スタディグループ「自然科学における統計サンプリング：数理から実践まで」

参加教員

教員名	職名	所属	主に
高田彰二	教授	生物科学専攻	数理＆実践
林重彦	教授	化学専攻	数理＆実践
佐々真一	教授	物理学・宇宙物理学専攻	数理
七田芳則	教授	生物科学専攻	実践
杉山弘	教授	化学専攻	実践

実施期間（開講曜日・時間等）

年度・期	開講曜日	時間	場所
平成 28 年度 後期	未定	未定	セミナー室、計算機

企画要旨・目的

物理学、地球科学、化学、および生物学等幅広い物質科学から、データに基づく機械学習等の情報科学まで広範な自然科学において、統計サンプリング、は普遍的な計算科学手法である。そこに共通する問題は、広大な状態（変数）空間を効率よくサンプリングし、興味のある状態を評価することである。そのために、無数のアルゴリズムが開発されてきた。この企画では、最前線にある統計サンプリングアルゴリズムの数理とその背後にある物理の世界を勉強し、それを蛋白質、核酸、他のモデリング問題に適用・実践することである。そこから、新しいサンプリングアルゴリズムが生まれれば素晴らしいことである。

計画案

「数理」

最新のさまざまな統計サンプリングアルゴリズムについて、論文紹介と専門家によるセミナーを併用して勉強する。

論文候補（実際には、開始までにアップデートされる見込み）

Suwa Todo, Phys. Rev. Lett. 2010, 105, Markov Chain Monte Carlo Method without Detailed Balance.

Ohzeki, Ichiki, Phys. Rev. E 92, 012105 Langevin dynamics neglecting detailed balance condition

McCarty,,, Parrinello,, Phys. Rev. Lett. 115, Variationally Optimized Free-Energy Flooding for Rate Calculation,　他

セミナー講師候補者（案）

伊庭幸人（統数研）ベイズ統計とサンプリング
大関真之（京大情報）機械学習におけるサンプリング
奥村久士（分子研）分子シミュレーションにおけるサンプリング
佐々真一（京大理）統計力学におけるサンプリング，　他

「実践」
統計サンプリングアルゴリズムが、実際の自然科学のどのような場面において適用しうるかを検討するために、実験研究者に講演を頂き、その可能性を議論する。また、計算機を用いて、統計サンプリングアルゴリズムの実装や分子シミュレーションの実施を行うことにより、統計サンプリングアルゴリズムの効果の検証や、現実の分子モデリング問題への適用を検討する。
セミナー講師候補者（案）
七田芳則（京大理）
杉山弘（京大理）
その他、興味のある実験研究者
林　重彦（京大理、アルゴリズムの実装及び分子シミュレーションの実施）

期待される効果
様々なシミュレーションを実施する研究者が、最新のサンプリングアルゴリズムに精通することにより、教員・学生が自身の研究に役立てることができる。理想的には、その過程を通じて、新たなアルゴリズムを提案できる可能性がある。
数理的な理解に基づいたアルゴリズムを、実験研究者と共同して実践的な問題に適用することで、場合によっては、新しい理論モデルを構築できる。

学生の参加要件
特になし。統計サンプリングアルゴリズムの数理の最先端を勉強してみたい、あるいはサンプリング法を適用して自然科学の諸問題に取り組みたい、の少なくとも一方に興味があるひと、ぜひ参加してください！