

2022 年度  
創発的研究支援事業 年次報告書

研究担当者	義永 那津人
研究機関名	東北大学
所属部署名	材料科学高等研究所
役職名	准教授
研究課題名	ソフトマテリアルの構造形成プロセスを理解するための数理モデルとデータ科学の協奏
研究実施期間	2022 年 4 月 1 日～2023 年 3 月 31 日

#### 研究成果の概要

ソフトマテリアルの非平衡プロセスの数理モデルを推定するため理論構築の準備として、与えられた構造を再現するための数理モデルの推定を行った。ブロック共重合体のマイクロ相分離やコロイド結晶などの現象論モデルであるフェイズフィールドクリスタルモデルを一般化し、目的となる構造を再現するために必要な項やパラメーターの推定をベイズ推定の枠組みで行った。その結果、実験的にも最近観測されている準結晶構造やダブルジャイロイド構造を作るためのモデルを推定することに成功し、準結晶構造の構造形成メカニズムの理解を促進した。

また、材料における破壊進展の数理モデルを推定するための機械学習手法を開発した。この手法を用いて、亀裂の進展の様子から材料内の破壊強度の不均一性を推定することに成功した。この手法では、亀裂進展を記述するフェイズフィールドモデルと材料ひずみを記述する弾性方程式を用いて破壊強度に対するパラメーター推定を行っている。現状では、単純な線形弾性モデルを用いているが、より現実的なモデルに拡張するために検討を行っている。

さらに、非平衡プロセスを、外場や環境パラメーターに対するシステムの応答と考えることによって、非平衡プロセスの推定の見通しがよくなることに気づき、この観点からいくつかの研究を進めている。特に、レザバー計算と呼ばれるリカレントニューラルネットワークの一種を、物理デバイスとして実現するための理論的考察を行った。磁性体におけるスピン波を用いて、スピン波を駆動する入力記憶と非線形変換を実現すること、それにより入出力を持つ時系列の予測などの計算を行うことができることを示した。