MBAR

$$F_1 = -\beta^{-1}\ln Z_1 = -\beta^{-1}\ln\int e^{-\beta U_1(x)}dx \approx -\beta^{-1}\ln\sum_{n=1}^{N} e^{-\beta U_1(x_n)}$$

$$F_2 = -\beta^{-1}\ln Z_2 = -\beta^{-1}\ln\int e^{-\beta U_2(x)}dx \approx -\beta^{-1}\ln\sum_{n=1}^{N} e^{-\beta U_2(x_n)}$$

$$F_3 = -\beta^{-1}\ln Z_3 = -\beta^{-1}\ln\int e^{-\beta U_3(x)}dx \approx -\beta^{-1}\ln\sum_{n=1}^{N} e^{-\beta U_3(x_n)}$$

やること1

F_1 F_2 F_3 を精度良く求める。 mbar() を使って先良い

絶対値は求まらないので $F_1=0$ として差分を求める

やること2

F_3 を target として $U_{target} = U_3$ のパラメータ θ_{target} を推定する。

mbar_f() という関数は $F_\theta = mbar\_f(u\_kl, [F_1, F_2], u_\theta)$

したがって Loss 関数は

$$Loss(\theta) = \left[F_3 - mbar\_f(u\_kl, [F_1, F_2], u_\theta)\right]^2$$

mbar_f() の中身

$$F_\theta = -\ln \sum_{j=1}^{2} \sum_{n=1}^{N_j} \frac{\exp\left[-u_\theta(x_{jn})\right]}{\sum_{k=1}^{2} N_k \exp\left[\hat{F}_k - u_k(x_{jn})\right]} = -\ln \Sigma\Sigma W$$

$$\frac{\partial F_\theta}{\partial u_\theta(x_{j'n'})} = -\frac{\partial}{\partial u_\theta} \ln \Sigma\Sigma W = -\frac{1}{\Sigma\Sigma W} \times \frac{\partial}{\partial u_\theta(x_{j'n'})} \ln \Sigma\Sigma W$$

$$= -\ln \Sigma\Sigma W \times \frac{\partial}{\partial u_\theta(x_{j'n'})} \sum_{j=1}^{2} \sum_{n=1}^{N_j} \frac{\exp\left[-u_\theta(x_{jn})\right]}{\sum_{k=1}^{2} N_k \exp\left[\hat{F}_k - u_k(x_{jn})\right]}$$

$$= +\ln \Sigma\Sigma W \times \frac{\exp\left[-u_\theta(x_{j'n'})\right]}{\sum_{k=1}^{2} N_k \exp\left[\hat{F}_k - u_k(x_{j'n'})\right]}$$

$$= \exp(-F_\theta) \times W_{j'n'}$$