगभग 0.703 और औसत निरपेक्ष त्रुटि लगभग 0.261 इलेक्ट्रॉनवोल्ट बताई गई है। ये अलग सांख्यिकीय माप हैं। निर्धारण गुणांक को '70.3 प्रतिशत अनुमान बिल्कुल सही' नहीं कहना चाहिए। औसत त्रुटि भी हर अनुमान के लिए निश्चित अधिकतम गलती नहीं होती; कुछ उम्मीदवारों पर गलती औसत से अधिक हो सकती है।

मॉडल ने चुनी गई बाधा-सीमा के आधार पर अच्छे आयनिक चालकों का वर्गीकरण लगभग 80 प्रतिशत सटीकता से किया। यहां अच्छी श्रेणी में 0.65 इलेक्ट्रॉनवोल्ट या उससे कम बाधा वाले उम्मीदवार रखे गए थे। यह 80 प्रतिशत अधिक चालकता, 80 प्रतिशत तेज चार्जिंग या हर नई सामग्री पर समान सफलता का दावा नहीं है। वर्गीकरण में सही पहचाने गए उम्मीदवार और छूट गए उम्मीदवार अलग जांच के विषय हैं।

परीक्षण की सीमाएं और डेटा की गुणवत्ता

PCSMANTRA.COM

अध्ययन में 559 डेटा बिंदु प्रशिक्षण और 60 परीक्षण के लिए थे। परीक्षण भाग में 21 संरचनात्मक समूह शामिल थे, जबकि प्रशिक्षण में 27 समूह थे। कम प्रतिनिधित्व वाले कुछ समूह परीक्षण से बाहर रखे गए। इसलिए विविधता होने पर भी इस परीक्षण को हर अनदेखे संरचना परिवार पर समान सामान्यीकरण का प्रमाण नहीं समझना चाहिए।

लेखक डेटा में अलग गणना विधियों से आने वाले शोर और स्थानीय संरचनात्मक जानकारी पकड़ने की सीमाएं स्वीकार करते हैं। मॉडल का प्रदर्शन अलग आयन संरचनाओं पर अपेक्षाकृत बेहतर सामान्यीकृत हुआ, लेकिन एक संरचना के अलग रास्तों पर चुनौतियां रहीं। सभी संदर्भ गणनाएं एक ही सैद्धांतिक स्तर पर नहीं थीं। अधिक डेटा, एकरूप गणना और बेहतर संरचनात्मक वर्णन आगे सुधार के साधन हो सकते हैं।

खुला कोड और सामग्री खोज में उपयोग

लेखकों का सार्वजनिक कोड भंडार प्रशिक्षित मॉडल तथा प्रशिक्षण और परीक्षण डेटा से जुड़े हिस्से उपलब्ध कराता है। मूल ग्राफ संरचना से संबंधित अलग कोड भी सार्वजनिक है। इससे अन्य शोधकर्ताओं को विधि जांचने, दोहराने और नए उम्मीदवारों पर उपयोग करने का आधार मिलता है। हालांकि कोड उपलब्ध होना अपने आप हर परिणाम की स्वतंत्र पुनरुत्पादकता या औद्योगिक प्रमाणन नहीं है।

नीतिगत दृष्टि से यह कम उपलब्ध वैज्ञानिक डेटा का अधिक उपयोग करने का उदाहरण है। बेहतर छंटाई से सीमित संगणकीय और प्रयोगशाला संसाधन उपयुक्त उम्मीदवारों पर लगाए जा सकते हैं। साथ ही डेटा की उत्पत्ति, प्रशिक्षण-परीक्षण विभाजन और अनिश्चितता स्पष्ट रखनी होगी। सामग्री खोज में मशीन लर्निंग का मूल्य तभी बढ़ता है जब उसके अनुमान भौतिक समझ और आगे के सत्यापन से जुड़े रहें।

आगे क्या देखना होगा?

अगले चरणों में नए संरचना परिवारों, अधिक समान गुणवत्ता वाले संदर्भ डेटा और स्वतंत्र प्रयोगों पर परीक्षण उपयोगी होगा। जिन उम्मीदवारों की बाधा कम बताई जाए, उनके लिए विस्तृत प्रवासन गणना और वास्तविक चालकता मापन करना चाहिए। अंतिम बैटरी में जांचते समय इलेक्ट्रोड, इलेक्ट्रोलाइट और उनकी आपसी सतहों का व्यवहार साथ देखना होगा। एक गुण की छंटाई से संपूर्ण उपकरण की विश्वसनीयता तय नहीं होती।

संतुलित निष्कर्ष है कि ट्रांसफर लर्निंग और दिशा-संवेदी ग्राफ मॉडल आयनिक प्रवासन बाधाओं के अनुमान को बेहतर बनाने की उपयोगी दिशा दिखाते हैं। यह तेज चार्जिंग की संभावना खोजने का औजार है, तैयार तेज-चार्ज बैटरी नहीं।

अभ्यास प्रश्न: डेटा की कमी वाली सामग्री विज्ञान समस्याओं में ट्रांसफर लर्निंग की भूमिका समझाइए। आयनिक प्रवासन बाधा के अनुमान और वास्तविक बैटरी प्रदर्शन के बीच अंतर का विवेचन कीजिए। (250 शब्द)

स्रोत: प्राथमिक शोध | लेखकों का कोड | भारतीय विज्ञान संस्थान | बैटरी की पृष्ठभूमि

PCSMANTRA.COM