

物理学におけるデータ科学の方法

岡山大学 異分野基礎科学研究所

大槻純也



自己紹介

大槻 純也 (OTSUKI Junya)

所属 : [岡山大学 異分野基礎科学研究所](#) 超伝導・機能材料研究コア 超伝導物性評価研究分野
Jeschke-Otsukiグループの構成員は[こちら](#)

教育担当 : 岡山大学 [理学部物理学科](#) / 大学院自然科学研究科

博士前期課程 : 数理物理学専攻 物理学講座 (教育研究分野:量子多体物理学)

博士後期課程 : 学際基礎科学専攻 学際基礎科学講座 (教育研究分野:量子多体物理学)

学位 : 博士 (理学) (東北大学) 2008年3月

専門分野 : 強相関電子系の理論 (特にf 電子系)

eメール : [j.otsuki\(at\)okayama-u.ac.jp](mailto:j.otsuki@okayama-u.ac.jp)

居室 : 津島キャンパス 異分野基礎科学研究所棟 404号室
[キャンパスマップ\(N69\)](#), [津島キャンパスへのアクセス](#)

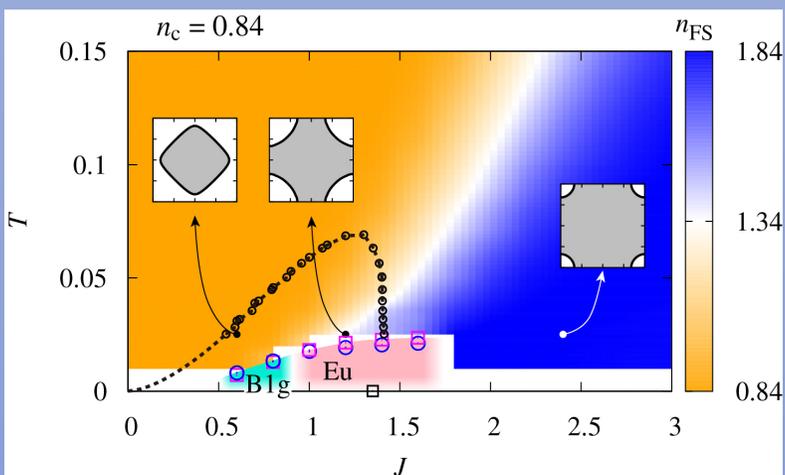
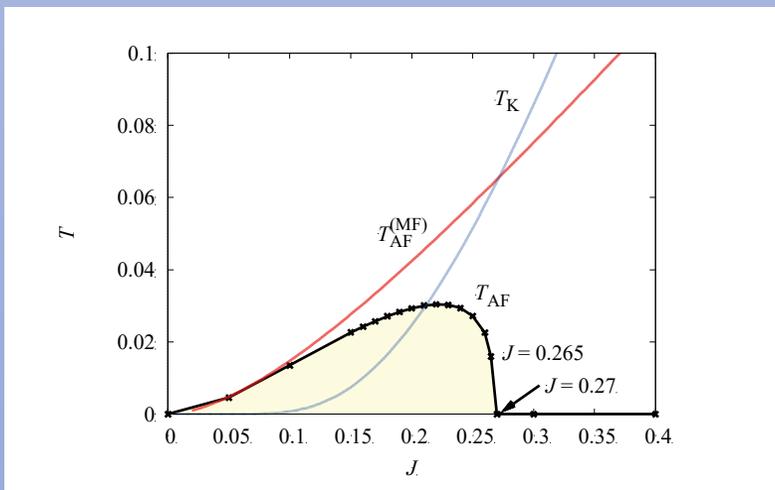
出身 : 東京都八王子市



<http://www.physics.okayama-u.ac.jp/~otsuki/>
<http://www.physics.okayama-u.ac.jp/jeschke-otsuki-group/>

