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() を使って良い

絶対値は求まらないので $F_1=0$ として相対値を求める

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 $F_\theta = \text{mbar\_f}(\text{u\_kl}, [F_1, F_2], u_\theta)$

したがって Loss 関数は

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

mbar_f() の中身

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

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

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

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

$$= \exp(+F_\theta) \times w_{j'n'}$$

$$-F_\theta = \ln \sum\sum W \qquad \frac{1}{\sum\sum W} = \left(e^{-F_0}\right)^{-1}$$

$$\exp(-F_0) = \sum\sum W \qquad = e^{F_0}$$