

SOKENDAI 特別研究員申請書 (1.博士後期課程 1 年次相当の学生を対象とする募集)

【次世代 AI 研究者枠のみ、または一般枠と次世代 AI 研究者枠を併願する学生用】

(1) 申請者情報

※現在総研大に在学中の方はこちらに記入してください。

申請対象枠	2) 「一般枠」及び「次世代 AI 研究者枠」を併願する。 ※いずれか一方を選択し、他方を削除してください。
申請者氏名	司馬博文
生年月	1999 年 5 月 30 日
学籍番号	20233751
ORCID ID	0009-0007-8251-1224
所属コース (専攻)	統計科学コース
所属博士課程	5 年一貫博士課程
入学年月日	2023 年 4 月 1 日
主任指導教員	鎌谷研吾教授
研究課題名	次世代の「AI 信頼性」に向けた抜本的解決
E-mail アドレス (複数可)	shiba.hirofumi@ism.ac.jp

※2025 年 4 月に総研大に入学を予定している方または出願中の方はこちらに記入してください。

申請対象枠	1) 「次世代 AI 研究者枠」のみ申請する。 2) 「一般枠」及び「次世代 AI 研究者枠」を併願する。 ※いずれか一方を選択し、他方を削除してください。
申請者氏名	
生年月	
現在の所属大学・専攻等	
入学を希望しているコース	
入学後に指導を希望している教員	
研究課題名	
E-mail アドレス (複数可)	

(2) 学歴

年月	
2023年3月 2023年4月	東京大学理学部数学科卒 総合研究大学院大学5年一貫博士課程入学(先端学術院統計科学 コース)

(3) 職歴

年月	
2023年7月～現在	情報・システム研究機構リサーチ・アシスタント

1. 研究計画（3 ページ以内）

1-1. 研究の概要

位置付け

「次世代の AI」には「信頼性」が必要である。そのためには「いつモデルが外部からの補助を必要としているか？」を明確にする必要があるが、現行の AI 技術はこれができない。現行 AI にベイズ法を適用し「不確実性の定量化」が可能になれば、この問題は抜本的に解決できる。

課題と研究目的

しかしベイズ法には「高次元モデルへのスケーラビリティがない」という欠点があり、これが AI 技術への適用を妨げていた。本研究では「スケーラブルなベイズ計算法」を開発し、ベイズ法の応用を妨げる課題の正面突破を狙う。

研究計画

1. 基礎的研究：新手法 PDMC の更なる効率化と性能の理論的評価
2. 応用的研究：新手法 PDMC の高次元モデルや AI 技術への適用
3. 在外研究：ベイズ計算法の中心地であるイギリスの研究者との協力関係を保つ

期待される成果

申請者は新手法 PDMC が利用可能なほとんど唯一のパッケージを開発済みである。このパッケージに提案手法を実装し、広く世界中の人に利用可能にする。その効率性を分析する数理的枠組みを作る。さらにこのパッケージを政治科学と生物統計学の課題に適用しイノベーションを起こす。

1-2. 研究の位置づけ

ベイズ法の背景

近年の AI の発展はめざましいが、「大量かつ良質な教師データが必要」「モデルの不確実性を扱うことが難しい」などの欠点があり、属人化医療や実験計画などデータが希少な分野や、自動運転、気象予報など不確実性が重要な領域へ、現行 AI 手法をそのまま応用することは困難である。

ベイズ法と呼ばれる手法群は、まさに近年、現状の AI 技術の欠点を補完する技術として、上述の分野を中心に急速に研究が進んでいる [1, 2]。これはベイズ法では出力の不確実性を自然に定量化できるためである (図 2)。ベイズ法を用いれば、例えばモデルに自信がない場合には使用者に警告を出すなど、実社会で安全に運用できる「次世代の AI」構築に大きく近づく。

課題「スケーラビリティ」

ベイズ法の応用が遅れた主な原因は「スケーラビリティ」の欠如による [3]。一般の統計モデルと違い、AI モデルはそのサイズ (次元) が $d = 10^n$ ($n \geq 4$) など、極めて高次元になることが多い。ベイズ法では高次元空間でも有効な計算法はいまだ欠如しており、このことが AI モデルへのベイズ法の応用を妨げる最大の障壁となっている。本研究はベイズ計算法の「スケーラビリティ」にブレイクスルーを起こし、AI モデルにベイズ法を適用可能にすることで、より広い応用範囲と信頼性をもった「次世代の AI」を実現することを目的とする。