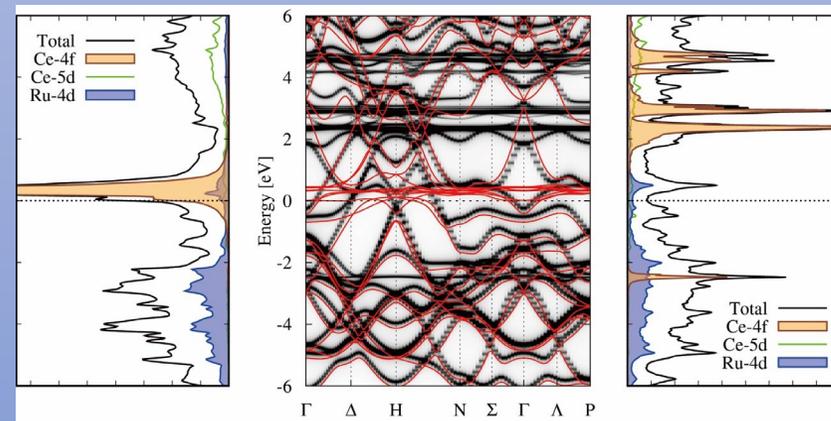
研究テーマ

重い電子系



動的平均場理論に関連した手法開発

DCore

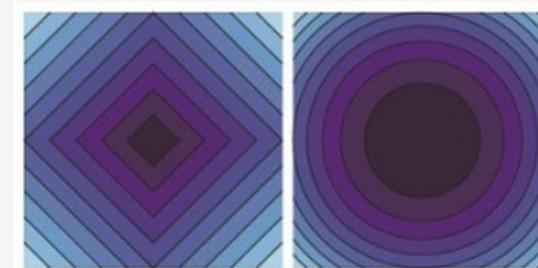


スパースモデリング

INVITED REVIEW PAPERS

NEW Sparse Modeling in Quantum Many-Body Problems

Junya Otsuki, Masayuki Ohzeki, Hiroshi Shinaoka, and Kazuyoshi Yoshimi [89, 012001 (2020)]



授業の概要と授業計画

テーマ：

「物理学におけるデータ科学の方法」

目的：

近年の物理学の研究において、大規模データに対するデータ科学の方法が頻繁に使われるようになってきている。本講義では、物理研究への応用を念頭に、ベイズ統計の基礎からスパースモデリングまでを解説する。実際の研究でデータ科学の方法を使えるようになることを目的とする。参加者の希望に応じて、python を用いた実習も行う予定にしている（Google Colaboratory を使用）。

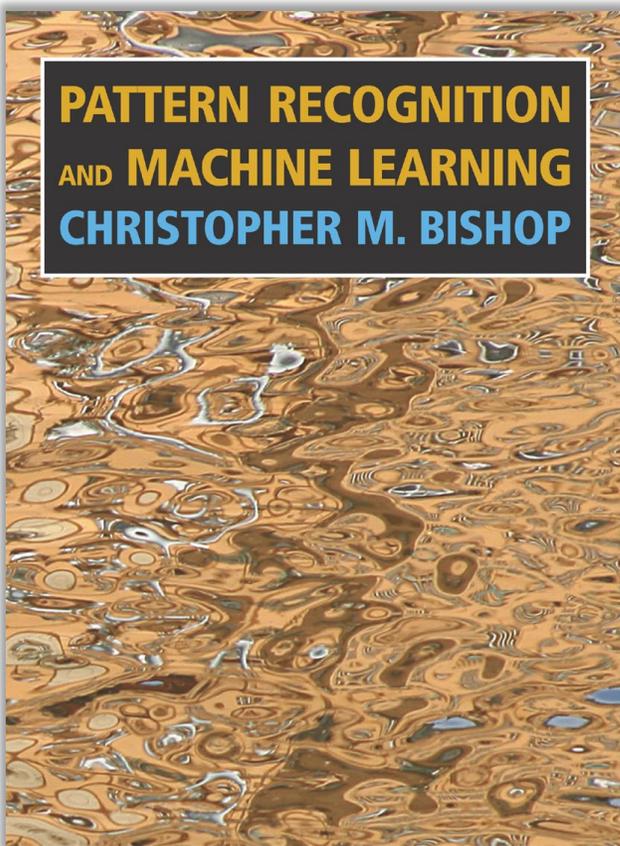
授業計画：

1. ベイズの定理
2. 線形回帰と最小二乗法
最尤推定
3. ベイズ線形回帰
4. カーネル法とガウス過程
5. ベイズ最適化
【実習】 ベイズ線形回帰
【実習】 ガウス過程
6. スパースモデリング
7. LASSO最適化問題の解法
【実習】 LASSO最適化問題
8. 【セミナー】

