


# 自然科学における統計サンプリングの プログラミング・シミュレーションの実践

## 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



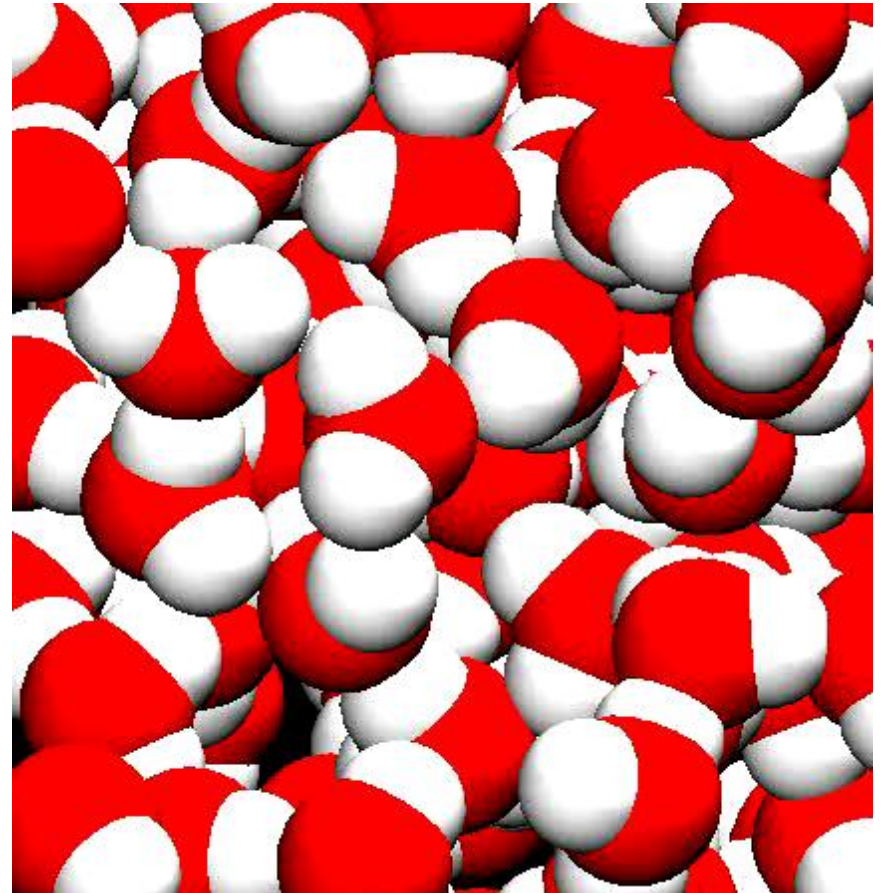
```
    }  
    scanf("%lf %lf %lf", &xbox,  
rdiffsq=0.0;  
for(i=1;i<=nmol;i++){  
    xdifff=xcod_0[i]-xcod_0_i  
    ydifff=ycod_0[i]-ycod_0_i  
    zdifff=zcod_0[i]-zcod_0_i  
    rdiffsq=rdiffsq+xdifff*xdifff  
                +ydifff*ydifff  
                +zdifff*zdifff  
    }  
    rdiffsq=rdiffsq/(double)nmol
```

# 自然科学における統計サンプリングの プログラミング・シミュレーションの実践

## 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

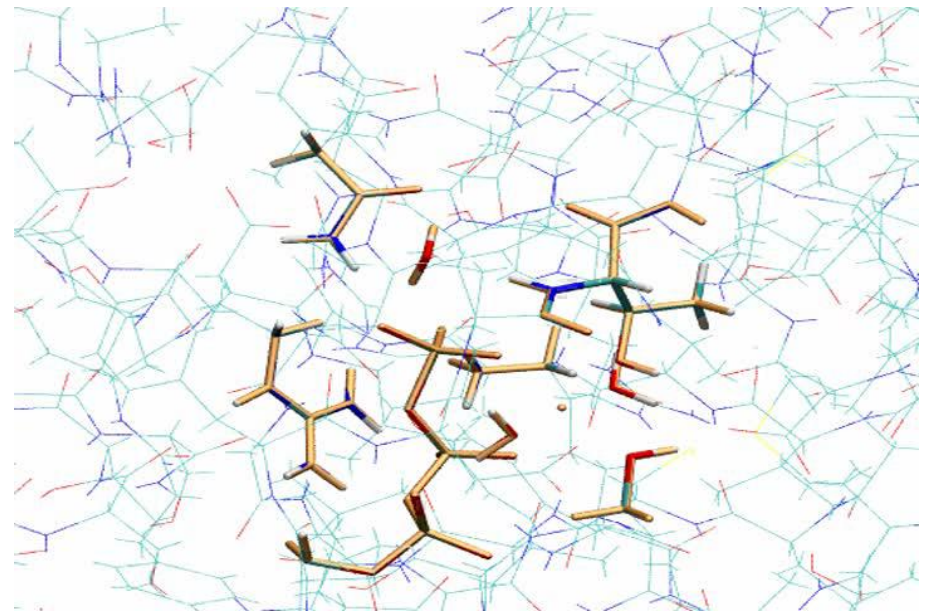


# 自然科学における統計サンプリングの プログラミング・シミュレーションの実践

## 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
- 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



$$P(\mathbf{X} \mid \Psi, \mathbf{R})$$

タンパク質構造( $\mathbf{X}$ )分布からそれを与える活性部位の電子波動関数( $\Psi$ )と構造( $\mathbf{R}$ )を推定

# 自然科学における統計サンプリングのプログラミング・シミュレーションの実践


## 統計サンプリング

昨年度の高田 SG で統計サンプリングの理論を勉強

- マルコフ連鎖モンテカルロ法 (次元の呪い)
- 拡張アンサンブル法 (多峰性、多重積分)
- ベイズ推論

分かったような気もするが、ちょっと理解がフワフワしている、、、

実際にデータをいじってみよう！



```
scanf("%lf %lf %lf", &xbox,  
rdiffsq=0.0;  
for(i=1;i<=nmol;i++){  
xdiff=xcod_0[i]-xcod_0_i  
ydiff=ycod_0[i]-ycod_0_i  
zdiff=zcod_0[i]-zcod_0_i  
rdiffsq=rdiffsq+xdiff*xc  
+ydiff*yc  
+zdiff*zc  
}  
rdiffsq=rdiffsq/(double)nr
```

# 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

- 平成 29 年度 通年
- 水曜日 5 限
- 隔週程度(月の前半に実施。後半二週はお休み)
- TA 雇用有り(対象者のみ。要相談)
- 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。