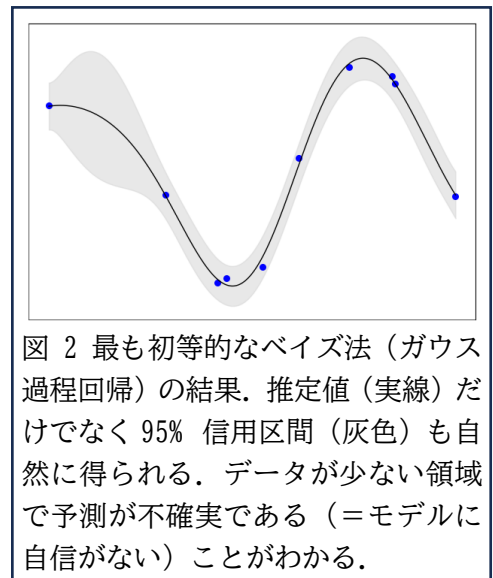
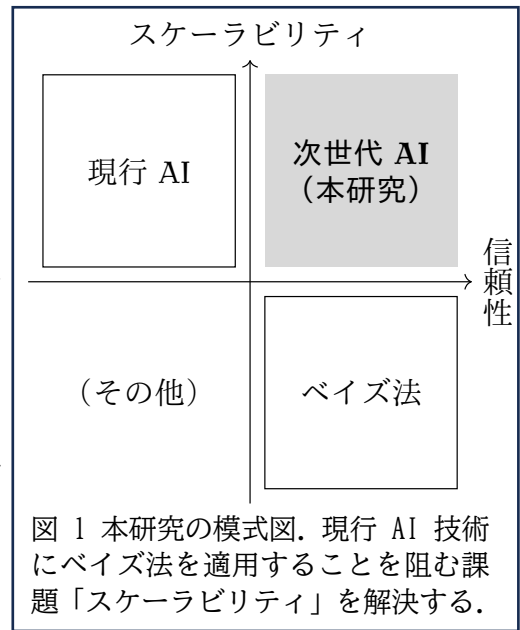


図 2 最も初等的なベイズ法 (ガウス過程回帰) の結果。推定値 (実線) だけでなく 95% 信用区間 (灰色) も自然に得られる。データが少ない領域で予測が不確実である (=モデルに自信がない) ことがわかる。

着想：新手法PDMCとその背景

従来のベイズ計算法が高次元モデルに弱いことはかねてから指摘されており、21世紀に入ってその原因が「可逆性」にあると次第に理解された [4]. そこで2010年代に入ると計算物理の分野で次々と非可逆な計算法が提案された [5, 6]. この手法は世界初の氷の液相転移の全原子シミュレーションに成功し [7], 統計学にも区分確定的モンテカルロ法 (Piecewise Deterministic Monte Carlo, 以下 PDMC 法) として輸入された [8, 9].

PDMC 法はベイズ法のスケーラビリティを解決する期待の星であるが、①多くのモデルに共通して使える汎用的なアルゴリズムがなく、②パッケージへの実装が僅少で使える人が限られていたために、応用は限られていた. そのような中で研究 [10] がアルゴリズムの問題①を、申請者の開発したパッケージ PDMPflux が利用可能なパッケージが少ないという問題②を解決した.

1-3. 研究目的・内容等

研究目的

本研究は PDMC 法をもとに高次元モデルへの「スケーラビリティ」のあるベイズ計算法を創出することで、ベイズ法の応用を阻む課題を根本的に解決し、現行の AI 技術にも応用可能にする.

研究計画の概要

本研究は、「1. 基礎的研究」と「2. 応用的研究」の二本立てと「3. 在外研究」の3部構成で、スケーラビリティの課題を一気通貫で解決することを目指す.

1. 基礎：既存の PDMC 法の理論的な性能評価と、更なる効率的アルゴリズムの創出
2. 応用：開発した PDMC 手法を実際の高次元モデルへ適用し、具体的な成功事例を示す

1. 基礎的研究

既存の PDMC 法では部分的なスケーラビリティを達成しているものしか存在しない. 例えば対称性の下では Zig-Zag サンプラー [9] の方がスケーラブルである [11] が、異方性 (形の歪み) が強い場合には BPS サンプラー [8] の方がスケーラブルになる [12] という具合である (右図4参照).

