

アクティブマターにおける機械学習による新しい相の提案

[1] 要旨

アクティブマター（自己駆動粒子系）における非自明なクラスター構造は重要な研究課題である。本研究では、アクティブマターを記述する Vicsek 模型の観点から制御パラメータが解釈可能である DBSCAN と呼ばれるクラスタリングアルゴリズムに着目し解析を行った。具体的には、Vicsek 模型と DBSCAN の数理的な対応について議論し、Vicsek 模型における新しい相の可能性が提示された。また、DBSCAN によるクラスター構造の熱力学的安定性が非自明であることについても考察が行われた。

[2] 本文

アクティブマター（自己駆動粒子系）は、外界からエネルギーを取り込みながら運動する素子の集団に関する研究分野であり、比較的新しく登場した非平衡統計物理の一分野である。典型的には鳥や魚など集団運動にメカニズムを調べる分野であり、近年では細胞集団やロボットなどの集団に関する研究も進んでいる。また、統計物理において系の集団的な振る舞いを理解するために、相転移の同定や新しい相の発見は極めて重要なトピックであり、平衡物理における研究はこれまでに多く存在する。そのため、非平衡統計物理、とりわけアクティブマターにおける重要な観点の 1 つに、平衡系では存在しない、あるいは見つかっていない相の発見が重要である。歴史的には Vicsek らの研究があり、極めて重要である。なぜならば、平衡系では Mermin-Wagner の定理によって禁止されていると考えられていた連続対称性を持つ二次元系の相転移を、非平衡系において数値的に発見したからである。この研究以来、アクティブマターにおける相転移の研究は盛んになってきており、近年では相分離などに代表されるアクティブマターにおける密度揺らぎ・クラスター構造に関する研究が多くなされている。

一方、情報科学の分野では機械学習の技術進展が著しく、画像認識・生成や自然言語処理において多くの成功を収めている。機械学習がカバーする範囲は広範であるが、その一つにクラスタリングという手法が挙げられる。クラスタリングは教師なし学習の代表的な問題設定であり、多くの機械学習的な問題設定の部分問題としても登場するため、その重要性は極めて高く、これまでに k-means アルゴリズムや混合ガウス分布に EM アルゴリズムを適用する手法などの多くのクラスタリングアルゴリズムが提案されている。このような背景から、アクティブマターに機械学習のクラスタリングアルゴリズムを適用するというアイデアは極めて自然のように思えるが、これまでにほとんど見られなかった。

最近、北海道大学大学院情報科学研究所のメンバーを中心とする研究グループは、DBSCAN と呼ばれるクラスタリングアルゴリズムと Vicsek 模型との類似性に注目することで、数値的に Vicsek 模型における新しい相と新しいクロスオーバーを発見した。また、これらの相を特徴付けるために、DBSCAN によるクラスタリング構造を陽に用いた秩序変数を提案し、その有効性を数値的に確認した。この成果は JPSJ の 2025 年 8 月号に掲載された。

応用上多くの成功を収めたために、機械学習は広く注目を集めており、物理系に対する応用例が増えている。例えば、ニューラルネットを物理シミュレーションや相転移の同定に利用しようとする試みが挙げられる。これらの研究は試みとしては興味深いものの、アルゴリズムの数理的な性質

を無視して適用した場合、その結果の意義・解釈は極めて困難になる。

今回の研究では、数多くあるクラスタリングアルゴリズムの中で、アルゴリズムの制御パラメータについて考察を行い、DBSCAN と呼ばれるアルゴリズムに着目した。DBSCAN に2つあるパラメータのうちの1つは、Vicsek 模型に登場する近傍を定めるパラメータと同一視することができる。DBSCAN のもう一つのパラメータ n はクラスタの構成要素の最小値を定めるのだが、これは Vicsek 模型に本来的に現れないパラメータである。そこで Vicsek 模型と DBSCAN に関する近傍を同一視して Vicsek 模型のクラスタ構造を調べ、結果が n については強く依存しないことを明らかにした。続いて、Vicsek 模型におけるクラスタ構造の熱力学的極限における安定性を議論し、DBSCAN による Vicsek 模型の相図を決定した (図1)。さらに、近傍を定めるパラメータを持つ他のクラスタリングアルゴリズムとして mean-shift を例にとり、適切にクラスタリングアルゴリズムを選定しないと熱力学極限におけるクラスタ構造を議論できないことも見いだした。本研究では、パラメータの類似性と広く利用されているという点を考慮し、DBSCAN と mean-shift に着目したが、他にも多くのクラスタリングアルゴリズムが知られている。数多く存在する機械学習アルゴリズムと物理模型の関係は未だ明らかではなく、今後の研究の展開が期待される。

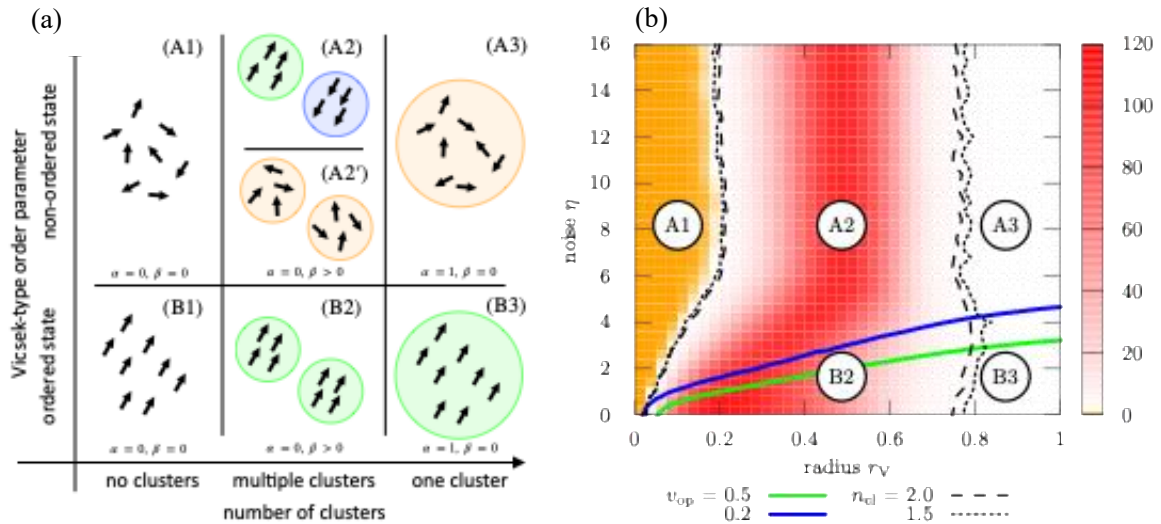


図1 (a) クラスタ構造の概念図。(b) Vicsek 模型の相図。パラメータの詳細は原論文を参照。

原論文 (2025年7月14日公開済)

Vicsek Model Meets DBSCAN: Cluster Phases in the Vicsek Model

H. Miyahara, H. Yoneki, T. Mizohata, and V. Roychowdhury, J. Phys. Soc. Jpn. **94**, 084002 (2025).

< 情報提供 : 宮原 英之 (北海道大学大学院情報科学院) >