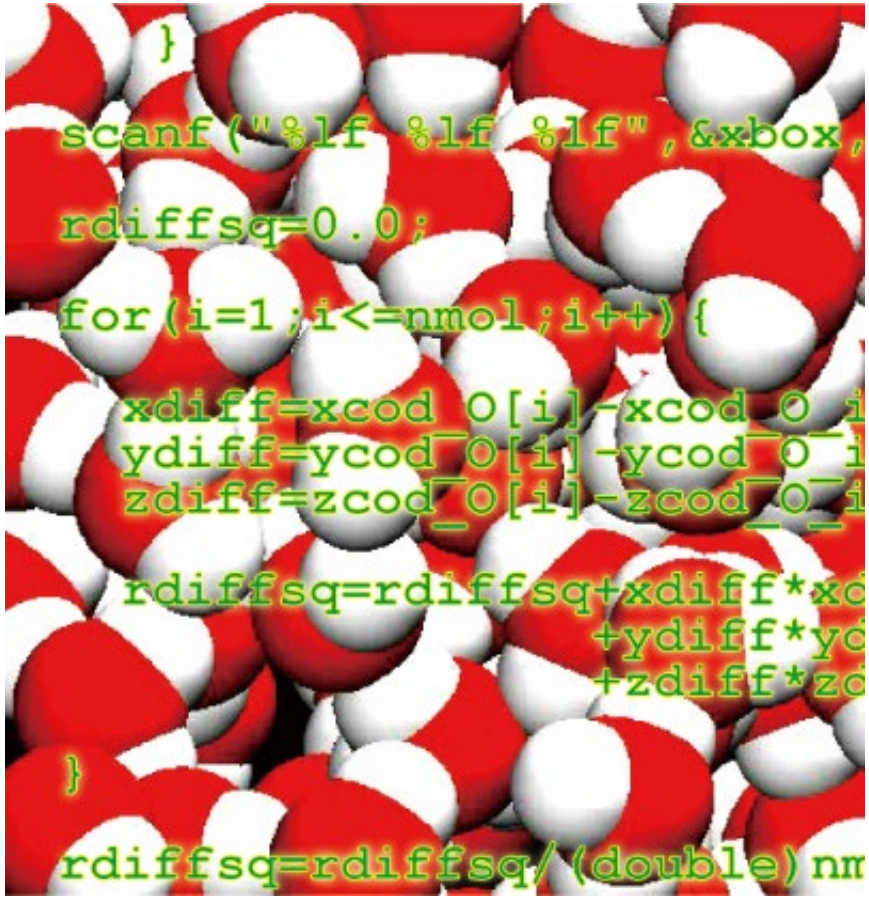
自然科学における統計サンプリングとモデリング:数理から実践まで

統計サンプリング

モデル(数式)で与えられた確率分布から具体的なサンプルを得る



担当教員

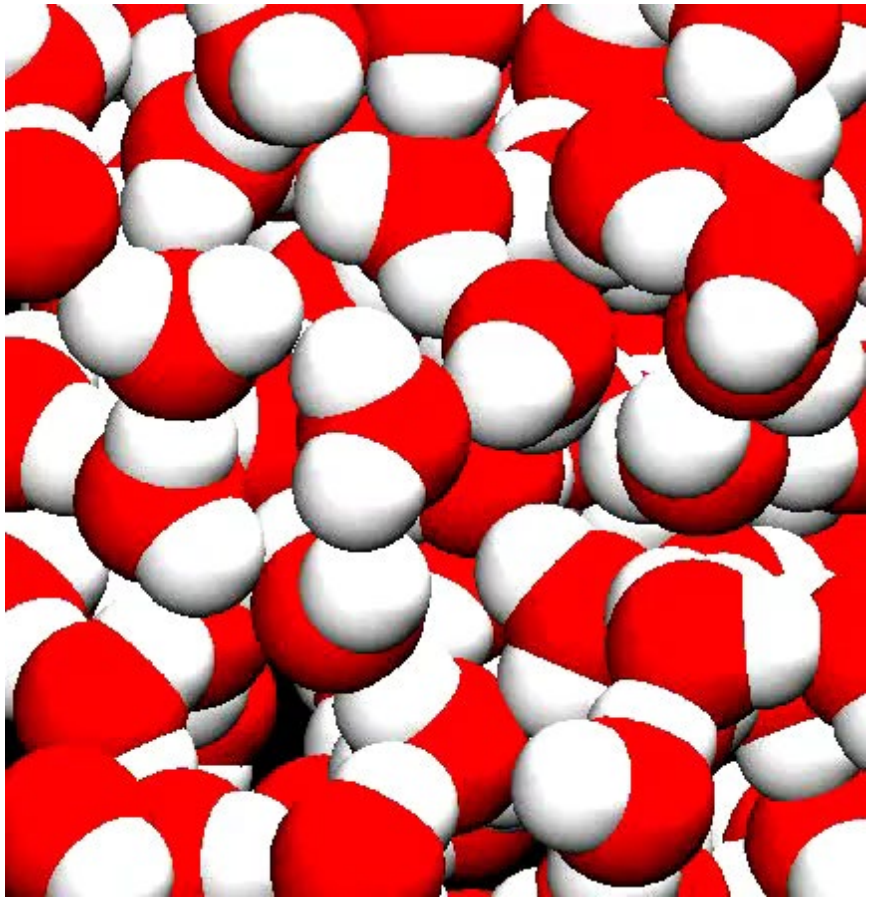
林　重彦　(化学)
高田　彰二(生物物理学)

自然科学における統計サンプリングとモデリング:数理から実践まで

統計サンプリング

モデル（数式）で与えられた確率分布から具体的なサンプルを得る

- シミュレーション
  - ✓ 与えられたモデルの振る舞いを知る



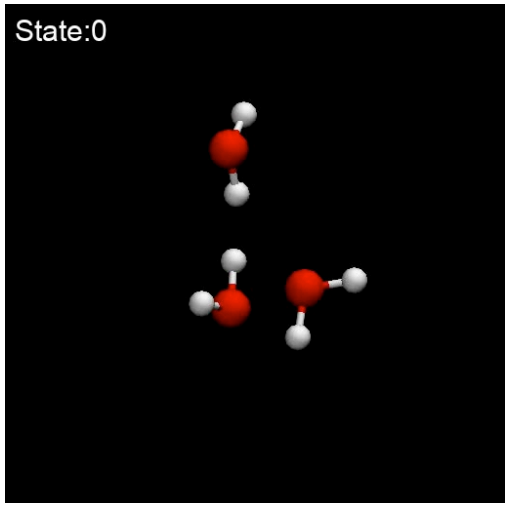
自然科学における統計サンプリングとモデリング:数理から実践まで

統計サンプリング

実際にデータをいじってみよう！

モデル（数式）で与えられた確率分布から具体的なサンプルを得る

- シミュレーション
  - ✓ 与えられたモデルの振る舞いを知る
- 推定
  - ✓ 与えられたデータからモデルのパラメータを推定する
  - ✓ 機械学習



以前の成果物（松澤）

$$P(o_1, \dots, o_N) = \sum_{s_1 \dots s_N} P(s_1, \dots, s_N, o_1, \dots, o_N)$$

$$= \sum_{s_1 \dots s_N} \underbrace{h(o_N|s_N)}_{\text{観測量}} \underbrace{P(s_N|s_{N-1})}_{\text{遷移確率}} \cdots h(o_1|s_1) P(s1)$$

分光データから構造遷移の推定に成功

企画内容

1. 参加者の興味あるテーマを提案
   - ✓ 提案内容の議論
   - ✓ 初学者には基礎的なテーマを用意
     - 分子シミュレーション
     - スピンモデル
     - 配列アライメント
   - ✓ 時間があればコンテスト的なものも企画する
2. プログラミング・シミュレーションの実施と発表
   - ✓ 上手く行かないところなどの検討会

統計サンプリングの初学者から既習者まで幅広いレベル、多様な分野の参加者を期待しています。

実施期間・日時・その他

- 令和 2 年度　後期
- 水曜日 5 限（?）
- 隔週程度
- 自分のノート PC はあると良いかも（無ければ相談して下さい）
- 担当教員は中年で、昨今のプログラミング開発の現状に疎いです。その辺に通じている学生さんの参加を願っています。