シラバスから少し修正しました。進捗に応じて変更します。

参考書

ベイズ統計



PRMLと略す。訳本あり。
タイトルは「画像認識
と機械学習」だが、ベ
イズ統計のテキストと
しておすすめ。

なんと、著者のwebサイトでPDFが無
料でダウンロードできる！

<https://www.microsoft.com/en-us/research/people/cmbishop/prml-book/>



OKAYAMA
UNIVERSITY

スパースモデリング

Journal of the Physical Society of Japan **89**, 012001 (2020)
<https://doi.org/10.7566/JPSJ.89.012001>

Invited Review Papers

Sparse Modeling in Quantum Many-Body Problems

Junya Otsuki¹, Masayuki Ohzeki², Hiroshi Shinaoka³, and Kazuyoshi Yoshimi⁴

¹Research Institute for Interdisciplinary Science, Okayama University, Okayama 700-8530, Japan

²Graduate School of Information Sciences, Tohoku University, Sendai 980-8579, Japan

³Department of Physics, Saitama University, Sakura, Saitama 338-8570, Japan

⁴Institute for Solid State Physics, University of Tokyo, Kashiwa, Chiba 277-8581, Japan

(Received August 6, 2019; accepted October 14, 2019; published online December 12, 2019)

This review paper describes the basic concept and technical details of sparse modeling and its applications to quantum many-body problems. Sparse modeling refers to methodologies for finding a small number of relevant parameters that well explain a given dataset. This concept reminds us physics, where the goal is to find a small number of physical laws that are hidden behind complicated phenomena. Sparse modeling extends the target of physics from natural phenomena to data, and may be interpreted as “physics for data”. The first half of this review introduces sparse modeling for physicists. It is assumed that readers have physics background but no expertise in data science. The second half reviews applications. Matsubara Green’s function, which plays a central role in descriptions of correlated systems, has been found to be sparse, meaning that it contains little information. This leads to (i) a new method for solving the ill-conditioned inverse problem for analytical continuation, and (ii) a highly compact representation of Matsubara Green’s function, which enables efficient calculations for quantum many-body systems.

<https://journals.jps.jp/doi/10.7566/JPSJ.89.012001>

固体物理 Vol. 53, No. 4, pp. 173–188 (2018) 出版原稿

最大エントロピー法でいいの？

—スパースモデリングの量子多体論への応用—

東北大学大学院理学研究科 大槻純也

東北大学大学院情報科学研究科 大関真之

埼玉大学大学院理工学研究科 品岡 寛

東京大学物性研究所 吉見一慶

http://www.physics.okayama-u.ac.jp/~otsuki/activity_article.html

スライドの入手先

超伝導理工学特別講義「物理学におけるデータ科学の方法」

集中講義@東京都立大学
2022年度8月2~4日

講義目次

0. はじめに 
1. ベイズの定理 
2. 線形回帰と最小二乗法 
 ベイズ統計から見た最小二乗法 
3. ベイズ線形回帰
4. カーネル法とガウス過程
5. ベイズ最適化
 【実習】 ベイズ線形回帰
 【実習】 ガウス過程
6. スパースモデリング
7. LASSO最適化問題の数値解法
 【実習】 LASSO最適化問題

資料

- 「最大エントロピー法でいいの？ —スパースモデリングの量子多体論への応用—」
大槻純也、大関真之、品岡 寛、吉見一慶： [固体物理 Vol.53 No.4 p.173-188 \(2018\)](#)  出版原稿
- "Sparse Modeling in Quantum Many-Body Problems" Invited Review Paper
J. Otsuki, M. Ohzeki, H. Shinaoka, K. Yoshimi: [J. Phys. Soc. Jpn. 89, 012001 \(2020\)](#).
- レポート課題

私の個人HPのトップから
「授業担当」

→ 【集中講義】 超伝導理工学特別講義
「物理学におけるデータ科学の方法」

成績評価について

課題を出題します（別資料参照）。解答をレポートにまとめて提出してください。

提出方法：単一のPDFファイルとして提出。

提出先は授業時に指定する。

×切：8月10日（成績登録期限が短いので×切厳守をお願いします）