Forward 法 [13] は2つの良いところを取った手法として提案されたが理論解析が全くなされておらず、前述の2つに比べて「本当に効率が良くなっているか」が判っていない. これはアルゴリズムとしての複雑性が前2者に比べて上っており、理論解析も難しくなっているためである.

申請者は PDMPflux パッケージの開発に際して Forward 法の実装も経験し、アルゴリズムの内容と高速性について深い洞察を持つ. そのことに加えて、理論解析に必要な数学を重点的に学部で学び、さらに特に必要性の高いマルコフ過程のエルゴード性の理論に関しては、前掲の理論解析論文 [11, 12] の著者でもある指導教員の下で修士の2年間、学習を進めてきた (第2節参照).

以上の経験を活かし、[11, 12]を拡張する形で Forward 法も扱える数理的枠組みを創出する. 続けて Forward 法には複数の未確定要素 (方向転換をする際の新しい方向の決め方など) があるため、最も効率が良い1つのアルゴリズムを特定することを目指す. これらの理論研究を通じて、Forward 法も含めた既存手法の中で最も効率の良いアルゴリズムを特定または創出し、開発済みの PDMPflux パッケージに実装し、世界中の人々が利用可能にする.

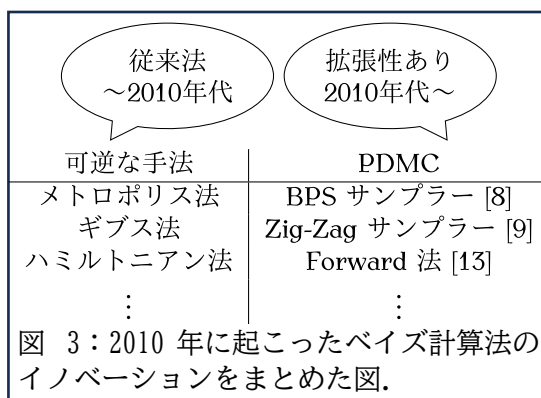


図 3: 2010 年に起こったベイズ計算法のイノベーションをまとめた図.

対称性の下でのスケーラビリティ

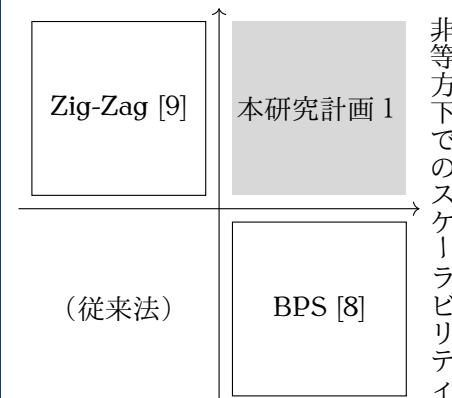


図 4: 現在の PDMC 法の中に決定的にスケーラビリティを達成するものは存在しない.

2. 応用的研究

申請者は、応用分野の中でも特に政治科学と生物統計に注目している。2分野とも「スケーラブルなベイズ計算法」を必要としているためである。

政治科学では民主主義の機能を定量的に評価するために有権者の信念を定量化する手法「理想点モデル」が広く用いられる。各国の有権者は極めて多いため、極めて高次元のモデルになり、ベイズ法の応用に苦戦している [14]。申請者は [14] の著者と連絡をとり PDMC の応用を目指して共同研究を開始した。申請者の PDMPlux パッケージは当初、この共同研究の一環として開発が開始されたものであった (図 5)。

生物統計において、疾患リスクの評価と属人化医療の分野では、不確実性の定量化が重要であるものの、

膨大な数の因子の複雑な交互効果を考慮する必要があるためにベイズ法の応用は困難であった。

そこで申請者は PDMPlux パッケージを通じたベイズ法の応用を目指して、予防医療サービスを展開するプリメディカ社と共同研究を開始し、データ利用協定の締結を目指している。プリメディカ社はすでに動脈硬化リスクの予測サービスを展開しており、本研究に必要なデータを持つ。

本研究の「応用的研究」パートでは、以上の2つの共同研究に取り掛かる。前者は米国連邦議会議員のデータを用いる計画だが、各議員に関する説明変数（出身大学、選挙区の人種構成・主要産業など）の収集に難航しており、共同研究者からアドバイスを受けている最中である。後者はデータ利用契約の締結と、解析に用いるモデルを確定させることが次の課題である。

いずれの研究においても、用いるモデルは「ベイズノンパラメトリクス」と呼ばれる深層モデルの代替手法と目されているモデルと深く関連する [2]。したがって、「1. 基礎的研究」で述べた理論解析の重要な実証例となると同時に、「提案手法が次世代の AI の創出に十分なスケーラビリティを達成できたか？」という申請者の研究課題を直接的に検証できる格好の事例となる。仮に本研究が大きく成功した場合、さらに大規模な AI への応用への道が拓かれることになる。

本応用研究は [10] で提案された汎用的なアルゴリズムを実装したほとんど唯一のパッケージである PDMPlux の開発者である申請者にしか現時点ではできない研究であると言えるだろう。

3. 在外研究

以上の2つの研究を遂行するなかで、英国ロンドンの University College London (以下、UCL) へ滞在研究することを目指す。この計画は修士2年次に1ヶ月 UCL へ総研大研究派遣プログラムの支援の下で研究滞在了した経験に基づく。その際に訪問した Alexandros Beskos 教授は PDMC は専門としないものの「1. 基礎的研究」に挙げた数理的枠組みの大家であり、3回のディスカッションを通じて PDMC 法を離散空間上でも適用可能にするという研究課題を着想し、PDMC の大家である同 UCL 所属の Samuel Livingstone 准教授も含めた共同研究プロジェクトを開始した。

このプロジェクトは先行研究 [15] に基づき、離散部分も持つ高次元モデルに対して、連続部分には PDMC を、そして離散部分には別手法を用い、最終的にはこれらを統合した1つの巨大な計算アルゴリズムを構成するという極めて野心的なものである。離散変数に対する計算法は現在活発に研究されている最中であり、「1. 基礎的研究」と「2. 応用的研究」とに挙げた課題に比してすぐに手をつけられるものではないが、単なる高次元モデルだけでなく、変数が離散部分と連続部分とに分かれていてもこれを自然に統合することもできることは真に PDMC 以前には出来なかったことであり、「スケーラビリティを持つベイズ計算法を創出する」という本研究課題に沿う。本プロジェクトを進める中で、UCL の Livingstone 准教授を訪問することを計画する。

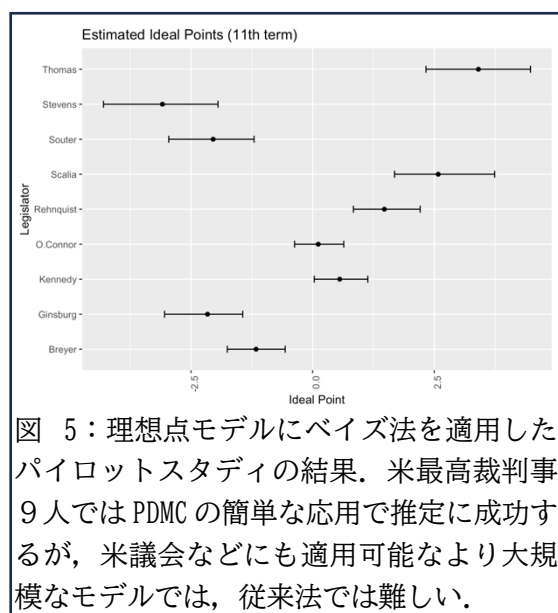


図 5：理想点モデルにベイズ法を適用したパイロットスタディの結果。米最高裁判事9人ではPDMCの簡単な応用で推定に成功するが、米議会などにも適用可能なより大規模なモデルでは、従来法では難しい。

2. 研究遂行力の自己分析（原則 1 ページ（必要な場合は最大 2 ページ））

研究遂行能力

1. **数学力**：ベイズ計算手法を解析する数学に関する深い理解と高い技術
2. **実装力**：提案した手法をパッケージに実装し多くの人にとって利用可能にする力
3. **共同研究力**：互いの専門を理解し合い、価値のある課題を洗い出す力

本研究計画で要求されるこの3つの能力を申請者は同時に持ち合わせており、遂行可能性が高い。

特記事項

さらに本研究計画のテーマである PDMC 技術は「画期的な手法であるが、使えるパッケージが少ない」という特有の課題を抱えている。PDMPlux パッケージ [V] を実装することで万人が PDMC アルゴリズムを利用可能な状態にした申請者は、PDMC 法の改良と応用が目的である本研究に特に適していると言える。

1. 数学力

申請者は東京大学の数学科において上位 3 割の好成績を取めた。数学者を目指して純粋数学・応用数学の別なく広く学んだ経験から盤石な基礎を持つため、現在の研究で先端的な数学が必要な際も、短時間の追加の学習があれば使いこなすことができる。

2. 実装力

本研究の対象である PDMC は数学的に高度であるだけでなく、アルゴリズムとしても全く新しいため、利用可能なパッケージが少ないが、申請者はその数少ないパッケージの 1 つの単独開発者である [V]。

リリースしたばかりであるために利用例・応用例はまだ少ないが、UCL への研究滞在中に PDMC の大家である UCL の Samuel Livingstone に大きく評価してもらい、本パッケージを利用した PDMC の応用研究が複数進行中である。

3. 共同研究力

申請者は TOEFL で 100 点の高い英語コミュニケーション能力を持ち、英語での研究発表もそつなくこなす [II, III]。さらに発表するだけでなく、対話を通じて共通の課題を洗い出し、共同研究に繋げることができる。

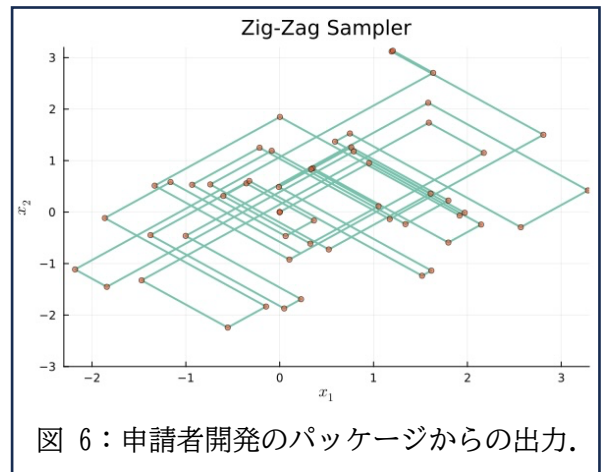
実際、本研究課題「2. 応用的研究」に含まれる政治科学における国際共同研究は、業績[II]の発表の機会から得られた協力関係であった。

研究発表

- I. 口頭発表 司馬博文「動き出す次世代サンプラー」統計数理研究所，学生研究発表会，2025.2
- II. 口頭発表 Shiba, H. Zig-Zag Sampler: A MCMC Game-Changer. ソウル国立大学，国際政治データセンター主催セミナー 2024, 9.
- III. ポスター Shiba, H. A Recent Development of Particle Methods. OIST, MLSS2024, March.
- IV. ポスター 司馬博文「新時代の MCMC を迎えるために」統計数理研究所オープンハウス，2024.5

パッケージリリース

- V. パッケージ PDMPlux v.0.3.1 JuliaRegistries #123174 2025.1.19



3. 自身の研究への想いとキャリア構想についてのエッセイ（1ページ）

■ 目指す研究者像とキャリア構想

申請者は「**数学に軸足を置いた応用**」ができる数学者になりたい。この「**数学に軸足を置いた応用**」という表現は、申請者が学部時代に数学科の進学ガイダンスにて聞いた表現であり、数学科への進学を決意したきっかけとなった。

統計や AI 分野は「**応用の集合体**」とも見ることができるため、ともすれば各論に溺れ、大局を見失いかねない。そんな中で申請者は早い段階で「**数学を軸足にする**」と決意し、**純粋数学・応用数学を隔てず徹底的に数学を学んだ学部時代を過ごした**。

統計に関して極めて多様な分野の研究者が揃っている統計数理研究所で修士を過ごし、多くの研究者の発表を聞いたり、研究交流を深めたりする中で、「**基礎に軸足があるからこそ、真の応用ができる**」のではないかと直覚した。申請者が尊敬する、紫綬褒章も受賞した数学者である岡潔の言葉「**数学の応用には、真の意味の数学者をじかに使うのが最も簡単で、最も先鋭で、しかも適用範囲が比較にならないほど広い**」を深く実感するばかりである。

申請者は岡潔のいう「**真の数学者**」を目指すと同時に、**統計数理研究所のような学際的な色の濃い研究所や総合大学に所属し、政治科学や生物統計をはじめとして、種々の異分野との交流を深めていきたい**。また本研究計画は、**申請者のこの理想に向けた第一歩**になっている。

■ 「**数学に軸足を置いた応用**」としての本研究計画

応用数学の金字塔といえば物理学である。17 世紀に惑星の動きを説明したことに始まり、20 世紀には光の粒よりも小さく原理的に見えないものの様子まで、数学のレンズを通して見えるようにしてしまった。人類の発展は物理学の発展なしにはあり得なかったとって過言でないだろう。

本研究で扱う PDMC などの**ペイズ計算法**は「**多過ぎて捉えきれないものの性質を見ようとする**」手法であり、**物理学だけでなく統計学・AI も含んだより広い土俵で展開されている応用数学の最先端の一つ**であると筆者は捉えている。コップ一杯の水分子は観測可能な範囲の宇宙にある星の数より多いと言われている [16] が、近年 PDMC 法によりコップ内の氷が溶ける様子の全原子シミュレーションが成功し、**固体相と液相の間に六角形を基調とした周期性を持つ新たな相の存在が特定された** [7]。人類の自然現象に対する理解がさらに広がったのである。

このように**物理現象を説明するのに用いられた PDMC 法とその数学が、そのまま AI の原理を説明するのににも使える**！Poincaré の言うように、**数学は一見無関係に思われるものの類似点を見つけることで発展してきた**。本研究計画も、この物理現象と AI の繋がりを解明する第一歩になる。

「1. 基礎的研究」で論じた研究計画は、PDMC が物理モデルから離れて一般の統計モデルに応用された際に、**挙動がどう変わるかを解析する数学的枠組みの構築を目指すものであった**。物理モデルの PDMC シミュレーションを通じて多くのことが理解できるように。統計モデルや AI は PDMC によって学習・推定できるだけでなく、**推定できる情報量や推定限界などの理論的な性質も解明することができる** [17]。PDMC の性能の理論研究にはマルコフ過程の収束やエルゴード性に関する新たな数学的困難に**ブレイクスルーが必要であるが、その結果得られる数学的枠組みは物理学的知見だけでなく、統計学・AI の研究にも活かせることが期待される**のである。

■ 研究への思い

PDMC は従来法よりも効率が良い。これは数学的には「**コーヒーに砂糖を入れた後、放置するよりもかき混ぜた方が効率が良い**」ことと同じであるが、「**本当に同じであるのか**」「**どのように同じであるのか**」を誰もが解るように示すことが、申請者の応用数学者としての仕事であると自負している。「**どんな不可解な現象もいずれは理解できる**」「**物理学が多くの科学技術をもたらしたように、AI も多くのものを我々にもたらしてくれる**」。私はこの時代にそんな希望の糸を繋ぎたいのである。

4. 研究計画の次世代 AI としてのインパクト (1 ページ)

「次世代の AI」に必要なもの：「信頼性」

現状の AI の適用が難航している領域は多く、また政治科学や属人化医療など、そもそも AI の導入自体が遅れている分野も多い。いずれも「不確実性の定量化」すなわち「何がどの程度わからないか」が大事である点が共通しており、まさに現行の AI が苦手とする対象である [1, 2]。

現状の AI 技術は予測に特化して発展して来たもので、データの説明や不確実性の定量化は二の次として扱われてきた。しかし実際の応用場面では運用環境のデータが訓練に用いたデータと一致しているとは限らず、その場合は AI の精度がいくら良かろうとも、「自信のある答え」なのか「自信のない答え」なのかをはっきり峻別する必要がある。例えば自動運転における物体認識の問題で、標的が 100%電柱であるのか、それとも 99%の確率で電柱で、残りの 1%で人間である可能性があるのかでは大きな違いがある。

本研究の新規性：「ベイズ法でやる」

当然現状の AI 技術に「不確実性の定量化」を可能にする拡張を加える研究は多々あるが、中でもベイズ法が最も根本的な解決を与える [1, 3]。これは他手法とベイズ法とでは、枠組みから違うためである [18]。例えば右図 7 は自動運転にベイズ法を適用した例であり、既存法と比べて取りこぼしがないことがわかる。

しかしベイズ法には「スケーラビリティがない」という致命的欠陥があり、「スケーラビリティ」と不確

実性の定量化に基づく「信頼性」はトレードオフの関係 (図 8) にあると信じる者も多い。現状はその通りであるが、本研究は PDMC 法に着目し、これを改良することでこのトレードオフは幻想であると突きつけることを狙う。

「ベイズ+AI」がもたらすインパクト

「自信のある回答」と「自信のない回答」を峻別できる AI ができて初めて、AI が人間社会に密接に関わり、相互に発展していける。残りの紙面でその理由を論ずる。

そもそも AI が社会に溶け込むにあたっては、ルールづくりや法的な枠組みが欠かせない。他の多くの科学技術も同じ道を辿ってきた。それにあたっては、責任の所在や AI のガバナンス体制の明確化が必要不可欠である。気象予測ならまだしも、産業応用や自動運転・ロボティクスなどの先端技術に AI が応用されるには、問題や事故が発生した際の責任の所在が明確にできない限り、そもそも導入することが憚られることになる。AI に「モデルに自信がないときは警告を出す」機能が備わっていれば、少なくとも責任の所在を明確にする法的な指針は立つ。ルールづくりが進み、社会の受容が進むと、AI 研究への投資も進み、人間社会と AI は安全な形で相互に発展できる。

ベイズの「不確実性の定量化」に基づく信頼における AI はそのための第一歩になると信じている。実際、法律の世界において、裁判の証拠能力 (特に DNA 鑑定など) などにベイズ法の定量化が用いられつつある [19]。同様のことが AI についても起こるだろう。裁判に使われる日はずっと遠いかも知れないが、明確なルール策定の下、人々の毎日の生活を豊かにしてくれる AI 技術が、安全性と信頼性を持って導入される基礎を、ベイズ法が敷いてくれるはずである。

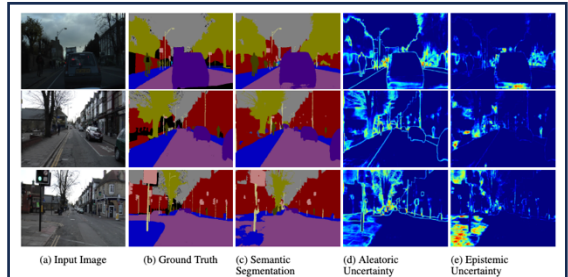


図 7: 自動運転におけるベイズ法の例 [1]。最右列がベイズ法からの出力。右から 2 列目の他手法に比べて取りこぼしがなく、「モデルに自信がない」部分を網羅している。

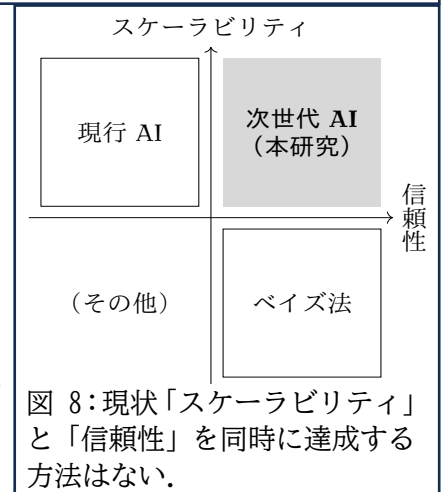


図 8: 現状「スケーラビリティ」と「信頼性」を同時に達成する方法はない。

参考文献 [1] Kendall & Gal (2017) [NeurIPS](#) [2] Moraffah (2024) Bayesian Nonparametrics: An Alternative to Deep Learning. [BA](#) [3] Papamarkou et. al. (2024) Position: Bayesian Deep Learning is Needed in the Age of Large-Scale AI. [ICML](#) [4] Diaconis et. al. (2000) [AAP](#) [5] Bernard et. al. (2009) [Physical Review E](#) [6] Turitsyn, Chertkov & Vucelja (2011) [Physica D](#) [7] Faulkner et. al. (2018) [JCP](#) [8] Bouchard-Côté et. al. (2018) [JASA](#) [9] Bierkens et. al. (2019) [AS](#) [10] Andral and Kamatani (2024) [2408.03682](#) [11] Bierkens, Kamatani & Roberts (2022) [AAP](#) [12] Bierkens, Kamatani & Roberts (2025) [Bernoulli](#) [13] Michel, Durmus & Sénécal (2020) [JCGS](#) [14] Lim, Shin & Park (2024) [64th ISI Congress](#) [15] Hardcastle, Livingstone & Baio (2024) [arXiv](#) [16] [NASA](#) [17] Zdeborová and Krzakala (2016) [AP](#) [18] Mucsányi et. al. (2023) [Tübingen](#) [19] 草野耕一 (2016) [有斐閣](#).